

**ПРИОРИТЕТНЫЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ «ОБРАЗОВАНИЕ»
РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ**

**К.П. ЛОВЕЦКИЙ, Л.А. СЕВАСТЬЯНОВ,
М.В. ПАУКШТО, А.А. ЖУКОВ**

МЕТОДЫ СВЯЗАННЫХ ВОЛН РАСЧЕТА ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ

Учебное пособие

Москва

2008

**«Создание комплекса инновационных образовательных программ
и формирование инновационной образовательной среды,
позволяющих эффективно реализовывать государственные интересы РФ
через систему экспорта образовательных услуг»**

Экспертное заключение –

доктор физико-математических наук, профессор *С.И. Виноцкий*

Ловецкий К.П., Севастьянов Л.А., Паукшто М.В., Жуков А.А.

Методы связанных волн расчета оптических покрытий: Учеб. пособие. –
М.: РУДН, 2008. – 144 с.

Пособие посвящено изложению основ метода связанных волн и его применению к решению задач расчета одномерных и двумерных дифракционных решеток. Метод является наиболее эффективным в случае расчета и проектирования бинарных оптических систем. Приведен подробный вывод расчетных формул для случаев *TE*- и *TM*-поляризованных волн, а также случая конической дифракции. Рассмотрена модификация точного метода связанных волн для многослойных дифракционных решеток с рельефной поверхностью. Изложены численно устойчивые методы определения интенсивностей пропускания и отражения для анизотропных покрытий со сложным профилем.

Для магистров и аспирантов, обучающихся по направлению «Прикладная математика и информатика».

Учебное пособие выполнено в рамках инновационной образовательной программы Российского университета дружбы народов, направление «Комплекс экспортноориентированных инновационных образовательных программ по приоритетным направлениям науки и технологий», и входит в состав учебно-методического комплекса, включающего описание курса, программу и электронный учебник.

Содержание

Общее описание курса	4
Инновационность курса	5
Тема 1. Знакомство с оптическими наноструктурами и численными методами решения уравнений Максвелла	8
1.1. Немного о нанотехнологии	8
1.2. Нанооптические структуры	10
1.3. Численное решение уравнений Максвелла в задачах дифракционной оптики	14
Тема 2. Одномерные дифракционные решетки	21
2.1. Рассеяние поляризованной монохроматической волны	21
2.2. Рассеяние ТЕ-поляризованной волны на одномерной решетке	26
2.3. Рассеяние ТМ-поляризованной волны на одномерной решетке	33
2.4. Численная дискретизация функции диэлектрической проницаемости, вычисление коэффициентов Фурье	43
2.5. Свойства теплицевых матриц. Обращение теплицевых матриц	50
Тема 3. Устойчивый метод решения задачи дифракции ТМ-поляризованной волны на одномерной решетке	59
3.1. Системы единиц измерения электрических и магнитных величин и используемые обозначения	59
3.3. Дифракция ТМ-поляризованной волны	62
Тема 4. Коническая дифракция	72
4.1. Геометрия падающих плоских электромагнитных линейно-поляризованных волн	72
4.2. Электрическое поле падающей волны	73
4.3. Проекция волнового вектора	75
4.4. Профиль дифракционной решетки	76
4.5. Уравнения для определения Фурье-компонент решения	77
4.6. Построение решения	83
4.7. Граничные условия	84
4.8. Компоненты падающей волны	86
4.9. Компоненты отраженной и преломленной волн	87
4.10. Условия на верхней границе $z = 0$	89
4.11. Условия на нижней границе при $z = d$	92
4.12. Расчетные формулы	95
Тема 5. Многослойные дифракционные решетки	102
5.1. Отражение и пропускание света многослойным покрытием, состоящим из однородных слоев	102
5.2. Численно устойчивая модификация метода матрицы перехода	107
5.3. Формулировка точного метода связанных волн для многослойных решеток с рельефной поверхностью	109
5.4. Численно устойчивый метод для покрытий со сложным профилем	114
5.5. Сводка расчетных формул	118
Литература	123
Описание курса и программа	124

Общее описание курса

Курс «Методы связанных волн расчета оптических покрытий» является составной частью магистерской программы «Оптика наноструктур». Магистерская программа «Оптика наноструктур» реализуется в рамках направления «Прикладная математика и информатика» и направления «Прикладная математика и физика», а возможно, и других направлений. В составе магистерской программы «Оптика наноструктур» курс «Методы связанных волн расчета оптических покрытий» является обязательным, привязанным к семестру. Для других магистерских программ этот курс может быть курсом по выбору без привязки к семестру или факультативным на усмотрение методической комиссии программы. Курс носит теоретический и практический характер.

Целью курса является подробное ознакомление студентов с устойчивыми современными методами численного решения математических задач, возникающих при изучении взаимодействия электромагнитного излучения в области светового диапазона с веществом, в особенности с наноструктурами. Эта область знаний особенно быстро развивается в последние годы в связи с широким применением наноэлементов и тонких (менее одного микрометра толщиной) пленок, используемых в производстве жидкокристаллических дисплеев, солнечных батарей на основе диэлектриков, фотоэмиссионных диодов, просветляющих покрытий, поляризаторов, миниатюрных лазеров, управляемых оптических элементов. Задачи оптики наноструктур практически не поддаются аналитическому решению, поэтому важным является не только освоение теоретического материала, но и изучение эффективных численных методов, используемых при решении данного класса задач, приобретение навыков создания программного обеспечения для численного моделирования различных оптических наноструктур.

Задачей курса «Методы связанных волн расчета оптических покрытий» является формирование у студентов навыков работы на современной измерительной аппаратуре, а также обучение использованию строгих методов связанных волн при решении задач моделирования современных оптических устройств на основе тонкопленочных покрытий и дифракционных оптических элементов. Это позволит им при необходимости разрабатывать новое программное обеспечение. Безусловной задачей курса является также освоение существующего программного обеспечения, ориентированного на расчет и проектирование оптических покрытий. В результате обучения студенты получают умение и навыки правильно оценить сложность научно-исследовательских и конструкторских заданий на разработку дифракционных оптических элементов и устройств, аргументированно выбрать метод решения конструкторской задачи, а затем экономично и эффективно выполнять компьютерный дизайн требуемого дифракционного оптического покрытия или устройства.

Инновационность курса.

Курс является инновационным по содержанию и по литературе, он включает в себя последние научные достижения в области решения задач дифракционной оптики, когда характерные размеры исследуемых объектов не превышают либо сравнимы с длиной волны оптического излучения. Эта область знаний интенсивно развивалась в последнее время, но лишь недавно были созданы устойчивые алгоритмы и разработаны численные методы решения задач для многослойных решеток. Следует отметить, что для оптических однослойных и многослойных решеток с характерными размерами больше длины волны оптического излучения устойчивые методы решения известны с середины прошлого века. Сейчас алгоритмы решения оптических задач в субволновой области распространяются на объекты со сложной геометрией, такие как

двумерные решетки с произвольным профилем, трехмерные решетки (фотонные кристаллы) и на анизотропные материалы. Они востребованы, поскольку позволяют создавать математические модели взаимодействия излучения с веществом в наномасштабах, а затем с их помощью проектировать новые эффективные устройства в высокотехнологичных областях медицины, энергетики, инфокоммуникаций и приборостроения.

В ходе проведения занятий по этому курсу разработчики предполагают использование традиционных методик преподавания, принятых в странах болонской системы образования, т.е. с использованием кредитной системы оценки знаний.

Наряду с традиционными элементами преподавания математических методов решения прикладных задач разработчики курса предполагают воспользоваться хорошо зарекомендовавшим себя опытом МФТИ и подобных вузов. Для этого в рамках подпрограммы «Оптика наноструктур» осуществляется закупка уникального измерительного и аналитического оборудования для выполнения измерений разнообразных характеристик оптических наноустройств с целью использования этого оборудования в учебном процессе и для проведения научно-исследовательских работ преподавателями, аспирантами и студентами.

По окончании магистратуры по направлению «Оптика наноструктур» выпускники Российского университета дружбы народов станут конкурентоспособными специалистами в области проектирования современных оптических устройств, которые не будут испытывать затруднений при последующем трудоустройстве.

Данное направление научно-практических разработок сформировалось лишь в последние 10 – 15 лет. Поэтому наблюдается сильный дефицит учебно-методической литературы не только в России, но и во всем мире. Разрабатываемые в рамках инновационной программы

«Оптика наноструктур» учебные пособия восполнят в некоторой степени этот пробел и составят основной список литературы для слушателей курсов. Вместе с ними следует использовать несколько учебников и монографий, вышедших в свет к настоящему времени и перечисленных в списке литературы. Курс базируется на публикациях научных статей мировых лидеров исследований в данной области в научной периодике, диссертационных работах их учеников, включающих работы по непосредственному моделированию, дизайну и последующему изготовлению лабораторных образцов оптических элементов и устройств.

В качестве практических заданий, курсовых работ и тем рефератов слушателям магистерской программы будут предложены актуальные проблемы и задачи, решение которых востребовано современным уровнем развития высокотехнологичных отраслей промышленности и научно-исследовательских лабораторий.

Тема 1. Знакомство с оптическими наноструктурами и численными методами решения уравнений Максвелла.

1.1. Немного о нанотехнологии

Нанотехнология - область науки и техники, занимающаяся изучением свойств объектов размером порядка нанометра (один нанометр - миллиардная часть метра). Практически - это технология производства устройств для создания, обработки и манипуляции частицами, размеры которых находятся в пределах от 1 до 100 нанометров¹. Нанотехнология качественно отличается от традиционных инженерных дисциплин. На таких масштабах привычные, макроскопические, технологии обращения с материей часто неприменимы, а микроскопические явления взаимодействия отдельных атомов и молекул, квантовые эффекты, пренебрежительно слабые на привычных масштабах, становятся намного значительнее.

Нанотехнология сейчас находится в начальной стадии развития, поскольку основные открытия, предсказываемые в этой области, пока не сделаны. Тем не менее проводимые исследования уже дают практические результаты. Использование в нанотехнологии передовых научных результатов позволяет относить её к высоким технологиям. Широкого практического распространения нанотехнологии пока не получили.

Нанотехнологии имеют дело с кластерами атомов и молекул, размеры таких кластеров - миллиардная доля метра.

В природе использованы структуры разных уровней иерархии -

¹ По ГОСТу нанотехнологии — это технологии, работающие с объектами, характерные размеры которых, по крайней мере в одном направлении, не превышают порядка 100 нм.

атомарный, молекулярный, нано, микро и макро. Научно-технический прогресс эволюционирует от макромасштабов в сторону микро- и нано -: промышленная революция проходила в миллиметровом диапазоне, полупроводниковая - в микронном, и, наконец, с наступлением нанотехнологической революции мы уходим на миллиардные доли метра.

Нанотехнологии предполагают, прежде всего, междисциплинарность. Скажем, раньше металл варили металлурги, но как только этот процесс переходит в сферу нано, к нему подключаются физики, химики, теоретики, математики и т.д. Причем все должны говорить на одном языке. В наном мире нечего делать отдельному узкому специалисту, группа разработчиков должна обладать широкими знаниями в разных сферах науки и техники.

Наноструктуры (физические структуры – размером с молекулу или несколько атомов) взаимодействуют с электромагнитным излучением, включая и оптический диапазон, совершенно иначе, не так, как это происходит в макром мире. При проектировании оптических структур это необходимо учитывать, по крайней мере, по двум причинам. Во-первых, непривычная форма взаимодействия обеспечивает конструктора оптических устройств большим количеством новых функций. Во-вторых, изменение геометрической формы, размеров объектов, зазоров между ними, а также использование анизотропных материалов обеспечивают практически неисчерпаемые возможности для реализации разных оптических функций. Ведь при этих размерах самые незначительные изменения объектов могут резко влиять на результат взаимодействия со светом [1].

Умело используя форму, размеры, периодичность наноструктур, взаимодействующих со светом, можно создавать нанооптические компоненты, позволяющие задействовать широкий спектр полезных

оптических эффектов. На их основе уже можно создавать модули – наборы оптических элементов для использования в качестве строительных блоков. Такие отдельные строительные блоки обладают отличными оптическими свойствами и легко совмещаются с другими оптическими материалами в различных конфигурациях.

Кроме того, такие отдельные строительные блоки позволяют гибко создавать более крупные конструкции, сокращая стоимость производства и повышая надежность оптических компонентов и систем.

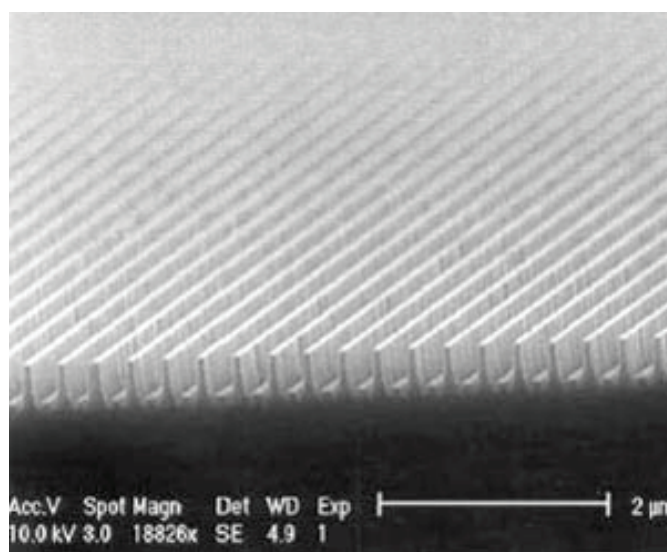


Рис. 1. Фотография сечения нанооптической дифракционной решетки

1.2. Нанооптические структуры

Нанооптические компоненты основаны на наноразмерных периодических структурах (например, дифракционная решетка из работы [2], изображенная на рис. 1; ДОЭ – дифракционные оптические элементы и т.п.). Размер отдельных составляющих (например, период решетки) намного меньше длины волны излучения, взаимодействующего с такой решеткой. Для устройств, предназначенных для работы в инфракрасном, оптическом или ультрафиолетовом диапазоне длин волн, обычные размеры периодических структур простираются от нескольких сотен до 10 нанометров. Для достижения необходимых оптических свойств размеры

оптических структур должны быть меньше длины волны. Напротив, большинство обычных оптических устройств имеет размеры много больше длины волны излучения. Это не мешает им отлично выполнять свои функции, и, кроме того, их производство хорошо отлажено.

Сечение одномерной субволновой дифракционной решетки – фотография, сделанная с помощью сканирующего туннельного микроскопа, приводится на рис. 1.

Нанооптические устройства могут создаваться в виде одномерных, двумерных и трехмерных наноструктур. В зависимости от конфигурации и состава материала, из которого создается оптический элемент, устройство может использоваться как:

- поляризаторы (polarizers);
- поляризационные светоделители, расщепители пучка - светоделители (polarization beam splitters and combiners);
- волновые пластинки (wave plates);
- фильтры (filters);
- микролинзы (micro lenses);
- просветляющие и рассеивающие покрытия (antireflective and diffusive coatings);
- и многое другое.

Точное физическое поведение нанооптических структур может быть описано с помощью математического моделирования, основанного на решении уравнений Максвелла, материальных уравнений и точного учета граничных условий. И это поведение значительно отличается от обычных представлений о поведении света, сложившихся при изучении макроструктур.

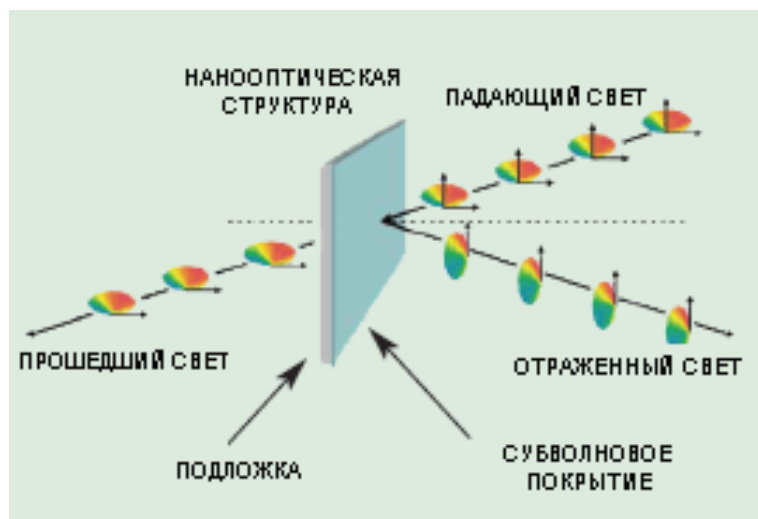


Рис. 2. Взаимодействие nanoоптической структуры с падающим лучом света

В общем случае взаимодействие электромагнитного излучения с наноструктурами приводит к возникновению отраженного и преломленного лучей [2] (рис. 2). Нанопустройства могут влиять на различные свойства света: поляризацию, фазу, длину волны и направление распространения.

Поляризующие оптические элементы пропускают волны одной поляризации и отражают свет с ортогональной поляризацией. Для создания оптических устройств с конкретными свойствами используются комбинации оптических элементов с разными структурными геометрическими параметрами и различными индексами диэлектрической проницаемости. Это позволяет, в зависимости от задачи, уменьшать или увеличивать отражение света такой структурой, регулировать пропускание и поглощение. Толщина такого субволнового активного слоя дифракционного оптического элемента обычно составляет величину меньше 1 микрона. Эти свойства позволяют уникальным образом реализовать разделители и соединители поляризованных пучков света (Polarization Beam Splitters/Combiners - PBS/C). Во-первых, благодаря тому, что характерные размеры структуры значительно меньше длины волны

падающего света, конструктивные параметры устройств могут быть чрезвычайно малыми, сравнимыми с размером падающего пучка света. Во-вторых, благодаря тому, что наноструктура непоглощающая, PBS/C устройства обладают высокой эффективностью. В-третьих, субволновые решетки пропускают и/или отражают только моды нулевого порядка, обеспечивая как однородное оптическое поведение в широком диапазоне частот (длин волн), так и функционирование в широком угловом диапазоне (плюс-минус двадцать градусов от угла нормального падения).

Подбирая размеры и геометрию наноустройств, возможно проектирование фазовых и волновых пластинок. В частности, уже реализованы волновые пластинки нулевого порядка с замедлением менее 0.01 длины волны. Также могут быть созданы широкополосные и узкополосные оптические фильтры, в том числе и поляризационные. Создаются также и наноустройства управления фокусировкой света, пропускающие антиотражающие покрытия, диффузионные структуры, системы микролинз, дифракционные решетки с блеском. Включение в конструкцию механизма управления позволяет создавать настраиваемые оптические устройства широкого диапазона действия [3].

1.3. Численное решение уравнений Максвелла в задачах дифракционной оптики

Если характерные размеры препятствия на пути света сравнимы с длиной волны, то для адекватного описания дифракции света на препятствии требуется строго решать задачу, которая в конечном счете сводится к решению системы уравнений Максвелла. Условно методы решения системы уравнений Максвелла можно разделить [4] на три группы:

- разностное решение дифференциальных уравнений;
- модовые методы решения интегральных и дифференциальных уравнений;
- метод конечных и граничных элементов для решения интегральных уравнений.

Особняком стоит метод решения задач на собственные значения и собственные функции для дифференциальных или интегральных операторов.

Перечисленные методы в настоящее время применяются для решения следующих задач оптики: расчета и анализа микрооптики, в том числе микрооптики на алмазных пленках; расчета субволнового антиотражающего покрытия; анализа дифракции света на одномерных и двумерных дифракционных решетках, фотонных кристаллах; расчета градиентной микрооптики, анализа пространственных мод оптических волноводов и волокон, расчета силы и момента силы, действующей на микрообъект со стороны электромагнитного поля.

Наиболее универсальным считается метод разностного решения системы уравнений Максвелла. Он применим для анализа дифракции произвольной электромагнитной волны на диэлектрических, металлических и анизотропных микрообъектах. Причем данный метод

позволяет промоделировать временную эволюцию электромагнитного импульса в произвольной неоднородной среде.

История проблемы численного решения системы уравнений Максвелла начинается с работы S.K. Yee (1966), в которой была предложена оригинальная разностная схема. Наибольший вклад в исследования по численному решению систем уравнений Максвелла начиная с 1975 г. внес A. Taflove. В статьях западных ученых этот метод решения системы уравнений Максвелла называется FDTD (finite difference time-domain).

Разностная схема Yee является условно устойчивой, а корректное введение излучения в расчетную область осуществляется с помощью привлечения понятий геометрического интегратора, вариационного интегратора и дискретного внешнего анализа. Подробности этих подходов изложены в учебном пособии «Методы дифференциальных разностей расчета оптических покрытий».

Метод разностного решения уравнений Максвелла применяется в задачах дифракции электромагнитных волн в широком диапазоне длин волн, начиная с радиоволн (радиолокация), волн видимого диапазона (микрооптика, фотонные кристаллы) и кончая рентгеновскими волнами (шкала электромагнитных волн приведена, в частности, в учебном пособии [5]). Из-за больших объемов памяти и времени расчета трехмерных дифракционных задач на компьютере обычно ограничиваются отношением размера объекта к длине волны от 1 до 100.

Во многих задачах дифракции рассматривается монохроматический свет. Решение таких задач связано с решением уравнения Гельмгольца. Если ограничить рассмотрение только периодическими объектами, например, одномерными или двумерными дифракционными решетками, трехмерными фотонными кристаллами, то решать уравнение Гельмгольца

в этом случае удобно с помощью метода связанных волн (rigorous coupled wave analysis– RCWA).

Для анализа дифракционных решеток строгий метод связанных волн применили в 1981 г. М. Moharam, Т. Gaylord.

Метод связанных волн основан на представлении электромагнитного поля в однородных областях пространства до периодического объекта и после него в виде линейной комбинации плоских волн. В области объекта решаются уравнения Максвелла методом Фурье-преобразования. Для нахождения неизвестных коэффициентов в рядах Фурье с помощью граничных условий формируется система линейных алгебраических уравнений.

Метод связанных волн позволяет относительно быстро рассчитывать трехмерные поля дифракции на элементах микрооптики, например, рассчитывать дифракцию плоской линейно-поляризованной волны на бинарной решетке, период которой сравним с длиной волны падающего электромагнитного излучения.

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

Кроме задач анализа дифракции электромагнитной волны на элементах микрооптики метод связанных волн используется в задачах синтеза или расчета дифракционных решеток или дифракционных оптических элементов, обладающих заданными характеристиками. Такая обратная задача решается, как правило, методами условной оптимизации.

При этом критерием, подлежащим оптимизации (например, минимизации), является среднеквадратичное отклонение рассчитанных интенсивностей порядков дифракции от заданных. Дополнительные условия обычно формулируются исходя из физических и конструктивных ограничений.

Для решения задач дифракции электромагнитной волны на оптических наноструктурах применяются не только дифференциальные методы, которые были рассмотрены до этого, но и интегральные методы. Они основаны на решении интегральных уравнений, как правило, линейных интегральных уравнений Фредгольма второго рода. Это методы конечных и граничных элементов в постановке Ритца или Галеркина, метод прямого сведения интегрального уравнения к линейной системе алгебраических уравнений или использование алгоритма быстрого преобразования Фурье для итеративного решения интегрального уравнения типа свертки. В последние годы обрел особую популярность многосеточный метод, основанный на дискретных вариационных принципах и дискретных методах геометрического интегрирования.

Отличительной особенностью решения дифракционных задач интегральным методом является то, что нет необходимости в разработке специальных условий на границе области расчета. Кроме того, после нахождения поля дифракции внутри оптической решетки и в малой окрестности вокруг нее с помощью того же интегрального преобразования можно найти электромагнитное поле в любой другой точке пространства.

В учебном пособии [5] было показано, что для описания процессов рассеяния света на неоднородностях нанометрового размера, т.е. субволновых размеров для видимого света, нужно в качестве математической модели описываемого процесса использовать систему уравнений Максвелла вместе с уравнениями материальной связи. Различные представления уравнений материальной связи, в свою очередь,

приводят к различным подмоделям (однородная изотропная среда, однородная анизотропная среда, плавно-неоднородные изотропные и/или анизотропные среды, среды с особыми признаками неоднородности: периодические, одномерные, двух- и трехмерные, случайные, особое место занимают среды с неоднородностями молекулярных масштабов). В данном учебном пособии мы не будем рассматривать модели со случайными неоднородностями. Однородные среды достаточно хорошо изучены к настоящему времени [6], их будем рассматривать в качестве отправного пункта в дальнейших рассуждениях. Основное внимание будет уделено средам с периодической структурой.

Большая часть материала книги посвящена тщательному изложению устойчивых методов и алгоритмов решения задач о прохождении монохроматического линейно поляризованного света сквозь тонкие одномерные периодические решетки. В конце книги будет коротко приведено обобщение изложенных методов на тонкие покрытия с двумерной и трехмерной периодичностью.

Как было показано в [5], периодичность рассматриваемой задачи диктует рассмотрение в первую очередь метода Фурье.

По теореме Флоке мы представляем решение в периодической области в виде ряда Фурье по плоским волнам. Поскольку работать с рядами Фурье неудобно, переходим к работе с коэффициентами Фурье. Можно проинтегрировать эти ряды, умноженные на функции, комплексно-сопряженные к плоским волнам. В результате получим бесконечную систему линейных обыкновенных дифференциальных уравнений, для работы с которой надо перейти к конечномерному возмущению, что является нетривиальной проблемой.

С другой стороны, можно воспользоваться методом Галеркина (при необходимости методом Галеркина—Петрова), который приводит к

конечной системе линейных обыкновенных дифференциальных уравнений.

Использование метода Галеркина приводит к необходимости решения задачи устойчивого вычисления ряда Фурье произведения двух разрывных функций. Задача сводится к решению бесконечной системы дифференциальных уравнений с непостоянными коэффициентами. Существует два принципиально разных подхода к решению этой задачи. Один из них – конечно-разностный метод, до последнего времени значительно отстававший по своим характеристикам от другого метода – строгого метода связанных волн. Конечно-разностный метод относится к классу приближенных, а строгий метод связанных волн – к точным методам. Основным принципом метода связанных волн заключается в замене переменных коэффициентов кусочно-постоянными.

Метод связанных волн возник при решении задач для весьма специфических решеток – одномерных бинарных решеток. В этом случае метод Фурье приводит к решению систем дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Традиционные алгоритмы и методы численного решения этой задачи давали устойчивое решение до тех пор, пока период решетки был много больше длины волны падающего излучения. Потребности проектирования оптических (умных) покрытий и структур с размерами порядка длины волны излучения привели к необходимости разработки новых устойчивых алгоритмов, поскольку имевшиеся не обеспечивали устойчивости решения при таких параметрах задач и не позволяли моделировать процессы взаимодействия излучения с веществом. Сложности численного решения возникающих систем линейных дифференциальных уравнений способствовали разработке новых методов многих частных (внутренних) задач. Таких как задача устойчивого вычисления коэффициентов ряда Фурье непрерывного

произведения двух разрывных функций, задача эффективного вычисления функций от матрицы, задача численного устойчивого решения слабосвязанных систем линейных алгебраических уравнений большой размерности.

Тема 2. Одномерные дифракционные решетки

2.1. Рассеяние поляризованной монохроматической волны

При решении прямой задачи дифракции света на ДОЭ в случае, когда характерные параметры среды, средняя глубина и период модуляции рельефа, на которой происходит дифракция света, сравнимы с длиной волны, скалярная теория оказывается недостаточной. Для адекватного описания дифракции света на ДОЭ, приходится использовать общую электромагнитную теорию света вместо скалярного приближения [8].

При этом уравнения Максвелла для электромагнитного поля в гауссовой системе единиц имеют следующий вид:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{4\pi \mathbf{j}}{c} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho \quad (2.3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \quad (2.4)$$

где \mathbf{E} , \mathbf{H} - напряжённости электрического и магнитного полей, соответственно; \mathbf{D} - индукция (электрическое смещение) электрического поля; \mathbf{B} - индукция магнитного поля; \mathbf{j} , ρ - плотности токов и зарядов.

Материальные уравнения для изотропной среды образуют систему: $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$, $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$, $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$, где σ - удельная проводимость; ε , μ - соответственно диэлектрическая и магнитная проницаемости среды.

В случае монохроматического поля, в среде без проводимости и без сторонних токов и зарядов, из (2.1)-(2.4) получается следующая система уравнений:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = -\frac{i\omega}{c} \varepsilon \mathbf{E}, \quad (2.5)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H}, \quad (2.6)$$

где ω - циклическая частота.

Предположим, что дифракционная решётка освещается плоской монохроматической волной с единичной амплитудой и волновым вектором $\mathbf{k} = k(\sin \theta \cos \gamma_0, -\cos \theta \cos \gamma_0, \sin \gamma_0)$, где $k = 2\pi/\lambda$, а углы θ и γ_0 определяют направление падающей волны (рис. 3).

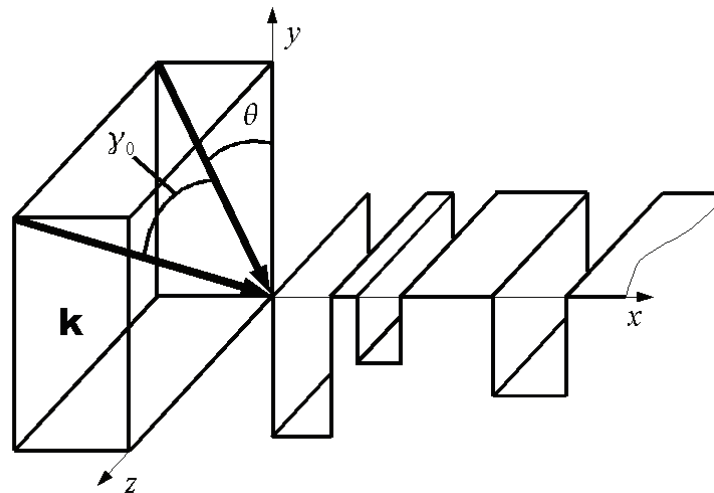


Рис. 3. Падение плоской волны на дифракционную решетку

Зависимость от переменной z напряжённостей электрического и магнитного полей, сформированных при отражении и прохождении плоской волны через решётку, описывается функцией $\exp(ik\gamma z)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x, y, z) &= \mathbf{E}(x, y) \exp(ik\gamma z), \\ \mathbf{H}(x, y, z) &= \mathbf{H}(x, y) \exp(ik\gamma z), \end{aligned} \quad (2.7)$$

где $\gamma = \sin \gamma_0$.

Подставив (2.7) в уравнения (2.5), (2.6), получим уравнения Максвелла для проекций электрического и магнитного векторов

монохроматической волны для свободного пространства:

$$\begin{aligned}
 \partial_y E_z - ik\gamma E_y &= ikH_x \\
 \partial_y H_z - ik\gamma H_y &= -ik\epsilon E_x \\
 ik\gamma E_x - \partial_x E_z &= ikH_y \\
 \partial_x E_y - \partial_y E_x &= ikH_z \\
 \partial_x H_y - \partial_y H_x &= -ik\epsilon E_z \\
 ik\gamma H_x - \partial_x H_z &= -ik\epsilon E_y,
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

где $\partial_x H_z = \partial H_z / \partial x$ и так далее.

Согласно (2.8), компоненты векторов $\mathbf{E}(x, y)$ и $\mathbf{H}(x, y)$ выражаются через компоненты $E_z(x, y)$ и $H_z(x, y)$, а компоненты $E_z(x, y)$, $H_z(x, y)$, в свою очередь, удовлетворяют уравнению Гельмгольца:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} + k^2(1 - \gamma^2)E_z = 0, \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2} + k^2(1 - \gamma^2)H_z = 0. \tag{2.10}$$

Согласно (2.9), (2.10), задача дифракции плоской волны на одномерной дифракционной решётке сводится к рассмотрению двух независимых задач: задачи дифракции плоской волны с ТЕ-поляризацией ($E_z \neq 0, H_z = 0$) и задачи дифракции плоской волны с ТМ-поляризацией ($H_z \neq 0, E_z = 0$). При этом произвольная плоская волна может быть представлена в виде линейной суперпозиции волн этих двух типов. Уравнения Гельмгольца (2.9), (2.10) должны быть дополнены граничными условиями и условием непрерывности тангенциальных компонент.

В дальнейшем изложении рассмотрим случай $\gamma = 0$, соответствующий «плоскому падению», при котором для ТЕ-поляризации $E_z \neq 0, E_x = E_y = H_z = 0$ и для ТМ-поляризации $H_z \neq 0, H_x = H_y = E_z = 0$.

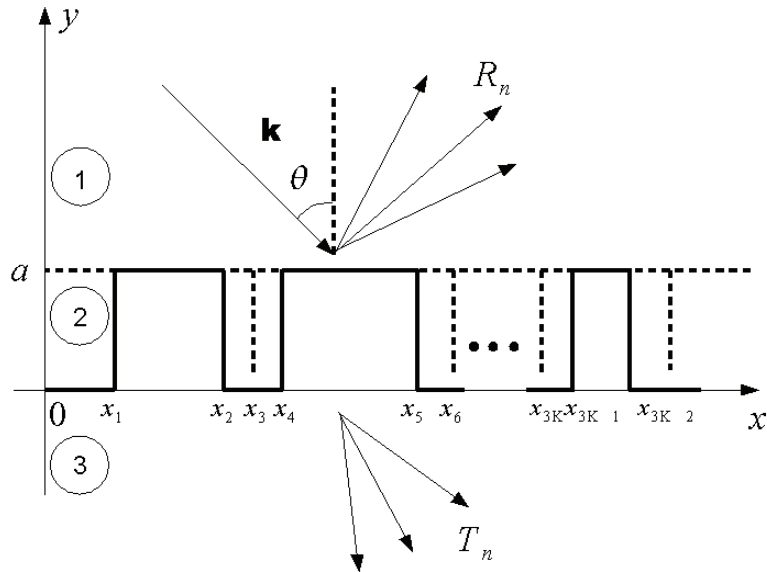


Рис. 4. Геометрия задачи дифракции на бинарной диэлектрической решётке

Таким образом, рассматривается дифракция плоской волны с волновым вектором $\mathbf{k} = k(\sin \theta, -\cos \theta, 0)$ на бинарной диэлектрической решётке с периодом d , изображённой на рис. 4.

Здесь R_n и T_n - коэффициенты отражения и пропускания дифракционных порядков. В приведённой геометрии задачи имеются три зоны с различной диэлектрической проницаемостью ε . В зонах, обозначенных как 1 и 3, т.е. при $y > a$, где a - максимальная высота профиля решётки, и при $y < 0$ диэлектрическая проницаемость постоянна. Без ограничения общности можно считать, что в первой зоне $\varepsilon = 1$, а в третьей зоне $\varepsilon > 1$. Во второй зоне при $y \in [0, a]$ - зоне модуляции диэлектрическая проницаемость является функцией $\varepsilon = \varepsilon(x)$.

Рассмотрим дифракцию двух независимых TE – и TM – поляризованных плоских волн. В первой и третьей зонах представление поля соответствует разложению Рэлея, в котором скалярная функция $u(x, y)$ соответствует компоненте $E_z(x, y)$ для TE -поляризации и компоненте $H_z(x, y)$ для TM -поляризации, являющемуся решением уравнения Гельмгольца и содержащему как однородные плоские волны ($\alpha_n^2 < 1$), так и неоднородные плоские волны ($\alpha_n^2 > 1$), экспоненциально затухающие при удалении от поверхности дифракционной решётки, при этом слагаемое $n \frac{2\pi}{d}$ в (2.12) соответствует теореме Флоке и характеризует наличие постоянного фазового сдвига между соседними периодами решётки.

Таким образом, при $y > a$ компоненты поля имеют вид:

$$u(x, y) = \exp(i(\alpha_0 x - \beta_0 y)) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} R_n \exp(i(\alpha_n x + \beta_n y)), \quad (2.11)$$

где

$$\alpha_n = k_0 \sin \theta + n \frac{2\pi}{d}, \quad k_0^2 = \frac{\omega^2}{c^2} = \left(\frac{2\pi}{\lambda_0} \right)^2, \quad \beta_n = \sqrt{k_0^2 - \alpha_n^2}. \quad (2.12)$$

При $y < 0$ функция $u(x, y)$ описывается следующим образом:

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n \exp(i(\alpha_n x - \beta_n y)), \quad (2.13)$$

где $\beta_n = \sqrt{k_0^2 \varepsilon - \alpha_n^2}$.

В зоне модуляции ($y \in [0, a]$) поле задаётся не решением уравнения Гельмгольца:

$$\Delta u + k^2 u = 0, \quad (2.14)$$

а системой дифференциальных уравнений, различных для ТЕ- и ТМ-поляризаций.

2.2. Рассеяние ТЕ-поляризованной волны на одномерной решетке

Вначале рассмотрим более простой случай ТЕ-поляризации.

Полагая в базовых уравнениях (2.8) $\mathbf{E}(x, y, z) = (0, 0, E_z(x, y))$, получаем следующую систему:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_z(x, y)}{\partial y} &= ik_0 H_x(x, y) \\ \frac{\partial E_z(x, y)}{\partial x} &= -ik_0 H_y(x, y) \\ H_z(x, y) &= 0 \\ \frac{\partial H_y(x, y)}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial H_x(x, y)}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial H_y(x, y)}{\partial x} - \frac{\partial H_x(x, y)}{\partial y} &= -ik_0 \varepsilon E_z(x, y). \end{aligned} \tag{2.15}$$

На границе раздела двух диэлектриков тангенциальные составляющие $E_z(x, y)$ и $H_x(x, y)$ векторов \mathbf{E} , \mathbf{H} непрерывны. В отличие от случая ТМ-поляризации, при ТЕ-поляризации производная $\frac{\partial E_z(x, y)}{\partial y} = ik_0 H_x(x, y)$ на границе раздела (при $y = 0$) является непрерывной, так как

$$\frac{1}{ik_0} \frac{\partial E_z(x, +0)}{\partial y} = H_x(x, +0) = H_x(x, -0) = \frac{1}{ik_0} \frac{\partial E_z(x, -0)}{\partial y}. \tag{2.16}$$

Поэтому в зоне модуляции $E_z(x, y)$ удовлетворяет уравнению Гельмгольца:

$$\Delta E_z(x, y) + k^2 E_z(x, y) = 0. \quad (2.17)$$

Функция $E_z(x, y)$ является квазипериодической, а именно

$$E_z(x, y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} E_m(y) \exp(i\alpha_m x), \quad (2.18)$$

где $\alpha_m = \alpha_0 + \frac{2\pi m}{d}$.

В дальнейшем будем считать, что функция $E_z(x, y)$ в зоне модуляции может быть аппроксимирована отрезками своего ряда (2.18) с $2N + 1$ членами.

Функция $k^2(x, y) = k_0^2 \mathcal{E}(x, y)$ является периодической по переменной x с периодом d :

$$k^2(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^{(1)}(y) \exp\left(i \frac{2\pi}{d} nx\right). \quad (2.19)$$

Однако для бинарной дифракционной решётки коэффициенты Фурье в (2.19) не зависят от переменной y , поэтому функция $k^2(x, y)$ переходит в функцию $k^2(x)$:

$$k^2(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^{(1)} \exp\left(i \frac{2\pi}{d} nx\right), \quad (2.20)$$

где

$$c_n^{(1)} = \begin{cases} \frac{3ik_0^2 \mathcal{E}}{2L\pi n} \sum_{j=1}^{L/3} \left(\exp\left(-i \frac{2\pi}{d} nx_{3(j-1)+2}\right) - \exp\left(-i \frac{2\pi}{d} nx_{3(j-1)+1}\right) \right), & n \neq 0, \\ \frac{3k_0^2 \mathcal{E}}{Ld} \sum_{j=1}^{L/3} (x_{3(j-1)+2} - x_{3(j-1)+1}), & n = 0, \end{cases} \quad (2.21)$$

где L - общее число точек, задающих дифракционную бинарную решётку, согласно рис. 4, а x_1, \dots, x_L - координаты этих точек.

При этом для регуляризации ряда, помимо множителей тихоновской регуляризации, могут быть использованы σ - множители Ланцоша, в этом случае вместо коэффициентов $c_n^{(1)}$ в разложении Фурье (2.20) при

$$n \neq 0 \text{ следует применять коэффициенты } \square c_n^{(1)} : \square c_n^{(1)} = c_n^{(1)} \left(\frac{\sin(n/d)}{(n/d)} \right)^{f(\overline{N})}, n \neq 0.$$

Подставляя (2.18), (2.20) в (2.17) и дифференцируя соответствующие ряды Фурье почленно, получаем, с учётом $2N+1$ членов разложения в (2.18), следующую систему $2N+1$ дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-N}^N \frac{\partial^2 E_m(y)}{\partial y^2} \exp(i\alpha_m x) - \sum_{m=-N}^N \alpha_m^2 E_m(y) \exp(i\alpha_m x) = \\ = - \sum_{l=-N}^N E_l(y) \exp(i\alpha_l x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \square c_n^{(1)} \exp\left(i \frac{2\pi}{d} nx\right). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Умножая уравнения (2.22) на $\exp(-i\alpha_p x)$, $p = -\overline{N}, \overline{N}$ и интегрируя по x на периоде, получаем систему $2N+1$ дифференциальных уравнений второго порядка с постоянными коэффициентами, не зависящих от переменной x :

$$\frac{\partial^2 E_n(y)}{\partial y^2} - \alpha_n^2 E_n(y) + \sum_{m=-N}^N \square c_{n-m}^{(1)} E_m(y) = 0, n = -\overline{N}, \overline{N}. \quad (2.23)$$

Таким образом, в зонах 1 и 3 решения имеют вид (2.11) и (2.13) соответственно, а в зоне модуляции необходимо решать систему уравнений (2.23), которая может быть представлена в следующем матричном виде:

$$\frac{\partial^2 E_n(y)}{\partial y^2} = A_n^{TE} \overline{E}(y), n = -\overline{N}, \overline{N}.$$

Для поиска общего решения системы (2.23) необходимо найти

$2(2N+1)$ линейно-независимых частных решений. При отсутствии модуляции ($\varepsilon(x, y) = \varepsilon$ в зоне 3 базисные решения (2.23) имеют вид:

$$E_p^\pm(y) = \exp(\pm i\beta_p y), p = -\overline{N}, \overline{N}. \quad (2.24)$$

Для согласования решения в зоне модуляции с решением (2.24) в зоне 3 определим $2(2N+1)$ векторов граничных условий для системы (2.23) в виде:

$$E_{mj}^\mp(0) = \delta_{m-j}, \frac{\partial E_{mj}^\mp(0)}{\partial y} = \mp i\beta_m \delta_{m-j}, m, j = -\overline{N}, \overline{N}, \quad (2.25)$$

где $\delta_m = \begin{cases} 1, m = 0, \\ 0, m \neq 0. \end{cases}$

При этом общее решение системы (2.23) принимает вид:

$$E_m(y) = \sum_{j=-N}^N C_j^- E_{mj}^-(y) + \sum_{j=-N}^N C_j^+ E_{mj}^+(y), m = -\overline{N}, \overline{N}. \quad (2.26)$$

Подставляя (2.26) в (2.18), получим, что в зоне модуляции $E_z(x, y)$ имеет вид:

$$E_z(x, y) = \sum_{m=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N C_j^- E_{mj}^-(y) + \sum_{j=-N}^N C_j^+ E_{mj}^+(y) \right) \exp(i\alpha_m x). \quad (2.27)$$

Для определения коэффициентов пропускания T_n и отражения R_n в (2.11), (2.13) из условий непрерывности $E_z(x, y)$ и производной $\frac{\partial E_z(x, y)}{\partial y}$ на границах зоны модуляции при $y=0$ и $y=a$ несложно получить, что при $y=0$: $T_p = C_p^-, C_p^+ = 0$, и решение в зоне модуляции принимает вид:

$$E(x, y) = \sum_{m=-N}^N \sum_{j=-N}^N T_j E_{mj}^-(y) \exp(i\alpha_m x). \quad (2.28)$$

А именно, согласно (2.13) и (2.18), при $y = 0$ для удовлетворения условиям непрерывности должно выполняться следующее равенство:

$$\sum_{n=-N}^N T_n \exp(i\alpha_n x) = \sum_{n=-N}^N E_n(0) \exp(i\alpha_n x). \quad (2.29)$$

Применяя дифференцирование к (2.13) и (2.18), при $y = 0$ получаем

$$\sum_{n=-N}^N (-i\beta_n) T_n \exp(i\alpha_n x) = \sum_{n=-N}^N \frac{\partial E_n(0)}{\partial y} \exp(i\alpha_n x). \quad (2.30)$$

С учётом (2.26) и граничных условий (2.25) получается следующая система, являющаяся следствием уравнений (2.29) и (2.30):

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-N}^N T_n \exp(i\alpha_n x) = \\ & = \sum_{n=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N C_j^- E_{nj}^-(0) + \sum_{j=-N}^N C_j^+ E_{nj}^+(0) \right) \exp(i\alpha_n x) = \\ & = \sum_{n=-N}^N (C_n^- + C_n^+) \exp(i\alpha_n x), \\ & \sum_{n=-N}^N (-i\beta_n) T_n \exp(i\alpha_n x) = \\ & = \sum_{n=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N C_j^- \frac{\partial E_{nj}^-(0)}{\partial y} + \sum_{j=-N}^N C_j^+ \frac{\partial E_{nj}^+(0)}{\partial y} \right) \exp(i\alpha_n x) = \\ & = \sum_{n=-N}^N (C_n^- (-i\beta_n) + C_n^+ (i\beta_n)) \exp(i\alpha_n x). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Из этой системы уравнений следует, что $T_n = C_n^- + C_n^+$ и $T_n = C_n^- - C_n^+$, а значит, $T_n = C_n^-$ и $C_n^+ = 0$, и согласно (2.26) получаем, что

$$E_m(y) = \sum_{n=-N}^N T_n E_{mn}^-(y), \quad (2.32)$$

откуда и следует (2.28).

На верхней границе зоны модуляции, с учётом (2.32), условия

непрерывности функции $E_z(x, y)$ и её производной имеют вид:

$$\begin{aligned}
& \sum_{m=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N T_j E_{mj}^-(a) \right) \exp(i\alpha_m x) = \\
& = \sum_{m=-N}^N R_m \exp(i\beta_m a) \exp(i\alpha_m x) + \exp(-i\beta_0 a) \exp(i\alpha_0 x), \\
& \sum_{m=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N T_j \frac{\partial E_{mj}^-(a)}{\partial y} \right) \exp(i\alpha_m x) = \\
& = \sum_{m=-N}^N i\beta_m R_m \exp(i\beta_m a) \exp(i\alpha_m x) - i\beta_0 \exp(-i\beta_0 a) \exp(i\alpha_0 x).
\end{aligned} \tag{2.33}$$

После умножения обеих частей уравнений (2.33) на $\exp(-i\alpha_p x)$, $p = \overline{-N, N}$ и интегрирования почленно по периоду получаются две системы линейных уравнений вида:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=-N}^N T_j E_{pj}^-(a) = R_p \exp(i\beta_p a) + \delta_p \exp(-i\beta_0 a), \quad p = \overline{-N, N}, \\
& \sum_{j=-N}^N T_j \frac{\partial E_{pj}^-(a)}{\partial y} = i\beta_p R_p \exp(i\beta_p a) - \delta_p i\beta_0 \exp(-i\beta_0 a), \quad p = \overline{-N, N}.
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Представим системы (2.34) в матричном виде:

$$\begin{aligned}
E_{01} \bar{T} &= E_{02} \bar{R} + \exp(-i\beta_0 a) \bar{\delta}, \\
E_{11} \bar{T} &= E_{12} \bar{R} - i\beta_0 \exp(-i\beta_0 a) \bar{\delta},
\end{aligned} \tag{2.35}$$

где введены обозначения: $E_{01pj} = E_{pj}^-(a)$, $E_{02pj} = \delta_{p-j} \exp(i\beta_p a)$, $p, j = \overline{-N, N}$,

$$E_{11pj} = \frac{\partial E_{pj}^-(a)}{\partial y}, \quad E_{12pj} = \delta_{p-j} i\beta_p \exp(i\beta_p a), \quad p, j = \overline{-N, N}.$$

Из уравнений (2.35) выводятся явные формулы для нахождения коэффициентов Рэлея:

$$\begin{aligned}
\bar{T} &= -2i\beta_0 \exp(-i\beta_0 a) (E_{11} - D_\beta E_{01})^{-1} \bar{\delta}, \\
\bar{R} &= E_{02}^{-1} E_{01} \bar{T} + \exp(-2i\beta_0 a) \bar{\delta}.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Через D_β в (2.36) обозначена диагональная матрица с элементами $i\beta_p$, а $\bar{\delta}$ - вектор столбец, у которого все элементы нулевые, кроме единицы в центре.

Запишем решение системы дифференциальных уравнений второго порядка с постоянными коэффициентами (2.23) для граничного условия с номером m в (2.25) матричном виде:

$$E_m^-(y) = \cos\left(\sqrt{A^{TE}} y\right) E_m^-(0) + \frac{\sin\left(\sqrt{A^{TE}} y\right)}{\sqrt{A^{TE}}} \frac{\partial E_m^-(0)}{\partial y}, \quad (2.37)$$

элементы матрицы A_{ij}^{TE} системы (2.23) с постоянными коэффициентами Фурье $\bar{c}_n^{(1)}$, определёнными в (2.21), имеют вид

$$A_{ij}^{TE} = -\alpha_{-(N+1)+i}^2 \delta_{i-j} + \bar{c}_{i-j}^{(1)}, i, j = \overline{1, 2N+1}. \quad (2.38)$$

Приведённое матричное представление позволяет выразить матрицы E_{01} и E_{11} в (2.36) через матрицу (2.38) и граничные условия (2.25) в виде:

$$E_{01} = \cos\left(\sqrt{A^{TE}} a\right) E + \frac{\sin\left(\sqrt{A^{TE}} a\right)}{\sqrt{A^{TE}}} D, \quad (2.39)$$

$$E_{11} = -\sqrt{A^{TE}} \sin\left(\sqrt{A^{TE}} a\right) E + \cos\left(\sqrt{A^{TE}} a\right) D, \quad (2.40)$$

где матрицы E и D являются соответственно единичной матрицей и диагональной матрицей с элементами $D_{jj} = -i\beta_j, j = \overline{-N, N}$.

Матрицы E_{01} и E_{11} также можно выразить через матричную экспоненту: заменяя систему $2N+1$ дифференциальных уравнений второго порядка (2.23) эквивалентной системой $4N+2$ дифференциальных уравнений первого порядка, получаем

$$\begin{bmatrix} E_{01} \\ E_{11} \end{bmatrix} = \exp(A_1^{TE} a) \begin{bmatrix} E \\ D \end{bmatrix}, \quad (2.41)$$

где $A_1^{TE} = \begin{bmatrix} NU & E \\ -A^{TE} & NU \end{bmatrix}$, NU - нулевые матрицы размера $(2N+1) \times (2N+1)$; E - единичная матрица.

Однако последний подход, с точки зрения вычислительного эксперимента, обладает существенными недостатками, обусловленными большей по сравнению с A^{TE} размерностью матрицы A_1^{TE} и вытекающим из этого факта наличием значительных погрешностей в ходе вычислений по формуле (2.41).

2.3. Рассеяние ТМ-поляризованной волны на одномерной решетке

Теперь рассмотрим дифракцию на бинарной пропускающей диэлектрической решётке ТМ-поляризованной плоской волны.

Для ТМ-поляризации при $\bar{H}(x, y) = (0, 0, H_x(x, y))$ вместо уравнений (2.8) получается следующая система:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y} &= -ik_0 \varepsilon E_x(x, y) \\ -\frac{\partial H_z(x, y)}{\partial x} &= -ik_0 \varepsilon E_y(x, y) \\ E_z(x, y) &= 0 \\ \frac{\partial E_y(x, y)}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial E_x(x, y)}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial E_y(x, y)}{\partial x} - \frac{\partial E_x(x, y)}{\partial y} &= -ik_0 H_z(x, y). \end{aligned} \quad (2.42)$$

На границе раздела двух диэлектриков с проницаемостями ε_1 и ε_2

тангенциальные составляющие векторов \overline{E} , \overline{H} непрерывны. Без ограничения общности будем считать границей раздела ось OX . При этом тангенциальные составляющие векторов \overline{E} , \overline{H} соответствуют компонентам $H_z(x, y)$ и $E_x(x, y)$. Условие непрерывности имеет вид:

$$\frac{-1}{ik_0\varepsilon_1} \frac{\partial H_z(x, +0)}{\partial y} = E_x(x, +0) = E_x(x, -0) = \frac{-1}{ik_0\varepsilon_2} \frac{\partial H_z(x, -0)}{\partial y}. \quad (2.43)$$

Согласно (2.43), при переходе через границу раздела функция $\frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y}$ терпит разрыв, что не позволяет использовать в случае ТМ-поляризации обычное уравнение Гельмгольца.

Непрерывной функцией при переходе через границу является функция $\left[\frac{1}{ik_0\varepsilon} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y} \right]$, а также:

$$\boxed{E}_x(x, y) = \frac{1}{k_0^2\varepsilon} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y} = \frac{1}{k^2} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y}. \quad (2.44)$$

Получим из первого, второго и пятого уравнений (2.42) аналог уравнения Гельмгольца относительно непрерывных функций $\boxed{E}_x(x, y)$ и $H_z(x, y)$:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{k^2} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{k^2} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y} \right) + H_z(x, y) = 0. \quad (2.45)$$

Представим (2.45), с учётом (2.44), в виде системы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y} &= k^2 \boxed{E}_x(x, y) \\ \frac{\partial \boxed{E}_x(x, y)}{\partial y} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{k^2} \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial x} \right) - H_z(x, y). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Функция $H_z(x, y)$ является квазипериодической:

$$H_z(x, y) = v(x, y) \exp(i\alpha_0 x), \alpha_0 = k_0 \sin \theta, \quad (2.47)$$

где $v(x, y)$ - периодическая по x функция с периодом d .

Разлагая функцию $v(x, y)$ в ряд Фурье по переменной x , представим $H_z(x, y)$ в виде:

$$H_z(x, y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} H_m(y) \exp(i\alpha_m x), \quad \alpha_m = \alpha_0 + \frac{2\pi m}{d}. \quad (2.48)$$

Функция $E_x(x, y)$ также является квазипериодической:

$$E_x(x, y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} E_m(y) \exp(i\alpha_m x). \quad (2.49)$$

Будем считать, что функции $E_x(x, y)$, $H_z(x, y)$ в зоне модуляции могут быть аппроксимированы отрезками своих рядов (2.48), (2.49) с $2N+1$ членами.

Функции $k^2(x) = k_0^2 \mathcal{E}(x)$ (см. (2.20)) и $\frac{1}{k^2(x)}$ являются

периодическими по x с периодом d :

$$\frac{1}{k^2(x)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^{(2)} \exp\left(i \frac{2\pi}{d} nx\right), \quad (2.50)$$

где $c_n^{(1)}$ считается по формуле (2.21), а $c_n^{(2)}$ — по формуле:

$$c_n^{(2)} = c_n^{(1)} \frac{1}{k_0^4 \mathcal{E}^2} = c_n^{(1)} \frac{1}{k^2}. \quad (2.51)$$

Подставляя разложения (2.20), (2.50) и (2.48), (2.49) с $2N+1$ членами в систему (2.46), получаем следующую систему $4N+2$ дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
\sum_{m=-N}^N \frac{\partial H_m(y)}{\partial y} \exp(i\alpha_m x) &= \\
&= \sum_{l=-N}^N \overline{E}_l(y) \exp(i\alpha_l x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^{(1)} \exp\left(i\frac{2\pi}{d}nx\right), \\
\sum_{m=-N}^N \frac{\partial \overline{E}_m(y)}{\partial y} \exp(i\alpha_m x) &= \\
&= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^{(2)} \exp\left(i\frac{2\pi}{d}nx\right) \sum_{l=-N}^N i\alpha_l H_l(y) \exp(i\alpha_l x) \right) - \\
&\quad - \sum_{m=-N}^N H_m(y) \exp(i\alpha_m x).
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Умножая каждое из уравнений (2.52) на $\exp(-i\alpha_p x)$, $p = -\overline{N}, \overline{N}$ и интегрируя почленно по x на периоде, получаем систему дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами, не зависящих от x :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H_p(y)}{\partial y} &= \sum_{l=-N}^N \overline{E}_l(y) c_{p-l}^{(1)}, \quad p = -\overline{N}, \overline{N}, \\
\frac{\partial \overline{E}_p(y)}{\partial y} &= \alpha_p \sum_{l=-N}^N \alpha_l c_{p-l}^{(2)} H_l(y) - H_p(y), \quad p = -\overline{N}, \overline{N}.
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Таким образом, в зонах 1 и 3 решения имеют вид (2.11), (2.13), а в зоне модуляции необходимо решать систему уравнений (2.53). Для поиска общего решения необходимо найти $4N + 2$ линейно-независимых частных решений. При отсутствии модуляции ($\varepsilon(x, y) = \varepsilon$ в зоне 3) базисные решения системы (2.53) имеют вид:

$$\begin{aligned}
H_p^\pm(y) &= \exp(\pm i \overline{\beta}_p y), \quad p = -\overline{N}, \overline{N}, \\
\overline{E}_p^\pm(y) &= \pm \frac{i \overline{\beta}_p}{k_0^2 \varepsilon} \exp(\pm i \overline{\beta}_p y), \quad p = -\overline{N}, \overline{N}.
\end{aligned} \tag{2.54}$$

Для согласования решения в зоне модуляции 2 с решением (2.54) в зоне 3 граничные условия для системы (2.53) определяются в следующем

виде:

$$H_{mj}^{\mp}(0) = \delta_{m-j}, \mathbb{E}_{mj}^{\mp}(0) = \mp \frac{i\beta_m \delta_{m-j}}{k_0^2 \varepsilon}, m, j = \overline{-N, N}. \quad (2.55)$$

Для удобства выкладок введём $4N + 2$ объединённых векторов граничных условий вида:

$$\left\{ \begin{pmatrix} H_{-N}^+(0) \\ \mathbb{E}_{-N}^+(0) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} H_N^+(0) \\ \mathbb{E}_N^+(0) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} H_{-N}^-(0) \\ \mathbb{E}_{-N}^-(0) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} H_N^-(0) \\ \mathbb{E}_N^-(0) \end{pmatrix} \right\}. \quad (2.56)$$

Обозначим $\psi_i(y), i = \overline{1, 4N + 2}$ полученные из решения системы (2.53) с граничными условиями (2.56) вектора базисных функций

$$\left\{ \begin{pmatrix} \psi_{-N}^+(y) \\ \mathbb{E}_{-N}^+(y) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \psi_N^+(y) \\ \mathbb{E}_N^+(y) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \psi_{-N}^-(y) \\ \mathbb{E}_{-N}^-(y) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \psi_N^-(y) \\ \mathbb{E}_N^-(y) \end{pmatrix} \right\}. \quad (2.57)$$

При этом общее решение системы принимает вид:

$$\begin{aligned} H_m(y) &= \sum_{j=-N}^N C_j^- \psi_{mj}^-(y) + \sum_{j=-N}^N C_j^+ \psi_{mj}^+(y), m = \overline{-N, N}, \\ \mathbb{E}_m(y) &= \sum_{j=-N}^N C_j^- \mathbb{E}_{mj}^-(y) + \sum_{j=-N}^N C_j^+ \mathbb{E}_{mj}^+(y), m = \overline{-N, N}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Для определения рэлеевских коэффициентов пропускания T_n и отражения R_n в (2.11) и (2.13) воспользуемся условиями непрерывности $H_z(x, y)$ и $\mathbb{E}_x(x, y)$ на границах зоны модуляции при $y = 0$ и при $y = a$.

Условия непрерывности при $y = 0$ дают следующие функциональные уравнения:

а) одно из них получается при подстановке первого соотношения из (2.58) в (2.48) и приравнивании к (2.13), с учётом (2.55);

б) следующее выводится подстановкой второго уравнения (2.58) в

(2.49) и приравнении к производной по y от (2.13), с учётом (2.44) и (2.55):

$$\begin{aligned}
\sum_{n=-N}^N T_n \exp(i\alpha_n x) &= \sum_{n=-N}^N H_n(0) \exp(i\alpha_n x) = \\
&= \sum_{n=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N C_j^- \psi_{nj}^-(0) + \sum_{j=-N}^N C_j^+ \psi_{nj}^+(0) \right) \exp(i\alpha_n x) = \\
&= \sum_{n=-N}^N (C_n^- + C_n^+) \exp(i\alpha_n x), \\
-\frac{i}{k_0^2 \varepsilon} \sum_{n=-N}^N \beta_n T_n \exp(i\alpha_n x) &= \sum_{n=-N}^N \bar{E}_n(0) \exp(i\alpha_n x) = \\
&= \sum_{n=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N C_j^- \bar{\psi}_{nj}^-(0) + \sum_{j=-N}^N C_j^+ \bar{\psi}_{nj}^+(0) \right) \exp(i\alpha_n x) = \\
&= \sum_{n=-N}^N \frac{i\beta_n}{k_0^2 \varepsilon} (C_n^+ - C_n^-) \exp(i\alpha_n x).
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Умножая обе части уравнений (2.59) на $\exp(-i\alpha_p x)$, $p = -\overline{N}, N$ и интегрируя по периоду, получаем, что $T_p = C_p^- + C_p^+$ и $-T_p = -C_p^- + C_p^+$, а значит, $T_p = C_p^-$ и $C_p^+ = 0$.

Следовательно, из (2.58) получим, что поле в зоне модуляции имеет вид:

$$\begin{pmatrix} H_m(y) \\ \bar{E}_m(y) \end{pmatrix} = \sum_{j=-N}^N C_j^- \begin{pmatrix} \psi_{mj}^-(y) \\ \bar{\psi}_{mj}^-(y) \end{pmatrix} = \sum_{j=-N}^N T_j \begin{pmatrix} \psi_{mj}^-(y) \\ \bar{\psi}_{mj}^-(y) \end{pmatrix}, m = -\overline{N}, N \tag{2.60}$$

Условия непрерывности функций $H_z(x, y)$ и $\bar{E}_x(x, y)$ на верхней границе зоны модуляции (при $y = a$) при подстановке (2.60) в (2.48)-(2.49) и приравнении к (2.13) и его производной по y с учётом (2.44) соответственно дают следующие уравнения:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=-N}^N R_n \exp(i\alpha_n x + i\beta_n a) + \exp(i\alpha_0 x - i\beta_0 a) = \\
& = \sum_{n=-N}^N H_n(a) \exp(i\alpha_n x) = \\
& = \sum_{n=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N T_j \psi_{nj}^-(a) \right) \exp(i\alpha_n x), \\
& \frac{i\beta_n}{k_0^2} \sum_{n=-N}^N R_n \exp(i\alpha_n x + i\beta_n a) - \frac{i\beta_0}{k_0^2} \exp(i\alpha_0 x - i\beta_0 a) = \\
& = \sum_{n=-N}^N \bar{E}_n(a) \exp(i\alpha_n x) = \\
& = \sum_{n=-N}^N \left(\sum_{j=-N}^N T_j \bar{\psi}_{nj}^-(a) \right) \exp(i\alpha_n x).
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Умножая обе части уравнений (2.61) на $\exp(-i\alpha_p x)$, $p = -\overline{N}, \overline{N}$ и интегрируя по периоду, получаем две системы линейных уравнений вида:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=-N}^N T_j \psi_{pj}^-(a) &= R_p \exp(i\beta_p a) + \delta_p \exp(-i\beta_0 a), \\
\sum_{j=-N}^N T_j \bar{\psi}_{pj}^-(a) &= R_p \exp(i\beta_p a) \frac{i\beta_p}{k_0^2} - \delta_p \exp(-i\beta_0 a) \frac{i\beta_0}{k_0^2}, \\
p &= -\overline{N}, \overline{N}.
\end{aligned} \tag{2.62}$$

Представим системы линейных уравнений (2.62) в матричном виде:

$$\begin{aligned}
H_{01} \bar{T} &= H_{02} \bar{R} + \exp(-i\beta_0 a) \bar{\delta}, \\
H_{11} \bar{T} &= H_{12} \bar{R} - \frac{i\beta_0}{k_0^2} \exp(-i\beta_0 a) \bar{\delta}.
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Здесь введены обозначения: $H_{01pj} = \psi_{pj}^-(a)$, $H_{02pj} = \delta_{p-j} \exp(i\beta_p a)$,

$H_{11pj} = \bar{\psi}_{pj}^-(a)$, и $H_{12pj} = \delta_{p-j} \frac{i\beta_p}{k_0^2} \exp(i\beta_p a)$, $p, j = -\overline{N}, \overline{N}$, при этом $\bar{\delta}$ -

вектор столбец, центральный элемент которого равен единице, а остальные элементы равны нулю.

Получим из (2.63) формулы для нахождения векторов коэффициентов Рэлея в явном виде для рассматриваемого случая ТМ-поляризации:

$$\begin{aligned}\bar{T} &= 2 \exp(-i\beta_0 a) (H_{01} - D_\beta H_{11})^{-1} \bar{\delta}, \\ \bar{R} &= H_{12}^{-1} H_{11} \bar{T} + \exp(-2i\beta_0 a) \bar{\delta},\end{aligned}\tag{2.64}$$

где через D_β обозначена диагональная матрица с элементами $\frac{k_0^2}{i\beta_p}$, $p = \overline{-N, N}$.

Так как для бинарной решётки коэффициенты Фурье в (2.21) не зависят от переменной y , и, следовательно, поле в зоне модуляции описывается системой дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами, то решение системы (2.53) для граничного условия \bar{x}_0 , определённого в уравнении (2.56), может быть представлено в следующем компактном матричном виде:

$$\begin{pmatrix} \psi_p^-(y) \\ \varphi_p^-(y) \end{pmatrix} = \exp(A^{TM} y) \bar{x}_0,\tag{2.65}$$

где A^{TM} - матрица системы (2.53) с постоянными Фурье коэффициентами $c_n^{(1)}$ и $c_n^{(2)}$, определёнными в (2.21) и (2.51).

Согласно (2.53), матрица A^{TM} имеет вид:

$$A^{TM} = \begin{bmatrix} NU & F_1 \\ F_2 & NU \end{bmatrix},\tag{2.66}$$

где NU - нулевые матрицы размера $(2N+1) \times (2N+1)$, а F_1 и F_2 - матрицы из Фурье коэффициентов:

$$F_{1ij} = c_{i-j}^{(1)}, F_{2ij} = \alpha_{-(N+1)+i} \alpha_{-(N+1)+j} c_{i-j}^{(2)} - \delta_{i-j}, i, j = \overline{1, 2N+1}.\tag{2.67}$$

Матричное представление (2.65) позволяет компактно выразить матрицы H_{01} и H_{11} в (2.64) через матрицу (2.66) системы и граничные условия (2.56) в виде:

$$\begin{pmatrix} H_{01} \\ H_{11} \end{pmatrix} = \exp(A^{TM} a) C, \quad (2.68)$$

где матрица C составлена из второй половины векторов граничных условий (2.56):

$$C = \left\{ \begin{pmatrix} H_{-N}^-(0) \\ \mathbb{E}_{-N}^-(0) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} H_N^-(0) \\ \mathbb{E}_N^-(0) \end{pmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} E \\ D_\beta \end{bmatrix}. \quad (2.69)$$

В последней формуле E - единичная матрица размера $(2N+1) \times (2N+1)$, а D_β - диагональная матрица с элементами:

$$D_{\beta jj} = \frac{-i \mathbb{B}_j}{k_0^2 \varepsilon}, j = -\overline{N, N}. \quad (2.70)$$

Наконец, определим из закона сохранения энергии интенсивности порядков, соответствующих отражённым и прошедшим волнам. Обозначим U_1 и U_2 множество индексов, соответствующих распространяющимся отражённым и прошедшим волнам:

$$U_1 = \left\{ n \mid \left(\frac{\alpha_n}{k_0} \right)^2 < 1 \right\} \quad (2.71)$$

$$U_2 = \left\{ n \mid \left(\frac{\alpha_n}{k_0 \sqrt{\varepsilon}} \right)^2 < 1 \right\}.$$

Рассмотрим прямоугольник D , ограниченный отрезками прямых $y=0$, $y=a$ и $x=0$, $x=d$. Используя закон сохранения энергии,

приравняем к нулю поток вектора Умова—Пойнтинга $S = \left(\frac{c}{8\pi} \right) \text{Re} \left[\overline{E}, \overline{H}^* \right]$

через область D . В результате получим следующие условия нормировки:

$$\begin{aligned}\cos \theta &= \sum_{n \in U_1} |R_n|^2 \cos \theta_n + \sqrt{\varepsilon} \sum_{n \in U_2} |T_n|^2 \cos \theta_n^{\square}, \\ \cos \theta &= \sum_{n \in U_1} |R_n|^2 \cos \theta_n + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \sum_{n \in U_2} |T_n|^2 \cos \theta_n^{\square}\end{aligned}\tag{2.72}$$

для ТЕ- и ТМ-поляризации соответственно. Углы θ_n , θ_n^{\square} соответствуют направлениям отражённых и прошедших волн в (2.11) и (2.13).

Согласно (2.72) под интенсивностями отражённых и прошедших порядков будем понимать следующие нормированные значения коэффициентов Рэлея:

$$I_n^R = |R_n|^2 \frac{\cos \theta_n}{\cos \theta}, \quad I_n^T = |T_n|^2 \frac{\cos \theta_n^{\square}}{\cos \theta},\tag{2.73}$$

$$I_n^R = |R_n|^2 \frac{\cos \theta_n}{\cos \theta}, \quad I_n^T = |T_n|^2 \frac{\cos \theta_n^{\square}}{\varepsilon \cos \theta},\tag{2.74}$$

для ТЕ- и ТМ-поляризации соответственно. В случае непоглощающих дифракционных решеток интенсивности отраженных и прошедших волн должны удовлетворять соотношению:

$$\sum_{n \in U_1} I_n^R + \sum_{n \in U_2} I_n^T = 1.$$

В изложенном методе не была учтена специфика численного решения систем линейных дифференциальных уравнений, полученных Фурье методом из уравнений Максвелла. Это приводит в случае ТМ-поляризации при работе с большим числом гармоник к появлению численной неустойчивости метода.

Прежде чем перейти к описанию метода, свободного от указанных недостатков, остановимся на некоторых деталях численной реализации методов решения систем дифференциальных уравнений с постоянными

коэффициентами.

2.4. Численная дискретизация функции диэлектрической проницаемости, вычисление коэффициентов Фурье

Пусть необходимо разложить в ряд Фурье периодическую функцию

$$k^2(x, y) = \left(\frac{\omega}{c} n(x, y) \right)^2 = \left\{ \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \right\} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} n^2(x, y)$$

с периодом d для произвольной формы периодического дифракционного слоя (рис.5).

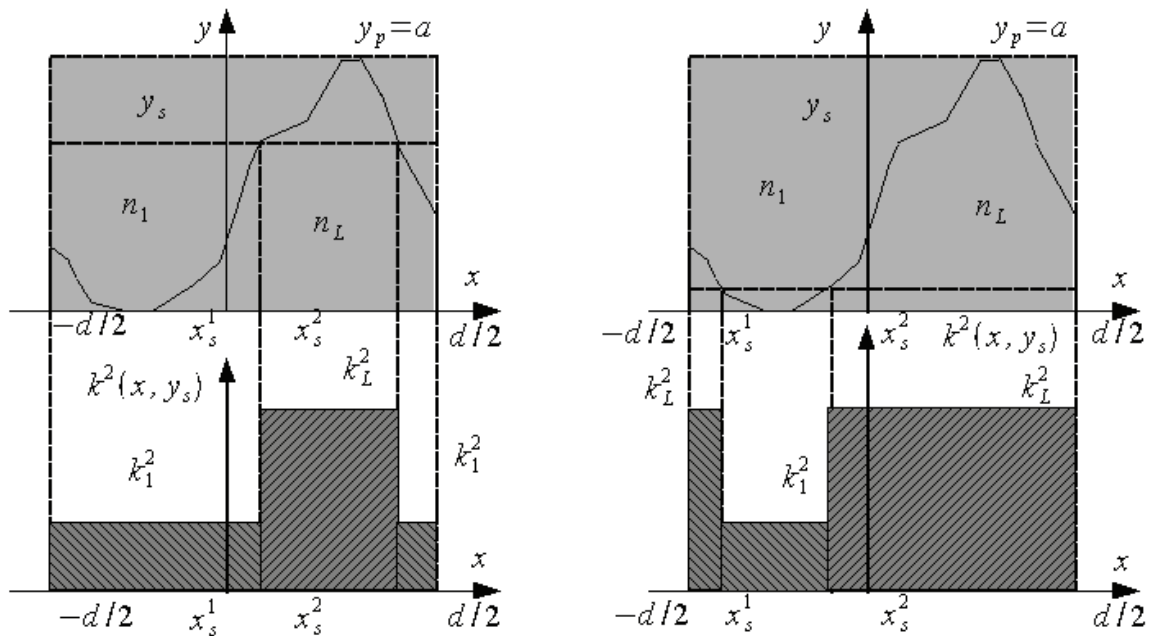


Рис. 5. Вид функции $k^2(x, y_s)$ для разложения в ряд Фурье

В рассматриваемых случаях функция $k^2(x, y_s)$ всегда имеет ступенчатый вид с двумя уровнями строго чередующихся ступеней: $\{k_L^2, k_1^2\}$. Зависимость от формы дифракционного слоя проявляется только в расположении на оси x точек $\{x_s^0, x_s^1, \dots, x_s^r, x_s^{r+1}, \dots, x_s^m\}$, являющихся границами ступеней. Расположение и количество точек

массива $\{x_S^0, x_S^1, \dots, x_S^r, x_S^{r+1}, \dots, x_S^m\}$ зависит также от уровня сечения дифракционного слоя y_s .

Схема вычислений

Последовательность построения ряда Фурье для функции $k^2(x, y_s)$.

1. Задать математическое описание для формы дифракционного слоя (периодического). В дальнейшем, по-видимому, будем использовать кусочно-аналитическое задание формы слоя, в который будут входить простейшие аналитические функции (например, прямоугольники, треугольники, параболические элементы, или степенные функции не выше второй степени).

При задании формы дифракционного слоя определяются его период d и максимальная высота a .

2. Запускается цикл по уровню высоты дифракционного слоя $0 \leq y_s \leq a$.

Для каждого уровня y_s вычисляются координаты $\{x_S^0, x_S^1, \dots, x_S^r, x_S^{r+1}, \dots, x_S^m\}$ - пересечения дифракционного слоя с заданным уровнем y_s и заполняется соответствующий массив X . При этом для массива обязательно должны выполняться условия для начальной и конечной точек: $x_S^0 = -\frac{d}{2}$, $x_S^m = \frac{d}{2}$.

Значения элементов массива должны быть строго возрастающими: $x_S^r < x_S^{r+1}$.

3. Определить уровень (значение) для начальной ступени: $k_{beg}^2 = k_L^2$ или k_1^2 .

4. С использованием заполненного массива рассчитать

коэффициенты Фурье по формулам, приведенным ниже.

Замечание. Для дифракционного слоя, состоящего из ступеней одинаковой высоты, координаты $\{x_s^0, x_s^1, \dots, x_s^r, x_s^{r+1}, \dots, x_s^m\}$ и уровень начальной ступени k_{beg}^2 будут оставаться постоянными и не зависящими от высоты слоя y_s .

Коэффициенты Фурье

Обозначим через X_L – множество отрезков с $k^2 \equiv k_L^2$, а через X_1 – множество отрезков с $k^2 \equiv k_1^2$.

При $j \neq 0$

$$\begin{aligned} g_j(y_s) &= \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} k^2(x, y_s) \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx = \\ &= \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[\sum \int_{X_L} n_L^2 \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx + \sum \int_{X_1} n_1^2 \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx \right]. \end{aligned}$$

Для участков постоянства k_L^2 : $[x_s^r, x_s^{r+1}]$ имеем:

$$\int_{x_s^r}^{x_s^{r+1}} n_L^2 \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx = -\frac{n_L^2}{i\frac{2\pi}{d}j} \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} \Big|_{x_s^r}^{x_s^{r+1}} = \frac{in_L^2 d}{2\pi j} \left[e^{-i\frac{2\pi}{d}jx_s^{r+1}} - e^{-i\frac{2\pi}{d}jx_s^r} \right].$$

При $j = 0$

$$g_0(y_s) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} k^2(x, y_s) dx = \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[\sum \int_{X_L} n_L^2 dx + \sum \int_{X_1} n_1^2 dx \right].$$

Для участков постоянства k_L^2 : $[x_s^r, x_s^{r+1}]$ имеем

$$\int_{x_s^r}^{x_s^{r+1}} n_L^2 dx = n_L^2 \cdot (x_s^{r+1} - x_s^r).$$

Ту же процедуру проделываем для участков постоянства k_1^2 .

Пример 1. Рассмотрим слой постоянной толщины (рис.6).

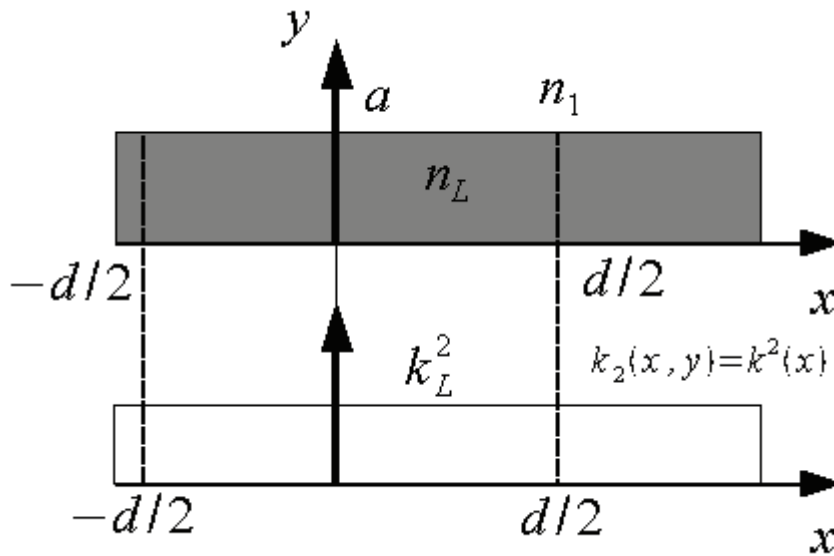


Рис. 6. Постоянный слой

В этом случае $\{x_S^0, x_S^1, \dots, x_S^r, x_S^{r+1}, \dots, x_S^m\} = \{x_S^0, x_S^1\} = \{-d/2, d/2\}$, и геометрическая структура слоя задается всего лишь двумя граничными точками: $X_{kol} = 2: k_{beg}^2 = k_L^2$.

Заметим, что для алгоритма, реализованного в программе расчета коэффициентов Фурье, можно задать $\{x_S^0, x_S^1\} = \{0, 1\}$.

Предположим, что это слой серебра, значение диэлектрической проницаемости которого: $n_L = 0.05 - i * 2.87$ при $\lambda = 500$ нм; в промежутках – воздух с индексом: $n_1 = 1$. Тогда

$$\begin{aligned} k^2(x, y) &= \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot (0.05 - i * 2.87)^2 = \\ &= \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot (0.05^2 - 2.87^2 - 2i \cdot 0.05 \cdot 2.87) = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot (-8.2344 - i * 0.287). \end{aligned}$$

При $j \neq 0$

$$\begin{aligned}
g_j(y) \equiv g_j &= \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} k^2(x) \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx = \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[\int_{-d/2}^{d/2} n_{silv}^2 \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx \right] = \\
&= \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[\int_{-d/2}^{d/2} n_{silv}^2 \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx \right] = \\
&= \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot n_{silv}^2 \frac{id}{2\pi j} \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} \Big|_{-d/2}^{d/2} = \\
&= \frac{2\pi i}{\lambda^2 j} n_{silv}^2 \left(e^{-i\frac{2\pi}{d}j\frac{d}{2}} - e^{i\frac{2\pi}{d}j\frac{d}{2}} \right) = \\
&= \frac{2\pi i}{\lambda^2 j} n_{silv}^2 \left(\cos(\pi j) - i \sin(\pi j) - (\cos(\pi j) + i \sin(\pi j)) \right) = 0.
\end{aligned}$$

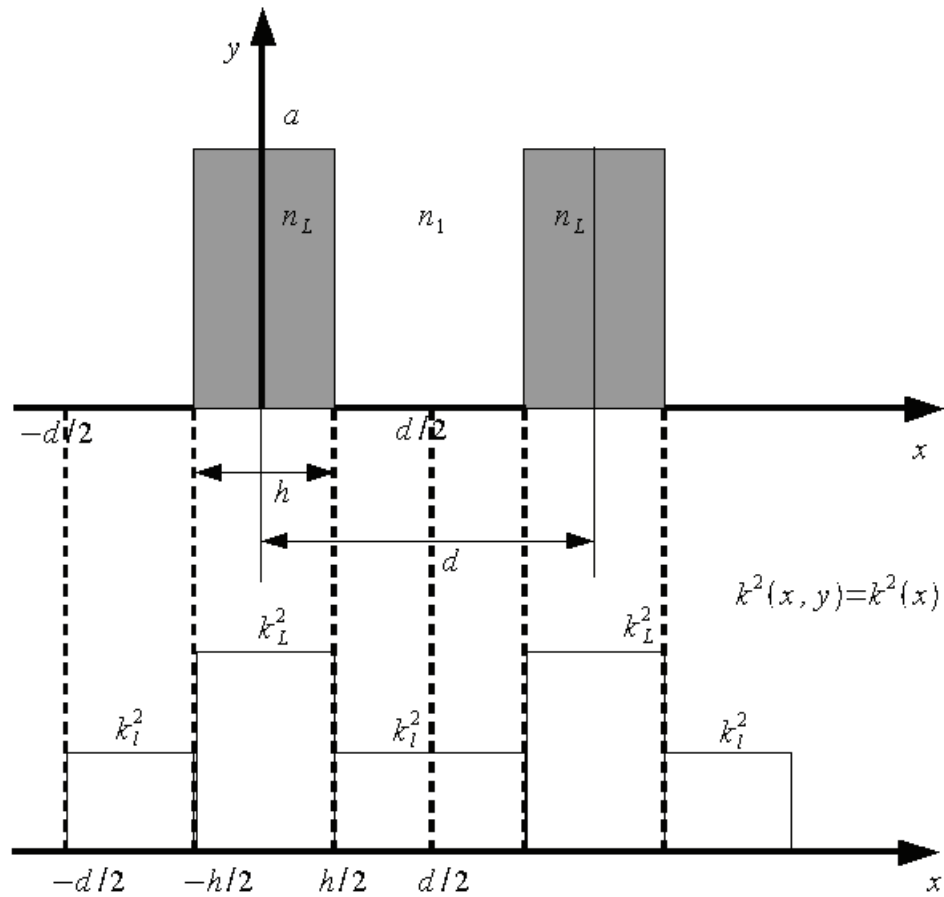


Рис. 7. Слой с пеньками

При $j = 0$

$$g_0(y_s) \equiv g_0 = \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[\int_{-d/2}^{d/2} n_{silv}^2 dx \right] = \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[n_{silv}^2 \left(\frac{d}{2} + \frac{d}{2} \right) \right] = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot n_{silv}^2.$$

Пример 2. Рассмотрим слой, состоящий из серебряных пенчков различной высоты (рис.7).

Сетку для такой структуры можно задать четырьмя точками:

$$\{x_S^0, x_S^1, \dots, x_S^r, x_S^{r+1}, \dots, x_S^m\} = \{x_S^0, x_S^1, x_S^2, x_S^3\} = \{-d/2, -h/2, h/2, d/2\},$$

$$X_{kol} = 4, \text{ в начало сетки помещаем точку } k_{beg}^2 = k_1^2.$$

Заметим, что для алгоритма, реализованного в программе расчета коэффициентов Фурье, сетку можно задать следующими четырьмя точками:

$$\{x_S^0, x_S^1, x_S^3, x_S^3\} = \{0, 0.5(1-h/d), 0.5(1+h/d), 1\}.$$

Снова считаем, что это слой серебра, значение диэлектрической проницаемости которого: $n_L = 0.05 - i \cdot 2.87$ при $\lambda = 500$ нм.; в промежутках – воздух с индексом: $n_1 = 1$. Тогда: $n_L = 0.05 - i \cdot 2.87$ при $\lambda = 500$ нм.; индекс диэлектрической проницаемости воздуха практически равен 1: $n_1 = 1$.

$$\begin{aligned} k^2(x, y) &= \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot (0.05 - i \cdot 2.87)^2 = \\ &= \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot (0.05^2 - 2.87^2 - 2i \cdot 0.05 \cdot 2.87) = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot (-8.2344 - i \cdot 0.287). \end{aligned}$$

При $j \neq 0$

$$\begin{aligned} g_j(y) \equiv g_j &= \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} k^2(x) \cdot e^{-i \frac{2\pi}{d} jx} dx = \\ &= \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[\int_{-d/2}^{-h/2} e^{-i \frac{2\pi}{d} jx} dx + \int_{-h/2}^{h/2} n_{silv}^2 \cdot e^{-i \frac{2\pi}{d} jx} dx + \int_{h/2}^{d/2} e^{-i \frac{2\pi}{d} jx} dx \right]. \end{aligned}$$

Вычислим первый и третий интегралы:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-d/2}^{-h/2} e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx + \int_{h/2}^{d/2} e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx g_j(y) = \frac{id}{2\pi j} \left[e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} \Big|_{-d/2}^{-h/2} + e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} \Big|_{h/2}^{d/2} \right] = \\
 & = \frac{id}{2\pi j} \left[e^{i\frac{2\pi}{d}j\frac{h}{2}} - e^{i\frac{2\pi}{d}j\frac{d}{2}} + e^{-i\frac{2\pi}{d}j\frac{d}{2}} - e^{-i\frac{2\pi}{d}j\frac{h}{2}} \right] = \\
 & = \frac{id}{2\pi j} \left[\cos\left(\frac{\pi hj}{d}\right) + i \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) - \left(\cos\left(\frac{\pi hj}{d}\right) - i \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) \right) - \right. \\
 & \left. - (\cos(\pi j) + i \sin(\pi j)) + \cos(\pi j) - i \sin(\pi j) \right] = \\
 & = \frac{id}{2\pi j} \left[2i \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) \right] = -\frac{d}{\pi j} \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right).
 \end{aligned}$$

Вычислим второй интеграл:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-h/2}^{h/2} n_{silv}^2 \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} dx = n_{silv}^2 \frac{id}{2\pi j} \cdot e^{-i\frac{2\pi}{d}jx} \Big|_{-h/2}^{h/2} = n_{silv}^2 \frac{id}{2\pi j} \left(e^{-i\frac{2\pi}{d}j\frac{h}{2}} - e^{i\frac{2\pi}{d}j\frac{h}{2}} \right) = \\
 & = n_{silv}^2 \frac{id}{2\pi j} \left(\cos\left(\frac{\pi hj}{d}\right) - i \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) - \left(\cos\left(\frac{\pi hj}{d}\right) + i \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) \right) \right) = \\
 & = n_{silv}^2 \frac{id}{2\pi j} \left(-2i \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) \right) = n_{silv}^2 \frac{d}{\pi j} \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right).
 \end{aligned}$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned}
 g_j & = \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[-\frac{d}{\pi j} \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) + n_{silv}^2 \frac{d}{\pi j} \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) \right] = \\
 & = \frac{4\pi}{\lambda^2 j} \cdot \sin\left(\frac{\pi hj}{d}\right) (n_{silv}^2 - 1).
 \end{aligned}$$

При $j = 0$

$$\begin{aligned}
g_0(y_s) \equiv g_0 &= \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[\int_{-d/2}^{-h/2} dx + \int_{-h/2}^{h/2} n_{silv}^2 dx + \int_{h/2}^{d/2} dx \right] = \\
&= \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left[-\frac{h}{2} + \frac{d}{2} + n_{silv}^2 \left(\frac{h}{2} + \frac{h}{2} \right) + \frac{d}{2} - \frac{h}{2} \right] = \\
&= \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} (d - h + h \cdot n_{silv}^2) = \frac{1}{d} \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} (d + h(n_{silv}^2 - 1)).
\end{aligned}$$

2.5. Свойства теплицевых матриц. Обращение теплицевых матриц

Приведем основные свойства теплицевых матриц, следуя [7]. Будем считать, что элементы матриц принадлежат некоторому кольцу Ω с единицей I . От кольца будем требовать выполнения следующего условия: из единственности решений уравнений $Ax = y$ и $z'A = y'$ для матрицы A и вектора y с элементами из Ω должно вытекать существование решений системы при любой правой части и, следовательно, обратимость матрицы A .

Определение. Матрица A_n порядка $n + 1$, элементы которой зависят только от разности индексов $i = j$, называется теплицевой.

Такая матрица и ее элементы обозначаются следующим образом:

$$A_n = \begin{bmatrix} a_0 & a_{-1} & \dots & a_{-n} \\ a_1 & a_0 & \dots & a_{-n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_n & a_{n-1} & \dots & a_0 \end{bmatrix}. \quad (2.75)$$

Произведение теплицевых матриц уже не является теплицевой матрицей. Однако матрица, обратная к теплицевой, выражается через сумму произведений теплицевых матриц специального вида. Это представление обратной матрицы неоднозначно и зависит от различных

дополнительных условий, накладываемых на теплицеву матрицу.

Пусть A_n - теплицева матрица. Рассмотрим величины $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i, \delta_i \in \Omega$, удовлетворяющие уравнениям:

$$\begin{aligned} A_n(\alpha_0, \dots, \alpha_n)' &= (\varphi_0, \dots, \varphi_n)', \\ A_n(\beta_0, \dots, \beta_n)' &= (I, \dots, I)', \\ (\gamma_0, \dots, \gamma_n)A_n &= (I, \dots, I), \\ (\delta_0, \dots, \delta_n)A_n &= (\psi_0, \dots, \psi_n), \end{aligned} \quad (2.76)$$

где $\varphi_0 = \psi_0 = 0$, $\varphi_i = a_1 + \dots + a_i$, $\psi_i = a_{-1} + \dots + a_{-i}$, и теплицевы матрицы

$$Q_l = \begin{bmatrix} I & 0 & \dots & 0 \\ -I & I & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -I & I \end{bmatrix}, \quad Q_u = \begin{bmatrix} I & -I & \dots & 0 \\ 0 & I & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & -I \\ 0 & 0 & \dots & I \end{bmatrix}, \quad (2.77)$$

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_n & \alpha_{n-1} & \dots & \alpha_0 \\ 0 & \alpha_n & \dots & \alpha_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_n \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_n & \beta_{n-1} & \dots & \beta_0 \\ 0 & \beta_n & \dots & \beta_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \beta_n \end{bmatrix}, \quad (2.78)$$

$$\gamma = \begin{bmatrix} \gamma_n & 0 & \dots & 0 \\ \gamma_{n-1} & \gamma_n & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \gamma_0 & \gamma_1 & \dots & \gamma_n \end{bmatrix}, \quad \delta = \begin{bmatrix} \delta_n & 0 & \dots & 0 \\ \delta_{n-1} & \delta_n & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \delta_0 & \delta_1 & \dots & \delta_n \end{bmatrix}. \quad (2.79)$$

Если уравнения, определяющие $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i, \delta_i$, разрешимы, то матрица A_n - невырожденная и A_n^{-1} имеет вид

$$A_n^{-1} = Q_u [\beta \alpha_0 \gamma + \alpha \gamma + \beta \delta] Q_l. \quad (2.80)$$

Если A_n - невырожденная теплицева матрица с элементами из кольца Ω , то матрица A_n' - также невырожденная теплицева.

Пусть A_n - теплицева матрица и величины $\bar{\alpha}_i, \bar{\delta}_i$ удовлетворяют

уравнениям:

$$\begin{aligned} A_n(\bar{\alpha}_0, \dots, \bar{\alpha}_n)' &= (\psi_n, \dots, \psi_0)', \\ (\bar{\delta}_0, \dots, \bar{\delta}_n)A_n &= (\varphi_n, \dots, \varphi_0). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Если уравнения, определяющие $\bar{\alpha}_i, \bar{\delta}_i, \beta_i, \gamma_i$, разрешимы, то матрица A_n - невырожденная и A_n^{-1} имеет вид:

$$A_n^{-1} = Q_l [\bar{\beta} \alpha_0 \bar{\gamma} + \bar{\alpha} \bar{\gamma} + \bar{\beta} \bar{\delta}] Q_u, \quad (2.82)$$

где

$$\bar{\alpha} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha}_0 & 0 & \dots & 0 \\ \bar{\alpha}_1 & \bar{\alpha}_0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \bar{\alpha}_n & \bar{\alpha}_{n-1} & \dots & \bar{\alpha}_0 \end{bmatrix}, \quad \bar{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_1 & \beta_0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_n & \beta_{n-1} & \dots & \beta_0 \end{bmatrix}, \quad (2.83)$$

$$\bar{\gamma} = \begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & \dots & \gamma_n \\ 0 & \gamma_0 & \dots & \gamma_{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \gamma_0 \end{bmatrix}, \quad \bar{\delta} = \begin{bmatrix} \bar{\delta}_0 & \bar{\delta}_1 & \dots & \bar{\delta}_n \\ 0 & \bar{\delta}_0 & \dots & \bar{\delta}_{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \bar{\delta}_0 \end{bmatrix}. \quad (2.84)$$

Представления (2.80), (2.82) для A_n^{-1} легко преобразуются к виду, содержащему суммы двух произведений треугольных теплицевых матриц, причем в (2.80) левые и правые сомножители являются соответственно правыми и левыми треугольными матрицами, а в (2.82) – левыми и правыми. Эти представления матрицы, обратной к теплицевой, являются самыми общими. Они полностью определяются через решения некоторых систем с матрицами A и A' при специальном выборе правых частей, при одном лишь предположении о разрешимости этих систем. Если же на матрицу A наложить дополнительные ограничения, то для полного представления A_n^{-1} можно использовать лишь некоторые строки и столбцы матрицы A_n^{-1} .

Например, пусть A_n - теплицева матрица и величины x_i, y_i, z_i, w_i удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} A_n(x_0, \dots, x_n)' &= (I, 0, \dots, 0)', \\ A_n(y_0, \dots, y_n)' &= (0, \dots, 0, I)', \\ (z_0, \dots, z_n)A_n &= (I, 0, \dots, 0), \\ (w_0, \dots, w_n)A_n &= (0, \dots, 0, I), \end{aligned} \tag{2.85}$$

т.е. x_i, y_i, z_i, w_i - элементы соответственно первого и последнего столбцов, а также первой и последней строк матрицы A_n^{-1} .

Если эти уравнения разрешимы и существуют элементы x_0^{-1}, y_n^{-1} , то матрица A_n - невырожденная и A_n^{-1} имеет вид

$$\begin{aligned} A_n^{-1} &= \begin{bmatrix} x_0 & 0 & \dots & 0 \\ x_1 & x_0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_n & x_{n-1} & \dots & x_0 \end{bmatrix} x_0^{-1} \begin{bmatrix} z_0 & z_1 & \dots & z_n \\ 0 & z_0 & \dots & z_{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & z_0 \end{bmatrix} - \\ &- \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ y_0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{n-1} & \dots & y_0 & 0 \end{bmatrix} y_n^{-1} \begin{bmatrix} 0 & w_0 & \dots & w_{n-1} \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & w_0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.86}$$

Или, что эквивалентно:

$$\begin{aligned} A_n^{-1} &= \begin{bmatrix} y_n & y_{n-1} & \dots & y_0 \\ 0 & y_n & \dots & y_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & y_n \end{bmatrix} y_n^{-1} \begin{bmatrix} w_n & 0 & \dots & 0 \\ w_{n-1} & w_n & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_0 & w_1 & \dots & w_n \end{bmatrix} - \\ &- \begin{bmatrix} 0 & x_n & \dots & x_1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & x_n \\ 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix} x_0^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ z_n & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ z_1 & \dots & z_n & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{2.87}$$

Аналогичные представления можно получить с привлечением

элементов второго и предпоследнего столбцов, а также второй и предпоследней строк матрицы A_n^{-1} . Необходимость такого представления может возникнуть, если для невырожденной матрицы A_n не существуют элементы x_0^{-1}, y_n^{-1} . Мы не будем выписывать эти представления, отметим лишь, что они вполне аналогичны представленным выше.

Для практических вычислений особое значение имеют случаи, когда Ω - поле комплексных чисел. В этом случае формулы вычисления матриц, обратных к теплицевым, упрощаются. Оказывается, в этом случае между параметрами, определяющими обратную матрицу, существует простая зависимость, порожденная свойством персимметричности рассматриваемых матриц.

Определение. Матрица A называется персимметричной, если она симметрична относительно второй диагонали.

Теплицева матрица персимметрична для любого кольца Ω .

Если элементы невырожденной теплицевой матрицы принадлежат полю комплексных чисел, то обратная матрица является персимметричной. В этом случае для элементов x_i, y_i, z_i, w_i из (2.85) для всех i выполняются соотношения $x_i = w_{n-i}, y_i = z_{n-i}$.

Поэтому для комплексных теплицевых матриц вычисление обратной еще более упрощается. В условиях и обозначениях (2.85) - (2.87) матрица A_n^{-1} имеет вид

$$A_n^{-1} = x_0^{-1} \left(\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc} x_0 & 0 & \dots & 0 \\ x_1 & x_0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_n & x_{n-1} & \dots & x_0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} y_n & y_{n-1} & \dots & y_0 \\ 0 & y_n & \dots & y_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & y_n \end{array} \right] - \\ - \left[\begin{array}{cccc} 0 & 0 & \dots & 0 \\ y_0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{n-1} & \dots & y_0 & 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} 0 & x_n & \dots & x_1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & x_n \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{array} \right] \end{array} \right). \quad (2.88)$$

Или, поменяв местами сомножители, мы можем записать выражение для обратной матрицы в виде:

$$A_n^{-1} = x_0^{-1} \left(\begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} y_n & y_{n-1} & \dots & y_0 \\ 0 & y_n & \dots & y_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & y_n \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} x_0 & 0 & \dots & 0 \\ x_1 & x_0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_n & x_{n-1} & \dots & x_0 \end{array} \right] - \\ - \left[\begin{array}{cccc} 0 & x_n & \dots & x_1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & x_n \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} 0 & 0 & \dots & 0 \\ y_0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{n-1} & \dots & y_0 & 0 \end{array} \right] \end{array} \right). \quad (2.89)$$

Таким образом, если элементы невырожденной треплицевой матрицы являются комплексными числами, то элементы обратной матрицы в случае $x_0 \neq 0$ полностью определяются ее первым и последним столбцами.

Из последнего утверждения следует, что для определения матрицы, обратной по отношению к комплекснозначной треплицевой матрице, требуется решить всего лишь две системы линейных алгебраических уравнений вида (2.85) и затем заполнить элементы обратной матрицы в соответствии с формулами (2.88) или (2.89).

**Решение систем линейных алгебраических уравнений с
теплицевыми матрицами над полем комплексных чисел.**

Пусть A - теплицева матрица с комплексными или вещественными элементами:

$$A = \begin{bmatrix} a_0 & a_{-1} & \dots & a_{-n} \\ a_1 & a_0 & \dots & a_{-n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_n & a_{n-1} & \dots & a_0 \end{bmatrix}. \quad (2.90)$$

Обозначим через u_k, v_k соответственно первый и последний столбцы обратной матрицы A_k^{-1} ведущего минора порядка $k+1$. Пусть их можно представить в виде

$$u_k = \begin{bmatrix} \hat{u}_{0,k} \\ \hat{u}_{1,k} \\ \dots \\ \hat{u}_{k,k} \end{bmatrix} \theta_k, \quad v_k = \begin{bmatrix} \hat{v}_{0,k} \\ \hat{v}_{1,k} \\ \dots \\ \hat{v}_{k,k} \end{bmatrix} \nu_k. \quad (2.91)$$

Если в таком же виде представлены векторы u_{k-1}, v_{k-1} , то

$$u_k = \left(\begin{bmatrix} \hat{u}_{0,k-1} \\ \hat{u}_{1,k-1} \\ \dots \\ \hat{u}_{k-1,k-1} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \hat{v}_{0,k-1} \\ \dots \\ \hat{v}_{k-1,k-1} \\ \hat{v}_{k-1,k-1} \end{bmatrix} \tau_k \right) \theta_k, \quad (2.92)$$

$$v_k = \left(\begin{bmatrix} \hat{u}_{0,k-1} \\ \hat{u}_{1,k-1} \\ \dots \\ \hat{u}_{k-1,k-1} \\ 0 \end{bmatrix} \delta_k + \begin{bmatrix} 0 \\ \hat{v}_{0,k-1} \\ \dots \\ \hat{v}_{k-1,k-1} \\ \hat{v}_{k-1,k-1} \end{bmatrix} \right) \nu_k, \quad (2.93)$$

где

$$\begin{aligned}
\tau_k &= -v_{k-1}\varphi_k, & \delta_k &= -\theta_{k-1}\psi_k, \\
\theta_k &= (1 - \delta_k\tau_k)^{-1}\theta_{k-1}, & v_{k-1} &= (1 - \delta_k\tau_k)^{-1}v_{k-1}, \\
\varphi_k &= \sum_{t=k}^1 a_t \hat{u}_{k-t, k-1}, & \psi_k &= \sum_{t=1}^k a_{-t} \hat{v}_{t-1, k-1}.
\end{aligned} \tag{2.94}$$

Пусть теперь A - тридиагональная матрица порядка $n+1$ с ненулевыми ведущими минорами. В обозначениях (2.90) первый и последний столбцы матрицы A_0^{-1} (размерности 1) совпадают и содержат единственный элемент a_0^{-1} . Пусть теперь для $k \geq 1$ вычислены столбцы u_{k-1}, v_{k-1} матрицы A_{k-1}^{-1} . Тогда столбцы u_k, v_k матрицы A_k^{-1} однозначно определяются по алгоритму (2.91)-(2.94). При $k = n$ будут вычислены первый и последний столбцы матрицы A^{-1} и, следовательно, будет найдено представление обратной матрицы A^{-1} .

Если при реализации процесса, описанного в предыдущем абзаце, умножение векторов на θ_k, v_k осуществить лишь в конце процесса, то представления обратной матрицы могут быть найдены всего за $4n^2$ операций умножения и сложения.

Метод, описанный выше, желательно применять в том случае, когда требуется решить несколько систем уравнений с одной и той же матрицей системы, но различными правыми частями. Тогда целесообразно вычислить вначале обратную матрицу, а произведение обратной матрицы на вектор правой части можно осуществлять не с очень большими затратами.

Для решения отдельной системы линейных алгебраических уравнений наиболее предпочтительным является следующий алгоритм.

Пусть решается система линейных алгебраических уравнений $Ax = b$ с тридиагональной матрицей A . Рассмотрим усеченные системы $A_k x_k = b_k$, где A_k - матрица углового минора порядка $k+1$; b_k - вектор, содержащий

первые $k+1$ координат вектора b . Если $x_{0,k}, \dots, x_{k,k}$ - координаты вектора x_k , то в обозначениях (2.91)-(2.94) для всех k выполняется соотношение:

$$\begin{bmatrix} x_{0,k} \\ \dots \\ x_{k-1,k} \\ x_{k,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{0,k-1} \\ \dots \\ x_{k-1,k-1} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{u}_{0,k} \\ \dots \\ \hat{u}_{k-1,k} \\ \hat{u}_{k,k} \end{bmatrix} (v_k \alpha_k), \quad (2.95)$$

$$\alpha_k = b_k - \sum_{l=1}^k a_l x_{k-l,k-1}. \quad (2.96)$$

Если решать систему линейных алгебраических уравнений порядка n на основе этих соотношений, то решение может быть найдено за $6n^2$ операций умножения и сложения.

Тема 3. Устойчивый метод решения задачи дифракции ТМ-поляризованной волны на одномерной решетке

3.1. Системы единиц измерения электрических и магнитных величин и используемые обозначения

До сих пор мы пользовались абсолютной гауссовой системой единиц. Она наилучшим образом подходит для изложения фундаментальных законов, так как в уравнения Максвелла явным образом входит одна из мировых констант — скорость света c в вакууме. Это облегчает установление связи между электродинамикой и теорией относительности, специальной и общей.

Наряду с гауссовой системой, в прикладной электродинамике часто используется так называемая международная система единиц (SI или СИ). В указанной системе электромагнитное поле в вакууме описывается четырьмя векторами $\mathbf{E}, \mathbf{D}, \mathbf{B}$ и \mathbf{H} . Уравнения Максвелла в этой системе единиц приобретают вид:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (3.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{j}(\mathbf{r}, t), \quad (3.2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t), \quad (3.3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.4)$$

Векторы \mathbf{E}, \mathbf{D} и \mathbf{B}, \mathbf{H} попарно связаны следующими соотношениями:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad (3.5)$$

где

$$\varepsilon_0 = \frac{10^7}{4\pi c^2} \text{ фарада/метр} \quad \text{и} \quad \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ генри/метр} \quad (3.6)$$

— электрическая и магнитная постоянные.

Эти возникающие в СИ величины по отдельности лишены какого-либо разумного физического смысла; лишь их комбинация $(\varepsilon_0 \mu_0)^{-1/2} = c$ представляет собой скорость света в вакууме.

Простота записи уравнений Максвелла в СИ обманчива. Кроме уже указанных недостатков (четыре вектора вместо двух, использование «электрической и магнитной проницаемостей вакуума» — реликта эпохи «светоносного эфира») имеются и другие: разные размерности всех четырех векторов, описывающих один и тот же объект — электромагнитное поле; введение кроме трех основных величин (длина, время, масса), имеющих в гауссовой системе, еще четвертой величины с независимой размерностью (сила тока, измеряемая в амперах). Последняя единица выбрана из чисто практических соображений.

На основе приведенных выше соображений будем пользоваться и в дальнейшем гауссовой системой единиц. Запись основных формул электродинамики и перевод единиц измерения из одной системы в другую можно без затруднений произвести с помощью соответствующих справочников.

Приведем обозначения, обычно используемые в задачах дифракции:

j — мнимая единица;

λ_0 — длина волны излучения в вакууме;

k — волновое число в среде, k_0 — волновое число в вакууме;

$\mathbf{k} = k \cdot \mathbf{u}$ — волновой вектор, \mathbf{u} — единичный волновой вектор;

ε , μ — коэффициенты диэлектрической и магнитной проницаемости

среды;

$\epsilon_0 = 1$, $\mu_0 = 1$ – коэффициенты диэлектрической и магнитной проницаемости вакуума – нормировочные константы, отличные от единицы в других системах единиц измерения, например в СИ;

n – комплексный индекс преломления: $\epsilon = n^2$;

c – скорость света в вакууме, $c = 2.997\,924\,58 \times 10^8$ м/с;

$v = \frac{c}{n}$ – скорость света в среде, отличной от вакуума.

В вакууме выполняются соотношения: $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} = \frac{\omega_0}{c} = \omega$, откуда следует,

что $k_0 \lambda_0 = 2\pi$, а в среде выполняются соотношения: $k^2 = \frac{\omega_0^2}{c^2} \epsilon = k_0^2 \epsilon$,

поэтому $k = k_0 n$.

$\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$, $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$ – векторы электрической и магнитной напряженностей.

Поскольку $\mathbf{E} = \sqrt{\frac{1}{\epsilon}} (\mathbf{H} \times \mathbf{u})$, $\mathbf{H} = -\sqrt{\epsilon} (\mathbf{E} \times \mathbf{u})$, то векторы \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{u} образуют правую тройку векторов (compose right-hand triple).

Скалярные величины в формулах будут изображаться стандартным шрифтом, а векторные – жирным шрифтом.

Система координат и составляющие электромагнитного вектора приведены на рис.8.

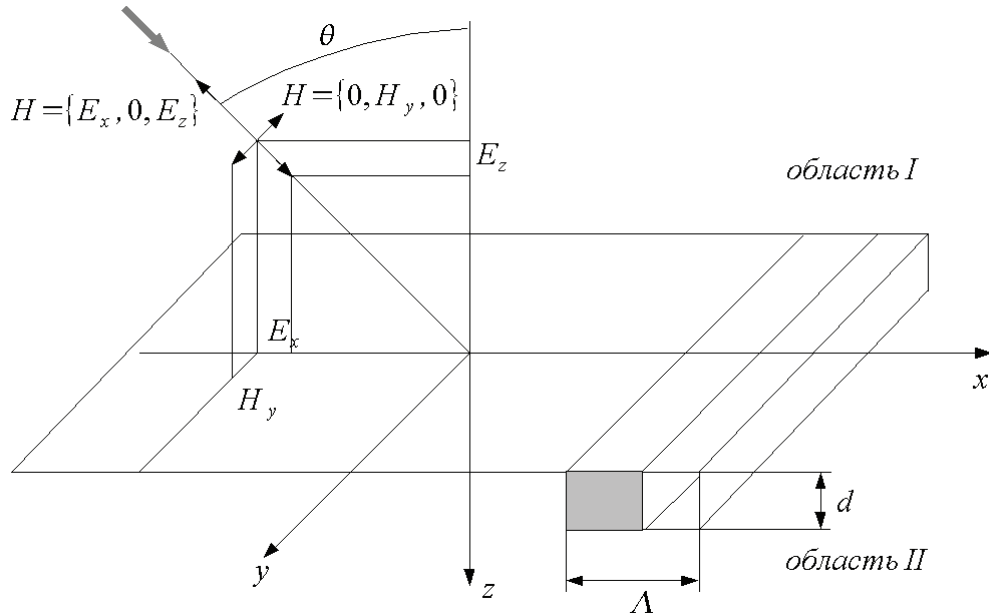


Рис. 8. Графическое изображение падающей ТМ-поляризованной волны на дифракционную решетку

3.3. Дифракция ТМ-поляризованной волны

Для случая ТМ-поляризации при переходе через границу области непрерывными являются тангенциальные составляющие E_x и H_y (рис.8).

Проекция волнового вектора

Проекция на ось OX:

$$k_{xi} = k_0 \left(n \cdot \sin(\theta) - i \frac{\lambda_0}{\Lambda} \right) = k_0 n \cdot \sin(\theta) - ik_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} = k_0 n \cdot \sin(\theta) - i \frac{2\pi}{\Lambda},$$

где n – комплексный коэффициент преломления.

Проекция на ось OZ:

$$k_{l,zi} = \begin{cases} +k_0 \sqrt{n_l^2 - (k_{xi}/k_0)^2}, & k_0 n_l > k_{xi} \\ -jk_0 \sqrt{(k_{xi}/k_0)^2 - n_l^2}, & k_0 n_l < k_{xi} \end{cases}, \quad l = I, II.$$

Форма профиля

Дифракционный профиль для $\varepsilon(x)$ будем считать бинарным, т.е. не зависящим от z : $0 \leq z \leq d$, (d – высота профиля, см. рис.8).

$$\varepsilon(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \varepsilon_i \exp(j \frac{2\pi}{\Lambda} ix) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \varepsilon_i \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix), \quad (3.7)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \bar{\varepsilon}_i \exp(j \frac{2\pi}{\Lambda} ix) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \bar{\varepsilon}_i \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix). \quad (3.8)$$

Отраженная волна для H_y :

$$H_{I,y} = H_{inc,y} + \sum_i R_i \exp(-j[k_{xi}x - k_{I,zi}z]). \quad (3.9)$$

Прошедшая волна для H_y :

$$H_{II,y} = \sum_i T_i \exp(-j[k_{xi}x - k_{II,zi}(z-d)]). \quad (3.10)$$

Уравнения Максвелла (по координатам)

В отсутствие внешних зарядов и токов уравнения Максвелла для монохроматической волны принимают вид:

$$\mathbf{H} = \left(\frac{j}{\omega} \right) \nabla \times \mathbf{E} \Rightarrow -j\omega \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{E}, \quad (3.11)$$

$$\mathbf{E} = \left(\frac{-j}{\omega \varepsilon(x)} \right) \nabla \times \mathbf{H} \Rightarrow j\omega \varepsilon(x) \mathbf{E} = \nabla \times \mathbf{H}. \quad (3.12)$$

Учтем, что изменений электромагнитного поля вдоль оси OY не происходит, следовательно

$$\frac{\partial E_\alpha}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial H_\alpha}{\partial y} = 0, \quad \alpha = x, y, z.$$

Покоординатно имеем:

$$-j\omega H_x = \frac{\partial E_y}{\partial z}, \quad -j\omega H_y = \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}, \quad -j\omega H_z = \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (3.13)$$

$$j\omega\varepsilon(x)E_x = \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad j\omega\varepsilon(x)E_y = \frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial z}, \quad j\omega\varepsilon(x)E_z = \frac{\partial H_y}{\partial x}. \quad (3.14)$$

С учетом непрерывности E_x первое уравнение (3.14) перепишем в виде:

$$j\omega E_x = \frac{1}{\varepsilon(x)} \frac{\partial H_y}{\partial z}. \quad (3.15)$$

Разложения в ряд Фурье составляющих электромагнитного вектора

Соотношения (30), (31):

$$\begin{aligned} H_y(x, z) &= \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_{yi}(z) \exp(-jk_{xi}x) = \\ &= \exp(-jk_0 n \sin(\theta)x) \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_{yi}(z) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} E_x(x, z) &= j \sum_{i=-\infty}^{\infty} S_{xi}(z) \exp(-jk_{xi}x) = \\ &= j \exp(-jk_0 n \sin(\theta)x) \sum_{i=-\infty}^{\infty} S_{xi}(z) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Замена координат по оси z

В дальнейшем нам может потребоваться выполнить линейное преобразование для переменной z :

$$z' = k_0 z \Rightarrow z = \frac{1}{k_0} z'. \quad (3.18)$$

Разложения (3.16), (3.17) примут вид:

$$H_y(x, z) = H_y(x, \frac{z'}{k_0}) = \bar{H}_y(x, z') = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \bar{U}_{yi}(z') \exp(-jk_{xi}x). \quad (3.19)$$

Из формул (3.16) и (3.19) следует:

$$U_{yi}(z) = U_{yi}(\frac{z'}{k_0}) = \bar{U}_{yi}(z').$$

Аналогично для соотношения (3.17):

$$E_x(x, z) = E_x(x, \frac{z'}{k_0}) = \bar{E}_x(x, z') = j \sum_{i=-\infty}^{\infty} \bar{S}_{xi}(z) \exp(-jk_{xi}x). \quad (3.20)$$

Сопоставляя соотношения (3.17) и (3.20), получим

$$S_{yi}(z) = S_{yi}(\frac{z'}{k_0}) = \bar{S}_{yi}(z').$$

Для производных $E_x(x, z)$, $\bar{E}_x(x, z')$ имеем

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} = \frac{\partial \bar{S}_{xi}(z')}{\partial z'}. \quad (3.21)$$

Для производных $H_y(x, z)$, $\bar{H}_y(x, z)$ имеем

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} = \frac{\partial \bar{U}_{yi}(z')}{\partial z'}. \quad (3.22)$$

Компоненты уравнения Максвелла и их представление через ряды Фурье

Уравнение (3.15) и второе уравнение (3.13) (поскольку $\omega = k_0$, а для бинарной решетки $\varepsilon(x, z) = \varepsilon(x)$) приводятся к виду:

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} \frac{\partial H_y}{\partial z} = jk_0 E_x, \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial E_x(x, z)}{\partial z} = -jk_0 H_y(x, z) + \frac{\partial E_z(x, z)}{\partial x}. \quad (3.24)$$

Подставим в уравнения (3.23), (3.24) разложения в ряды Фурье функций E_x, H_y, E_z и упростим их.

Преобразование уравнения (3.23).

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon}_m \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} mx) \cdot \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} \exp(-jk_{xi}x) = k_0 \sum_{i=-\infty}^{\infty} S_{xi}(z) \exp(-jk_{xi}x) \Rightarrow \\ & \frac{\exp(-jk_0 n \sin(\theta)x)}{k_0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon}_m \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} mx) \cdot \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) = \\ & = \frac{\exp(-jk_0 n \sin(\theta)x)}{k_0} \sum_{i=-\infty}^{\infty} S_{xi}(z) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) \end{aligned}$$

Выполнив свертку, получим:

$$\frac{1}{k_0} \cdot \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon}_{i-p} \frac{\partial U_{yp}(z)}{\partial z} \right) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} S_{xi}(z) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix).$$

Приравниваем коэффициенты при одинаковых экспонентах:

$$\frac{1}{k_0} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon}_{i-p} \frac{\partial U_{yp}(z)}{\partial z} = S_{xi}(z),$$

или

$$\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon}_{i-p} \frac{\partial U_{yp}(z)}{\partial z} = k_0 S_{xi}(z). \quad (3.25)$$

В матричной форме:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix} \left[\frac{\partial U_y(z)}{\partial z} \right] = k_0 [S_x] \quad \Rightarrow \quad \left[\frac{\partial U_y(z)}{\partial z} \right] = k_0 \begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix}^{-1} [S_x].$$

С учетом замены переменной $z' = k_0 z$ (см. (3.18), (3.21), (3.22)) имеем

$$\sum_{p=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon_{i-p}} \frac{\partial \bar{U}_{yp}(z')}{\partial z'} = \bar{S}_{xi}(z'). \quad (3.26)$$

В матричной форме:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix} \left[\frac{\partial \bar{U}_y(z')}{\partial z'} \right] = \begin{bmatrix} \bar{S}_x \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \left[\frac{\partial \bar{U}_y(z')}{\partial z'} \right] = \begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \bar{S}_x \end{bmatrix}.$$

В формате одного уравнения:

$$\left[\frac{\partial U_y(z)}{\partial z} \right] = k_0 \begin{bmatrix} 0 & \begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_y \\ S_x \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

Или с учетом замены переменной:

$$\left[\frac{\partial \bar{U}_y(z')}{\partial z'} \right] = \begin{bmatrix} 0 & \begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_y \\ \bar{S}_x \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Преобразование уравнения (3.24)

Найдем выражение для $\frac{\partial E_z(x, z)}{\partial x}$ из формулы (3.24). Из третьего уравнения (3.14) имеем:

$$\begin{aligned} E_z &= -\frac{j}{\omega} \frac{1}{\varepsilon(x)} \frac{\partial H_y}{\partial x} = \\ &= -\frac{j}{\omega} \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \bar{\varepsilon}_m \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} mx) \right) \left((-j) \sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} U_{yi}(z) \exp(-jk_{xi} x) \right) = \\ &= -\frac{1}{\omega} \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \bar{\varepsilon}_m \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} mx) \right) \cdot \\ &\quad \cdot \left(\sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} U_{yi}(z) \exp(-jk_0 n \sin(\theta) x + jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) \right) = \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{\omega} \exp(-jk_0 n \sin(\theta)x) \cdot \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_m} \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} mx) \right) \left(\sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} U_{yi}(z) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) \right)$$

Изменяя порядок суммирования, получим

$$E_z = -\frac{1}{\omega} \exp(-jk_0 n \sin(\theta)x) \left(\sum_{i=-\infty}^{\infty} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) \right) =$$

$$= -\frac{1}{\omega} \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) \exp(-jk_{xi}x).$$

Дифференцируем это выражение по x ($\omega = k_0$):

$$\frac{\partial E_z(x, z)}{\partial x} = \frac{j}{k_0} \sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) \exp(-jk_{xi}x) =$$

$$= \frac{j}{k_0} \exp(-jk_0 n \sin(\theta)x) \sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix).$$

Подставляем в (3.24):

$$j \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} \exp(-jk_{xi}x) = -jk_0 \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_{yi}(z) \exp(-jk_{xi}x) +$$

$$+ \frac{j}{k_0} \sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) \exp(-jk_{xi}x).$$

Выносим множитель $\exp(-jk_0 n \sin(\theta)x)$ из $\exp(-jk_{xi}x)$ и сокращаем на него:

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) = -k_0 \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_{yi}(z) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) +$$

$$+ \frac{1}{k_0} \sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix),$$

или

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_0} \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) = & - \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_{yi}(z) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix) + \\ & + \frac{1}{k_0^2} \sum_{i=-\infty}^{\infty} k_{xi} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix). \end{aligned}$$

Приравниваем коэффициенты при одинаковых экспонентах:

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_0} \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} = \frac{1}{k_0^2} k_{xi} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} U_{yp}(z) \right) - U_{yi}(z) = \\ = \frac{k_{xi}}{k_0} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} \frac{k_{xp}}{k_0} U_{yp}(z) \right) - U_{yi}(z). \end{aligned} \quad (3.29)$$

С учетом замены переменной $z' = k_0 z$ (см. (3.18), (3.21), (3.22)),

имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{S}_{xi}(z')}{\partial z'} = \frac{1}{k_0^2} k_{xi} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} k_{xp} \bar{U}_{yp}(z') \right) - \bar{U}_{yi}(z') = \\ = \frac{k_{xi}}{k_0} \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} \overline{\varepsilon_{i-p}} \frac{k_{xp}}{k_0} \bar{U}_{yp}(z') \right) - \bar{U}_{yi}(z'), \end{aligned} \quad (3.30)$$

или в матричной форме:

$$\frac{1}{k_0} [\partial S_x(z)/\partial z] = [B \quad 0] \begin{bmatrix} U_y \\ S_x \end{bmatrix} \quad \text{или} \quad [\partial \bar{S}_x(z')/\partial z'] = [B \quad 0] \begin{bmatrix} \bar{U}_y \\ \bar{S}_x \end{bmatrix}, \quad (3.31)$$

где

$$B = K_x \begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix} K_x - I, \quad K_x = \begin{bmatrix} \frac{k_{x1}}{k_0} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{k_{x2}}{k_0} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{k_{xN}}{k_0} \end{bmatrix}.$$

Перейдем к уравнению второго порядка

Из (3.28) и (3.31) имеем

$$\begin{aligned} \left[\partial^2 U_y(z) / \partial (z)^2 \right] &= k_0^2 \left[\begin{array}{c} \boxed{1} \\ \boxed{\varepsilon} \end{array} \boxed{}^{-1} B \right] [U_y] \\ \text{или} \quad \left[\partial^2 \bar{U}_y(z') / \partial (z')^2 \right] &= \left[\begin{array}{c} \boxed{1} \\ \boxed{\varepsilon} \end{array} \boxed{}^{-1} B \right] [\bar{U}_y]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Общее решение

Собственные числа матриц (для переменных z, z')

$$k_0^2 \left[\begin{array}{c} \boxed{1} \\ \boxed{\varepsilon} \end{array} \boxed{}^{-1} B \right], \quad \begin{array}{c} \boxed{1} \\ \boxed{\varepsilon} \end{array} \boxed{}^{-1} B \quad (3.33)$$

отличаются на множитель k_0^2 . Нормированные собственные вектора при этом остаются прежними.

Обозначим через q_m^k – собственные числа первой матрицы в (3.33), а через q_m – собственные числа второй матрицы в (3.33). Тогда общее решение для уравнения второго порядка (3.32) имеет вид:

$$\begin{aligned} U_{yi}(z) &= \sum_{m=1}^n w_{i,m} \left\{ c_m^+ \exp(-q_m^k z) + c_m^- \exp(q_m^k (z-d)) \right\} = \\ &= \bar{U}_{yi}(z') = \sum_{m=1}^n w_{i,m} \left\{ c_m^+ \exp(-q_m k_0 z) + c_m^- \exp(q_m k_0 (z-d)) \right\}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Дифференцируем по z и подставляем в (3.27), (3.28), получим:

$$\begin{aligned} S_{yi}(z) &= \frac{1}{k_0} \sum_{m=1}^n v_{i,m} \left\{ -c_m^+ \exp(-q_m^k z) + c_m^- \exp(q_m^k (z-d)) \right\} = \\ &= \bar{S}_{yi}(z') = \sum_{m=1}^n v_{i,m} \left\{ -c_m^+ \exp(-q_m k_0 z) + c_m^- \exp(q_m k_0 (z-d)) \right\}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

где $V = \begin{array}{c} \boxed{1} \\ \boxed{\varepsilon} \end{array} WQ$, $Q = \text{diag}\{q_m\}$, или $Q = \text{diag}\{q_m^k\}$.

Последние уравнения содержат в качестве неизвестных коэффициенты c_m^+ и c_m^- , которые и подлежат определению с использованием граничных условий.

Граничные условия

Из условий непрерывности решений для тангенциальных составляющих E_x и H_y на верхней ($z = 0$) и нижней ($z = d$) границах выписываем граничные условия для уравнений (3.34), (3.35).

Верхняя граница $z = 0$:

$$\delta_{i0} + R_i = \sum_{m=1}^n w_{i,m} [c_m^+ + c_m^- \exp(-k_0 q_m d)], \quad (3.36)$$

$$j \left[\left(\frac{\cos \theta}{n_I} \right) \delta_{i0} - \left(\frac{k_{I,zi}}{k_0 n_I^2} \right) R_i \right] = \sum_{m=1}^n v_{i,m} [c_m^+ - c_m^- \exp(-k_0 q_m d)]. \quad (3.37)$$

Нижняя граница $z = d$:

$$\sum_{m=1}^n w_{i,m} [c_m^+ \exp(-k_0 q_m d) + c_m^-] = T_i, \quad (3.38)$$

$$\sum_{m=1}^n v_{i,m} [c_m^+ \exp(-k_0 q_m d) - c_m^-] = j \left(\frac{k_{II,zi}}{k_0 n_{II}^2} \right) T_i. \quad (3.39)$$

Исключаем из последних четырех уравнений R_i , T_i и получаем систему относительно c_m^+ , c_m^- . Решая ее, вычисляем параметры для определения R_i , T_i по формулам (3.36), (3.38).

Тема 4. Коническая дифракция

Рассмотрим подробно задачу конической дифракции плоской монохроматической электромагнитной волны на одномерной периодической решетке с помощью метода связанных волн - RCWA (Rigorous Coupled-Wave Analysis). Целью этого рассмотрения является изложение шаг за шагом методики решения сложной задачи взаимодействия света с веществом строго обоснованным и численно устойчивым методом. Изложение базируется на основополагающих статьях М. Мохарама (M.G. Moharam) с соавт. [9].

Ниже будем использовать те же старые обозначения, что и в предыдущих разделах.

4.1. Геометрия падающих плоских электромагнитных линейно-поляризованных волн

Вектор напряженности электрического поля записывается в виде произведения комплексной амплитуды \mathbf{E}_0 и фазового множителя $\exp[-j(k_x x + k_y y + k_z z)]$:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp[-j(k_x x + k_y y + k_z z)],$$

где k_x , k_y , k_z – компоненты волнового вектора, задающего фазу плоской волны.

Компоненты k_x , k_y , k_z могут зависеть от номера гармоники Фурье (сформированной дифракционной структурой) отраженного и преломленного полей.

Как и в формулах (2.11) и (2.12), тангенциальные компоненты k_x , k_y не зависят от коэффициента преломления среды, а нормальные компоненты k_z зависят от коэффициента преломления среды.

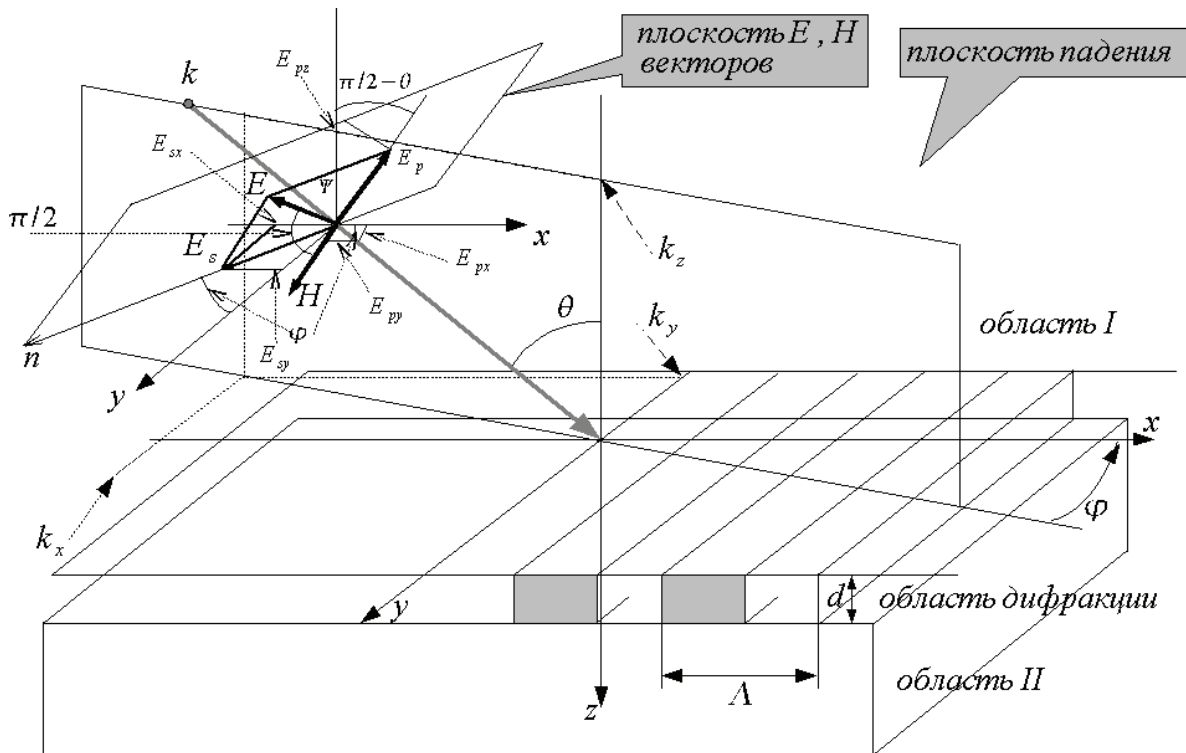


Рис. 9. Геометрия конической дифракции

Обозначения на рис. 9: θ - угол падения; ϕ - азимутальный угол и ψ - угол ориентации поляризации. Случаю ТЕ-поляризации соответствует $\psi = 90^\circ$, а случаю ТМ-поляризации - $\psi = 0^\circ$.

4.2. Электрическое поле падающей волны

Запишем электрическое поле падающей волны в обозначениях рис. 9:

$$\mathbf{E}_{inc} = \mathbf{u} \exp[-jk_0 n_I (\sin \theta \cos \phi x + \sin \theta \sin \phi y + \cos \theta z)]. \quad (4.1)$$

В случае падающей волны имеем единственную гармонику, для компонент волнового вектора которой выполняются соотношения:

$$k_x = k_0 n_I \sin \theta \cos \phi; \quad k_y = k_0 n_I \sin \theta \sin \phi; \quad k_z = k_0 n_I \cos \theta.$$

Разложение электрического и магнитного полей на s - и p -поляризации имеет вид: $\mathbf{E} = \mathbf{E}_s + \mathbf{E}_p$, $\mathbf{H} = \mathbf{H}_s + \mathbf{H}_p$.

Разложение \mathbf{E}_s , \mathbf{E}_p в декартовых координатах (x, y, z) для

электрического вектора единичной длины \mathbf{E} имеет вид:

$$\mathbf{E}_s = (-\sin \psi \sin \varphi) \hat{x} + (+\sin \psi \cos \varphi) \hat{y} + 0 \hat{z},$$

$$\mathbf{E}_p = \cos(\psi) \cos \theta \cos \varphi \hat{x} + \cos \psi \cos \theta \sin \varphi \hat{y} - \cos \psi \sin \theta \hat{z}.$$

Здесь \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} - координатные орты.

Из этих формул следует, что $|\mathbf{E}_s|^2 = \sin^2 \psi$, $|\mathbf{E}_p|^2 = \cos^2 \psi$.

Разложим произвольный единичный вектор \mathbf{u} , являющийся суммой двух линейных поляризаций, в сумму декартовых компонент:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} = \mathbf{u}_s + \mathbf{u}_p &= u_x \hat{x} + u_y \hat{y} + u_z \hat{z} = \\ &(\cos \psi \cos \theta \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi) \hat{x} + \\ &(\cos \psi \cos \theta \sin \varphi + \sin \psi \cos \varphi) \hat{y} - \cos \psi \sin \theta \hat{z}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Для ТЕ-поляризации ($\psi = 90^\circ$) компоненты вектора электрического поля могут быть представлены в виде (см. (4.2)):

$$\mathbf{E}^{\text{TE}} = (-\sin(\varphi), +\cos(\varphi), 0). \quad (4.3)$$

Для ТМ-поляризации ($\psi = 0^\circ$) компоненты соответствующего вектора записываются в виде:

$$\mathbf{E}^{\text{TM}} = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta). \quad (4.4)$$

В силу того, что $\mathbf{H} = -\sqrt{\varepsilon} (\mathbf{E} \times \mathbf{u})$, для линейных поляризаций \mathbf{H}_s , \mathbf{H}_p справедливы соотношения $\mathbf{H}_s = -\sqrt{\varepsilon} (\mathbf{E}_s \times \mathbf{u})$, $\mathbf{H}_p = -\sqrt{\varepsilon} (\mathbf{E}_p \times \mathbf{u})$. Поэтому их можно записать в виде (в силу соотношений $\sin(\psi + \pi/2) = \cos(\psi)$, $\cos(\psi + \pi/2) = -\sin(\psi)$):

$$\mathbf{H}_s = |\mathbf{H}| [(-\cos \psi \sin \varphi) \hat{x} + (+\cos \psi \cos \varphi) \hat{y} + 0 \hat{z}],$$

$$\mathbf{H}_p = |\mathbf{H}| [-\sin \psi \cos \theta \cos \varphi \hat{x} - \sin \psi \cos \theta \sin \varphi \hat{y} + \sin \psi \sin \theta \hat{z}]$$

и $|\mathbf{H}| = \sqrt{\varepsilon_1} = n_1$.

4.3. Проекция волнового вектора

ОХ-проекция. Мы изучаем одномерную решетку (периодическую вдоль координаты x), поэтому выполняется соотношение:

$$k_{xi} = k_0 \left(n_l \cdot \sin \theta \cos \varphi - i \frac{\lambda_0}{\Lambda} \right), \quad (4.5)$$

где n_l – показатель преломления в первой (I) области.

ОУ-проекция. Вдоль координаты y периодичность отсутствует, следовательно, справедливо соотношение:

$$k_y = k_0 n_l \cdot \sin(\theta) \sin(\varphi). \quad (4.6)$$

ОZ-проекция. Для нее выполняется $k_z = \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}$, поэтому в первой (I) и во второй (II) областях справедливы соотношения:

$$k_{l,zi} = \begin{cases} +[(k_0 n_l)^2 - k_{xi}^2 - k_y^2]^{1/2}, & k_{xi}^2 + k_y^2 < (k_0 n_l)^2 \\ -j[k_{xi}^2 + k_y^2 - (k_0 n_l)^2]^{1/2}, & k_{xi}^2 + k_y^2 > (k_0 n_l)^2 \end{cases}, \quad l = I, II. \quad (4.7)$$

Угол отражения плоской гармоники i -го порядка равен

$$\varphi_i = \arctg(k_y / k_{xi}), \dots, \frac{k_y}{k_{xi}} = \frac{\sin(\varphi_i)}{\cos(\varphi_i)}, \quad i \geq 1, \quad \text{и} \quad \varphi_0 = \varphi. \quad (4.8)$$

Электрическое поле отраженных и прошедших волн:

$$\mathbf{E}_I = \mathbf{E}_{inc} + \sum_i \mathbf{R}_i \exp[-j(k_{xi}x + k_y y - k_{I,zi}z)], \quad (4.9)$$

$$\mathbf{E}_{II} = \sum_i \mathbf{T}_i \exp[-j(k_{xi}x + k_y y + k_{II,zi}(z - d))]. \quad (4.10)$$

4.4. Профиль дифракционной решетки

В случае, когда рассеивающая решетка имеет ступенчатый профиль, диэлектрическая проницаемость не зависит от координаты z в области $0 \leq z \leq d$ (d - высота прямоугольного гребня, см. рис.9). Кроме того, $\varepsilon(x)$ является периодической функцией по x . Ее можно представить в виде разложения в ряд Фурье:

$$\varepsilon(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \varepsilon_i \exp(j \frac{2\pi}{\Lambda} ix) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \varepsilon_i \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix), \quad (4.11)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \bar{\varepsilon}_i \exp(j \frac{2\pi}{\Lambda} ix) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \bar{\varepsilon}_i \exp(jk_0 \frac{\lambda_0}{\Lambda} ix). \quad (4.12)$$

Все рассматриваемые волны являются плоскими монохроматическими, поэтому для них уравнения Максвелла принимают вид:

$$-j\omega \mathbf{H}_g = \nabla \times \mathbf{E}_g \quad \text{или} \quad \mathbf{H}_g = \frac{j}{\omega} \nabla \times \mathbf{E}_g, \quad (4.13)$$

$$j\omega \varepsilon(x) \mathbf{E}_g = \nabla \times \mathbf{H}_g. \quad (4.14)$$

Согласно теореме Флоке—Блоха для уравнений с периодическими коэффициентами решения могут быть представлены в виде:

$$\mathbf{E}_g = \sum_{i=-\infty}^{\infty} [S_{xi}(z)\hat{\mathbf{x}} + S_{yi}(z)\hat{\mathbf{y}} + S_{zi}(z)\hat{\mathbf{z}}] \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)], \quad (4.15)$$

$$\mathbf{H}_g = -j \sum_{i=-\infty}^{\infty} [U_{xi}(z)\hat{\mathbf{x}} + U_{yi}(z)\hat{\mathbf{y}} + U_{zi}(z)\hat{\mathbf{z}}] \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)]. \quad (4.16)$$

Операторы ротора от полей \mathbf{E}_g , \mathbf{H}_g можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}_g &= \sum_{i=-\infty}^{i=\infty} \begin{bmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ S_{xi}(z)e^{-j(k_{xi}x+k_yy)} & S_{yi}(z)e^{-j(k_{xi}x+k_yy)} & S_{zi}(z)e^{-j(k_{xi}x+k_yy)} \end{bmatrix} \\ &= \sum_{i=-\infty}^{i=\infty} \begin{bmatrix} -jk_y S_{zi}(z) - \frac{\partial S_{yi}(z)}{\partial z} \\ jk_{xi} S_{zi}(z) + \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} \\ -jk_{xi} S_{yi}(z) + jk_y S_{xi}(z) \end{bmatrix} e^{-j(k_{xi}x+k_yy)}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H}_g &= \sum_{i=-\infty}^{i=\infty} \begin{bmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ U_{xi}(z)e^{-j(k_{xi}x+k_yy)} & U_{yi}(z)e^{-j(k_{xi}x+k_yy)} & U_{zi}(z)e^{-j(k_{xi}x+k_yy)} \end{bmatrix} \\ &= \sum_{i=-\infty}^{i=\infty} \begin{bmatrix} -jk_y U_{zi}(z) - \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} \\ jk_{xi} U_{zi}(z) + \frac{\partial U_{xi}(z)}{\partial z} \\ -jk_{xi} U_{yi}(z) + jk_y U_{xi}(z) \end{bmatrix} e^{-j(k_{xi}x+k_yy)}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$E_{s,i}^H = \cos \varphi_i T_{y,i} - \sin \varphi_i T_{x,i}.$$

4.5. Уравнения для определения Фурье-компонент решения

Подставляя выражения (4.16) и (4.17) в уравнение (4.14) и проинтегрировав по каждой из гармоник, получим для соответствующих Фурье-компонент соотношения:

$$-\omega \begin{bmatrix} U_{xi}(z) \\ U_{yi}(z) \\ U_{zi}(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -jk_y S_{zi}(z) - \frac{\partial S_{yi}(z)}{\partial z} \\ jk_{xi} S_{zi}(z) + \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} \\ -jk_{xi} S_{yi}(z) + jk_y S_{xi}(z) \end{bmatrix},$$

ИЛИ

$$-\omega U_{xi}(z) = -jk_y S_{zi}(z) - \frac{\partial S_{yi}(z)}{\partial z}, \quad (4.19)$$

$$-\omega U_{yi}(z) = jk_{xi} S_{zi}(z) + \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z}, \quad (4.20)$$

$$-\omega U_{zi}(z) = -jk_{xi} S_{yi}(z) + jk_y S_{xi}(z). \quad (4.21)$$

Таким же образом подставляя выражения (4.15) и (4.18) в уравнение (4.13) и проинтегрировав по каждой из гармоник, получим для соответствующих Фурье-компонент соотношения:

$$j\omega\epsilon \begin{bmatrix} S_{xi}(z) \\ S_{yi}(z) \\ S_{zi}(z) \end{bmatrix} = -j \begin{bmatrix} -jk_y U_{zi}(z) - \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} \\ jk_{xi} U_{zi}(z) + \frac{\partial U_{xi}(z)}{\partial z} \\ -jk_{xi} U_{yi}(z) + jk_y U_{xi}(z) \end{bmatrix},$$

ИЛИ

$$j\omega\epsilon S_{xi}(z) = -j \left(-jk_y U_{zi}(z) - \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} \right), \quad (4.22)$$

$$j\omega\epsilon S_{yi}(z) = -j \left(jk_{xi} U_{zi}(z) + \frac{\partial U_{xi}(z)}{\partial z} \right), \quad (4.23)$$

$$j\omega\epsilon S_{zi}(z) = -j \left(-jk_{xi} U_{yi}(z) + jk_y U_{xi}(z) \right). \quad (4.24)$$

Выразим нормальные компоненты \mathbf{E}_{gz} ($S_{zi}(z)$ из (4.24)) и \mathbf{H}_{gz} ($U_{zi}(z)$ из (4.21)). Везде далее будем считать $\omega = k_0$ (снова возвращаемся к записи формул в гауссовой системе единиц):

$$S_{zi}(z) = \frac{j}{k_0} [\varepsilon]^{-1} (k_{xi} U_{yi}(z) - k_y U_{xi}(z)), \quad (4.25)$$

$$U_{zi}(z) = \frac{j}{k_0} (k_{xi} S_{yi}(z) - k_y S_{xi}(z)). \quad (4.26)$$

Подставляя $S_{zi}(z)$ в (4.19), (4.20), а $U_{zi}(z)$ в (4.22), (4.23), мы получаем соотношения:

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial S_{yi}(z)}{\partial z} = \frac{k_y}{k_0} [\varepsilon]^{-1} \frac{k_{xi}}{k_0} U_{yi}(z) + \left(1 - \frac{k_y}{k_0} [\varepsilon]^{-1} \frac{k_y}{k_0} \right) U_{xi}(z), \quad (4.27)$$

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} = \left(\frac{k_{xi}}{k_0} [\varepsilon]^{-1} \frac{k_{xi}}{k_0} - 1 \right) U_{yi}(z) - \frac{k_{xi}}{k_0} [\varepsilon]^{-1} \frac{k_y}{k_0} U_{xi}(z), \quad (4.28)$$

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} = \frac{k_y}{k_0} \frac{k_{xi}}{k_0} S_{yi}(z) + \left(\varepsilon - \frac{k_y}{k_0} \frac{k_y}{k_0} \right) S_{xi}(z), \quad (4.29)$$

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial U_{xi}(z)}{\partial z} = \left(\frac{k_{xi}^2}{k_0^2} - \varepsilon \right) S_{yi}(z) - \frac{k_{xi}}{k_0} \frac{k_y}{k_0} S_{xi}(z). \quad (4.30)$$

В этих формулах обозначения ε и $[\varepsilon]^{-1}$ все еще означают исходные функции. Ниже заменим их разложениями в ряды Фурье (4.11), (4.12). Введем, как и ранее, теплицевы матрицы:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon \end{bmatrix} \quad \text{с элементами } \left(\begin{bmatrix} \varepsilon \end{bmatrix} \right)_{n,m} = \varepsilon_{n-m},$$

$$\mathbf{E}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix} \quad \text{с элементами } \left(\begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix} \right)_{n,m} = \bar{\varepsilon}_{n-m}.$$

С их помощью уравнения (4.27) – (4.30) можно переписать в

следующем виде:

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial S_{yi}(z)}{\partial z} = \frac{k_y}{k_0} \sum_p \varepsilon_{i-p} \frac{k_{xp}}{k_0} U_{yp}(z) + U_{xi}(z) - \frac{k_y}{k_0} \cdot \frac{k_y}{k_0} \sum_p \varepsilon_{i-p} U_{xp}(z), \quad (4.27)$$

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial S_{xi}(z)}{\partial z} = \sum_p \frac{k_{xp}}{k_0} \varepsilon_{i-p} \frac{k_{xp}}{k_0} U_{yp}(z) - U_{yi}(z) - \frac{k_y}{k_0} \sum_p \frac{k_{xp}}{k_0} \varepsilon_{i-p} U_{xp}(z), \quad (4.28)$$

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial U_{yi}(z)}{\partial z} = \frac{k_y}{k_0} \frac{k_{xi}}{k_0} S_{yi}(z) + \sum_p \varepsilon_{i-p} S_{xp}(z) - \frac{k_y}{k_0} \frac{k_y}{k_0} S_{xi}(z), \quad (4.29)$$

$$\frac{1}{k_0} \frac{\partial U_{xi}(z)}{\partial z} = \frac{k_{xi}^2}{k_0^2} S_{yi}(z) - \sum_p \varepsilon_{i-p} S_{yp}(z) - \frac{k_{xi}}{k_0} \frac{k_y}{k_0} S_{xi}(z). \quad (4.30)$$

Переходя к матричной форме записи и заменив бесконечномерные матрицы их конечномерными приближениями, можем переписать уравнения (4.27) – (4.30) в форме $(4n \times 4n)$ системы линейных уравнений

$$\partial \mathbf{S}_y / \partial z' = \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x \mathbf{U}_y + (\mathbf{I} - \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y) \mathbf{U}_x, \quad (4.31)$$

$$\partial \mathbf{S}_x / \partial z' = (\mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{I}) \mathbf{U}_y - \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y \mathbf{U}_x, \quad (4.32)$$

$$\partial \mathbf{U}_y / \partial z' = \mathbf{K}_y \mathbf{K}_x \mathbf{S}_y + (\tilde{\mathbf{E}} - \mathbf{K}_y^2) \mathbf{S}_x, \quad (4.33)$$

$$\partial \mathbf{U}_x / \partial z' = (\mathbf{K}_x^2 - \tilde{\mathbf{E}}) \mathbf{S}_y - \mathbf{K}_x \mathbf{K}_y \mathbf{S}_x, \quad (4.34)$$

где использованы обозначения: $z' = k_0 z$, $\tilde{\mathbf{E}} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \varepsilon \end{bmatrix}^{-1}$, $\mathbf{E}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \varepsilon \end{bmatrix}$,

$$\mathbf{K}_x = \begin{bmatrix} k_{x1}/k_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & k_{x2}/k_0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & k_{xN}/k_0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}_y = \left(\frac{k_y}{k_0} \right) \mathbf{I}.$$

Подчеркнем, что в конечномерном случае $\tilde{\mathbf{E}}$ не совпадает с \mathbf{E} [10]. Напомним, что последние формулы выведены в предположении

периодичности решетки только по x .

Обозначим:

$$A = K_x^2 - \tilde{E}, \quad B = K_x E^{-1} K_x - I, \quad C = \tilde{E} - K_y^2, \quad D = K_y E^{-1} K_y - I \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial \vec{S}}{\partial z'} = \hat{P} \vec{U},$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial z'} = \hat{Q} \vec{S},$$

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x & \hat{I} - \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_y \\ \hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_x - \hat{I} & -\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y \end{pmatrix},$$

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{K}_x & \tilde{E} - \hat{K}_y^2 \\ \hat{K}_x^2 - \tilde{E} & -\hat{K}_x \hat{K}_y \end{pmatrix}.$$

Преобразуем уравнения первого порядка (4.31) – (4.34) в уравнения второго порядка для S_x, S_y, U_x, U_y . Для бинарных покрытий матрицы P и Q не зависят от z' , поэтому дифференцирование по z' уравнений (4.31) – (4.34) приводит к следующему результату.

$$\partial^2 S_y / \partial (z')^2 = \frac{\partial}{\partial z'} (\hat{P} \vec{U}) = \hat{P} \frac{\partial \vec{U}}{\partial z'} = (\hat{P} \hat{Q}) \vec{S};$$

$$\partial^2 \vec{U}_y / \partial (z')^2 = \frac{\partial}{\partial z'} (\hat{Q} \vec{S}) = \hat{Q} \frac{\partial \vec{S}}{\partial z'} = (\hat{Q} \hat{P}) \vec{U}.$$

Приведем явный вид произведений матриц \hat{P} и \hat{Q} :

$$\hat{P} \hat{Q} = \begin{pmatrix} (\hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x) \hat{K}_y \hat{K}_x + (\hat{I} - \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_y) (\hat{K}_x^2 - \tilde{E}) & \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x (\tilde{E} - \hat{K}_y^2) - (\hat{I} - \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_y) \hat{K}_x \hat{K}_y \\ (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_x - \hat{I}) \hat{K}_y \hat{K}_x - \hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y (\hat{K}_x^2 - \tilde{E}) & (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_x - \hat{I}) (\tilde{E} - \hat{K}_y^2) + (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y) \hat{K}_x \hat{K}_y \end{pmatrix}$$

$$\hat{Q} \hat{P} = \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{K}_x (\hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x) + (\tilde{E} - \hat{K}_y^2) (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_x - \hat{I}) & \hat{K}_y \hat{K}_x (\hat{I} - \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_y) - (\tilde{E} - \hat{K}_y^2) \hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y \\ (\hat{K}_x^2 - \tilde{E}) \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x - \hat{K}_x \hat{K}_y (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_x - \hat{I}) & (\hat{K}_x^2 - \tilde{E}) (\hat{I} - \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_y) + \hat{K}_x \hat{K}_y (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y) \end{pmatrix}.$$

В обозначениях (4.35) эти же произведения можно записать в виде:

$$\hat{P}\hat{Q} = \begin{pmatrix} (\hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x) \hat{K}_y \hat{K}_x - DA & -\hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x C + D \hat{K}_x \hat{K}_y \\ B \hat{K}_y \hat{K}_x - \hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y A & -BC + (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y) \hat{K}_x \hat{K}_y \end{pmatrix},$$

$$\hat{Q}\hat{P} = \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{K}_x (\hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x) - CB & -\hat{K}_y \hat{K}_x D + C \hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y \\ A \hat{K}_y E^{-1} \hat{K}_x - \hat{K}_x \hat{K}_y B & -AD + \hat{K}_x \hat{K}_y (\hat{K}_x E^{-1} \hat{K}_y) \end{pmatrix}.$$

С учетом того, что решетка одномерная, мы получили две системы $(2n \times 2n)$ обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$d^2 S_y / d(z')^2 = (K_x^2 + D\tilde{E}) S_y + K_y (E^{-1} K_x \tilde{E} - K_x) S_x, \quad (4.36)$$

$$d^2 S_x / d(z')^2 = K_x (E^{-1} K_y \tilde{E} - K_y) S_y + (K_y^2 + B\tilde{E}) S_x, \quad (4.37)$$

$$d^2 U_y / d(z')^2 = (K_y^2 + \tilde{E}B) U_y + (K_x - \tilde{E}K_x E^{-1}) K_y U_x, \quad (4.38)$$

$$d^2 U_x / d(z')^2 = (K_y - \tilde{E}K_y E^{-1}) K_x U_y + (K_x^2 + \tilde{E}D) U_x. \quad (4.39)$$

В силу одномерности решетки матрица \mathbf{K}_y скалярна. Поэтому в силу соотношений (4.35) уравнения (4.37), (4.39) принимают более простой вид и образуют замкнутую подсистему двух $n \times n$ систем уравнений второго порядка:

$$\partial^2 S_x / \partial(z')^2 = (k_y^2 I + B\tilde{E}) S_x, \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \partial^2 U_x / \partial(z')^2 &= (K_x^2 + ED) U_x = (K_x^2 + E(E^{-1} K_y^2 - I)) U_x = \\ &= (K_y^2 + A) U_x = (k_y^2 I + A) U_x. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Отметим, что в большинстве публикаций вместо \tilde{E} используется E .
Уравнение (4.40), имеющее явный вид:

$$\partial^2 S_x / \partial (z')^2 = \left(K_y^2 + B \left[\frac{1}{\varepsilon} \right]^{-1} \right) S_x, \quad (4.42)$$

обеспечивает лучшую сходимость по сравнению с этими публикациями.

4.6. Построение решения

Обозначим через $w_{1,i,m}$ $q_{1,m}$ компоненты собственных векторов и положительные квадратные корни из собственных значений матрицы $(K_y^2 + A)$. Тогда решение уравнения (4.41) можно искать в виде:

$$U_{xi}(z) = \sum_{m=1}^n w_{1,i,m} \left\{ -c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m} z) + c_{1,m}^- \exp(k_0 q_{1,m} (z - d)) \right\}. \quad (4.43)$$

Замечание. Знак «-» перед первым слагаемым в фигурных скобках $(-c_{1,m}^+)$ в формуле (4.43) выбран лишь исходя из соображений удобства. Формально можно использовать любой знак. В статье Мохарама [9], идеям которой мы следуем в изложении материала, присутствует путаница со знаками.

Обозначим через $w_{2,i,m}$ $q_{2,m}$ компоненты собственных векторов и положительные квадратные корни из собственных значений матрицы $\left(K_y^2 I + B \left[\frac{1}{\varepsilon} \right]^{-1} \right)$. Тогда решение (4.42) можно искать в виде:

$$S_{xi}(z) = \sum_{m=1}^n w_{2,i,m} \left\{ c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} z) + c_{2,m}^- \exp(k_0 q_{2,m} (z - d)) \right\}. \quad (4.44)$$

Из (4.31) получаем $S_{yi} = A^{-1} \left(\partial U_{xi} / \partial z' + K_x K_y S_{xi} \right)$.

Подставляя (4.43), (4.44) в это уравнение, получим:

$$S_{yi}(z) = \sum_{m=1}^n v_{11, i, m} \left\{ c_{1, m}^+ \exp(-k_0 q_{1, m} z) + c_{1, m}^- \exp(k_0 q_{1, m} (z - d)) \right\} + \sum_{m=1}^n v_{12, i, m} \left\{ c_{2, m}^+ \exp(-k_0 q_{2, m} z) + c_{2, m}^- \exp(k_0 q_{2, m} (z - d)) \right\}, \quad (4.45)$$

где $V_{11} = A^{-1} W_1 Q_1$, $V_{12} = (k_y / k_0) A^{-1} K_x W_2$, $Q_1 = \text{diag} \{ q_{1, m} \}$.

Аналогично из (4.32) получаем $U_{yi} = B^{-1} (\partial S_{xi} / \partial z' + K_x E^{-1} K_y U_{xi})$.

Подставляя (4.43), (4.44) в последнее соотношение, получаем:

$$U_{yi}(z) = \sum_{m=1}^n v_{21, i, m} \left\{ -c_{1, m}^+ \exp(-k_0 q_{1, m} z) + c_{1, m}^- \exp(k_0 q_{1, m} (z - d)) \right\} + \sum_{m=1}^n v_{22, i, m} \left\{ -c_{2, m}^+ \exp(-k_0 q_{2, m} z) + c_{2, m}^- \exp(k_0 q_{2, m} (z - d)) \right\}, \quad (4.46)$$

где $V_{21} = (k_y / k_0) B^{-1} K_x E^{-1} W_1$, $V_{22} = B^{-1} W_2 Q_2$, $Q_2 = \text{diag} \{ q_{2, m} \}$.

Таким образом, мы получили четыре группы уравнений для неопределенных коэффициентов $c_{1, m}^+$, $c_{1, m}^-$, $c_{2, m}^+$, $c_{2, m}^-$.

4.7. Граничные условия

Граничные условия для уравнений (4.43) – (4.46) определяются условием непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного векторов решения на верхней ($z = 0$) и нижней ($z = d$) границах области периодичности.

Для каждой из границ областей (I, II) у нас есть по четыре тангенциальных компоненты для амплитуд s -, p -поляризации:

Для s -поляризации:

$$E_{I \text{ or } II, s} = E_{gs}, \quad (4.47)$$

$$H_{I \text{ or } II, s} = H_{gs}. \quad (4.48)$$

Для p – поляризации:

$$\Pr(\mathbf{E}_{I \text{ or } II, p}) = \Pr(\mathbf{E}_{gp}), \quad (4.49)$$

$$\Pr(\mathbf{H}_{I \text{ or } II, p}) = \Pr(\mathbf{H}_{gp}). \quad (4.50)$$

Проекция амплитуды p – поляризации на ось x (см. рис. 9) равна $\Pr(\mathbf{E}_p) = |\Pr(\mathbf{E}_p)| = |\mathbf{E}_p| \cos(\theta)$.

Амплитуды $E_{s,i}$ могут быть записаны с использованием проекций $E_{s,x,i}$, $E_{s,y,i}$ в виде (см. рис.9, 10):

$$E_{s,i} = \cos \varphi_i E_{y,i} - \sin \varphi_i E_{x,i}. \quad (4.51)$$

Аналогично амплитуды $H_{s,i}$ можно выразить через компоненты $H_{s,x,i}$, $H_{s,y,i}$ в виде:

$$H_{s,i} = \cos(\varphi_i) H_{y,i} - \sin(\varphi_i) H_{x,i}. \quad (4.52)$$

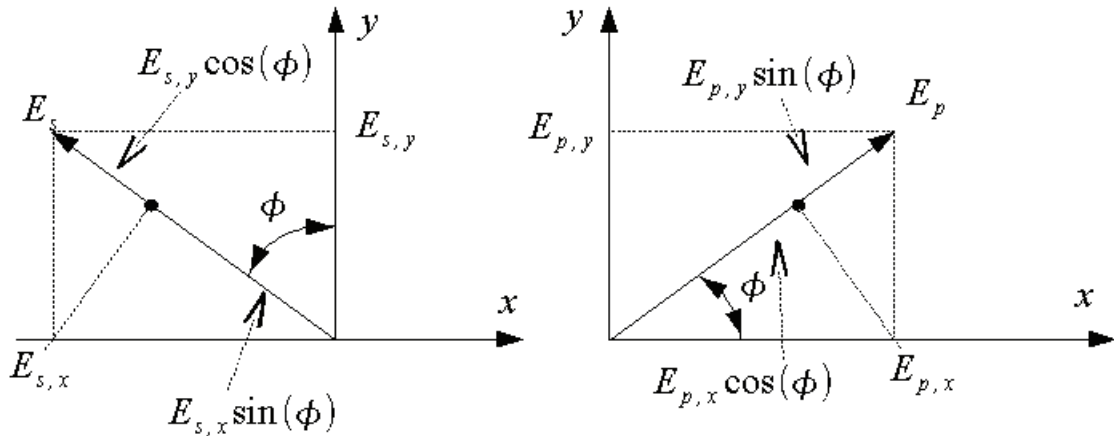


Рис. 10. Разложения амплитуд E_s , E_p

Все рассмотренные разложения для амплитуд $E_{p,i}$, $H_{p,i}$ через их проекции $E_{p,x,i}$, $E_{p,y,i}$ и $H_{p,x,i}$, $H_{p,y,i}$ приводят к выражениям для тангенциальных проекций:

$$\text{Pr}(\mathbf{E}_{p,i}) = \cos \varphi_i E_{x,i} + \sin \varphi_i E_{y,i}, \quad (4.53)$$

$$\text{Pr}(\mathbf{H}_{p,i}) = -\cos \varphi_i H_{x,i} - \sin \varphi_i H_{y,i}. \quad (4.54)$$

Здесь i – номер гармоники (порядок дифракции), в частности, для $i = 0$ $\varphi_0 = \varphi$.

Заметим, что уравнения для H_s , H_p могут быть выражены через компоненты электрического поля с помощью уравнений Максвелла (4.13):

$$\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z) = \frac{j}{k_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}, \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}, \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right). \quad (4.55)$$

4.8. Компоненты падающей волны

В соответствии с рис. 9, а также в силу нормировки $|\mathbf{E}_{inc}| = 1$ для падающей волны мы имеем:

$$E_{inc,s} = \sin \psi, \quad (4.56)$$

$$E_{inc,p} = \cos \psi \cos \theta. \quad (4.57)$$

Из соотношения (4.55) и выражений для s - и p -компонент электрического поля падающей волны (4.1), (4.2) получаем:

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{j}{k_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) = \frac{j}{k_0} (-jk_0 n_I) \left(\begin{aligned} & -[\cos \psi \sin \theta] \sin \theta \sin \varphi - \\ & [\cos \psi \cos \theta \sin \varphi + \sin \psi \cos \varphi] \cos \theta \end{aligned} \right) = \\ &= \underline{n_I (-\cos \psi \sin \varphi - \sin \psi \cos \varphi \cos \theta)}, \\ H_y &= \frac{j}{k_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) = \frac{j}{k_0} (-jk_0 n_I) \left(\begin{aligned} & [\cos \psi \cos \theta \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi] \cos \theta + \\ & [\cos \psi \sin \theta] \sin \theta \cos \varphi \end{aligned} \right) = \\ &= \underline{n_I (\cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi \cos \theta)}. \end{aligned}$$

Из выражений для s – компонент (4.52) получаем:

$$\begin{aligned}
 H_{inc,s} &= n_I [\cos \varphi (\cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi \cos \theta) - \\
 &\quad - \sin \varphi (-\cos \psi \sin \varphi - \sin \psi \cos \varphi \cos \theta)] = \\
 &= n_I [\cos^2 \varphi \cos \psi - \cancel{\cos \varphi \sin \varphi \sin \psi \cos \theta} - \\
 &\quad + \sin^2 \varphi \cos \psi + \cancel{\cos \varphi \sin \varphi \sin \psi \cos \theta}] \\
 &= n_I \cos \psi.
 \end{aligned} \tag{4.58}$$

Из выражений для p – компонент (4.54) аналогично выводим:

$$\begin{aligned}
 \text{Pr}(\mathbf{H}_{inc,p}) &= -n_I [\cos(\varphi) (-\cos(\psi) \sin(\varphi) - \sin(\psi) \cos(\varphi) \cos(\theta)) + \\
 &\quad + \sin(\varphi) (\cos(\psi) \cos(\varphi) - \sin(\psi) \sin(\varphi) \cos(\theta))] = \\
 &= -n_I [-\cancel{\sin(\varphi) \cos(\varphi) \cos(\psi)} - \cos^2(\varphi) \sin(\psi) \cos(\theta) \\
 &\quad + \cancel{\sin(\varphi) \cos(\varphi) \cos(\psi)} - \sin^2(\varphi) \sin(\psi) \cos(\theta)] = \\
 &= n_I \sin(\psi) \cos(\theta).
 \end{aligned} \tag{4.59}$$

4.9. Компоненты отраженной и преломленной волн

Вначале рассмотрим случай s – поляризации.

Перепишем уравнения (4.51), (4.52) для областей I и II, воспользовавшись уравнениями (4.9), (4.10) для отраженной и прошедшей волн. Для уравнения (4.51) получим:

$$E_{s,i}^I = \cos(\varphi_i) R_{y,i} - \sin(\varphi_i) R_{x,i}, \tag{4.60}$$

$$E_{s,i}^{II} = \cos(\varphi_i) T_{y,i} - \sin(\varphi_i) T_{x,i}. \tag{4.61}$$

Для уравнения (4.52) получим в первой (I) области:

$$\begin{aligned}
 H_{x,i}^I &= \frac{j}{k_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \Bigg|_{z=0} = \frac{j(-j)}{k_0} (k_y R_{z,i} - (-k_{I,zi} R_{y,i})) = \\
 &= \frac{1}{k_0} (k_y R_{z,i} + k_{I,zi} R_{y,i})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{y,i}^I &= \frac{j}{k_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \Big|_{z=0} = \frac{j(-j)}{k_0} (-k_{I,zi} R_{x,i} - k_{x,i} R_{z,i}) = \\
&= \frac{1}{k_0} (-k_{I,zi} R_{x,i} - k_{x,i} R_{z,i})
\end{aligned}$$

Для второй (II) области получим:

$$\begin{aligned}
H_{x,i}^{II} &= \frac{j}{k_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \Big|_{z=d} = \frac{j(-j)}{k_0} (k_y T_{z,i} - k_{II,zi} T_{y,i}) = \\
&= \frac{1}{k_0} (k_y T_{z,i} - k_{II,zi} T_{y,i})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{y,i}^{II} &= \frac{j}{k_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \Big|_{z=d} = \frac{j(-j)}{k_0} (k_{II,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i}) = \\
&= \frac{1}{k_0} (k_{II,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i})
\end{aligned}$$

Таким образом, для s -поляризации мы получили (с учетом соотношений (4.8)):

$$\begin{aligned}
H_{s,i}^I &= \cos \varphi_i H_{I,y,i} - \sin \varphi_i H_{I,x,i} = \\
&= \frac{1}{k_0} \left[\cos \varphi_i (-k_{I,zi} R_{x,i} - k_{x,i} R_{z,i}) - \sin \varphi_i (k_{I,zi} R_{y,i} + k_y R_{z,i}) \right] = \quad (4.62) \\
&= \frac{1}{k_0} \left[-k_{I,zi} (\cos \varphi_i R_{x,i} + \sin \varphi_i R_{y,i}) - (\cos \varphi_i k_{x,i} + \sin \varphi_i k_y) R_{z,i} \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{s,i}^{II} &= \cos(\varphi_i) H_{y,i}^{II} - \sin(\varphi_i) H_{x,i}^{II} = \\
&= \frac{1}{k_0} \left[\cos(\varphi_i) (k_{II,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i}) - \sin(\varphi_i) (k_y T_{z,i} - k_{II,zi} T_{y,i}) \right]. \quad (4.63)
\end{aligned}$$

Теперь рассмотрим p -поляризацию.

В первой (I) области уравнение (4.53) приобретает вид:

$$E_{p,i}^I = \cos \varphi_i R_{x,i} + \sin \varphi_i R_{y,i}, \quad (4.64)$$

$$E_{p,i}^{II} = \cos \varphi_i T_{x,i} + \sin \varphi_i T_{y,i}, \quad (4.65)$$

а уравнение (4.54) переписываем в виде:

$$\begin{aligned}
H_{p,i}^I &= -\cos(\varphi_i)H_{x,i}^I - \sin(\varphi_i)H_{y,i}^I = \\
&= \frac{-1}{k_0} \left[\cos(\varphi_i)(k_{I,zi}R_{y,i} + k_y R_{z,i}) + \sin(\varphi_i)(-k_{I,zi}R_{x,i} - k_{x,i}R_{z,i}) \right] = \\
&= \frac{-1}{k_0} \left[k_{I,zi}(\cos(\varphi_i)R_{y,i} - \sin(\varphi_i)R_{x,i}) + R_{z,i}(\cos(\varphi_i)k_y - \sin(\varphi_i)k_{x,i}) \right] = \quad (4.66) \\
&= -\frac{k_{I,zi}}{k_0} \left[\cos(\varphi_i)R_{y,i} - \sin(\varphi_i)R_{x,i} \right] = -\frac{k_{I,zi}}{k_0} R_{s,i}^I,
\end{aligned}$$

где $\left[\cos(\varphi_i)k_y - \sin(\varphi_i)k_{x,i} \right] = \left[\cos(\varphi_i) \frac{\sin(\varphi_i)}{\cos(\varphi_i)} k_{x,i} - \sin(\varphi_i)k_{x,i} \right] = 0$, здесь

также учтены соотношения (4.8).

Во второй (II) области получаем соотношения

$$\begin{aligned}
H_{p,i}^{II} &= -\cos(\varphi_i)H_{x,i}^{II} - \sin(\varphi_i)H_{y,i}^{II} = \\
&= \frac{-1}{k_0} \left[\cos(\varphi_i)(k_y T_{z,i} - k_{II,zi} T_{y,i}) + \sin(\varphi_i)(k_{II,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i}) \right] = \\
&= -\frac{k_{II,zi}}{k_0} \left[-\cos \varphi_i T_{y,i} + \sin \varphi_i T_{x,i} \right] - \frac{1}{k_0} T_{z,i} \left[k_y \cos \varphi_i - k_{x,i} \sin \varphi_i \right] = \quad (4.67) \\
&= \frac{k_{II,zi}}{k_0} \left[\cos \varphi_i T_{y,i} - \sin \varphi_i T_{x,i} \right] = \frac{k_{II,zi}}{k_0} T_{s,i}
\end{aligned}$$

4.10. Условия на верхней границе $z = 0$

Для E_s из соотношений (4.47), (4.51), (4.56) и (4.60) вытекает равенство:

$$\sin \psi \delta_{i0} + (\cos \varphi_i R_{y,i} - \sin \varphi_i R_{x,i}) = \cos \varphi_i S_{y,i}(0) - \sin \varphi_i S_{x,i}(0),$$

которое после упрощения принимает вид:

$$\sin \psi \delta_{i0} + R_{s,i} = \cos \varphi_i S_{y,i}(0) - \sin \varphi_i S_{x,i}(0). \quad (4.68)$$

Для H_s компоненты из соотношений (4.48), (4.52), (4.58), (4.62) и

умноженного на $-j$ уравнения (4.16) вытекает равенство

$$n_I \cos \psi \delta_{i0} + \frac{1}{k_0} \left[\cos \varphi_i (-k_{I,zi} R_{x,i} - k_{x,i} R_{z,i}) - \sin \varphi_i (k_{I,zi} R_{y,i} + k_y R_{z,i}) \right] = \\ = -j \left[\cos \varphi_i U_{y,i}(0) - \sin \varphi_i U_{x,i}(0) \right],$$

которое после умножения на $-j$ принимает вид:

$$-jn_I \cos(\psi) \delta_{i0} - \\ - \frac{j}{k_0} \left[\cos \varphi_i (-k_{I,zi} R_{x,i} - k_{x,i} R_{z,i}) - \sin \varphi_i (k_{I,zi} R_{y,i} + k_y R_{z,i}) \right] = \quad (4.69) \\ = - \left[\cos \varphi_i U_{y,i}(0) - \sin \varphi_i U_{x,i}(0) \right].$$

Здесь мы полагаем, что величины R_{si} и R_{pi} являются компонентами амплитуд электрического и магнитного полей, перпендикулярных плоскости падения. Их можно считать ТЕ- и ТМ-компонентами отраженного поля, которые выражаются согласно (4.60), (4.61), (4.62) следующим образом:

$$R_{s,i} = \cos \varphi_i R_{y,i} - \sin \varphi_i R_{x,i},$$

$$R_{p,i} = \\ = - \frac{j}{k_0} \left[\cos \varphi_i (-k_{I,zi} R_{x,i} - k_{x,i} R_{z,i}) - \sin \varphi_i (k_{I,zi} R_{y,i} + k_y R_{z,i}) \right] = \quad (4.70) \\ = -j H_{s,i}.$$

Окончательно из (4.69), (4.70) получаем:

$$-jn_I \cos(\psi) \delta_{i0} + R_{p,i} = - \left[\cos \varphi_i U_{y,i}(0) - \sin \varphi_i U_{x,i}(0) \right]. \quad (4.71)$$

Для E_p компоненты из соотношений (4.49), (4.53), (4.64), (4.57) получаем

$$\delta_{i0} \cos \psi \cos \theta + (\cos \varphi_i R_{x,i} + \sin \varphi_i R_{y,i}) = \cos \varphi_i S_{x,i}(0) + \sin \varphi_i S_{y,i}(0). \quad (4.72)$$

Вычислим выражение $(\cos \varphi_i R_{x,i} + \sin \varphi_i R_{y,i})$. Для этого из уравнений

Максвелла (4.14) выразим

$$\mathbf{E} = \frac{1}{jk_0 \varepsilon} [\nabla \times \mathbf{H}] = \frac{1}{jk_0 \varepsilon} \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ H_x & H_y & H_z \end{vmatrix},$$

и поскольку $R_{x,i} = E_{x,i}^{refl}$, получим после дифференцирования разложений, аналогичных (4.9), (4.10):

$$\begin{aligned} R_{x,i} &= \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) = \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] (-jk_y H_{z,i}^{refl} - jk_{l,zi} H_{y,i}^{refl}) = \\ &= \frac{-1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] (k_y H_{z,i}^{refl} + k_{l,zi} H_{y,i}^{refl}). \end{aligned} \quad (4.73)$$

Аналогично для $R_{y,i} = E_{y,i}^{refl}$ получим выражение:

$$\begin{aligned} R_{y,i} &= \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) = \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] (jk_{l,zi} H_{x,i}^{refl} + jk_{x,i} H_{z,i}^{refl}) = \\ &= \frac{1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] (k_{l,zi} H_{x,i}^{refl} + k_{x,i} H_{z,i}^{refl}). \end{aligned} \quad (4.74)$$

Компонуя вместе выражения (4.73), (4.74), получим:

$$\begin{aligned} \cos \varphi_i R_{x,i} + \sin \varphi_i R_{y,i} &= \\ &= \frac{-1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] (k_{yi} H_{z,i}^{refl} + k_{l,zi} H_{y,i}^{refl}) \cos \varphi_i + \frac{1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] (k_{l,zi} H_{x,i}^{refl} + k_{xi} H_{z,i}^{refl}) \sin \varphi_i = \\ &= \frac{1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_1} \right] [H_{z,i}^{refl} (k_{xi} \sin \varphi_i - k_{yi} \cos \varphi_i) + k_{l,zi} (H_{x,i}^{refl} \sin \varphi_i - H_{y,i}^{refl} \cos \varphi_i)] = \\ &= \frac{k_{l,zi}}{k_0 n_1^2} (-1) (H_{y,i}^{refl} \cos \varphi_i - H_{x,i}^{refl} \sin \varphi_i) = \\ &= \frac{-jk_{l,zi}}{k_0 n_1^2} (-j) (H_{y,i}^{refl} \cos \varphi_i - H_{x,i}^{refl} \sin \varphi_i) = \frac{-jk_{l,zi}}{k_0 n_1^2} (-j) H_{s,i} = \frac{-jk_{l,zi}}{k_0 n_1^2} R_{p,i}, \end{aligned}$$

или окончательно $(\cos \varphi_i R_{x,i} + \sin \varphi_i R_{y,i}) = \frac{-jk_{l,zi}}{k_0 n_1^2} R_{p,i}$.

Принимая во внимание полученное соотношение, мы можем записать выражение (4.72) в виде:

$$\cos \psi \cos \theta \delta_{i0} - \frac{-jk_{I,zi}}{k_0 n_1^2} R_{p,i} = \cos \varphi_i S_{x,i}(0) + \sin \varphi_i S_{y,i}(0). \quad (4.75)$$

Для H_p компоненты из соотношений (4.54), (4.54), (4.66), (4.59) получаем

$$\begin{aligned} n_I \sin \psi \cos \theta \delta_{i0} - \\ - \frac{1}{k_0} \left[\cos \varphi_i (k_{I,zi} R_{y,i} + k_y R_{z,i}) + \sin \varphi_i (-k_{I,zi} R_{x,i} - k_{x,i} R_{z,i}) \right] = \\ = j \left[\cos \varphi_i U_{x,i}(0) + \sin \varphi_i U_{y,i}(0) \right]. \end{aligned} \quad (4.76)$$

После умножения на $(-j)$ получаем

$$jn_I \sin \psi \cos \theta \delta_{i0} - j \frac{k_{I,zi}}{k_0} R_{s,i}^I = - \left[\cos \varphi_i U_{x,i}(0) + \sin \varphi_i U_{y,i}(0) \right]. \quad (4.77)$$

4.11. Условия на нижней границе при $z = d$

Для E_s компоненты из соотношений (4.47), (4.51), (4.61) получаем

$$\cos \varphi_i S_{y,i}(d) - \sin \varphi_i S_{x,i}(d) = (\cos \varphi_i T_{y,i} - \sin \varphi_i T_{x,i}),$$

или, выражая правую часть через компоненты s – поляризации $T_{s,i}$:

$$\cos \varphi_i S_{y,i}(d) - \sin \varphi_i S_{x,i}(d) = T_{s,i}. \quad (4.78)$$

Для H_s компоненты из соотношений (4.48), (4.52), (4.63) получаем

$$\begin{aligned} -j \left[\cos \varphi_i U_{y,i}(d) - \sin \varphi_i U_{x,i}(d) \right] = \\ = \frac{1}{k_0} \left[\cos \varphi_i (k_{II,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i}) - \sin \varphi_i (-k_{II,zi} T_{y,i} + k_y T_{z,i}) \right]. \end{aligned} \quad (4.79)$$

После умножения на $(-j)$ получаем

$$\begin{aligned} & -\left[\cos\varphi_i U_{y,i}(d) - \sin\varphi_i U_{x,i}(d)\right] = \\ & = -\frac{j}{k_0} \left[\cos\varphi_i (k_{\parallel,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i}) - \sin\varphi_i (-k_{\parallel,zi} T_{y,i} + k_y T_{z,i})\right]. \end{aligned}$$

Рассуждая, как и в случае вывода формулы (4.78), мы можем записать:

$$\begin{aligned} T_{p,i} & = \\ & = -\frac{j}{k_0} \left[\cos\varphi_i (k_{\parallel,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i}) - \sin\varphi_i (-k_{\parallel,zi} T_{y,i} + k_y T_{z,i})\right] = \quad (4.80) \\ & = -jH_{s,i}. \end{aligned}$$

Окончательно из (4.79), (4.80) получаем

$$-\left[\cos\varphi_i U_{y,i}(d) - \sin\varphi_i U_{x,i}(d)\right] = T_{p,i}. \quad (4.81)$$

Для E_p компоненты из соотношений (4.49), (4.53), (4.65) следует:

$$\cos\varphi_i S_{x,i}(d) + \sin\varphi_i S_{y,i}(d) = (\cos\varphi_i T_{x,i} + \sin\varphi_i T_{y,i}). \quad (4.82)$$

Преобразуем выражение $\cos\varphi_i T_{x,i} + \sin\varphi_i T_{y,i}$ к удобному для дальнейших вычислений виду. Из уравнений Максвелла (4.14) можем получить (с учетом обозначения $T_{x,i} = E_{x,i}^{trans}$):

$$\begin{aligned} T_{x,i} & = \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2}\right] \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}\right) = \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2}\right] (-jk_y H_{z,i}^{trans} + jk_{\parallel,zi} H_{y,i}^{trans}) = \\ & = \frac{-1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2}\right] (k_y H_{z,i}^{trans} - k_{\parallel,zi} H_{y,i}^{trans}). \end{aligned} \quad (4.83)$$

Аналогично, с учетом $T_{y,i} = E_{y,i}^{trans}$, получаем

$$\begin{aligned} T_{y,i} &= \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) = \frac{1}{jk_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left(-jk_{\parallel,zi} H_x^{trans} + jk_{x,i} H_z^{trans} \right) = \\ &= \frac{1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left(-k_{\parallel,zi} H_x^{trans} + k_{x,i} H_z^{trans} \right). \end{aligned} \quad (4.84)$$

Из соотношений (4.83), (4.84) можно получить:

$$\begin{aligned} \cos \varphi_i T_{x,i} + \sin \varphi_i T_{y,i} &= \\ &= \frac{-1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left(k_y H_{z,i}^{trans} - k_{\parallel,zi} H_{y,i}^{trans} \right) \cos \varphi_i + \\ &\quad + \frac{1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left(-k_{\parallel,zi} H_{x,i}^{trans} + k_{x,i} H_{z,i}^{trans} \right) \sin \varphi_i = \\ &= \frac{1}{k_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left[H_{z,i}^{trans} (k_{xi} \sin \varphi_i - k_y \cos \varphi_i) + k_{\parallel,zi} (-H_{x,i}^{trans} \sin \varphi_i + H_{y,i}^{trans} \cos \varphi_i) \right] = \\ &= \frac{k_{\parallel,zi}}{k_0 n_2^2} \left(H_{y,i}^{trans} \cos \varphi_i - H_{x,i}^{trans} \sin \varphi_i \right) = \\ &= \frac{jk_{\parallel,zi}}{k_0 n_2^2} (-j) \left(H_{y,i}^{trans} \cos \varphi_i - H_{x,i}^{trans} \sin \varphi_i \right) = \frac{jk_{\parallel,zi}}{k_0 n_2^2} (-j) H_{s,i} = \frac{jk_{\parallel,zi}}{k_0 n_2^2} T_{p,i}, \end{aligned}$$

или в окончательном виде $(\cos \varphi_i T_{x,i} + \sin \varphi_i T_{y,i}) = \frac{jk_{\parallel,zi}}{k_0 n_2^2} T_{p,i}$.

Принимая во внимание последнее выражение, получаем следующее соотношение:

$$\cos \varphi_i S_{x,i}(d) + \sin \varphi_i S_{y,i}(d) = \frac{jk_{\parallel,zi}}{k_0 n_2^2} T_{p,i}. \quad (4.85)$$

Для H_p компоненты из соотношений (4.50), (4.50), (4.54), (4.67) следует:

$$\begin{aligned}
& -j(\cos \varphi_i H_{x,i}(d) + \sin \varphi_i H_{y,i}(d)) = \\
& = -\frac{1}{k_0} \left[\cos \varphi_i (-k_{II,zi} T_{y,i} + k_y T_{z,i}) + \sin \varphi_i (k_{II,zi} T_{x,i} - k_{x,i} T_{z,i}) \right] = \quad (4.86) \\
& \quad = \frac{k_{II,zi}}{k_0} T_{s,i},
\end{aligned}$$

или после умножения на $(-j)$:

$$-\left[\cos \varphi_i U_{x,i}(d) + \sin \varphi_i U_{y,i}(d) \right] = -j \frac{k_{II,zi}}{k_0} T_{s,i}. \quad (4.87)$$

4.12. Расчетные формулы

Для реализации вычислительного алгоритма приведем в удобном для программирования виде выведенные выше формулы. Мы собираемся решать уравнения (4.68), (4.71), (4.75), (4.77), (4.78), (4.81), (4.85) и (4.87) относительно неизвестных амплитуд R_s, T_s, R_p, T_p и коэффициентов разложения c_m^\pm . Будучи записанные в приведенном выше порядке, эти уравнения составляют плохо обусловленную матрицу (элементы внедиагональных блоков значительно превышают по величине элементы диагональных блоков). Систему можно преобразовать к эквивалентной, но лучше обусловленной, матрице исключением переменных R_s, T_s, R_p, T_p . В результате такого исключения получим систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов c_m^\pm . Определив c_m^\pm , затем сможем выразить искомые амплитуды пропускания и отражения R_s, T_s, R_p, T_p через найденные коэффициенты c_m^\pm , завершив тем самым основной этап вычислений.

Начнем поэтапно исключать амплитуды из системы уравнений. Так, на границе первой области из соотношений (4.68) и (4.77) получаем

$$\left\{ \begin{array}{l} \sin \psi \delta_{i0} + R_{s,i} = \cos \varphi_i S_{y,i}(0) - \sin \varphi_i S_{x,i}(0) \\ \delta_{i0} j n_I \sin \psi \cos \theta - \frac{j k_{I,zi}}{k_0} R_{s,i} = -[\cos \varphi_i U_{x,i}(0) + \sin \varphi_i U_{y,i}(0)] \end{array} \right.$$

Разрешая полученную систему относительно амплитуд R_s , приходим к соотношениям

$$\left\{ \begin{array}{l} R_{s,i} = \cos \varphi_i S_{y,i}(0) - \sin \varphi_i S_{x,i}(0) - \sin \psi \delta_{i0} \\ -R_{s,i} = -\frac{k_0}{j k_{I,zi}} [\cos \varphi_i U_{x,i}(0) + \sin \varphi_i U_{y,i}(0) + j n_I \sin \psi \cos \theta \delta_{i0}] \end{array} \right.$$

Суммируя два последних уравнения, получим уравнение:

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos \varphi_i S_{y,i}(0) - \sin \varphi_i S_{x,i}(0) - \sin \psi \delta_{i0} - \\ -\frac{k_0}{j k_{I,zi}} \cos \varphi_i U_{x,i}(0) - \frac{k_0}{j k_{I,zi}} \sin \varphi_i U_{y,i}(0) - \frac{j k_0}{j k_{I,zi}} n_I \sin \psi \cos \theta \delta_{i0} = 0. \end{array} \right.$$

С помощью соотношений (4.43)-(4.46) преобразуем его к уравнению относительно неизвестных коэффициентов c_m^\pm :

$$\begin{aligned} & \cos \varphi_i \left[\sum_m V_{11,im} (c_{1,m}^+ + c_{1,m}^- \exp(-k_0 q_{1,m} d)) + \right. \\ & \quad \left. + \sum_m V_{12,im} (c_{2,m}^+ + c_{2,m}^- \exp(-k_0 q_{2,m} d)) \right] - \\ & \quad - \sin \varphi_i \sum_m W_{2,im} (c_{2,m}^+ + c_{2,m}^- \exp(-k_0 q_{2,m} d)) - \\ & \quad - \frac{k_0}{j k_{I,zi}} \left\{ \cos \varphi_i \sum_m W_{1,im} (-c_{1,m}^+ + c_{1,m}^- \exp(-k_0 q_{1,m} d)) + \right. \\ & \quad \left. + \sin \varphi_i \sum_m V_{21,im} (-c_{1,m}^+ + c_{1,m}^- \exp(-k_0 q_{1,m} d)) + \right. \\ & \quad \left. + \sin \varphi_i \sum_m V_{22,im} (-c_{2,m}^+ + c_{2,m}^- \exp(-k_0 q_{2,m} d)) \right\} = \sin \psi \left[1 + \frac{k_0 n_I \cos \theta}{k_{I,zi}} \right] \delta_{i0}. \end{aligned}$$

Группируя члены с одинаковыми коэффициентами c_m^\pm , получаем окончательно:

$$\begin{aligned}
& \sum_m [V_{11,im} \cos \varphi_i + \frac{k_0}{jk_{I,zi}} \cos \varphi_i W_{1,im} + \frac{k_0}{jk_{I,zi}} \sin \varphi_i V_{21,im}] c_{1,m}^+ + \\
& + \sum_m [V_{11,im} \cos \varphi_i - \frac{k_0}{jk_{I,zi}} \cos \varphi_i W_{1,im} - \frac{k_0}{jk_{I,zi}} \sin \varphi_i V_{21,im}] \cdot \\
& \quad \cdot \exp(-k_0 q_{1,m} d) c_{1,m}^- + \\
& + \sum_m [V_{12,im} \cos \varphi_i - \sin \varphi_i W_{2,im} + \frac{k_0}{jk_{I,zi}} \sin \varphi_i V_{22,im}] c_{2,m}^+ + \\
& + \sum_m [V_{12,im} \cos \varphi_i - \sin \varphi_i W_{2,im} - \frac{k_0}{jk_{I,zi}} \sin \varphi_i V_{22,im}] \exp(-k_0 q_{2,m} d) c_{2,m}^- = \\
& = \sin \psi [1 + \frac{k_0 n_I \cos \theta}{k_{I,zi}}] \delta_{i0}.
\end{aligned} \tag{4.88}$$

Выведем второе уравнение из соотношений (4.69) и (4.75):

$$\begin{aligned}
-R_{p,i} &= \frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} (\cos \varphi_i S_{x,i}(0) + \sin \varphi_i S_{y,i}(0) - \delta_{i0} \cos \psi \cos \theta) \\
R_{p,i} - j n_I \cos(\psi) \delta_{i0} &= -[\cos(\varphi_i) U_{y,i}(0) - \sin(\varphi_i) U_{x,i}(0)].
\end{aligned}$$

Исключая левые части, получим

$$\begin{aligned}
\frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} [\cos \varphi_i S_{x,i}(0) + \sin \varphi_i S_{y,i}(0)] - \cos \varphi_i U_{y,i}(0) + \sin \varphi_i U_{x,i}(0) &= \\
&= n_I \cos \psi (-j + \frac{n_I k_0}{jk_{I,zi}} \cos \theta) \delta_{i0}.
\end{aligned}$$

Подставляя разложения (4.43)-(4.46) в эту формулу, приводим ее к виду

$$\begin{aligned}
& \frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} \cos \varphi_i \sum_m W_{2,im} (c_{2,im}^+ + c_{2,im}^- \exp(-k_0 q_{2,m} d)) + \\
& + \frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} \sin \varphi_i \sum_m V_{11,im} (c_{1,m}^+ + c_{1,m}^- \exp(-k_0 q_{1,m} d)) + \\
& + \frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} \sin \varphi_i \sum_m V_{12,im} (c_{2,im}^+ + c_{2,im}^- \exp(-k_0 q_{2,m} d)) -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \cos \varphi_i \sum_m V_{21,im} (-c_{1,m}^+ + c_{1,m}^- \exp(-k_0 q_{1,m} d)) - \\
& - \cos \varphi_i \sum_m V_{22,im} (-c_{2,m}^+ + c_{2,m}^- \exp(-k_0 q_{2,m} d)) + \\
& + \sin \varphi_i \sum_m W_{1,im} (-c_{1,im}^+ + c_{1,im}^- \exp(-k_0 q_{1,m} d)) = \\
& = n_I \cos \psi (-j + \frac{n_I k_0}{jk_{I,zi}} \cos \theta) \delta_{i0}.
\end{aligned}$$

Группируя члены с одинаковыми коэффициентами c_m^\pm , получаем:

$$\begin{aligned}
& \sum_m [\frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} v_{11,im} \sin \varphi_i + v_{21,im} \cos \varphi_i - w_{1,im} \sin \varphi_i] c_{1,m}^+ + \\
& + \sum_m [\frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} v_{11,im} \sin \varphi_i - v_{21,im} \cos \varphi_i + w_{1,im} \sin \varphi_i] \exp(-k_0 q_{1,m} d) c_{1,m}^- + \\
& + \sum_m [\frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} w_{2,im} \cos \varphi_i + \frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} v_{12,im} \sin \varphi_i + v_{22,im} \cos \varphi_i] c_{2,m}^+ + \\
& + \sum_m [\frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} w_{2,im} \cos \varphi_i + \frac{k_0 n_I^2}{jk_{I,zi}} v_{12,im} \sin \varphi_i - v_{22,im} \cos \varphi_i] \cdot \\
& \quad \cdot \exp(-k_0 q_{2,m} d) c_{2,m}^- = \\
& = n_I \cos \psi (-j + \frac{n_I k_0}{jk_{I,zi}} \cos \theta) \delta_{i0}.
\end{aligned} \tag{4.89}$$

На границе со второй областью из уравнений (4.78) и (4.87) выписываем:

$$\begin{aligned}
T_{s,i} &= \cos(\varphi_i) S_{y,i}(d) - \sin(\varphi_i) S_{x,i}(d), \\
T_{s,i} &= -\frac{k_0}{jk_{II,zi}} [\cos(\varphi_i) U_{x,i}(d) + \sin(\varphi_i) U_{y,i}(d)].
\end{aligned}$$

Исключая левые части

$$\cos(\varphi_i) S_{y,i}(d) - \sin(\varphi_i) S_{x,i}(d) + \frac{k_0}{jk_{II,zi}} [\cos(\varphi_i) U_{x,i}(d) + \sin(\varphi_i) U_{y,i}(d)] = 0 \quad \text{и}$$

подставляя разложения (4.43)-(4.46):

$$\begin{aligned}
& \cos(\varphi_i) \left[\sum_{m=1}^n v_{11,i,m} (c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m} d) + c_{1,m}^-) + \right. \\
& \left. + \sum_{m=1}^n v_{12,i,m} (c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} d) + c_{2,m}^-) \right] - \\
& - \sin(\varphi_i) \sum_{m=1}^n w_{2,i,m} (c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} d) + c_{2,m}^-) + \\
& + \frac{k_0}{jk_{II,zi}} \cos(\varphi_i) \sum_{m=1}^n w_{1,i,m} (-c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m} d) + c_{1,m}^-) + \\
& + \frac{k_0}{jk_{II,zi}} \sin(\varphi_i) \left[\sum_{m=1}^n v_{21,i,m} (-c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m} d) + c_{1,m}^-) + \right. \\
& \left. + \sum_{m=1}^n v_{22,i,m} (-c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} d) + c_{2,m}^-) \right] = 0.
\end{aligned}$$

Приводя подобные члены, получаем третью группу уравнений:

$$\begin{aligned}
& \sum_m \left[v_{11,im} \cos \varphi_i - \frac{k_0}{jk_{II,zi}} (w_{1,im} \cos \varphi_i + v_{21,im} \sin \varphi_i) \right] \exp(-k_0 q_{1,m} d) c_{1,m}^+ + \\
& + \sum_m \left[v_{11,im} \cos \varphi_i + \frac{k_0}{jk_{II,zi}} (w_{1,im} \cos \varphi_i + v_{21,im} \sin \varphi_i) \right] c_{1,m}^- + \\
& + \sum_m \left[v_{12,im} \cos \varphi_i - w_{2,im} \sin \varphi_i - \frac{k_0}{jk_{II,zi}} v_{22,im} \sin \varphi_i \right] \exp(-k_0 q_{2,m} d) c_{2,m}^+ + \\
& + \sum_m \left[v_{12,im} \cos \varphi_i - w_{2,im} \sin \varphi_i + \frac{k_0}{jk_{II,zi}} v_{22,im} \sin \varphi_i \right] c_{2,m}^- = 0.
\end{aligned} \tag{4.90}$$

Четвертая группа уравнений может быть выведена из соотношений (4.81) и (4.85). Приводим их к виду:

$$\begin{aligned}
& - \left[\cos \varphi_i U_{y,i}(d) - \sin \varphi_i U_{x,i}(d) \right] = T_{p,i}, \\
& \cos \varphi_i S_{x,i}(d) + \sin \varphi_i S_{y,i}(d) = \frac{jk_{II,zi}}{k_0 n_{II}^2} T_{p,i}
\end{aligned}$$

и исключаем $T_{p,i}$:

$$\frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} [\cos \varphi_i S_{x,i}(d) + \sin \varphi_i S_{y,i}(d)] + \cos \varphi_i U_{y,i}(d) - \sin \varphi_i U_{x,i}(d) = 0.$$

Подставляя в полученное равенство разложения (4.43)-(4.46) для $S_{x,i}(d), S_{y,i}(d), U_{y,i}(d)$ и $U_{x,i}(d)$, получим:

$$\begin{aligned} & \frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} \cos \varphi_i \sum_{m=1}^n w_{2,i,m} (c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} d) + c_{2,m}^-) + \\ & + \frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} \sin \varphi_i \left[\sum_{m=1}^n v_{11,i,m} (c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m} d) + c_{1,m}^-) + \right. \\ & \quad \left. + \sum_{m=1}^n v_{12,i,m} (c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} d) + c_{2,m}^-) \right] + \\ & + \cos \varphi_i \left[\sum_{m=1}^n v_{21,i,m} (-c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m} d) + c_{1,m}^-) + \right. \\ & \quad \left. + \sum_{m=1}^n v_{22,i,m} (-c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} d) + c_{2,m}^-) \right] - \\ & - \sin \varphi_i \sum_{m=1}^n w_{1,i,m} (-c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m} d) + c_{1,m}^-) = 0. \end{aligned}$$

После приведения подобных членов получаем четвертую группу уравнений для коэффициентов c^\pm :

$$\begin{aligned} & \sum_m \left[\frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} v_{11,im} \sin \varphi_i - v_{21,im} \cos \varphi_i + w_{1,im} \sin \varphi_i \right] \exp(-k_0 q_{1,m} d) c_{1,m}^+ + \\ & + \sum_m \left[\frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} v_{11,im} \sin \varphi_i + v_{21,im} \cos \varphi_i - w_{1,im} \sin \varphi_i \right] c_{1,m}^- + \\ & + \sum_m \left[\frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} w_{2,im} \cos \varphi_i + \frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} v_{12,im} \sin \varphi_i - v_{22,im} \cos \varphi_i \right] \cdot \\ & \quad \cdot \exp(-k_0 q_{2,m} d) c_{2,m}^+ + \\ & + \sum_m \left[\frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} w_{2,im} \cos \varphi_i + \frac{k_0 n_{II}^2}{jk_{II,zi}} v_{12,im} \sin \varphi_i + v_{22,im} \cos \varphi_i \right] c_{2,m}^- = 0. \end{aligned} \tag{4.91}$$

Решая совместно уравнения (4.88)-(4.91), мы определяем искомые коэффициенты c_m^\pm , а затем амплитуды отраженных и прошедших волн

R_s, T_s, R_p, T_p . Интенсивности соответствующих порядков вычисляются при необходимости по формулам:

$$DE_{ri} = |R_{si}|^2 \operatorname{Re} \left(\frac{k_{I,zi}}{k_0 n_I \cos \theta} \right) + |R_{pi}|^2 \operatorname{Re} \left(\frac{k_{I,zi} / n_I^2}{k_0 n_I \cos \theta} \right), \quad (4.92)$$

$$DE_{ii} = |T_{si}|^2 \operatorname{Re} \left(\frac{k_{II,zi}}{k_0 n_{II} \cos \theta} \right) + |T_{pi}|^2 \operatorname{Re} \left(\frac{k_{II,zi} / n_{II}^2}{k_0 n_{II} \cos \theta} \right). \quad (4.93)$$

Тема 5. Многослойные дифракционные решетки

Рассмотрим усовершенствованный, численно устойчивый вариант метода связанных волн (RCWA - Rigorous Coupled-Wave Analysis) в применении к многослойным дифракционным решеткам. Этот подход [9, 10] позволяет реализовать численно устойчивый алгоритм решения задачи о рассеянии электромагнитного излучения на многослойных глубоких дифракционных решетках. Кроме того, удается преодолеть численную неустойчивость традиционного метода переходных матриц для многослойных систем. Неустойчивость появляется в связи с тем, что обычно при решении задачи на основе матриц перехода приходится обращаться плохо обусловленные матрицы. Подход, который мы опишем ниже, позволяет избавиться от обращения плохо обусловленных матриц и, следовательно, получить устойчивый метод решения задач многослойной асимметричной конической дифракции.

5.1. Отражение и пропускание света многослойным покрытием, состоящим из однородных слоев

Рассмотрим отражение и пропускание ТЕ-поляризованной плоской монохроматической волны, приведенная длина волны которой (в вакууме) равна λ_0 , падающей под углом θ на L однородных слоев с показателями преломления n_1, n_2, \dots, n_L и толщинами d_1, d_2, \dots, d_L , как показано на рис.11 (модификация алгоритма для случая ТМ-поляризации достаточно прозрачна и обсуждается ниже).

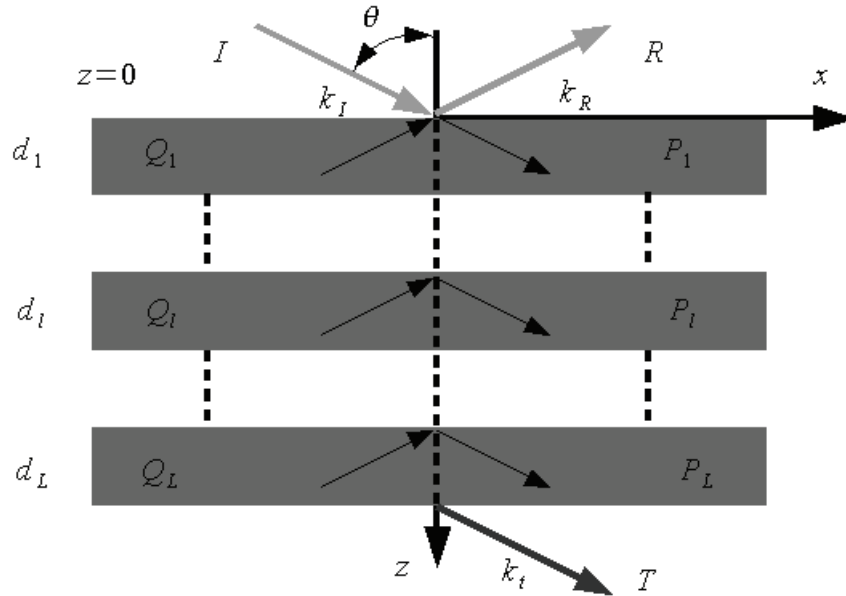


Рис. 11. Геометрия отражения и пропускания на многослойном покрытии из однородных слоев

Нормированное электрическое поле (в направлении y) в областях перед и после покрытия, а также в каждом из его слоев может быть записано в виде:

$$\begin{aligned}
 E_0 &= \left[\exp(-jk_{I,z}z) + R \exp(jk_{I,z}z) \right] \exp(-jk_x x), \quad z \leq 0, \\
 E_l &= \left\{ P_l \exp[-k_0 \gamma_l (z - D_{l-1})] + Q_l \exp[k_0 \gamma_l (z - D_l)] \right\} \exp(-jk_x x), \\
 & \quad D_{l-1} \leq z \leq D_l
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

$$E_t = T \exp \left\{ -j \left[k_x x + k_{II,z} (z - D_L) \right] \right\}, \quad z \geq D_L,$$

$$E_0 = \left[\exp(-jk_{I,z}z) + R \exp(jk_{I,z}z) \right] \exp(-jk_x x), \quad z \leq 0,$$

$$\begin{aligned}
 E_l &= \left\{ P_l \exp[-k_0 \gamma_l (z - D_{l-1})] + Q_l \exp[k_0 \gamma_l (z - D_l)] \right\} \exp(-jk_x x), \\
 & \quad D_{l-1} \leq z \leq D_l
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k_x &= k_0 n_I \sin(\theta), \\
k_{I,z} &= k_0 n_I \cos(\theta), \\
k_{II,z} &= k_0 \left[n_{II}^2 - n_I^2 \sin^2(\theta) \right]^{1/2}, \\
\gamma_l &= j \left[n_l^2 - n_I^2 \sin^2(\theta) \right]^{1/2}, \quad l=1, \dots, L, \\
D_l &= \sum_{p=1}^l d_p,
\end{aligned} \tag{5.2}$$

где R и T - амплитуды отраженного и прошедшего электрических полей; P и Q - амплитуды поля в однородных слоях; $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ - длина волнового вектора n_I и n_{II} - показатели преломления входной и выходной сред. Отметим, что для сред без потерь, γ_l являются чисто мнимыми при $n_l > n_I \sin \theta$ и чисто вещественными при $n_l < n_I \sin \theta$ (полное внутреннее отражение, т.е. экспоненциально убывающая волна в диэлектрическом слое). Для среды с поглощением (комплексный показатель преломления) γ_l является комплексным. Мы вычисляем амплитуды отраженного и прошедшего полей, согласуя тангенциальные компоненты электрического и магнитного полей на границах между слоями.

На границе между входной средой и первым слоем ($z = 0$) выполняются соотношения:

$$\begin{aligned}
1 + R &= P_1 + Q_1 \exp(-k_0 \gamma_1 d_1), \\
jk_{I,z} / k_0 (1 - R) &= \gamma_1 [P_1 - Q_1 \exp(-k_0 \gamma_1 d_1)];
\end{aligned} \tag{5.3}$$

на границе между $(l-1)$ -м и l -м слоями ($z = D_{l-1}$) выполняются соотношения:

$$\begin{aligned}
P_{l-1} \exp(-k_0 \gamma_{l-1} d_{l-1}) + Q_{l-1} &= P_l + Q_l \exp(-k_0 \gamma_l d_l), \\
\gamma_{l-1} [P_{l-1} \exp(-k_0 \gamma_{l-1} d_{l-1}) - Q_{l-1}] &= \gamma_l [P_l - Q_l \exp(-k_0 \gamma_l d_l)];
\end{aligned} \tag{5.4}$$

и на границе между последним слоем и выходной средой ($z = D_L$)

выполняются соотношения

$$\begin{aligned} P_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) + Q_L &= T, \\ \gamma_L [P_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) - Q_L] &= j(k_{II,z} / k_0) T. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Отметим, что граничные условия на каждой границе дают по два уравнения, так что для структуры из L слоев получатся $2(L+1)$ уравнения. Эта полная система уравнений может быть решена одновременно относительно R и T с помощью стандартных методов численного решения систем линейных алгебраических уравнений (например, с помощью LU или QR разложений). Процедура будет численно устойчивой при любом числе слоев, любых толщинах слоев и любых значениях показателей преломления.

Численная неустойчивость традиционных методов возникала, в частности, при больших положительных значениях (γd) . В излагаемом подходе Мохарама эта неустойчивость преодолена введенной калибровкой $(z - D)$ в экспоненциальных членах с положительными значениями γ в уравнениях (5.1). К сожалению, при большом числе слоев полная система уравнений может оказаться слишком большой для эффективного численного решения.

Предлагавшиеся ранее методы понижения размерности системы линейных уравнений (с целью повышения эффективности) могут привести к появлению численной неустойчивости.

Обычно уравнения (5.3)–(5.5) разрешаются с целью понижения размерности результирующей системы линейных алгебраических уравнений. В методе матрицы перехода из уравнения (5.5) амплитуды поля P_L и Q_L выражаются через коэффициент пропускания T :

$$\begin{bmatrix} P_L \\ Q_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & 1 \\ \gamma_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & -\gamma_L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{II,z} / k_0) \end{bmatrix} T \quad (5.6)$$

и подставляются в уравнения (5.4) для амплитуд поля P_{L-1} и Q_{L-1} :

$$\begin{bmatrix} P_{L-1} \\ Q_{L-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_{L-1} d_{L-1}) & 1 \\ \gamma_{L-1} \exp(-k_0 \gamma_{L-1} d_{L-1}) & -\gamma_{L-1} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \\ \gamma_L & -\gamma_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & 1 \\ \gamma_{L-1} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & -\gamma_L \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{II,z} / k_0) \end{bmatrix} T. \quad (5.7)$$

Повторяя эту процедуру для оставшихся слоев, приходим к системе линейных уравнений второго порядка:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{I,z} / k_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -j(k_{I,z} / k_0) \end{bmatrix} R = \prod_{l=1}^L \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0 \gamma_l d_l) \\ \gamma_l & -\gamma_l \exp(-k_0 \gamma_l d_l) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & 1 \\ \gamma_{L-1} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & -\gamma_L \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{II,z} / k_0) \end{bmatrix} T. \quad (5.8)$$

Отметим, что для вывода уравнений (5.8) необходимо для каждого слоя вычислять обратную матрицу. Если для какого-то слоя величина $(\gamma_l d_l)$ достаточно велика и положительна (в случае экспоненциально убывающих волн и/или для поглощающих сред), все элементы в крайнем левом столбце обращаемой матрицы будут практически равны нулю.

Обращение плохо обусловленной матрицы приводит к появлению очень больших элементов в обратной матрице. Умножение такой матрицы на вектор с малой погрешностью приводит к многократному увеличению погрешности.

Хотя исходная задача является устойчивой, ее решение с помощью

матриц перехода может привести к ошибочным результатам даже в случае простых многослойных систем.

Формулировка задачи для случая ТМ-поляризованных волн аналогична уравнениям (5.2)–(5.8), с тем отличием, что в этих формулах величина γ_l заменяется на γ_l/n_l^2 (кроме как в показателях экспонент); $k_{l,z}$ замещается $k_{l,z}/n_l^2$; $k_{II,z}$ заменяется величиной $k_{II,z}/n_{II}^2$. Теперь величины R и T представляют собой компоненты (нормальные к плоскости падения) отраженного и преломленного магнитных полей. Численная неустойчивость, возможная в случае ТЕ-поляризации, присуща также и в случае ТМ-поляризации.

5.2. Численно устойчивая модификация метода матрицы перехода

Для преодоления численной неустойчивости, связанной с обращением матриц, рассмотрим последний множитель перед T ($l = L$) в уравнении (5.8):

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \\ \gamma_L & -\gamma_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & 1 \\ \gamma_{L-1} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & -\gamma_L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_{L+1} \\ g_{L+1} \end{bmatrix} = \\ & = \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \\ \gamma_L & -\gamma_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \gamma_L & -\gamma_L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_{L+1} \\ g_{L+1} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

где $f_{L+1} = 1$ и $g_{L+1} = jk_{II,z}/k_0$. Заметим, что обращаемая матрица переписана в последней формуле в виде произведения двух матриц. Правая из них может быть обращена устойчиво. При этом правая часть уравнения (5.9) переписывается в виде:

$$\begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \\ \gamma_L & -\gamma_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_L d_L) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} a_L \\ b_L \end{bmatrix} T, \quad (5.10)$$

где

$$\begin{bmatrix} a_L \\ b_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \gamma_L & -\gamma_L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_{L+1} \\ g_{L+1} \end{bmatrix}.$$

Оставшаяся матрица является плохо обусловленной при малых значениях диагональных элементов $\exp(-k_0 \gamma_L d_L)$. Очевидно, что простую диагональную (2x2) матрицу мы можем обратить аналитически и точно. Однако обращенная матрица будет содержать очень большие элементы, что может привести к росту погрешности при численном умножении на нее. Подстановка $T = \exp(-k_0 \gamma_L d_L) T_L$ позволяет обойти эту проблему.

С помощью этой подстановки последний множитель в уравнении (5.6) может быть записан в виде

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} f_L \\ g_L \end{bmatrix}_{T_L} &= \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \\ \gamma_L & -\gamma_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_L \\ b_L \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \end{bmatrix}_{T_L} = \\ &= \begin{bmatrix} a_L + b_L \exp(-2k_0 \gamma_L d_L) \\ \gamma_L [a_L - b_L \exp(-2k_0 \gamma_L d_L)] \end{bmatrix}_{T_L}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Повторяя процедуру разложения (5.9) к предыдущим слоям, получим

$$\begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{I,z} / k_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -j(k_{I,z} / k_0) \end{bmatrix} R = \begin{bmatrix} f_1 \\ g_1 \end{bmatrix}_{T_1}. \quad (5.12)$$

Здесь связь между T и T_1 задается соотношением:

$$T = \exp(-k_0 \gamma_L d_L) \dots \exp(-k_0 \gamma_l d_l) \dots \exp(-k_0 \gamma_1 d_1) T_1, \quad (5.13)$$

где a_l, b_l, f_l , и g_l — величины, введенные в соотношениях (5.10) и (5.11). Уравнение (5.12) легко разрешается относительно R и T (через T_1) без какой-либо численной неустойчивости. В данном разделе мы привели численно устойчивую модификацию метода, основанного на матрице перехода. Эта модификация выглядит очень просто лишь благодаря тому, что мы рассматривали с (2x2) скалярными матрицами.

5.3. Формулировка точного метода связанных волн для многослойных решеток с рельефной поверхностью

Рассмотрим описанный в предыдущем разделе подход в случае многослойных бинарных покрытий или покрытий со сложным рельефом поверхности.

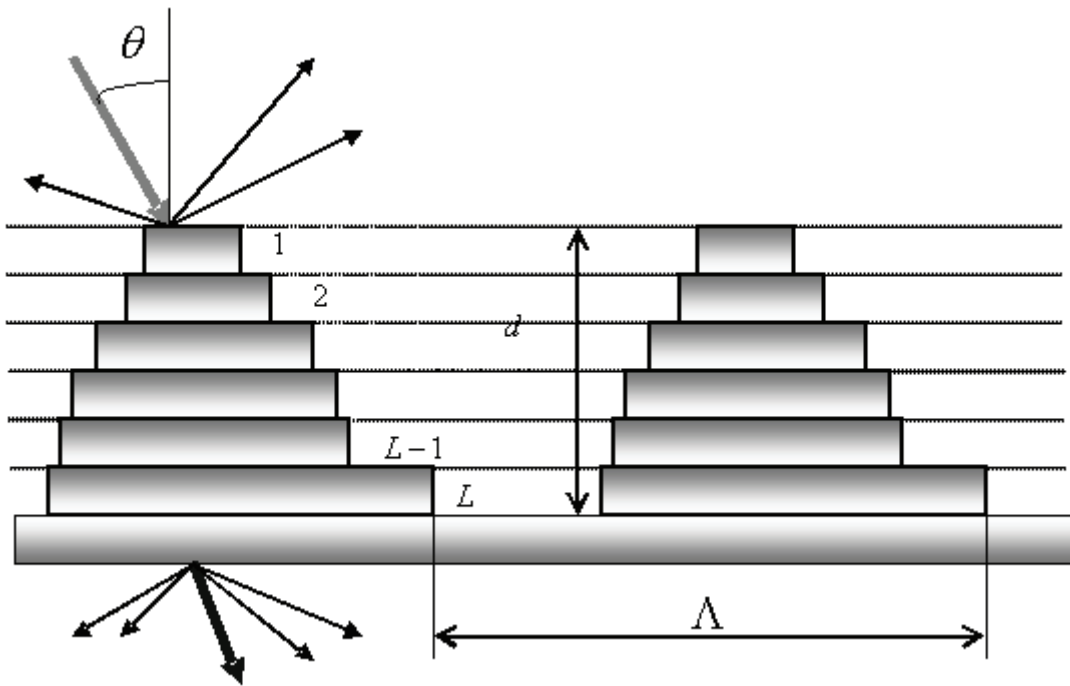


Рис.12. Геометрия дифракционной решетки с кусочно-постоянной аппроксимацией рельефной поверхности

На рис. 12 представлена стратификация покрытия со сложным рельефом поверхности, превращающая его в многослойное бинарное покрытие. Линейно-поляризованная плоская электромагнитная волна падает (в плоскости, перпендикулярной штрихам решетки) под произвольным углом θ к нормали на многослойное бинарное покрытие (диэлектрическое или поглощающее). На протяжении периода решетки Λ , вообще говоря, располагаются участки с различными показателями преломления. Решетка ограничена сверху и снизу двумя областями с постоянными показателями преломления: n_I и n_{II} . Не ограничивая

общности, будем считать, что нормаль к границам слоев направлена вдоль оси z , а вектор решетки ориентирован вдоль оси x . Внутри решетки периодическая функция диэлектрической проницаемости может быть разложена в ряд Фурье:

$$\varepsilon(x, z) = \sum_h \varepsilon_h(z) \exp[j(2\pi h / \Lambda)], \quad (5.14)$$

где $\varepsilon_h(z)$ это h -ый коэффициент Фурье диэлектрической проницаемости и зависит от z . В общем случае коэффициенты Фурье являются комплекснозначными. После стратификации покрытия на тонкие бинарные слои, перпендикулярные вектору нормали, как показано на рис. 12, мы можем применить метод связанных волн, развитый первоначально для однослойных бинарных покрытий. Покрытие с произвольным профилем может быть аппроксимировано сколь угодно точно за счет выбора толщин отдельных слоев. При этом коэффициенты Фурье становятся (приближенно) постоянными внутри каждого слоя. Диэлектрическая проницаемость l -го слоя толщиной d_l может быть представлена при этом в виде

$$\varepsilon_l(x) = \sum_h \varepsilon_{l,h} \exp([j(2\pi h / \Lambda)], \quad (5.15)$$

$$D_l - d_l < z < D_l = \sum_{p=1}^l d_p.$$

Проблема рассеяния на сложном покрытии решается поэтапно. Во-первых, метод связанных волн применяется к электромагнитному полю внутри каждого слоя. Во-вторых, граничные условия для электромагнитного поля (непрерывность тангенциальных компонент электрического и магнитного поля) записываются для границы между входной областью и первым слоем покрытия, затем для границы между первым и вторым слоями покрытия и так далее, пока мы не дойдем до границы между последним слоем и выходной областью. В-третьих,

получившуюся систему уравнений для граничных условий решаем относительно амплитуд отраженной и преломленной волн.

Численно устойчивая реализация метода связанных волн детально рассмотрена в теме 3 для ТЕ-поляризации. Рассмотрим подробно случай ТМ-поляризации, который легко модифицируется для ТЕ-поляризации и может быть обобщен на случай конической дифракции. Поля падающей, отраженной и преломленной волн запишем в виде

$$\begin{aligned}
 H_{I,y} &= \exp\{-jk_0 n_0 [\sin(\theta)x + \cos(\theta)z]\} + \\
 &\quad + \sum_i R_i \exp[-j(k_{xi}x - k_{I,zi}z)], \\
 H_{II,y} &= \sum_i E_i \exp[-j(k_{xi}x + k_{II,zi}(D_L - z))].
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

R_i и T_i являются нормированными амплитудами магнитного поля i -ой отраженной и преломленной волн. Величина k_{xi} определяется из условия Флоке в виде

$$\begin{aligned}
 k_{xi} &= k_0 [n_l \sin(\theta) - i(\lambda_0 / \Lambda)], \\
 k_{l,zi} &= (k_0^2 n_l^2 - k_{xi}^2)^{1/2}, \quad l = I, II.
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

Отметим, что величины $k_{I,zi}$ и $k_{II,zi}$ являются либо вещественными положительными числами, либо отрицательными мнимыми. Под интенсивностями отраженных и прошедших порядков понимаются следующие нормированные значения коэффициентов Рэлея:

$$\begin{aligned}
 DE_{ri} &= R_i R_i^* \operatorname{Re} \left[\frac{k_{I,zi}}{k_0 n_l \cos(\theta)} \right], \\
 DE_{ii} &= T_i T_i^* \operatorname{Re} \left(\frac{k_{II,zi}}{n_{II}^2} \right) / [n_l k_0 \cos(\theta)].
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Тангенциальные составляющие электрического и магнитного полей в l -ом слое разлагаются в ряды Фурье вида:

$$\begin{aligned}
H_{l,gy} &= \sum_i U_{l,yi}(z) \exp(-jk_{xi}x), \\
E_{l,gx} &= j(\mu_0 / \varepsilon_0)^{1/2} \sum_i S_{l,xi}(z) \exp(-jk_{xi}x).
\end{aligned}
\tag{5.19}$$

Здесь ε_0 и μ_0 — диэлектрическая и магнитная проницаемости вакуума. Величины $U_{l,yi}(z)$ и $S_{l,xi}(z)$ являются нормированными амплитудами i -тых порядков поля и выбираются так, чтобы выполнялись уравнения Максвелла в каждом из слоев:

$$\begin{aligned}
\partial H_{l,gy} / \partial z &= j\omega\varepsilon_0\varepsilon_d(x)E_{l,gx}, \\
\partial E_{l,gx} / \partial z &= j\omega\mu_0 H_{l,gy} + \partial E_{l,gx} / \partial x,
\end{aligned}
\tag{5.20}$$

и через ω обозначена угловая частота падающей волны. Подставляя разложения (5.15) и (5.19) в уравнения Максвелла, получим

$$\left[\partial^2 U_{l,y} / \partial (z')^2 \right] = [E_l][B_l][U_{l,y}],
\tag{5.21}$$

где $B_l = K_x E_l^{-1} K_x - I$, $z' = k_0 z$, I - единичная матрица; K_x - диагональная матрица с элементами k_{xi}/k_0 ; E_l - матрица, (i,p) -ый элемент которой равен коэффициенту $\varepsilon_{l,i-p}$, определенному в (5.15). Решаем связанную систему уравнений (5.21) методом разложения по собственным векторам $(n \times n)$ матрицы $E_l B_l$, где n - число порядков, удержанных в разложении поля. Связь между тангенциальными составляющими электрического и магнитного полей задается соотношением

$$[S_{l,x}] = [E_l]^{-1} [\partial U_{l,x} / \partial z'].
\tag{5.22}$$

Порядки тангенциальных компонент электрического и магнитного полей в l -ом слое разлагаем по собственным векторам с учетом собственных значений:

$$\begin{aligned}
U_{l,y} &= \sum_{m=1}^n w_{l,im} \{c_{l,m}^+ \exp[-k_0 q_{l,m} (z - D_l + d_l)] + \\
&\quad + c_{l,m}^- \exp[k_0 q_{l,m} (z - D_l)]\}, \\
S_{l,x} &= \sum_{m=1}^n v_{l,im} \{-c_{l,m}^+ \exp[-k_0 q_{l,m} (z - D_l + d_l)] + \\
&\quad + c_{l,m}^- \exp[k_0 q_{l,m} (z - D_l)]\}, \\
&\quad + D_l - d_l < z < D_l = \sum_{p=1}^l d_p,
\end{aligned} \tag{5.23}$$

где $w_{l,im}$ - элементы матрицы W_l , составленной из собственных векторов матрицы $E_l B_l$, а $q_{l,m}$ - положительные квадратные корни из собственных значений той же матрицы $E_l B_l$. Величины $v_{l,im}$ являются элементами матрицы $V_l = E_l^{-1} W_l Q_l$, где Q_l - диагональная матрица с элементами $q_{l,m}$, а величины $c_{l,m}^{\pm}$ являются неизвестными коэффициентами, подлежащими определению. Как и в случае с однородными слоями, приравниваем тангенциальные компоненты электромагнитных полей на границах между слоями. На границе между входной областью и первым слоем ($z = 0$) справедливо

$$\begin{bmatrix} \delta_{i0} \\ j\delta_{i0} \cos \theta / n_l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I \\ -jZ_l \end{bmatrix} R = \begin{bmatrix} W_l & W_l X_l \\ V_l & -V_l X_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_l^+ \\ c_l^- \end{bmatrix}, \tag{5.24}$$

на границе между $l-1$ -м и l -м слоями ($z = D_{l-1}$) справедливо

$$\begin{bmatrix} W_{l-1} X_{l-1} & W_{l-1} \\ V_{l-1} X_{l-1} & -V_{l-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{l-1}^+ \\ c_{l-1}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_l & W_l X_l \\ V_l & -V_l X_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_l^+ \\ c_l^- \end{bmatrix}, \tag{5.25}$$

и на границе между последним слоем и выходной областью ($z = D_L$) выполняется

$$\begin{bmatrix} W_L X_L & W_L \\ V_L X_L & -V_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_L^+ \\ c_L^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I \\ jZ_{II} \end{bmatrix} T, \tag{5.26}$$

где Z_I и Z_{II} - диагональные матрицы с элементами $k_{I,zi}/(n_I^2 k_0)$ и $k_{II,zi}/(n_{II}^2 k_0)$ соответственно, а X_I - диагональная матрица с элементами $\exp(-q_{I,m} d_I)$.

Для сложнорельефного покрытия, разделенного на L слоев, уравнения (5.24)–(5.26) будут образовывать $2n(L+1)$ -мерную систему уравнений, где n - число удерживаемых порядков. Одним из подходов может быть решение полной системы $2n(L+1)$ уравнений относительно R_i и T_i каким-либо из стандартных методов (например, LU или QR разложения). Такой подход обеспечивает численную устойчивость решения при любом числе порядков, любом числе слоев, их толщин и показателях преломления. Однако для большого числа слоев (L) системы уравнений требуется больше памяти и много времени для решения. Поэтому хотелось бы иметь другие, более эффективные методы решения таких систем.

Систему уравнений (5.24)–(5.26) можно свести к $2n$ -мерной системе относительно амплитуд R_i и T_i :

$$\begin{bmatrix} \delta_{i0} \\ \frac{j\delta_{i0} \cos \theta}{n_I} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I \\ -jZ_I \end{bmatrix} R = \prod_{l=1}^L \begin{bmatrix} W_l & W_l X_l \\ V_l & -V_l X_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_l X_l & W_l \\ V_l X_l & -V_l \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} I \\ jZ_{II} \end{bmatrix} T, \quad (5.27)$$

которая обладает такими же недостатками, что и система уравнений (5.8), только в большей степени. Поэтому применим к системе (5.27) устойчивый метод, изложенный в предыдущем разделе.

5.4. Численно устойчивый метод для покрытий со сложным профилем

Предлагается два численно устойчивых алгоритма. Первый позволяет вычислить все амплитуды отраженных и преломленных волн.

Второй метод позволяет ограничиться вычислением всех амплитуд либо отраженных, либо преломленных волн. Второй метод, в силу большей простоты и эффективности, выгоднее применять в случаях, когда требуется вычислять либо только коэффициенты отражения, либо только коэффициенты преломления.

Алгоритм вычисления всех коэффициентов

Рассмотрим последнюю группу сомножителей ($l = L$) в уравнении (5.27):

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} W_L & W_L X_L \\ V_L & -V_L X_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_L X_L & W_L \\ V_L X_L & -V_L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_{L+1} \\ g_{L+1} \end{bmatrix}_T = \\ & = \begin{bmatrix} W_L & W_L X_L \\ V_L & -V_L X_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_L & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} W_L & W_L \\ V_L & -V_L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_{L+1} \\ g_{L+1} \end{bmatrix}_T, \end{aligned} \quad (5.28)$$

где $f_{L+1} = I$ и $g_{L+1} = jZ_{II}$. Матрица, которую следует обратить, переписывается в виде произведения двух матриц. Правая матрица в этом произведении хорошо обусловлена и обращается устойчиво. Однако при подозрении на наличие численно вырожденных собственных значений и собственных векторов желательно использовать SVD-метод для решения. При этом правая часть уравнения (5.28) приобретет вид:

$$\begin{bmatrix} W_L & W_L X_L \\ V_L & -V_L X_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_L & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} a_L \\ b_L \end{bmatrix}_T, \quad (5.29)$$

где

$$\begin{bmatrix} a_L \\ b_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_L & W_L \\ V_L & -V_L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_{L+1} \\ g_{L+1} \end{bmatrix}.$$

Как и в случае с однородными слоями, оставшаяся матрица плохо обусловлена, когда элементы диагональной матрицы X_L очень малы. Диагональную матрицу можно обратить аналитически и точно. Однако

обращенная матрица будет содержать большие элементы, и при умножении на содержащие численные ошибки вектора будет лишь увеличивать эти погрешности. Чтобы избежать этого введем подстановку $T = a_L^{-1} X_L T_L$, и тогда последний множитель ($l = L$) в уравнении (5.27) переписывается в виде

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} f_L \\ g_L \end{bmatrix} T_L &= \begin{bmatrix} W_L & W_L X_L \\ V_L & -V_L X_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I \\ b_L a_L^{-1} X_L \end{bmatrix} T_L = \\ &= \begin{bmatrix} W_L (I + X_L b_L a_L^{-1} X_L) \\ V_L (I - X_L b_L a_L^{-1} X_L) \end{bmatrix} T_L. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Повторяя процедуру для всех слоев, приводим систему уравнений к виду:

$$\begin{bmatrix} \delta_{i0} \\ j \delta_{i0} \cos \theta / n_l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I \\ -j Z_l \end{bmatrix} R = \begin{bmatrix} f_l \\ g_l \end{bmatrix} T_l, \quad (5.31)$$

где

$$T = a_L^{-1} X_L \dots a_l^{-1} X_l \dots a_1^{-1} X_1 T_1. \quad (5.32)$$

Величины a_l, b_l, f_l и g_l получаются аналогично выражениям (5.29) и (5.30). При любом числе слоев уравнение (5.31) разрешается относительно R_l и T_l численно устойчиво. При обращении матриц a_l следует использовать SVD-метод, чтобы избежать накопления ошибок в случае большого количества слоев или большого числа гармоник.

Метод получения частичного решения

Рассмотрим более быстрый и эффективный устойчивый метод, основанный, как и ранее, на матрицах перехода. Однако этот метод позволяет вычислять амплитуды лишь отраженных (или лишь преломленных) волн. Приведем формулировку метода для определения

амплитуд отраженных волн. Уравнение (5.26) (равенство граничных условий на $L + 1$ границе) может быть представлено в виде:

$$\begin{bmatrix} -W_L & f_{L+1} \\ V_L & g_{L+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} c_L^- \\ g_{L+1}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_L X_L \\ V_L X_L \end{bmatrix} C_L^+, \quad (5.33)$$

где $C_{L+1}^+ \equiv T$, $f_{L+1} = I$, и $g_{L+1} = jZ_{II}$. Из уравнения (5.33) соотношение между C_{L+1}^- и C_{L+1}^+ задается выражением

$$C_L^- = a_L C_L^+, \quad (5.34)$$

где

$$\begin{bmatrix} a_L \\ b_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -W_L & f_{L+1} \\ V_L & g_{L+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} W_L X_L \\ V_L X_L \end{bmatrix}.$$

Обращение матрицы в последнем выражении численно устойчиво, поскольку матрица хорошо обусловлена. Матрица b_L далее не используется. Из этого же уравнения следует, что поля внутри слоя L на границе $l=L$, задающиеся уравнением (5.26), связаны соотношением:

$$\begin{bmatrix} W_L & W_L X_L \\ V_L & -V_L X_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_L^+ \\ c_L^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_L \\ g_L \end{bmatrix} c_L^+, \quad (5.35)$$

$$\begin{bmatrix} f_L \\ g_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_L (I + X_L a_L) \\ V_L (I - X_L a_L) \end{bmatrix}.$$

Из уравнения (5.25) следует, что поля внутри $(L-1)$ -го слоя на $(l=L)$ -ой границе представимы в виде:

$$\begin{bmatrix} -W_{L-1} & f_L \\ V_{L-1} & g_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{L-1}^- \\ c_L^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_{L-1} & X_{L-1} \\ V_{L-1} & X_{L-1} \end{bmatrix} c_{L-1}^+. \quad (5.36)$$

Повторяя процесс, описанный уравнениями (5.34)–(5.36) для оставшихся слоев, получим

$$\begin{bmatrix} \delta_{i0} \\ j\delta_{i0} \cos \theta / n_I \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I \\ -jZ_I \end{bmatrix} R = \begin{bmatrix} f_1 \\ g_1 \end{bmatrix} C_1^+, \quad (5.37)$$

где величины f_1 и g_1 определяются посредством уравнения (5.35). Уравнение (5.37) может быть устойчиво разрешено относительно R_i . Этот упрощенный подход к решению задачи представляется гораздо более эффективным, чем метод решения полной проблемы (отыскания амплитуд, как пропускания, так и отражения). Число умножений матриц сокращается практически вдвое, требуется лишь одно обращение матрицы размером $(2n \times 2n)$. Мало того, при необходимости можно использовать еще более эффективный алгоритм, поскольку на самом деле нам требуется на каждом шаге не вся обратная матрица, а лишь ее часть. Однако повышение эффективности связано с тем, что алгоритм позволяет вычислять амплитуды лишь отраженной волны.

Формулировка алгоритма для вычисления амплитуд преломленных волн может быть проведена аналогично. Надо лишь учесть, что процесс формирования уравнений начинается с первого слоя.

5.5. Сводка расчетных формул

Приведем расчетные формулы для вычисления амплитуд преломленных и отраженных волн для случая многослойной структуры из однородных слоев. Рассмотрим вначале отражение и преломление ТЕ-поляризованной плоской монохроматической волны, длина волны которой в вакууме равна λ_0 , падающей под углом θ на структуру, состоящую только из двух ($L = 2$) однородных слоев с показателями преломления n_1 и n_2 и толщинами d_1 и d_2 . В этом случае формулы (5.3)-(5.5) принимают вид, описанный ниже.

На границе между входной областью и первым слоем ($z = 0$)

выполняются соотношения:

$$\begin{aligned} 1 + R &= P_1 + Q_1 \exp(-k_0 \gamma_1 d_1), \\ j k_{II,z} / k_0 (1 - R) &= \gamma_1 [P_1 - Q_1 \exp(-k_0 \gamma_1 d_1)]; \end{aligned} \quad (5.38)$$

на границе между первым и вторым слоями ($z = D_1$) выполняются соотношения:

$$\begin{aligned} P_1 \exp(-k_0 \gamma_1 d_1) + Q_1 &= P_2 + Q_2 \exp(-k_0 \gamma_2 d_2), \\ \gamma_1 [P_1 \exp(-k_0 \gamma_1 d_1) - Q_1] &= \gamma_2 [P_2 - Q_2 \exp(-k_0 \gamma_2 d_2)]; \end{aligned} \quad (5.39)$$

на границе между вторым слоем и выходной средой ($z = D_2$) выполняются соотношения:

$$\begin{aligned} P_2 \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) + Q_2 &= T, \\ \gamma_2 [P_2 \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) - Q_2] &= j(k_{II,z} / k_0) T. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Перепишем последние два уравнения в матричной форме:

$$\begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) & 1 \\ \gamma_2 \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) & -\gamma_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_2 \\ Q_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{II,z} / k_0) \end{bmatrix} T, \quad (5.41)$$

или

$$\begin{bmatrix} P_2 \\ Q_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) & 1 \\ \gamma_2 \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) & -\gamma_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_3 \\ g_3 \end{bmatrix} T. \quad (5.42)$$

Здесь $f_3 = 1$ и $g_3 = j k_{II,z} / k_0$. Для преодоления численной неустойчивости, связанной с обращением матрицы, рассмотрим разложение обращаемой матрицы в уравнении (5.42) в произведение матриц:

$$\begin{bmatrix} P_2 \\ Q_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \gamma_2 & -\gamma_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_3 \\ g_3 \end{bmatrix} T. \quad (5.43)$$

Правая часть приведенного разложения может быть обращена аналитически, без внесения погрешностей. Перепишем правую часть

уравнения (5.43) в виде:

$$\begin{bmatrix} \exp(-k_0\gamma_2 d_2) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} T, \quad (5.44)$$

где обозначено

$$\begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \gamma_2 & -\gamma_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_3 \\ g_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1/\gamma_2 \\ 1 & -1/\gamma_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_3 \\ g_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} f_3 + \frac{g_3}{\gamma_2} \\ f_3 - \frac{g_3}{\gamma_2} \end{bmatrix}.$$

Оставшаяся матрица, которую необходимо обращать, плохо обусловлена, если диагональные элементы $\exp(-k_0\gamma_2 d_2)$ очень малы. Очевидно, что в нашем случае мы можем точно обратить диагональную матрицу размерности (2x2). Однако обращенная матрица будет содержать очень большие матричные элементы. Умножение на такую матрицу может привести к тому, что погрешность решения сильно возрастет. Избежать этого можно за счет введения новых переменных по формуле $T = \exp(-k_0\gamma_2 d_2) T_2$.

В новых переменных формула (5.44) переписывается в виде:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} P_2 \\ Q_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \exp(-k_0\gamma_2 d_2) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} T = \begin{bmatrix} \exp(k_0\gamma_2 d_2) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} T = \\ &= \begin{bmatrix} a_2 \exp(k_0\gamma_2 d_2) \\ b_2 \end{bmatrix} T = \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \exp(-k_0\gamma_2 d_2) \end{bmatrix} T_2. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Повторяя процесс для следующего слоя ($z = D_1$), получим

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \exp(-k_0\gamma_1 d_1) & 1 \\ \gamma_1 \exp(-k_0\gamma_1 d_1) & -\gamma_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1 \\ Q_1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0\gamma_2 d_2) \\ \gamma_2 & -\gamma_2 \exp(-k_0\gamma_2 d_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_2 \\ Q_2 \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0\gamma_2 d_2) \\ \gamma_2 & -\gamma_2 \exp(-k_0\gamma_2 d_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \exp(-k_0\gamma_2 d_2) \end{bmatrix} T_2 = \\
&= \begin{bmatrix} a_2 + b_2 \exp(-2k_0\gamma_2 d_2) \\ \gamma_2 [a_2 - b_2 \exp(-2k_0\gamma_2 d_2)] \end{bmatrix} T_2 = \begin{bmatrix} f_2 \\ g_2 \end{bmatrix} T_2,
\end{aligned} \tag{5.46}$$

или

$$\begin{bmatrix} P_1 \\ Q_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(-k_0\gamma_1 d_1) & 1 \\ \gamma_1 \exp(-k_0\gamma_1 d_1) & -\gamma_1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_2 \\ g_2 \end{bmatrix} T_2. \tag{5.47}$$

Повторяя преобразования по образцу (5.43) - (5.45), получаем

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} P_1 \\ Q_1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \exp(-k_0\gamma_1 d_1) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \gamma_1 & -\gamma_1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_2 \\ g_2 \end{bmatrix} T_2 = \\
&= \begin{bmatrix} \exp(k_0\gamma_1 d_1) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} T_2 = \\
&= \begin{bmatrix} a_1 \exp(k_0\gamma_1 d_1) \\ b_1 \end{bmatrix} T_2 = \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \exp(-k_0\gamma_1 d_1) \end{bmatrix} T_1.
\end{aligned} \tag{5.48}$$

Выпишем заново формулы для первой пары уравнений при ($z = 0$):

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{I,z}/k_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -j(k_{I,z}/k_0) \end{bmatrix} R &= \begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0\gamma_1 d_1) \\ \gamma_1 & -\gamma_1 \exp(-k_0\gamma_1 d_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1 \\ Q_1 \end{bmatrix} = \\
\begin{bmatrix} 1 & \exp(-k_0\gamma_1 d_1) \\ \gamma_1 & -\gamma_1 \exp(-k_0\gamma_1 d_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \exp(-k_0\gamma_1 d_1) \end{bmatrix} T_1 &= \\
= \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \exp(-2k_0\gamma_1 d_1) \\ \gamma_1 [a_1 - b_1 \exp(-2k_0\gamma_1 d_1)] \end{bmatrix} T_1 = \begin{bmatrix} f_1 \\ g_1 \end{bmatrix} T_1.
\end{aligned}$$

В матричной форме:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ j(k_{I,z}/k_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -j(k_{I,z}/k_0) \end{bmatrix} R = \begin{bmatrix} f_1 \\ g_1 \end{bmatrix} T_1. \tag{5.49}$$

Решение (5.49) легко представить в виде:

$$\begin{aligned}
 R - f_1 T_1 &= -1 \\
 R + \frac{k_0}{jk_{Lz}} g_1 T_1 &= 1, \quad T_1 = \frac{2jk_{Lz}}{k_0 g_1 + jk_{Lz} f_1}, \quad R = f_1 T_1 - 1.
 \end{aligned}
 \tag{5.50}$$

При этом связь между T и T_1 задается соотношением

$$T = \exp(-k_0 \gamma_2 d_2) \exp(-k_0 \gamma_1 d_1) T_1,
 \tag{5.51}$$

и a_l, b_l, f_l и g_l получаются с помощью процесса, описанного в (5.44) и (5.46). Уравнения (5.50) легко и численно устойчиво разрешаются относительно R и T (через T_1). Этот улучшенный подход решения с использованием матриц перехода является весьма эффективным и численно устойчивым методом. Приведенная выше формулировка была получена с такой легкостью лишь благодаря тому, что мы работали со скалярными двумерными матрицами.

Литература

1. <http://www.nanonewsnet.ru/index.php?module=Pagesetter&func=viewpub&tid=6&pid=122> - Хрестоматия, Интервью с академиком РАН Михаилом Алфимовым.
2. <http://www.photonics.com//content/handbook/2006/opticaldesign/82749.aspx>
3. *Mateus C. F. R.* PhD. Thesis. Tunable Optoelectronic Devices, University of California at Berkeley, 2004, 217 p.
4. *Котляр В.В.* Численное решение уравнений Максвелла в задачах дифракционной оптики // Компьютерная оптика. —2006, №29, С. 24-40.
5. *Севастьянов Л.А., Ловецкий К.П., Бикеев О.Н., Горобец А.П.* Методы и алгоритмы решения задач в моделях оптических покрытий. - РУДН (в печати).
6. *Furman Sh. A., Tikhonravov A.V.* Basics of optics of multilayer systems.— Edition Frontieres, Gif-sur-Yvette, 1992.
7. *Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А.* Матрицы и вычисления. — М.: Наука, 1984.
8. Методы компьютерной оптики. / Под ред. В.А. Сойфера. – М.: Физматлит, 2003.
9. *Moharam M. G., Grann E. B., Pommet D. A., Gaylord T. K.* Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings // J. Opt. Soc. Am. A 12, (1995).
10. *Li L.* Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures// JOSA — 1996. — Vol. 13. — No. 9, — p 1870-1876.

ОПИСАНИЕ КУРСА И ПРОГРАММА

Цели и задачи магистерской программы «Оптика наноструктур»

Целью учебно-методического комплекса магистерской программы «Оптика наноструктур» является формирование у студентов четкого представления об основных принципах функционирования современных дифракционных оптических элементов и устройств, тонкопленочных многослойных покрытий; о законах взаимодействия электромагнитного излучения видимого диапазона с материалом. Целью является также изучение способов и возможностей математического синтеза и компьютерного проектирования дифракционных оптических покрытий. Полученные знания закрепляются в оптической лаборатории и дисплейном классе на примерах изучения конкретных дифракционных оптических элементов и многослойных покрытий со сложной геометрией.

Задачей учебно-методического комплекса магистерской программы «Оптика наноструктур» является обучение студентов навыкам самостоятельного анализа технических заданий на проектирование дифракционных оптических элементов и устройств. Они должны научиться выбирать из имеющихся в наличии алгоритмов и программ математического синтеза или разрабатывать их самостоятельно. В результате обучения обретут навыки ориентации в научной и бизнес информации с целью выбора нужной функции или нужного инструмента для реализации известной функции в области проектирования и создания дифракционных оптических наноструктур.

Цели и задача курса «Методы связанных волн расчета оптических покрытий»

Курс «Методы связанных волн расчета оптических покрытий» является составной частью магистерской программы «Оптика наноструктур». Магистерская программа «Оптика наноструктур» реализуется в рамках направления «Прикладная математика и информатика» и направления «Прикладная математика и физика», а возможно и других направлений. В составе магистерской программы «Оптика наноструктур» курс «Методы связанных волн расчета оптических покрытий» является обязательным, привязанным к семестру. Для других магистерских программ этот курс может быть курсом по выбору без привязки к семестру или факультативным на усмотрение методической комиссии программы. Курс носит теоретический и практический характер.

Целью курса является подробное ознакомление студентов с устойчивыми современными методами численного решения математических задач, возникающих при изучении взаимодействия электромагнитного излучения в области светового диапазона с веществом, в особенности с наноструктурами. Эта область знаний особенно быстро развивается в последние годы в связи с широким применением нанозадач и тонких (менее одного микрометра толщиной) пленок, используемых в производстве жидко-кристаллических дисплеев, солнечных батарей на основе диэлектриков, фотоэмиссионных диодов, просветляющих покрытий, поляризаторов, миниатюрных лазеров, управляемых оптических элементов. Задачи оптики наноструктур практически не поддаются аналитическому решению, поэтому важным является не только освоение теоретического материала, но и изучение эффективных численных методов, используемых при решении данного

класса задач, приобретение навыков создания программного обеспечения для численного моделирования различных оптических наноструктур.

Задачей курса «Методы связанных волн расчета оптических покрытий» является формирование у студентов навыков работы на современной измерительной аппаратуре. Задачей курса является также обучение студентов использованию строгих методов связанных волн при решении задач моделирования современных оптических устройств на основе тонкопленочных покрытий и дифракционных оптических элементов. Это позволит им при необходимости разрабатывать новое программное обеспечение. Безусловной задачей курса является также освоение существующего программного обеспечения, ориентированного на расчет и проектирование оптических покрытий. В результате обучения они получают умение и навыки правильно оценить сложность научно-исследовательских и конструкторских заданий на разработку дифракционных оптических элементов и устройств, аргументированно выбрать метод решения конструкторской задачи, а затем экономично и эффективно выполнять компьютерный дизайн требуемого дифракционного оптического покрытия или устройства.

Трудоемкость курса составляет 3 кредита; 2 часа лекций и 2 часа лабораторных занятий в дисплейном классе в неделю.

Инновационность курса.

Курс является инновационным по содержанию и по литературе, он включает в себя последние научные достижения в области решения задач дифракционной оптики, когда характерные размеры исследуемых объектов не превышают либо сравнимы с длиной волны оптического излучения. Эта область знаний интенсивно развивалась в последнее время, но лишь недавно были созданы устойчивые алгоритмы и разработаны

численные методы решения задач для многослойных решеток. Следует отметить, что для оптических однослойных и многослойных решеток с характерными размерами больше длины волны оптического излучения устойчивые методы решения известны с середины прошлого века. Сейчас алгоритмы решения оптических задач в субволновой области распространяются на объекты со сложной геометрией, такие как двумерные решетки с произвольным профилем, трехмерные решетки (фотонные кристаллы) и на анизотропные материалы. Они востребованы, поскольку позволяют создавать математические модели взаимодействия излучения с веществом в наномасштабах, а затем с их помощью проектировать новые эффективные устройства в высокотехнологичных областях медицины, энергетики, инфокоммуникаций и приборостроения.

В ходе проведения занятий по этому курсу разработчики предполагают использование традиционных методик преподавания, принятой в странах болонской системы образования, то есть с использованием кредитной системы оценки знаний.

Наряду с традиционными элементами преподавания математических методов решения прикладных задач, разработчики курса предполагают воспользоваться хорошо зарекомендовавшим себя опытом МФТИ и подобных вузов. Для этого в рамках подпрограммы «Оптика наноструктур» осуществляется закупка уникального измерительного и аналитического оборудования для выполнения измерений разнообразных характеристик оптических наноустройств с целью использования этого оборудования в учебном процессе и для проведения научно-исследовательских работ преподавателями, аспирантами и студентами.

По окончании магистратуры по направлению «Оптика наноструктур» выпускники Российского университета дружбы народов станут конкурентно-способными специалистами в области проектирования

современных оптических устройств, которые не будут испытывать затруднений при последующем трудоустройстве.

Данное направление научно-практических разработок сформировалось лишь в последние 10 – 15 лет. Поэтому наблюдается сильный дефицит учебно-методической литературы не только в России, но и во всем мире. Разрабатываемые в рамках инновационной программы «Оптика наноструктур» учебные пособия восполнят в некоторой степени этот пробел и составят основной список литературы для слушателей курсов. Вместе с ними следует использовать несколько учебников и монографий, вышедших в свет к настоящему времени и перечисленные в списке литературы. Курс базируется на публикациях научных статей мировых лидеров исследований в данной области в научной периодике, диссертационных работах их учеников, включающих работы по непосредственному моделированию, дизайну и последующему изготовлению лабораторных образцов оптических элементов и устройств. В список дополнительной и рекомендуемой литературы включены все научно-исследовательские публикации, положенные в основу предлагаемого курса.

В качестве практических заданий, курсовых работ и тем рефератов слушателям магистерской программы будут предложены актуальные проблемы и задачи, решение которых востребовано современным уровнем развития высокотехнологичных отраслей промышленности и научно-исследовательских лабораторий.

Структура курса (с указанием количества часов аудиторных/самостоятельной работы на темы)

Темы лекций

Тема 1. Введение (обзор) в численные методы решения задач компьютерной оптики. Точные и приближенные методы. Класс прикладных задач. Практические приложения. Области применения – колориметрия, просветляющие покрытия, дифракционные оптические элементы, лазеры на дифракционных элементах, поляризаторы... Преимущества и недостатки различных методов – FMM, RCWA, FDTD, методы конечных элементов...

Тема 2. Уравнения Максвелла. Материальные уравнения. Системы единиц измерения. Постановка задачи над полем комплексных чисел. Разложение Рэлея вне области взаимодействия. Теорема Флоке-Блоха о представлении решения внутри области. Условия сшивания решений на границах области – непрерывность тангенциальных компонент. Одномерные дифракционные решетки – периодичность функции диэлектрической проницаемости – бинарные решетки. Периодичность в сферической и цилиндрической системах координат – сферические и цилиндрические бинарные решетки.

Тема 3. Одномерные бинарные решетки – уравнения для вычисления параметров TE и TM поляризованных волн. Метод Галеркина, переход к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений. (FMM)

Тема 4. Конечномерная аппроксимация (обращение оператора $\hat{\epsilon}$, а не деление на функцию ϵ в случае TM поляризации). Случаи изотропного и анизотропного тензора диэлектрической проницаемости. Теплицевы матрицы, их свойства, методы, быстрые и устойчивые алгоритмы и программы вычисления матриц, обратных по отношению к теплицевым.

Тема 5. Обзор различных методов решения (методы Т-, S- и Н-матриц) возникающих конечномерных систем линейных алгебраических уравнений над полем комплексных чисел. Методы блочной прогонки для слабосвязанных систем линейных алгебраических уравнений, LU-разложение.

Тема 6. Коническая дифракция. Особенности получения устойчивого алгоритма по методу Мохарама. Усовершенствование (ускорение сходимости) метода Мохарама – обращение оператора $\hat{\epsilon}$.

Тема 7. Вывод формул решения уравнений Максвелла для случая многослойных систем, состоящих из изотропных слоев. Случаи ТЕ- и ТМ-поляризации, коническая дифракция. Описание метода для случая однородных многослойных тонкопленочных структур.

Тема 8. Обзор методов решения задач дифракции на многослойных структурах, состоящих из одномерных и двумерных бинарных дифракционных решеток. Случай фотонных кристаллов – трехмерные дифракционные элементы.

Темы семинарских и практических занятий

Вычисление коэффициентов Фурье произвольной функции, заданной на отрезке.

Вычисление коэффициентов Фурье периодической функции, заданной на периоде.

Произведение периодических функций при преобразовании Фурье переходит в свертку коэффициентов – произведение теплицевой матрицы на вектор.

Свойства теплицевых матриц. Методы вычисления матриц обратных по отношению к теплицевой матрице.

Создание программной оболочки для программы расчета пропускания и отражения однослойных и многослойных однородных изотропных структур на подложке.

Создание процедур численного расчета пропускания и отражения однослойных и многослойных однородных изотропных структур на подложке.

Процедуры оптимизации параметров однородных изотропных структур для проектирования (синтеза) просветляющих покрытий, зеркал, солнечных батарей.

Темы коллоквиумов и контрольных работ

Модальный метод Фурье.

Метод Галеркина.

Непрерывность тангенциальных компонент электромагнитного поля на границе раздела.

Выбор базиса для устойчивого и эффективного метода численного решения системы ОДУ.

Теплицевы матрицы.

Приведение системы ОДУ для ТМ-мод к нормальному виду.
Методика Л. Ли.

Методы решения систем линейных алгебраических уравнений с матрицами специального вида (блочно-ленточного вида) (Т-, S- и Н-матрицы).

Описание системы контроля знаний:

Общие правила выполнения контрольных заданий;

Требования к оформлению работы

Постановка задачи.

1. Краткая формулировка задачи.
2. Развернутая постановка задачи с указанием основных режимов работы и их сценариев.

Алгоритм решения.

1. Математическое описание алгоритма.
2. Структура алгоритма ядра программы (укрупненная блок-схема).

Тестирование.

1. Описание основных режимов тестирования алгоритма и программы и результатов работы программы.
2. Список возможных ошибок и аномалий, описание реакции программы на них.

Заключение.

Содержит общие комментарии и замечания исполнителя о выполненной работе.

Приложение.

Приложение должно содержать текст программы (полная распечатка или распечатка алгоритма ядра программы).

Работа должна быть представлена в виде распечатанного текста и на дискете (Word + Delphi и/или C++).

Рекомендации к составлению отчета

Оформление.

отчет по работе должен быть оформлен в форме Word-файла.

Содержание отчета.

Каждый пункт задания вычислительного эксперимента должен найти свое отражение в отчете.

Каждый раздел отчета должен содержать:

формулировку цели эксперимента

описание исходных данных - приближаемая функция, интервал и порядок приближения, метод приближения и т.п.

результаты эксперимента, представленные в форме таблиц, гистограмм и графиков

иллюстрационный материал в виде копий экрана с графиками зависимостей погрешности приближения, вида приближаемой функции и т.п.

выводы, следующие из результатов эксперимента в контексте его цели.

Примерные типы письменных работ и форм устного контроля

Образец оформления курсовой работы на тему «Теплицевы матрицы. Обращение теплицевых матриц» приведен в приложении 1.

Шкала оценок, итоговые оценки (методика выставления)

Бально-рейтинговая методика оценки уровня знаний по обязательной дисциплине «Методы связанных волн расчета оптических покрытий», привязанной к семестру.

Порядок начисления баллов за семестр.

Контрольная работа № 1: 0 – 40 баллов

Теоретические вопросы: 0 – 10 баллов

Практические задания: 0 – 30 баллов

Контрольная работа № 2: 0 – 40 баллов

Теоретические вопросы: 0 – 10 баллов

Практические задания: 0 – 30 баллов

Контрольная работа № 3: 0 – 20 баллов

Теоретические вопросы: 0 – 20 баллов

Шкала бально-рейтинговой системы.

Баллы за семестр	Автоматическая оценка		Баллы за итоговый контроль знаний	Общая сумма баллов	Итоговая оценка
	Итоговая оценка	Дополнительные баллы			
78 – 80	зачет	по 5 баллов за каждый свыше 76**	0 – 20*	86 – 100	зачет
41 – 77	Нет	Нет	0 – 20	51 – 97	зачет
			0 – 20	41 – 50	незачет
< 41	незачет	Нет	Нет	Нет	незачет

* студент имеет право не проходить итоговый контроль знаний.

** дополнительные баллы начисляются автоматически:

за 86 баллов, набранных в семестре, начисляется дополнительно 6 баллов (общая сумма баллов – 92);

за 87 баллов – 12 баллов (99);

за 88 баллов – 18 баллов (106);

за 89 баллов – 24 балла (113);

за 90 баллов – 30 баллов (120).

Академическая этика, соблюдение авторских прав.

Все имеющиеся в тексте сноски тщательно выверены и снабжены «адресами». Авторы не включали в свою работу выдержки из работ других авторов без указания на это, не пересказывали чужих работ близко к тексту без отсылки к ним. Авторы также не использовали чужих идей без указания первоисточников. Это касается и источников, найденных в интернете. В необходимых случаях указан полный адрес сайта.

Программа курса УМК:

Аннотированное содержание курса.

Первый модуль трудоемкостью в 1 кредит составляют:

- теоретический материал, излагаемый в первых трех темах,
- практическими занятиями в дисплейном классе в течение 14 академических часов,
- самостоятельные занятия по первым двум практическим заданиям.

В конце этого модуля проводится промежуточный контроль знаний.

Второй модуль трудоемкостью в 1 кредит составляют:

- теоретический материал, излагаемый в четвертой и пятой темах,
- практическими занятиями в дисплейном классе в течение 10 академических часов,
- самостоятельные занятия по третьему и четвертому практическим заданиям.

В конце этого модуля проводится промежуточный контроль знаний.

Третий модуль трудоемкостью в 1 кредит составляют:

- теоретический материал, излагаемый в шестой и седьмой темах,
- практическими занятиями в дисплейном классе в течение 8 академических часов,
- самостоятельные занятия по пятому, шестому и седьмому практическим заданиям.

В конце этого модуля проводится итоговый контроль знаний.

Список обязательной и дополнительной литературы с указанием соответствия разделов источника (постранично) разделам читаемого курса

Список обязательной литературы.

1. Методы связанных волн расчета оптических покрытий/Под ред.К.П. Ловецкого: Учебное пособие. - М.: Изд-во РУДН (готовится к печати).
2. Методы компьютерной оптики/Под ред. В.А. Соифера: Учеб. для вузов. — 2-е изд., испр. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. - 688 с.
3. M. Neviere, E. Popov. Light Propagation in Periodic Media: Differential Theory and Design Marcel Dekker Inc, 2002, 432 p.
4. Родионов С.А. Основы оптики. Конспект лекций.— СПб: СПб ГИТМО (ТУ), 2000. - 167 с.
5. Терлецкий Я.П., Рыбаков Ю.П. Электродинамика. М.: Высш. шк., 1990.
6. Ильинский А.С., Кравцов В.В., Свешников А.Г. Математические модели электродинамики. М.: Высшая школа. 1991. 224с.
7. Канторович Л. В., Крылов В. И. Приближённые методы высшего анализа. — 5-е изд. — Л.-М., 1962.
8. Михлин С. Г. Вариационные методы в математической физике. — 2-е изд. — М.-Л. — 1970.
9. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. — М.:Наука,1984. —3 20с.
- 10.Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. М. Мир.1981.

Список дополнительной литературы и источников в интернете.

- 11.R.M. Gray Toeplitz and Circulant Matrices: A Review // Foundations and Trends in Communications and Information Theory, Vol. 2, No 3 (2006) p.155–239.

12. С.Н. Воеводина. Решение системы уравнений с клеточно-теплицевыми матрицами. В сб. "Вычислительные методы и программирование", вып. 24, Изд-во МГУ, 1975.
13. Moharam, M. G., E. B. Grann, D. A. Pommet, and T. K. Gaylord, "Formulation for stable and efficient implementation of rigorous coupled-wave analysis of binary gratings," J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 12, No. 5, 1068-1076, 1995.
14. Moharam, M. G., D. A. Pommet, E. B. Grann, and T. K. Gaylord, "Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach," J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 12, No. 5, 1077-1086, 1995.
15. L. Li, "Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures," J. Opt. Soc. Am. A 13, 1870-1876 (1996).
16. Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. М. Мир. 1983.
17. P. Lalanne, "Improved formulation of the coupled-wave method for two-dimensional gratings," J. Opt. Soc. Am. A 14, 1592-1598 (1997).
18. P. Lalanne and G. M. Morris, "Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization," J. Opt. Soc. Am. A 13, 779- (1996).
19. C. Sauvan, G. Lecamp, P. Lalanne, and J. Hugonin, "Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in Photonic Crystal microcavities," Opt. Express 13, 245-255 (2005).

Темы рефератов, курсовых работ, эссе

Темы рефератов.

Примеры использования просветляющих покрытий, история совершенствования технических реализаций. Изменение математических моделей и методов расчета.

Дифракционные оптические элементы (ДОЭ) (плоские линзы, фокусаторы и т.п.), области применения, преимущества по сравнению с традиционными оптическими устройствами. Методы расчета и проектирования ДОЭ.

Оптический резонатор из дифракционных нанозеркал для промышленных и бытовых лазеров.

Оптический поляризатор на дифракционных элементах для промышленных и бытовых целей.

Темы курсовых работ

1. Методика Л. Ли регуляризации метода вычисления разрывного сомножителя по известному разрывному сомножителю и известному непрерывному произведению.

Произведение периодических функций при преобразовании Фурье переходит в свертку коэффициентов: произведение теплицевой матрицы на вектор. Обращение теплицевых матриц.

2. Вычисление коэффициентов Фурье бинарной решетки и построение соответствующей теплицевой матрицы.

3. Экономичные методы вычисления матриц, обратных к теплицевым.

4. Расчет пропускания и отражения ТЕ-моды для однослойной бинарной решетки.

5. Расчет пропускания и отражения ТМ-моды для однослойной бинарной решетки.

6. Простой метод диагонализации матрицы. По работе: John P Killingbeck, Alain Grosjean and Georges Jolicard. A simple method for complex eigenvalues. // J. Phys. A: Math. Gen. 37 (2004) L567–L572

7. Метод вычисления функции от матрицы по работе V.N. Robuk / Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 534 (2004) p. 319–323.

8. Метод вычисления собственных векторов матрицы в случае кратных собственных значений. Синтез результатов Берремана и Палто.

9. Метод вычисления собственных значений по Шуберту, явные формулы для собственных значений.

Темы курсовых работ с последующим продолжением в качестве магистерской диссертации.

10. Сравнение методов восьмой и девятой курсовых работ

11. Расчет пропускания и отражения ТЕ- и ТМ-мод для однослойной двумерной бинарной решетки.

12. Расчет пропускания и отражения ТЕ- и ТМ-мод для однослойной двумерной бинарной решетки при коническом падении плоско-параллельной монохроматической волны.

Учебный тематический план курса УМК (календарный план,
структурированный по видам учебных занятий)

Календарный план (20 недель) учебных занятий по обязательной дисциплине «Методы связанных волн расчета оптических покрытий», привязанный к первому семестру магистратуры.

Виды и содержание учебных занятий				
Неделя	Лекции	Число часов	Лабораторные занятия	Число часов
1	Введение в численные методы решения задач компьютерной оптики. Обзор.	2	Подготовка графической оболочки программы для прикладных расчетов	2
2	Уравнения Максвелла, разложение Рэлея вне области взаимодействия, псевдопериодичность переменных внутри области взаимодействия.	2	Численное интегрирование	2
3	Одномерные дифракционные решетки. Бинарные решетки.	2	Численное решение задачи Коши для систем дифференциальных уравнений.	2

4	Условия непрерывности решения на границах раздела сред.	2	Численное решение граничных задач для дифференциального уравнений второго порядка.	2
5	Метод Фурье для бинарных решеток в случае ТЕ мод.	2	Численное решение систем линейных алгебраических уравнений с ленточными матрицами	2
6	Метод Фурье для бинарных решеток в случае ТМ мод.	2	Комплексная арифметика компилятора Delphi	2
7	Метод Галеркина приведения систем дифференциальных уравнений к системам алгебраических уравнений.	2	Методы решения СЛАУ над полем комплексных чисел	2
8	Промежуточный контроль (Контрольная работа №1)			2
9	Проблема конечномерной аппроксимации произведения разрывных функций рядом Фурье. Методика Л. Ли.	2	Определение собственных значений и собственных векторов комплекснозначных матриц	2

10	Теплицевы матрицы, обращение теплицевых матриц, решение СЛАУ с теплицевыми матрицами.	2	Вычисление коэффициентов Фурье периодической комплекснозначной функции	2
11	Обзор методов решения сформированных систем линейных алгебраических уравнений с помощью разложения по различным базисам.	2	Формирование систем линейных алгебраических уравнений для ТЕ-мод.	2
12	Метод решения СЛАУ для ТЕ мод, рассеянных на бинарной решетке.	2	Формирование систем линейных алгебраических уравнений для ТМ-мод.	2
13	Метод решения СЛАУ для ТМ мод, рассеянных на бинарной решетке.	2	Визуализация результатов измерений и расчетных характеристик.	2
14	Промежуточный контроль (Контрольная работа №2)			2
15	Модальный метод Фурье для конической дифракции на бинарной решетке.	2	Алгебраические процедуры с комплекснозначными теплицевыми матрицами	2

16	Метод Мохарама решения СЛАУ для конического рассеяния на бинарной решетке.	2	Процедуры формирования четырехиндексных матриц. Ввод, вывод, методы хранения.	2
17	Модальный метод Фурье для многослойных систем.	2	Процедуры умножения четырехиндексной матрицы на двухиндексный вектор.	2
18	Устойчивые модификации метода Мохарама для многослойных систем.	2	Обращение четырехиндексных теплицевых матриц.	2
19	Заключительный обзор курса. Консультации по подготовке к итоговому контролю знаний.	2	Заключительный обзор курса. Консультации.	2
20	Итоговый контроль знаний			2