

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

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

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

Москва – 2022

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Обзор литературы и методов расчета	10
Глава 2. Численное моделирование и исследование оптических характеристик структур на основе фотонных кристаллов	27
2.1 Закон дисперсии электромагнитного излучения внутри фотонных кристаллов .	27
2.1.1 Групповая скорость в фотонных кристаллах типа опала с различными заполнителями	34
2.2 Управление шириной запрещенной зоны двумерного фотонного кристалла за счет изменения геометрии элементарной ячейки	38
2.3 Гибридные волноводы на основе планарного фотонного кристалла	42
2.4 Выводы по главе	46
Глава 3. Моделирование и исследование динамических и статических характеристик волноводных структур с резонансами Фано	48
3.1 Исследование оптических свойств планарных волноводов	49
3.1.1 Моделирование резонансов Фано и связанных состояний в континууме в планарных волноводах	49
3.1.2 Анализ динамики образования резонансов Фано в двумерных структурах	55
3.2 Резонанс Фано в трехмерном волноводе, связанном с шарообразным резонатором	59
3.2.1 Анализ времени формирования резонанса Фано	64
3.2.2 Реализация квази-связанного состояния в континууме в фотонном волноводе	71
3.3 Выводы по главе	75
Глава 4. Разработка и оптимизация численных методов расчёта оптических характеристик фотонных структур	77
4.1 Метод конечных разностей во временной области	77

4.2	Сравнение времени численного решения уравнений Максвелла при помощи центрального процессора и при помощи видеопроцессора	90
4.3	Методика оптимизации расчетов электромагнитных волн в гиротропных средах на примере магнитоактивной плазмы	94
4.4	Выводы по главе	102
Заключение		103
Литература		106
Список рисунков		125
Список таблиц		129
Приложение А		130

Введение

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. Использование линз и отражающих плёнок позволило 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 используются как дешёвый, по сравнению с медным, кабель для передачи огромного количества данных за тысячи километров с малыми потерями мощности. Развитие технологии привело к созданию фотонных интегральных схем (ФИС) [1,2], 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 [3,4]. 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. [5,6].

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") [7]. Подобный подход уже использовался в электронике, а частности как память на линии задержки в первых ЭВМ [8] и радарных установках [9], 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 [10]. Для создания "замедленного света" может быть использовано заполнение пор фотонного кристалла по основе опаловой матрицы различными веществами с резонансным характером частотной дисперсии показателя диэлектрической проницаемости [11], что делает актуальным

исследование оптических свойств фотонных кристаллов, заполненных различными материалами.

Для передачи сигналов между элементами ФИС используются волноводы. Одними из основных типов волноводов служат волноводы на основе фотонных кристаллов с линейным дефектом [12] и волноводы с отражающими стенками [13]. 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 [14, 15], имеющими близко расположенные максимум и минимум пропускания, управление которыми позволяет добиться эффекта переключения сигнала [16]. 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 [17–24], 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 [25], что является особенно важным для высокоскоростной передачи данных на дальние расстояния. Мультиплексирование требует эффективного метода сжатия оптических импульсов во времени. На данный момент разработано много различных физических принципов и конфигураций фотонных устройств для сжатия оптических импульсов [26–31]. 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 [29], а также в фотонных кристаллах с асимметричным резонансом Фано, который испытывает смещение в область высоких частот в результате двухфотонного поглощения [31]. Однако, из-за того, что используемые нелинейности могут применяться толь-

ко 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 сложных 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, к примеру 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.

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.

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:

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.

Степень достоверности:

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 изложены в 13 печатных изданиях [32–44], 7 из которых изданы в журналах, индексируемых Web of Science и Scopus [32–38], 6 — в тезисах докладов [39–44].

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и одного приложения. Полный объем диссертации составляет 143 страниц с 40 рисунками и 5 таблицами. Список литературы содержит 192 наименования.

Глава 1. Обзор литературы и методов расчета

В данной главе представлен обзор литературы, описывающей текущее состояние исследований в областях, связанных с задачами диссертации. Первый раздел посвящен физике фотонных кристаллов, включая как глобулярные фотонные кристаллы, так и планарные. Показано применение дефектов для организации волноводов на ФК. Второй раздел содержит информацию о резонансах Фано в оптических и молекулярных проводниках, связанных состояниях в континууме и представленных в литературе фотонных структурах с резонансом Фано. Третий раздел – обзор использованных в работе алгоритмов и техник вычислений.

1.1 Фотонные кристаллы и волноводы на их основе

Изначально понятие кристаллической решетки использовалось исключительно в физике твердого тела для обозначения периодического потенциала для электронов, при этом поведение волновой функции электрона описывается при помощи Блоховских волн [45], основанных на теории Флоке [46]. Периодичность потенциала приводит к появлению так называемых запрещенных зон, то есть диапазонов энергий электрона, при которых эта частица не может распространяться в кристалле. Аналогичный эффект, называемый фотонной запрещенной зоной, проявляется и в периодических оптических структурах. При падении на поверхность фотонного кристалла электромагнитных волн с частотой, попадающей в запрещенную зону, происходит их отражение. Пионером исследований фотонных кристаллов является Эли Яблонович, который изучал электромагнитные запрещенные зоны в радиодиапазоне [47, 48] в трехмерных структурах. Впоследствии было показано наличие фотонной запрещенной зоны в двумерных [49] и трёхмерных [50] фотонных кристаллах в оптическом диапазоне.

Для исследований взаимодействия света и вещества особый интерес представляют глобулярные фотонные кристаллы, наиболее известным из которых является природный минерал опал, пример зонной диаграммы которого приведён на Рис.1.1. Опал может иметь гексагональную или кубическую плотноупакованную решетку из сфер диоксида кремния. Природ-

ные опалы отличаются разбросом параметров кристаллической решетки и наличием большого числа неконтролируемых дефектов. В настоящее время существуют технологии выращивания синтетических опалов на плоских подложках [51], отличающиеся стабильностью параметров. Также разработаны технологии контролируемого внедрения дефектов в само-собирающиеся системы из глобул [52]. Использование глобулярных фотонных кристаллов позволяет заполнять пространство между глобулами различными веществами.

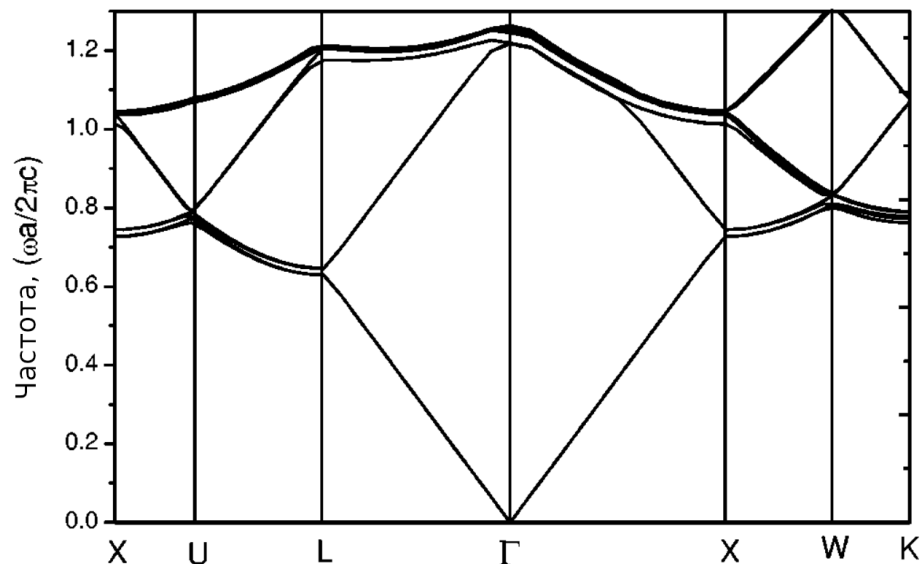


Рисунок 1.1: Рассчитанные дисперсионные кривые электромагнитного излучения в опале без использования одномерного приближения. Адаптация из работы [53].

Заполнение пор фотонного кристалла на основе опала жидкостями, золями и газами приводит к изменению зонной структуры. При этом возможно простое смещение зон, в случае если заполняющее вещество не имеет ярко выраженной резонансной природы диэлектрической проницаемости в данном диапазоне. К примеру, при заполнении фотонного кристалла на основе синтетического опала нанопорошком ZnO происходит смещение запрещенной зоны [54] в сторону больших длин волн из-за смены показателя преломления вещества в порах. В случае же заполнения пор веществом с ярко выраженным резонансным характером частотной дисперсии диэлектрической проницаемости возникает качественное изменение зонной структуры, характеризующееся появлением разрешенных состояний в запрещенных зонах или разрывов в разрешенных зонах. К примеру, в работе [55] было показано изменение зонной структуры за счет появления дополнительных разрешенных состояний внутри запрещенной зоны на частотах возле резонанса диэлектрической проницаемости диоксида европия.

Одним из применений глобулярных фотонных кристаллов служит улучшение характеристик экспериментальных установок по исследованию вынужденного комбинационного рассеяния за счет усиления взаимодействия излучения с веществом, заполняющим поры фотонно-

го кристалла. В работе [56] было проведено экспериментальное исследование глобулярных фотонных кристаллов при заполнении бензолом и сероуглеродом. В результате было зарегистрировано снижение порога вынужденного комбинационного рассеяния за счет увеличения плотности электромагнитной энергии.

Значимым эффектом, наблюдаемым в фотонных кристаллах, является снижение групповой скорости света ($\frac{\partial \omega}{\partial k}$, где k – волновой вектор), представляющей скорость распространения огибающей электромагнитного импульса в фотонном кристалле [7]. Снижение группой скорости сопутствует увеличению плотности фотонных состояний, что повышает интенсивность взаимодействия света с веществом, включая люминесценцию и фото-химические реакции. В отсутствие резонансов частотной дисперсии диэлектрической проницаемости веществ фотонного кристалла, снижение групповой скорости происходит вблизи краев фотонных разрешенных зон.

Другим методом снижения групповой скорости в фотонном кристалле является использование резонансов диэлектрической проницаемости материалов. В частности, в работе [57] была описана аномально низкая групповая скорость в фотонном кристалле составленном из металлических столбиков. Аномальное снижение групповой скорости сопровождалось множеством фотонных разрешенных зон в частотной области резонанса диэлектрической проницаемости.

Для управления светом в фотонных кристаллах могут быть использованы различные нарушения периодичности решетки (дефекты). В частности, для создания волноводных структур на основе фотонных кристаллов используются линейные дефекты. В этом случае множество элементов, расположенных на одной линии, имеют отличные от остального кристалла состав или размер или вовсе отсутствуют. В двумерных фотонных кристаллах случай отсутствующего ряда соответствует W1 волноводам [12]. Дисперсионные кривые которого представлены на Рисунке 1.2. W1 волноводы могут применяться в качестве межсоединений в фотонных интегральных схемах (ФИС). В таком случае рабочая частота волновода должна находиться в запрещенной зоне фотонного кристалла, что обеспечивает локализацию излучения.

1.2 Резонансы Фано и связанные состояния в континууме

Резонанс Фано образуется в результате интерференции распространяющейся волны и волны, рассеянной на локализованном состоянии, и представляет собой близко расположенные максимум (резонанс) и минимум (антирезонанс) сечения рассеяния. Эта тематика занимает важное место в современной оптике [58, 59] с различными практическими применениями, включающим оптические переключатели [16], датчики на основе изменений показателя пре-

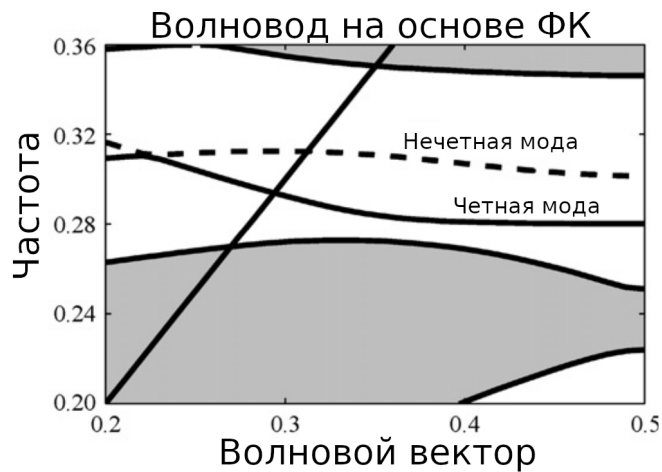


Рисунок 1.2: Дисперсионные кривые электромагнитного излучения в W1 волноводе при ТМ-поляризации. Серым цветом показаны разрешенные зоны фотонного кристалла. Адаптация из работы [12].

ломления [60], эффективные методы генерации третьей гармоники [61]. За последние несколько десятилетий было предложено множество различных конфигураций волноводов с резонансом Фано, таких как плазмонные волноводы [22], кольцевые волноводы [62], волноводы на фотонных кристаллах [63] и кремниевые волноводы с Брегговской решеткой [30].

Существуют разные методы локализации электромагнитного излучения, необходимого для формирования резонанса Фано. В диэлектрических системах основными механизмами являются мода Фабри-Перо и мода шепчущей галереи [64]. Интерференция в таких системах имеет место между проходящей волной в волноводе и исходящей волной из резонатора. Несмотря на то, что между оптическими системами, использующими названные два типа локализации излучения имеются существенные отличия в оптических характеристиках, в особенности в потерях, подходы для описание переходных процессов могут быть применены к системам с обоими типами локализации и любой формой резонанса Фано, имеющей антирезонансную частоту.

При формировании резонанса Фано возможно формирование связанного состояния в континууме (ССК), которое образуется в результате коллапса резонанса и антирезонанса в резонансе Фано [65]. Соответственно, ССК можно рассматривать как резонанс или антирезонанс с нулевой шириной [66]. Вблизи точки своего существования в пространстве параметров системы ССК проявляет себя как резонанс со сверхвысокой добротностью, что представляет значительный интерес для практических применений [67]. ССК занимает особое место среди интерференционных явлений квантовой механики и оптики [68, 69]. Изначально ССК рассматривались исключительно как математическая конструкция, придуманная фон Нейманом и Вигнером на заре квантовой механики [70]. На данный момент ССК являются широко наблюдаемым физическим явлением [71–73] с множеством перспективных применений, таких как

дизайн особенностей квантового транспорта в молекулярных проводниках [65, 74, 75], распространения акустических волн [76], локализация энергии в электромагнитных волноводах [77], фотонных кристаллах [78]. Экспериментальная реализация ССК требует технологии, позволяющей контролировать размеры структуры на уровне меньшем, чем длина волны. Так как в квантовой механике длины волн значительно меньше, чем в оптике или акустике, эксперименты по изучению ССК проводят на электромагнитных [77, 79–81] или акустических [76, 82] волнах. В частности, электромагнитные ССК успешно наблюдались в экспериментах на фотонных волноводах [83, 84], фотонных кристаллах [81, 85, 86] и метаповерхностях [73, 87, 88].

Электронные ССК были теоретически исследованы в квантовых бильярдах (резонаторах) различных форм [65, 72, 89], в квантовых проводниках в приближении сильной связи [66, 74, 75], а также в линейных структурах в присутствии внешнего осциллирующего поля [90].

В работе [68] была представлена классификация ССК, которая включает в себя три основных класса.

- Стабилизированный симметрией, когда отсутствие взаимодействия с континуумом происходит за счет разных симметрий волновой функции изолированного состояния и волновой функции в континууме [91, 92];
- ССК на механизме Фабри – Перо, когда резонансное состояние между двумя зеркалами обладает абсолютным отражением при резонансном значении энергии [93];
- ССК на механизме Фридриха – Винтгена, основанное на интерференции волн состояний континуума и волн, рассеянных на двух связанных состояниях [71].

Все три механизма имеют в своей основе универсальный принцип волновой интерференции и могут быть в равной степени применимы к классическим (электромагнитным, акустическим) и к квантовым (электронным) волнам. В последние несколько лет особое внимание физиков в силу своей универсальности получил механизм Фридриха – Винтгена. Несмотря на то, что механизм был изначально разработан для атомной физики, данная модель может быть применена для различных волновых систем [94–96]. В оптических и акустических резонаторах также возможно появление локализованных состояний, имеющих природу Фридриха – Винтгена [76, 97]. В квантовой механике ССК Фридриха – Винтгена могут появляться в квантовом бильярде [65, 72], квантовом аналоге классического резонатора.

Так как ССК имеют бесконечное время жизни, они могут быть рассмотрены как резонанс с нулевой шириной в частотной области, что соответствует полюсу на действительной оси, поскольку мнимая часть положения полюса характеризует ширину резонанса [98]. Таким образом, нахождение ССК в некоторой заданной модели является эквивалентным нахождению нуля мнимой части полюса матрицы рассеяния [69]. Базовая модель Фридриха – Винтгена основана на общих принципах интерференции и не имеет явных ограничений симметрии системы. Однако, для случаев произвольной симметрии основного волновода (открытого канала) и при наличии непрерывных координат, задача нахождения действительного полюса матрицы рассеяния становится мультипараметрической и сложной в решении [78]. До недавнего времени в большинстве случаев изучаемые ССК принадлежали симметричным волноводам с симметричными резонаторами различной физической природы [72, 76], так как симметрия значительно снижает количество свободных параметров системы, что в значительной мере упрощает поиск ССК. Редкие исключения включают в себя, к примеру, ССК в планарных фотонных кристаллах [78] и анизотропных средах [99], а также некоторых других системах. Однако, упомянутые структуры либо сохраняют элементы симметрии [78], либо имеют одно-модовый континуум [99], таким образом упрощая модели.

Для решения проблемы описания ССК в асимметричных структурах использован факт того, что модель Фридриха – Винтгена [71] описывает истинные локализованные локализованные состояния, а не возникающие в результате интерференции локализованные состояния. Особо перспективным является применение недавно разработанной теории квантового транспорта в молекулярных проводниках [66, 100] для нахождения аналитических условий формирования ССК в асимметричных системах. В рамках данной теории ССК может быть явно рассмотрен либо как резонанс нулевой ширины, либо как антирезонанс нулевой ширины. Раздельное описание точных положений резонансов и антирезонансов делает возможным разработку простых аналитических правил анализа существования ССК в асимметричных волноводах. Данные правила являются универсальными и могут быть использованы для квантовых и электромагнитных волноводов, состоящих из квантовых бильярдных и оптических резонаторов соответственно [38]. Аналитические выражения для условия существования ССК являются хорошей отправной точкой для поиска ССК более детальными численными методами.

Не смотря на то, что время образования локализованного состояния является измеримым параметром, количество работ, исследовавших временную зависимость оптических резонансов Фано остаётся малым. В тоже время, многие группы исследовали время образования состояния в атомарных системах [101, 102]. Как было показано [101] в квантовых системах, резо-

нанс Фано не образуется мгновенно, а является результатом переходного процесса, связанного с изменением плотности состояний.

В фотонных системах были проведены исследования временной зависимости резонанса Фано для волноводов на фотонных кристаллах. К примеру, в работе [103] была рассмотрена динамика установления резонанса Фано в двумерном фотонном кристалле. Представленный метод использует формализм функции Грина и был применён к волноводу на фотонном кристалле с нелинейным материалом резонатора. Была определена временная зависимость коэффициента пропускания на частоте антирезонанса, имеющая пик прозрачности с последующим снижением пропускания.

Другой метод анализа динамики волноводов с резонаторами Фано был показан в работе [104]. Используя метод FDTD, описан волновод на двумерных фотонных кристаллах с изолированным резонатором в виде полости внутри фотонного кристалла. Данный волновод был изготовлен при помощи литографии сканирующим электронным микроскопом на подложке из фосфата индия. Измеренные экспериментальные характеристики показали хорошее совпадение с результатами моделирования. Было обнаружено образование пика пропускания, за которым через 100 пс следовал минимум пропускания. Однако, в работе [104] данные пики пропускания во время образования резонанса рассматривались как негативный эффект при создании оптического модулятора со скоростью передачи данных в 10 Гб/с.

Таким образом можно сделать вывод, что на настоящий момент тематика динамики резонансов Фано в оптических волноводах является актуальной и большинство типов структур ещё не исследованы в рамках данного типа анализа.

В течении последних двух десятилетий было опубликовано значительное количество работ, посвященных практической реализации фотонных волноводов с резонансами Фано. Несмотря на это, описанные структуры поддаются классификации по направлению падающего излучения, используемым материалам и методу локализации дискретного состояния.

Оптические структуры с резонансами Фано по направлению падающего излучения делятся на структуры с падением входящего излучения на плоскость и на структуры, где входной волновод направляет излучение параллельно плоскости структуры. Первый тип структур характерен для классической оптики, так как не требует соединителей (англ. couplers) необходимых для эффективной передачи оптической энергии из волокна в фотонную структуру [105]. Однако, падение электромагнитного излучения в плоскости структуры предпочтительно для интеграции с современной планарной технологией. В рамках данного обзора были рассмотрены только сами фотонные структуры, но не их соединения с оптоволоком.

Наиболее простыми в изготовлении и эксперименте являются структуры на основе одномерных фотонных кристаллов, в которых нарушена периодичность [17, 106], что необходимо для создания дефектного слоя и локализованного в нём состояния. Локализация состояния происходит на резонаторе Фабри-Перо, возникающем между брэгговскими зеркалами. Падение излучения происходит перпендикулярно слоям одномерного фотонного кристалла и не требует специальных соединителей с оптоволоком. Другой вариант локализации излучения основан на электрических и магнитных диполях [19–21], изготовленных при помощи литографии на прозрачной подложке, при этом падение излучения, как и в предыдущем случае, происходит перпендикулярно фронтальной поверхности.

Локализовать электромагнитную энергию можно и с помощью плазмонного резонанса. Локализация происходит на поверхности металл-диэлектрик. Существует два основных типа оптических структур с резонансом Фано, основанных на плазмонном резонансе: структуры типа Кречманна [18, 107], в которых излучение попадает на границу металл-диэлектрик из диэлектрической призмы, а также структуры основанные на плазмонных волноводах [22–24]. В случае плазмонных волноводов необходимы соединительные устройства между оптоволоком и плазмонным волноводом. Резонатор в таких волноводах формируется за счет полости в металле. Данная полость может соединяться с волноводом как непосредственно, так и эванесцентно.

Расположить резонатор можно и внутри фотонного волновода, к примеру за счет дефектов, образующих брэгговскую решетку. В работе [108] описана структура, являющаяся трехмерным эквивалентом одномерного резонатора Фано на одномерном фотонном кристалле. Отверстия в диэлектрическом волноводе образуют брэгговскую решетку, период которой меняется для создания дефектного слоя, где образуется локализованное состояние. Более сложным вариантом данной структуры являются волноводы с Y-разветвлением [15], где после брэгговской решетки находится разветвление, создающее два асимметричных резонанса, в которых минимум и максимум пропускания меняются местами за счёт взаимодействия как нулевой, так и первой волноводной моды с локализованным состоянием.

Так как фотонные кристаллы имеют запрещенную зону, ограничивающую распространение электромагнитных волн определенных частот, запрещенную зону планарного фотонного кристалла можно использовать для организации и волновода, и резонатора. Волновод может быть создан за счет линейного дефекта в ФК [12]. Точечные дефекты, связанные с изменением материала или размера отдельных элементов фотонного кристалла, применяются для локализации энергии в системах с резонансами Фано [31, 63]. Было показано, что на таких волноводах

можно организовать оптический диод [109–111] и управляемый ССК для хранения информации [112].

Другой способ создать структуру с резонансом Фано – использовать собственный резонанс диэлектрического объекта. Основными типами мод резонансов в диэлектрических объектах являются мода шепчущей галереи и мода стоячей волны. Моды обоих типов могут быть использованы для дизайна резонаторов Фано. Моды шепчущей галереи используются в кольцевых резонаторах, где резонатор эванесцентно связан с волноводом [14, 62]. При этом, как показано в работе [113], характеристики оптической системы, а в частности, добротность изменяются при использовании двух кольцевых резонаторов вместо одного. Другим типом локализации электромагнитной энергии является мода стоячей волны. Аналогично кольцевым резонаторам, резонаторы стоячей волны могут быть эванесцентно сопряжены с волноводами [30], приводя к появлению резонанса Фано.

1.3 Использование параллельных вычислений

Одним из трендов развития вычислительной техники является использование параллельных вычислений. Это связано со сложностью увлечения частоты одиночных вычислительных ядер и развитием технологий создания сверхбольших интегральных схем (СБИС). Развитие технологий создания СБИС позволяет производителям выпускать на рынок системы, имеющие множество вычислительных ядер на одном полупроводниковом кристалле. Одним из видов подобных вычислительных систем являются видеопроцессоры (англ. Graphic Processing Unit, GPU), изначально созданные для ускорения вычисления значений цвета и яркости пикселей экрана.

Так как такие вычисления требуют множества операций с плавающей точкой [114], то логичным является использование видео-процессоров для научных вычислений. Данная техника программирования называется видео-процессором общего назначения (англ. General Purpose Graphic Processing Unit, GPGPU) [115]. В реальных вычислительных системах видеопроцессоры общего назначения используются в качестве сопроцессоров для классических центральных процессоров. Таким образом, позволяя иметь мощную и адаптивную ко многим типам задач вычислительную систему.

До 2007 года основным способом использования видеопроцессоров было декодирование результата графических вычислений в численную форму. Первым специализированным программным интерфейсом для видео-процессоров общего назначения стала CUDA от корпорации NVidia. Однако, данный интерфейс не является открытым и работает только на аппаратном обеспечении производства NVidia.

Удобный интерфейс на языке Си позволил интерфейсу CUDA стать популярным, поэтому возросший запрос на свободный от патентов интерфейс для программирования видеопроцессоров общего назначения привёл в образованию в 2008 группы Khronos. На данный момент в группу Khronos входят такие корпорации как AMD, Apple, Intel, IBM, Google, Samsung, NVidia и многие другие. В декабре 2008 года группа Khronos представила свой открытый интерфейс программирования видеопроцессоров, под названием OpenCL 1.0. На данный момент интерфейс OpenCL поддерживает программирование не только видеопроцессоров, но и цифровых сигнальных процессоров, многоядерных центральных процессоров и программируемых логических интегральных схем (ПЛИС).

Параллелизация вычислений характеризуется законом Амдала [116] и законом Густавсона [117]. Первый описывает прирост скорости вычисления фиксированной задачи при увеличении количества расчётных ядер, в то время как закон Густавсона даёт оценку изменению количества обрабатываемой информации за фиксированное время при увеличении количества расчётных ядер.

Для исследования оптических свойств фотонных структур имеется потребность в использовании как ускорения по Амдалу, так и по Густавсону. Ускорение по Амдалу необходимо для моделирования больших структур, таких как комбинация нескольких трёхмерных элементов. Ускорение по Густавсону, напротив, используется для большого числа малых структур, таких как варианты одного и того же волновода с разной шириной. При использовании подхода Амдала существует только часть операций, которые могут быть распараллелены. Обычно эту долю обозначают A . К примеру, при вычислении спектров пропускания или отражения фотонных структур необходимо вычислять Фурье образ вектора Пойнтинга во множестве точек плоскости, пересекающей вход или выход структуры. Эти операции легко распараллелить. В тоже время, интегрирование этих результатов относится к части $B = 1 - A$. Также к части B относится анализ файлов конфигурации, ввод и вывод данных.

Как показано в книге Бэнгера [115], в идеальном случае время вычисления задачи на n ядрах может быть описано формулой:

$$T(n) = T(1)\left(B + \frac{1 - B}{n}\right) \quad (1.1)$$

где $T(1)$ – время вычисления задачи на одном вычислительном ядре. Таким образом, прирост производительности на той же задаче будет описываться формулой:

$$S_A(n) = 1/\left(B + \frac{1 - B}{n}\right) \quad (1.2)$$

Однако, при реальном применении параллельных вычислений по подходу Амдала с каждым дополнительным вычислительным ядром появляются дополнительные операции ввода-вывода и обмена данными, начиная с некоторого значения n' процесс не может быть описан выражением (1.1).

Закон Густавсона описывает масштабирование вычислительной системы посредством добавления вычислительных ядер. Данный закон подразумевает, что количество задач, которые могут быть распараллелены, линейно зависит от количества расчётных ядер. Обозначив последовательную составляющую задачи за a , в параллельную за b , приходим к коэффициенту ускорения по закону Густавсона:

$$S_G(n) = (a + n \cdot b) / (a + b) \quad (1.3)$$

В данном случае за a можно принять время обработки результатов вычислений или написание статьи по результатам проведённого математического моделирования.

Рассматривая задачу, которая может быть распараллелена, следует учитывать, что закон Амдала меняет нагрузку на вычислительное ядро при изменении количества ядер, в то время как закон Густавсона оставляет нагрузку одинаковой при изменении количества вычислительных ядер.

Если взять для примера ситуацию, когда 50% задачи может быть распараллелено, то параллелизация по Амдалу с использованием двух ядер даёт $S_A(2) = 1.33$ прирост скорости вычислений. Аналогично для 4 и 8 ядерных процессоров: $S_A(4) = 1.6$, $S_A(8) = 1.77$ В пределе бесконечного числа вычислительных ядер даже в идеальном случае эта модельная задача может быть ускорена только в два раза. С другой стороны, используя параллелизацию по Густавсону, где $\alpha = 0.5 / (0.5 + 0.5) = 0.5$, прирост производительности может быть описан как:

$$S_G(2) = 2 - 0.5(2 - 1) = 1.5 \quad (1.4)$$

В случае использования 4 и 8 ядерных процессоров прирост производительности по Густавсону:

$$S_G(4) = 2.5, \quad S_G(8) = 4.5 \quad (1.5)$$

Так как при использовании алгоритма аппроксимации конечными разностями, последовательная часть (темный цвет на Рис.1.3) соответствует анализу файлов конфигурации и операциям ввода-вывода, то при использовании обоих подходов к параллелизации имеет смысл снижать частоту вывода компонент полей до минимально необходимой.

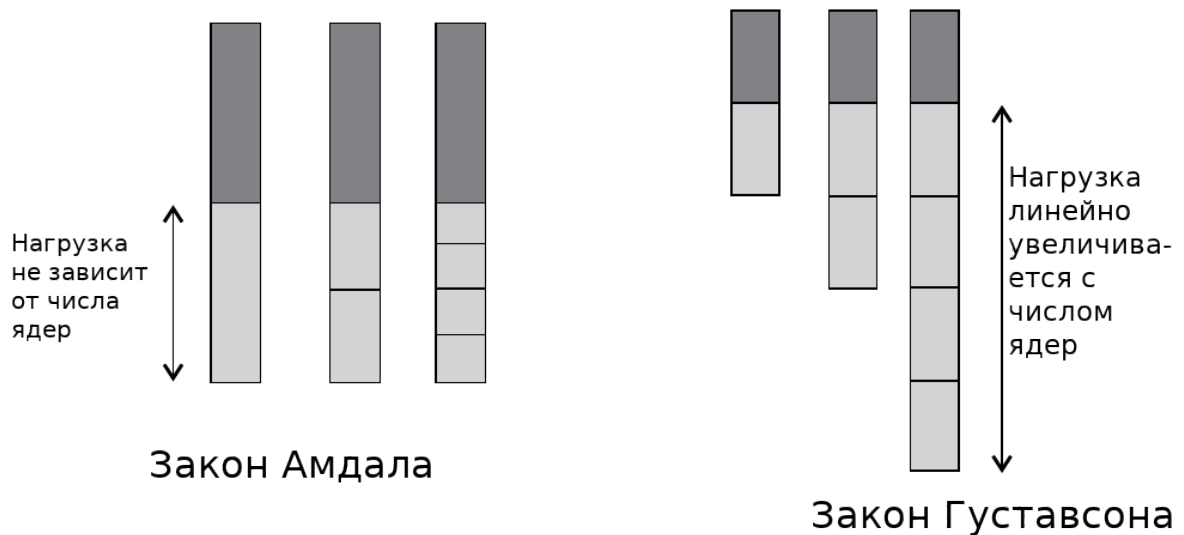


Рисунок 1.3: Сравнение нагрузки на вычислительное ядро при параллелизации по Амдалу и Густавсону. Адаптировано из [115]

Есть несколько различных подходов к распараллеливанию задачи, они включают в себя использование множества ядер центральных процессоров, видеопроцессоров общего назначения, а также использование группы компьютеров, объединённых в сеть. Рассмотрим различные преимущества и недостатки данных схем для моделирования распространения электромагнитных волн по методу аппроксимации конечными разностями.

Параллелизация интерфейсом OpenMP OpenMP это программный интерфейс, позволяющий разработчику распараллелить задачи на языках программирования Си, Си++ и Фортран [118] в системах с общей памятью. Основным плюсом данного интерфейса является простота разработки программного обеспечения. Интерфейс позволяет использовать существующий однопоточный программный код с минимальными изменениями. Однако, к отрицательным сторонам интерфейса OpenMP относится ограничение на использование только центрального процессора или нескольких процессоров на одной материнской плате. Так как многопроцессорные системы являются серверами enterprise уровня, их стоимость ограничивает их использование в рамках отдельной лаборатории.

Параллелизация интерфейсом MPI Название интерфейса MPI расшифровывается как "message passing interface" (интерфейс передачи сообщений) [119]. Основным преимуществом относительно интерфейса OpenMP является возможность использования вычислительных систем, состоящих из различных материнских плат, то есть отдельных компьютеров, соединённых сетью. В ряде задач такой подход даёт значительное ускорение расчётов, однако в случае моделирования распространения электромагнитных волн в волноводах по методу аппроксимации конечными разностями, граничные условия требуют наличия информации о полях на

каждом шагу времени. Таким образом рассматриваемые задачи требуют сверхбыстрых сетей класса InfiniBand, так как использование обычных сетей класса Ethernet не даёт преимуществ.

Сверхбыстрые сети класса InfiniBand применяются в суперкомпьютерах [120]. Однако, в настоящее время на практике использование суперкомпьютеров сопряжено со значительным временем ожидания задачи в очереди на исполнение. Поисковые научные исследования зачастую не позволяют автору запланировать и поставить в очередь задачи на месяцы вперёд. В то же время значительная стоимость оборудования сетей класса InfiniBand делает мало-доступным построение вычислительных систем с использованием данного класса сетей для отдельной лаборатории.

Параллелизация интерфейсами OpenCL и CUDA Использование интерфейсов OpenCL [115] и CUDA [121] позволяет задействовать для вычисления значений электрических и магнитных полей по методу FDTD видеопроцессоры общего назначения. Современные видеопроцессоры имеют тысячи вычислительных ядер, к примеру, AMD Vega 64, использованный автором диссертации, оснащён 4096 вычислительными ядрами [122]. В дополнение к большому количеству вычислительных ядер, видеопроцессоры во многих случаях используют более быструю оперативную память, чем центральные процессоры. К примеру, в использованный автором диссертации центральный процессор Intel Core i5-6600K имеет максимальную пропускную способность шины оперативной памяти равную 34.1 Гб/с [123], что значительно меньше аналогичного показателя для AMD Vega 64, равного 483.8 Гб/с [122].

К недостаткам интерфейсов OpenCL и CUDA следует отнести архитектуру с одиночным потоком команд и множественным потоком данных (ОКМД, англ. Single Instruction Multiple Data, SIMD) видеопроцессоров общего назначения, а также в случае OpenCL, и другого аппаратного обеспечения. Данная архитектура использует одну и ту же операцию, производимую над разными адресами в оперативной памяти, как правило элементами массива. Многие задачи используют ветвления в алгоритмах, что несовместимо с SIMD-архитектурами. Ветвления в алгоритмах приводят к тому, что все варианты ветвления исполняются по очереди, а не параллельно, из чего следует значительное уменьшение эффективной вычислительной мощности. Другим недостатком использования видеопроцессоров общего назначения является ограниченный объем оперативной памяти, так как видеопроцессоры не поддерживают возможности добавить плату оперативной памяти. В некоторых случаях возможно использование оперативной памяти центрального процессора посредством доступа через шину PCI Express, однако как сказано в книге Бэнгера [115], данный способ имеет во много раз меньшую пропускную способность, чем шина оперативной памяти видеопроцессора. К примеру, использованный в данной работе видео-процессор общего назначения AMD Vega 64 имеет

всего 8 ГБайт оперативной памяти, что значительно меньше, чем 32 ГБайт оперативной памяти головной электронной вычислительной машины, использованной автором диссертации. В ряде случаев возможно использование нескольких видео-процессоров общего назначения для решения одной задачи на одной головной электронной вычислительной машине. К сожалению, по опыту автора данной диссертации, использование двух видеопроцессоров общего назначения привело к снижению производительности в 1.6 раза, причины которого остались неизвестными в связи с большим объёмом программного кода драйверов, написанных программистами корпорации AMD.

Так как алгоритм вычисления электромагнитных полей по методу аппроксимации конечными разностями не требует ветвления при обходе элементов массива [124], использование интерфейсов OpenCL и CUDA является допустимым для данного типа задач. Как будет показано далее, в задачах среднего размера, включающих в себя трёхмерный одиночный элемент фотонной интегральной схемы, достаточно 8 ГБайт оперативной памяти видеопроцессора AMD Vega 64. Таким образом, параллелизация интерфейсами OpenCL и CUDA на аппаратном обеспечении в виде видеопроцессоров общего назначения является оптимальным способом расчёта оптических свойств волноводов по методу аппроксимации конечными разностями для задач среднего размера в рамках бюджета отдельной лаборатории или отдельного исследователя.

Основными понятиями при исполнении программ с помощью интерфейса OpenCL являются "программное ядро" и головная программа. Программные ядра исполняются на видеопроцессоре общего назначения или другом устройстве, поддерживающем интерфейс OpenCL. Головная программа исполняется на центральном процессоре. В рамках моделирования оптических свойств волноводов по методу аппроксимации конечными разностями основной задачей головной программы является считывание файла конфигурации, создание массива значений диэлектрической и магнитной проницаемости, загрузка и выгрузка данных, запуск программных ядер на видеопроцессоре общего назначения.

Когда головная программа ставит программное ядро в очередь на исполнение, создается N мерный массив индексов ($1 \leq N \leq 3$), называемый *NDRange*. Каждый поток имеет свои координаты в этом дискретном N мерном пространстве. Глобальный размер задачи это общее количество параллельных потоков. В большинстве случаев это количество точек на данном куске (англ. chunk) расчётной сетки. Локальный размер задачи это минимальное количество потоков, которые устройство может исполнять одновременно. Обычно локальный размер задачи равен количеству расчётных ядер в вычислительном блоке. Таким образом появляется понятие рабочей группы, это набор потоков, исполняемых в рамках локального размера за-

дачи. В рамках данной работы использовались одномерные массивы индексов с локальным размером, равным 64, а также двумерные массивы индексов с рабочим размером, равным вектору (количество частот Фурье преобразования вектора Пойнтинга, количество ячеек).

Полный алгоритм расчета на видеопроцессоре включает в себя выделение памяти на головной машине и запись туда исходных значений, что делается при помощи центрального процессора. Затем идёт поиск OpenCL-устройств, создание контекста и очереди задач на выбранном устройстве, выделение памяти и запись исходных значений в памяти видеопроцессора. Для запуска программных ядер необходимо провести компиляцию, задать аргументы, отдать команду на запуск и дождаться завершения очереди задач. Затем необходимо скопировать результаты в память головной машины и освободить память видео-процессора.

Для успешного использования возможностей параллельных вычислений на доступном аппаратном обеспечении с применением OpenCL необходимо соблюдать ряд правил специфичных для программирования таких систем правил. Адаптация существующего программного кода для использования OpenCL является сложной и длительной задачей разработчика программного обеспечения.

Было проведено сравнение существующего на данный момент программного обеспечения для расчёта фотонных структур, результаты которого представлены в Таблице 1.1. Следует отметить, что метод конечных элементов (FEM), используемый в программном пакете COMSOL, имеет как преимущества, так и недостатки по сравнению с методом конечных разностей во временной области (FDTD). В частности, основное преимущество заключается в сложной структуре расчетной сетки, способной описывать объекты различных форм, подстраивая границы расчетных элементов под границы описываемых объектов. Такой подход позволяет использовать меньше элементов и в теории сократить время расчетов. На практике же это приводит к необходимости использования матрицы соединения элементов (англ. *element connectivity matrix*) [125], так как элементы сетки не эквиваленты друг другу. Другой типичной проблемой при расчёте спектров структур, содержащих нелинейные материалы, является необходимость использовать N отдельных расчетов для получения спектра из N частот при использовании FEM [126]. В случае FDTD, задача решается при помощи моделирования распространения Гауссова импульса и последующего Фурье анализа результата. Одним из недостатков FDTD (по сравнению с FEM) является невозможность учитывать заряд в явном виде из-за условия $\nabla \vec{D} = 0$ [127], однако задачи с заряжающимися и разряжающимися конденсаторами редко применяются в оптике и больше необходимы для разработки электронных схем.

Кроме того, следует отметить доступность исходного кода программного обеспечения. Доступ к исходному коду позволяет не только контролировать правильность расчёта на всех его этапах, но и имеет академическое значение. Так как задачи каждой лаборатории отличаются друг от друга, то возможность модификации позволяет модифицировать программное обеспечение для описания специфических для данной лаборатории эффектов. Таким образом, доступность исходного кода программного обеспечения является важным критерием для академической науки.

Из Таблицы 1.1 видно, что только модифицированная версия программного пакета МЕЕР позволяет полноценно моделировать магнитоактивные плазмы методом аппроксимации конечными разностями. В данном случае необходимо учитывать частотную дисперсию всех компонент тензора диэлектрической проницаемости, так как даже при возбуждении моделируемой системы синусоидальным источником возможно образование гармоник и других смещений частоты, которые приведут к неверным результатам в случае использования моделей без частотной дисперсии.

Исходя из перечисленных факторов, модифицированная версия МЕЕР является оптимальной для академической науки благодаря широким возможностям по расчету нелинейных, анизотропных и гиротропных сред, использованию параллелизации и простоты аудита благодаря открытому исходному коду.

Таблица 1.1: Сравнение существующего программного обеспечения

Название	Метод	Доступность исходного кода	Поддержка MPI	Поддержка GPGPU	Расчёт магнитоактивных плазм
MEEP	FDTD	Да	Да	Да	Да
COMSOL	FEM	Нет	Да	Нет	Да
Lumerical	FDTD	Нет	Да	Нет	Да* (без учёта частотной дисперсии)
Tohoku University	FDTD	Нет (ПО не опубликовано)	Нет	Да* (OpenCL на FPGA)	Нет
SEMCAD X Optics	FDTD	Нет	Да	Да	Нет
AWR Microwave Office (Analyst)	FEM	Нет	Да	Нет	Нет
REMCOM	FDTD + FEM	Нет	Да	Да	Да* (без учёта частотной дисперсии)
CST Microwave Studio	FDTD + FEM	Нет	Да	Нет	Нет

Глава 2. Численное моделирование и исследование оптических характеристик структур на основе фотонных кристаллов

Фотонные кристаллы представляют собой периодические структуры, в которых может образовываться фотонная запрещенная зона, то есть спектральная область, в которой распространение электромагнитной волны сколь угодно глубоко в кристалл невозможно. При таком изменении закона дисперсии возникают особенности распространения волны, характеризующиеся низкой групповой скоростью. В данной главе исследованы фотонные кристаллы на основе синтетических опалов и планарные ФК, а также волноводы на их основе. Эффекты, связанные с изменением характера дисперсии, могут быть использованы для замедления света, электрооптической модуляции, усиления нелинейных эффектов, а также акустооптических структур.

2.1 Закон дисперсии электромагнитного излучения внутри фотонных кристаллов

Так как, в отличие от электронных волн де Бройля, электромагнитные волны имеют разброс длин волн на 10 десятичных порядков (от рентгеновского диапазона до длинных радиоволн), то существует множество реализаций фотонного кристалла. К примеру, первая работа в области фотонной запрещенной зоны была посвящена миллиметровому диапазону [48]. Однако, в рамках данной работы исследуется оптический диапазон.

В оптическом диапазоне существуют несколько возможных вариантов создания фотонного кристалла: использование напыления, в частности, молекулярно-лучевой эпитаксии [128], для создания идеальных одномерных структур; литографии для создания планарных фотонных кристаллов; использование плотноупакованных глобулярных структур, к примеру глобулярных вирусов [11], или минералов, в частности, опалов.

Основными преимуществами использования синтетических опалов являются стабильность размеров (по сравнению с природными минералами), высокая прочность (по сравнению биологическими системами) и возможность заполнения пор фотонного кристалла различными материалами, в том числе жидкостями, золями, парами и газами. В рамках анализа влияния заполняющих материалов на зонную структуру были рассмотрены фотонные кристаллы на основе синтетических опалов, то есть плотноупакованной кристаллической решетки из глобул диоксида кремния [129].

В качестве аналитической модели для фиксированного кристаллографического направления рассмотрим простейший случай, заключающийся в периодической слоистой среде, состоящей из двух различных материалов с следующим профилем показателя преломления, что, как показано в работе [130] на основе анализа расстояний между идентичными слоями глобул ГЦК решетки, соответствует глобулярному фотонному кристаллу при падении излучения под углами, близкими к кристаллографическому направлению [111]:

$$n(z) = \begin{cases} n_2, & \text{если } 0 < z < a_1 \\ n_1, & \text{если } a_1 < z < a \end{cases} \quad (2.1)$$

где a – период кристалла.

Ось z принята за перпендикуляр к плоскостям межслойных границ одномерного фотонного кристалла. В общем виде выражение для вектора напряженности электрического поля может быть записано как:

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}(z)e^{j\omega t} \quad (2.2)$$

В данном случае подразумевается, что волна распространяется вдоль оси z . Внутри каждого слоя гомогенного материала электрическое поле может быть записано как суперпозиция падающей и отраженной волн. Как показано в [131], напряженность электрического поля в некоторой точке z , попадающей в элементарную ячейку номер n , описывается блоховской волновой функцией и может быть записана как:

$$E(y, z) = a_n^{(\alpha)} e^{-jk_{\alpha z}(z-na)} + b_n^{(\alpha)} e^{jk_{\alpha z}(z-na)} \quad (2.3)$$

где

$$k_{\alpha z} = \frac{n_{\alpha}\omega}{c}, \quad a = 1; 2 \quad (2.4)$$

При распространении в направлении оси z электромагнитной волны, не имеющей E_z компоненты поля, существует условие непрерывности $E_x, H_y \sim \frac{\partial E_x}{\partial z}$ на границе между элемен-

тарными ячейками кристалла, что приводит к следующему дисперсионному уравнению [131]:

$$\cos(ka) = \cos(k_1 a_1) \cos(k_2 a_2) - \frac{1}{2} \left(\frac{n_2}{n_1} + \frac{n_1}{n_2} \right) \sin(k_1 a_1) \sin(k_2 a_2) \quad (2.5)$$

Запрещённая зона соответствует частотам, при которых правая часть уравнения (2.5) имеет значение больше единицы. В дальнейших расчётах использовалось $n = \sqrt{\varepsilon}$.

Применение формулы (2.5) для описания глобулярных фотонных кристаллов требует нахождения соответствия между $a_{1,2}$ и диаметром глобул. Как показано в работе [132] при распространении волны в кристаллографическом направлении [111] ГЦК-решетки:

$$a = D \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad a = a_1 + a_2, \quad a_1 = (1 - \eta) \cdot a, \quad a_2 = \eta \cdot a \quad (2.6)$$

где η – коэффициент заполнения, в случае опалов равный 0.26 [11].

Существуют различные методы управления запрещенной зоной фотонного кристалла. В случае использования глобулярных фотонных кристаллов на основе опалов наиболее простым способом является изменение показателя преломления вещества в порах фотонного кристалла за счёт заполнения различными веществами, в частности, наночастицами рубина и иодом.

Рассмотрим базовый случай фотонного кристалла, в порах которого находится воздух. Дисперсионные зависимости для диаметров глобул 270 нм, 315 нм, 340 нм, рассчитанные с использованием формулы (2.5), показаны оранжевой кривой на Рисунке 2.1, а для диаметров глобул 250 нм, 300 нм, 350 нм – на Рисунке 2.3. Пунктирные линии на представленных рисунках в частотных областях нижней поляритонной ветви могут сливаться в сплошную линию из-за многократного наложения пикселей при построении графика. Многократное наложение вызвано фолдингом (приведением закона дисперсии к первой зоне Бриллюэна) ветви дисперсионной кривой.

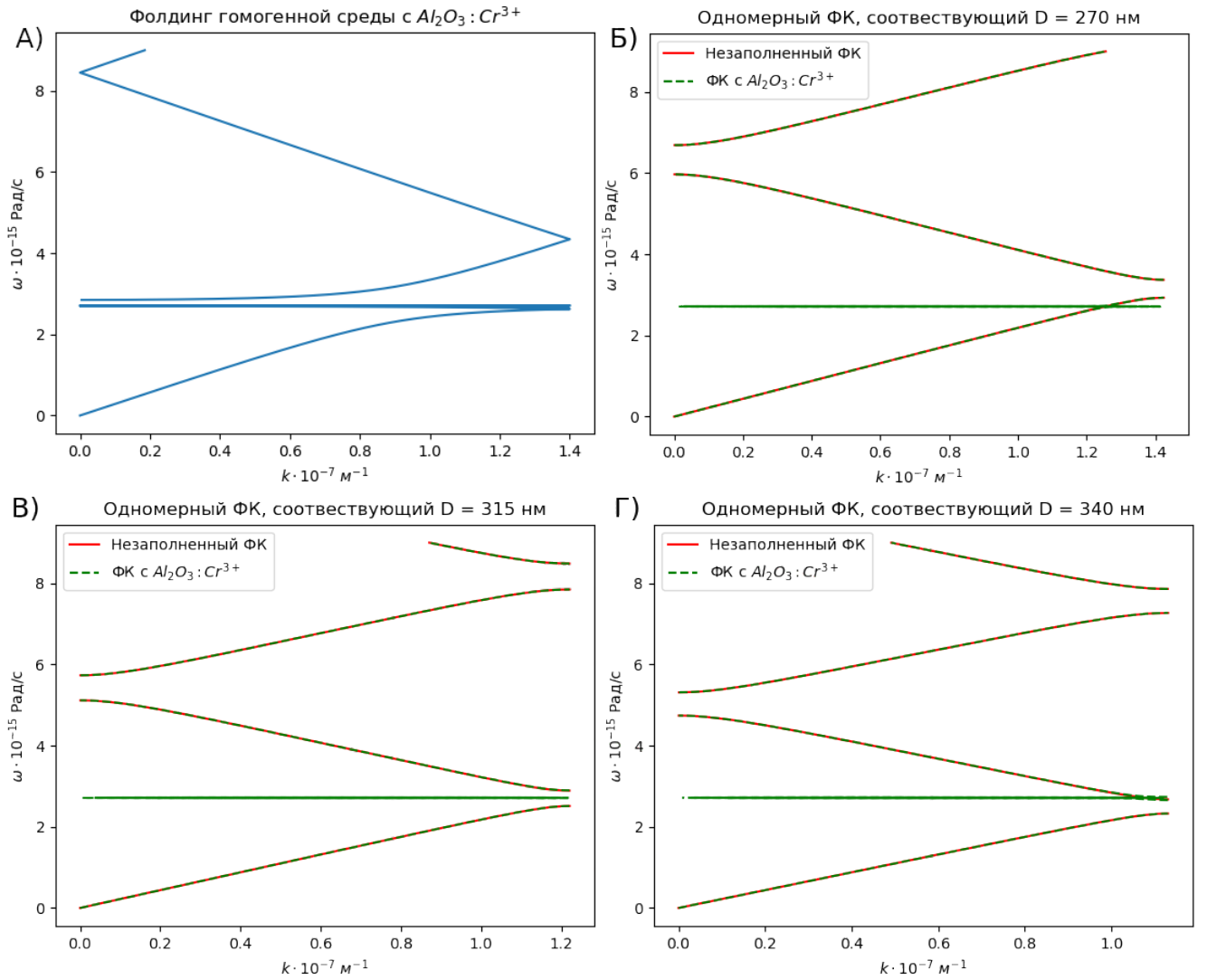


Рисунок 2.1: Дисперсионные кривые А) фолдинга среды нанопорошка $\text{Al}_2\text{O}_3 : \text{Cr}^{3+}$; Одномерного фотонного кристалла, заполненного $\text{Al}_2\text{O}_3 : \text{Cr}^{3+}$, соответствующего: Б) $D=270 \text{ нм}$ В) $D=315 \text{ нм}$ Г) $D=340 \text{ нм}$ в направлении $[111]$.

В случае заполнения пор ФК воздухом при всех диаметрах глобул дисперсионные кривые гладкие и не имеют резких производных. Однако, при заполнении веществами, имеющими резонанс диэлектрической проницаемости, в дисперсионных кривых появляются особенности, соответствующие появлению дополнительных зон, зависящие от заполняющего вещества и диаметра глобул ФК.

Для анализа влияния веществ с отрицательной диэлектрической проницаемостью рассмотрим два случая, представленные на Рисунке 2.2. При использовании вставок из вещества с $\epsilon = -4$, частотные диапазоны разрешенных состояний зависят от доли вставки в элементарной ячейке – зоны разрешенных состояний становятся шире по мере уменьшения доли вставки. Аналогичным образом ведут себя зонные диаграммы для металлических вставок по модели Друде (Рисунок 2.2Б). Можно наблюдать разрешенные фотонные состояния на частотах с отрицательной диэлектрической проницаемостью металла. В обоих случаях групповая

скоростью на частотах с отрицательной диэлектрической проницаемостью снижается по мере увеличения доли вещества с отрицательной диэлектрической проницаемостью.

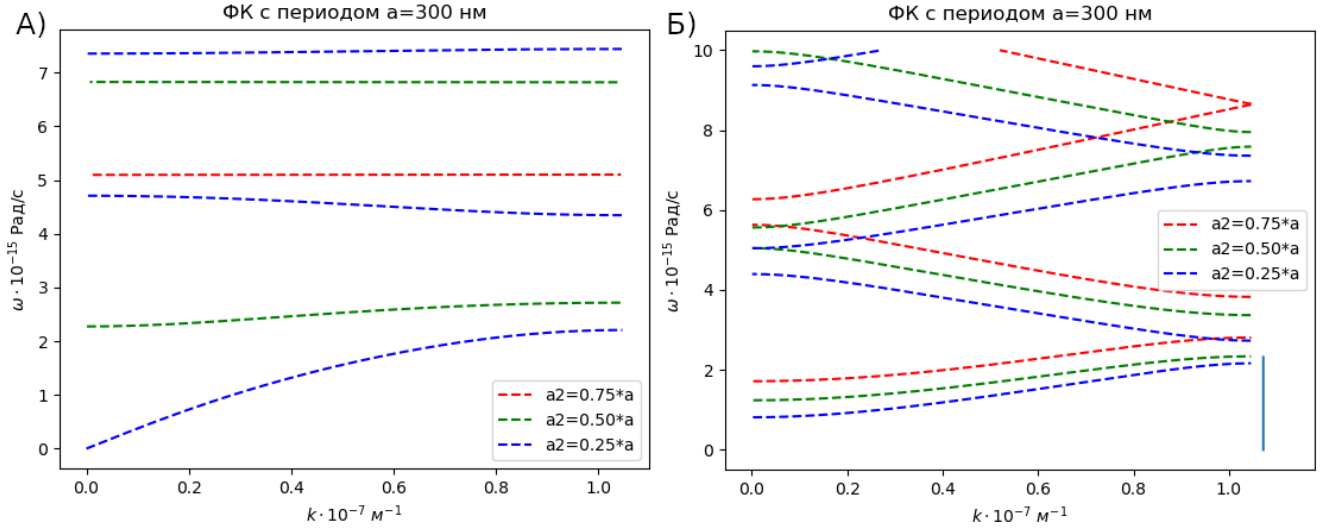


Рисунок 2.2: Дисперсионные кривые ФК с вставками А) вещества с $\varepsilon = -4$, Б) металла по модели Друде. Вертикальная синяя линия обозначает зону отрицательных значений $\varepsilon\omega$.

Рассмотрим случай заполнения пор фотонного кристалла наночастицами рубина. Рубин имеет диэлектрический резонанс малой ширины в красной области спектра электромагнитного излучения. Как показано в работе [34], рубин ($Al_2O_3 : Cr^{3+}$) имеет переход между основным состоянием (4A_2) и первым возбуждённым состоянием, соответствующий длине волны 694.3 нм.

Отличительной особенностью оптических свойств $Al_2O_3 : Cr^{3+}$ является частотная дисперсия показателя диэлектрической проницаемости в видимой области спектра. С учётом одного резонанса формула комплексной диэлектрической проницаемости [133] может быть записана как:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - j\omega\Gamma} \quad (2.7)$$

где ω_p – плазменная частота, ω_0 – характеристическая частота резонанса, Γ – ширина резонанса. Так как теорема Блоха требует трансляционной симметрии, а соотношения Крамерса-Кронига накладывают условия на мнимую и действительную часть ε , то затуханием необходимо пренебречь и принять $\Gamma = 0$. Частота ω_0 зависит от энергии перехода $^2E \rightarrow ^4A_2$ и соответствует длине волны электромагнитного излучения 694.3 нм [134]. Значение плазменной частоты может быть описано формулой [133]:

$$\omega_p^2 = \frac{e^2 FN}{m\varepsilon_0} \quad (2.8)$$

где e – заряд электрона, F – коэффициент силы осциллятора (принят за единицу), m – масса электрона, N – концентрация ионов Cr^{3+} . Исходя из экспериментальных данных [134], концентрация ионов Cr^{3+} в кристаллах рубина достигает 0.05%, что приводит к $N = 4.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Для анализа дисперсионных кривых был рассмотрен фолдинг для случая гомогенной среды с $Al_2O_3 : Cr^{3+}$, приведенный на Рисунке 2.1А. Из фолдинга можно видеть бездисперсионную поляритонную ветвь, складывающуюся в множество уровней, и поляритонную запрещенную зону. Кроме того, в рамках данного исследования было проведено вычисление дисперсионных кривых электромагнитных волн "эффективных" фотонных кристаллов соответствующих, синтетическим опалам с диаметрами глобул 270 нм, 315 нм и 340 нм, поры которых заполнены материалом с ионами хрома с концентрацией $N = 4.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. На Рисунке 2.1 приведены дисперсионные кривые для трёх диаметров глобул синтетического опала. Как можно видеть на Рисунке 2.1, резонанс диэлектрической проницаемости может находиться ниже запрещённой зоны для диаметра глобул 270 нм, внутри запрещённой зоны для диаметра глобул 315 нм и выше запрещённой зоны для диаметра глобул 340 нм. Ситуация, когда резонанс диэлектрической проницаемости находится внутри запрещённой зоны, вызывает наибольший интерес. В таком случае возникает дополнительная разрешенная зона с крайне пологими дисперсионными кривыми на частотах вблизи резонанса диэлектрической проницаемости.

Другим веществом, имеющим резонансный характер частотной дисперсии показателя диэлектрической проницаемости, является иод. Так как при атмосферном давлении иод переходит из твёрдой фазы в газообразное состояние [135], то возможно заполнение пор фотонного кристалла на основе синтетического опала парами йода. В данном исследовании рассмотрен случай распространения электромагнитных волн в фотонном кристалле в кристаллографическом направлении [111]. Представленные спектры отражения промоделированы для поверхности (111). Так как в настоящей работе рассматривался переход электрона между основным состоянием и первым возбуждённым состоянием молекулы I_2 . Энергия этого перехода равна 15770 см^{-1} [136]. Диэлектрическая проницаемость паров иода описывается формулой (??).

Был проведён расчёт дисперсионных кривых электромагнитных волн в фотонных кристаллах на основе синтетических опалов с диаметрами кварцевых глобул 250 нм, 300 нм и 350 нм. Данные дисперсионные кривые показаны на Рисунке 2.3, на которых оранжевые и зелёные кривые соответствуют дисперсии электромагнитного излучения в случае заполнения пор фотонного кристалла воздухом и парами иода с концентрацией $N = 2.34 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ соответственно. Резонансная частота для диэлектрической проницаемости иода была принята за $\omega_0 = 2.973 \cdot 10^{15} \text{ Рад/с}$.

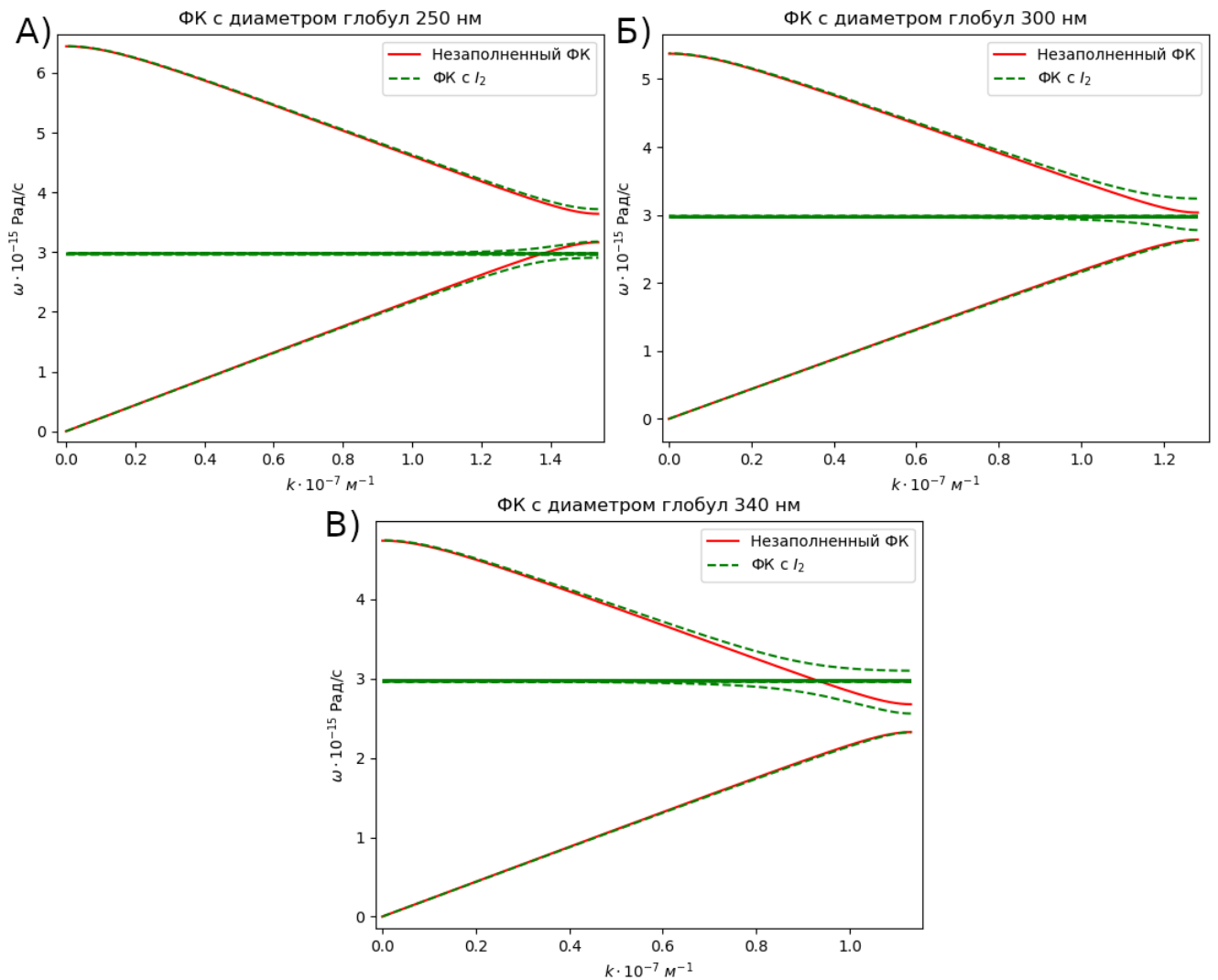


Рисунок 2.3: Дисперсионные кривые электромагнитного излучения в направлении $[111]$ фотонного кристалла, заполненного парами иода и соответствующего: А) $D=250$ нм, Б) $D=300$ нм, В) $D=340$ нм.

Как следует из представленных результатов моделирования дисперсии электромагнитных волн в фотонных кристаллах с различными диаметрами кварцевых глобул, частотное положение резонанса диэлектрической проницаемости паров иода может находиться в фотонной разрешенной зоне (Рисунки 2.3АВ) и в запрещённой зоне (Рисунок 2.3Б).

Использование иода в качестве вещества с резонансом диэлектрической проницаемости позволяет создать фотонный кристалл в котором дополнительная разрешенная зона внутри первой запрещенной зоны будет находиться в видимой области оптического спектра. Данная ситуация соответствует случаю с диаметром глобул, равному 300 нм.

Следует отметить, что при использовании модели Друде-Лоренца в структуре дисперсионных кривых могут наблюдаться 2 основные особенности:

1. Бездисперсионные зоны, аналогичные зонной структуре ФК, составленного из слоёв "метал-диэлектрик" (Рисунок 2.2)

2. Сгущение бездисперсионных зон, связанное с фолдингом поляритонного закона дисперсии (Рисунок 2.1А). В случае обоих заполняющих полости в ФК веществ подбором параметров можно поместить особенности дисперсионных кривых в первую разрешенную зону, вторую разрешенную зону, а также в запрещенную зону.

2.1.1 Групповая скорость в фотонных кристаллах типа опала с различными заполнителями

Такая характеристика, как групповая скорость электромагнитной волны оптического диапазона, является одной из наиболее важных оптических характеристик прозрачных сред. Она определяет скорость распространения импульса и в тривиальных случаях совпадает со скоростью света в данной прозрачной среде. С некоторыми допущениями групповая скорость также совпадает со скоростью распространения волнового пакета в оптической среде [137]. Большинство явлений, связанных с "замедлением света" могут быть рассмотрены как суперпозиция двух случаев:

- Снижение групповой скорости, связанное с частотной дисперсией гомогенного вещества для электромагнитных волн оптического диапазона
- Снижение групповой скорости, связанное с интерференцией падающего электромагнитного излучения на периодической структуре фотонного кристалла

В данном исследовании были рассмотрены оба механизма образования аномального снижения групповой скорости электромагнитного излучения: использование частотной дисперсии материалов и использование особенностей закона дисперсии вблизи края разрешенной зоны.

Сильная пространственная дисперсия, в частности дисперсионные соотношения фотонного кристалла, описанные уравнением (2.5), может привести к снижению или даже обнулению групповой скорости соответствующей Блоховской волны. В практических реализациях фотонных кристаллов скорость импульсов электромагнитного излучения оптического диапазона, распространяющихся в фотонных кристаллах без частотной дисперсии материалов, может снижаться на три порядка [138]. На практике, снижение групповой скорости применяется для создания условий высокоэффективной генерации гармоник электромагнитного излучения [139], усиления оптического сигнала [140].

Как показано в работе [32], дисперсионное соотношение (2.5) приводит к следующему виду выражения для групповой скорости в фотонном кристалле:

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{ac_0 \sqrt{1 - f_0^2(\omega)}}{a_1 \sqrt{\varepsilon_1} f_1(\omega) + a_2 \sqrt{\varepsilon_2} f_2(\omega) + \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \left(\frac{a_1}{\sqrt{\varepsilon_2}} f_2(\omega) + \frac{a_2}{\sqrt{\varepsilon_1}} f_1(\omega) \right)} \quad (2.9)$$

где

$$f_0(\omega) = \cos \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_1}}{c_0} a_1 \right) \cos \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_2}}{c_0} a_2 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{\sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}} \right) \sin \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_1}}{c_0} a_1 \right) \sin \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_2}}{c_0} a_2 \right) \quad (2.10)$$

$$f_1(\omega) = \sin \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_1}}{c_0} a_1 \right) \cos \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_2}}{c_0} a_2 \right) \quad (2.11)$$

$$f_2(\omega) = \cos \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_1}}{c_0} a_1 \right) \sin \left(\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_2}}{c_0} a_2 \right) \quad (2.12)$$

Так как описанное в (2.9) решение не учитывает частотную дисперсию диэлектрической проницаемости, то оно не может применяться для описания групповой скорости в резонансных фотонных кристаллах. Для нахождения групповой скорости в данном исследовании применялось численное дифференцирование.

Рассмотрим фотонный кристалл, заполненный $Al_2O_3 : Cr^{3+}$. На Рисунке 2.4 приведены кривые зависимости групповой скорости электромагнитного излучения от циклической частоты для таких фотонных кристаллов. В случае, если резонанс диэлектрической проницаемости находится внутри запрещённой зоны фотонного кристалла (отмечено стрелкой на Рисунке 2.4Б), групповая скорость в данной области падает до значений ниже 10^6 м/с.

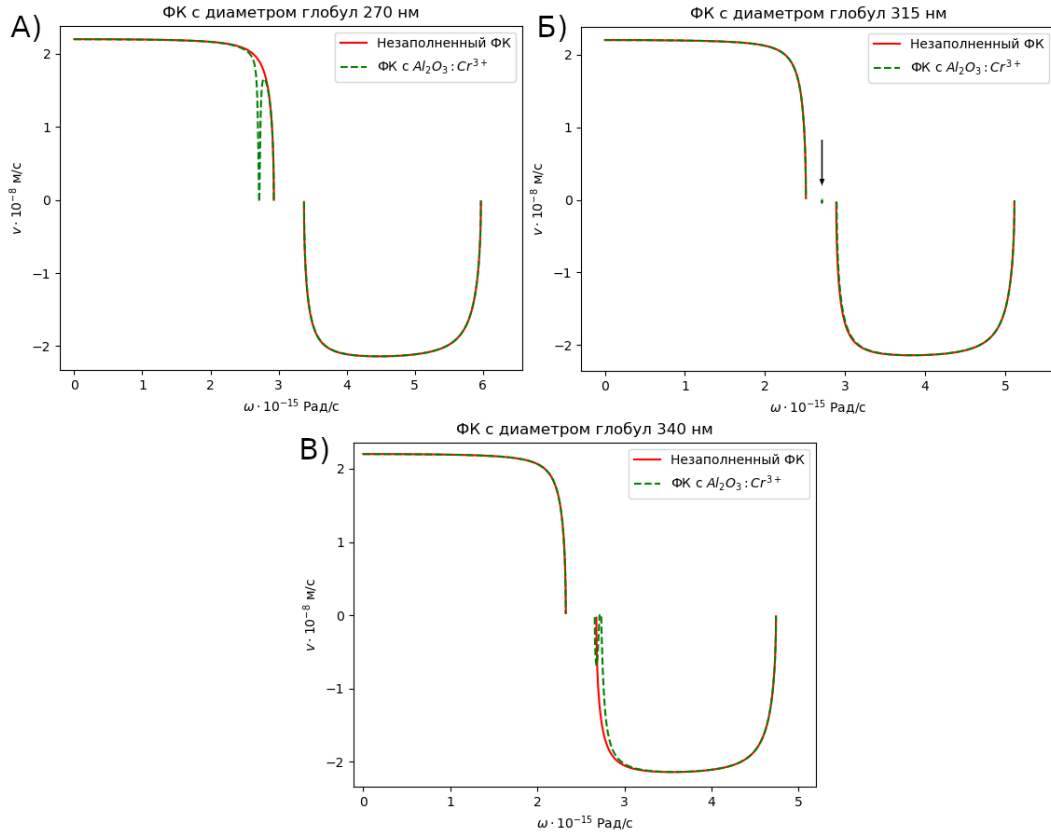


Рисунок 2.4: Групповая скорость в направлении $[111]$ электромагнитных волн в фотонном кристалле, заполненном $Al_2O_3 : Cr^{3+}$, соответствующим различным диаметрам глобул: а) 270 нм б) 315 нм, стрелкой показано состояние, индуцированное резонансом диэлектрической проницаемости с) 340 нм.

Таким образом, дисперсионные кривые и соответствующие графики групповой скорости электромагнитного излучения внутри фотонного кристалла, заполненного $Al_2O_3 : Cr^{3+}$, имеют разрыв в области резонанса диэлектрической проницаемости на длине волны 694.3 нм. Значение групповой скорости электромагнитного излучения в данной области спектра аномально падает.

Так как длина волны в 694.3 нм больше, чем полосы поглощения рубина в фиолетовой и желто-зелёной областях спектра, то электромагнитные волны состояния резонанса диэлектрической проницаемости внутри запрещенной зоны фотонного кристалла могут быть возбуждены светом видимого диапазона. Процесс фотолюминесценции приводит к эффективному заполнению резонансного уровня 2E [134].

Теперь рассмотрим групповую скорость в фотонных кристаллах, заполненных парами иода, графики которой показаны на Рисунке 2.5. На частотах, близких к резонансным, возникает набор близко-расположенных уровней. В таких случаях групповая скорость электромагнитных волн аномально снижается в данной области спектра. Наиболее значительное снижение групповой скорости электромагнитных волн присутствует в случае, если резонанс диэлектри-

ческой проницаемости паров иода попадает в запрещенную зону фотонного кристалла, что показано на Рис.2.3Б.

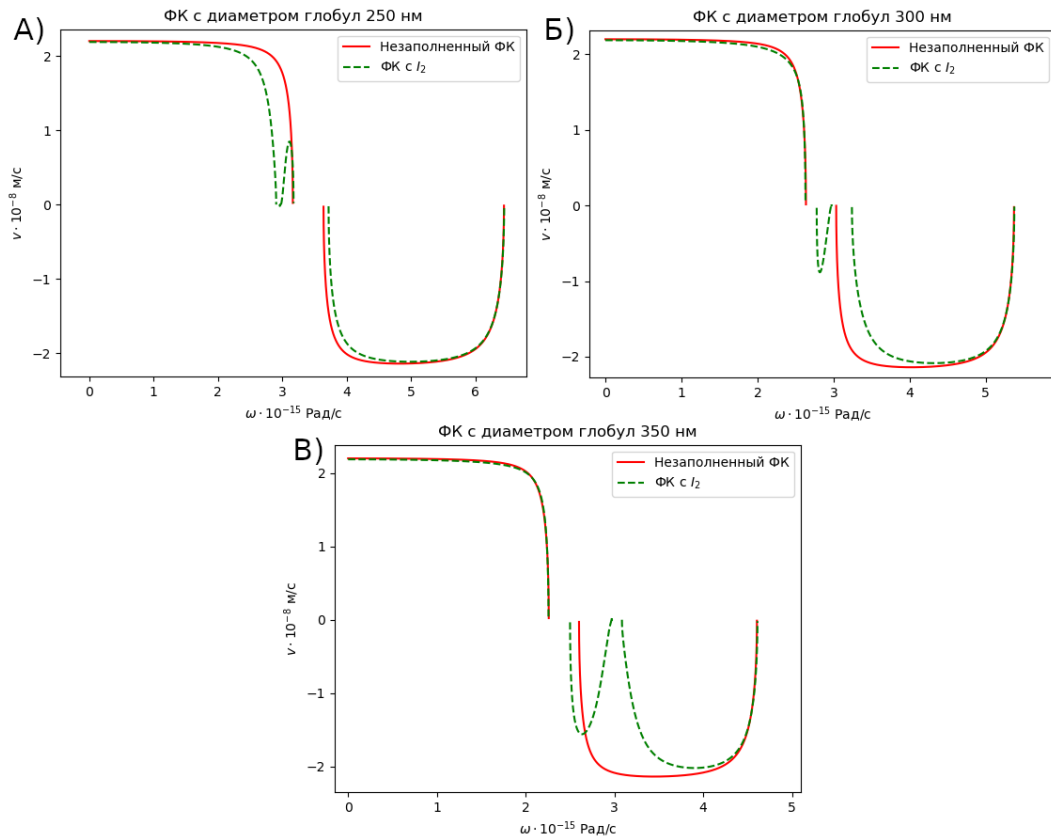


Рисунок 2.5: Групповая скорость в направлении $[111]$ электромагнитных волн в фотонном кристалле, заполненном I_2 , соответствующим различным диаметров глобул: А) 250 нм Б) 300 нм В) 350 нм.

Резкое падение групповой скорости электромагнитного излучения должно приводить к соответствующему увеличению плотности фотонных состояний [141] внутри объёма фотонного кристалла. Исходя из проведенного анализа значений групповой скорости, данный эффект будет наиболее явно проявляться при попадании полосы резонанса диэлектрической проницаемости паров иода в запрещенную зону фотонного кристалла. В таком случае, при фокусировке лазерного излучения внутри фотонного кристалла следует ожидать аномального увеличения эффективности различных процессов неупругого рассеяния света.

Изученные свойства фотонных кристаллов с резонансами диэлектрической проницаемости материалов вызывают интерес на практике при разработке новых типов селективных зеркал и фильтров, преобразователей частоты в оптическом диапазоне и датчиков электромагнитных полей. Дополнительно к наночастицам рубина или парам иода, возможно заполнение пор фотонного кристалла на основе синтетических опалов одновременно и наночастицами нецентросимметричных материалов, к примеру ниобата лития, титаната бария, нитрита натрия. Ожидается, что такая комбинация материалов за счёт аномального снижения групповой

скорости электромагнитного излучения приведёт к эффективной генерации второй гармоники и других нелинейных процессов.

2.2 Управление шириной запрещенной зоны двумерного фотонного кристалла за счет изменения геометрии элементарной ячейки

Так как при попадании электромагнитного излучения с частотой, соответствующей фотонной запрещённой зоне, на поверхность фотонного кристалла, глубина проникновения излучения зависит от соотношения разности между частотой падающего излучения и частотой ближайшей разрешенной зоны к частоте падающего излучения [11] то, ширина запрещенной зоны фотонного кристалла является важным показателем при разработке ФИС, и существует задача её максимизации. Однако, в задачах фотоники следует рассматривать не разность частот верхней и нижней границ зоны, а соотношение частотной ширины фотонной запрещённой зоны к центральной частоте запрещённой зоны (англ. *gap-midgap ratio*) [142], что учитывает возможность масштабирования, в отличие от тривиальной разности частот. В дальнейшем будем использовать термин относительная ширина зоны для описания этого соотношения.

При решении задачи максимизации относительной ширины запрещенной зоны фотонного кристалла существует два возможных подхода к решению данной проблемы. Наиболее очевидный подход предполагает изменение состава веществ, из которых изготовлен фотонный кристалл, с целью увеличения оптического контраста. Однако, при разработке ФИС выбор материалов ограничен технологическими возможностями производственной линии. В таком случае, необходимо исследовать возможность максимизации относительной ширины запрещенной зоны вторым методом – за счет изменения геометрии элементарной ячейки. Несмотря на то, что в литературе представлены фотонные кристаллы различной геометрии, в частности гексагональные фотонные кристаллы с элементами в виде круга [143], прямоугольника треугольника [144], в данной диссертации проведено сравнение максимально возможной запрещенной зоны гексагонального фотонного кристалла с элементом в виде гексагона и классическим элементом в виде круга. Сравнение данных геометрий приведено на Рис.2.6.

При расчёте дисперсионных кривых электромагнитных волн в фотонном кристалле показатель преломления вещества пластины принимался за $n = 3.398$, показатель преломления воздуха в отверстиях принимался за $n = 1$. Показатель преломления $n = 3.398$ был выбран исходя из того, что это значение принимает показатель преломления GaAs на стандартной телекоммуникационной длине волны 1.55 мкм [145]. Полученные дисперсионные характери-

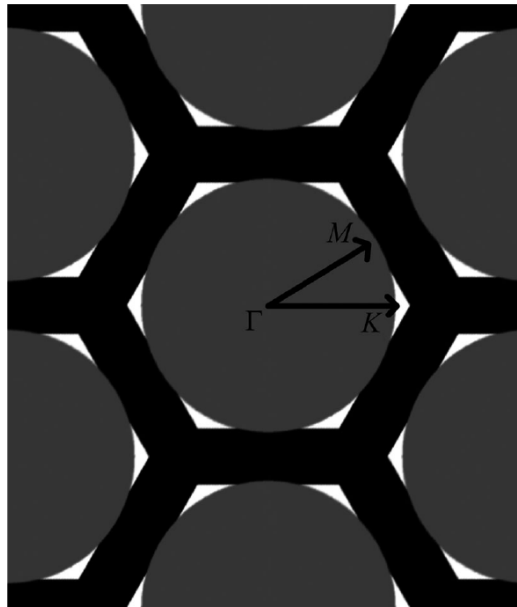


Рисунок 2.6: Сравнение двумерных гексагональных структур.

стики приведены на Рис.2.7 в виде соотношения ширины запрещённой зоны к центральной частоте запрещенной зоны для обоих видов гексагональных фотонных кристаллов. Максимальное соотношение ширины запрещенной зоны к центральной частоте запрещенной зоны для фотонного кристалла с круглыми элементами составляет 0.5007 при заполнении 57.21%. В тоже время для гексагонального фотонного кристалла с гексагональными элементами данный показатель составляет 0.5223 при заполнении 59.41%. Прирост максимального соотношения ширины запрещенной зоны к центральной частоте составляет 4.3% по сравнению с гексагональным фотонным кристаллом с круглыми элементами.

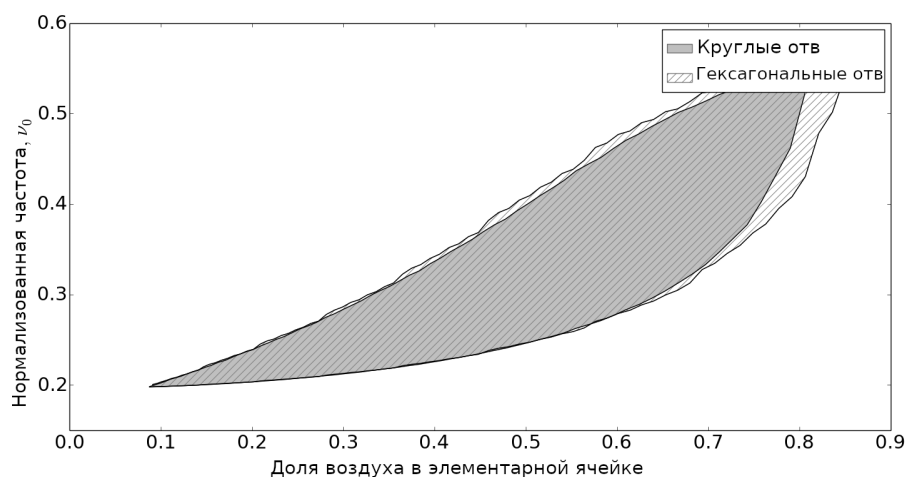


Рисунок 2.7: Сравнение ширины запрещённых зон двумерных ФК структур с круглыми и гексагональными отверстиями.

На Рис.2.8 приведены дисперсионные кривые обоих типов гексагональных фотонных кристаллов с заполнением соответствующим максимальному соотношению ширины запрещен-

ной зоны к её частотному положению. Из формы дисперсионных кривых видно, что дисперсия в первой разрешенной зоне не сильно отличается в гексагональных фотонных кристаллах с обоими типами элементов. Это вызвано низкими частотами электромагнитного излучения в этой зоне. В то же время, положение второй разрешенной зоны гексагонального фотонного кристалла с гексагональными элементами находится выше на шкале частот, чем у гексагонального фотонного кристалла с круглыми элементами. Это различие обеспечивает прирост ширины запрещённой зоны.

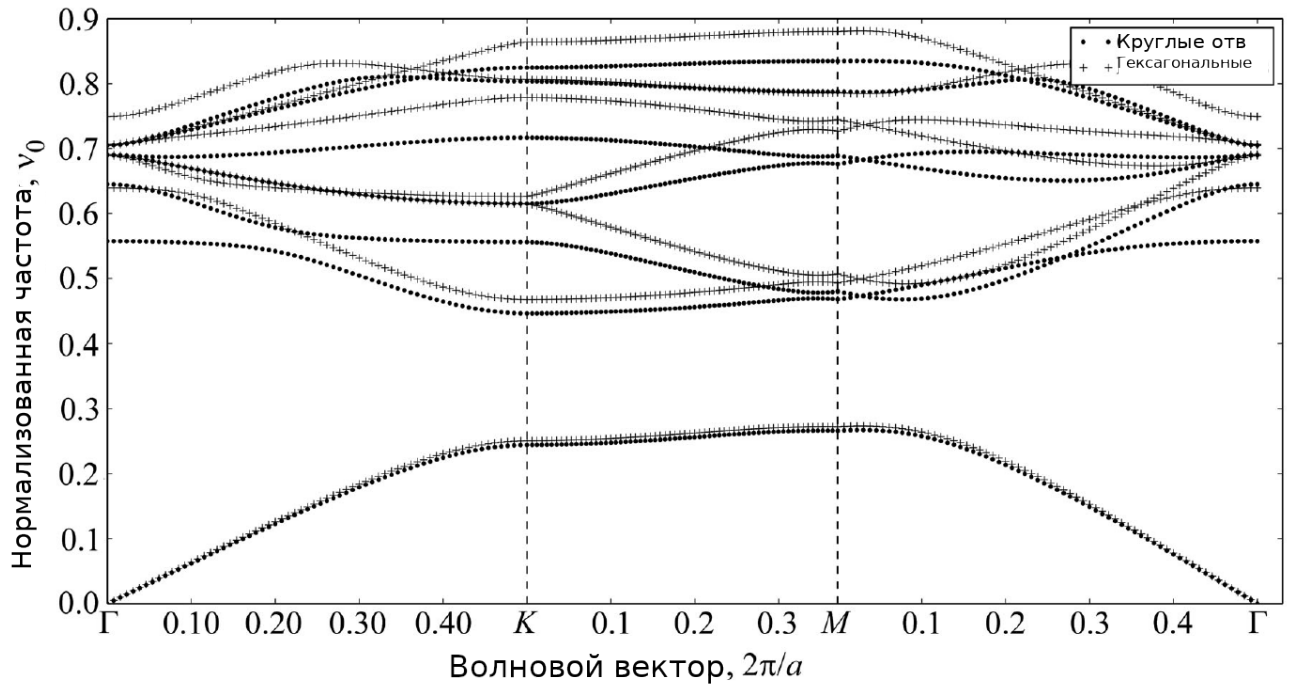


Рисунок 2.8: Сравнение дисперсионных двумерных ФК структур с круглыми и гексагональными отверстиями.

Типичным способом изготовления планарных структур, включающих ФИС, является фотолитография. Одним из основных недостатков фотолитографии как способа изготовления планарных фотонных кристаллов является высокая стоимость выходной продукции при малых объёмах производства, что особенно актуально при проведении исследований. Высокая стоимость изготовления в данном случае вызвана необходимостью производства уникальных для каждой структуры фотошаблонов. Однако, если вместо фотолитографии использовать электронную литографию отпадает необходимость в фотошаблонах. В настоящее время, точность электронной литографии достигла такого уровня, что с её помощью возможно производить структуры с шириной линии в 10 нм [146], что превышает возможности большинства фотолитографических производств.

В связи с тем, что прямые линии являются базовыми структурами для генерации управляющих команд электронных литографов [147], был предложен метод комбинации прямых

линий, который приводит к появлению структуры гексагонального фотонного кристалла с гексагональными отверстиями. Предложенный метод основан на результатах работы [148], посвящённых субдифракционной микроскопии. Схема наложения прямых линий представлена на Рис.2.9.



Рисунок 2.9: Схема построения планарного фотонного кристалла при помощи набора прямых линий. Источник [148].

Так же, как и фоторезист [149], электронный резист делится на позитивный и негативный. При использовании позитивного резиста, растворяется и смывается экспонированная область резиста. При использовании негативного – смывается неэкспонированная область нанесённого на пластину резиста. Таким образом, для производства предложенной структуры гексагонального фотонного кристалла возможно использовать набор прямых линий, нанесённых на негативный фоторезист при помощи электронного литографа или электронного микроскопа с возможностью литографии.

Для производства планарных гексагональных фотонных кристаллов с гексагональными отверстиями предложена следующая последовательность операций:

1. Нанесение на поверхность GaAs пластины слоя негативного электронного резиста
2. Экспозиция резиста по предложенной схеме
3. Смывка неэкспонированных участков электронного резиста
4. Травление

Таким образом, в данном исследовании предложена новая геометрия элемента планарного гексагонального фотонного кристалла, имеющая форму ячейки Вигнера-Зейтца для данной кристаллической решетки. Проведённые вычисления показали, что у фотонных кристаллов предложенной геометрии соотношение ширины запрещённой зоны к центральной частоте этой запрещённой зоны выше, чем у аналогичных фотонных кристаллов с традиционными круглыми элементами. Разница составляет 4.3%. Предложен метод изготовления рассматриваемых гексагональных фотонных кристаллов, использующий достижения современной электронной литографии.

2.3 Гибридные волноводы на основе планарного фотонного кристалла

Одним из основных применений планарных ФК в интегральной фотонике является использование их линейных дефектов в качестве волноводов. В связи с тем, что волноводы на основе ФК могут быть использованы в ФИС совместно с металлическими проводниками, то возможно влияние отражения от металлических проводников на электромагнитное излучение в волноводе. Таким образом, интересной структурой для анализа является комбинация металлического волновода и фотонного кристалла. Можно предположить, что малое пропускание в запрещенной зоне конечного отрезка фотонного кристалла оказывает влияние на динамические характеристики фотонной системы.

Структура показана на Рисунке 2.10 и представляет собой гексагональный фотонный кристалл из отверстий в полупроводнике с $\varepsilon = 12$, с центральным волноводом и отражающими границами на максимальном и минимальном значении координаты Y (вертикаль на Рисунке 2.10). Ширина структуры была принята на 20 периодов ФК. В этой структуре был построен гексагональный ФК с центральным волноводом, в котором был проведен анализ распространения сигнала. Было установлено, что волна с длиной 3.97 периода ФК распространяется в волноводе с шириной 0.736 периода, полученного за счёт смещения половины ФК вдоль вертикальной оси. Так как система не содержит нелинейностей и резонансов диэлектрической проницаемости, то можно выбрать такой период ФК, что длина волны 3.97 периода соответствует длине волны 1.5 мкм. В таком случае ширина структуры составляет 7.547 мкм, период фотонного кристалла 0.377 мкм, центральный волновод представляет собой сдвиг половины фотонного кристалла на 0.278 мкм.

Исследовалось влияние отражающих границ на динамические характеристики волноводной структуры. Была проведена серия расчетов электромагнитных полей в гибридных вол-

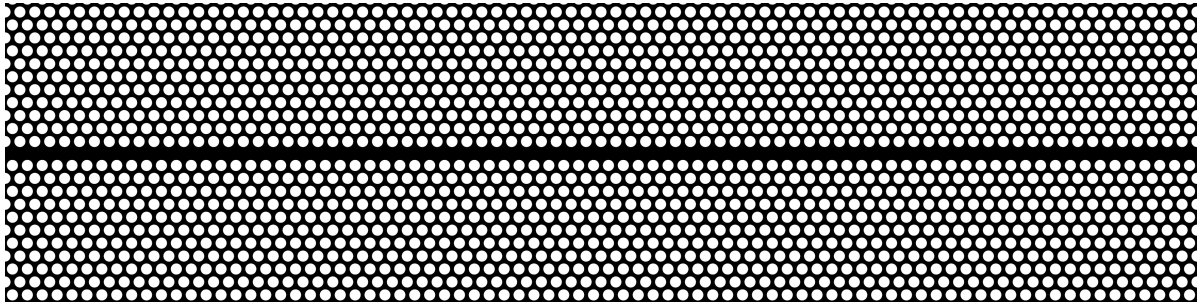


Рисунок 2.10: Структура гибридного волновода. Черным цветом показан полупроводник с $\varepsilon = 12$, белым цветом – воздух. Верхняя и нижняя границы отражающие.

новодах по методу FDTD. Так как FDTD не использует разложение электромагнитного излучения на моды, то для селективного возбуждения мод можно использовать источники поля конфигураций, соответствующих пучностям стоячей волны. В частности, было проверено исследование влияния конфигурации источника поля E_z : точечный источник в центре волновода, соответствующий нулевой моде; два точечных источника в противофазе по бокам центрального волновода, соответствующие первой моде; линейный источник во всю ширину волновода, соответствующий неселективному возбуждению. Источники находились на левом краю структуры, а зона измерения выходной мощности – на правом. Временная зависимость выходной мощности электромагнитного излучения на правой границе структуры при длине волны 1.5 мкм приведена на Рисунке 2.11. Следует отметить, что приведенные графики являются результатом фильтрации изначального зашумленного сигнала по методике дискретных вейвлет преобразований [150]. Как можно видеть из Рисунка 2.11А, форма графиков не проявляет особенностей зависимости от конфигурации источника поля. Однако приведенная зависимость выходной мощности центрального волновода, представленная на Рисунке 2.11Б и Рисунке 2.11В, показывает пик на моменте около 300 фс при одиночном точечном и линейном источнике.

Для объяснения пика необходимо рассмотреть распределение электромагнитных полей в различные моменты времени. Как показано на Рисунке 2.12, характер распределения поля зависит от типа граничных условий и момента времени. К примеру, в момент начального пика пропускания (Рисунок 2.12А) в центральном волноводе доминирует нулевая мода, которая хорошо распространяется. Однако, в момент 550 фс (Рисунок 2.12Б) характер распределения поля смещается в сторону первой моды, которая плохо распространяется в центральном волноводе. К моменту времени 3000 фс, приходит волна, занимающая всю ширину структуры и соответствующая первой моде центрального волновода, как показано на Рисунке 2.12В.

Можно предположить, что резонанс, формирующийся между верхней и нижней границами структуры, требует наличия первой моды в центральном волноводе. Это объясняет прохожде-

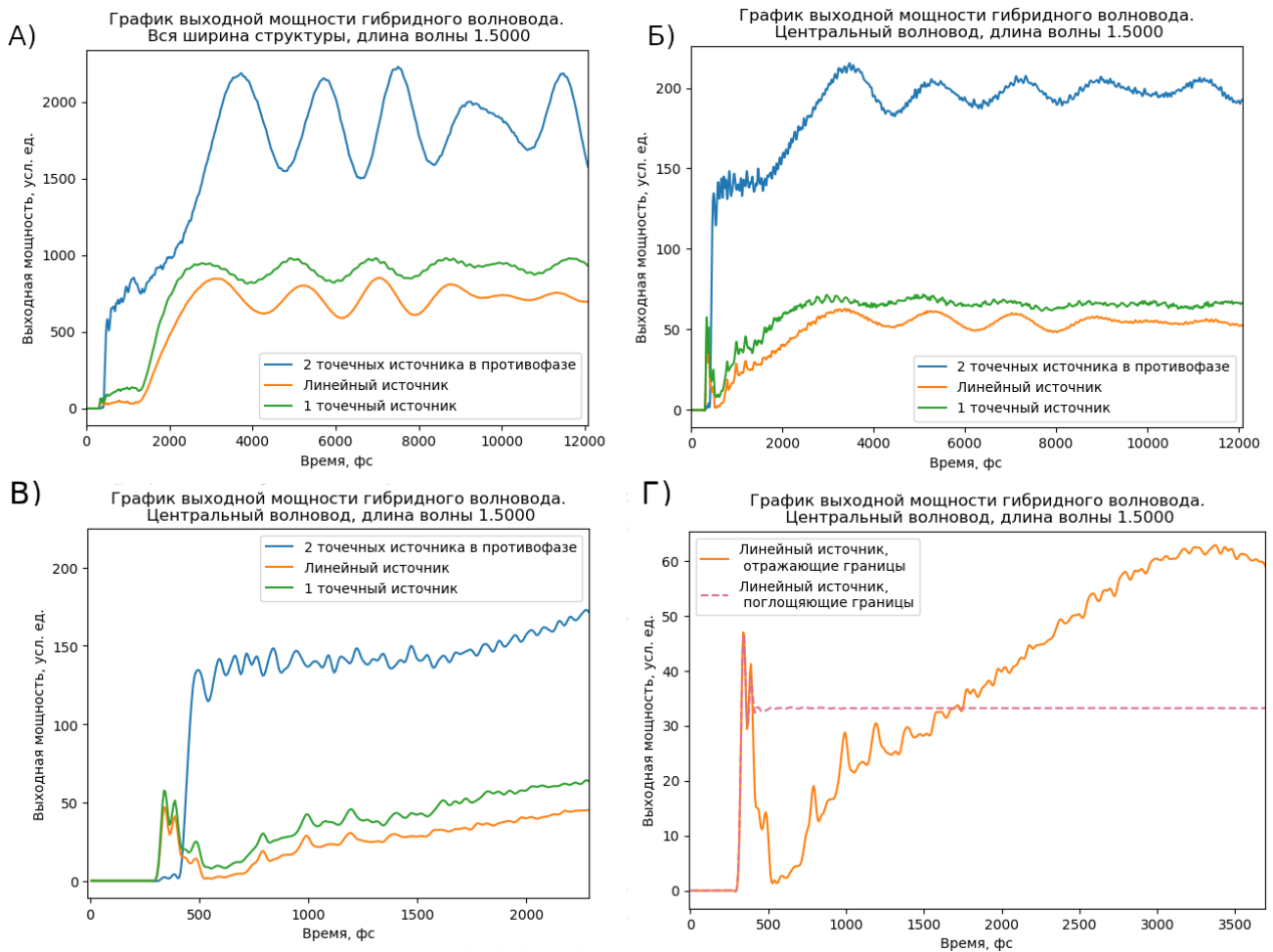


Рисунок 2.11: Выходной мощности из А) всей ширины гибридной структуры с отражающими граничными условиями Б,В) центральной части гибридного волновода с отражающими граничными условиями Г) центральной части гибридного волновода с отражающими и поглощающими граничными условиями

ние первого импульса в виде нулевой моды в момент времени 350 фс, последующее формирование резонанса и провал пропускания в момент времени 550 фс, широкий фронт волны в момент 3000 фс.

Для проверки гипотезы был рассмотрен случай с поглощающими верхним и нижним граничными условиями. Так как при поглощении электромагнитной волны – вместо её отражения – формирование резонанса невозможно, то следует ожидать отсутствие значительной зависимости характера распределения поля от времени. Данный результат представлен на Рисунках 2.12Г/Д/Е, показывающих распределение поля в структуре с поглощающими граничными условиями в моменты времени 350 фс, 550 фс и 3000 фс.

Для анализа временной зависимости пропускания гибридного волновода рассмотрим 3 линии на Рисунке 2.11В. Как можно видеть из графика, кривые, соответствующие линейному и одиночному точечному источнику поля, имеют схожую форму, в то же время, кривая соот-

ветствующая двум источникам в противофазе, не имеет ни начального пика пропускания, ни падения пропускания.

Так как пики пропускания линейного и точечного источников на Рисунке 2.11В имеют по две четко выраженные вершины, то для полного понимания физики системы необходимо объяснить их происхождение. Для этого сравним график выходной мощности линейного источника в случаях отражающих и поглощающих граничных условий по оси Y , показанных на Рисунке 2.11Г. Как можно видеть, данные двойные вершины повторяются для обеих кривых и являются единственной особенностью системы с поглощающими граничными условиями. Таким образом, можно сделать вывод, что двойной пик обусловлен резонансом центрального W1 волновода между двумя половинами фотонного кристалла.

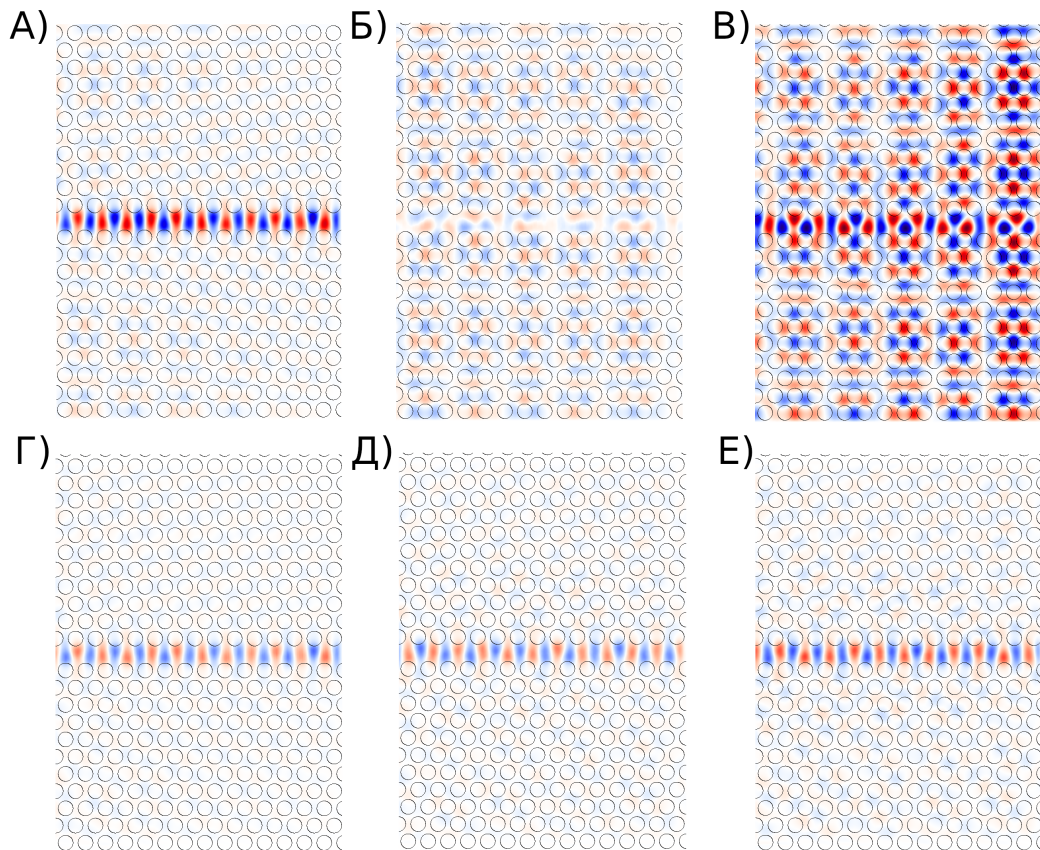


Рисунок 2.12: Распределение электрического поля E_z возле выходной (правой) границы гибридного волновода при длине волны 1.5 мкм при линейной конфигурации источника поля: А, Б, В) Отражающие граничные условия сверху и снизу в моменты времени 350 фс, 550 фс, 3000 фс; Г, Д, Е) Поглощающие граничные условия сверху и снизу в моменты времени 350 фс, 550 фс, 3000 фс;

Для анализа частотной зависимости рассмотрим трехмерный график выходной мощности, показанный на Рисунке 2.13, где точками показана выходная мощность в момент провала. Можно видеть, что характер выходной мощности зависит от частоты падающего излучения. Вблизи резонанса, связанного с отражающими граничными условиями, наблюдаются малые

значения выходной мощности в момент провала. Однако, в случае смещения частоты падающего излучения значения выходной мощности в момент провала увеличиваются.

Можно сделать вывод, что в гибридном W1 волноводе на основе фотонного кристалла и отражающих границ существует нетривиальная динамика выходной мощности, обусловленная взаимодействием моды центрального волновода и моды, образующейся между отражающими границами структуры по оси Y . Данный эффект существует в узком частотном диапазоне и временном интервале. Ограниченность временного интервала является следствием времени установления состояния между отражающими границами структуры по оси Y , лимитированного малым пропусканием фотонного кристалла в запрещенной зоне.

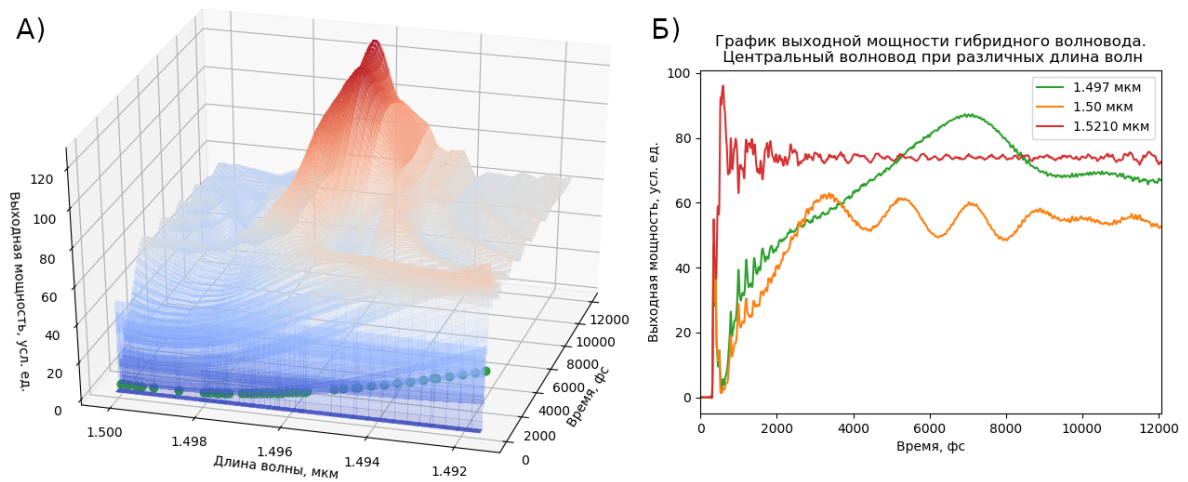


Рисунок 2.13: Зависимость выходной мощности гибридного волновода от длины волны падающего излучения. Точками на (А) показано значение выходной мощности в момент провала пропускания.

2.4 Выводы по главе

1. Фотонные кристаллы на основе синтетических опалов могут менять свои оптические свойства при заполнении их пор веществами с резонансом диэлектрической проницаемости, в частности парами иода и $Al_2O_3 : Cr^{3+}$. Резонанс диэлектрической проницаемости сред-заполнителей может находиться выше, ниже и внутри первой фотонной запрещённой зоны. В случае нахождения резонанса диэлектрической проницаемости внутри первой фотонной запрещённой зоны, внутри запрещённой зоны возникают разрешенные фотонные состояния, характеризующиеся малыми значениями групповой скорости электромагнитных волн.

2. Двумерные гексагональные фотонные кристаллы с элементами в виде гексагона имеют большую ширину первой фотонной запрещённой зоны по сравнению с идентичными фотонными кристаллами с круглыми элементами. Данное увеличение ширины запрещённой зоны проявляется на больших размерах воздушных полостей.
3. В волноводах на основе фотонных кристаллов с отражающими границами существует нетривиальная динамика нулевой волноводной моды, в которой можно выделить изначальный пик пропускания, провал пропускания и основной сигнал. В случае селективного возбуждения первой моды, динамика становится тривиальной.

Глава 3. Моделирование и исследование динамических и статических характеристик волноводных структур с резонансами Фано

В данной главе описано численное и аналитическое исследование оптических характеристик волноводов с резонансами Фано. Данные структуры состоят из протяженного волновода и резонатора, в котором образуется локализованное состояние. Таким образом возможно наблюдать взаимодействие локализованного состояния и близких по частоте распространяющихся мод, приводящее к образованию резонансов Фано.

Отличительной особенностью резонансов Фано служит их малая спектральная ширина, зачастую сопровождающаяся резким асимметричным характером кривой пропускания [151]. Данная особенность делает структуры с резонансами Фано хорошими кандидатами на роль логических ключей [152] и сенсоров [153]. Однако, как и любое локализованное состояние, такой резонатор требует накопления энергии для выхода на стационарный режим. Опубликованные работы зачастую описывают только спектральные характеристики [24, 30], что актуально для больших времен измерения. Для исследования быстропротекающих процессов или быстрой обработки оптических сигналов следует определить динамические характеристики резонансов Фано. Одним из предельных случаев которых является связанное состояние в континууме (ССК), также рассмотренное в данной главе.

Специфика математического моделирования непериодических фотонных структур заключается в невозможности описания электромагнитных полей в данных структурах при помощи Блоховских функций. Это приводит к необходимости применения затратных, с точки зрения необходимой вычислительной мощности, методов расчёта, в частности, метода аппроксимации конечными разностями во временной области (FDTD), использованном в данном исследовании. Метод FDTD позволяет рассчитывать спектры пропускания и отражения фотонных

структур, а также динамику распространения электромагнитных полей в данных структурах, для широкого класса материалов.

Было проведено исследование как двумерных, так и трехмерных структур. В качестве двумерной системы был выбран волновод с металлическими обкладками и диэлектрической вставкой внутри волновода. В качестве трёхмерной системы был выбран диэлектрический волновод эванесцентно сопряженный с диэлектрическим резонатором. Обе рассматриваемые системы являются линейными, что позволяет использовать найденные закономерности в широком диапазоне частот и мощностей излучения.

3.1 Исследование оптических свойств планарных волноводов

В данном разделе приводится описание численного метода анализа волноводных мод, а также численное моделирование планарных волноводов и анализ оптических свойств локализованных состояний в двумерных волноводах. При наличии диэлектрической вставки, на разных участках волновода могут существовать различные наборы распространяющихся мод. Их взаимодействие потенциально может привести к образованию ССК.

3.1.1 Моделирование резонансов Фано и связанных состояний в континууме в планарных волноводах

Так как для установления локализованного состояния в резонаторе требуется время, то спектр пропускания системы, состоящей из волновода и резонатора, формируется не мгновенно. Обычно для анализа спектра пропускания фотонных структур по методу аппроксимации конечными разностями во временной области используется гауссов импульс, который описывается формулой:

$$V(t) = e^{\frac{-(t-t_0)^2}{2w^2}} \cdot \cos(2\pi \cdot f \cdot (t - t_0)) \quad (3.1)$$

где V – компонента электромагнитного поля, t_0 – время начала импульса, w – частотная ширина импульса, f – центральная частота импульса. В связи с тем, что резонансы Фано в диэлектрических структурах являются узкими в спектральной области, их время образования является значительным. Таким образом необходимо использовать гауссовы импульсы, протяженные во времени. Однако, использование протяженных гауссовых импульсов не даёт возможности наблюдать спектр в широком диапазоне длин волн.

Для решения задачи нахождения спектров волноводов с резонансом Фано был разработан приём использования множественных гауссовых импульсов. Так как длительность гауссова импульса обратно пропорциональна его частотной ширине, то использование длинных во временной области импульсов приводит к необходимости использования множества импульсов для покрытия всей ширины интересующей частотной области. Существуют два предельных подхода к организации исследования с множеством импульсов. Первый предельный подход заключается в моделировании каждого импульса по отдельности, что приводит к необоснованно большому времени расчётов. Второй предельный подход заключается в моделировании всех импульсов в одном расчёте, что приводит к взаимной интерференции и помехам. В качестве промежуточного варианта был разработан метод, в котором гауссовы импульсы разбиваются на два набора, которые моделируются в двух расчётах. Для этого центральные частоты всех импульсов упорядочиваются в сортированный список. Чётные номера в этом списке попадают в один набор, а нечётные – во второй набор.

Первым шагом в построении этих наборов является определение необходимой спектральной ширины гауссовых источников. Для определения ширины используется выражение:

$$w = \sqrt{\frac{50}{T^2}} \quad (3.2)$$

где константа 50 взята из исходного кода программного пакета МЕЕР [124], T – длительность импульса. Таким образом, зная примерное время образования резонансного состояния можно выбрать подходящее значение параметра T и установить необходимую частотную ширину гауссовых импульсов.

После определения необходимой спектральной ширины гауссовых импульсов, частотная область, на которой будет рассчитываться спектр, разбивается на равные по спектральной ширине гауссова импульса участки. Нечётные источники имеют центральные частоты, равные:

$$f = f_0 + n \cdot w \quad (3.3)$$

где f_0 – начало спектрального интервала, n – целое неотрицательное число в диапазоне от 0 до N , выбираемого по формуле:

$$N = \left\lceil \frac{f_{end} - f_0}{w} \right\rceil \quad (3.4)$$

где скобки обозначают округление до целого в большую сторону, f_{end} – конец спектрального интервала.

Аналогичным образом выбираются центральные частоты ”чётных” источников:

$$f = f_0 + \frac{w}{2} + n \cdot w \quad (3.5)$$

где n – имеет те же значения, что и в выражении (3.3). График интенсивности ”чётных” и ”нечётных” источников представлен на Рисунке 3.1. Для каждой структуры проводятся два расчёта: один с ”нечётными” источниками, а второй с ”чётными”. Аналогично, два расчёта проводятся для нормировочных структур, не содержащих резонатора.

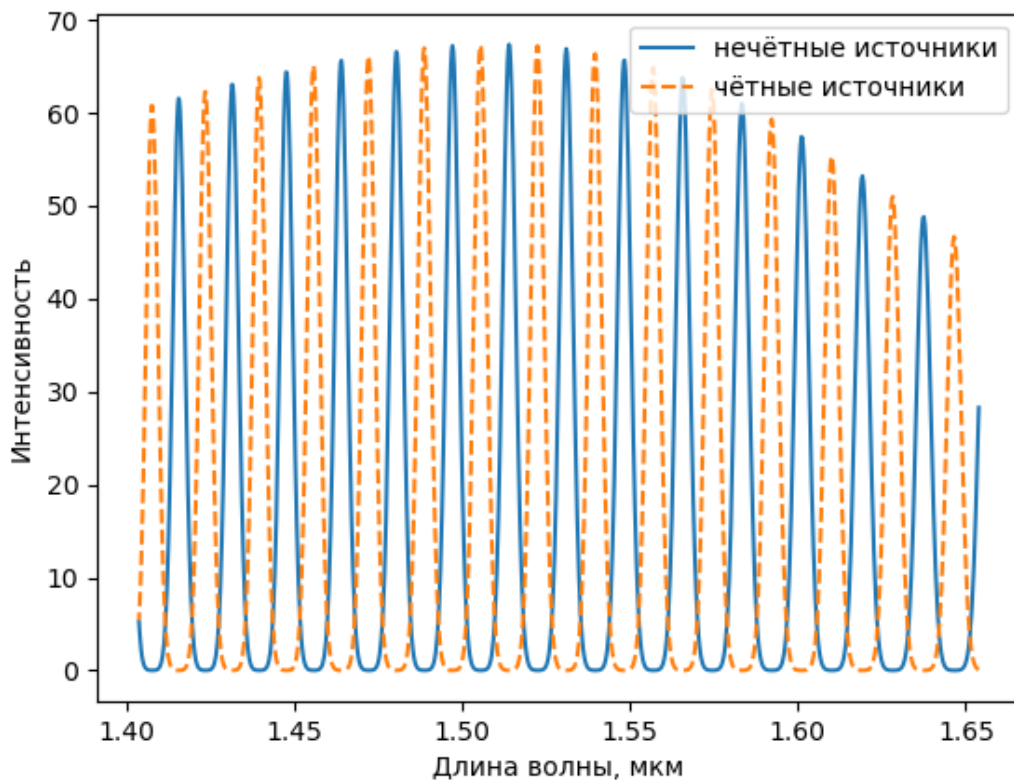


Рисунок 3.1: Зависимость интенсивности источников от длины волны.

Следующим шагом является выбор необходимых амплитуд. Это обусловлено тем, что для каждой частоты на момент окончания расчётов имеется два возможных значения амплитуды, одно из расчёта с ”нечётными” источниками, а второе из расчёта с ”чётными” источниками. Дальнейшая нормировка выбранных значений из результатов моделирования структуры с резонатором приводит к спектру пропускания.

Несмотря на очевидные достоинства моделирования фотонных систем по методу FDTD, такие как использование любых геометрий и материалов, а также возможность анализа динамических характеристик, данный метод имеет ряд недостатков при моделировании волноводных структур. Во-первых, метод является затратным с точки зрения вычислительных ресур-

сов. Во-вторых, для анализа характеристик волноводов зачастую необходимо знать характеристики отдельной моды, что требует дополнительного преобразования временного сигнала. Альтернативным методом для анализа оптических характеристик планарных волноводов может служить метод разложения по волноводным модам [154], модифицированный для решения задач электродинамики. Для его использования рассмотрим уравнение Гельмгольца:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} + \left[\frac{2\pi}{\lambda} n(x, y) \right]^2 E_z = 0 \quad (3.6)$$

Будем считать, что волновод состоит из конечного числа N областей с разным распределением показателя преломления по оси y . Пусть $j \in [0, N]$, где 0 – входной интерфейс, а N – выходной интерфейс, тогда обозначим $n(x, y) = n_j(y)$. Тогда для слоя номер j функцию $E_z^j(x, y)$ можно представить как:

$$E_z^{(j)}(x, y) = \sum_m \left\{ A_m^{(j)} \cdot e^{ik_m^{(j)}(x-x_j)} + B_m^{(j)} \cdot e^{-ik_m^{(j)}(x-x_j)} \right\} Y_m^{(j)}(y) \quad (3.7)$$

где m – номер моды, $A_m^{(j)}$ и $B_m^{(j)}$ – амплитуды прямой (слева направо) и обратной волн m -й моды в слое номер j , $k_m^{(j)}$ – волновой вектор в слое номер j , $Y_m^{(j)}(y)$ – профиль волноводной моды в слое номер j , x_j – положение левой границы слоя.

Чтобы найти волноводные моды для каждого слоя и каждой длины волны, необходимо решить уравнение на собственные функции:

$$\frac{Y''}{Y} + \left[\frac{2\pi}{\lambda} \right]^2 (n^2(y) - \beta) = 0 \quad (3.8)$$

в таком случае волновой вектор для слоя можно записать как:

$$\left(k_m^{(j)} \right)^2 = \left[\frac{2\pi}{\lambda} \right]^2 \beta_m^{(j)} \quad (3.9)$$

Процедура решения уравнения (3.8) заключается в анализе каждого участка волновода по отдельности. При этом рассматривается матрица переноса в направлении, поперечном к распространению волны. То есть, от нижней границы волновода к верхней:

$$\begin{pmatrix} E^{up} \\ \frac{\partial E^{up}}{\partial y} \end{pmatrix} = D^y \begin{pmatrix} E^{down} \\ \frac{\partial E^{down}}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{11}^y & D_{12}^y \\ D_{21}^y & D_{22}^y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^{down} \\ \frac{\partial E^{down}}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Таким образом, уравнение для E^{up} может быть записано как:

$$E^{up} = D_{11}^y E^{down} + D_{12}^y \frac{\partial E^{down}}{\partial y} \quad (3.11)$$

Так как поле на обеих границах должно быть равно нулю, то и элемент D_{12}^y должен быть равен нулю. Таким образом, значение β находится из условия $D_{12}^y = 0$.

Если волновой вектор $k_m^{(j)}$, вычисляемый по формуле (3.9), имеет действительное значение, то мода с номером m распространяется в слое номер j , иначе затухает. Для численного нахождения мод двумерных оптических волноводов примем амплитуды из уравнения (3.7) равными: $A_m^{(1)} = A_m$, $A_m^{(N)} = t_m$, $B_m^{(N)} = 0$, $B_m^{(1)} = r_m$. Для матричной записи будем упускать индекс m , подразумевая A вектором столбцом, а элементы матриц – подматрицами (англ. submatrix). Таким образом пропускание системы может быть связано с падающей волной

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \text{ как:} \quad \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = S(1, j) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S(1, j)_{11} & S(1, j)_{12} \\ S(1, j)_{21} & S(1, j)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

где $S(1, j)$ – матрица рассеяния структуры между слоем 1 и слоем j включительно.

На границе слоев выполняется соотношение:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D^x(j)_{11} & D^x(j)_{12} \\ D^x(j)_{21} & D^x(j)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Таким образом, используя уравнения (3.12) и (3.13), можно написать выражения для следующего слоя:

$$\begin{cases} A_{j+1} = D^x(j)_{11}(S(1, j)_{11}A_1 + S(1, j)_{12}C \cdot D^x(j)_{21}S(1, j)_{11}A_1 + D^x(j)_{11}S(1, j)_{12}C \cdot B_{j+1} + \\ \quad + D^x(j)_{12}C \cdot B_{j+1} - D^x(j)_{12}C \cdot D^x(j)_{21}S(1, j)_{11}A_1 \\ B_{j+1} = D^x(j)_{12}(S(1, j)_{11}A_1 + S(1, j)_{12}B_j) + D^x(j)_{22}B_j \end{cases} \quad (3.14)$$

где $C(j) = (D^x(j)_{21}S(1, j)_{12} + D^x(j)_{22})^{-1}$. Исходя из этого, матричные элементы для следующего слоя можно записать как:

$$\begin{cases} S(1, j+1)_{11} = D^x(j)_{11}S(1, j)_{11} - (D^x(j)_{11}S(1, j)_{12} + D^x(j)_{12})C(j)D^x(j)_{21}S(1, j)_{11} \\ S(1, j+1)_{12} = (D^x(j)_{11}S(1, j)_{12} + D^x(j)_{12})C(j) \\ S(1, j+1)_{21} = S(1, j)_{21} - S(1, j)_{22}C(j)D^x(j)_{21}S(1, j)_{11} \\ S(1, j+1)_{22} = S(1, j)_{22}C(j) \end{cases} \quad (3.15)$$

Так как $S(1, 1) = I$, то, используя выражение (3.17), можно вычислить матрицу рассеяния для каждого слоя.

Для вычисления матриц переноса в направлении распространения можно воспользоваться условиями непрерывности поля и его амплитуды на границе:

$$E_z^{(j)}(x_{border}, y) = E_z^{(j+1)}(x_{border}, y) \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial E_z^{(j)}(x_{border}, y)}{\partial x} = \frac{\partial E_z^{(j+1)}(x_{border}, y)}{\partial x} \quad (3.17)$$

Этот же перенос через границу может быть описан в терминах матрицы переноса, используя уравнение (3.13), и вычислить матрицу D^x . Этот подход позволяет быстро, по сравнению с методом аппроксимации конечными разностями, вычислить моды и пропускание системы. В тоже время, приведенный метод не описывает динамических свойств и характеристик оптической системы.

Конкретные расчёты выполнялись для структуры волновода, сформированного отражающими поверхностями и содержащего диэлектрическую вставку, как показано на Рисунке 3.2.

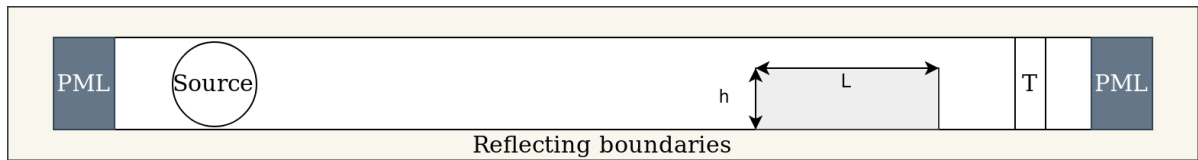


Рисунок 3.2: Схема рассчитываемой структуры двумерного волновода. PML – поглощающие граничные условия. Reflecting boundaries – границы с идеальным отражением. Source – источник осциллирующего электрического поля. h , L – размеры диэлектрической вставки. T – зона Фурье анализа

В связи с тем, что волна с низкой частотой не может распространяться в волноводе с малым поперечным размером, необходимо найти максимальную распространяющуюся длину волны. Для этого в волноводе с шириной 1 мкм, заполненном вакуумом, был проведен анализ потока энергии при помощи метода FDTD. Как можно видеть из Рисунка 3.3, частоты $1.5 \cdot 10^{14}$ Гц и выше поддерживают передачу энергии в направлении от источника поля, в то время как более длинные волны не дают стабильного потока энергии. Таким образом, частота отсечки (англ. cut off frequency) находится между $1.11 \cdot 10^{14}$ Гц и $1.5 \cdot 10^{14}$ Гц, что в вакууме соответствует длинам волн 2.7 мкм и 2.0 мкм.

Спектр пропускания структуры на Рисунке 3.2 был посчитан двумя методами: методом конечных разностей во временной области и методом разделения переменных, описанным выше. Спектры пропускания показаны на Рисунке 3.4.

Расхождение между спектральным положением резонанса Фано при длине вставки 1.14 мкм объясняется погрешностью расчетов по методу FDTD. При этом следует отметить,

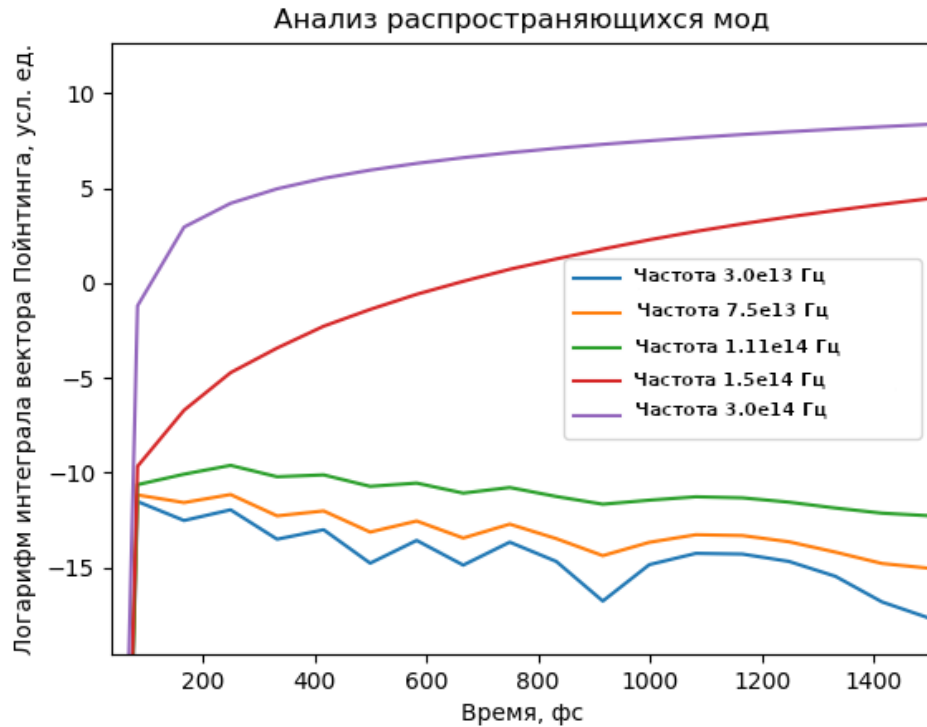


Рисунок 3.3: Поиск частоты отсечки в волноводе с отражающими стенками и шириной 1 мкм

что резонанс при вставке 1.14 мкм настолько узкий в спектральной области, что программный пакет МЕЕР [124] и скрипты визуализации данных, рассчитывающие форму пика (Рисунок 3.4), не смогли полноценно разрешить пик. В то же время, как видно из Рисунка 3.4, резонанс при длине вставки 1.16 мкм имеет ещё меньшую ширину. Что даёт основания полагать наличие связанного состояния в континууме (ССК) при близких параметрах. Пространство параметров системы может быть проанализировано градиентным методом для минимизации ширины резонанса Фано. Таким образом, спектральное положение ССК может быть найдено с любым заранее заданным уровнем точности.

Приведенные выше спектры пропускания посчитаны принципиально разными методами конечных разностей во временной области и разделения переменных и нахождения собственных мод в частотной области, но при этом показывают близкие положения резонансов. Исходя из этого, мы можем использовать метод аппроксимации конечных разностей во временной области для анализа подобных волноводов.

3.1.2 Анализ динамики образования резонансов Фано в двумерных структурах

Особый интерес представляют собой временные характеристики резонансов Фано. Был проведен ряд расчетов электромагнитных полей волновода, показанного на Рисунке 3.2, для

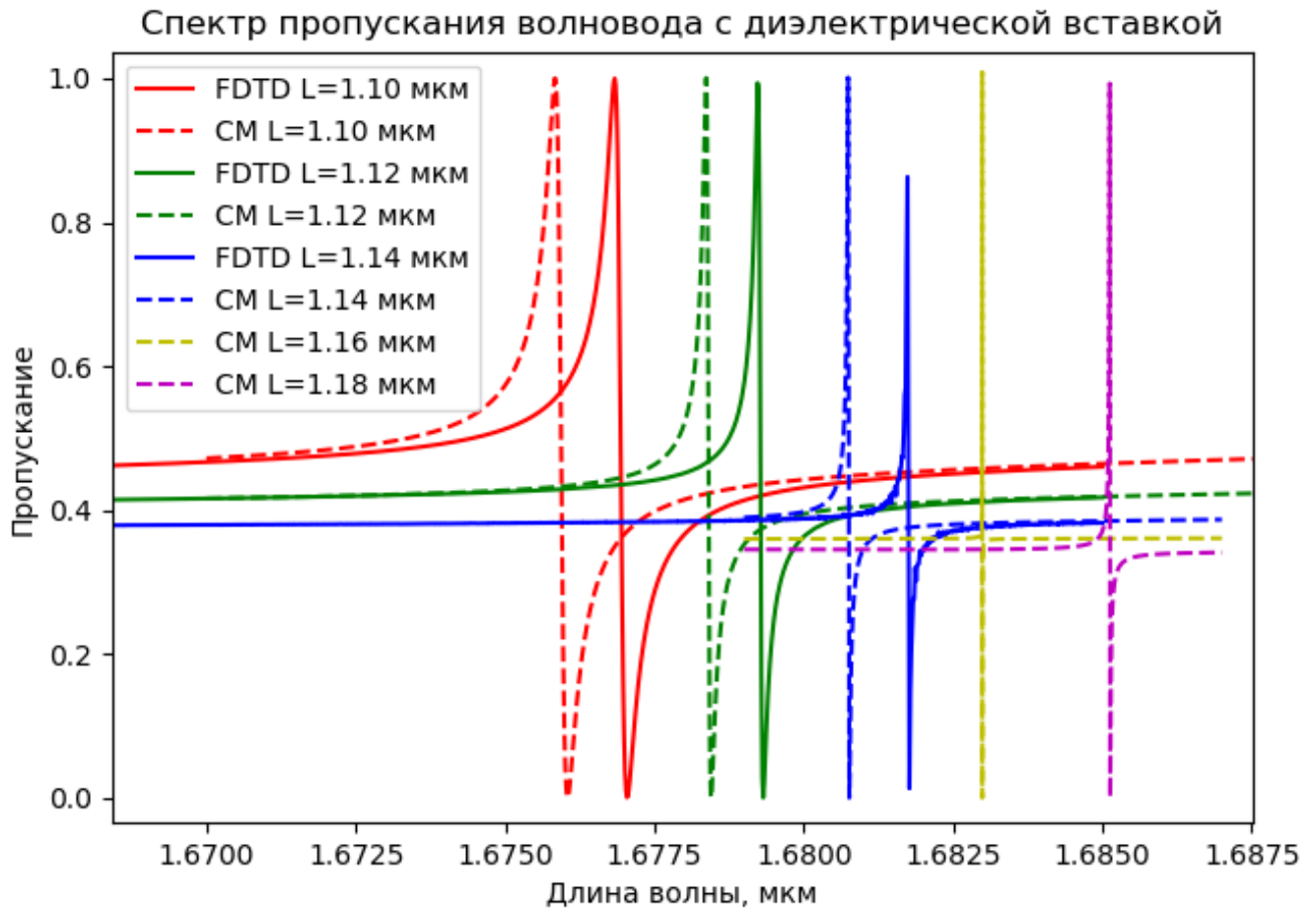


Рисунок 3.4: Спектры пропускания волновода с отражающими стенками и диэлектрической вставкой при разной длине вставки (1.10 мкм - 1.18 мкм). Результаты, показанные сплошными линиями, рассчитаны при помощи FDTD. Результаты, показанные прерывистыми линиями, рассчитаны методом разделения переменных и поиска волноводных мод.

различных частот падающего излучения. Длина диэлектрической вставки была выбрана за 1.10 мкм, так как при этой длине время накопления энергии в резонаторе достаточно мало для расчётов на используемом аппаратном обеспечении. Использование синусоидальных источников с различными частотами необходимо для понимания накопления энергии в резонаторе при разных длинах волн. В противном случае, из данных о значении накопленной энергии, полученных посредством интегрирования, невозможно выделить информацию о длинах волн.

Собранные данные о накоплении энергии были скомпилированы в трехмерный график, показанный на Рисунке 3.5. Ось X – время с момента начала моделирования, Y – длина волны в вакууме, Z – накопленная в резонаторе энергия. Как можно видеть на графике, энергия накапливается наиболее эффективно на длине волны резонанса, совпадающего с синей кривой на Рисунке 3.4А. При этом, на длинах волн в сильно отличных от резонансной длины волны значительного накопления энергии не происходит. Но даже на резонансной длине волны энергия выходит на стационарный уровень за время около 100 пс.

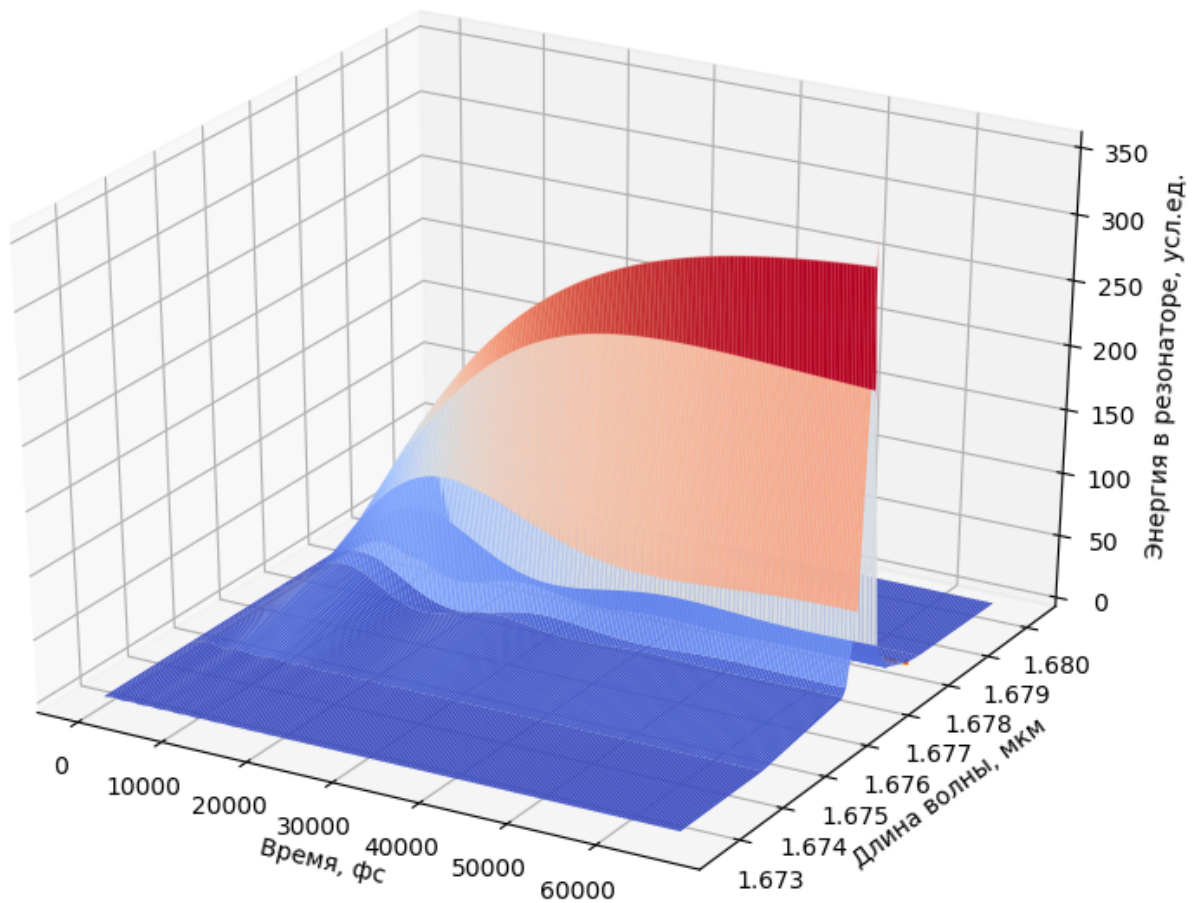


Рисунок 3.5: График накопления энергии в резонаторе длиной 1.10 мкм при различных длинах волн возбуждающего излучения.

Наибольший интерес представляют длины волн около резонансной. На данных длинах волн можно видеть осцилляции накопленной в диэлектрическом резонаторе энергии. К примеру, нормированный график накопления энергии для длины волны 1.678 мкм показан на Рисунке 3.6. Из временной зависимости можно видеть низкочастотные осцилляции с периодом около 9 пс, что соответствует миллиметровым волнам. Значение накопленной энергии начинается с нуля, достигает максимума на первом периоде и затухает до стационарного уровня за 7 периодов.

Для проверки измеримости данного эффекта был использован метод FDTD. При помощи которого была построена зависимость испускаемой из правого края волновода мощности от времени. Нормированная зависимость показана на Рисунке 3.7. Из графика выходной мощности можно видеть, что в первые 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.

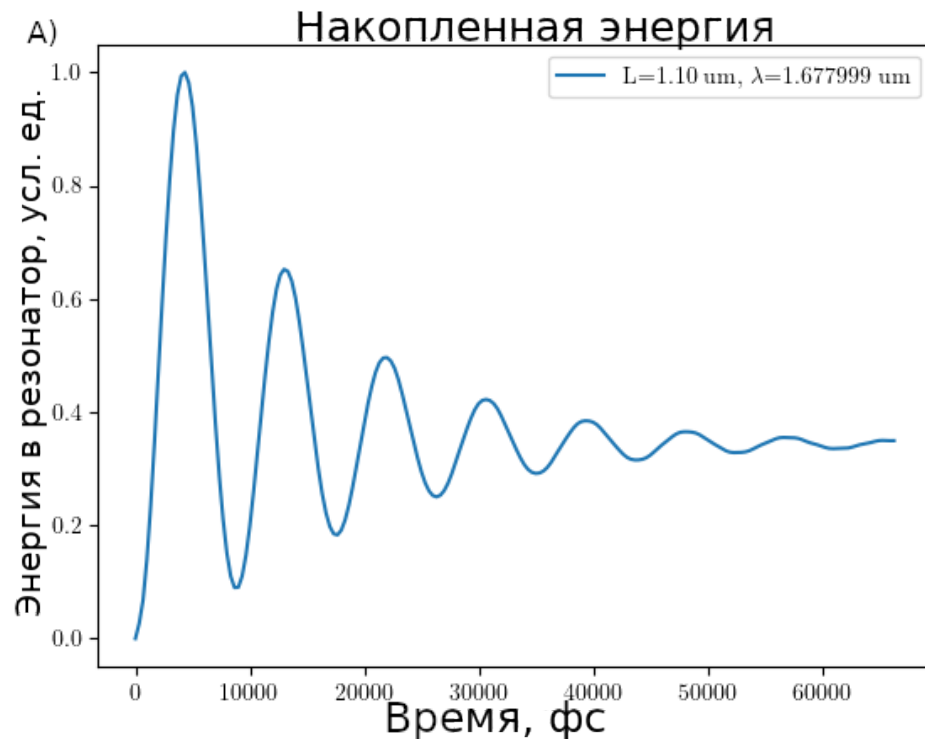


Рисунок 3.6: График накопления энергии в резонаторе длиной 1.10 мкм при длине волны 1.678 мкм. Энергия нормирована на максимальное наблюдаемое значение.

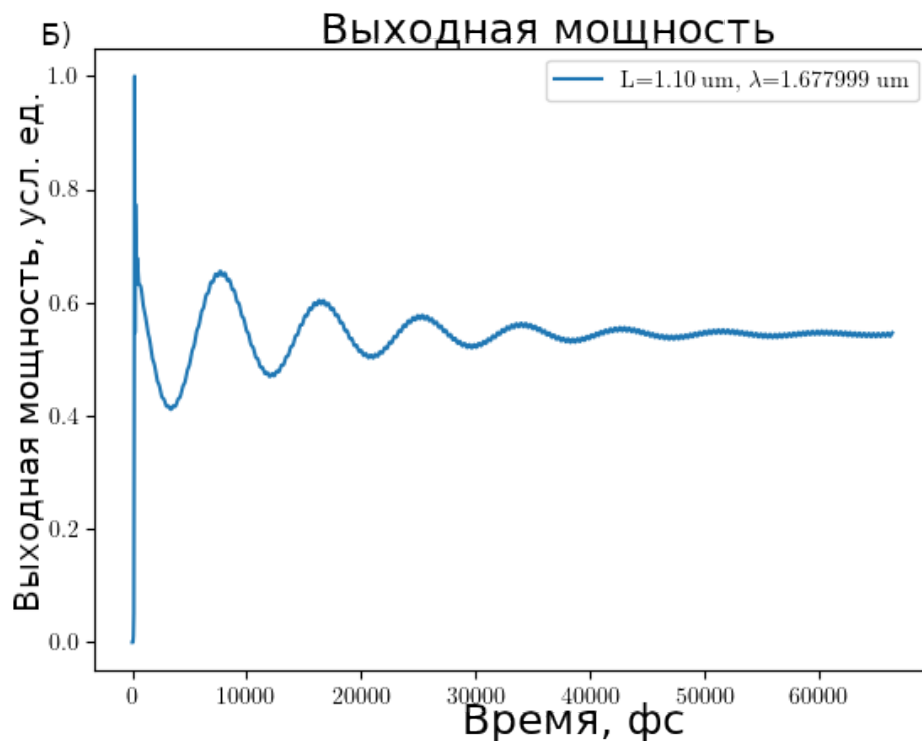


Рисунок 3.7: График выходной мощности из волновода с резонатором длиной 1.10 мкм при длине волны 1.678 мкм. Мощность нормирована на максимальное наблюдаемое значение.

Для теоретического анализа наблюдаемого эффекта была применена теория связанных мод. Во временной области основное уравнение теории [19] в одномодовом приближении,

может быть записано как:

$$\frac{\partial a(t)}{\partial t} = \left(i\omega_r - \frac{1}{\tau_0} - \frac{1}{\tau_c} \right) a(t) + \sqrt{\frac{1}{\tau_c}} s_{in}(t), \quad (3.18)$$

где $a(t)$ – комплексная амплитуда в резонаторе, ω_r – резонансная частота, ω – частота падающей волны, τ_0 , τ_c – характерные времена жизни состояния для данной длины волны, $s_{in}(t)$ – функция источника поля.

Если задать гармонический источник поля, включающийся в момент времени 0:

$$s_{in}(t) = s_{in,0} e^{i\omega t} \Theta(t) \quad (3.19)$$

где $\Theta(t)$ – функция Хэвисайда, то решение уравнения (3.18) может быть записано как:

$$|a(t)|^2 = s_{in,0}^2 \frac{\tau_c^{-1} \left[1 - 2e^{-t(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})} \cos[(\omega - \omega_r)t] + e^{-2t(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})} \right]}{(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})^2 + (\omega - \omega_r)^2}. \quad (3.20)$$

В результате $\cos[(\omega - \omega_r)t]$ обеспечивает низкочастотные осцилляции, а $e^{-t(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})}$ обеспечивает затухание низкочастотных осцилляций.

Таким образом низкочастотное излучение, генерируемое в представленной на Рисунке 3.2 структуре, объяснено как численно, так и аналитически.

3.2 Резонанс Фано в трехмерном волноводе, связанном с шарообразным резонатором

Для изучения спектральных и динамических характеристик резонансов Фано в отсутствии идеально отражающих границ была рассмотрена трёхмерная система, состоящая из диэлектрического волновода и диэлектрического шарообразного резонатора (Рисунок 3.8). В качестве материала для волновода и резонатора был выбран немагнитный диэлектрик с диэлектрической проницаемостью равной 12. Выбор данной системы обоснован тем, что моды шара являются простыми относительно менее тривиальных геометрий, а также имеется малое количество публикаций, описывающих данную структуру. Важным фактором при выборе данной геометрии системы является возможность создания взаимодействия резонаторов. В связи с относительно малым размером шарика возможен анализ систем, состоящих из нескольких взаимодействующих резонаторов. Трёхмерные геометрии дают множество вариантов взаимного расположения взаимодействующих резонаторов.

Основной задачей в данном разделе является описание спектра пропускания и динамики установления состояния системы ”резонатор-волновод”. Для решения данной задачи необходимо исследовать собственные моды резонатора и влияние волновода на моды резонатора, расчёт динамики образования локализованного состояния.

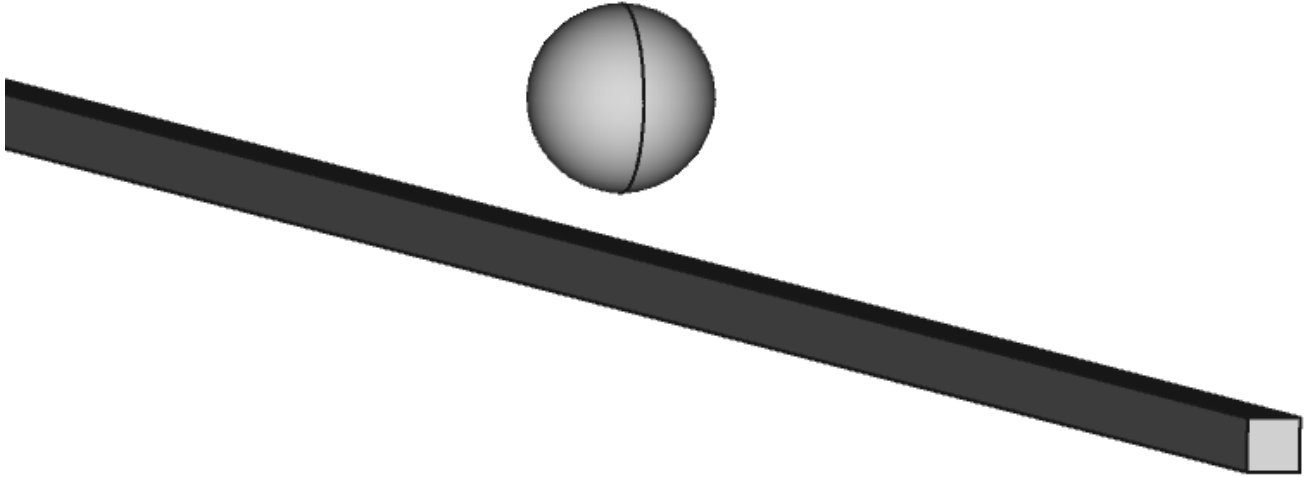


Рисунок 3.8: Трёхмерная модель рассматриваемой структуры, состоящей из диэлектрического волновода квадратного сечения и диэлектрического шарообразного резонатора

Так как резонанс Фано это результат взаимодействия локализованного состояния (моды резонатора) и волноводной моды, то одной из приоритетных задач разработки оптической системы можно считать определение частот мод резонатора, а также их добротности.

Нахождение мод резонатора осуществлялось при помощи программного пакета Harminv [155], суть работы которого заключается в разложении временного сигнала на гармонические моды. В данном случае использование метода разложения по Фурье не является оптимальным, так как метод Фурье хорошо работает для большого количества частот, но в случае малого количества мод не всегда может их четко выделить.

Альтернативой Фурье анализу является метод Уолла-Неухазера [156], который заключается в использовании корреляционной функции:

$$C(t) = (\Phi_0, e^{-it\hat{H}} \Phi_0) \quad (3.21)$$

где $C(t)$ – результат численного моделирования в виде одной из компонент поля, $\hat{H}$ – гамильтониан системы, Φ_0 – случайная функция изначального состояния системы, а круглые скобки обозначают симметричное скалярное произведение без комплексного или эрмитова сопряжения. Как показано в работе [155], задав относительно узкое частотное окно, можно определить амплитуды мод, зная только сигнал $C(t)$.

При FDTD расчётах использовались безразмерные величины. В данном случае за единицу длины принимается характерный размер системы, скорость света в вакууме ($\varepsilon = \mu = 1$) принимается за 1, единицей времени является время, необходимое электромагнитному излучению для прохождения единицы длины в вакууме, а единицей частоты является обратное значение единицы времени. Данный подход позволяет сократить количество умножений при каждом шаге вычислений распространения электромагнитных волн в вакууме, что приводит к увеличению скорости вычислений. Этот алгоритм применён в оригинальном программном пакете MEER [124] и сохранён в используемой в данном исследовании модифицированной версии программного пакета.

В результате исследования были получены следующие моды резонатора в присутствии протяженного волновода квадратного сечения:

Таблица 3.1: Моды шарообразного резонатора радиусом 0.35 единиц длины в присутствии протяженного волновода квадратного сечения с длиной стороны 0.2 единиц длины

Номер моды	Действительная часть частоты	Длина волны	Добротность	Амплитуда
1	0.89458	1.11784	701.23501	0.00322
2	0.89624	1.11577	515.40776	0.01218
3	0.89798	1.11361	312.48203	0.00397

Аналогичный расчёт был проведён для резонатора в отсутствие волновода. Из Таблицы 3.2 можно видеть, что в резонаторе отсутствует одно из значений энергии. Это говорит о расщеплении значений энергии, возникающем в резонаторе при взаимодействии с волноводом. Также отсутствие волновода увеличило добротность резонатора, что вызвано меньшими потерями и большей эффективной электромагнитной контрастностью между структурой и окружающим вакуумом.

Таблица 3.2: Моды шарообразного резонатора радиусом 0.35 единиц длины в вакууме

Номер моды	Действительная часть частоты	Длина волны	Добротность	Амплитуда
1	0.89450	1.11794	917.69747	0.00510
2	0.89678	1.11510	915.57734	$8.692 \cdot 10^{-4}$

Как показано в учебном пособии [157], в диэлектрическом микрорезонаторе, имеющем форму шара, при заданной поляризации для моды с кратностью l существует $2 \cdot l + 1$ вырожденных по частоте мод. В случае численных расчётов при использовании декартовой систе-

мы координат модель шара может отличаться от идеального шара. Подобные неоднородности приводят к снятию вырождения и появлению дополнительных собственных частот.

В нашем случае, как видно из Рисунка 3.9, $l = 3$. Таким образом значения индекса m лежат в диапазоне от -3 до $+3$, что предполагает 7-кратное вырождение. Однако, следует учитывать спин электромагнитной моды в резонаторах шепчущей галереи [158, 159]. Учет спина приводит к 14-кратному вырождению. В результате численного моделирования были обнаружены две различные частоты, что может быть объяснено снятием спинового вырождения. Так как, в отличие от работы [159], в данном моделировании не применялись гиротропные материалы, то снятие вырождения предположительно связано с отличием численной модели шара в декартовых координатах от идеала.

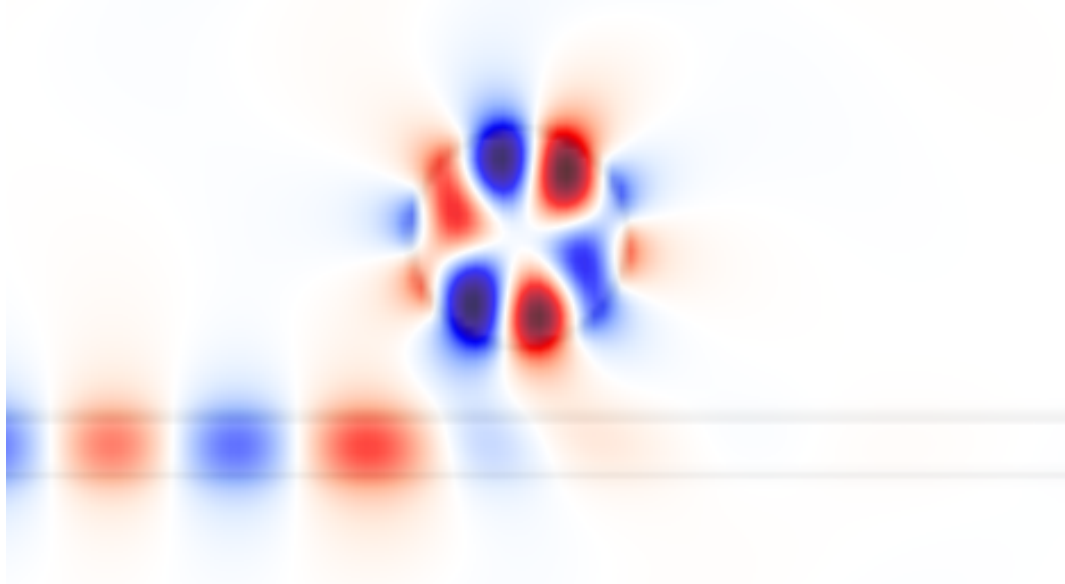


Рисунок 3.9: Распределение напряженности магнитного поля H_z в резонаторе вблизи точки минимума пропускания

Было проведено исследование оптических свойств системы резонатор-волновод в зависимости от расстояния между краем волновода и поверхностью резонатора. Так как нас интересуют свойства оптической системы на телекоммуникационной длине волны 1.55 мкм , то для попадания резонанса на эту длину волны воспользуемся свойством линейности системы и примем абстрактные единицы длины волны за 1.3915 мкм . Полученные характеристики антирезонансов пропускания представлены в Таблице 3.3. Как можно видеть из Рисунка 3.10,

при увеличении расстояния между резонатором и волноводом резонанс сужается и становится более глубоким. Однако, при достижении значения 0.2783 мкм, как можно видеть из Рисунка 3.11, резонанс продолжает сужаться, но его глубина уменьшается.

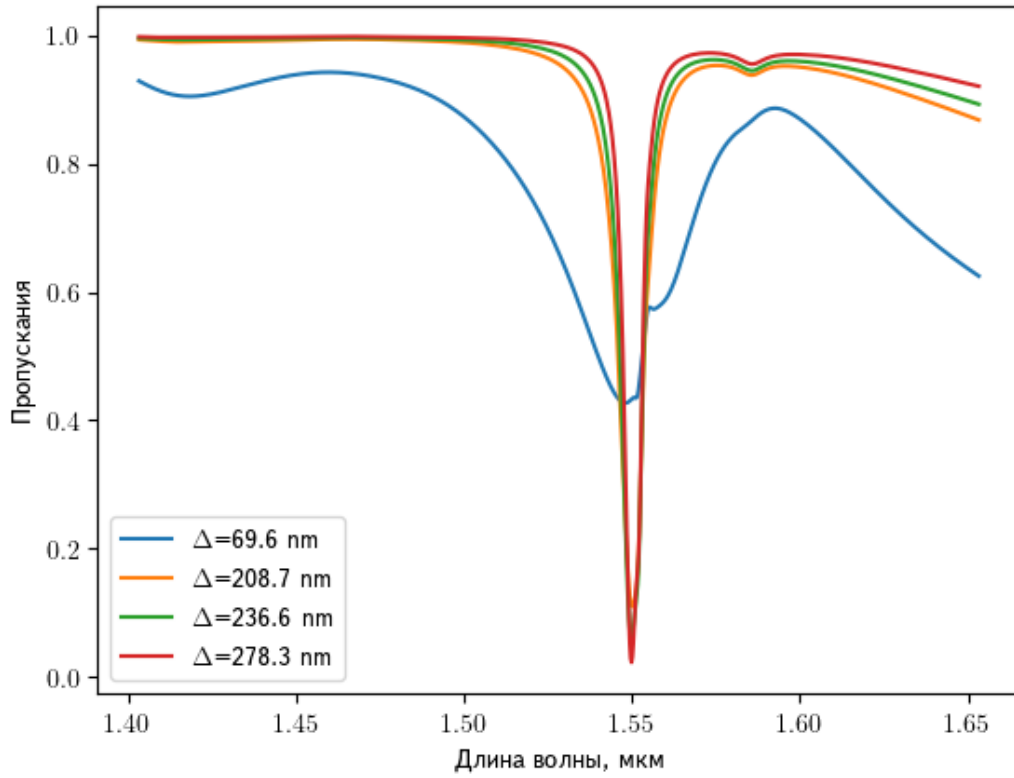


Рисунок 3.10: Вариация спектра пропускания системы волновод-резонатор в зависимости от расстояния между волноводом и резонатором до минимума пропускания.

Данный эффект частично согласуется со спектром пропускания в квантовомеханической модели Фано-Андерсона, схематически представленной на Рисунка 3.12. Как показано в работе [66], прозрачность волновода с ответвлением может описываться формулой:

$$T(E) = \frac{4\Gamma^2(E - E_0)^2}{4\Gamma^2(E - E_0)^2 + ((E - E_0)^2 - \tau^2)^2} \quad (3.22)$$

где E – энергия падающего электрона, Γ – энергия взаимодействия с контактами, τ – интеграл перескока в ответвление, E_0 – энергия локализованного состояния.

В квантовом случае при уменьшении интеграла перескока между волноводом и локализованным состоянием, что соответствует отдалению резонатора в электромагнитном волноводе, изменения спектра характеризуются уменьшением ширины антирезонанса. Данные спектры приведены на Рисунке 3.13. Как можно видеть из Рисунка 3.13, ширина антирезонансов уменьшается с уменьшением значения интеграла перескока, но во всех случаях глубина антирезо-

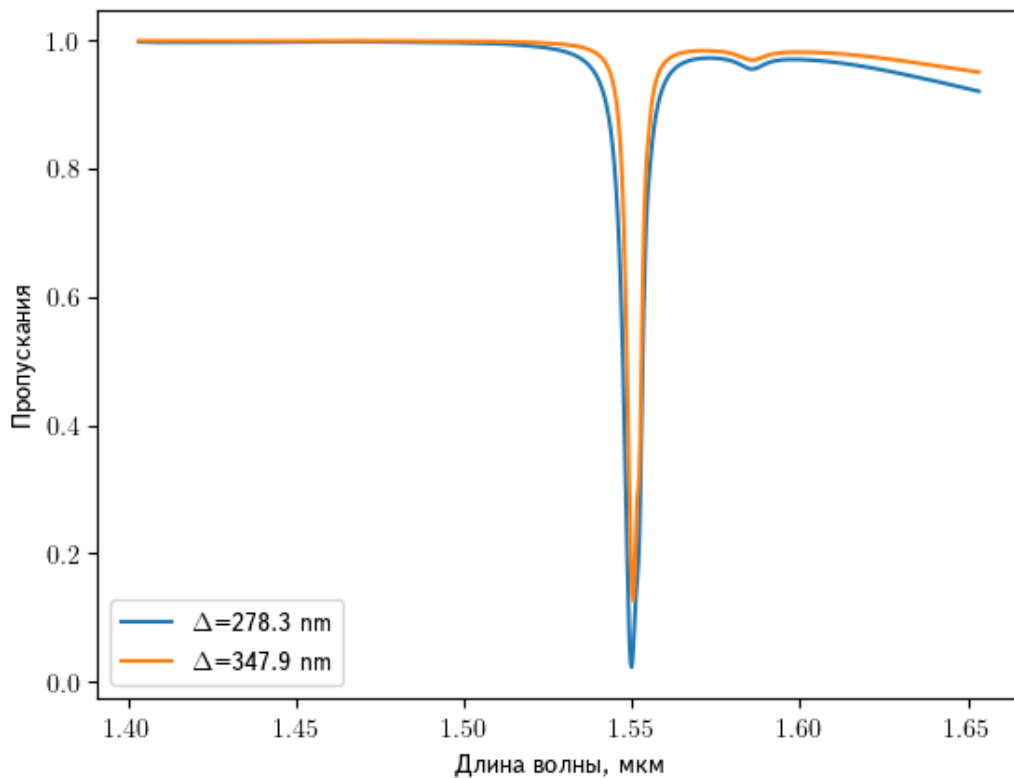


Рисунок 3.11: Вариация спектра пропускания системы волновод-резонатор в зависимости от расстояния между волноводом и резонатором после минимума пропускания.

нанса остаётся одинаковой. То есть, график всегда доходит до нулевой отметки пропускания. В случае же электромагнитного волновода минимальное значение пропускания в 4% достигается при расстоянии между волноводом прямоугольного сечения и резонатором в форме шарика, равном 0.2783 мкм. В прочих случаях минимум антирезонанса имеет значение большее, чем 4%. Это объясняется тем, что в квантовом случае отсутствуют потери. То есть интеграл квадрата модуля волновой функции электрона всегда нормируется на единицу. В электромагнитном случае существуют потери при обмене энергией между волноводом и локализованным состоянием.

3.2.1 Анализ времени формирования резонанса Фано

Рассмотрим систему, состоящую из волновода и резонатора. В данном случае форма резонатора не имеет принципиального значения. Динамика резонанса Фано в данной структуре может быть описана при помощи теории связанных мод (англ. coupled theory mode) [160]. Если обозначить амплитуду электромагнитного поля в резонаторе за $a(t)$, то, как показано в работе [161], при наличии затухания и притока энергии в систему, то данная амплитуда может

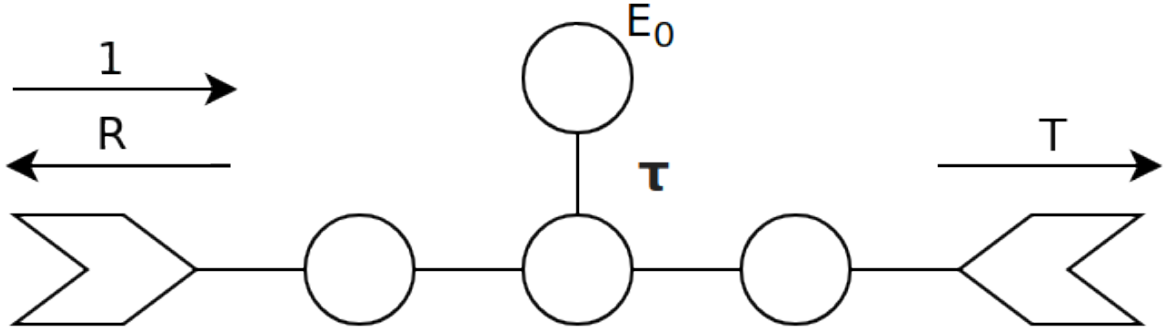


Рисунок 3.12: Квантовомеханический волновод модели Фано-Андерсона.

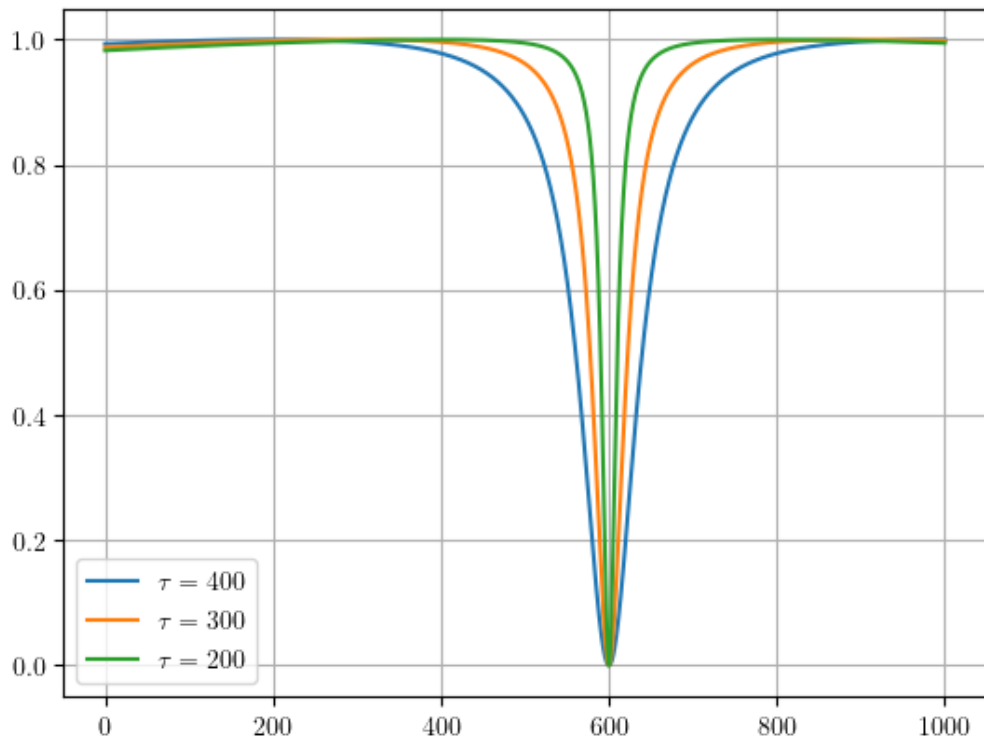


Рисунок 3.13: Вариация спектра квантовой системы.

быть записана как:

$$\frac{\partial a(t)}{\partial t} = \left(i\omega_r - \frac{1}{\tau_0} - \frac{1}{\tau_c} \right) a(t) + \sqrt{\frac{2}{\tau_c}} s_{in}(t), \quad (3.23)$$

где ω_r – собственная частота резонатора, τ_0 – время затухания резонансной моды в резонаторе, τ_c – характерное время образования эванесцентной связи между волноводом и резонатором и $s_{in}(t)$ – амплитуда падающей извне волны. В таком случае амплитуда исходящей из системы волны $s_{out}(t)$ может быть записана как:

$$s_{out}(t) = s_{in}(t) - \sqrt{\frac{2}{\tau_c}} a(t). \quad (3.24)$$

Таблица 3.3: Временные характеристики пропускания

Расстояние до резонатора, нм	Начальное пропускание	Минимум пропускания	Пропускание в стационарном режиме	Длительность, фс
13.9	0.54	0.06	0.43	23
69.6	0.64	0.03	0.42	26
139.2	0.79	0.02	0.27	58
208.8	0.91	0.01	0.09	101
236.6	0.94	0.02	0.04	124
278.4	0.97	0.02	0.02	179
348.0	0.99	0.18	0.18	347

В случае стационарного режима амплитуда падающей извне электромагнитной волны, имеющей частоту ω , может быть записана как:

$$s_{in}(t) = s_{in}e^{i\omega t} \quad (3.25)$$

Из уравнений (3.23-3.24) можно вывести коэффициент пропускания:

$$T_1(\omega) = \frac{|s_{out}|^2}{|s_{in}|^2} = \frac{P_1^2(\omega)}{P_1^2(\omega) + Q_1^2(\omega)} \quad (3.26)$$

где

$$P_1(\omega) = \sqrt{(\tau_0 - \tau_c)^2 + \tau_0^2 \tau_c^2 (\omega - \omega_r)^2} \quad (3.27)$$

$$Q_1(\omega) = 4\tau_0\tau_c \quad (3.28)$$

Здесь нижний индекс 1 обозначает, что рассматриваемая система содержит только 1 резонатор. Минимум пропускания возникает при циклической частоте электромагнитного излучения $\omega = \omega_r$ и составляет:

$$T_1^{min} = \left(\frac{\tau_0 - \tau_c}{\tau_0 + \tau_c} \right)^2 \quad (3.29)$$

Значение T_1^{min} становится равным нулю при $\tau_0 = \tau_c$.

Предположим, что падающая электромагнитная волна, настроенная на собственную частоту резонатора, достигает резонатора в момент $t = 0$, то можно принять её амплитуду за:

$$s_{in}(t) = s_{in}e^{i\omega_r t}\theta(t) \quad (3.30)$$

где $\theta(t)$ – функция Хэвисайда. В связи тем, что функция Хэвисайда меняется только в нуле, то в пределе $t \rightarrow \infty$ доля энергии падающей электромагнитной волны, прошедшей через

волновод будет стремиться к T_1^{min} . Однако, в начальный момент доля проходящей энергии будет отличаться от T_1^{min} в связи с тем, что амплитуда резонатора a ещё не достигла значения стационарного режима. В таком случае уравнения (3.23-3.24) могут быть решены с учётом очевидного начального условия $a(0) = 0$, временная зависимость коэффициента пропускания электромагнитной волны на собственной частоте резонатора может быть записана как:

$$T_1(t > 0) = \frac{|s_{out}(t)|^2}{|s_{in}(t)|^2} = \left[\frac{\tau_0 - \tau_c}{\tau_0 + \tau_c} - \frac{2\tau_0}{\tau_0 + \tau_c} e^{-Wt} \right]^2, \quad (3.31)$$

где полуширина на полуминимуме стационарного режима антирезонанса (3.26) принимает вид:

$$W = \frac{\tau_0 + \tau_c}{\tau_0 \tau_c} \quad (3.32)$$

Как можно видеть из данной формулы, коэффициент пропускания резко падает с единичного пропускания до T_1^{min} . Время, необходимое для падения $T(t)$ до $\frac{1}{2}$ может быть описано формулой:

$$\Delta t_1 = \frac{1}{W} \log \left[\frac{4(W\tau_0 - 1)}{(2 + \sqrt{2})W\tau_0 - 4} \right]. \quad (3.33)$$

Переменная Δt_1 явно показывает длительность импульса пропускания и асимптотически затухает, в то время как, значение $\Delta t_1 \sim W^{-1}$ возрастает по мере возрастания ширины антирезонанса. Таким образом для достижения короткого импульса необходимо использовать большое значение полуширины W , которое требует малых значений τ_c . С другой стороны, τ_c не может быть бесконечно малым, так как τ_c и τ_0 должны быть согласованы ($\tau_c \approx \tau_0$), чтобы улучшить глубину модуляции импульса $T_1^{min} \approx 0$. В идеальном случае $\tau_c = \tau_0$ эффективная длительность импульса Δt_1^{ideal} описывается выражением:

$$\Delta t_1^{ideal} = \tau_0 \frac{\log 2}{4} \approx 0.17329\tau_0 \quad (3.34)$$

Более подходящим методом увеличения ширины антирезонанса является использование нескольких резонаторов и явления взаимодействия резонаторов [66]. В данном случае характерное время взаимодействия каждого из резонаторов с волноводом может быть подстроено под оптимальное значение ($\tau_c = \tau_0$), в то же время ширина антирезонанса всей системы в целом будет увеличиваться за счёт количества резонаторов. К примеру, для оценки динамики амплитуд электромагнитных волн в системе из волновода и двух резонаторов можно восполь-

зоваться уравнениями связанных мод:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial a_1(t)}{\partial t} &= \left(i\omega_r - \frac{1}{\tau_0} - \frac{1}{\tau_c} \right) a_1(t) + \sqrt{\frac{2}{\tau_c}} s_{in}(t), \\
 \frac{\partial a_2(t)}{\partial t} &= \left(i\omega_r - \frac{1}{\tau_0} - \frac{1}{\tau_c} \right) a_2(t) + \sqrt{\frac{2}{\tau_c}} s_1(t), \\
 s_1(t) &= s_{in}(t) - \sqrt{\frac{2}{\tau_c}} a_1(t), \\
 s_{out}(t) &= s_1(t) - \sqrt{\frac{2}{\tau_c}} a_2(t).
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

где первое и второе уравнения описывают взаимодействие первого и второго резонаторов с волноводом и окружающим вакуумом, а третье и четвертое уравнения описывают входящую (s_{in}), исходящую (s_{out}) и промежуточную (s_1) волны в волноводе. Для корректности уравнений (3.35) требуется, чтобы резонаторы были расположены достаточно близко друг к другу, таким образом время прохождения электромагнитного излучения между резонаторами должно быть сравнимо с $\tau_{0,c}$. Решая систему уравнений (3.35) с учётом начального условия $a_i(0) = 0$ и резкого фронта падающей волны $s_{in}(t) = s_{in} e^{i\omega_r t} \theta(t)$, можно оценить динамику коэффициента прохождения по формуле:

$$T_2(t > 0) = \left[\left(\frac{\tau_0 - \tau_c}{\tau_0 + \tau_c} \right)^2 - \frac{4(W\tau_0 - 1)[Wt(W\tau_0 - 1) - 1]}{W^2\tau_0^2} e^{-Wt} \right]^2 \tag{3.36}$$

Нижний индекс 2 означает наличие двух резонаторов в системе. В данном уравнении W обозначает полуширину антирезонанса в системе с одним резонатором. Время, необходимое для снижения доли пропускания до значения $\frac{1}{2}$ в случае настроенной конфигурации ($\tau_c = \tau_0$), можно оценить как $\Delta t_2 \approx 0.082784\tau_0$, что примерно в два раза меньше, чем Δt_1 – в случае системы с одним резонатором.

Аналогичный подход для системы из волновода и трёх резонаторов показывает, что характерное время пропускания начального импульса может быть оценено как $\Delta t_3 \approx 0.054388\tau_0 < \Delta t_2 < \Delta t_1$ для $\tau_c = \tau_0$. Таким образом, увеличивая количество резонаторов, то есть усиливая и увеличивая частотную ширину стационарного антирезонанса системы, вызванного взаимодействием резонаторов [66], возможно достижение более коротких времён установления антирезонансов Фано без нарушения согласования между характерным временем взаимодействия резонатора с волноводом и временем затухания моды в резонаторе. Параметр времени затухания задает глубину стационарного антирезонанса пропускания и таким образом обеспечивает контраст между пропускаемым импульсом и остаточным шумом.

Для проверки аналитических результатов было проведено численное моделирование распространения электромагнитных волн в волноводах с резонаторами Фано. Для численного моделирования был применён метод аппроксимации конечными разностями с использованием вычислений на графическом процессоре общего назначения, что позволило значительно сократить необходимое время для расчёта трёхмерных структур.

Первый этап исследования заключается в определении времени прохождения электромагнитной волной рассматриваемого волновода без резонатора. Это необходимо для определения момента начала отсчёта накопления энергии. Для проведения данного этапа был использован метод вычисления энергии в заданном объёме. Рассматриваемый объём находится в конце волновода и представляет собой прямоугольный параллелепипед, две стороны которого равны размеру расчётной области, а третья сторона, расположенная вдоль продольной оси волновода, имеет длину, сравнимую с полуволной. Энергия в объёме параллелепипеда вычисляется посредством численного интегрирования суммы энергий электрического и магнитного полей по объёму параллелепипеда. Значение энергии электромагнитного поля в параллелепипеде выводилось каждые 4.63 фс на всём протяжении расчёта. Результат расчёта энергии электромагнитных полей в прямоугольном параллелепипеде представлен на Рисунке 3.14.

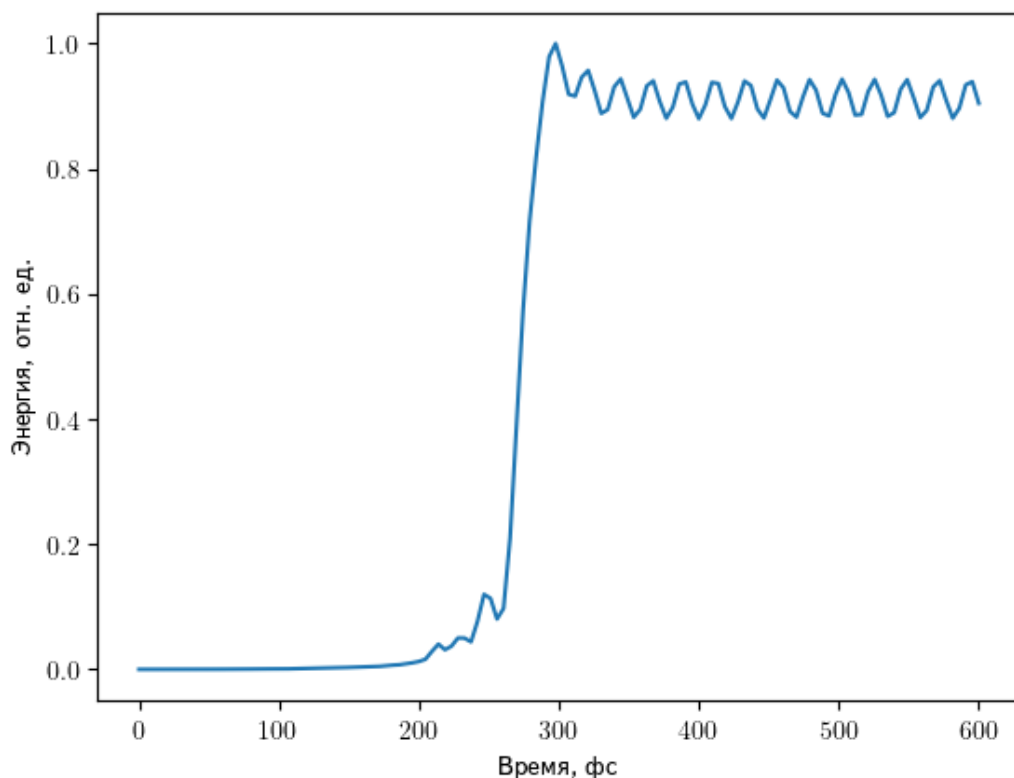


Рисунок 3.14: Энергия в конце волновода без резонатора в зависимости от времени при длине волны 1.55 мкм по результатам расчёта по методу аппроксимации конечными разностями.

Из представленного графика очевидно, что электромагнитная волна доходит до расчётной области в момент 255 фс. Небольшое увеличение энергии поля в конце волновода в моменты 200-255 фс объясняется приходом излучения через вакуум вне области диэлектрического волновода. Данный эффект нивелируется с увеличением длины расчётной области, которая ограничена вычислительными ресурсами лаборатории. Кроме того, синусоидальная форма графика в моменты после 255 фс объясняется малым размером прямоугольного параллелепипеда, в объёме которого проводился расчёт энергии поля. Данное обстоятельство не мешает определению времени прихода электромагнитного излучения через диэлектрический волновод.

Проверка выражений (3.31, 3.36) и установление констант τ_0 и τ_c проводились при помощи фитирования формулы (3.31) на данные численного моделирования прохождения электромагнитной волны, соответствующей минимуму пропускания. Полученные значения характерных времён: $\tau_0 = 1293$ фс, $\tau_c = 1798$ фс. Данные значения были подставлены в формулу (3.36) для проверки соответствия в случае наличия двух резонаторов в системе, расположенных по одну сторону от волновода на расстоянии более 1 длины волны друг от друга. Результаты численного моделирования и аналитические решения с полученными константами представлены на Рисунке 3.15. Для учёта влияния первичного ухода энергии в резонаторы в случае наличия двух резонаторов в системе, аналитическое решение для этого случая было перенормировано с единичного пропускания в нулевой момент на максимальное пропускание численного результата. Из Рисунка 3.15 можно видеть хорошее соответствие данных численного моделирования и аналитических решений. С учетом того, что константы τ_0 и τ_c были получены только для случая одного резонатора, из этого можно сделать вывод о корректности представленных аналитических решений.

Для проверки возможности временной компрессии затухающих сигналов при помощи волноводов со шарообразными резонаторами было проведено численное моделирование распространения волны с линейно затухающей амплитудой. Амплитуда синусоидальной волны с длиной волны 1.55 мкм затухала до 0 за 465 фс. На Рисунке 3.16 представлены временные зависимости энергии в конце волновода для случаев волновода без резонаторов, с 1 резонатором и 2 резонаторами. Из характера затухания видно, что в случае наличия резонаторов в системе, характеристика затухания становится значительно более резкой. Данный эффект можно использовать для временной компрессии сигналов.

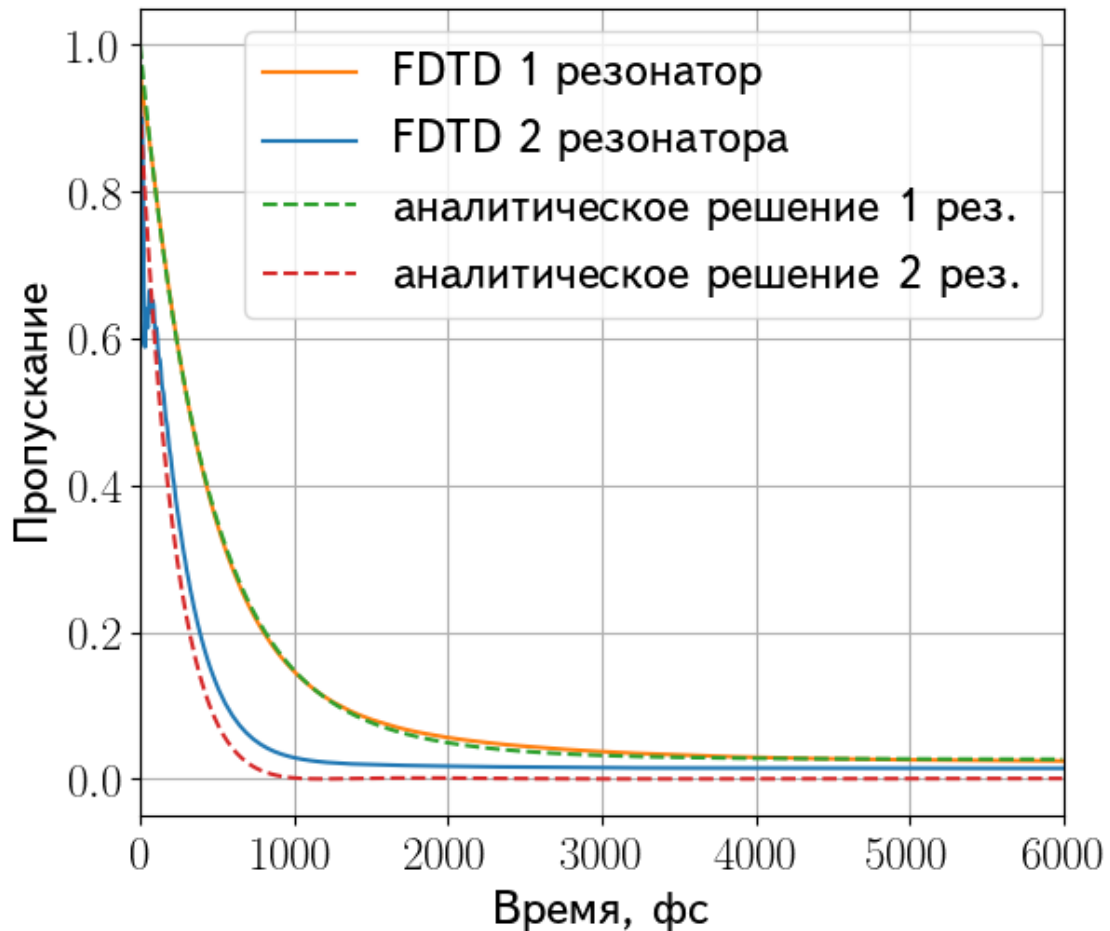


Рисунок 3.15: Пропускание на длине волны резонанса в зависимости от времени за вычетом времени прохождения волной волновода для структур с 1 резонатором и 2 резонаторами.

3.2.2 Реализация квази-связанного состояния в континууме в фотонном волноводе

Связанное состояние в континууме (ССК, англ. Bound State in Continuum) [68] это состояние, имеющее частоту, попадающую в континуум распространяющихся в системе мод, но тем не менее пространственно ограниченное таким образом, что электромагнитное поле остаётся локализованным и не переходит в волновод. Впервые существование данных состояний было предсказано для квантовомеханических систем в 1929 году [70] в модели со специального вида осциллирующим потенциалом, который, по-видимому, так и не был реализован на практике. Однако, данный эффект является принципиально волновым и по своей сути не ограничивается квантовой механикой. На данный момент эффект связанного состояния в континууме предсказан для электромагнитных волн, акустических волн в газах, волн в жидкостях и в твёрдых телах. Структуры и материалы, которые были рассмотрены в исследованиях дру-

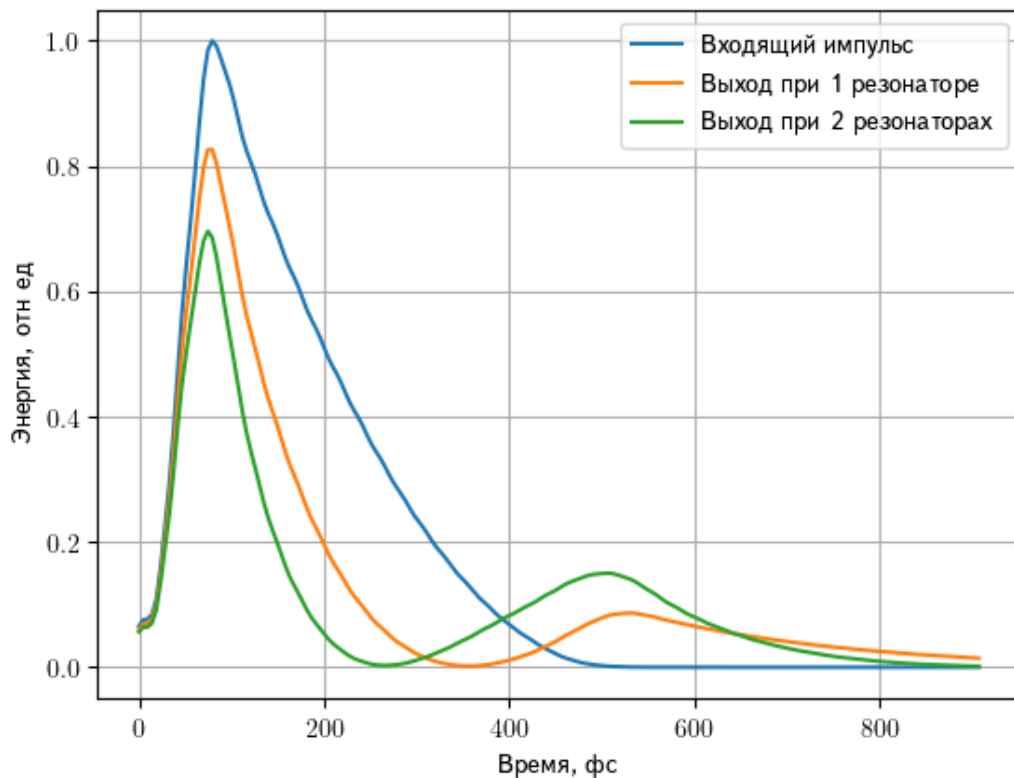


Рисунок 3.16: Временные характеристики пропускания волноводов с 1 и 2 шарообразными резонаторами в случае затухающего сигнала.

гих авторов включают в себя диэлектрические фотонные кристаллы, пьезоэлектрики, массивы параллельных электромагнитных волноводов [162], графен [163], топологически нетривиальные материалы [95]. Области применения ССК включают в себя лазеры [164], фильтры [165] и сенсоры [166].

Для анализа связанного состояния в континууме в первую очередь необходимо убедиться, что связанное состояние имеет частоту, попадающую в спектр пропускания волновода. В противном случае это просто отдельная локализованная система. Вторым критерием связанного состояния в континууме, который отличает ССК от обычного резонанса, является отсутствие исходящей энергии из области локализации. Данный критерий может быть реализован для теоретической системы как тривиальными методами, например, изоляцией резонатора идеальным отражающим материалом или потенциалом, так и нетривиальными методами – за счёт различных вариантов интерференции.

Наличие идеального связанного состояния в континууме невозможно в трёхмерной фотонной системе [167]. Одним из ранних условий, ограничивающих наличие ССК в фотонной системе, является ограничение размерности системы. Большинство систем, имеющих нетривиальные связанные состояния в континууме, являются или одномерными или двумерными,

то есть имеют как минимум одно измерение, в котором они вытянуты в бесконечность. Формальный анализ данного ограничения был проведён в работе [167]. Для примера рассмотрим компактный шарообразный резонатор, описываемый диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(r)$ и радиусом R , в вакууме. Положим, что вне резонатора $\varepsilon(r) = \mu(r) = 1$. Таким образом функции распределения напряженностей электрического (E) и магнитного (H) полей будут являться решениями уравнения Гельмгольца и могут быть описаны сферическими функциями Ханкеля с волновым числом $k = \omega/c$. Так как связанное состояние по определению не излучает электромагнитную энергию в виде распространяющихся в бесконечность волн, то каждый член разложения функций напряженностей электрического и магнитного полей имеет нулевой вектор Пойнтинга. Таким образом, напряженности электрического и магнитного полей должны быть равны нулю снаружи, и, как следствие, и внутри резонатора.

Однако, в трёхмерных системах возможна реализация механизмов снижения излучения энергии локализованного состояния. Эти механизмы в других системах приводят к формированию связанного состояния в континууме, но в трёхмерных системах они создают квазисвязанное состояние в континууме. К таким механизмам относятся использование симметрии состояний [168], динамическое изменение параметров резонатора [169] или параметров перегиба [170], а также динамическое изменение потенциала в заданной области [70].

В данном исследовании рассмотрена трёхмерная система, состоящая из диэлектрического волновода квадратного сечения и двух шарообразных резонаторов, находящихся на противоположных сторонах от волновода и смещённые относительно волновода по оси Z . Диэлектрический профиль рассматриваемой системы имеет зеркальную симметрию относительно плоскости XY в центре волновода.

В качестве механизма образования квазисвязанного состояния в континууме распространяющихся частот был выбран механизм манипуляции симметрии состояний. Его физический смысл в данной системе заключается в том, что волновод имеет достаточно малые размеры по осям Y и Z , 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 диэлектрическом волноводе квадратного сечения. Состояния, которые возбуждают нераспространяющуюся вторую 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 ис-

точников поля внутри резонаторов при моделировании по методу аппроксимации конечными разностями.

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 квадратного сечения, расположенном между резонаторами, возникает мода нулевого порядка, распространяющаяся в данном волноводе. Распределение напряженности магнитного поля для данного случая показано на Рисунке 3.17. Как можно видеть из Рисунка 3.17, электромагнитное поле образует в диэлектрическом волноводе распространяющуюся моду нулевого порядка, 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.



Рисунок 3.17: Состояние, возбуждённое одинаковыми источниками в резонаторах

Во втором случае, возбуждение локализованных состояний в шарообразных диэлектрических резонаторах, также расположенных симметрично относительно диэлектрического волновода, производилось при помощи источников, расположенных в центрах резонаторов и имеющих временные зависимости, отличающиеся множителем -1 . Такая конфигурация локализованного в двух шарообразных резонаторах состояния в широких волноводах приводит к возбуждению моды первого порядка. Однако, в данном волноводе мода первого порядка не может распространяться в силу малых поперечных размеров квадратного сечения волновода. Распределение напряженности магнитного поля в данном случае показано на Рисунке 3.18. Из Рисунка 3.18 можно видеть, что поле локализовано в шарообразных резонаторах и не распространяется в диэлектрическом волноводе.

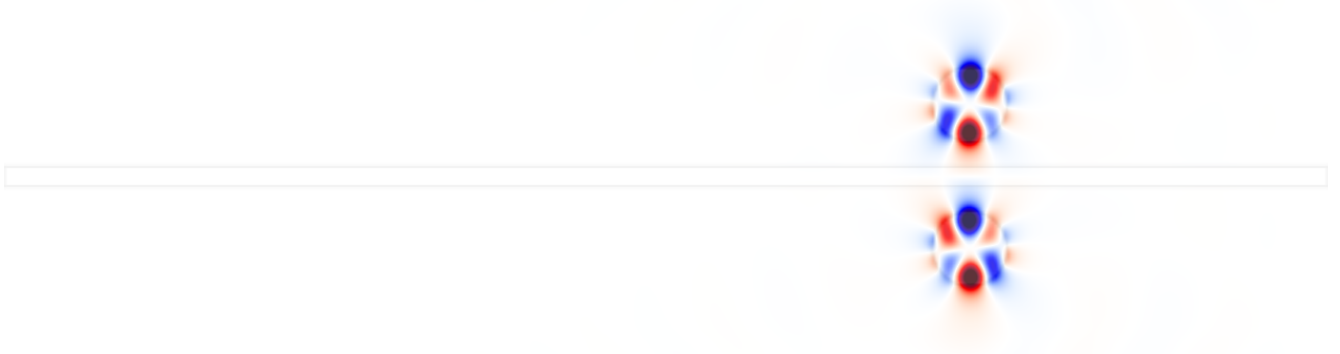


Рисунок 3.18: Состояние, возбуждённое источниками в противофазе в резонаторах

Определение добротности в обоих случаях проводилось при помощи возбуждения поля гауссовым импульсом и анализа затухания по методу Уолла-Неухазера [156], который используется для нахождения собственных частот резонаторов. В первом, контрольном, случае идентичных источников поля, собственная частота равняется 0.899 единицы частоты при значении единицы длины 1.392 мкм. Таким образом длина волны излучения равна $\frac{1}{0.899} \cdot 1.392 = 1.548$ мкм. Во втором случае, который соответствует случаю антисимметричных источников, собственная частота равна 0.898, что соответствует длине волны излучения $\frac{1}{0.898} \cdot 1.392 = 1.550$ мкм и подходит под стандартную телекоммуникационную длину волны. Таким образом, принимая во внимание малое смещение собственной частоты, можно утверждать, что использование антисимметричных источников поля позволяет увеличить добротность в 3.6 раза без изменения диэлектрического профиля структуры.

Исходя из приведённого изменения добротности и распределений напряженности магнитных полей можно сделать вывод о состоятельности модели квази-связанного состояния в континууме распространяющихся частот в системе из диэлектрического волновода и двух шарообразных диэлектрических резонаторов. В данном случае использовался симметричный механизм образования квази-связанного состояния в континууме, приводящий к значительному изменению характера взаимодействия резонаторов с волноводом.

3.3 Выводы по главе

1. В планарном волноводe с металлическими границами и диэлектрической вставкой при включении внешнего оптического сигнала с частотой, близкой к частоте резонанса Фано, возникают затухающие низкочастотные колебания с частотой, равной разности частот сигнала и собственной частоты резонатора.

2. В волноводных структурах, состоящих из диэлектрического волновода квадратного сечения и шарообразного резонатора, возможно формирование резонанса Фано. Спектр пропускания данных структур зависит от расстояния между волноводом и резонатором. При отдалении волновода от резонатора спектр антирезонанса пропускания сужается и глубина модуляции увеличивается до 4% пропускания в минимуме при оптимальном расстоянии между волноводом и резонатором. Дальнейшее увеличение расстояния между волноводом и резонатором приводит к сужению ширины антирезонанса и увеличению пропускания в минимуме.
3. Спектр пропускания волноводной структуры, состоящей из диэлектрического волновода квадратного сечения и шарообразного резонатора, зависит от времени. В начальный момент времени, когда в резонаторе отсутствует сформированное резонансное состояние, пропускание в минимуме близко к единичному. Пропускание в минимуме снижается по мере формирования локализованного состояния в резонаторе. Характерная длительность процесса – сотни фемтосекунд. Управление характерным временем падения пропускания в минимуме антирезонанса возможно за счёт изменения количества шарообразных резонаторов, взаимодействующих с волноводом.
4. В диэлектрическом волноводе с двумя шарообразными резонаторами возможно формирование квази-связанного состояния в континууме распространяющихся частот за счёт использования антисимметрии локализованных в резонаторах состояний.

Глава 4. Разработка и оптимизация численных методов расчёта оптических характеристик фотонных структур

В данной главе описаны алгоритмы численного решения уравнений Максвелла и особенности реализации этих алгоритмов на языках C/C++. 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 МІТ. Автор данной диссертации считает, что академические расчёты должны быть максимально свободными и открытыми, насколько это выполнимо.

4.1 Метод конечных разностей во временной области

Алгоритм аппроксимации конечными разностями во временной области (англ. finite-difference time-domain, FDTD) представляет особый интерес в связи с её *ab-initio* природой – вычисления производятся из первичных принципов электродинамики. Данное направление начало активно развиваться в 1980-е годы в связи с необходимостью расчётов структур произвольной формы, плохо подходящих для аналитических методов, для решения задач малой заметности воздушных судов на радарх.

Развитие методики FDTD началось в 1960-е годы, когда в 1966 году Кейн И (Kane Yee) опубликовал первую работу [171] по методам численного решения уравнений Максвелла на пространственной сетке во временной области. Предложенная методика позволила считать частные производные в операторе ротора через конечные разности на двух периодических сетках в евклидовом пространстве. Сетки представляют собой две кубические решетки для электрического и магнитного полей соответственно, сдвинутые на полпериода как показано

на Рисунка 4.1. Условия численной стабильности алгоритма FDTD для синусоидальной волны

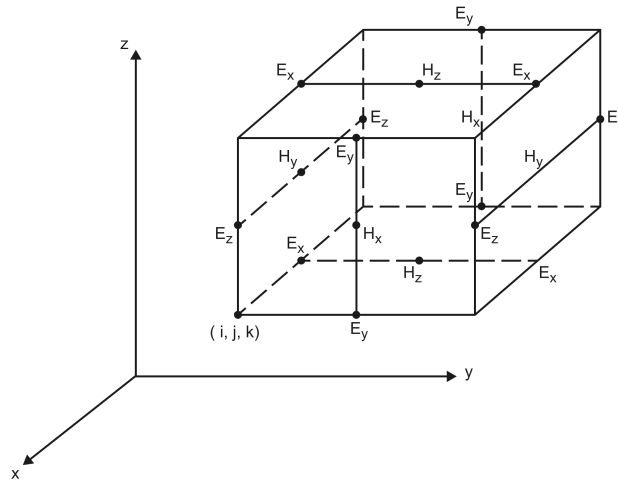


Рисунок 4.1: Расположение полей на решетке И [171].

в двумерной структуре были разработаны в 1975 году Тафловым и Бродвином [172], и в том же году расширены до трёхмерных структур теми же авторами [173]. Следующим важным шагом была разработка методов моделирования электромагнитных импульсов, что было сделано в конце 1970-х Кунзом [174] и Холландом [175].

Так как вычислительные возможности компьютеров ограничены, то для моделирования ухода волны в бесконечность необходимо создание абсорбирующих слоёв. Эти слои были разработаны в 1981 году [176]. А в 1994 году были созданы идеальные абсорбирующие слои, в англоязычной литературе называемые perfect match players (PML) [177, 178].

Одним из важнейших условий для моделирования реальных фотонных систем является возможность работы с нелинейными материалами, эти методы были разработаны в 1990-х годах [179, 180].

4.1.1 Модификация выделения памяти для параллелизации численного решения уравнений Максвелла

В связи с тем, что центральный процессор имеет на 2-3 порядка меньше вычислительных ядер, чем видеопроцессор, имеет смысл рассмотреть вариант использования видеопроцессоров для численного решения задач фотоники. Так как эти типы процессоров используют разные адресные пространства памяти, то правильная работа с оперативной памятью является одним из ключевых условий успешной параллелизации задачи на видеопроцессорах с

использованием интерфейса OpenCL. В данном разделе описано выделение памяти для основных объектов программного пакета МЕЕР: класса геометрии расчётной области, класса констант расчётной области и класса граничных условий.

Выделение памяти для описания геометрии расчётной области

В оригинальной версии программного продукта МЕЕР [124] для работы с геометрией расчётной области использовался класс *grid_volume*. Члены класса включают в себя переменные описывающие, координаты центра расчётной области, линейные размеры и дискретные размеры области. Для обхода расчётной области, то есть для проведения некоторой операции над всеми точками определенной компоненты поля в данной расчётной области авторы оригинальной версии МЕЕР использовали набор макросов, с тройным вложенным циклом для обхода индексов в трёхмерном пространстве. Так как память компьютера является одномерным адресным пространством, то для однозначного указания трёхмерных координат используется понятие шага (англ. *stride*) – величины сдвига при шаге в определённом направлении. То есть, с точки зрения алгоритма, трёхмерное пространство сводится к одномерному с набором шагов, на которые нужно отступать при смещении по определенной координате. Для обхода точек поля авторы оригинального пакета МЕЕР использовали макрос *LOOP_OVER_VOL_OWNED(gv, c, idx)*, где *gv* – объект класса *grid_volume*, *c* – компонента поля, *idx* – индекс точки для модификации.

К сожалению, особенности SIMD-архитектуры не позволяют использовать циклы, так как в каждом цикле есть ветвление, определяющее окончание или продолжение цикла. Однако, сведение тройного вложенного цикла к одинарному циклу по переменной *idx* позволяет записать все возможные значения *idx* в массив и сохранить в буфере оперативной памяти видеопроцессора.

В данной работе был применен подход записи всех возможных значений индекса *idx* для каждой компоненты поля *c* каждого участка расчётной области *gv*. С целью записи всех необходимых индексов была проведена модификация класса *grid_volume*. В частности в члены класса *grid_volume* был добавлен массив буферов *index_ocl*, имеющий количество элементов, равное количеству компонент электрического и магнитного полей. Таким образом, для каждой компоненты поля создаётся свой буфер *idx* индексов.

Кроме того, для записи значений индексов *idx* была произведена модификация конструктора *grid_volume::grid_volume*. Теперь при создании объекта класса *grid_volume* производится запуск макросов *FOR_COMPONENTS(fc)* и *LOOP_OVER_VOL_OWNED(*this, fc, idx)*, которые используются для обхода всех

возможных компонент поля f_c и всех возможных значений индекса idx соответственно. После обхода всех возможных значений индекса idx производится вычисление необходимого для их хранения объёма памяти, выделение данного объёма памяти с использованием функции *clCreateBuffer*, и запись значений всех возможных значений индекса idx в оперативную память видеопроцессора с использованием функции *clEnqueueWriteBuffer*. Изначально в данной работе использовалась только функция *clCreateBuffer* с параметром *CL_MEM_COPY_HOST_PTR*, что позволяло одной командой создать буфер в оперативной памяти видеопроцессора и записать в него значения. Однако, такой подход показал свою ненадёжность на больших структурах, где требуется записывать значительный объём информации. Таким образом было решено использовать функцию *clEnqueueWriteBuffer* и *clFinish*, что дало возможность приостановить программу на время записи всех возможных значений индекса idx в оперативную память видеопроцессора и таким образом увеличить надёжность программы.

В результате при работе с электрическими и магнитными полями используется буфер всех возможных значений индекса idx вместо последовательного перебора этих значений. Каждый из потоков берёт одно значение индекса idx , соответствующее точке пространства, и производит модификации с данной точкой. Это приводит к параллельному расчёту значений полей во множестве точек одновременно вместо изначального последовательного перебора.

Выделение памяти для описания вещества моделируемой структуры

Так как мало кто заинтересован в моделировании распространения электромагнитных волн в вакууме, то необходимо хранить информацию о диэлектрической и магнитной проницаемости каждой точки пространства. Кроме того, МЕЕР поддерживает работу с нетривиальными дисперсиями, к примеру, с моделью Друде. Таким образом, необходимо хранить информацию и о поляризациях в веществах. Сначала рассмотрим тривиальную ситуацию, когда дополнительные поляризации отсутствуют.

Для хранения информации о диэлектрической и магнитной проницаемости используется класс *structure_chunk*, который содержит данные о $1/\epsilon$ или $1/\mu$; о нелинейности первого порядка; о нелинейности второго порядка; инвертированную проводимость материала. Использование коэффициентов диэлектрической и магнитной проницаемости в обратном виде вызвано тем, что операция умножения занимает значительно меньшее время, чем операция деления. Так как в настоящем исследовании не используется выражение для проводимости в явном виде, то при модификации необходимо было создать только некоторые буферы со-

ответствующие значениям коэффициентов нелинейности $\chi_{1,2,3}$. Данные буферы создаются в конструкторе класса *structure_chunk*, там же происходит запись значений.

Другой подход используется для выделения памяти на данные, описывающие нетривиальные поляризации вещества. Так как программный пакет МЕЕР поддерживает несколько видов нетривиальных поляризаций, то каждый из видов поляризаций требует хранения специфической информации. Для этого в оригинальной версии программного пакета МЕЕР используются наследование классов и приведение типов данных. То есть, изначально существует базовый класс *susceptibility*, в котором заданы прототипы виртуальных функций для использования извне. Однако, сам по себе базовый класс не имеет возможности как-то влиять на электрические и магнитные поля. Непосредственные алгоритмы для манипуляции электрическими и магнитными полями прописаны в дочерних классах. То есть, когда извне вызывается любая функция нетривиальной поляризации для работы с полем, программа определяет, что это виртуальная функция базового класса и находит необходимую реализацию данной функции в дочернем классе. Таким образом, программный пакет МЕЕР поддерживает модели нетривиальных поляризаций с резонансами Лоренца, Друде и намагниченных плазм.

В связи с использованием множества дочерних классов, производных от базового класса *susceptibility*, необходим гибкий механизм хранения данных о нетривиальных поляризациях. Таким механизмом является приведение типа структуры данных. То есть, изначально все виртуальные функции принимают данные о поляризации как нулевой указатель на адрес в оперативной памяти центрального процессора (*void**). Однако, каждый из дочерних классов имеет свою структуру для хранения данных. Поэтому в начале каждой функции прописывается приведение типа данных. Таким образом тип нулевого указателя на адрес в оперативной памяти центрального процессора конвертируется в указатель на структуру данных в оперативной памяти центрального процессора. К примеру, в случае функции для инициализации данных о поляризации по модели Лоренца изначально функция принимает указатель *data* как *void**, а затем приводит к *d* типа (*lorentzian_data**).

Так как информация о поляризации хранится в специфических для каждого дочернего класса структурах, то и выделение памяти происходит в реализации виртуальных функций в рамках дочерних классов. В частности для нетривиальной поляризации по модели Лоренца выделение памяти для OpenCL буферов в оперативной памяти видеопроцессора происходит в реализации виртуальной функции *lorentzian_susceptibility :: init_internal_data*. Создаются следующие буферы:

- *P_ocl* – хранит данные о текущем значении поляризации. Имеет тип числа с плавающей точкой двойной точности.

- P_{prev_ocl} – хранит данные о значении поляризации на предыдущем временном шаге. Имеет тип числа с плавающей точкой двойной точности.

Часть информации о поляризации является общей для всех видов нетривиальных поляризаций. В частности, это параметр σ , определяющий силу резонанса в заданной точке пространства, который используется всеми реализациями нетривиальных поляризаций. Параметр σ хранится в буфере σ_ocl . Оперативная память видеопроцессора для буфера σ_ocl выделяется в функции $add_susceptibility$, которая не изменяется в зависимости от вида нетривиальной поляризации.

Выделение памяти для хранения значений полей

Так как основной задачей при моделировании свойств электромагнитных волноводов является вычисление электрических и магнитных полей, то выделение памяти для хранения этих полей является критически важным условием для успешной параллелизации задачи.

В связи с тем, что в оригинальной версии программного пакета МЕЕР информация о значениях полей на заданном участке расчётной области хранится в членах класса $fields_chunk$, которые представляют собой массивы значений амплитуд полей в текущий момент времени, в прошлый момент времени, значений вспомогательных полей E и H в текущий и прошлый моменты времени, значений вспомогательных полей для описания проводимости в условиях идеальных абсорбирующих слоев, а также значений вклада нетривиальных поляризаций, то выделение памяти является важной задачей в условиях ограниченного объема памяти видео процессоров общего назначения.

В модифицированной версии программного пакета МЕЕР память для OpenCL версии массива f – буфера f_ocl выделяется в методах $alloc_f$ и $alloc_f_real$ класса $field_chunk$. Для выделения оперативной памяти видеопроцессора общего назначения были созданы 2 метода класса $fields_chunk$:

- $allocate_ocl_db$ – метод, выделяющий память для буферов f_u_ocl и f_cond_ocl
- $allocate_ocl_eh$ – метод, выделяющий память для буферов f_w_ocl , $f_minus_p_ocl$ и $f_w_prev_ocl$

Таким образом обеспечена гарантия того, что для каждого необходимого поля будет выделен соответствующий буфер в оперативной памяти видеопроцессора.

Выделение памяти для описания граничных условий

Для описания идеальных абсорбирующих слоёв используются отдельные участки расчётной области (англ. *chunks*). Каждая из границ расчётной области имеет отдельный участок расчётной области, таким образом трёхмерная расчётная область с идеальными абсорбирующими слоями по всем направлениям имеет 27 участков (6 по граничным плоскостям, 8 по граничным углам, 12 по граничным рёбрам и 1 центральный участок). Аналогично, двумерная расчётная область имеет 9 участков расчётной области, а одномерная область 3 – участка.

Для моделирования распространения электромагнитных полей необходим обмен информацией между участками – для задания граничных условий. Оригинальная версия программного пакета МЕЕР использует три вида массивов для обмена информацией между участками расчётной области. Первые два вида массивов содержат указатели на адреса в оперативной памяти центрального процессора, в которых хранится информация о точках, которые нужно экспортировать/импортировать между участками расчётной области. Третий вид массивов используется для временной записи значений во время процедуры обмена граничными значениями электрических и магнитных полей. Для реализации данного подхода для каждой пары участков расчётной области вычислялся номер пары:

$$pair = j + i \cdot n \quad (4.1)$$

где j – номер экспортирующего данные участка, i – номер импортирующего данные участка, n – общее количество участков расчётной области. Таким образом в оригинальном программном пакете МЕЕР обмен производился перебором всех возможных номеров пар участков.

В случае параллелизации интерфейсом OpenCL использование указателей на адреса в памяти является затруднительным, так как на данный момент интерфейс OpenCL не поддерживает возможность создания буфера указателей на произвольный адрес в оперативной памяти видеопроцессора, а синхронизация данных при помощи центрального процессора приводит к значительным задержкам. Вместо этого был использован альтернативный подход, заключающийся в сохранении индексов точек, требующих обмена, вместо прямых адресов в памяти.

Подход сохранения индексов не использует понятие номера пары. Вместо этого был модифицирован класс *fields*, использующийся для хранения информации о полях. В класс *fields* были добавлены многомерные массивы указателей на OpenCL буферы, для каждой компоненты электрических и магнитных полей, для каждой (действительной или мнимой) части поля в случае использования комплексных полей, для каждого типа обмена информацией: копирование, копирование с обратным знаком, копирование с произвольной фазой.

Непосредственно выделение памяти происходит в методе *connect_the_chunks_ocl* класса *fields*. Так как в этот момент информация о количестве участков расчётной области становится уже известной, первое действие алгоритма это выделение памяти под массивы указателей на OpenCL буферы. Затем алгоритм метода *connect_the_chunks_ocl* начинает перебирать компоненты полей и импортирующие участки расчётной области, обозначенные переменной *i*. Для каждого *i* делается обход точек, которые геометрически принадлежат к данному участку, но фактически информация о них отсутствует. Эта процедура делается при помощи макроса *LOOP_OVER_VOL_NOTOWNED*, написанного разработчиками оригинального МЕЕР. После нахождения точки, требующей импорта данных, производится поиск экспортера данных для данной точки. Для этого производится перебор участков расчётной области, обозначенных переменной *j*. Для каждого значения *j* проверяется наличие информации об искомой точке. Когда экспортер данных установлен, соответствующее значение *connections_num_points* увеличивается на единицу.

После определения количества точек, подлежащих обмену, происходит выделение памяти на буферы под указателями *connections_out_points_ocl*, *connections_in_points_ocl*, *connections_phases_r_ocl*, *connections_phases_i_ocl*. Затем происходит заполнение вышеуказанных OpenCL-буферов соответствующими номерами точек.

В случае наличия нетривиальных поляризаций в моделируемой системе используется более сложный подход. Так как на момент написания программы неизвестно количество поляризаций и их тип, то невозможно тривиально записать их информацию для обмена в аналогичные массивы в классе *fields*. Вместо этого была произведена модификация структуры *polarization_state_s*, которая используется классом *fields_chunk* для хранения информации об имеющихся поляризациях. В данную структуру были добавлены такие же члены, что и в класс *fields*. Однако в отличие от буферов в классе *fields* буферы в структуре *polarization_state_s* относятся к отдельно взятой поляризации вещества. То есть, если в модели используется две или более различных частотных дисперсии, то информация о точках обмена данными на границах между участками расчётной области будет храниться для каждой дисперсии по отдельности.

Оригинальный подход, основанный на хранении индексов расчётных ячеек численного алгоритма для последующего запуска расчётов во всех точках одновременно, позволяет избавиться от условных переходов, несовместимых с SIMD архитектурами и обеспечить надёжность алгоритма шага.

4.1.2 Оптимизация алгоритма шага

Шаг в алгоритме аппроксимации конечными разностями состоит из обновления значения источников поля, вычисления напряженности полей, вычисления электрической и магнитной индукций, а также по необходимости, вычисления значений вектора Пойнтинга.

Инициализация волны при помощи источника поля

Так как в алгоритме аппроксимации конечными разностями изначально отсутствует понятие моды, то для возбуждения электромагнитной волны необходим источник поля. Программный пакет МЕЕР изначально поддерживает источники любой компоненты поля и любой временной зависимости. В частности, поддерживаются синусоидальные, Гауссовы и специализированные источники поля. Синусоидальные источники используются для задания волны определённой частоты. Гауссовы источники предназначены для возбуждения электромагнитного импульса, так как их фурье образ имеет форму Гауссова распределения. Особой сложностью отличаются специализированные источники поля. Данный тип источников использует заданную через Scheme-интерфейс пользователем функцию амплитуды от времени. Специализированные источники используются для возбуждения волн круговой поляризации и прочих вариантов необходимых пользователю.

В связи со значительной номенклатурой источников и тем фактом, что интерфейс OpenCL использует SIMD-архитектуру, не отличающуюся особой гибкостью, было принято решение вычислять значения амплитуды источника в заданный момент времени на центральном процессоре, а только потом пересылать эти данные в оперативную память видеопроцессора. Для этого используется два типа OpenCL-буферов, являющихся членами класса *src_vol*:

- *index_ocl* – содержит номера точек, относящихся к источнику поля. Имеет целочисленный тип данных.
- *buffer_ocl* – содержит значения амплитуд поля. Имеет тип числа с плавающей точкой двойной точности.

Оба буфера создаются в методе *allocate_source_buffers* класса *fields_chunk*. В этой же функции происходит копирование номеров точек из массива *index*, члена класса *src_vol*, в буфер *index_ocl*. Размер буфера *index_ocl* соответствует количеству точек поля, принадлежащих к объёму источника. Размер буфера *buffer_ocl* вычисляется нетривиальным образом.

Так как каждая запись данных в оперативную память видеопроцессора занимает значительное время, то перед программистом стоит задача минимизировать количество записей в оперативную память видеопроцессора. Для реализации минимизации количества записей используется запись значений амплитуд источника поля на несколько шагов вперёд. Количество шагов, на которое производится запись, находится в переменной *savetimes*, члене класса *fields*. Значение переменной *savetimes* зависит от количества свободной памяти и объёма источника, но не может быть меньше 10. Таким образом, размер буфера *buffer_ocl* равен количеству точек, принадлежащих к объёму источника, умноженному на значение переменной *savetimes*.

Запись данных в буфер *buffer_ocl* производится каждые *savetimes* шагов. Для этого запускается функция *fill_source_buffers*, являющаяся методом класса *fields*, в которую передаются в качестве параметров тип поля и текущее модельное время. Каждый источник поля опрашивается на *savetimes* шагов вперёд, и эта информация записывается в буфер *buffer_ocl* для каждой точки, принадлежащей к объёму источника.

Обновление значений поля производится каждый расчётный шаг. Для точного определения значений поля используется переменная *sourcetimes*, член класса *fields*, принимающая значения от 0 до (*savetimes* – 1). Непосредственное изменение значений поля производится при помощи программного ядра *kernel_dec_shifted_data*. В данной реализации алгоритма аппроксимации конечными разностями используются ”мягкие” источники, то есть значение поля в источнике не задаётся жёстко, а меняется посредством вычитания значения амплитуды источника из текущего значения поля. Таким образом, не допускается отражение электромагнитной волны от объёма источника поля.

Программное ядро *kernel_dec_shifted_data* запускается со следующими параметрами: указатель на буфер *index_ocl*, указатель на буфер *buffer_ocl*, указатель на буфер поля, текущее значение переменной *sourcetimes* и количество точек в объёме источника *N*. Запуск программного ядра производится одномерным образом (1DRange), то есть каждый поток получает только одну координату. Общее количество потоков равно количеству точек поля в объёме источника. Таким образом, каждый поток получает свой номер потока *i* и номер точки из буфера *index_ocl[i]*, затем производит вычитание из данной точки поля значения буфера *buffer_ocl* под номером $(i + \text{sourcetimes} \cdot N)$.

Предложенный автором подход, основанный на создании буфера значений поля источников, совмещает гибкость в выборе функции источника поля с высокой производительностью, заложенную разработчиками оригинальной версии программного пакета МЕЕР, и малыми задержками при пересылке данных из оперативной памяти центрального процессора.

Вычисление полей

Для вычисления электрических D и магнитных B индукций оригинальная версия программного пакета МЕЕР использует метод *step_db* класса *fields*. В модифицированной версии для этой задачи используется новый метод *step_db_ocl* класса *fields*. Данный метод получает в качестве входного параметра тип поля, электрическое или магнитное, и перебирает все участки (*chunks*) расчётной области вычисляя все компоненты B или D поля.

Если в оригинальной версии МЕЕР координаты точки, в которой производится вычисление поля, перебирались последовательно при помощи макроса *LOOP_OVER_VOL_OWNED0*, то в модифицированной версии МЕЕР все возможные координаты точек уже переведены в одномерный вид и записаны в буфер *index_ocl* для всех компонент поля. Таким образом запуск расчёта поля производится одновременно для всех точек. Каждое из вышеперечисленных программных ядер начинает свою работу с того, что определяет номер потока и выбирает из буфера *index_ocl* соответствующую точку. Вместо последовательного перебора все точки отправляются на исполнение одновременно, и драйвер распределяет их по 4096 вычислительным ядрам.

Рассмотрим пример работы программного ядра *kernel_step_gpu_curl_nopml_nofu_g2*, которое обеспечивает вычисление полей D и B на центральных участках расчётной области, то есть там, где находится моделируемая структура. В качестве первого параметра программное ядро получает список точек, в которых необходимо обновить значение поля, в виде OpenCL буфера *index_ocl*, затем идут три буфера полей: рассчитываемое поле и два поля для оператора ротора. Следующий параметр представляет собой шаг дискретизации $dt \cdot dx$, а потом шаги по направлениям производных в операторе ротора (*strides*) s_1 и s_2 . Новое значение поля вычисляется по формуле:

$$f^{(n)}[i] = f^{(n-1)}[i] - dt \cdot dx \cdot (g_1^{(n-1/2)}[i + s_1] - g_1^{(n-1/2)}[i] + g_2^{(n-1/2)}[i + s_2] - g_2^{(n-1/2)}[i]) \quad (4.2)$$

где i – номер точки, в которой производится расчёт поля. Данная процедура проходит во множестве точек *index_ocl* одновременно.

Для вычисления напряженностей полей E и H используется другой алгоритм, который прописан в методе *update_eh_ocl* класса *fields*, созданном в рамках модификации программного пакета МЕЕР. Как и для полей D и B , алгоритм основан на одновременном вычислении значений поля во множестве точек. Так как в программном пакете МЕЕР поддерживается множество ситуаций, включающих в себя различные свойства ε тензора и наличие или отсутствие на участке расчётной области идеальных поглощающих слоёв, для реализации распараллели-

вания необходимо использовать несколько вариантов программных ядер. Программные ядра, созданные в рамках настоящей работы, показаны в Таблице 4.1.

Таблица 4.1: Типы программных ядер, созданных для вычисления полей E и H .

Тип $\varepsilon \setminus$ PML	Отсутствует	Присутствует
Отсутствует (вакуум)	<i>kernel_step_eh_noeps</i>	<i>kernel_step_eh_pml_noeps</i>
Скалярное ε	<i>kernel_step_eh_eps</i>	<i>kernel_step_eh_pml_eps</i>
2x2 анизотропия	<i>kernel_step_eh_2x2eps</i>	Не создано
3x3 анизотропия	<i>kernel_step_eh_3x3eps</i>	Не создано

В качестве примера рассмотрим программное ядро *kernel_step_eh_eps*. Оно получает следующие параметры: буфер точек *index_ocl*, два буфера поля и буфер значений $1/\varepsilon$. Инвертирование ε используется в связи с тем, что умножение производится значительно быстрее, чем деление. Для выбранной точки i поле f вычисляется следующим образом:

$$f^{(n)}[i] = g^{(n)}[i] \cdot u[i] \quad (4.3)$$

где g – соответствующая индукция, а u – инвертированное значение скалярного ε .

Таким образом, вычисление значений полей E и H производится во множестве точек одновременно в отличие от последовательного перебора значений i в оригинальной версии МЕЕР.

Вычисление спектра вектора Пойнтинга

Вычисление спектров пропускания, отражения и поглощения является одной из основных задач моделирования электромагнитных процессов. Это вызвано тем, что спектр это одна из немногих характеристик оптических систем, которые можно измерить в реальном физическом эксперименте. Таким образом, для сравнения и верификации результатов численного моделирования вычисление спектров является необходимым условием для численного исследования фотонных структур. Использование вектора Пойнтинга для вычисления спектров вызвано тем, что данный вектор содержит информацию не только об энергии поля, но и о направлении потока энергии.

Таким образом, для вычисления спектров необходимо проводить фурье анализ вектора Пойнтинга. Так как в данном случае количество частот задаётся пользователем, то использование быстрого фурье преобразования не представляется возможным. В результате задача сводится к фурье анализу по каждой частоте в каждой точке сечения расчётной области.

В оригинальной версии программного пакета МЕЕР для решения данной задачи на участке расчётной области выделяется прямоугольная область, задаваемая двумя векторами, в которой производится вычисление фурье образа вектора Пойнтинга. Так как программный пакет МЕЕР поддерживает различные геометрические модели вычисления спектров, то для вычисления спектров в нетривиальных геометриях используется понятие веса для каждой точки, в которой вычисляется спектр. Затем на каждом временном шаге для каждой точки производится обход прямоугольной области при помощи макроса *LOOP_OVER_IVECS*. На выбранной точке производится перебор всех частот спектра, заданных пользователем. Для выбранной пары точка-частота вычисляется произведение значения поля в этой точке на значение косинуса $\cos(2\pi \cdot f \cdot t)$. После этого к значению в соответствующей ячейке двумерного массива прибавляется вышеописанное произведение. Таким образом производится последовательный перебор по двум переменным: номеру точки и номеру частоты.

Для реализации этого алгоритма на видеопроцессоре общего назначения необходимо выделить четыре OpenCL буфера для хранения точек, в которых производится анализ спектра, весов точек, действительных и мнимых частей выходных результатов фурье анализа. Хранение действительных и мнимых частей в различных буферах необходимо в связи с тем, что интерфейс OpenCL не поддерживает комплексные типы данных.

Реализация данного алгоритма требует использования двумерного запуска программного ядра, когда каждый поток получает два номера: номер точки и номер частоты. Под это требование было создано программное ядро *kernel_update_dft_real*. Программное ядро получает номер частоты n при помощи OpenCL функции *get_global_id(0)* и номер точки i при помощи *get_global_id(1)*. И вычисляет необходимую для каждого потока частоту по формуле:

$$f = \text{min_f} + n * df \quad (4.4)$$

Затем используя встроенные в интерфейс OpenCL функции *sin()* и *cos()* вычисляется действительная и мнимая части фазы. После этого производится умножение значения поля на действительную и мнимую части фазы, а также добавление полученного значения в соответствующие паре точка-частота ячейки буферов *dft_r_ocl* и *dft_i_ocl*.

4.2 Сравнение времени численного решения уравнений Максвелла при помощи центрального процессора и при помощи видеопроцессора

Так как смысл модификации программного пакета МЕЕР заключается в ускорении вычислений, необходимо провести исследование, доказывающее, что ускорение процесса расчёта действительно имеет место быть. Для этого были проведены вычисления трёх типов задач: задачи распространения электромагнитных волн в вакууме; задачи распространения электромагнитных волн в вакууме с имитацией ухода волны в бесконечность за счёт использования поглощающих граничных условий; задачи распространения электромагнитной волны в вакууме с имитацией ухода волны в бесконечность и вычислением вектора Пойнтинга исходящей волны. Данные задачи являются основными в при моделировании оптических свойств фотонных структур, так как позволяют рассчитать динамику электромагнитных полей и вычислить спектры пропускания и отражения.

4.2.1 Случай одномерной структуры

Одномерные структуры используются для моделирования оптических свойств фотонных кристаллов и Брэгговских зеркал, изготовленных методами напыления тонких плёнок. Моделирование оптических свойств одномерных систем является одним из применений метода аппроксимации конечными разностями. Для проверки работоспособности и прироста скорости вычислений была рассмотрена структура, представляющая собой одномерный отрезок, длиной 1 мкм, имеющий $\varepsilon = \mu = 1$, к которой по необходимости добавлялось 2 поглощающих слоя длиной 1 мкм каждый. Измерение скорости вычислений проводилось при разрешениях от 10 до 100000 точек на мкм.

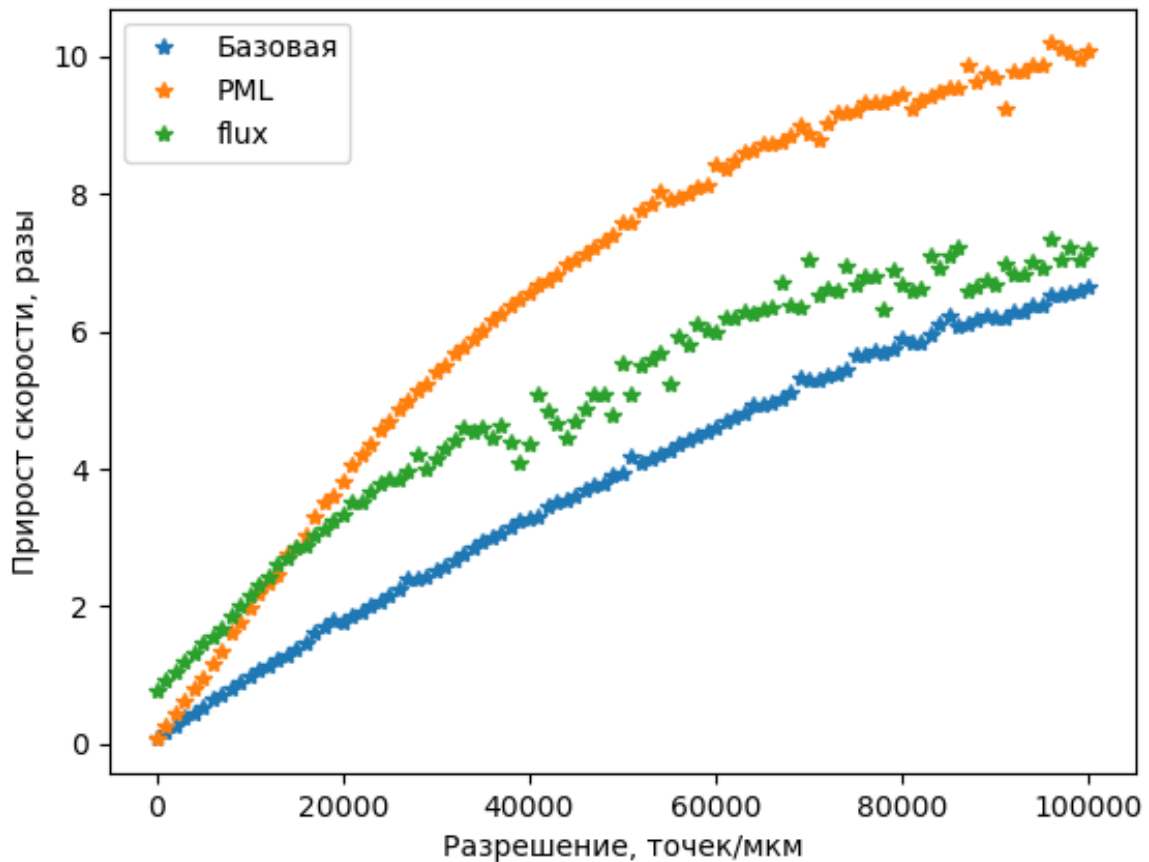


Рисунок 4.2: Зависимость прироста скорости вычисления значений напряженности электромагнитных полей от пространственного разрешения расчетной сетки в случае одномерных структур для следующих задач: 1) "Базовая" задача без поглощающих граничных условий и вычисления вектора Пойнтинга. 2) Задача "PML" с поглощающими граничными условиями, без вычисления вектора Пойнтинга. 3) Задача "flux" с поглощающими граничными условиями и вычислением вектора Пойнтинга.

Как можно видеть из Рисунка 4.2, на малых разрешениях задачи без вычисления вектора Пойнтинга на видеопроцессоре общего назначения решаются медленнее, чем на центральном процессоре. Однако, с ростом количества расчетных точек в системе возникает прирост скорости, достигающий 10 крат. В случае расчета спектров пропускания, то есть фурье образа вектора Пойнтинга, замедление на малых количествах расчетных точек не наблюдается.

4.2.2 Случай двумерной структуры

Фотонные структуры, изготовленные методами планарного напыления и литографии, являются квазидвумерными. Таким образом, для моделирования оптических свойств данных структур можно использовать двумерное описание диэлектрического профиля рассматриваемой системы. На данный момент двумерные задачи являются наиболее распространенными,

так как могут давать достаточно точное описание многих планарных структур при возможности использования обычного центрального процессора. Для проверки производительности при расчётах электромагнитных полей в двумерных структурах использовалась расчетная область размером 1 мкм на 1 мкм, к которой по необходимости с каждой стороны добавлялись поглощающие слои толщиной 1 мкм. Измерение скорости вычислений проводилось на пространственных разрешениях от 10 до 1400 точек на мкм.

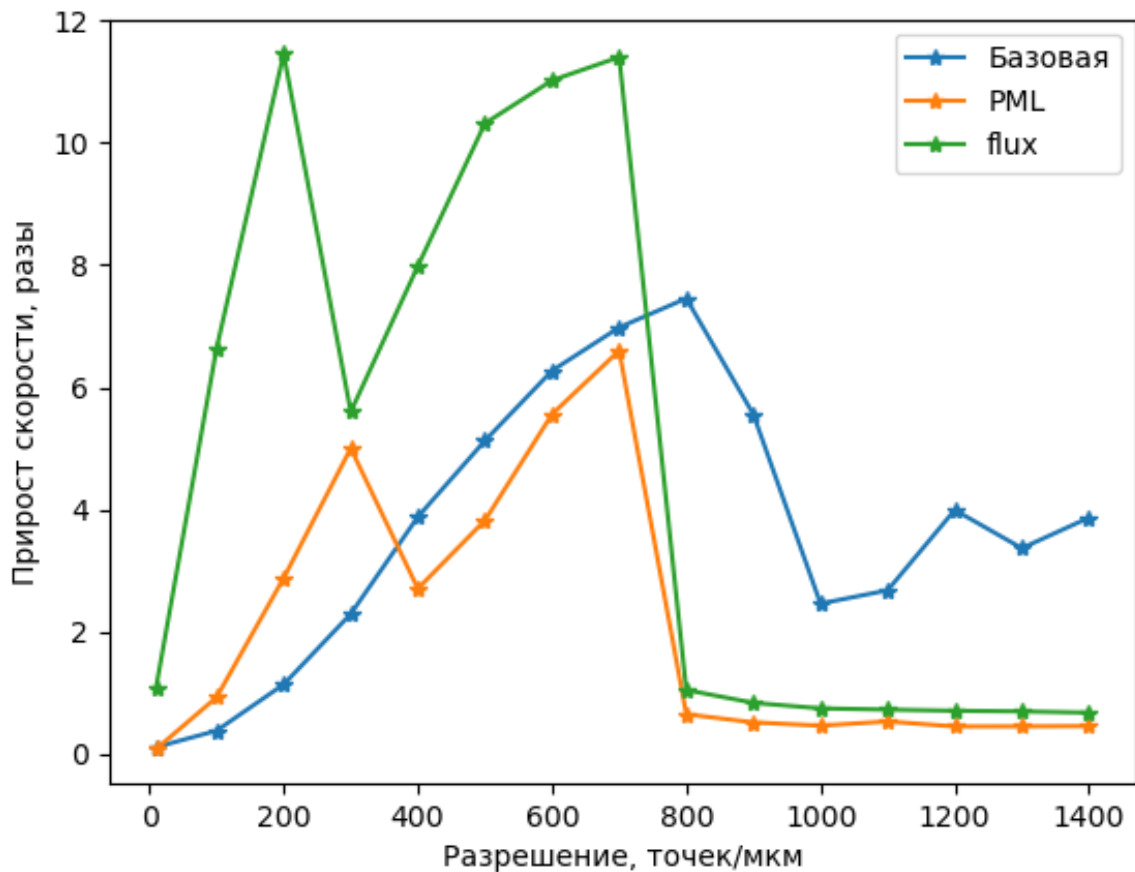


Рисунок 4.3: Зависимость прироста скорости вычисления значений напряженности электромагнитных полей от пространственного разрешения расчетной сетки в случае двумерных структур для следующих задач: 1) "Базовая" задача без поглощающих граничных условий и вычисления вектора Пойнтинга. 2) Задача "PML" с поглощающими граничными условиями, без вычисления вектора Пойнтинга. 3) Задача "flux" с поглощающими граничными условиями и вычислением вектора Пойнтинга.

Как можно видеть из Рисунка 4.3, задачи, не требующие вычисления вектора Пойнтинга, не имеют прироста скорости на малых разрешениях. Это объясняется тем, что время необходимое для запуска функций на видеопроцессоре общего назначения, больше, чем время необходимое для расчёта значений полей на центральном процессоре в случае малого числа точек. Кроме того, начиная с разрешения 800 точек/мкм можно видеть провал в производительности.

Это связано с особенностями работы драйвера видеопроцессора на больших задачах. Для того, чтобы обойти эту проблему предлагается разбивать запуск функций с большим количеством точек на несколько запусков с меньшим количеством точек в задаче. Провал производительности задач с поглощающими слоями на разрешениях 350-500 точек/мкм связан с изменением вероятности нахождения соседнего значения поля в кэш-памяти (англ. hit/miss ratio). Таким образом, в случае двумерных структур прирос скорости может достигать 11 крат.

4.2.3 Случай трёхмерной структуры

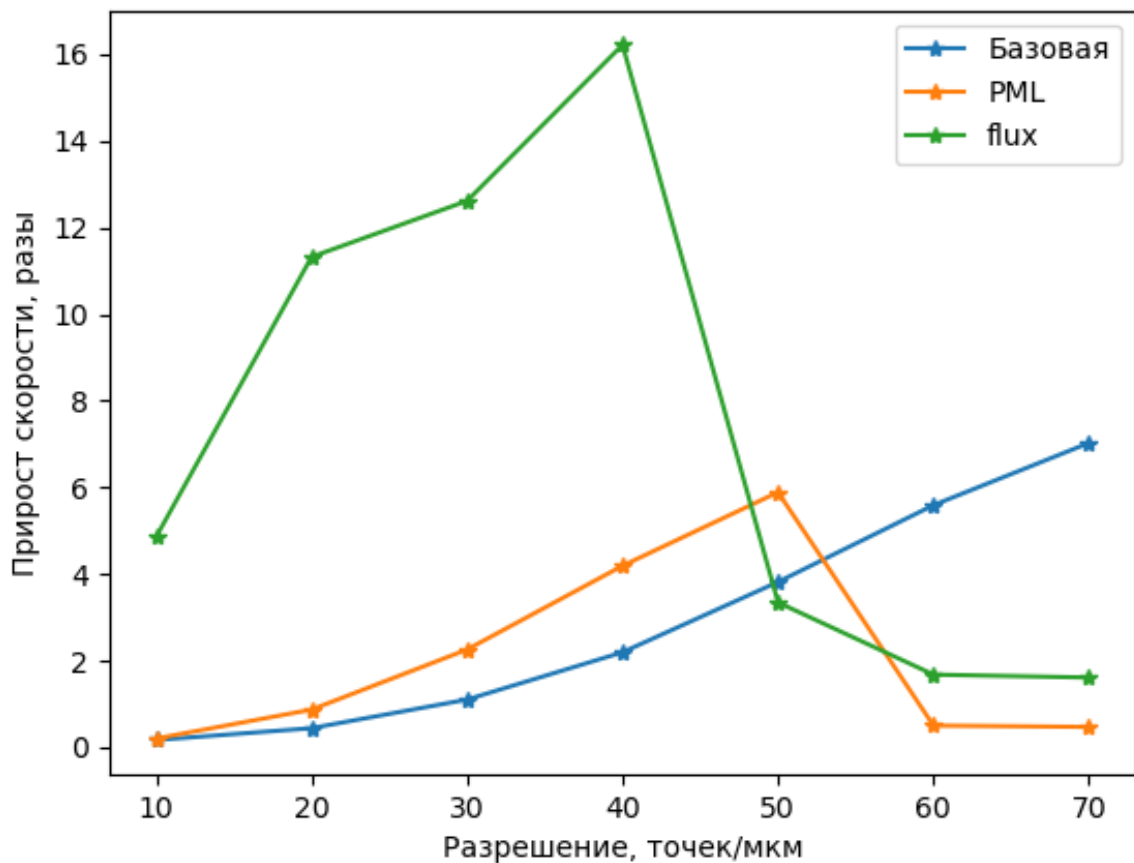


Рисунок 4.4: Зависимость прироста скорости вычисления значений напряженности электромагнитных полей от пространственного разрешения расчётной сетки в случае трёхмерных структур для следующих задач: 1) "Базовая" задача без поглощающих граничных условий и вычисления вектора Пойнтинга. 2) Задача "PML" с поглощающими граничными условиями, без вычисления вектора Пойнтинга. 3) Задача "flux" с поглощающими граничными условиями и вычислением вектора Пойнтинга.

Наиболее сложными с точки зрения необходимой вычислительной мощности структурами для расчёта оптических свойств являются трёхмерные структуры. Это связано с большим количеством расчётных точек, большими ширинами массивов данных (англ. array strides) и дву-

мерными сечениями структур при расчёте спектров. Однако, на данный момент трёхмерные структуры являются наиболее точными аппроксимациями физических объектов. Для проверки скорости вычислений значений электромагнитных полей в случае трёхмерных структур использовался кубический объем размеров 1 мкм x 1 мкм x 1 мкм с добавлением по необходимости поглощающих слоёв по 1 мкм с каждой стороны. Для определения зависимости прироста скорости вычислений от количества расчётных точек в системе использовалось изменение пространственного разрешения от 10 точек/мкм до 70 точек/мкм.

Как можно видеть из Рисунка 4.4, в задачах, не требующих вычисления вектора Пойнтинга, на малых разрешениях не наблюдается прирост скорости, этот результат аналогичен двумерному случаю. Однако, в случае вычисления фурье образа вектора Пойнтинга из-за большого количества точек в двумерном сечении трёхмерной структуры прирост скорости наблюдается на всех разрешениях. Аналогично случаю двумерной структуры, можно видеть наличие провала скорости вычислений на разрешениях выше 40 точек/мкм. В данном случае также необходимо использовать разбиение задачи на несколько запусков функций.

4.3 Методика оптимизации расчетов электромагнитных волн в гиротропных средах на примере магнитоактивной плазмы

Одним из важных аспектов математического моделирования фотонных структур является возможность моделирования гиротропных материалов. Гиротропные материалы, а в частности магнитоактивные плазмы, являются актуальным объектом исследования в оптике, радиофизике, лазерной физике. В частности, в работе [181] показана возможность использования магнитоактивной плазмы для фокусировки и изменения направления фемтосекундного лазерного импульса на угол в $\pm 5^\circ$, что недоступно традиционными оптическими методами. Подобные задачи встают при получении изображений сверх-быстро протекающих процессов [182]. Кроме того, гиромагнитные среды могут быть использованы для получения изображения объектов за дифракционным пределом [183]. В данном случае был показан подход при котором между объектом и линзой микроскопа помещалась магнитоактивная плазма, что повышало детализацию изображения.

Другим примером использования магнитоактивных плазм является спутниковая связь [184]. Здесь магнитоактивные плазмы представляют собой ионизированные слои атмосферы, взаимодействующие с магнитным полем Земли. В данном случае гиромагнитные эффекты

ухудшают прохождение сигнала и их изучение необходимо для построения спутниковых систем связи, минимально подверженных негативному влиянию магнитного поля Земли.

Несмотря на то, что было предложено несколько вариантов моделирования магнитоактивных плазм методом аппроксимации конечными разностями [185–189], ни один из исследователей до нас не публиковал своё программное обеспечение, ни в виде исходных кодов, ни в виде коммерческого продукта.

В данной главе представлен метод описания магнитоактивных плазм в виде нетривиальной поляризации в рамках алгоритма аппроксимации конечными разностями. В отличие от работ предшественников, данный метод не требует внесения дополнительных членов в уравнения Максвелла, а описывает процессы взаимодействия электромагнитных волн с магнитоактивной плазмой как одну из многих поляризаций. Это позволяет использовать множество различных нетривиальных свойств среды одновременно с гиротропными свойствами. К примеру, среда может иметь собственные атомарные резонансы поглощения и в тоже время быть магнитоактивной плазмой.

Предложенный подход и модификация широко известного программного пакета МЕЕР для реализации этого подхода позволили создать программный пакет, способствующий решению реальных физических задач.

4.3.1 Описание магнитоактивных плазм в виде поляризации вещества

Уравнения для описания магнитоактивных плазм были разработаны В.Л. Гинзбургом [190] в 1960-х годах для описания распространения радиоволн в ионосфере Земли. Используя второй закон Ньютона можно вывести уравнение:

$$m\ddot{\vec{r}} + mv_{\text{эфф}} = e\vec{E}_0 e^{j\omega t} + \frac{e}{c}[\dot{\vec{r}}, \vec{H}^{(0)}] \quad (4.5)$$

где $\vec{r}$ – координата электрона, $\vec{E}_0$ – амплитуда электрического поля, e – заряд электрона, $\vec{H}_0$ – вектор внешнего стационарного магнитного поля. При выводе уравнения (4.5) не учитывалось движение положительно заряженных ионов.

Решая уравнение (4.5) для стационарного магнитного поля $\vec{H}_0$, направленного вдоль оси z , Виталий Гинзбург вывел уравнения для компонент тензора ε :

$$\varepsilon_{xx}(\omega) = \varepsilon_{yy}(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{(\omega_p/\omega)^2 [1 - (j\nu_c/\omega)]}{[1 - j\nu_c/\omega]^2 - (\omega_b/\omega)^2} \right)$$

$$\varepsilon_{xy}(\omega) = \varepsilon_{yx}(\omega) = \varepsilon_0 \frac{(\omega_p/\omega)^2 (\omega_b/\omega)}{[1 - j\nu_c/\omega]^2 - (\omega_b/\omega)^2}$$

$$\varepsilon_{zz}(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + j\nu_c)} \right)$$

Таким образом, выражения для диэлектрических восприимчивостей будут следующими:

$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{\varepsilon_{xx}(\omega)}{\varepsilon_0} - 1 \quad (4.6)$$

$$\chi_{xy}(\omega) = \frac{\varepsilon_{xy}(\omega)}{\varepsilon_0} \quad (4.7)$$

Выражение для ε_{yy} и ε_{zz} аналогичны уравнению (4.6).

Однако, данные выражения зависят от частоты – параметра, который не используется в явном виде при расчётах методом аппроксимации конечными разностями. Для использования частотных выражений во временной области применяется обратное Фурье преобразование. Сложность заключается в том, что умножение в частотной области соответствует свёртке во временной области. Вычисление свёрток в явном виде является сверхзатратной в плане вычислительных ресурсов задачей, так как каждый следующий шаг требует на одну операцию умножения больше, чем предыдущий шаг. К примеру для вычисления значения i -й компоненты поляризации в момент времени n можно использовать формулу:

$$P_i(n \cdot \Delta t) = \sum_{m=0}^{(n)} E_j((n-m)\Delta t) \cdot \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_{ij}(\tau) d\tau \quad (4.8)$$

Метод рекурсивных свёрток

Показанные ранее выражения в частотной области могут быть записаны в виде рекурсивных свёрток, что впервые было сделано в работе [185]. Для нахождения решения во первых необходимо провести обратное преобразование Фурье выражений (4.6-4.7). Таким образом выражения для диэлектрической восприимчивости во временной области будут представлять собой:

$$\chi_{xx}(\tau) = \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\nu_c - e^{-\nu_c \tau} [\nu_c \cos(\omega_b \tau) - \omega_b \sin(\omega_b \tau)]) U(\tau)$$

$$\chi_{xy}(\tau) = \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\omega_b - e^{-\nu_c \tau} [\omega_b \cos(\omega_b \tau) + \nu_c \sin(\omega_b \tau)]) U(\tau)$$

$$\chi_{zz}(\tau) = \frac{\omega_p^2}{\nu_c} [1 - e^{-\nu_c \tau}] U(\tau)$$

где $U(\tau)$ – функция Хэвисайда, ν_c – частота столкновений, ω_p – плазменная циклическая частота, ω_b – циклотронная циклическая частота. Для того чтобы обойти необходимость в вычислении значений свёрток в явном виде, введём комплексные функции диэлектрической вос-

приимчивости:

$$\chi_{xx}(\tau) = Re[\hat{\chi}_{xx}(\tau)], \quad \chi_{xy}(\tau) = Re[\hat{\chi}_{xy}(\tau)], \quad \chi_{zz}(\tau) = Re[\hat{\chi}_{zz}(\tau)].$$

Простое использование формулы Эйлера приводит к следующему виду комплексных выражений:

$$\hat{\chi}_{xx}(\tau) = \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\nu_c + j\omega_b) \left[1 - e^{-(\nu_c - j\omega_b)\tau} \right] U(\tau) \quad (4.9)$$

$$\hat{\chi}_{xy}(\tau) = \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\omega_b - j\nu_c) \left[1 - e^{-(\nu_c - j\omega_b)\tau} \right] U(\tau) \quad (4.10)$$

$$\hat{\chi}_{zz}(\tau) = \frac{\omega_p^2}{\nu_c} \left[1 - e^{-\nu_c \tau} \right] U(\tau) \quad (4.11)$$

В данных уравнениях физический смысл имеют только действительные части комплексных значений.

Обозначим интеграл в выражении (4.8) как:

$$\chi_{xy}^{(m)} = Re \left\{ \hat{\chi}_{xy}^{(m)} \right\} = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_{xy}(\tau) d\tau \quad (4.12)$$

Подстановка выражения (4.10) в формулу (4.12), и интегрирование с учётом условия $\tau, m \geq 0$ приводит к:

$$\hat{\chi}_{xy}^{(m)} = \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\omega_b - j\nu_c) \cdot \left[\Delta t - \frac{1}{j\omega_b - \nu_c} \left(e^{-(\nu_c - j\omega_b)(m+1)\Delta t} - e^{-(\nu_c - j\omega_b)m\Delta t} \right) \right] \quad (4.13)$$

Таким образом, если разделить выражение для поляризации на диагональную и недиагональную части, зависящие от χ_{ii} и χ_{ij} соответственно, то выражение для поляризации принимает вид:

$$\vec{P}(t) = \vec{P}_{diag}(t) + \vec{P}_{offdiag}(t)$$

$$\vec{P}^{(n)} = \vec{P}(n \cdot \Delta t)$$

С учётом выражения (4.13), и условия $i \neq j$ для недиагональных компонент, формулу (4.8) можно представить в виде:

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

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:

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

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

Аналогичным образом выводятся и уравнения для $P_{i,diag}$ и P_z :

$$P_{i,diag} = P_{i,diag,1} + P_{i,diag,2}$$

$$P_{i,diag,1}^{(n+1)} = E_i^{(n+1)} \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\nu_c + j\omega_b) \Delta t + P_{i,diag,1}^{(n)}$$

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

$$P_z = P_{z,1} + P_{z,2}$$

$$P_{z,1}^{(n+1)} = E_z^{(n+1)} \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\nu_c} + P_{z,1}^{(n)}$$

$$P_{z,2}^{(n+1)} = E_z^{(n+1)} \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2} (e^{-\nu_c \Delta t} - 1) + P_{z,2}^{(n)} \cdot e^{-\nu_c \Delta t}$$

Следует отметить, что в отличие от работы Хансбергера [185] и основанных на ней реализаций, данный подход не требует модификации структуры уравнений Максвелла, а ограничивается введением дополнительной компоненты поляризации. Различные по своей физической природе поляризации могут складываться для полного описания всех резонансов диэлектрической проницаемости в рассматриваемом веществе.

Смена системы координат

Так как в реальных структурах стационарное магнитное поле, намагничивающее плазму, может иметь произвольное направление вектора напряженности, то важным аспектом разработки методов численного моделирования распространения электромагнитных волн в магнитоактивных плазмах является возможность задания произвольного направления вектора напряженности стационарного магнитного поля.

Рассмотрим две системы координат. В первой системе координат $\vec{r}$ направление вектора напряженности стационарного магнитного поля $\vec{H}^0$ совпадает с осью Z . Для простоты вывода будем считать, что $|\vec{H}^0| = 1$. Во второй системе координат $\vec{r}'$ вектор напряженности стационарного магнитного поля направлен произвольным образом. Пусть T – матрица преобразования координат из системы $\vec{r}$ в систему $\vec{r}'$. Так как тензор χ проецирует вектор $\vec{E}(\vec{r})$ в вектор $\vec{P}(\vec{r})$, в новой системе координат $\vec{r}'$ тензор χ' должен проецировать $\vec{E}(\vec{r}')$ в $\vec{P}(\vec{r}')$:

$$\vec{P}(\vec{r}') = \chi' \vec{E}(\vec{r}')$$

Если переписать $\vec{E}(\vec{r}')$ и $\vec{P}(\vec{r}')$ используя матрицу преобразования координат T :

$$T\vec{P}(\vec{r}) = \chi' T\vec{E}(\vec{r})$$

или

$$\varepsilon' = T\varepsilon T^{-1}$$

Так как значения элементов матрицы T всё ещё неизвестны, для их определения используется формула Родрига [191]:

$$T = I + [v]_{\times} + [v]_{\times}^2 \frac{1-c}{s^2} \quad (4.14)$$

где c значение косинуса угла между осью Z и вектором напряженности стационарного магнитного поля $\vec{H}$, s – значение синуса того же угла, $v = \vec{H}^0 \times \vec{e}_z$ и $[v]_{\times}$ задается формулой:

$$[v]_{\times} = \begin{pmatrix} 0 & -v_3 & v_2 \\ v_3 & 0 & -v_1 \\ -v_2 & v_1 & 0 \end{pmatrix}$$

в данном случае эта матрица имеет следующее значение:

$$[v]_{\times} = \begin{pmatrix} 0 & H_z^0 & -H_y^0 \\ -H_z^0 & 0 & H_x^0 \\ H_y^0 & -H_x^0 & 0 \end{pmatrix}$$

а коэффициенты могут быть записаны как:

$$c = H_z^0$$

$$s = \sqrt{(H_x^0)^2 + (H_y^0)^2}$$

Функция (4.14) является неопределенной в случае, если значение синуса угла между $\vec{H}^0$ и осью Z равно 0. Для того чтобы избавиться от этой неопределенности необходимо задать два особых

случая. Первый случае соответствующий ситуации, когда $\vec{H}^0$ направлен вдоль оси Z , является тривиальным, а матрица T является единичной. Второй случай соответствующий ситуации, когда вектор $\vec{H}^0$ направлен противоположно оси Z , может быть описан одной из двух матриц:

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

которые дают одинаковый результат.

4.3.2 Результаты моделирования магнитоактивной плазмы и сравнение с аналитическим решением

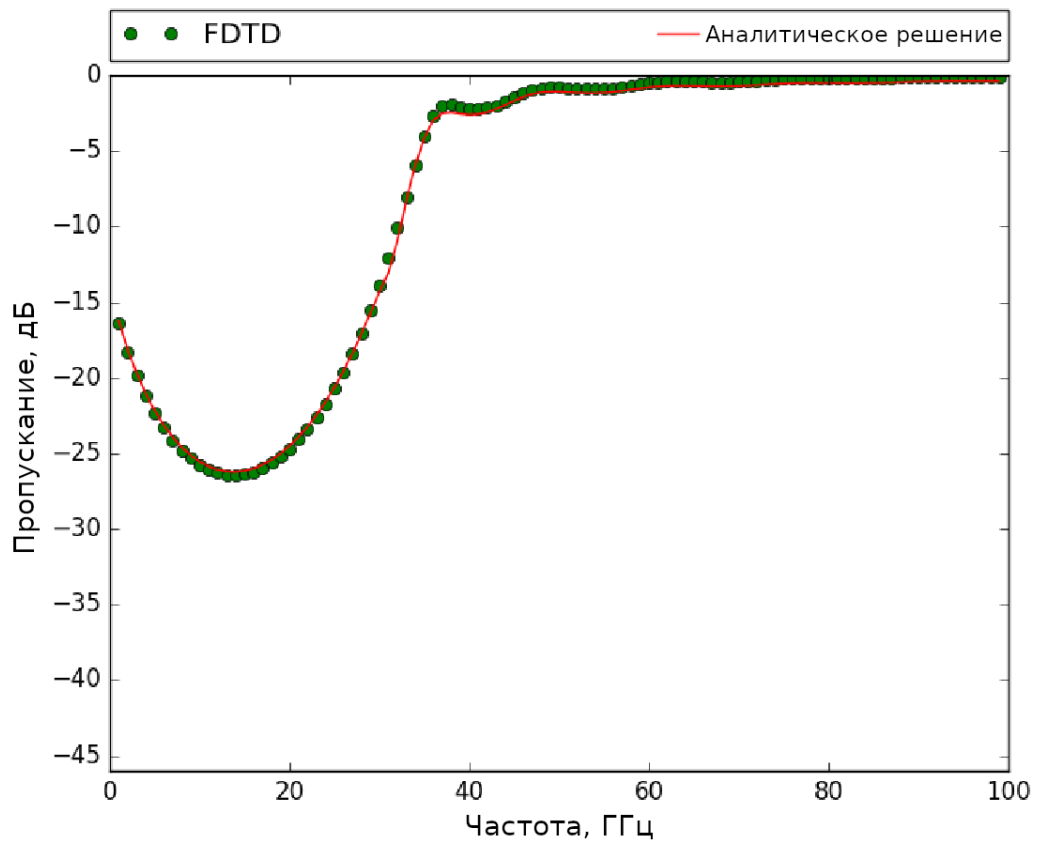


Рисунок 4.5: Сравнение спектров пропускания электромагнитных правой круговой поляризации волн через слой магнитоактивной плазмы, полученных при помощи численного расчёта и аналитического решения

Для проверки правильности расчётов было проведено сравнение численных результатов, полученных по методу аппроксимации конечными разностями, с аналитическим решением. Был проведён расчёт спектров пропускания электромагнитных волн с правой и левой круговыми поляризациями через одномерную структуру, состоящую из слоя магнитоактивной

плазмы толщиной 9 мм в окружении вакуума. В рамках данного численного моделирования размер пространственного шага расчётной сетки был принят за 75 мкм, а соотношение Куранта за 0.25. Параметры плазмы были выбраны следующими $\omega_p = 2\pi \cdot 50 \cdot 10^9$ рад/с, $\omega_b = 2\pi \cdot 3 \cdot 10^{11}$ рад/с и $\nu_c = 2 \cdot 10^{10}$ Гц. Направление вектора напряженности стационарного магнитного поля было выбрано вдоль одномерной структуры, параллельно оси Z и волновому вектору падающей волны.

Аналитическое решение для коэффициента пропускания электромагнитной волны через проводящий слой было заимствовано из книги Борна и Вольфа [192]. В частном случае нормального падения электромагнитной волны формула может быть записана как:

$$t = \frac{\tau_{12}\tau_{21}e^{-jh \cdot \hat{n}_2 \cdot \omega/c}}{1 + \rho_{21} \cdot \rho_{12}e^{-2jh \cdot \hat{n}_2 \cdot \omega/c}} \quad (4.15)$$

где комплексный коэффициент преломления представляет собой $\hat{n}_2 = u_2 + j\nu_2$; ρ и τ – комплексные коэффициенты Френеля для отражения и пропускания, индексы 1 и 2 в τ и ρ соответствуют вакууму и магнитоактивной плазме соответственно; h – толщина слоя плазмы. Коэффициент пропускания энергии электромагнитной волны (4.15), для специального случая нормального падения и вакуума перед и после магнитоактивной плазмы может быть описан как:

$$T = \frac{\cos(0)}{\cos(0)} \frac{n_1}{n_1} |t|^2 = |t|^2 \quad (4.16)$$

Уравнения для $\hat{n}_2$, соответствующие правой и левой круговой поляризации, были заимствованы из [190]:

$$\hat{n}_{2RCP}^2 = 1 - \frac{(\omega_p/\omega)^2}{1 - j\nu_c/\omega - \omega_b/\omega} \quad (4.17)$$

$$\hat{n}_{2LCP}^2 = 1 - \frac{(\omega_p/\omega)^2}{1 - j\nu_c/\omega + \omega_b/\omega} \quad (4.18)$$

На Рис.4.5 и Рис. 4.6 приведено сравнение аналитических решений спектров пропускания с результатами численного моделирования для случаев правой и левой круговой поляризации соответственно.

Таким образом, предложенный метод численного моделирования электромагнитных волн в магнитоактивных плазмах показывает хорошее совпадение с аналитическим решением. Данный метод отличается тем, что не требует модификации системы уравнений Максвелла и может использоваться

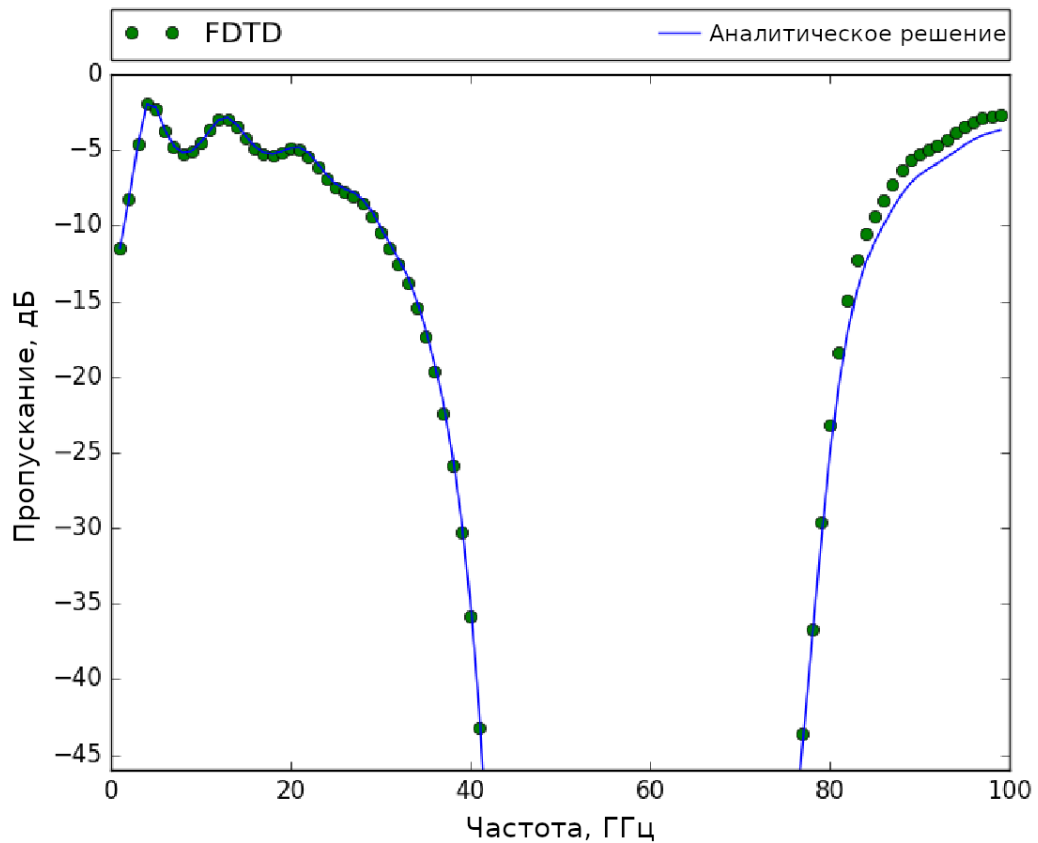


Рисунок 4.6: Сравнение спектров пропускания электромагнитных левой круговой поляризации волн через слой магнитоактивной плазмы, полученных при помощи численного расчёта и аналитического решения

4.4 Выводы по главе

Использование параллелизации на основе фреймворка OpenCL позволяет ускорить вычисление значений полей, а также фурье-образов вектора Пойнтинга при численном моделировании оптических свойств фотонных структур по методу аппроксимации конечными разностями. Ускорение вычислений проявляется на больших количествах расчётных точек, что соответствует большим размерам структуры или большим пространственным разрешениям. Разработанная методика позволяет сократить необходимое для расчётов время до 16 крат по сравнению с расчётами на 4-х ядерном центральном процессоре.

Оптические свойства магнитоактивных плазм могут быть описаны в рамках аппроксимации конечными разностями. Разработанный метод описания не требует модификации системы уравнений Максвелла и учитывает влияние магнитоактивных плазм как поляризацию вещества.

Заключение

Современные методы численного моделирования позволяют рассчитывать оптические свойства фотонных систем, и в частности фотонных кристаллов и фотонных волноводов. Такие задачи требуют проведения большого объёма вычислений, что затруднительно сделать на центральном процессоре персонального компьютера. Это делает актуальным параллелизацию расчётов, а в частности использование вычислительных устройств на SIMD архитектуре. Предложенный подход параллелизации открывает возможность моделировать динамику распространения электромагнитных волн в сложных трёхмерных системах на настольном компьютере, что является актуальным для многих лабораторий. Разработанное программное обеспечение позволит исследователям проводить расчёты оптических свойств актуальных на данный момент фотонных структур.

Представленные результаты расчёта оптических свойств фотонных кристаллов показывают аномальное замедление групповой скорости в фотонных кристаллах, заполненных материалами с резонансным характером дисперсии диэлектрической проницаемости. Проведенная модификация геометрии элемента двумерного гексагонального фотонного кристалла позволяет увеличить ширину запрещённой зоны без изменения материалов кристалла. Данные результаты могут найти применение при создании фильтров и линий задержки оптических сигналов.

Локализация электромагнитных полей в сферическом резонаторе приводит к возникновению интерференции между локализованным состоянием и электромагнитной волной вне резонатора. Расположение сферического резонатора возле диэлектрического волновода позволяет управлять прохождением оптических сигналов через данный волновод. Так как локализация энергии происходит не мгновенно, то данный процесс можно использовать для динамического управления коэффициентом прохождения.

Основные результаты и выводы диссертации:

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. Продemonстрировано 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.

Автор хочет выразить благодарность за многолетнее сотрудничество, советы и помощь в решении многочисленных проблем коллективам лаборатории "Комбинационное рассеяние света" и лаборатории квантового дизайна молекулярных и твердотельных наноструктур ФИАН, и в особенности своему научному руководителю, профессору МИЭТа, доктору физ.-мат. наук, академику РАН, Горбачеву Александру Алексеевичу и доктору физ.-мат. наук, Капаеву Владимиру Васильевичу. Отдельно следует отметить краткий курс вычислительной физики, рассказанный заместителем директора ФИАН по развитию, кандидатом физ.-мат. наук, Ивановым Олегом Викторовичем.

Автор также выражает благодарность своим родителям, Фриман Елене Рудольфовне и Фриману Владимиру Борисовичу. Без вашей поддержки и примера трудолюбия эта работа не была бы завершена.

Литература

1. Advances in silicon quantum photonics / Jeremy C Adcock, Jueming Bao, Yulin Chi и др. // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. — 2020. — Т. 27, № 2. — С. 1–24.
2. Chip-based quantum communications / Qingqing Wang, Yun Zheng, Chonghao Zhai и др. // *Journal of Semiconductors*. — 2021. — Т. 42, № 9. — С. 091901.
3. InP-based generic foundry platform for photonic integrated circuits / Luc M Augustin, Rui Santos, Erik den Haan и др. // *IEEE journal of selected topics in quantum electronics*. — 2017. — Т. 24, № 1. — С. 1–10.
4. System-on-chip photonic integrated circuits / Fred Kish, Vikrant Lal, Peter Evans и др. // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. — 2017. — Т. 24, № 1. — С. 1–20.
5. High-performance photonic integrated circuits on silicon / Roger Helkey, Adel AM Saleh, Jim Buckwalter, John E Bowers // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. — 2019. — Т. 25, № 5. — С. 1–15.
6. Photonic integrated circuits using heterogeneous integration on silicon / Tin Komljenovic, Duanni Huang, Paolo Pintus и др. // *Proceedings of the IEEE*. — 2018. — Т. 106, № 12. — С. 2246–2257.
7. Slow light in photonic crystals / Toshihiko Baba // *Nature photonics*. — 2008. — Т. 2, № 8. — С. 465–473.
8. Ultrasonic Memory Unit / MV Wilkes, W Renwick // *Electronic Engineering*. — 1948. — Т. 20. — С. 208.
9. Design, fabrication, and application of precise SAW delay lines used in an FMCW radar system / Leonhard Reindl, Clemens CW Ruppel, Stefan Berek и др. // *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*. — 2001. — Т. 49, № 4. — С. 787–794.

10. Enhanced stimulated Raman scattering in slow-light photonic crystal waveguides / James F. McMillan, Xiaodong Yang, Nicolae C. Panoiu и др. // *Optics Letters*. — 2006. — Т. 31, № 9. — С. 1235–1237.
11. Оптика глобулярных фотонных кристаллов / В.С. Горелик // *Квантовая электроника*. — 2007. — Т. 37, № 5. — С. 409–432.
12. Photonic crystal slotted slab waveguides / A. Di Falco, L. O’Faolain, T.F. Krauss // *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*. — 2008. — Т. 6, № 1. — С. 38–41. — The Seventh International Symposium on Photonic and Electromagnetic Crystal Structures.
13. Terahertz quantum-cascade laser at $\lambda \approx 100 \mu\text{m}$ using metal waveguide for mode confinement / Benjamin S Williams, Sushil Kumar, Hans Callebaut и др. // *Applied Physics Letters*. — 2003. — Т. 83, № 11. — С. 2124–2126.
14. Tunable Fano resonances based on microring resonator with feedback coupled waveguide / Guolin Zhao, Ting Zhao, Huifu Xiao и др. // *Optics express*. — 2016. — Т. 24. — С. 20187–20195.
15. Generating Fano Resonances in a Single-Waveguide Silicon Nanobeam Cavity for Efficient Electro-Optical Modulation / Jianhao Zhang, Xavier Leroux, Elena Durán-Valdeiglesias и др. // *ACS Photonics*. — 2018. — Т. 5, № 11. — С. 4229–4237.
16. High-contrast and low-power all-optical switch using Fano resonance based on a silicon nanobeam cavity / Gaoneng Dong, Yilun Wang, Xinliang Zhang // *Opt. Lett.* — 2018. — Т. 43, № 24. — С. 5977–5980. — URL: <http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-43-24-5977>.
17. Fano-resonance in one-dimensional topological photonic crystal heterostructure / Wei Gao, Xiaoyong Hu, Chong Li и др. // *Opt. Express*. — 2018. — Т. 26, № 7. — С. 8634–8644.
18. Fano resonance and plasmon-induced transparency in waveguide-coupled surface plasmon resonance sensors / Shinji Hayashi, Dmitry V. Nesterenko, Zouheir Sekkat // *Applied Physics Express*. — 2015. — Т. 8, № 2. — С. 022201.
19. Temporal coupled-mode theory for the Fano resonance in optical resonators / Shanhui Fan, Wonjoo Suh, J. D. Joannopoulos // *J. Opt. Soc. Am. A*. — 2003. — Т. 20, № 3. — С. 569–572.
20. All-dielectric metasurface analogue of electromagnetically induced transparency / Yuanmu Yang, Ivan I. Kravchenko, Dayrl P. Briggs, Jason Valentine // *Nature Communications*. — 2014. — Т. 5. — С. 5753.

21. Efficient Color Filters Based on Fano-Like Guided-Mode Resonances in Photonic Crystal Slabs / V. A. Nguyen, Q. M. Ngo, K. Q. Le // *IEEE Photonics Journal*. — 2018. — April. — T. 10, № 2. — C. 1–8.
22. Fano Resonance Based on Metal-Insulator-Metal Waveguide-Coupled Double Rectangular Cavities for Plasmonic Nanosensors / Zhidong Zhang, Liang Luo, Chenyang Xue и др. // *Sensors*. — 2016. — T. 16, № 5.
23. Fano resonances in a plasmonic waveguide system composed of stub coupled with a square cavity resonator / Yun Binfeng, Guohua Hu, Ruohu Zhang, Cui Yiping // *Journal of Optics*. — 2016. — T. 18, № 5. — C. 055002.
24. Independently tunable double Fano resonances in asymmetric MIM waveguide structure / Jiwei Qi, Zongqiang Chen, Jing Chen и др. // *Optics express*. — 2014. — T. 22. — C. 14688–14695.
25. Ultrahigh-speed optical time-division-multiplexed transmission technology based on optical signal processing / S. Kawanishi // *IEEE Journal of Quantum Electronics*. — 1998. — Nov. — T. 34, № 11. — C. 2064–2079.
26. Joule-Level High-Efficiency Energy Transfer to Subpicosecond Laser Pulses by a Plasma-Based Amplifier / J.-R. Marquès, L. Lancia, T. Gangolf и др. // *Phys. Rev. X*. — 2019. — T. 9. — C. 021008. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.9.021008>.
27. SnSe₂ Nanosheets for Subpicosecond Harmonic Mode-Locked Pulse Generation / Ji-Shu Liu, Xiao-Hui Li, Yi-Xuan Guo и др. // *Small*. — 2019. — T. 15, № 38. — C. 1902811. — URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/smll.201902811>.
28. In-Plane Photonic Crystal Devices using Fano Resonances / Dagmawi Bekele, Yi Yu, Kresten Yvind, Jesper Mork // *Laser & Photonics Reviews*. — 2019. — T. 13, № 12. — C. 1900054. — URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/lpor.201900054>.
29. Monolithic nonlinear pulse compressor on a silicon chip / Dawn T. H. Tan, Pang C. Sun, Yeshaiah Fainman // *Nature Communications*. — 2010. — T. 1, № 1. — C. 116. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms1113>.
30. Silicon slot waveguide Fano resonator / Arijit Bera, Markku Kuittinen, Seppo Honkanen, Matthieu Roussey // *Opt. Lett.* — 2018. — T. 43, № 15. — C. 3489–3492.

31. Signal reshaping and noise suppression using photonic crystal Fano structures / Dagmawi A. Bekele, Yi Yu, Hao Hu и др. // *Opt. Express*. — 2018. — Т. 26, № 15. — С. 19596–19605.
32. Оптические свойства фотонных кристаллов, заполненных металлическими квантовыми точками / Горелик В.С., Фриман А.В. // *Краткие сообщения по физике*. — 2011. — Т. 4. — С. 23.
33. Оптические свойства фотонных кристаллов, заполненных парами йода / Горбачевич А.А., Горелик В.С., Фриман А.В. // *Краткие сообщения по физике*. — 2013. — Т. 2. — С. 28.
34. Дисперсия электромагнитных волн глобулярного резонансного фотонного кристалла с порами, заполненными $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ / Горелик В.С., Фриман А.В. // *Неорганические материалы*. — 2013. — Т. 6. — С. 615.
35. Двумерный гексагональный фотонный кристалл с новой геометрией элемента / Горбачевич А.А., Фриман А.В., Горелик В.С. // *Краткие сообщения по физике*. — 2014. — Т. 6. — С. 37.
36. Finite-Difference Time-Domain technique for gyroelectric material structure simulation using recursive convolutions in polarization / A. V. Friman, A. A. Gorbachevich, P. P. Sverbil // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. — 2017. — Т. 65, № 5. — С. 2745–2747.
37. Subpicosecond light pulses induced by Fano antiresonance buildup process / A. V. Friman, N. M. Shubin, V. V. Kapaev, A. A. Gorbachevich // *Opt. Express*. — 2020. — Т. 28, № 10. — С. 14590–14604.
38. Bound states in the continuum in asymmetrical quantum-mechanical and electromagnetic waveguides / N. M. Shubin, A. V. Friman, V. V. Kapaev, A. A. Gorbachevich // *Phys. Rev. B*. — 2021. — Т. 104. — С. 125414.
39. Перспективы создания приборов на основе фотонных кристаллов. / Фриман А.В. // Сборник трудов V Всероссийской молодежной конференции по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики. — Москва: 2013. — С. 133.
40. Особенности зонной структуры гексагональных планарных фотонных кристаллов / Александр 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.

41. Research of band structure features of hexagonal planar photonic crystals. / Фриман А.В. // International Conference Micro- and Nanoelectronics with the Extended Session 2014. Book of ABSTRACTS. — Moscow – Zvenigorod, Russia: 2014. — С. P1–16.
42. Fano resonances and exceptional points in waveguides and quantum conductors / Alexander Gorbatshevich, Nikolay Shubin, Vladimir Kapaev, Alexander 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.
43. Bound states in the continuum in asymmetric waveguides: role of proportionate coupling / Nikolay Shubin, Vladimir Kapaev, Alexander Friman, Alexander Gorbatshevich // 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.
44. Low Frequency Signal Generation during Fano Resonance Build-up Process / Aleksandr Friman, Nikolay Shubin, Vladimir Kapaev, Alexander Gorbatshevich // 2021 International Applied Computational Electromagnetics Society Symposium (ACES). — 2021. — С. 1–2. — URL: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9528558>.
45. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern / Felix Bloch // *Zeitschrift für physik*. — 1929. — Т. 52, № 7. — С. 555–600.
46. Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques / G. Floquet // *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure*. — 1883. — Vol. 2e série, 12. — Pp. 47–88. — URL: <http://www.numdam.org/articles/10.24033/asens.220/>.
47. Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics / E. Yablonovitch // *Physical Review Letters*. — 1987. — Т. 58, № 20. — С. 2059.
48. Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms / E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, K. M. Leung // *Phys. Rev. Lett.* — 1991. — Т. 67. — С. 2295–2298.
49. Two-dimensional photonic-bandgap structures operating at near-infrared wavelengths / Thomas F Krauss, M Richard, Stuart Brand // *Nature*. — 1996. — Т. 383, № 6602. — С. 699–702.

50. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems / Kurt Busch, Sajeev John // *Phys. Rev. E*. — 1998. — T. 58. — C. 3896–3908. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.58.3896>.
51. On-chip natural assembly of silicon photonic bandgap crystals / Yurii A Vlasov, Xiang-Zheng Bo, James C Sturm, David J Norris // *Nature*. — 2001. — T. 414, № 6861. — C. 289–293.
52. Advances in colloidal assembly: the design of structure and hierarchy in two and three dimensions / Nicolas Vogel, Markus Retsch, Charles-Andre Fustin и др. // *Chemical reviews*. — 2015. — T. 115, № 13. — C. 6265–6311.
53. Weak photonic band gap effect on the fluorescence lifetime in three-dimensional colloidal photonic crystals / Zhi-Yuan Li, Zhao-Qing Zhang // *Phys. Rev. B*. — 2001. — Mar. — T. 63. — C. 125106. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.125106>.
54. Photo and Cathodoluminescence Studies of ZnO-Filled Opal Nanocomposites / Saidislam Kurbanov, Youngsin Park, Taewon Kang, Tae Won Kim // *Journal of the Korean Physical Society*. — 2007. — 03. — T. 50. — C. 617–621.
55. Дисперсия оптических характеристик синтетических опаловых матриц, заполненных SiO₂-золями с оксидом европия / ВС Горелик, СН Ивичева, ЮФ Каргин, ВВ Филатов // *Неорганические материалы*. — 2013. — Т. 49, № 7. — С. 733–733.
56. Понижение порога вынужденного комбинационного рассеяния света в комбинационно-активных средах, введенных в поры глобулярного фотонного кристалла / Я Альмохамед, Р Бариль, Александр Иванович Водчиц и др. // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 2015. — Т. 101, № 6. — С. 399–404.
57. Metallic photonic crystals with strong broadband absorption at optical frequencies over wide angular range / Georgios Veronis, Robert W Dutton, Shanhui Fan // *Journal of applied physics*. — 2005. — T. 97, № 9. — C. 093104.
58. Fano resonances in nanoscale structures / Andrey E. Miroshnichenko, Sergej Flach, Yuri S. Kivshar // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — T. 82. — C. 2257–2298.
59. Fano Resonances in Optics and Microwaves / Eugene Kamenetskii, Almas Sadreev, Andrey Miroshnichenko. — Springer, 2018.

60. High-quality-factor multiple Fano resonances for refractive index sensing / Yuebian Zhang, Wenwei Liu, Zhancheng Li и др. // *Opt. Lett.* — 2018. — Т. 43, № 8. — С. 1842–1845. — URL: <http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-43-8-1842>.
61. Fano-resonant silicon photonic crystal slab for efficient third-harmonic generation / Guoxun Ban, Cheng Gong, Chaobiao Zhou и др. // *Opt. Lett.* — 2019. — Т. 44, № 1. — С. 126–129. — URL: <http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-44-1-126>.
62. Fano resonances in a multimode waveguide coupled to a high-Q silicon nitride ring resonator / Dapeng Ding, Michiel J. A. de Dood, Jared F. Bauters и др. // *Opt. Express.* — 2014. — Т. 22, № 6. — С. 6778–6790.
63. Symmetry breaking for transmission in a photonic waveguide coupled with two off-channel nonlinear defects / Evgeny Bulgakov, Konstantin Pichugin, Almas Sadreev // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Т. 83.
64. Microcavities / A. Kavokin, J.J. Baumberg, G. Malpuech, F.P. Laussy. Series on Semiconductor Science and Technology. — OUP Oxford, 2011.
65. Resonant tunneling in a quantum waveguide: Effect of a finite-size attractive impurity / Chang Sub Kim, Arkady M. Satanin, Yong S. Joe, Ronald M. Cosby // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Т. 60. — С. 10962–10970. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.10962>.
66. Unified theory of resonances and bound states in the continuum in Hermitian tight-binding models / A. A. Gorbatsevich, N. M. Shubin // *Physical Review B.* — 2017. — Т. 96, № 20. — С. 205441.
67. Photonic bound states in the continuum: from basics to applications / Shaimaa I Azzam, Alexander V Kildishev // *Advanced Optical Materials.* — 2021. — Т. 9, № 1. — С. 2001469.
68. Bound states in the continuum / Chia Wei Hsu, Bo Zhen, A.Douglas Stone и др. // *Nature Reviews Materials.* — 2016. — Т. 1. — С. 16048.
69. Interference traps waves in open system: Bound states in the continuum / Almas F Sadreev // *Reports on Progress in Physics.* — 2021. — URL: <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6633/abefb9>.
70. Über merkwürdige diskrete Eigenwerte. Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen / J. von Neuman, E. Wigner // *Physikalische Zeitschrift.* — 1929. — Т. 30. — С. 467–470.

71. Interfering resonances and bound states in the continuum / H. Friedrich, D. Wintgen // *Phys. Rev. A*. — 1985. — T. 32. — C. 3231–3242. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.32.3231>.
72. Bound states in the continuum in open quantum billiards with a variable shape / Almas F. Sadreev, Evgeny N. Bulgakov, Ingrid Rotter // *Phys. Rev. B*. — 2006. — T. 73. — C. 235342. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.235342>.
73. Asymmetric Metasurfaces with High- Q Resonances Governed by Bound States in the Continuum / Kirill Koshelev, Sergey Lepeshov, Mingkai Liu и др. // *Phys. Rev. Lett.* — 2018. — T. 121. — C. 193903. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.193903>.
74. Ghost Fano resonance in a double quantum dot molecule attached to leads / M. L. Ladrón de Guevara, F. Claro, Pedro A. Orellana // *Phys. Rev. B*. — 2003. — T. 67. — C. 195335. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.67.195335>.
75. Electronic transport through a parallel-coupled triple quantum dot molecule: Fano resonances and bound states in the continuum / M. L. Ladrón de Guevara, P. A. Orellana // *Phys. Rev. B*. — 2006. — T. 73. — C. 205303. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.205303>.
76. Bound states with orbital angular momentum in the continuum of cylindrical non-axisymmetric waveguide / A.A. Lyapina, A.S. Pilipchuk, A.F. Sadreev // *Annals of Physics*. — 2018. — T. 396. — C. 56 – 70. — URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000349161830157X>.
77. Controlling multipolar radiation with symmetries for electromagnetic bound states in the continuum / Thomas Lepetit, Boubacar Kanté // *Phys. Rev. B*. — 2014. — T. 90. — C. 241103. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.241103>.
78. Bound states in the continuum in symmetric and asymmetric photonic crystal slabs / Anton I. Ovcharenko, Cédric Blanchard, Jean-Paul Hugonin, Christophe Sauvan // *Phys. Rev. B*. — 2020. — T. 101. — C. 155303. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.155303>.
79. Photonic Bound States in the Continuum: From Basics to Applications / Shaimaa I. Azzam, Alexander V. Kildishev // *Advanced Optical Materials*. — 2021. — T. 9, № 1. — C. 2001469. — URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adom.202001469>.

80. Fano resonances in photonic crystal slabs near optical bound states in the continuum / Cédric Blanchard, Jean-Paul Hugonin, Christophe Sauvan // *Phys. Rev. B.* — 2016. — T. 94. — C. 155303. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.155303>.
81. Lasing action from photonic bound states in continuum / Ashok Kodigala, Thomas Lepetit, Qing Gu и др. // *Nature.* — 2017. — Jan. — T. 541, № 7636. — C. 196–199. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature20799>.
82. Fano resonances and bound states in the continuum in a simple phononic system / Seiji Mizuno // *Applied Physics Express.* — 2019. — T. 12, № 3. — C. 035504. — URL: <https://doi.org/10.7567/1882-0786/ab032f>.
83. Photonic integrated circuits with bound states in the continuum / Zejie Yu, Xiang Xi, Jingwen Ma и др. // *Optica.* — 2019. — T. 6, № 10. — C. 1342–1348. — URL: <http://www.osapublishing.org/optica/abstract.cfm?URI=optica-6-10-1342>.
84. Bound states in the continuum and high-Q resonances supported by a dielectric ridge on a slab waveguide / Evgeni A. Bezus, Dmitry A. Bykov, Leonid L. Doskolovich // *Photon. Res.* — 2018. — T. 6, № 11. — C. 1084–1093. — URL: <http://www.osapublishing.org/prj/abstract.cfm?URI=prj-6-11-1084>.
85. Ultrasensitive hyperspectral imaging and biodetection enabled by dielectric metasurfaces / Filiz Yesilkoy, Eduardo R. Arvelo, Yasaman Jahani и др. // *Nature Photonics.* — 2019. — Jun. — T. 13, № 6. — C. 390–396. — URL: <https://doi.org/10.1038/s41566-019-0394-6>.
86. One-dimensional photonic bound states in the continuum / P. S. Pankin, B.-R. Wu, J.-H. Yang и др. // *Communications Physics.* — 2020. — May. — T. 3, № 1. — C. 91. — URL: <https://doi.org/10.1038/s42005-020-0353-z>.
87. Metasurface Engineering through Bound States in the Continuum / Anton S. Kupriianov, Yi Xu, Andrey Sayanskiy и др. // *Phys. Rev. Applied.* — 2019. — T. 12. — C. 014024. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.12.014024>.
88. Spectral and temporal evidence of robust photonic bound states in the continuum on terahertz metasurfaces / Diego R. Abujetas, Niels van Hoof, Stan ter Huurne и др. // *Optica.* — 2019. — T. 6, № 8. — C. 996–1001. — URL: <http://www.osapublishing.org/optica/abstract.cfm?URI=optica-6-8-996>.

89. Bound states in the continuum in quantum-dot pairs / Gonzalo Ordonez, Kyungsun Na, Sungyun Kim // *Phys. Rev. A*. — 2006. — T. 73. — C. 022113. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.73.022113>.
90. Floquet-Hubbard bound states in the continuum / Giuseppe Della Valle, Stefano Longhi // *Phys. Rev. B*. — 2014. — T. 89. — C. 115118. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.115118>.
91. Experimental Observation of Optical Bound States in the Continuum / Yonatan Plotnik, Or Peleg, Felix Dreisow и др. // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — T. 107. — C. 183901.
92. Localized states in continuum in low-dimensional systems / Khee-Kyun Voo, C. S. Chu // *Phys. Rev. B*. — 2006. — T. 74. — C. 155306. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.155306>.
93. Compact Surface Fano States Embedded in the Continuum of Waveguide Arrays / Steffen Weimann, Yi Xu, Robert Keil и др. // *Phys. Rev. Lett.* — 2013. — T. 111. — C. 240403. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.240403>.
94. Creation and manipulation of bound states in the continuum with lasers: Applications to cold atoms and molecules / Bimalendu Deb, G. S. Agarwal // *Phys. Rev. A*. — 2014. — T. 90. — C. 063417. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.063417>.
95. Helical bound states in the continuum of the edge states in two dimensional topological insulators / Vladimir A Sablikov, Aleksei A Sukhanov // *Physics Letters A*. — 2015. — T. 379, № 30-31. — C. 1775–1779.
96. Optically tunable bound states in the continuum / Yingyue Boretz, Gonzalo Ordonez, Satoshi Tanaka, Tomio Petrosky // *Phys. Rev. A*. — 2014. — T. 90. — C. 023853. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.023853>.
97. Resonance continuum coupling in high-permittivity dielectric metamaterials / Thomas Lepetit, Eric Akmansoy, Jean-Pierre Ganne, Jean-Michel Lourtioz // *Phys. Rev. B*. — 2010. — T. 82. — C. 195307. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.195307>.
98. Complex eigenvalues in scattering theory / Rudolf Ernst Peierls // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*. — 1959. — T. 253, № 1272. — C. 16–36.

99. Topological properties of bound states in the continuum in geometries with broken anisotropy symmetry / Samyabrata Mukherjee, Jordi Gomis-Bresco, Pilar Pujol-Closa и др. // *Phys. Rev. A*. — 2018. — Т. 98. — С. 063826. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.98.063826>.
100. Non-Hermitian Hamiltonians and Quantum Transport in Multi-Terminal Conductors / Nikolay M. Shubin, Alexander A. Gorbatsevich, Gennadiy Ya. Krasnikov // *Entropy*. — 2020. — Т. 22, № 4. — URL: <https://www.mdpi.com/1099-4300/22/4/459>.
101. Observing the ultrafast buildup of a Fano resonance in the time domain / A. Kaldun, A. Blättermann, V. Stooß и др. // *Science*. — 2016. — Т. 354, № 6313. — С. 738–741.
102. Buildup of Fano resonances in the time domain in a double quantum dot Aharonov-Bohm interferometer / Pei-Yun Yang, Wei-Min Zhang // *Phys. Rev. B*. — 2018. — Т. 97. — С. 054301.
103. Dynamics and instabilities of nonlinear Fano resonances in photonic crystals / A. Miroshnichenko, Y. Kivshar, R. Iliew и др. // 2007 European Conference on Lasers and Electro-Optics and the International Quantum Electronics Conference. — 2007. — June. — С. 1–1.
104. Fano resonance control in a photonic crystal structure and its application to ultrafast switching / Yi Yu, Mikkel Heuck, Hao Hu и др. // *Applied Physics Letters*. — 2014. — Т. 105, № 6. — С. 061117.
105. Grating-Assisted Fiber to Chip Coupling for SOI Photonic Circuits / Siddharth Nambiar, Purnima Sethi, Shankar Kumar Selvaraja // *Applied Sciences*. — 2018. — Т. 8, № 7. — URL: <https://www.mdpi.com/2076-3417/8/7/1142>.
106. Disorder-induced Fano resonance in 1D photonic crystals / A. K. Samusev, Alexander B. Khanikaev, Mikhail F. Limonov, Mikhail V. Rybin // *2011 International Quantum Electronics Conference (IQEC) and Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO) Pacific Rim incorporating the Australasian Conference on Optics, Lasers and Spectroscopy and the Australian Conference on Optical Fibre Technology*. — 2011. — С. 1041–1043.
107. Light-tunable Fano resonance in metal-dielectric multilayer structures / S. Hayashi, D. V. Nesterenko, A. Rahmouni и др. // *Scientific Reports*. — 2016. — Т. 6. — С. 33144.

108. Characterization of 1D photonic crystal nanobeam cavities using curved microfiber / B. C. Richards, J. Hendrickson, J. D. Olitzky и др. // *Opt. Express*. — 2010. — Т. 18, № 20. — С. 20558–20564.
109. Resonance induced by a bound state in the continuum in a two-level nonlinear Fano-Anderson model / Evgeny N. Bulgakov, Almas F. Sadreev // *Phys. Rev. B*. — 2009. — Т. 80. — С. 115308.
110. All-optical diode based on dipole modes of Kerr microcavity in asymmetric L-shaped photonic crystal waveguide / Evgeny Bulgakov, Almas Sadreev // *Optics letters*. — 2014. — Т. 39. — С. 1787–90.
111. Optical Diode Based on Two-Dimensional Photonic Crystal / Han Ye, Yumin Liu, Zhongyuan Yu. — 2018.
112. All-optical light storage in bound states in the continuum and release by demand / E. N. Bulgakov, K. N. Pichugin, A. F. Sadreev // *Opt. Express*. — 2015. — Т. 23, № 17. — С. 22520–22531.
113. Compact Silicon-on-Insulator Dual-Microring Resonator Optimized for Sensing / Baoqing Su, Chunxia Wang, Qiang Kan, Hongda Chen // *J. Lightwave Technol.* — 2011. — Т. 29, № 10. — С. 1535–1541. — URL: <http://jlt.osa.org/abstract.cfm?URI=jlt-29-10-1535>.
114. Essays on Automatics / Leonardo Torres y Quevedo. — Springer, Berlin, Heidelberg, 1982.
115. OpenCL Programming by Example / R. Banger, K. Bhattacharyya. — Packt Publishing, 2013.
116. Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large Scale Computing Capabilities / Gene M. Amdahl // Proceedings of the April 18-20, 1967, Spring Joint Computer Conference. — AFIPS '67 (Spring). — ACM, 1967. — С. 483–485.
117. Reevaluating Amdahl's Law / John L. Gustafson // *Commun. ACM*. — 1988. — Т. 31, № 5. — С. 532–533.
118. Using OpenMP: portable shared memory parallel programming / Barbara Chapman, Gabriele Jost, Ruud Van Der Pas. — MIT press, 2008. — Т. 10.
119. Using MPI: portable parallel programming with the message-passing interface / William Gropp, William D Gropp, Ewing Lusk и др. — MIT press, 1999. — Т. 1.
120. Сравнительный анализ вариантов развёртывания программных платформ для высокопроизводительных вычислений / Аладышев О.С., Баранов А.В., Ионин Р.П. и др. // *Вестник УГАТУ*. — 2014. — Т. 18, № 3. — С. 295–300.

121. Parallel computing experiences with CUDA / Michael Garland, Scott Le Grand, John Nickolls и др. // *IEEE micro*. — 2008. — Т. 28, № 4. — С. 13–27.
122. AMD Radeon RX Vega 64. — <https://www.techpowerup.com/gpu-specs/radeon-rx-vega-64.c2871>. — 2017. — дата обращения: 23.06.2021.
123. Intel Core i5-6600K Processor. — <https://ark.intel.com/content/www/us/en/ark/products/88191/intel-core-i5-6600k-processor-6m-cache-up-to-3-90-ghz.html>. — 2015. — дата обращения: 23.06.2021.
124. MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method / Ardavan F. Oskooi, David Roundy, Mihai Ibanescu и др. // *Computer Physics Communications*. — 2010. — Т. 181. — С. 687–702.
125. Reordering edges and elements in unstructured meshes to reduce execution time in Finite Element Computations / Gerardo Ortigoza, Alberto Lorandi Medina, Alfonso Reynoso // *Nova Scientia*. — 2018. — Т. 10. — С. 263.
126. Models of near-field spectroscopic studies: comparison between Finite-Element and Finite-Difference methods / Thomas Grosjes, Alexandre Vial, Dominique Barchiesi // *Opt. Express*. — 2005. — Т. 13, № 21. — С. 8483–8497. — URL: <http://www.opticsexpress.org/abstract.cfm?URI=oe-13-21-8483>.
127. Computational Electrodynamics: The Finite - Difference Time - Domain Method / A. Taflove. Antennas and Propagation Library. — Artech House, Incorporated, 1995.
128. Epitaxial GaAs Films Deposited by Vacuum Evaporation / John E. Davey, Titus Pankey // *Journal of Applied Physics*. — 1968. — Т. 39, № 4. — С. 1941–1948.
129. Спектроскопия запрещенной фотонной зоны в синтетических опалах / А.В. Барышев, А.А. Каплянский, В.А. Кособукин и др. // *Физика Твёрдого Тела*. — 2004. — Т. 46, № 7. — С. 1291.
130. Spectral properties of opal-based photonic crystals having a SiO₂ matrix / A. Reynolds, F. López-Tejeira, D. Cassagne и др. // *Phys. Rev. B*. — 1999. — Oct. — Т. 60. — С. 11422–11426. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.11422>.
131. Оптические волны в кристаллах / Юх П. Ярив А. — Москва: «Мир», 1987. — С. 616.

132. Филатов В. В. Спектры электромагнитных и акустических волн в глобулярных фотонных кристаллах: Диссертация на соискание степени кандидата физико-математических наук / Московский Государственный Технический Университет имени Н.Э.Баумана. — 2013.
133. Физическая оптика / Ахматов С.А., Никитин С.Ю. — Изд-во МГУ; Наука, 2004. — С. 656.
134. Optical and Microwave-Optical Experiments in Ruby / Т. Н. Maiman // *Phys. Rev. Lett.* — 1960. — Т. 4. — С. 564–566.
135. Плавится ли иод в открытом сосуде? / В.Н. Витер // *Химия и Химики*. — 2009. — № 9. — С. 98–107.
136. Spectroscopic Constants and Vibrational Assignment for the B $^3\Pi_{0_u}$ State of Iodine / J. I. Steinfeld, R. N. Zare, L. Jones и др. // *The Journal of Chemical Physics*. — 1965. — Т. 42. — С. 25–33.
137. Wave Propagation and Group Velocity / L. Brillouin, H.S.W. Massey. Pure and applied physics. — Elsevier Science, 2013.
138. Slow wave phenomena in photonic crystals / A. Figotin, I. Vitebskiy // *Laser & Photonics Reviews*. — 2011. — Т. 5, № 2. — С. 201–213.
139. Group velocity matching in high-order harmonic generation driven by mid-infrared lasers / C Hernández-García, T Popmintchev, M M Murnane и др. // *New Journal of Physics*. — 2016. — Т. 18, № 7. — С. 073031.
140. Amplification of solitary optical waves in fibers with positive group velocity dispersion / Todor N. Arabadzhiev, Ivan M. Uzunov // *Central European Journal of Physics*. — 2007. — Mar. — Т. 5, № 1. — С. 62–69.
141. Limits of slow light in photonic crystals / Jesper Goor Pedersen, Sanshui Xiao, Niels Asger Mortensen // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Oct. — Т. 78. — С. 153101. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.153101>.
142. Photonic Crystals. Molding the Flow of Light / John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, Robert D. Meade. — Princeton NJ: Princeton University Press, 2008. — С. 286.
143. Optical properties of the (3.4.6.4) hexagonal Archimedean photonic crystal / D. Jovanovic, R. Gajic, K. Hingerl // *Acta Physica Polonica A*. — 2009. — Т. 116, № 4. — С. 642–644.

144. Analysis of the filling pattern dependence of the photonic bandgap for two-dimensional systems / R. Padjen, J.M. Gerard, J.Y. Marzin // *Journal of Modern Optics*. — 1994. — Т. 41, № 2. — С. 295–310.
145. Handbook of Optics, Third Edition Volume IV: Optical Properties of Materials, Nonlinear Optics, Quantum Optics (set) / M. Bass, C. DeCusatis, J. Enoch и др. Handbook of Optics. — New York: McGraw-Hill Education, 2009. — С. 1152.
146. Sub-10-nm half-pitch electron-beam lithography by using poly(methyl methacrylate) as a negative resist / Huigao Duan, Donald Winston, Joel K. W. Yang и др. // *J. Vac. Sci. Technol. B*. — 2010. — Т. 28, № 6. — С. 58–62.
147. A versatile pattern generator for high-resolution electron-beam lithography / JC Nabity, MN Wybourne // *Review of scientific instruments*. — 1989. — Т. 60, № 1. — С. 27–32.
148. Three-directional structural characterization of hexagonal packed nanoparticles by hexagonal digital moiré method / Qinghua Wang, Satoshi Kishimoto, Yusuke Yamauchi // *Opt. Lett.* — 2012. — Т. 37, № 4. — С. 548–550.
149. Critical review on photoresists / SA Ekhurutomwen, Samuel P Sawan // *Polymers in Optics: Physics, Chemistry, and Applications: A Critical Review* / International Society for Optics and Photonics. — Т. 10285. — 1996. — С. 102850B.
150. Вейвлеты и их использование / Игорь Михайлович Дрёмин, Олег Викторович Иванов, Владимир Александрович Нечитайло // *Успехи физических наук*. — 2001. — Т. 171, № 5. — С. 465–501.
151. Fano resonances in photonics / Mikhail F Limonov, Mikhail V Rybin, Alexander N Poddubny, Yuri S Kivshar // *Nature Photonics*. — 2017. — Т. 11, № 9. — С. 543–554.
152. Design of all-optical XOR and XNOR logic gates based on Fano resonance in plasmonic ring resonators / Marziyeh Moradi, Mohammad Danaie, Ali Asghar Orouji // *Optical and Quantum Electronics*. — 2019. — Т. 51, № 5. — С. 1–18.
153. Optical bio-chemical sensors based on whispering gallery mode resonators / Ya-nan Zhang, Tianmin Zhou, Bo Han и др. // *Nanoscale*. — 2018. — Т. 10, № 29. — С. 13832–13856.
154. ВОЛНОВОДНАЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКА / АА Горбачевич, ВВ Капаев // *Микроэлектроника*. — 2007. — Т. 36, № 1. — С. 3–16.

155. Harmonic inversion of time signals and its applications / Vladimir A. Mandelshtam, Howard S. Taylor // *The Journal of Chemical Physics*. — 1997. — T. 107, № 17. — С. 6756–6769.
156. Extraction, through filter-diagonalization, of general quantum eigenvalues or classical normal mode frequencies from a small number of residues or a short-time segment of a signal. I. Theory and application to a quantum-dynamics model / Michael R. Wall, Daniel Neuhauser // *The Journal of Chemical Physics*. — 1995. — T. 102, № 20. — С. 8011–8022.
157. Основы теории оптических микрорезонаторов / Городецкий М.Л. — Отдел оперативной печати Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010.
158. Spin photonics in 3D whispering gallery mode resonators / Farhad Khosravi, Cristian L. Cortes, Zubin Jacob // *Opt. Express*. — 2019. — T. 27, № 11. — С. 15846–15855. — URL: <http://www.osapublishing.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-27-11-15846>.
159. Controlling a whispering-gallery-doublet-mode avoided frequency crossing: Strong coupling between photon bosonic and spin degrees of freedom / Maxim Goryachev, Warrick G Farr, Daniel L Creedon, Michael E Tobar // *Physical Review A*. — 2014. — T. 89, № 1. — С. 013810.
160. Waves and fields in optoelectronics / Hermann A Haus. — Prentice-Hall,, 1984.
161. Coupling of modes analysis of resonant channel add-drop filters / C. Manolatou, M.J. Khan, S. Fan и др. // *IEEE Journal of Quantum Electronics*. — 1999. — T. 35, № 9. — С. 1322–1331.
162. Transfer of light waves in optical waveguides via a continuum / Stefano Longhi // *Physical Review A*. — 2008. — T. 78, № 1. — С. 013815.
163. Bound states in the continuum in graphene quantum dot structures / JW González, M Pacheco, L Rosales, PA Orellana // *EPL (Europhysics Letters)*. — 2010. — T. 91, № 6. — С. 66001.
164. Watt-class high-power, high-beam-quality photonic-crystal lasers / Kazuyoshi Hirose, Yong Liang, Yoshitaka Kurosaka и др. // *Nature photonics*. — 2014. — T. 8, № 5. — С. 406.
165. Symmetry-protected mode coupling near normal incidence for narrow-band transmission filtering in a dielectric grating / Justin M Foley, Steven M Young, Jamie D Phillips // *Physical Review B*. — 2014. — T. 89, № 16. — С. 165111.

166. Enabling enhanced emission and low-threshold lasing of organic molecules using special Fano resonances of macroscopic photonic crystals / Bo Zhen, Song-Liang Chua, Jeongwon Lee и др. // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. — 2013. — Т. 110, № 34. — С. 13711–13716.
167. Trapping light in open plasmonic nanostructures / Mário G. Silveirinha // *Phys. Rev. A*. — 2014. — Т. 89. — С. 023813.
168. Trapped mode frequencies embedded in the continuous spectrum / D. V. Evans, C. M. Linton, F. Ursell // *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*. — 1993. — Т. 46, № 2. — С. 253–274.
169. Robust bound state in the continuum in a nonlinear microcavity embedded in a photonic crystal waveguide / EN Bulgakov, AF Sadreev // *Optics letters*. — 2014. — Т. 39, № 17. — С. 5212–5215.
170. Observation of surface states with algebraic localization / Giacomo Corrielli, Giuseppe Della Valle, Andrea Crespi и др. // *Physical review letters*. — 2013. — Т. 111, № 22. — С. 220403.
171. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media / K. Yee // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. — 1966. — Т. 14. — С. 302–307.
172. Numerical Solution of Steady-State Electromagnetic Scattering Problems Using the Time-Dependent Maxwell's Equations / A. Taflove, M Brodwin // *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. — 1975. — Т. 23, № 8. — С. 623–630.
173. Computation of the Electromagnetic Fields and Induced Temperatures Within a Model of the Microwave-Irradiated Human Eye / A. Taflove, M. E. Brodwin // *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. — 1975. — Nov. — Т. 23, № 11. — С. 888–896.
174. A Three-Dimensional Finite-Difference Solution of the External Response of an Aircraft to a Complex Transient EM Environment: Part I-The Method and Its Implementation / K. S. Kunz, K. Lee // *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*. — 1978. — May. — Т. EMC-20, № 2. — С. 328–333.
175. THREDE: A Free-Field EMP Coupling and Scattering Code / R. Holland // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. — 1977. — Dec. — Т. 24, № 6. — С. 2416–2421.

176. Absorbing Boundary Conditions for the Finite-Difference Approximation of the Time-Domain Electromagnetic-Field Equations / G. Mur // *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*. — 1981. — Nov. — T. EMC-23, № 4. — C. 377–382.
177. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves / Jean-Pierre Berenger // *Journal of Computational Physics*. — 1994. — T. 114, № 2. — C. 185 – 200. — URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711594>.
178. Ultrawideband absorbing boundary condition for termination of waveguiding structures in FD-TD simulations / C. E. Reuter, R. M. Joseph, E. T. Thiele и др. // *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*. — 1994. — Oct. — T. 4, № 10. — C. 344–346.
179. Numerical solutions of Maxwell's equations for nonlinear-optical pulse propagation / Cheryl V. Hile, William L. Kath // *J. Opt. Soc. Am. B*. — 1996. — T. 13, № 6. — C. 1135–1145. — URL: <http://josab.osa.org/abstract.cfm?URI=josab-13-6-1135>.
180. Direct time integration of Maxwell's equations in nonlinear dispersive media for propagation and scattering of femtosecond electromagnetic solitons / Peter M. Goorjian, Allen Taflove // *Opt. Lett.* — 1992. — T. 17, № 3. — C. 180–182. — URL: <http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-17-3-180>.
181. Transient magnetized plasma as an optical element for high power laser pulses / Nobuhiko Nakanii, Tomonao Hosokai, Kenta Iwasa и др. // *Phys. Rev. ST Accel. Beams*. — 2015. — T. 18. — C. 021303.
182. Single-Shot Femtosecond Electron Diffraction with Laser-Accelerated Electrons: Experimental Demonstration of Electron Pulse Compression / Shigeki Tokita, Masaki Hashida, Shunsuke Inoue и др. // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — T. 105, № 21. — C. 215004.
183. Magnetized Plasma for Reconfigurable Subdiffraction Imaging / Shuang Zhang, Yi Xiong, Guy Bartal и др. // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — T. 106. — C. 243901.
184. Satellite Technology: Principles and Applications / A.K. Maini, V. Agrawal. — John Wiley & Sons, 2007.
185. Finite-difference time-domain analysis of gyrotropic media. I. Magnetized plasma / F. Hunsberger, R. Luebbers, K. Kunz // *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*. — 1992. — Dec. — T. 40, № 12. — C. 1489–1495.

186. Runge-Kutta exponential time differencing FDTD method for anisotropic magnetized plasma / S. Liu, S. Liu // *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*. — 2008. — T. 7. — C. 306–309.
187. FDTD Simulation for Wave Propagation in Anisotropic Dispersive Material Based on Bilinear Transform / X. Xi, Z. Li, J. Liu, J. Zhang // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. — 2015. — Nov. — T. 63, № 11. — C. 5134–5138.
188. A Simple FDTD Algorithm for Simulating EM-Wave Propagation in General Dispersive Anisotropic Material / A. A. Al-Jabr, M. A. Alsunaidi, T. Ng, B. S. Ooi // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. — 2013. — March. — T. 61, № 3. — C. 1321–1326.
189. FDTD implementation for magnetoplasma medium using exponential time differencing / S. J. Huang, F. Li // *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*. — 2005. — March. — T. 15, № 3. — C. 183–185.
190. Propagation of electromagnetic waves in plasma / V.L. Ginzburg. Russian monographs and texts on advanced mathematics and physics. — Gordon and Breach, 1962.
191. Introduction to Robotics / T. Bajd, M. Mihelj, M. Munih. — Springer Netherlands, 2013.
192. Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference, and diffraction of light / M. Born, E. Wolf. — Pergamon Press, 1959.

Список рисунков

1.1	Рассчитанные дисперсионные кривые электромагнитного излучения в опале без использования одномерного приближения. Адаптация из работы [53].	11
1.2	Дисперсионные кривые электромагнитного излучения в W1 волноводе при ТМ-поляризации. Серым цветом показаны разрешенные зоны фотонного кристалла. Адаптация из работы [12].	13
1.3	Сравнение нагрузки на вычислительное ядро при параллелизации по Амдалу и Густавсону. Адаптировано из [115]	21
2.1	Дисперсионные кривые А) фолдинга среды нанопорошка $Al_2O_3 : Cr^{3+}$; Одномерного фотонного кристалла, заполненного $Al_2O_3 : Cr^{3+}$, соответствующего: Б) D=270 нм В) D=315 нм Г) D=340 нм в направлении [111].	30
2.2	Дисперсионные кривые ФК с вставками А) вещества с $\varepsilon = -4$, Б) металла по модели Друде. Вертикальная синяя линия обозначает зону отрицательных значений $\varepsilon\omega$	31
2.3	Дисперсионные кривые электромагнитного излучения в направлении [111] фотонного кристалла, заполненного парами иода и соответствующего: А) D=250 нм, Б) D=300 нм, В) D=340 нм.	33
2.4	Групповая скорость в направлении [111] электромагнитных волн в фотонном кристалле, заполненном $Al_2O_3 : Cr^{3+}$, соответствующим различным диаметрам глобул: а) 270 нм б) 315 нм, стрелкой показано состояние, индуцированное резонансом диэлектрической проницаемости с) 340 нм.	36
2.5	Групповая скорость в направлении [111] электромагнитных волн в фотонном кристалле, заполненном I_2 , соответствующим различных диаметров глобул: А) 250 нм Б) 300 нм В) 350 нм.	37
2.6	Сравнение двумерных гексагональных структур.	39
2.7	Сравнение ширины запрещённых зон двумерных ФК структур с круглыми и гексагональными отверстиями.	39
2.8	Сравнение дисперсионных двумерных ФК структур с круглыми и гексагональными отверстиями.	40

2.9	Схема построения планарного фотонного кристалла при помощи набора прямых линий. Источник [148].	41
2.10	Структура гибридного волновода. Черным цветом показан полупроводник с $\varepsilon = 12$, белым цветом – воздух. Верхняя и нижняя границы отражающие.	43
2.11	Выходной мощности из А) всей ширины гибридной структуры с отражающими граничными условиями Б,В) центральной части гибридного волновода с отражающими граничными условиями Г) центральной части гибридного волновода с отражающими и поглощающими граничными условиями	44
2.12	Распределение электрического поля E_z возле выходной (правой) границы гибридного волновода при длине волны 1.5 мкм при линейной конфигурации источника поля: А, Б, В) Отражающие граничные условия сверху и снизу в моменты времени 350 фс, 550 фс, 3000 фс; Г, Д, Е) Поглощающие граничные условия сверху и снизу в моменты времени 350 фс, 550 фс, 3000 фс;	45
2.13	Зависимость выходной мощности гибридного волновода от длины волны падающего излучения. Точками на (А) показано значение выходной мощности в момент провала пропускания.	46
3.1	Зависимость интенсивности источников от длины волны.	51
3.2	Схема рассчитываемой структуры двумерного волновода. PML – поглощающие граничные условия. Reflecting boundaries – границы с идеальным отражением. Source – источник осциллирующего электрического поля. h, L – размеры диэлектрической вставки. T – зона Фурье анализа	54
3.3	Поиск частоты отсечки в волноводе с отражающими стенками и шириной 1 мкм	55
3.4	Спектры пропускания волновода с отражающими стенками и диэлектрической вставкой при разной длине вставки (1.10 мкм - 1.18 мкм). Результаты, показанные сплошными линиями, рассчитаны при помощи FDTD. Результаты, показанные прерывистыми линиями, рассчитаны методом разделения переменных и поиска волноводных мод.	56
3.5	График накопления энергии в резонаторе длиной 1.10 мкм при различных длинах волн возбуждающего излучения.	57
3.6	График накопления энергии в резонаторе длиной 1.10 мкм при длине волны 1.678 мкм. Энергия нормирована на максимальное наблюдаемое значение. . . .	58
3.7	График выходной мощности из волновода с резонатором длиной 1.10 мкм при длине волны 1.678 мкм. Мощность нормирована на максимальное наблюдаемое значение.	58

3.8	Трёхмерная модель рассматриваемой структуры, состоящей из диэлектрического волновода квадратного сечения и диэлектрического шарообразного резонатора	60
3.9	Распределение напряженности магнитного поля H_z в резонаторе вблизи точки минимума пропускания	62
3.10	Вариация спектра пропускания системы волновод-резонатор в зависимости от расстояния между волноводом и резонатором до минимума пропускания.	63
3.11	Вариация спектра пропускания системы волновод-резонатор в зависимости от расстояния между волноводом и резонатором после минимума пропускания.	64
3.12	Квантовомеханический волновод модели Фано-Андерсона.	65
3.13	Вариация спектра квантовой системы.	65
3.14	Энергия в конце волновода без резонатора в зависимости от времени при длине волны 1.55 мкм по результатам расчёта по методу аппроксимации конечными разностями.	69
3.15	Пропускание на длине волны резонанса в зависимости от времени за вычетом времени прохождения волной волновода для структур с 1 резонатором и 2 резонаторами.	71
3.16	Временные характеристики пропускания волноводов с 1 и 2 шарообразными резонаторами в случае затухающего сигнала.	72
3.17	Состояние, возбуждённое одинаковыми источниками в резонаторах	74
3.18	Состояние, возбуждённое источниками в противофазе в резонаторах	75
4.1	Расположение полей на решетке И [171].	78
4.2	Зависимость прироста скорости вычисления значений напряженности электромагнитных полей от пространственного разрешения расчётной сетки в случае одномерных структур для следующих задач: 1) "Базовая" задача без поглощающих граничных условий и вычисления вектора Пойнтинга. 2) Задача "PML" с поглощающими граничными условиями, без вычисления вектора Пойнтинга. 3) Задача "flux" с поглощающими граничными условиями и вычислением вектора Пойнтинга.	91

4.3	Зависимость прироста скорости вычисления значений напряженности электромагнитных полей от пространственного разрешения расчётной сетки в случае двумерных структур для следующих задач: 1) "Базовая" задача без поглощающих граничных условий и вычисления вектора Пойнтинга. 2) Задача "PML" с поглощающими граничными условиями, без вычисления вектора Пойнтинга. 3) Задача "flux" с поглощающими граничными условиями и вычислением вектора Пойнтинга.	92
4.4	Зависимость прироста скорости вычисления значений напряженности электромагнитных полей от пространственного разрешения расчётной сетки в случае трёхмерных структур для следующих задач: 1) "Базовая" задача без поглощающих граничных условий и вычисления вектора Пойнтинга. 2) Задача "PML" с поглощающими граничными условиями, без вычисления вектора Пойнтинга. 3) Задача "flux" с поглощающими граничными условиями и вычислением вектора Пойнтинга.	93
4.5	Сравнение спектров пропускания электромагнитных правой круговой поляризации волн через слой магнитоактивной плазмы, полученных при помощи численного расчёта и аналитического решения	100
4.6	Сравнение спектров пропускания электромагнитных левой круговой поляризации волн через слой магнитоактивной плазмы, полученных при помощи численного расчёта и аналитического решения	102

Список таблиц

1.1	Сравнение существующего программного обеспечения	26
3.1	Моды шарообразного резонатора радиусом 0.35 единиц длины в присутствии протяженного волновода квадратного сечения с длиной стороны 0.2 единиц длины	61
3.2	Моды шарообразного резонатора радиусом 0.35 единиц длины в вакууме	61
3.3	Временные характеристики пропускания	66
4.1	Типы программных ядер, созданных для вычисления полей E и H	88

Приложение А

Исходный код OpenCL программных ядер, используемых для моделирования электромагнитных свойств фотонных структур

```
#pragma OPENCL EXTENSION cl_khr_fp64 : enable
```

```
__kernel void kernel_subtract_P( __global double *fmp,
__global double *P, __global long *points)
{
    //Get the index of the work-item
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    fmp[i] -= P[i];
}

__kernel void kernel_dumb_subtract_P( __global double *fmp,
__global double *P)
{
    //Get the index of the work-item
    long i = get_global_id(0);
    fmp[i] -= P[i];
}

#define OFFDIAG(u,g,sx,s) (0.25 * ((g[i]+g[i-sx])*u[i]
+ (g[i+s]+g[(i+s)-sx])*u[i+s]))

__kernel void kernel_update_P_not_z( __global long *points ,
__global double *P, __global double *P_prev ,
__global double *conv_diag1_r, __global double *conv_diag1_i ,
__global double *conv_diag2_r, __global double *conv_diag2_i ,
__global double *conv_offdiag1_r, __global double *conv_offdiag1_i ,
__global double *conv_offdiag2_r, __global double *conv_offdiag2_i ,
__global double *chi0_diag1_r, __global double *chi0_diag1_i ,
__global double *chi0_diag2_r, __global double *chi0_diag2_i ,
__global double *chi0_offdiag1_r, __global double *chi0_offdiag1_i ,
__global double *chi0_offdiag2_r, __global double *chi0_offdiag2_i ,
__global double *w, __global double *w1,
long is, long isl,
double exp_decay_r, double exp_decay_i,
double factor){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    conv_diag1_r[i]=conv_diag1_r[i]+chi0_diag1_r[i]*w[i];
    conv_diag1_i[i]=conv_diag1_i[i]+chi0_diag1_i[i]*w[i];
```

```

double templ_r=exp_decay_r*conv_diag2_r[i] -
    exp_decay_i*conv_diag2_i[i];
double templ_i=exp_decay_r*conv_diag2_i[i] +
    exp_decay_i*conv_diag2_r[i];
conv_diag2_r[i]=templ_r+chi0_diag2_r[i]*w[i];
conv_diag2_i[i]=templ_i+chi0_diag2_i[i]*w[i];
conv_offdiag1_r[i]=conv_offdiag1_r[i]+
    OFFDIAG(chi0_offdiag1_r,wl,is1,is);
conv_offdiag1_i[i]=conv_offdiag1_i[i]+
    OFFDIAG(chi0_offdiag1_i,wl,is1,is);
templ_r=exp_decay_r*conv_offdiag2_r[i] -
    exp_decay_i*conv_offdiag2_i[i];
templ_i=exp_decay_r*conv_offdiag2_i[i] +
    exp_decay_i*conv_offdiag2_r[i];
conv_offdiag2_r[i]=templ_r + OFFDIAG(chi0_offdiag2_r,wl,is1,is);
conv_offdiag2_i[i]=templ_i + OFFDIAG(chi0_offdiag2_i,wl,is1,is);
P_prev[i] = P[i];
P[i] = conv_diag1_r[i]+conv_diag2_r[i]+
    factor*(conv_offdiag1_r[i]+conv_offdiag2_r[i]);
}

__kernel void kernel_update_P_not_z_1D( __global long *points ,
__global double *P, __global double *P_prev,
__global double *conv_diag1_r, __global double *conv_diag1_i,
__global double *conv_diag2_r, __global double *conv_diag2_i,
__global double *conv_offdiag1_r, __global double *conv_offdiag1_i,
__global double *conv_offdiag2_r, __global double *conv_offdiag2_i,
__global double *chi0_diag1_r, __global double *chi0_diag1_i,
__global double *chi0_diag2_r, __global double *chi0_diag2_i,
__global double *chi0_offdiag1_r, __global double *chi0_offdiag1_i,
__global double *chi0_offdiag2_r, __global double *chi0_offdiag2_i,
__global double *w, __global double *wl,
long is, long is1,
double exp_decay_r, double exp_decay_i,
double factor){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    conv_diag1_r[i]=conv_diag1_r[i]+chi0_diag1_r[i]*w[i];
    conv_diag1_i[i]=conv_diag1_i[i]+chi0_diag1_i[i]*w[i];
    double templ_r=exp_decay_r*conv_diag2_r[i] -
        exp_decay_i*conv_diag2_i[i];
    double templ_i=exp_decay_r*conv_diag2_i[i] +
        exp_decay_i*conv_diag2_r[i];
    conv_diag2_r[i]=templ_r+chi0_diag2_r[i]*w[i];
    conv_diag2_i[i]=templ_i+chi0_diag2_i[i]*w[i];
    conv_offdiag1_r[i]=conv_offdiag1_r[i]+
        chi0_offdiag1_r[i]*wl[i];
    conv_offdiag1_i[i]=conv_offdiag1_i[i]+
        chi0_offdiag1_i[i]*wl[i];
    templ_r=exp_decay_r*conv_offdiag2_r[i] -
        exp_decay_i*conv_offdiag2_i[i];

```

```

    templ_i=exp_decay_r*conv_offdiag2_i[i] +
        exp_decay_i*conv_offdiag2_r[i];
    conv_offdiag2_r[i]=templ_r + chi0_offdiag2_r[i]* w1[i];
    conv_offdiag2_i[i]=templ_i + chi0_offdiag2_i[i]* w1[i];
    P_prev[i] = P[i];
    P[i] = conv_diag1_r[i]+conv_diag2_r[i]+
        factor*(conv_offdiag1_r[i]+conv_offdiag2_r[i]);
}

__kernel void kernel_update_P_z( __global long *points ,
__global double *P, __global double *P_prev ,
__global double *conv_diag1_r , __global double *conv_diag1_i ,
__global double *conv_diag2_r , __global double *conv_diag2_i ,
__global double *chi0_diag1_r , __global double *chi0_diag1_i ,
__global double *chi0_diag2_r , __global double *chi0_diag2_i ,
__global double *w,
double exp_decay_zz_r , double exp_decay_zz_i)
{
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    conv_diag1_r[i]=conv_diag1_r[i]+chi0_diag1_r[i]*w[i];
    conv_diag1_i[i]=conv_diag1_i[i]+chi0_diag1_i[i]*w[i];
    double templ_r=exp_decay_zz_r*conv_diag2_r[i] -
        exp_decay_zz_i*conv_diag2_i[i];
    double templ_i=exp_decay_zz_r*conv_diag2_i[i] +
        exp_decay_zz_i*conv_diag2_r[i];
    conv_diag2_r[i]=templ_r+chi0_diag2_r[i]*w[i];
    conv_diag2_i[i]=templ_i+chi0_diag2_i[i]*w[i];
    P_prev[i] = P[i];
    P[i] = conv_diag1_r[i]+conv_diag2_r[i];
}

__kernel void kernel_set_data(
__global long *points ,
__global double *buffer ,
__global double *data
){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    data[i]=buffer[index];
}

__kernel void kernel_get_data(
__global long *points ,
__global double *buffer ,
__global double *data
){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    buffer[index]=data[i];
}

__kernel void kernel_dec_data(
__global long *points ,

```

```

__global double *buffer ,
__global double *data
){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    data[i]-=buffer[index];
}

__kernel void kernel_dec_shifted_data(
__global long *points ,
__global double *buffer ,
__global double *data ,
unsigned long moment,
unsigned long stride
){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    data[i]-=buffer[index+moment*stride];
}

__kernel void kernel_inc_data(
__global long *points ,
__global double *buffer ,
__global double *data
){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    data[i]+=buffer[index];
}

__kernel void kernel_step_eh_pml_eps(
__global long *points ,
__global long *points2 ,
__global double *f,
__global double *fw,
__global double *kapw,
__global double *sigw,
__global double *g,
__global double *u,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long kw = points2[index];
    double fwprev = fw[i];
    fw[i] = (g[i] * u[i]);
    f[i] += (kapw[kw] + sigw[kw]) * fw[i] -
            (kapw[kw] - sigw[kw]) * fwprev;
}

__kernel void kernel_step_eh_pml_noeps(
__global long *points ,

```

```

__global long *points2 ,
__global double *f,
__global double *fw,
__global double *kapw,
__global double *sigw,
__global double *g,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long kw = points2[index];
    double fwprev = fw[i];
    fw[i] = g[i];
    f[i] += (kapw[kw] + sigw[kw]) * fw[i] -
            (kapw[kw] - sigw[kw]) * fwprev;
}

__kernel void kernel_step_eh_eps(
__global long *points ,
__global double *f,
__global double *g,
__global double *u,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    f[i] = (g[i] * u[i]);
}

__kernel void kernel_step_eh_noeps(
__global long *points ,
__global double *f,
__global double *g,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    f[i] = g[i];
}

// stable averaging of offdiagonal components
#define OFFDIAG_EH(u,g,s,sx) (0.25 * ((g[i]+g[i-sx])*u[i] +
    (g[i+s]+g[(i+s)-sx])*u[i+s]))
__kernel void kernel_step_eh_3x3eps(
__global long *points ,
__global double *f,
__global double *g,
__global double *g1,
__global double *g2,
__global double *u,
__global double *u1,
__global double *u2,
long s,

```

```

long s1 ,
long s2
){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    f[i] = (g[i] * u[i] + OFFDIAG_EH(u1,g1,s,s1) +
            OFFDIAG_EH(u2,g2,s,s2));
}

__kernel void kernel_step_eh_2x2eps(
__global long *points ,
__global double *f,
__global double *g,
__global double *g1,
__global double *u,
__global double *u1,
long s,
long s1
//long offset
){
    long index = get_global_id(0);
    long i = points[index];
    f[i] = (g[i] * u[i] + OFFDIAG_EH(u1,g1,s,s1));
}

__kernel void kernel_step_curl_nopml_nofu_g2(
__global long *points ,
__global double *f,
__global double *g1,
__global double *g2,
double dtdx ,
long s1 ,
long s2 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    f[i] -= dtdx * (g1[i+s1] - g1[i] + g2[i] - g2[i+s2]);
}

__kernel void kernel_step_curl_nopml_nofu_nog2(
__global long *points ,
__global double *f,
__global double *g1,
double dtdx ,
long s1 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;

```

```

    long i = points[index];
    f[i] -= dtdx * (g1[i+s1] - g1[i]);
}

__kernel void kernel_step_curl_nopml_fu_g2(
__global long *points ,
__global long *points2 ,
__global double *f ,
__global double *fu ,
__global double *g1 ,
__global double *g2 ,
__global double *kapu ,
__global double *sigu ,
__global double *siginvu ,
double dtdx ,
long s1 ,
long s2 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long ku = points2[index];
    double fprev = fu[i];
    fu[i] -= dtdx * (g1[i+s1] - g1[i] + g2[i] - g2[i+s2]);
    f[i] = siginvu[ku] * ((kapu[ku] - sigu[ku]) * f[i] + fu[i] - fprev);
}

__kernel void kernel_step_curl_nopml_fu_nog2(
__global long *points ,
__global long *points2 ,
__global double *f ,
__global double *fu ,
__global double *g1 ,
__global double *kapu ,
__global double *sigu ,
__global double *siginvu ,
double dtdx ,
long s1 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long ku = points2[index];
    double fprev = fu[i];
    fu[i] -= dtdx * (g1[i+s1] - g1[i]);
    f[i] = siginvu[ku] * ((kapu[ku] - sigu[ku]) * f[i] + fu[i] - fprev);
}

__kernel void kernel_step_curl_pml_nofu_g2(
__global long *points ,

```



```

__global long *points2 ,
__global double *f ,
__global double *g1 ,
__global double *g2 ,
__global double *kap ,
__global double *sig ,
__global double *siginv ,
double dtdx ,
long s1 ,
long s2 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long k = points2[index];
    f[i] = ((kap[k] - sig[k]) * f[i] - dtdx * (g1[i+s1] - g1[i] + g2[i] -
        g2[i+s2])) * siginv[k];
}

__kernel void kernel_step_curl_pml_nofu_nog2(
__global long *points ,
__global long *points2 ,
__global double *f ,
__global double *g1 ,
__global double *kap ,
__global double *sig ,
__global double *siginv ,
double dtdx ,
long s1 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long k = points2[index];
    f[i] = ((kap[k] - sig[k]) * f[i] - dtdx * (g1[i+s1]-g1[i])) * siginv[k];
}

__kernel void kernel_step_curl_pml_fu_g2(
__global long *points ,
__global long *points2 ,
__global long *points3 ,
__global double *f ,
__global double *fu ,
__global double *g1 ,
__global double *g2 ,
__global double *kap ,
__global double *sig ,
__global double *siginv ,
__global double *kapu ,
__global double *sigu ,

```

```

__global double *siginvu ,
double dtdx ,
long s1 ,
long s2 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long k = points2[index];
    long ku = points3[index];
    double fprev = fu[i];
    fu[i] = ((kap[k] - sig[k]) * fu[i] - dtdx * (gl[i+s1] - gl[i] +
    g2[i] - g2[i+s2])) * siginv[k];
    f[i] = siginvu[ku] * ((kapu[ku] - sigu[ku]) * f[i] + fu[i] - fprev);
}

__kernel void kernel_step_curl_pml_fu_nog2(
__global long *points ,
__global long *points2 ,
__global long *points3 ,
__global double *f ,
__global double *fu ,
__global double *gl ,
__global double *kap ,
__global double *sig ,
__global double *siginv ,
__global double *kapu ,
__global double *sigu ,
__global double *siginvu ,
double dtdx ,
long s1 ,
long offset
){
    long index = get_global_id(0)+offset;
    long i = points[index];
    long k = points2[index];
    long ku = points3[index];
    double fprev = fu[i];
    fu[i] = ((kap[k] - sig[k]) * fu[i] - dtdx * (gl[i+s1]-gl[i])) * \
    siginv[k];
    f[i] = siginvu[ku] * ((kapu[ku] - sigu[ku]) * f[i] + fu[i] - fprev);
}

__kernel void kernel_boundaries_copy(
__global long *points_source ,
__global long *points_reciever ,
__global double *data_source ,
__global double *data_reciever
){
    long index = get_global_id(0);
    long index_source = points_source[index];

```

```

    long index_reciever = points_reciever[index];
    data_reciever[index_reciever]=data_source[index_source];
}
__kernel void kernel_boundaries_negate(
__global long *points_source ,
__global long *points_reciever ,
__global double *data_source ,
__global double *data_reciever
){
    long index = get_global_id(0);
    long index_source = points_source[index];
    long index_reciever = points_reciever[index];
    data_reciever[index_reciever]=-data_source[index_source];
}
__kernel void kernel_boundaries_phase(
__global long *points_source ,
__global long *points_reciever ,
__global double *data_source ,
__global double *data_reciever ,
__global double *phase
){
    long index = get_global_id(0);
    long index_source = points_source[index];
    long index_reciever = points_reciever[index];
    data_reciever[index_reciever]=phase[index]*data_source[index_source];
}
__kernel void kernel_update_dft(
long numcmp,
double time ,
double omega_min ,
double domega ,
double scale_i ,
double scale_r ,
long avg1 ,
long avg2 ,
__global long *field_points ,
__global double *dft_r ,
__global double *dft_i ,
__global double *weights ,
__global double *data_r ,
__global double *data_i //,
//__global double *debugd
){
    long freq_num = get_global_id(0);
    long point_num = get_global_id(1);
    //long idx;
    long numfreqs=get_global_size(0);
    double phase_i;
    double phase_r;
    double arg=(omega_min + freq_num*domega)*time;

```

```

phase_r=cos(arg)*scale_r-sin(arg)*scale_i;
phase_i=cos(arg)*scale_i+sin(arg)*scale_r;
double f_r;
double f_i;
long field_point_num = field_points[point_num];
f_r = (weights[point_num] * 0.25) * (data_r[field_point_num] +
    data_r[field_point_num+avg1] + data_r[field_point_num+avg2] +
    data_r[field_point_num+(avg1+avg2)]);
f_i = (numcmp-1)*(weights[point_num] * 0.25) *
    (data_i[field_point_num] + data_i[field_point_num+avg1] +
    data_i[field_point_num+avg2] + data_i[field_point_num+(avg1+avg2)]

dft_r[numfreqs*point_num + freq_num] += (phase_r*f_r - phase_i*f_i);
dft_i[numfreqs*point_num + freq_num] += (phase_r*f_i + phase_i*f_r);

}

__kernel void kernel_update_dft_real(
double time,
double omega_min,
double domega,
double scale_i,
double scale_r,
long avg1,
long avg2,
__global long *field_points,
__global double *dft_r,
__global double *dft_i,
__global double *weights,
__global double *data_r
){
    long freq_num = get_global_id(0);
    long point_num = get_global_id(1);
    //long idx;
    long numfreqs=get_global_size(0);
    double phase_i;
    double phase_r;
    double arg=(omega_min + freq_num*domega)*time;
    phase_r=cos(arg)*scale_r-sin(arg)*scale_i;
    phase_i=cos(arg)*scale_i+sin(arg)*scale_r;
    double f_r;
    long field_point_num = field_points[point_num];
    f_r = (weights[point_num] * 0.25) * (data_r[field_point_num] +
        data_r[field_point_num+avg1] + data_r[field_point_num+avg2] +
        data_r[field_point_num+(avg1+avg2)]);
    dft_r[numfreqs*point_num + freq_num] += (phase_r*f_r);
    dft_i[numfreqs*point_num + freq_num] += (phase_i*f_r);

}

```

```

__kernel void kernel_update_dft_real_shifted(
double time,
double omega_min,
double domega,
double scale_i,
double scale_r,
long avg1,
long avg2,
long points_shift,
__global long *field_points,
__global double *dft_r,
__global double *dft_i,
__global double *weights,
__global double *data_r,
__global double *debug
){
    long freq_num = get_global_id(0);
    long point_num = get_global_id(1)+points_shift;
    //long idx;
    long numfreqs=get_global_size(0);
    double phase_i;
    double phase_r;
    double arg=(omega_min + freq_num*domega)*time;
    phase_r=cos(arg)*scale_r-sin(arg)*scale_i;
    phase_i=cos(arg)*scale_i+sin(arg)*scale_r;
    double f_r;
    long field_point_num = field_points[point_num];
    f_r = (weights[point_num] * 0.25) * (data_r[field_point_num] + \
        data_r[field_point_num+avg1] + data_r[field_point_num+avg2] + \
        data_r[field_point_num+(avg1+avg2)]);

    dft_r[numfreqs*point_num + freq_num] += (phase_r*f_r);
    dft_i[numfreqs*point_num + freq_num] += (phase_i*f_r);
    debug[numfreqs*point_num + freq_num]=1.0+points_shift;
}

__kernel void kernel_set_zero(
__global long *points,
__global double *data
){
    long index = get_global_id(0);
    long point_num = points[index];
    data[point_num]=0;
}

```

```

__kernel void kernel_lorentzian_update_P_3x3(
double gammalinv,
double omega0dtsqr_denom,
double gammal,
double omega0dtsqr,
long is,
long is1,
long is2,
__global double *s,
__global double *s1,
__global double *s2,
__global double *p,
__global double *pp,
__global double *w,
__global double *w1,
__global double *w2,
__global long *points
){
    long index = get_global_id(0);
    long i=points[index];
    double pcur=p[i];
    p[i]= gammalinv * (pcur * (2 - omega0dtsqr_denom)
                        - gammal * pp[i]
                        + omega0dtsqr * (s[i] * w[i]
                                         + OFFDIAG(s1,w1,is1,is)
                                         + OFFDIAG(s2,w2,is2,is)));
    pp[i] = pcur;
}

```

```

__kernel void kernel_lorentzian_update_P_2x2(
double gammalinv,
double omega0dtsqr_denom,
double gammal,
double omega0dtsqr,
long is,
long is1,
__global double *s,
__global double *s1,
__global double *p,
__global double *pp,
__global double *w,
__global double *w1,
__global long *points
){
    long index = get_global_id(0);
    long i=points[index];
    double pcur=p[i];
    p[i]= gammalinv * (pcur * (2 - omega0dtsqr_denom)
                        - gammal * pp[i]
                        + omega0dtsqr * (s[i] * w[i]

```

+ OFFDIAG(s1,w1,is1,is)));

```
pp[i] = pcur;
}
```

```
__kernel void kernel_lorentzian_update_P_iso(
double gammalinv,
double omega0dtsqr_denom,
double gammal,
double omega0dtsqr,
__global double *s,
__global double *p,
__global double *pp,
__global double *w,
__global long *points
){
    long index = get_global_id(0);
    long i=points[index];
    double pcur=p[i];
    p[i]= gammalinv * (pcur * (2 - omega0dtsqr_denom)
                    - gammal * pp[i]
                    + omega0dtsqr * (s[i] * w[i] ));

    pp[i] = pcur;
}
```

```
__kernel void kernel_timeliner_update_P(
double factor,
__global double *s,
__global double *p,
__global double *w,
__global long *points
){
    long index = get_global_id(0);
    long i=points[index];
    p[i]=factor*s[i]*w[i];
}
;
```