

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи



Домбровская Жанна Олеговна

**Особенности распространения электромагнитных волн через
диэлектрические метаплёнки и слоистые среды**

01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики
05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Москва – 2019

Работа выполнена на кафедре математики физического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова

Научный руководитель – *Боголюбов Александр Николаевич,
д.ф.-м.н., профессор*

Официальные оппоненты – *Козарь Анатолий Викторович,
д.ф.-м.н., профессор,
МГУ имени М.В. Ломоносова, физический
факультет, кафедра фотоники и физики
микроволн, профессор*

*Еремин Юрий Александрович,
д.ф.-м.н., профессор,
МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет
ВМиК, кафедра математической физики,
ведущий научный сотрудник*

*Кравченко Виктор Филиппович,
д.ф.-м.н., профессор,
Институт радиотехники и электроники
имени В.А. Котельникова РАН, главный
научный сотрудник*

Защита диссертации состоится «12» сентября 2019 г. в 15-30 на заседании диссертационного совета МГУ.01.12 Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.2, Физический факультет МГУ, ауд. СФА.

E-mail: igorkartashov@mail.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В.Ломоносова (Ломоносовский просп., д.27) и на сайте ИАС «ИСТИНА»:

http://istina.msu.ru/dissertation_councils/councils/34133295/

Автореферат разослан «26» июня 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.ф.-м.н.



И.Н.Карташов

Общая характеристика работы

Цель и задачи. Целью диссертационной работы является разработка эффективных и высоконадежных алгоритмов моделирования устройств интегральной фотоники. Это требуется для исследования новых эффектов в таких устройствах, а также оптимизации структур, которые могут использоваться в том числе для разработки приборов, основанных на новых физических принципах.

В ходе работы были поставлены и решены следующие задачи.

1. Разработать процедуру, позволяющую проводить расчеты неоднородных и слоистых сред методом конечных разностей во временной области (FDTD) с высокой гарантированной точностью $\sim 0.1-0.01\%$ (чтобы обеспечить такую точность уже на умеренных сетках, требуются численные алгоритмы с порядком точности не меньше второго). Построить апостериорную оценку фактической точности для этого метода с помощью процедуры сгущения сеток и метода Ричардсона. Исследовать схему Йе на монотонность. Провести тестовые расчеты задачи о прохождении волны через плоскую диэлектрическую границу раздела.
2. Разработать критерий применимости дипольного приближения для моделирования прозрачного диэлектрического шара с высоким постоянным показателем преломления. Провести критический анализ и исследовать, насколько точны существующие физические модели метапленки из сферических частиц в однородной непоглощающей среде.
3. Сформулировать постановку задачи о безотражательном покрытии на основе метапленки с учетом ограничений на допустимое множество ее геометрических параметров. Разработать подход, повышающий надежность алгоритма минимизации отражения от структуры.
4. Спроектировать безотражательное покрытие на основе метапленки из сферических частиц, расположенных на полубесконечной диэлектрической подложке, в дальневолновом среднем ИК-диапазоне. В качестве материалов метаатомов и подложки использовать теллурид свинца и германий, соответственно. Сравнить полученный спектр отражения со спектром однослойного тонкопленочного покрытия из «Иртрана»-2 на такой же подложке.
5. Разработать модель, позволяющую заменить метапленку однородным тонким слоем для диапазона длин волн, расположенного далеко от резонанса.

Актуальность темы исследования. Современный эксперимент становится все более технологичным и изучает все более сложные эффекты. Для этого требуются все более чувствительные детектирующие приборы. Например, для спектроскопических экспериментов требуются линзы со сверхвысоким разрешением, сверхточные спектрографы (особенно с временной разверткой), новые фазовые и амплитудные модуляторы.

Востребована разработка новых просветляющих покрытий, поглотителей, зеркал. Перспективной является разработка приборов, основанных на новых физических принципах, в частности, с использованием метаматериалов.

Наиболее просты в изготовлении и перспективны двумерные метаматериалы (метаповерхности). Для указанных приложений требуется разработка метаповерхностей с заданными свойствами (просветление, максимальное поглощение, полное отражение и т.д.), то есть решение обратной задачи. Последняя требует многократного решения прямой задачи, то есть расчета отклика метаматериала с заданными свойствами.

Перечисленные задачи достаточно трудны, их не удастся решить стандартными методами. Требуется разработка специализированных алгоритмов (как численных, так и аналитических). Поэтому построение и исследование таких алгоритмов является актуальным.

Степень разработанности темы исследования. Схема Йе метода конечных разностей во временной области (FDTD) является чрезвычайно популярным методом численного расчета задач электродинамики. Однако при расчете распространения электромагнитных волн в слоистых средах (то есть с разрывными материальными параметрами) этот метод сталкивается со значительными трудностями. В литературе многократно отмечалось катастрофическое падение точности¹. Однако этот факт не был объяснен.

Вопрос о фактической погрешности расчета в большинстве публикаций не освещается. Для простейших задач известны оценки точности, полученные в результате сравнения численного решения на заданной сетке с точным решением². Однако для более сложных задач такие оценки могут быть лишь грубо ориентировочными. В отечественной литературе описан метод сгущения сеток и оценки точности по Ричардсону³, однако он малоизвестен и в задачах электродинамики ранее не применялся.

Отдельную трудность представляют задачи в слоистых средах с большим контрастом показателей преломления в соседних слоях. В таких задачах присутствуют сильно различающиеся характерные пространственные масштабы (период решения в оптически плотной и в свободном пространстве). Для таких задач используют кусочно-равномерные сетки⁴. Однако последние не оптимальны. Поскольку шаблон схемы Йе занимает более одного шага по пространству, то на сильно неравномерных сетках с резко различающимися соседними шагами точность аппроксимации ухудшается. Гораздо более перспективны квазиравномерные сетки. Пример такой сетки предложил Лисейкин⁵.

Использование аналитических формул, полученных в физических моделях, существенно повышает экономичность расчетов. Однако

¹ См., например, Cangellaris A.C., Wright D.B. // IEEE Trans. Antennas Propag. **39**:10 (1991), 1518.

² Taflov A., Brodwin M.E. // IEEE Trans. Microw. Theory Techniques. **23** (1975), 623.

³ Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Рогов Б.В. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005.

⁴ Shishkin G.I. // Comp. Math. Math. Phys. **3**:4 (1992), 467; Sun G., Stynes M. // Numer. Algorithms **8**:1 (1994), 111.

⁵ Liseikin V.D. Layer resolving grids and transformations for singular perturbation problems, VSP BV, 2001.

физические модели имеют ограниченную область применимости. Это приводит к тому, что параметры структуры могут изменяться лишь в некоторых ограниченных диапазонах. За их пределами модели быстро теряют количественную точность или вовсе становятся неприменимыми.

Обычно границы применимости моделей определяют косвенно, исходя из их внутренней непротиворечивости (например, неотрицательность коэффициентов прохождения, отражения, поглощения). Однако это не дает представления о фактической точности модели. Для оценки этой точности как правило оценивают в результате сравнения с численными расчетами.

Из всего многообразия моделей гомогенизации метаповерхностей практический интерес представляют лишь те подходы, в которых материальные параметры могут быть непосредственно рассчитаны по коэффициентам прохождения и отражения. Даже для нерезонансного случая возможность гомогенизации была показана лишь при фиксированной длине падающей волны⁶. Возможность замены метапленки эквивалентной тонкой пленкой в диапазоне длин волн не была исследована. Кроме того, до сих пор открытым оставался вопрос о толщине эквивалентной тонкой пленки.

Проектирование функциональных покрытий на основе метаповерхностей сводится к определению таких параметров структуры, которые обеспечивают заданные спектральные свойства метаповерхности. Поскольку отклик метапленки имеет резонансный характер, то в нем имеются множественные минимумы и максимумы. Поэтому задача проектирования является многоэкстремальной. Исходя из физического смысла, необходимо определить диапазон параметров метапленки, в котором заведомо расположены физически адекватные минимумы целевой функции. Ограничивая допустимое множество параметров, можно откинуть нефизичные ответы. Это сводится к постановке задачи на условный экстремум с ограничениями типа неравенства. Такая задача чаще всего решается методом штрафных функций. Основной трудностью является отыскание требуемого диапазона параметров.

При решении задач на условный экстремум традиционно используются кусочно-заданные штрафные функции: они равны нулю в допустимой области и быстро нарастают вне ее. Такие функции непрерывны и имеют непрерывную первую производную. Однако их вторая производная испытывает скачок на границе допустимой области. Это приводит к затруднениям, если градиент функции вычисляется разностно. Необходимость в этом возникает при использовании методов минимизации порядка выше нулевого (подчеркнем, что случаи, когда градиент удастся вычислить аналитически, являются скорее исключениями).

Научная новизна. Для метода конечных разностей во временной области впервые предложен подход, позволяющий кардинально уменьшить погрешность расчета (до $10^6 - 10^9$ раз в зависимости от задачи) и

⁶ Saenz E., Ikonen P., Gonzalo R., Tretyakov S.A. // J. Appl. Phys. **101** (2007), 114910.

многократно повысить порядок точности (до 4 – 6). К задачам электродинамики этот подход ранее не применялся. Было проведено исследование свойств схемы Йе и показано, что она является немонотонной. Это особенно проявляется при расчете слоистых сред. Впервые показано, что и в этом случае рекуррентное уточнение решения позволяет значительно уменьшить немонотонность, многократно повысить порядок точности и значительно уменьшить количественную погрешность (количественные параметры этого улучшения приведены выше).

Впервые получены границы применимости дипольного приближения для оптически прозрачного диэлектрического шара. Положения электрического и магнитного дипольных резонансов описываются соотношениями между длиной падающей волны, радиусом шара и его показателем преломления.

Предложена оригинальная модель описания метапленки при помощи эквивалентного однородного слоя. Рассмотрены границы ее применимости. Показано, что толщина этого слоя является частотно зависимой. Проведен ряд вспомогательных исследований применимости и точности известных моделей метапленки.

Поставлена и решена задача проектирования безотражательного покрытия на основе метапленки из сферических частиц на подложке. Впервые корректно учтены ограничения на геометрические параметры, связанные с процессом изготовления структуры, применимостью физической модели и др. Учет указанных ограничений приводит к задаче на условный экстремум, которая методом штрафных функций сводится к задаче на безусловный экстремум. Предложена новая штрафная функция, учитывающая специфику задачи оптимизации диэлектрических метаповерхностей. Эта функция является бесконечно гладкой, и поэтому допускает использование алгоритмов оптимизации высокого порядка с разностным вычислением градиента.

Проведена оптимизация безотражательного покрытия на основе метаповерхности из сферических частиц PbTe на германиевой подложке. Получены оптимальные геометрические параметры фильтрующего элемента с резонансной передаточной функцией.

Положения, выносимые на защиту

1. Применение рекуррентных уточнений по методу Ричардсона и адаптивных квазиравномерных сеток позволяет значительно уменьшать немонотонность схемы Йе и повышать точность расчета по этой схеме на 6-9 порядков.
2. Учет положения дипольных резонансов, естественных ограничений на радиус и период расположения метаатомов и границ применимости аналитических моделей позволяет построить алгоритмы проектирования метапленок, обладающие повышенной надежностью.
3. Метапленка из сферических частиц PbTe на подложке из Ge является фильтрующим элементом с резонансной передаточной функцией при

оптимальном выборе параметров, обеспечивающем практически нулевое отражение на фиксированной длине волны из диапазона 9-11 мкм.

4. В нерезонансном случае изотропная метапленка оптически эквивалентна однородному тонкому слою, толщина которого монотонно возрастает с увеличением длины волны.

Теоретическая и прикладная значимость. Методы и подходы, предложенные в диссертации, могут использоваться при разработке устройств интегральной фотоники с использованием слоистых сред и метаповерхностей и исследовании новых физических эффектов в таких устройствах. Такие устройства могут использоваться при разработке приборов, основанных на новых физических принципах.

Предложенный в диссертации алгоритм для повышения эффективности метода FDTD позволяет проводить расчеты слоистых сред с апостериорным контролем погрешности и получать высокую точность (не менее 3 – 4 верных знаков уже на умеренных сетках с числом узлов 300-500). Предложенные подходы позволили уменьшить фактическую погрешность расчета до 10^6 – 10^9 раз (в зависимости от решаемой задачи) по сравнению с исходной схемой Йе. Метод FDTD является чрезвычайно популярным инструментом численного расчета задач электродинамики. Поэтому кардинальное улучшение точности этого метода, полученное в диссертации, может быть непосредственно использовано при прямом численном моделировании диэлектрических структур прямоугольной геометрии.

Разработанный подход к оптимизации полностью диэлектрических метаповерхностей на подложке может быть использован при создании метаповерхностей с заданными спектральными свойствами (просветляющих и безотражательных покрытий, зеркал, фазовых и амплитудных решеток и т.д.). Такие метаповерхности непосредственно применяются как конструкционные элементы в приборах нового поколения. При этом использование аналитических формул для решения прямой задачи позволяет кардинально уменьшить трудоемкость расчетов, а штрафная функция, предложенная в диссертации, значительно улучшает надежность работы алгоритмов оптимизации.

Данный подход применен к оптимизации безотражательного покрытия на основе метаповерхности из сферических частиц PbTe на германиевой подложке. Получены оптимальные геометрические параметры для фильтрующего элемента с резонансной передаточной функцией. Этот результат может непосредственно использоваться для разработки усовершенствованных балометрических матриц тепловизоров, ИК-телескопов и т.д.

Большинство аналитических моделей димеров, периодических метапленок и более сложных структур построены в рамках дипольного приближения. Простой и конструктивный критерий его применимости,

предложенный в диссертации, может эффективно быть использован для верификации этих моделей и определения границ их применимости.

Достоверность проведенных численных расчетов гарантируется тем, что все они выполнены на многократно сгущающихся сетках с апостериорной оценкой точности по Ричардсону и контролем фактического порядка точности. Фундаментальные теоремы теории разностных схем гарантируют, что в ходе такого расчета решение может быть найдено с точностью вплоть до ошибок компьютерного округления.

Достоверность использованных моделей обеспечивается сопоставлением с наилучшими известными моделями и тщательным исследованием частных случаев. При этом контролируется выполнение ограничений на параметры задачи, которые обусловлены границами применимости дипольного приближения, лежащего в основе всех этих моделей. Полученные результаты для положения дипольных резонансов согласуются с ранее известными экспериментальными данными.

Методы и методология исследования. Основным методом исследования, проведенного в данной диссертационной работе, было математическое моделирование. Использовались аналитический и численный подходы. При разработке аналитических моделей использовались традиционные методы теоретической физики. При разработке и исследовании математических алгоритмов использовались стандартные подходы вычислительной математики. Большое внимание уделялось обоснованию сходимости методом сгущения сеток и построению оценок фактической точности. Все полученные результаты могут быть использованы при разработке усовершенствованной экспериментальной техники, основанной на новых физических принципах.

Личный вклад автора. Все результаты получены лично. В частности, диссертант самостоятельно разработала подход, существенно повышающий надежность алгоритма оптимизации метаповерхности, а также построила модель замены метапленки эффективным однородным слоем. Кроме того, диссертанту принадлежит разработка деталей алгоритмов, их программная реализация, проведение вычислительных экспериментов и расчеты конкретных задач. Руководителю принадлежит общая постановка задачи и обсуждение получаемых в процессе работы над диссертацией результатов.

Апробация результатов. Результаты работы докладывались на заседаниях 3 научных семинаров физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова и 28 научных конференциях. Перечислим наиболее значимые из них:

семинар «Математические методы в естественных науках» кафедры математики (2018, 2017, 2016); семинар лаборатории нанооптики и метаматериалов кафедры квантовой электроники (2017); семинар лаборатории колебательных систем с нелинейными диэлектриками кафедры физики колебаний (2018, 2013);

Международный конгресс «Artificial Materials for Novel Wave Phenomena – Metamaterials» (2017 Марсель, Франция; 2015 Оксфорд, Великобритания), Международная конференция «Metamaterials, Photonic

Crystals and Plasmonics – META» (2016 Малага, Испания), Международный симпозиум «Progress In Electromagnetics Research Symposium – PIERS» (2017 Санкт-Петербург, Россия), Международная конференция «International Conference Mathematical Modeling in Applied Science – ICMMAS» (2017 Санкт-Петербург, Россия), Международная конференция «Days on Diffraction» (2015 Санкт-Петербург, Россия), Всероссийская школа-семинар «Физика и применение микроволн» имени проф. А.П. Сухорукова (2017, 2015, 2013 Москва, Россия), Всероссийская школа-семинар «Волновые явления в неоднородных средах» имени проф. А.П. Сухорукова (2018, 2016, Москва, Россия), Симпозиум «Numerical Methods for Problems with Layer Phenomena» (2016, Москва, Россия) и др.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 10 печатных работах в журналах, индексируемых RSCI, Scopus и Web of Science. Они удовлетворяют Положению о присуждении ученых степеней МГУ имени М.В.Ломоносова. Также опубликовано 9 печатных работ в других изданиях.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации составляет 116 страниц, в том числе 30 рисунков и 3 таблицы. Список литературы включает 116 пунктов на 10 страницах.

Соответствие диссертации паспортам специальностей. В части построения и исследования моделей физических явлений и процессов, возникающих при распространении электромагнитных волн через границы раздела сред и метаповерхности, исследования возможности применения построенных моделей к разработке новой экспериментальной техники диссертация соответствует паспорту специальности 01.04.01 – «Приборы и методы экспериментальной физики» (пункты 2-4 Положений, выносимых на защиту). В части построения и исследования усовершенствованных математических методов содержание диссертации соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (пункт 1 и частично пункт 2 Положений, выносимых на защиту).

Содержание работы

Введение содержит общую характеристику работы (обоснование актуальности, цель работы, научная новизна, практическая значимость, обоснование достоверности результатов, положения, выносимые на защиту).

Глава 1. Моделирование распространения излучения через структуры на основе метаповерхностей. Приводится обзор современного состояния исследований по теме диссертации.

Глава 2. Моделирование слоистых сред методом FDTD.

Для исследования физических процессов в устройствах интегральной фотоники нужно решать векторную задачу электродинамики в слоистой

среде. Большинство задач рассматривается в нестационарной постановке. Многие актуальные задачи сводятся к одномерным: например, прохождение излучения через фотонный кристалл, динамика поверхностных волн различного типа на поверхности фотонного кристалла и т.д. В главе 3 будет показано, что в ряде случаев метапленка из сферических частиц может быть заменена оптически эквивалентной тонкой пленкой на той же границе раздела (то есть одномерной слоистой структурой).

При численном решении задач в слоистых средах (особенно с большим контрастом показателей преломления) возникает ряд принципиальных математических трудностей. Они связаны с тем, что на границе раздела сред поля преломляются, и решение не является гладким. В известных численных методах это приводит к артефактам в численном расчете, которые резко снижают точность. В данной главе этим артефактам дано строгое математическое объяснение и предложены меры борьбы с ними.

Рассмотрим распространение электромагнитных волн, нормально падающих на слоистую диэлектрическую среду (то есть набор плоскопараллельных пластин). Одномерная постановка выбрана для простоты, однако полученные результаты применимы к произвольной трехмерной задаче, если расчетная область и рассеиватель имеют прямоугольную геометрию.

Одномерная нестационарная задача для вихревых уравнений Максвелла формулируется следующим образом:

$$\partial E_z / \partial x = \mu_0 \partial H_y / \partial t, \quad \partial H_y / \partial x = \varepsilon(x) \varepsilon_0 \partial E_z / \partial t + J_z. \quad (1)$$

Здесь расчетная область – отрезок $x \in (0, a)$, $a > 0$. На границах отрезка ставятся условия Мура. Начальные условия будем считать нулевыми. Будем решать задачу с использованием хорошо известной конечно-разностной схемы Йе. Это явная схема «с перешагиванием». Она является двухслойной и обладает вторым порядком точности по пространству и по времени.

Немонотонность схемы Йе. В диссертации было дано строгое математическое объяснение трудностей, возникающих при расчете задач электродинамики в слоистых средах.

Вихревые уравнения Максвелла, записанные покомпонентно, фактически представляет собой систему уравнений переноса. При распространении излучения в однородной среде скорость переноса постоянна. В этом случае справедлива теорема Годунова⁷. Из нее следует, что двухслойная линейная монотонная схема для системы уравнений переноса с постоянной скоростью не может иметь порядок точности $p \geq 2$. Напомним, что разностные схемы, сохраняющие монотонность профиля разностного решения, называются монотонными. Таким образом, схема Йе является немонотонной.

Распространение волн через слоистые среды с границами раздела является гораздо более трудной задачей. Для них немонотонность схемы Йе

⁷ Годунов С.К. // Матем. сб. 47:89 (1959), 271.

была проверена с помощью численного эксперимента. Пример такого расчета приведен на рис. 1. На нем представлены численные решения в задаче о прохождении гауссова импульса через плоскопараллельную пластинку. Последняя изготовлена из кристаллического кремния с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 11.56$. Волна падает слева направо.

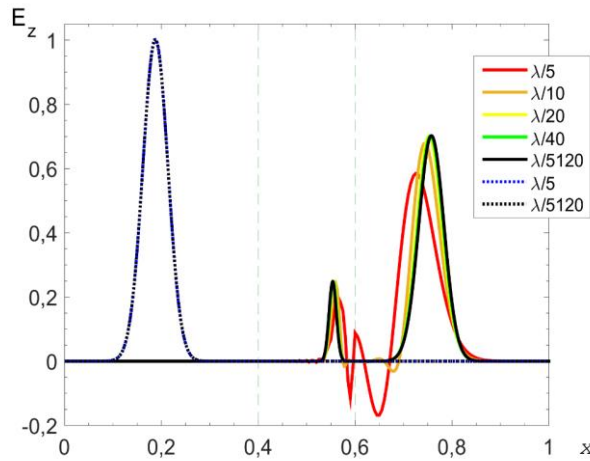


Рис. 1. Численное решение для поля E в задаче о прохождении волны через пластину из кристаллического кремния (на исходной сетке и с учетом уточнений). У кривых указан шаг по пространству.

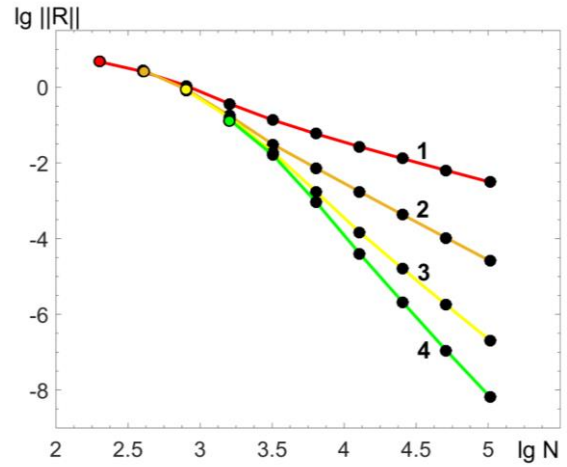


Рис. 2. Погрешности в задаче о прохождении волны через пластину из кристаллического Si с учетом уточнений. Цифры около линий – фактический порядок точности. Цвета соответствуют легенде рис. 1

Расчеты выполнены на нескольких сетках, причем шаг следующей сетки в 2 раза меньше шага предыдущей. Такие сетки будем называть сгущающимися. Пунктирные линии соответствуют решению в свободном пространстве (до того, как волна достигнет первой границы раздела). Сплошные линии – решение после прохождения импульсом границ раздела.

Видно, что в свободном пространстве решения на самой грубой и самой подробной сетках с графической точностью совпадают друг с другом и, следовательно, с точным решением. Поэтому точность расчета уже на грубой сетке достаточно высока.

Однако после того, как импульс прошел через границу раздела, в численном решении возникают сильные нефизичные осцилляции. Это хорошо видно для сетки с шагом $h = \lambda/5$, где λ – центральная длина волны в вакууме. Амплитуда этих осцилляций убывает при уменьшении шага сетки, но со скоростью $O(h)$, то есть значительно медленнее, чем ошибка аппроксимации. Поэтому фактический порядок точности схемы Йе ухудшается до первого, а погрешность катастрофически возрастает. Ранее немонотонность схемы Йе не была установлена.

Сгущение сеток. Опишем процедуру, позволяющую вычислять решение одновременно с контролем его фактической точности. Пусть проведены расчеты на наборе сгущающихся сеток с числом шагов N , rN ,

$r^2N, \dots$, $r > 1$, и получена последовательность численных решений; например, для электрического поля E_N , E_{rN} , $E_{r^2N}, \dots$. Точность решения E_{rN} можно оценить по известной формуле Ричардсона

$$R_{rN} = \frac{E_{rN} - E_N}{r^p - 1} + o(N^{-p}) \quad (2)$$

Здесь p – порядок точности. Точность E_{r^2N} и последующих решений вычисляется аналогично. Оценка (2) не требует какой-либо информации о точном решении или его производных (кроме естественных предположений гладкости) и использует только результаты сеточных расчетов. Кроме того, эта оценка асимптотически точна; на практике она почти не отличается от фактической погрешности и стремится к последней при сгущении сеток.

Вычтем найденную погрешность из решения

$$\tilde{E}_{rN} = E_{rN} + R_{rN}. \quad (3)$$

Тогда остаточный член погрешности будет содержать степени h , начиная с $p+1$ либо $p+2$. Поэтому уточнение по формулам (2), (3) эквивалентно расчету по схеме более высокого порядка точности. Такие уточнения можно делать рекуррентно.

График погрешности в задаче о прохождении волны через пластинку из кристаллического кремния представлен на рис. 2. По горизонтали отложено число шагов сетки, по вертикали – погрешность, полученная в результате рекуррентных уточнений по формулам (2), (3). Масштаб графика двойной логарифмический. Видно, что метод сгущения сеток позволяет улучшить точность на много порядков и многократно повысить порядок точности.

Заметим, что при расчете слоистых сред основной вклад в погрешность обусловлен немонотонностью. Поэтому в первую очередь уточнение (3) уменьшает немонотонность (что хорошо видно на рис. 1). Таким образом, уточнение по формулам Ричардсона (2), (3) является одним из способов построения «почти монотонных» схем для гиперболических задач. Этот результат является новым.

Проведение расчетов на сгущающихся сетках с контролем погрешности по формуле (2) является исключительно мощным численным инструментом. К сожалению, он мало распространен. В задачах электродинамики он ранее не применялся. Напомним, что в стандартных пакетах программ отсутствует контроль фактической точности. В лучшем случае проверяют визуальное сближение решений при уменьшении шага сетки. Однако это не позволяет построить гарантированных оценок.

Жесткие задачи электродинамики возникают при расчете прохождения излучения через слоистые диэлектрические среды с большим контрастом показателей преломления. В таких задачах присутствуют сильно различающиеся характерные пространственные масштабы (период решения в оптически плотной среде и в свободном пространстве).

Такие задачи представляют серьезную трудность для численного расчета, так как длина волны в оптически плотной среде существенно

меньше таковой в свободном пространстве. Чтобы обеспечить разумную точность расчета в оптически плотном веществе, шаг сетки в соответствующих пространственных областях должен быть достаточно малым. Использование такого же шага в свободном пространстве заведомо избыточно, так как обеспечить такую же точность можно с помощью существенно большего шага.

Для эффективного расчета таких задач нужно использовать адаптивные пространственные сетки. Поясним идею их построения на примере задачи о прохождении излучения через границу раздела диэлектриков с показателями преломления n_l (слева) и n_r (справа); будем считать, что $n_l < n_r$. Пусть расчетная область есть $x \in [-a, a]$ и граница раздела соответствует $x = 0$.

Для однородной среды естественно выбирать постоянный шаг $h_{l,r} \sim [Jk_0^2 a^2 \text{Re} n_{l,r}]^{-1}$, где J – полное число шагов, k_0 – волновое число в вакууме. При наличии границы раздела физическая картина меняется. Волна достигает границы раздела и частично отражается. На границе поля **E** и **H** претерпевают излом. Справа от границы раздела волна распространяется с увеличенным волновым числом $k_0 \text{Re} n_r$. Тем самым, непосредственно вблизи границы раздела шаг должен плавно уменьшиться от h_l до h_r , то есть отношение шагов в точках $x = 0$ и $x = -a$ должно равняться $\text{Re} n_r / \text{Re} n_l$.

В диссертации предложена квазиравномерная сетка, удовлетворяющая перечисленным условиям. Производящая функция этой сетки имеет вид

$$x(\xi) = \begin{cases} a \text{th}[c(\xi+1)(1+(\xi+1)^2/3)] - a, & -1 \leq \xi \leq 0; \\ h_r \xi, & 0 \leq \xi \leq \beta. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $\beta = a^2 k_0 \text{Re} n_r$. Коэффициент c выбирается так, чтобы $x'(0)/x'(-1) = \text{Re} n_r / \text{Re} n_l$. Первое выражение в (3) обобщает производящую функцию, предлагавшуюся ранее для стационарного уравнения диффузии⁸. Напомним, что узлы $\{x_j\}$ и шаги $\{h_j\}$ сетки вычисляются по правилам

$$x_j = x(\xi_j), \quad h_j = x'(\xi_{j+1/2})\Delta\xi, \quad \Delta\xi = (\beta+1)/J. \quad (4)$$

В диссертации также было построено обобщение сетки (3), (4) для задачи о проникновении высокочастотного поля в металл. Вблизи границы раздела «металл-диэлектрик» возникает узкий скин-слой, в котором поле резко изменяется. В этом случае сетка адаптируется к толщине скин-слоя.

Сетка (3), (4) обеспечивает достаточно мелкий шаг в оптически плотной среде и вблизи границ раздела сред, где велика кривизна решения. При этом шаг в свободном пространстве остается достаточно большим, что делает расчет экономичным. Поскольку построенная сетка является квазиравномерной, для нее применим описанный выше метод сгущения сеток и оценки точности по методу Ричардсона.

⁸ Белов А.А., Калиткин Н.Н. // Матем. Моделирование 27:11 (2015), 47.

Совокупность предложенных подходов позволяет существенно повысить точность расчетов электродинамических задач, возникающих при проектировании устройств интегральной фотоники и новой экспериментальной техники на их основе.

Глава 3. Моделирование метапленок из сферических частиц.

Применимость и точность физических моделей метапленок. При проектировании новых технических систем (в частности, экспериментальной техники, основанной на новых физических принципах) необходимо решать обратную задачу, то есть определять такие параметры системы, которые обеспечивали бы заданный отклик на внешнее воздействие. Решение обратной задачи сводится к многократному решению прямой задачи (то есть расчету отклика системы с некоторыми заданными параметрами).

Использование прямых численных расчетов в таких задачах исключительно трудоемко, более перспективным представляется решение прямой задачи с помощью аналитических моделей. Однако такие модели имеют границы применимости, за пределами которых точность резко падает. Поэтому для практики важно знать границы применимости наиболее употребительных моделей и оценки их точности.

В литературе предложено сравнительно немного различных моделей метапленок. Для метапленки в однородном диэлектрике чаще всего используют два приближения: (а) замена каждого метаатома точечными диполями (например, модель Евлюхина⁹) и (б) замена метапленки эффективной границей раздела (например, модель Кустера-Холлоуэя¹⁰).

В диссертации исследованы границы применимости и точность дипольного приближения, лежащего в основе модели Евлюхина. Будем считать дипольное приближение применимым, если дипольный вклад в сечение рассеяния на всем рассматриваемом частотном диапазоне составляет не менее 95%. Для непоглощающего материала резонансы высокого порядка (квадрупольный и др.) являются высокочастотными, поэтому предельно допустимым при данной длине волны λ является радиус r , соответствующий магнитному квадрупольному резонансу.

Теория Ми является масштабируемой (то есть во все величины входит безразмерная комбинация λ/r), поэтому при заданном значении показателя преломления n достаточно взять какое-то одно λ и найти для него r из описанного выше критерия. Такая процедура была проведена для вещественных n в диапазоне от 3 до 10. Этот диапазон соответствует ряду актуальных материалов, которые имеют участки слабой дисперсии и пренебрежимо малого поглощения в оптическом и ближнем ИК-диапазоне (Ge, PbTe и др.). Полученная зависимость λ/r от n представлена на рис. 3. Она практически прямолинейна и хорошо описывается аппроксимацией

$$\lambda/r = 1.35n + 0.55 \quad (5)$$

⁹ Evlyukhin A.B., Reinhardt C., Seidel A. et al. // Phys. Rev. B **82**:4 (2010), 045404.

¹⁰ Kuester E.F., Mohamed M.A., Piket-May M., Holloway C.L. // IEEE Trans. Antennas Propag. **51**:10 (2003), 2641.; Holloway C.L., Mohamed M.A., Kuester E.F., Dienstfrey A. // IEEE Trans. Electromagn. Comp. **47** (2005), 853.

Такой подход позволяет получить не только конкретные (количественные) ограничения на размеры частицы, но и достаточно разумную оценку точности ее замены электрическим и магнитным диполями.

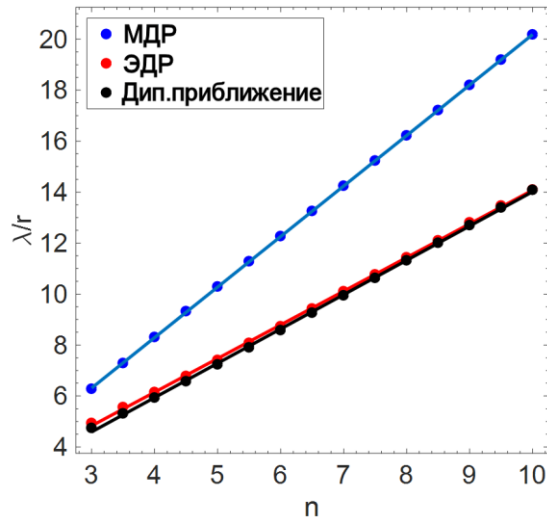


Рис. 3. Применимость дипольного приближения для различных материалов и положения магнитного и электрического дипольных резонансов

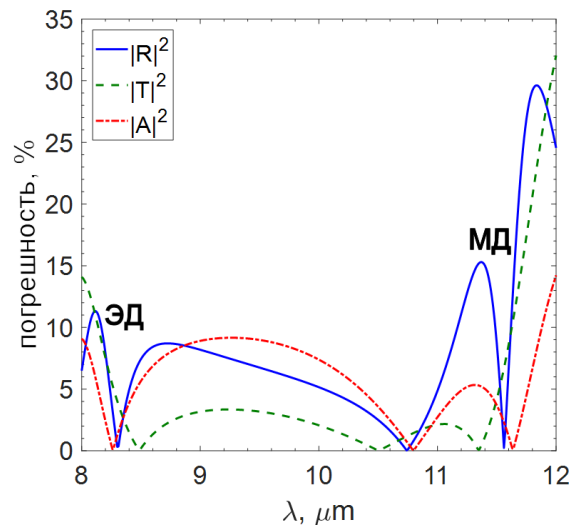


Рис. 4. Относительная погрешность модели Кустера-Холлоуэя на примере метапленки из сферических частиц PbTe

Попутно непосредственно по графикам сечения рассеяния в зависимости от r при фиксированных λ были построены выражения для резонансных радиусов r_M и r_E , при которых возникают магнитный и электрический дипольный резонансы соответственно. Приведем эти выражения

$$\lambda/r_M = 1.98n + 0.37, \quad \lambda/r_E = 1.32n + 0.87. \quad (6)$$

Оценка для магнитного дипольного резонанса согласуется с известными данными эксперимента¹¹. Построенные оценки (5), (6) являются новыми.

В модели Евлюхина основным источником погрешности является замена частиц точечными диполями. Поэтому если радиус частиц не превосходит r из (5), то погрешность модели Евлюхина не превышает 5%. Тем самым, эту модель можно использовать как эталон при сравнении с другими моделями. Например, на рис. 4 показана точность расчета отражения $|R|^2$, прохождения $|T|^2$ и поглощения $|A|^2$ по модели Кустера-Холлоуэя для метапленки, составленной из сферических частиц PbTe. Видно, что точность этой модели составляет 10-20%. Это позволяет качественно описывать спектр метапленки, но количественная точность невелика.

Замена метапленки тонкой пленкой. Прямой численный расчет рассеяния света метапленкой исключительно сложен, так как требуется введение неструктурированных сеток, причем для каждого метаатома (число которых очень велико). Однако в ряде случаев такую метапленку можно заменить эквивалентным однородным тонким слоем, который является

¹¹ Kuznetsov A. I., Miroshnichenko A. E., Fu Y. H. et al. // Sci. Rep. **2** (2012), 492.

гораздо более простой структурой. Для нее нетрудно провести прямой численный расчет, который позволяет учесть наклонное падение исходного пучка, его немонохроматичность и ряд других эффектов, учет которых в полностью аналитических моделях проблематичен.

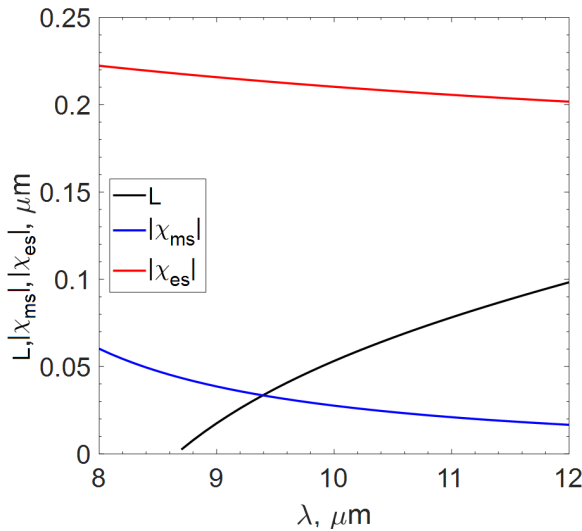


Рис. 5. Толщина L эффективной тонкой пленки и нормальные компоненты плотностей поверхностной восприимчивости метапленки

Поэтому такой гибридный подход представляется перспективным (особенно при решении сложных обратных задач). Для его реализации нужна модель замены метапленки эквивалентным однородным тонким слоем. В диссертации такая модель построена для метапленки, составленной из сферических частиц. Опишем эту модель.

Пусть существует однородная тонкая пленка, имеющая такие же коэффициенты отражения R , прохождения T и поглощения A и компоненты плотности поверхностной восприимчивости χ_{es} и χ_{ms} , что и исходная метапленка.

Такую тонкую пленку будем называть эквивалентной. Материальные параметры метапленки и исходной тонкой пленки будем считать одинаковыми. Найдем толщину L эквивалентной тонкой пленки.

Пусть на структуру нормально падает плоская волна. В нерезонансном случае (то есть для частиц малого размера) справедливы выражения, связывающие материальные параметры метапленки и однородного слоя¹²

$$\chi_{es} = L(\varepsilon - 1); \quad \chi_{ms} = L(\mu - 1). \quad (7)$$

Система (7) содержит 2 уравнения относительно 3 неизвестных. Поэтому в указанных выше работах был сделан вывод о произволе в выборе параметров эквивалентной тонкой пленки.

Добавим недостающее третье уравнение. Так как любой материал обладает некоторым поглощением, то систему (7) необходимо дополнить законом Бугера-Ламберта-Бера, описывающим поглощение света в прозрачной среде

$$I = I_0 e^{-L\delta}, \quad \delta = 2\text{Im}k \geq 0, \quad k = 2\pi n/\lambda. \quad (8)$$

Здесь I_0 и I – интенсивности падающего и прошедшего через слой излучения, δ – коэффициент поглощения, k – волновое число в веществе с показателем преломления n . Учтем, что $I/I_0 = T$, выразим ε и μ из (7) и подставим их в (8). После упрощений получим уравнение для определения толщины L

¹² Holloway C.L., Kuester E.F., Dienstfrey A. // IEEE Antennas Wireless Propag. Lett. **10** (2011), 1507.; Bhobe A. U. Ph.D. thesis. University of Colorado, 2004.

$$\ln T + (4\pi/\lambda)\sqrt{2}\sqrt{PQ - \chi_{\text{es}}\chi_{\text{ms}} + L\text{Re}(\chi_{\text{es}} + \chi_{\text{ms}}) - L^2} = 0, \quad (9)$$

$$P = \sqrt{|\chi_{\text{es}}|^2 + 2L\text{Re}\chi_{\text{es}} - L^2}, \quad Q = \sqrt{|\chi_{\text{ms}}|^2 + 2L\text{Re}\chi_{\text{ms}} - L^2}.$$

В качестве примера рассмотрим метапленку, образованную сферическими частицами PbTe в воздухе. Пусть радиус сферических частиц $r = 0.5$ мкм, период структуры $p = 3$ мкм, длина волны падающего излучения $\lambda \in [8, 12]$ мкм. Такой случай является нерезонансным. Коэффициент прохождения T вычислялся по модели Евлюхина. Плотности поверхностной восприимчивости χ_{es} и χ_{ms} вычислялись по R и T , найденным по модели Евлюхина. Такое вычисление χ_{es} , χ_{ms} – это обратная задача; однако ее удается решить аналитически.

На рис. 5 приведен результат вычисления толщины эквивалентного однородного слоя. Видно, что толщину удастся вычислить только вдали от резонанса; вблизи него замена метапленки тонкой пленкой неправомерна.

Глава 4. Проектирование безотражательного покрытия на основе метапленки.

В последние годы большое внимание уделяется исследованию возможности создания усовершенствованных функциональных покрытий на основе метаповерхностей. Например, для повышения чувствительности различных спектральных и детектирующих оптических приборов требуются просветляющие покрытия, для солнечных батарей и фотовольтаических элементов актуально создание покрытий с нулевым отражением и т.д.

Разработка таких функциональных покрытий сводится к оптимизации геометрических и материальных параметров метаповерхности (то есть простейшей обратной задаче). В диссертации предложены подходы, позволяющие существенно повысить надежность работы алгоритмов оптимизации. Эти подходы применены к задаче о безотражательном покрытии на основе метапленки из сферических частиц PbTe на подложке Ge.

Постановка задачи. Рассмотрим метапленку из одинаковых сферических частиц на подложке. Пусть и метаатомы, и подложка являются диэлектриками с $\mu = 1$. Требуется найти такие период структуры p и радиус частиц r , при которых отражение $|R_s|^2$ от структуры минимально. Задача рассматривается в двух постановках:

(а) длина падающей волны $\lambda = \lambda_*$ фиксирована

$$|R_s(\mathbf{x}, \lambda_*)|^2 = \min; \quad (10)$$

(б) длина волны может меняться в заданном диапазоне $\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$

$$\int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} |R_s(\mathbf{x}, \lambda)|^2 d\lambda = \min. \quad (11)$$

Из физического смысла задачи вытекает ряд ограничений на оптимизационные параметры. Во-первых, очевидно, последние положительны $p > 0$, $r > 0$, а частицы не соприкасаются $p > 2r$.

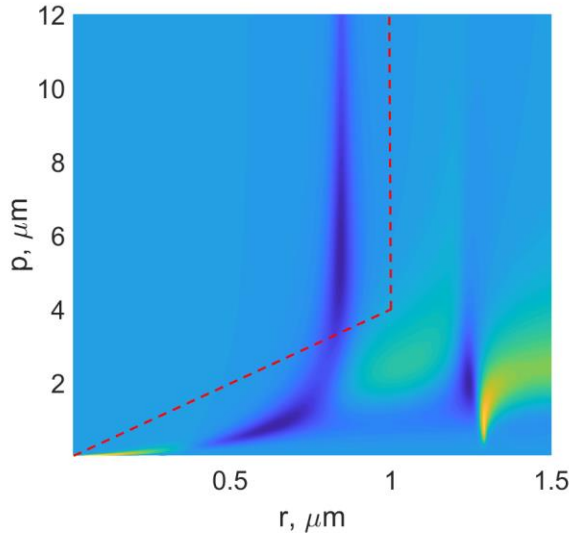


Рис. 6. Отражение $|R_s|^2$ в зависимости от периода p и радиуса r при фиксированной длине волны. Красная линия – граница допустимой области.

Во-вторых, существуют ограничения, связанные с процессом изготовления структуры. Так, радиус идентичных сферических частиц из диэлектрика крайне редко бывает менее $r_{\text{fabric}} : 50$ нм. Они располагаются на подложке не вплотную, а с интервалом, равным диаметру частицы или более, поэтому $p \geq 4r$.

В-третьих, нужно обеспечить применимость дипольного приближения, которое лежит в основе физических моделей, используемых для решения прямой задачи. Это дает ограничение на максимально допустимый радиус r_{max} .

В-четвертых, нужно исключить из рассмотрения далеко расположенные друг от друга и, тем самым, слабо взаимодействующие метаатомы. Для этого потребуем, чтобы $p \leq \lambda_{\text{max}}$. Объединение перечисленных ограничений дает допустимое множество

$$4r \leq p \leq \lambda_{\text{max}}, \quad r_{\text{fabric}} \leq r \leq r_{\text{max}}. \quad (12)$$

Учет этих ограничений приводит к задаче на условный экстремум (10), (12) либо (11), (12). Такая постановка является новой.

Характерный вид целевой функции и допустимое множество показаны на рис. 6. Целевая функция в данной задаче имеет ряд специфических особенностей. Она сильно зависит от радиуса частиц и сравнительно слабо зависит от периода структуры. При малых r значения $|R_s|^2$ практически не изменяются. Наличие такого горизонтального плато приводит к заикливанию вычислений, поэтому оно вызывает серьезные трудности. На резонансных радиусах имеются глубокие овраги, однако лишь один из них лежит в области применимости дипольного приближения. Кроме того, очевидно, по физическому смыслу $0 \leq |R_s|^2 \leq 1$.

Штрафная функция. Задача на условный экстремум была сведена к задаче на безусловный экстремум методом штрафных функций. Была построена бесконечно гладкая штрафная функция. Это позволяет использовать методы минимизации первого и более высоких порядков с разностным вычислением градиента.

Опираясь на описанную выше специфику, построим штрафную функцию $y(p, r, \lambda_*)$. Она должна быть неотрицательной и заведомо превосходить целевую функцию за пределами допустимой области (12). Поэтому $y \geq 1$ при $r = r_{\text{fabr}}$, $r = r_{\text{max}}$, $p = 4r$, $p = \lambda_*$. При этом из физических соображений мы ожидаем, что минимум отражения будет вблизи радиуса,

соответствующего магнитному дипольному резонансу r_0 (но точного совпадения с последним не будет). Поэтому целесообразно потребовать, чтобы $y=0$ при $r=r_0$. Для величины r_0 возьмем результат из главы 3 $r_0 \approx \lambda_*/(1.98n + 0.37)$.

Представим штрафную функцию в виде произведения $y = y_r(r)y_p(p)$. Первый сомножитель обеспечивает выполнение ограничений на r , а второй – ограничений на p . Будем искать $y_r(r)$ в виде $(Ar + B)^\beta$, где β – четное натуральное число. Возможны два случая. **(а)** Пусть $r_{\max} - r_0 < r_0 - r_{\text{fabr}}$ (то есть r_0 лежит ближе к $r_{\max}$, чем к r_{fabr}). Тогда целесообразно выбрать

$$y_r(r) = ((r - r_0)/(r_{\max} - r_0))^\beta. \quad (13)$$

Такая функция представляет собой желоб ширины $(r_{\max} - r_0)$ с центром при $r = r_0$, причем на стенке желоба имеем $y_r(r_{\max}) = 1$. **(б)** Пусть теперь $r_{\max} - r_0 > r_0 - r_{\text{fabr}}$, (то есть r_0 лежит ближе к r_{fabr} , чем к $r_{\max}$). Тогда выберем

$$y_r(r) = ((r - r_0)/(r_0 - r_{\text{fabr}}))^\beta. \quad (14)$$

Аналогично построим $y_p(p)$. Эта функция будет иметь следующий вид:

$$y_p(p) = ((p - p_{\text{mid}})/d_p)^\beta. \quad (15)$$

Здесь $p_{\text{mid}} = (4r + \lambda_*)/2$, $d_p = (\lambda_* - 4r)/2$. Такое $y_p(p)$ имеет вид желоба, ориентированного вдоль прямой $p = p_{\text{mid}}$. Ширина желоба выбирается так, чтобы на границе диапазона допустимых p обеспечить $y_p = 1$.

Случай диапазона длин волн рассматривается аналогично; для этого достаточно заменить λ_* на $\lambda_{\min}$ в (15). Величина β является настроечным параметром. Было проанализировано его влияние на $y(p, r)$ и рекомендовано значение $\beta = 10$. Предложенная штрафная функция является новой.

Пример. Пусть метаатомы изготовлены из теллурида свинца PbTe и находятся на границе раздела «воздух-германий». В дальневолновом ближнем ИК-диапазоне (8-12 мкм) эти материалы имеют показатели преломления 5.65 и 4 соответственно, при этом поглощение обоих материалов пренебрежимо мало¹³. Рассмотрим задачу при фиксированном $\lambda_* = 10$ мкм и в диапазоне $\lambda \in [9, 11]$ мкм.

Для решения прямой задачи будем использовать две модели:

(а) модифицированная модель Симовского (в отличие от исходной модели¹⁴, будем вычислять матрицы поляризуемости метапленки в воздухе не численно, а аналитически на основе модели Евлюхина);

(б) Модель Бабичевой¹⁵ (которая также строится с использованием модели Евлюхина).

¹³ Weiting F., Yixun Y. // Infrared Phys. **30** (1990), 371.

¹⁴ Morits D.K., Simovski C.R. // Phys. Rev. B. **82**:16 (2010), 165114; Albooyeh M., Morits D., Simovski C.R. // Metamaterials. **5**:4 (2011), 178.

Тогда задача сводится к поиску минимума функции двух переменных. Эта функция вычисляется по явным формулам (хотя имеет достаточно сложный вид). Для поиска минимума будем использовать метод внутренней точки¹⁶, реализации которого есть во многих математических пакетах. Это метод первого порядка, причем градиент целевой функции вычисляется разностно.

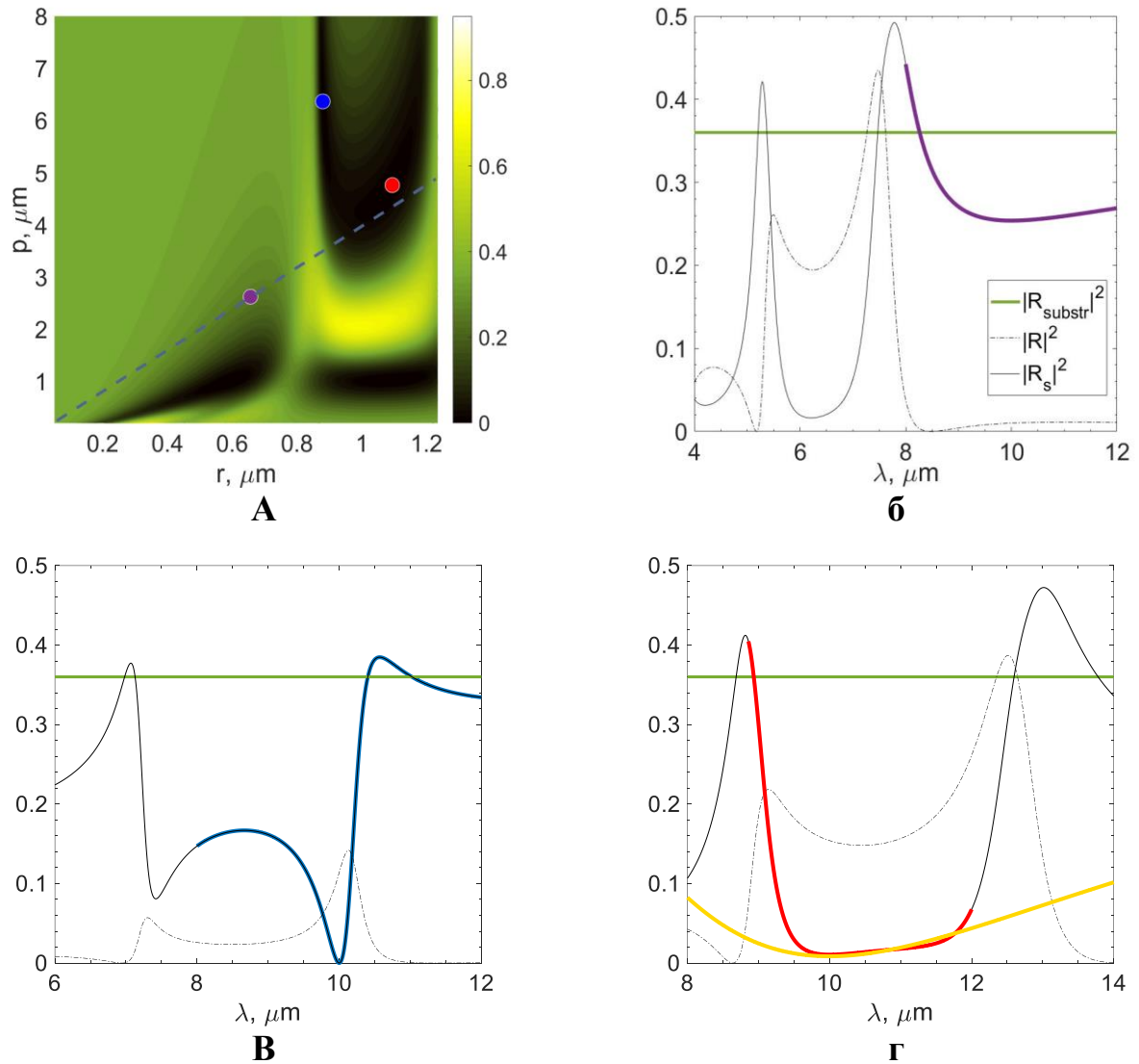


Рис. 7. Вид целевой функции (а) и спектры отражения (б,в,г) подложки, метапленки в воздухе и метапленки на подложке (используется модель Бабичевой). Обозначения – см. текст.

Маркер	<i>Фиолетовый</i>	<i>Синий</i>	<i>Красный</i>
r_{opt} , мкм	0.656	0.879	1.094
p_{opt} , мкм	2.623	6.365	4.762
$ R_s ^2$	0.254	$1.659 \cdot 10^{-13}$	0.010

Табл. 1. Результаты оптимизации по модели Бабичевой.

¹⁵ Babicheva V.E., Petrov M.I., Baryshnikova K.V., Belov P.A. // J. Opt. Soc. Am. B. 34:7 (2017), D18.

¹⁶ Byrd R.H., Hribar M.E., Nocedal J. // SIAM Journal on Optimization. 9:4 (1999), 877.

Фиксированная длина волны. Вид целевой функции по модели Симовского при $\lambda_* = 10$ представлен на рисунке 6. Имеется единственный минимум, соответствующий $p_{\text{opt}} = 5.4676$ мкм и $r_{\text{opt}} = 0.8430$ мкм. При этом отражение оказывается практически нулевым $|R_s|^2 \approx 1.0552 \cdot 10^{-14}$.

Модель Бабичевой дает три локальных минимума (см. рис. 7 а и табл. 1). Эти минимумы возникают, если электрический и магнитный дипольные моменты равны по модулю и противоположны по направлению.

На рисунках 7 б)-г) показаны спектры отражения, соответствующие полученным оптимальным геометрическим параметрам. Жирные участки кривых соответствуют диапазонам, в которых справедливо дипольное приближение. Жирными горизонтальными линиями показано отражение от границы раздела без покрытия. Из этих графиков видно, что минимумы отражения обусловлены разными причинами.

Фиолетовый минимум (рис. 7 б) обеспечивается близко расположенными нерезонансными частицам.

Синий минимум (рис. 7 в) обусловлен взаимодействием между подложкой и метапленкой, размер частиц соответствует первому магнитному дипольному резонансу. В этом случае метапленка ведет себя как идеальный узкополосный фильтр. Однако данный минимум очень узкий, и даже при незначительном отклонении r и p от оптимальных отражение будет велико. Как правило, точность изготовления метаатомов составляет $\sim 10\%$ от их линейного размера, что превосходит ширину минимума. Поэтому минимум на рис. 7 в практически нереализуем.

Красный минимум (рис. 7 г) возникает в силу магнитоэлектрического взаимодействия. Последнее соответствует случаю компенсации отражения в широком спектральном диапазоне. Ширина области малого отражения определяется положениями первых дипольных резонансов. В этом случае метапленка работает как неплохой широкодиапазонный фильтр. Этот минимум значительно проще реализовать в эксперименте.

Заметим, что модифицированная модель Симовского воспроизводит только минимум, соответствующий магнитному дипольному резонансу. При этом оптимальный радиус разумно согласуется с результатом по модели Бабичевой (в пределах $\sim 4\%$), а оптимальный период заметно отличается (на $\sim 14\%$). Этот результат ожидаем, так как обе модели построены в не слишком точных приближениях, а отражение сильно зависит от радиуса частиц и сравнительно слабо – от периода их расположения. Два других минимума в модифицированной модели Симовского не воспроизводятся.

Аналогичные результаты будут иметь место при выборе других значений λ_* из диапазона 9-11 мкм (то есть между электрическим и магнитным дипольными резонансами).

Диапазон длин волн. Для модели Симовского результаты полностью совпадают с описанными выше, то есть не зависят от выбора λ_{min} и λ_{max} . Это

связано с тем, что минимум отражения только один, и за его пределами отражение только увеличивается, как и площадь под его графиком.

В модели Бабичевой возможно несколько минимумов отражения. Поэтому при изменении диапазона площадь под графиком отражения может как увеличиваться, так и уменьшаться. Для примера был рассмотрен интервал от $\lambda_{\min}=9$ мкм до $\lambda_{\max}=11$ мкм, расположенный между двумя резонансами. Соответствующая целевая функция приведена на рис. 8. Видно, что она качественно имеет тот же вид, что рисунок 7 з). Однако в допустимую область попадает только один минимум. Оптимальные значения геометрических параметров для указанного диапазона равны $r_{\text{opt}}=1.037$ и $r_{\text{opt}}=4.532$, а глубина минимума составляет 0.014. Тем самым, данный минимум аналогичен «красному» минимуму на длине волны 10 мкм. Значит, он также обусловлен магнито-электрическим взаимодействием частиц с подложкой.

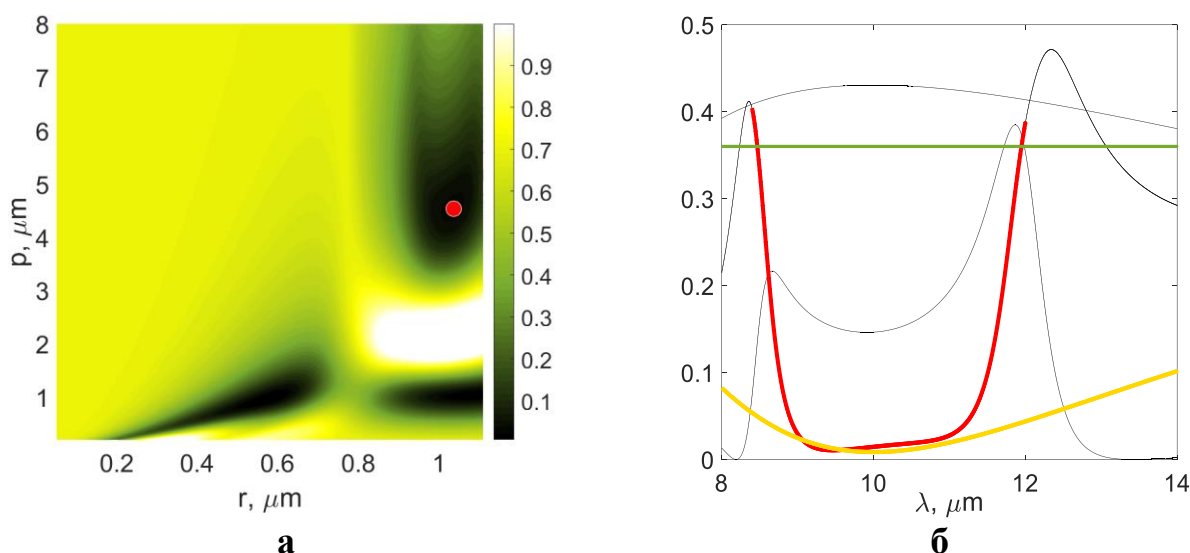


Рис. 8. Вид целевой функции (а) и спектр отражения (б) при оптимизации в диапазоне длин волн (используется модель Бабичевой). Обозначения соответствуют рис. 7.

Сравнение с тонкой пленкой. Для сравнения на рис. 7 з) и рис. 8 б) представлен спектр отражения от подложки, на которой расположена тонкая пленка из коммерческого материала «Иртран»-2 (желтые кривые). Здесь выбрана оптимальная толщина пленки. Видно, что использование такого однослойного тонкопленочного покрытия не позволяет добиться полного подавления отраженного излучения ни на одной длине волны. Это связано с тем, что ее показатель преломления больше 2, а варьирование толщины недостаточно для получения желаемого результата.

Однако в отличие от метапленки, тонкая пленка обеспечивает малое отражение во всем диапазоне длин волн от 8 до 12 мкм. Метапленка обеспечивает малое отражение в более узком диапазоне от 9 до 11 мкм (рис. 9 б). При этом метапленка обеспечивает практически такое же отражение, как тонкая пленка.

При разработке безотражательного покрытия не всегда удастся найти материалы с необходимыми показателями преломления. Эта проблема обычно решается использованием многослойных структур, однако их сложно изготовить из-за необходимости непрерывного контроля толщины каждого из слоев. Использование метаповерхностей позволяет получить покрытия с требуемым эффективным показателем преломления.

В **Заключении** формулируются основные результаты диссертации.

**Публикации автора по теме диссертации,
индексируемые Web of Science, Scopus, RSCI**

1. Dombrovskaya Zh.O., Zhuravlev A.V. Investigation of the possibility of metafilm modeling as a conventional thin film // Appl. Phys. A Mater. **123**:1 (2017), 27.
2. Dombrovskaya Zh.O., Zhuravlev A.V., Belokopytov G.V., Bogolyubov A.N. Phonon-polariton meta-atoms for far infrared range // Phys. Wave Phen. **24**:2 (2016), 96.
3. Домбровская Ж.О., Боголюбов А.Н. Повышение точности одномерной схемы Йе методом сгущения сеток // Изв. РАН. Сер. Физ. **81**:1 (2017), 117.
[Dombrovskaya Zh.O. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. **81**:1 (2017), 106.]
4. Домбровская Ж.О., Журавлев А.В., Белокопытов Г.В., Боголюбов А.Н. Обратная задача восстановления характеристик мета-атома по измеренному прохождению и отражению метапленки // Изв. РАН. Сер. Физ. **79**:12 (2015), 1709.
[Dombrovskaya Zh.O. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. **79**:12 (2015), 1496.]
5. Рыбина А.В., Домбровская Ж.О., Боголюбов А.Н. Дипольный отклик диэлектрического шара // Изв. РАН. Сер. Физ. **82**:11 (2018), 1516.
[Rybina A.V. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. **82**:11 (2018), 1379.]
6. Боголюбов А.Н., Белокопытов Г.В., Домбровская Ж.О. Моделирование спектральных зависимостей для двумерных фотонно-кристаллических систем // Вестник МГУ. Физ. Астрон. **5** (2013), 8.
[Bogolyubov A.N. et al. // Moscow Univ. Bull. Phys. **68**: 5 (2013), 344.]
7. Домбровская Ж.О. Проектирование изотропной полностью диэлектрической метаповерхности на подложке // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. **18**:4 (2017), 455.
8. Домбровская Ж.О. Метод конечных разностей во временной области для кусочно-однородных диэлектрических сред // Моделирование и анализ информационных систем. **23**:5 (2016), 539.
9. Домбровская Ж.О., Журавлев А.В. Моделирование изотропной метапленки с помощью тонкой пленки с частотно зависимой толщиной // Ядерная физика и инжиниринг. **8**:1 (2017), 96.
10. Белокопытов Г. В., Боголюбов А. Н., Домбровская Ж. О., Терехов Ю. Е. Расчет электродинамических характеристик метапленки. Экспериментально-аналитический подход // Физические основы приборостроения. **4**:1 (2015), 5.

Другие публикации

- 11.Dombrovskaya Zh. O., Rybina A. V., Belov A. A., Bogolyubov A. N. All-dielectric metasurface filters for mid-infrared range // J Phys Conf Ser. **1092** (2018), 012023.
- 12.Домбровская Ж. О., Боголюбов А. Н. Немонотонность схемы FDTD при моделировании границ раздела между диэлектриками // Ученые записки физического факультета Московского Университета. 4 (2017), 1740302.
- 13.Dombrovskaya Zh. O., Zhuravlev A. V. Is it possible to replace an isotropic metafilm by a homogeneous layer? // 11th International Congress on Engineered Materials Platforms for Novel Wave Phenomena (Metamaterials) – IEEE Xplore Digital Library, 2017, 85.
- 14.Dombrovskaya Zh. O., Zhuravlev A. V. Possibility of isotropic metafilm representation by an equivalent homogeneous layer // Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS) – IEEE Xplore Digital Library, 2017, 3365.
- 15.Dombrovskaya Zh. O., Bogolyubov A. N. High order FDTD computations using mesh thickening // Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS) – IEEE Xplore Digital Library, 2017, 453.
- 16.Dombrovskaya Zh. O., Bogolyubov A. N. Effective FDTD modeling of microwave ceramics // Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS) – IEEE Xplore Digital Library, 2017, 2732.
- 17.Dombrovskaya Zh. O. Algorithm for bianisotropic metafilm design problem // 9th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials) – IEEE Xplore Digital Library, 2015, 58.
- 18.Домбровская Ж.О., Боголюбов А.Н. Анализ точности и сходимости одномерной схемы Йе методом сгущения сеток // Ученые записки физического факультета Московского Университета. 3 (2016), 163112.
- 19.Dombrovskaya Z. Research of spectral characteristics for photonic crystals with fractal defects // 6th International Kharkov Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Submillimeter Waves (MSMW) – IEEE Xplore Digital Library, 2013, 611.