

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE
Fakulta elektrotechniky a informatiky

Mgr. Gergely Kajtár

Autoreferát dizertačnej práce

**Elektromagnetické vlastnosti
dvojrozmerné periodických štruktúr**

na získanie vedecko-akademickej hodnosti
philosophiae doctor
v odbore doktorandského štúdia
5.2.48 Fyzikálne inžinierstvo

Bratislava 2014

Dizertačná práca bola vypracovaná v dennej forme doktorandského štúdia na Ústave jadrového a fyzikálneho inžinierstva, Fakulta elektrotechniky a informatiky STU v Bratislave.

Predkladateľ: Mgr. Gergely Kajtár
Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Školiteľ: prof. RNDr. Peter Markoš, DrSc.
Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Oponenti: doc. Ing. Ľubomír Šumichrast, CSc.
Ústav elektrotechniky
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

doc. RNDr. František Kundracik, CSc.
Katedra experimentálnej fyziky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave
Mlynská dolina F2, 842 48 Bratislava

Autoreferát bol rozoslaný dňa:

Obhajoba dizertačnej práce sa koná dňa o hod. v miestnosti na Oddelení fyziky Ústavu jadrového a fyzikálneho inžinierstva Fakulty elektrotechniky a informatiky STU v Bratislave, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore doktorandského štúdia 5.2.48 Fyzikálne inžinierstvo.

prof. RNDr. Gabriel Juhás, PhD.
Dekan FEI STU Bratislava
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Obsah	
Úvod	4
Súčasný stav problematiky	5
Ciele dizertačnej práce	6
Teoretický základ	7
Výsledky dizertačnej práce	9
Numerický program	9
Fotonický kryštál s lineárnym defektom	9
Náhodná anizotrópna štruktúra	11
Vlastné rezonancie korugovanej dielektrickej vrstvy	12
Zvýšená transmitancia kovovej mriežky	14
Záver	16
Literatúra	17
Publikačná činnosť	18

Úvod

Dizertačná práca je zameraná na analýzu šírenia elektromagnetickej vlny cez periodické štruktúry. Táto problematika je podstatnou časťou nanofotoniky, optických vlnovodov a optických difrakčných prvkov. Rozpracovali sme analýzu viazaných vln (rigorous coupled wave analysis – RCWA) pre analýzu rôznych periodických štruktúr. Túto metódu sme implementovali v numerickom simulačnom programe. RCWA je jedna z početných numerických metód používaných pre simuláciu šírenia svetla v periodických štruktúrach pozostávajúcich z kovových, dielektrických, alebo metamateriálových prvkov. Tieto štruktúry často vykazujú neočakávané správanie, ktoré vedie k veľmi prekvapujúcim a zaujímavým optickým vlastnostiam.

RCWA je vektorová teória, ktorá nezanedbáva hraničné podmienky ani evanescentné vlny, a preto sa používa aj v prípade optických prvkov s rozmermi menšími ako je polovica vlnovej dĺžky prechádzajúcej vlny. Princíp RCWA spočíva v rozvinutí priestorovo závislých fyzikálnych veličín (intenzita elektromagnetického poľa, relatívna permitivita, relatívna permeabilita) do Fourierovho radu na základe Floquetovej-Blochovej teórie, kde sú už nezávislé priestorové premenné odseparované. Pomocou Maxwellových rovníc je problém zjednodušený na systém diferenciálnych rovníc druhého rádu, ktorý sa už po diskretizácii priestoru dá vyriešiť známymi algebraickými postupmi nezávisle v každej oblasti: v superstrate (nad štruktúrou), v mriežke a v substráte. Pomocou hraničných (okrajových) podmienok vyjadríme sústavu lineárnych rovníc, z čoho sa vypočíta odrazivosť a priepustnosť štruktúry. Obyčajná RCWA vyžaduje, aby materiálne veličiny v oblasti mriežky boli priestorovo nezávislé v smere šírenia vlny. Ak to tak nie je, treba oblasť mriežky rozkúsovať na tenšie podvrstvy, v ktorých je permitivita/permeabilita konštantná. Analýza štruktúry pozostávajúcej z viacerých vrstiev vyžaduje ďalšiu úpravu numerického kódu, ktorá zamedzí numerickým nestabilitám.

RCWA pracuje vo frekvenčnej oblasti, čo znamená, že numerický výpočet je vykonaný pre jednu frekvenciu naraz, čo nám umožní efektívne simulovať disperzné štruktúry. Presnosť výpočtu je ovplyvnená jedine počtom členov vo Fourierovom radu. Ako každá metóda, aj RCWA má svoje silné a slabé stránky (viď Tab. 1).

Tab. 1: Silné a slabé stránky metódy RCWA.

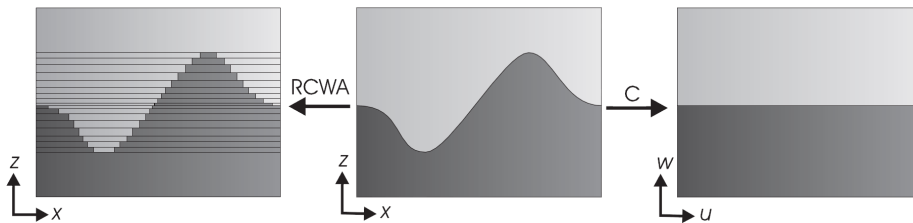
Silné stránky	Slabé stránky
Relatívne rýchle výpočty	Simulácia iba pre periodickú štruktúru
Jednoduchá interpretácia výsledkov	Aproximuje tvar štruktúry
Výpočet pre jednu frekvenciu	Problémy s konvergenciou pre zápornú permitivitu/permeabilitu
Zvládne nespojitý priebeh materiálu	Náročná algebra

Súčasný stav problematiky

História modálnych metód sa začala v roku 1907, keď sa RAYLEIGH pokúsil vysvetliť Woodovu anomáliu pomocou analytických výpočtov amplitúd jednotlivých difrakčných rádov [1]. Vo svojom modeli používal modálnu expanziu pre amplitúdu poľa pod a nad mriežkou (tzv. Rayleighova modálna expanzia). Jeho metóda bola vhodná len pre TE polarizáciu (vektor elektrického poľa je rovnobežný s rozhraním mriežky). Jeden z prvých pokusov o rigorózne riešenie difrakčných problémov priniesol BURCKHARDT v roku 1966 [2]. Skúmal difrakciu svetla na hrubých hologramoch s harmonickou zmenou indexu lomu. Predpokladal neabsorpčnú dielektrickú mriežku a využil Fourierov rozklad poľa vo vnútri mriežky pre obidve polarizácie (TE a TM). V roku 1969 KOGELNIK popísal difrakciu na hrubej mriežke so slabou moduláciou indexu lomu. Jeho analýza sa nazýva teória viazaných vln [3]. Teória viazaných vln nie je úplne rigorózna analýza, pretože je založená na niekoľkých priblíženiach. Napríklad uvažuje len nulý a prvý difrakčný rád, ostatné rády sa zanedbávajú.

V roku 1973 sa KASPAR snažil vylepšiť model difrakcie na štruktúre s komplexným indexom lomu a obdĺžnikovým profilom [4]. Využil pri tom Fourierov rozklad poľa a Floquetovu teorému. O niekoľko rokov neskôr, v roku 1975 PENG riešil difrakciu na mriežkach s rôznymi profilmi (harmonický, trojuholníkový, atď.) rozdelením mriežky na viacero podvrstiev [5]. V roku 1977 MAGNUSSON a GAYLORD dokázali, že Kogelnikova teória viazaných vln je rovnocenná modálnou teóriou ak nezanedbáme druhú deriváciu poľa a vyššie difrakčné rády, ako to predpokladal Kogelnik [6]. V roku 1981 rozšírili analýzu viazaných vln, a odvtedy hovoríme o rigoróznej analýze viazaných vln, ktorou sa zaoberáme aj v našej práci [7]. Metóda umožnila modelovať difrakciu elektromagnetickej vlny na mriežke s komplexnou permitivitou, s ľubovoľným tvarom profilu a pre ľubovoľný smer dopadu vlny [8]. V roku 1988 MOHARAM rozšíril RCWA pre dvojrozmerné periodické mriežky [9].

Ďalšie vylepšenie metódy RCWA priniesol v roku 1993 LI. Ukázal, že pomalá konvergencia difrakčnej efektivity pre TM polarizáciu je spôsobená nesprávnym rozvojom poľa a permitivity (resp. permeability) do Fourierovho radu. Navrhol správny rozvoj a ujasnil aj jeho matematickú podstatu známu dnes pod názvom *inverzné pravidlo* [10]. V poslednej dobe došlo k rôznym vylepšeniam metódy na základe transformácie súradnicovej sústavy. V roku 2002 GRANET zaviedol metódu adaptívneho rozlíšenia. Táto technika umožňuje lepšie rozlíšenie v oblasti nespojitosti mriežky, čím sa dosiahne lepšia konvergencia [11]. Používaním absorpčnej hraničnej podmienky namiesto periodickej je možnosť simulovať aj neperiodické štruktúry [12]. Kombinácia RCWA s Chandezonovou metódou (C-metóda) umožňuje modelovanie reliéfnej mriežky bez jej rozkúskovania na podvrstvy v smere šírenia vlny [13].



Obr. 1: Pôvodná RCWA odstraňuje z -ovú závislosť štruktúry jej rozkúskovaním na tenšie vrstvy (vľavo). C-metóda transformuje súradnicový systém do iného systému, kde je rozhranie rovné (vpravo).

Ciele dizertačnej práce

Ciele dizertačnej práce sú zhrnuté do nasledujúcich bodov:

- Štúdium šírenia elektromagnetickej vlny cez periodické štruktúry pomocou RCWA.
- Podrobný a všeobecný opis metódy pre dvojrozmerné periodickú štruktúru s ľubovoľným dopadom, ľubovoľnou polarizáciou dopadajúcej vlny, s komplexnou permitivitou a permeabilitou mriežky.
- Riešenie problému inverzie kvázisingulárnych matíc, ktoré vznikajú následkom exponenciálneho rastu evanescentných vln v numerickom programe.
- Vytvorenie numerického programu na základe metódy RCWA na výpočet difrakčnej účinnosti.
- Vyšetriť transmitanciu fotonického kryštálu s lineárnym defektom. Určiť disperzné spektrum defektu, ako vlnovodu.
- Pokúsiť sa určiť vplyv anizotropie na priepustnosť fotonického kryštálu s nepravidelným rozložením relatívnej permitivity.
- Identifikovať dôvod zvýšenej priepustnosti kovovej mriežky pre určité frekvencie dopadajúcej vlny.
- Vyšetriť difrakčné spektrum mriežky z metamateriálu.
- Určiť pôvod rezonancií v periodicky korugovanej tenkej vrstve.

Teoretický základ

Stručne predstavíme teóriu pre RCWA dvojrozmerné periodickej štruktúry. Základom teórie sú makroskopické Maxwellove rovnice.

$$\nabla \cdot \tilde{\varepsilon} \hat{\mathbf{E}} = \rho \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mu} \hat{\mathbf{H}} = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{E}} = -\frac{\partial \tilde{\mu} \hat{\mathbf{H}}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{H}} = \frac{\partial \tilde{\varepsilon} \hat{\mathbf{E}}}{\partial t} + \mathbf{J} \quad (4)$$

Predpokladáme, že prostredie je nenabité (neobsahuje voľné nosiče náboja, $\rho = 0$), izotropné (permitivita a permeabilita je skalárna veličina) a neobsahuje voľné prúdy ($\mathbf{J} = 0$). Ďalej predpokladáme, že sa elektromagnetické pole šíri v tvare monochromatických rovinných vln. RCWA je metóda vo frekvenčnej oblasti, preto pracujeme s komplexnými amplitúdami elektrického a magnetického poľa.

Princípom metódy RCWA je rozvoj funkcie elektrického (\mathbf{E}), magnetického poľa (\mathbf{H}), permitivity (ε), inverznej permitivity $\tilde{\varepsilon}$, permeability (μ) a inverznej permeability $\tilde{\mu}$ prostredia do Fourierovho radu. Oblasť mriežky je nekonečná, periodická v smere x a y s periódami p_x a p_y , preto aj tieto veličiny budú periodické s rovnakými periódami. Predpokladá sa, že mriežka v smere z je homogénna.

Polia $F = \{E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z\}$ sú rozvinuté v každej oblasti do Fourierovho radu ako

$$F(x, y, z) = \sum_{s,t} F_{s,t}(z) e^{ik_x^s x} e^{ik_y^t y} \quad (5)$$

kde k_x a k_y sú dané Floquetovou-Blochovou teorémou

$$k_x^s = k \sqrt{\varepsilon_1} \sin \varphi \cos \theta + \frac{2\pi}{p_x} s \quad (6)$$

$$k_y^t = k \sqrt{\varepsilon_1} \sin \varphi \sin \theta + \frac{2\pi}{p_y} t \quad (7)$$

a φ je uhol dopadu medzi osou z a vlnovým vektorom \mathbf{k} . Uhol θ je uhol medzi dopadovou rovinou a osou x . Veličiny $f = \{\varepsilon, \mu, \tilde{\varepsilon}, \tilde{\mu}\}$ z oblasti mriežky sú podobne rozvinuté do radu ako

$$f(x, y) = \sum_{m,n} f_{m,n} e^{i\frac{2\pi}{p_x} x m} e^{i\frac{2\pi}{p_y} y n} \quad (8)$$

Dosadením Fourierových radov do Maxwellových rovníc odvodíme sústavu diferenciálnych rovníc druhého rádu pre x -ové a y -ové zložky elektrického a magnetického poľa (ktoré závisia len od z) v tvare

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_x \\ \mathbf{F}_y \end{pmatrix} = -\mathbf{C} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_x \\ \mathbf{F}_y \end{pmatrix} \quad (9)$$

Matica \mathbf{C} zviaže jednotlivé rády vo vektoroch \mathbf{F}_x a \mathbf{F}_y . Odtiaľ pochádza názov metódy. Túto sústavu diferenciálnych rovníc riešime nezávisle v oblasti superstrátu (I), mriežky (G)

a substrátu (II). Riešenie v každej oblasti dostaneme zvlášť pre elektrické a magnetické pole ako

$$\mathbf{F}^I(z) = e^{i\mathbf{k}_z^I z} \mathbf{o} + e^{-i\mathbf{k}_z^I z} \mathbf{r} \quad (10)$$

$$\mathbf{F}^G(z) = \mathbf{Q}e^{-i\sqrt{\mathbf{L}}z} \mathbf{v}_1 + \mathbf{Q}e^{i\sqrt{\mathbf{L}}z} \mathbf{v}_2 \quad (11)$$

$$\mathbf{F}^{II}(z) = e^{i\mathbf{k}_z^{II} z} \mathbf{t} \quad (12)$$

kde \mathbf{o} je amplitúda dopadajúcej vlny, vektory \mathbf{r} (amplitúdy odrazených vln), \mathbf{t} (amplitúdy prepustených vln), \mathbf{v}_1 a \mathbf{v}_2 sú neznáme integračné konštanty. Vektory \mathbf{r} a \mathbf{t} obsahujú všetky difrakčné rády. Vektor \mathbf{k}_z predstavuje z -ovú zložku vlnového vektora v homogénnom prostredí (superstrát a substrát) definovanú ako

$$\mathbf{k}_z = \sqrt{\varepsilon\mu\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_x^2 - \mathbf{k}_y^2} \quad (13)$$

kde ε a μ charakterizuje dané prostredie. Matica \mathbf{L} je vektor vlastných hodnôt matice \mathbf{C} , matica \mathbf{Q} obsahuje vlastné vektory matice \mathbf{C} tak, aby platila rovnosť: $\mathbf{QL} = \mathbf{CQ}$.

Naším cieľom je vyjadriť vektory \mathbf{r} a \mathbf{t} pomocou hraničných podmienok (s rozhraním rovnobežné zložky vektora intenzity elektrického (\mathbf{E}) a magnetického (\mathbf{H}) poľa sa zachovávajú v jednotlivých prostrediach pri prechode), ktoré aplikujeme na rozhranie medzi superstrátom a mriežkou (v bode $z = 0$) a na rozhranie medzi mriežkou a substrátom ($z = d$):

$$\mathbf{F}^I(z = 0) = \mathbf{F}^G(z = 0) \quad (14)$$

$$\mathbf{F}^G(z = d) = \mathbf{F}^{II}(z = d) \quad (15)$$

Na sformulovanie algebraického problému si zvolíme metódu transfer matice, ktorá spája amplitúdy na jednej strane rozhrania (\mathbf{o} a \mathbf{r}) s amplitúdami na druhej strane rozhrania (\mathbf{t} a $\mathbf{0}$) [14]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{o} \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix} \quad (16)$$

Pri riešení používame renormalizáciu, aby sme obchádzali prípadné numerické nestability, ktoré vznikajú kvôli exponenciálne rastúcim evanescentným vlnám vo vnútri mriežky [15]. Keď sa štruktúra skladá z viacerých podvrstiev, potom transfer matica celej štruktúry je daná ako súčin transfer matic jednotlivých štruktúr.

$$\mathbf{M} = \prod_i \mathbf{M}_i \quad (17)$$

Keď už máme koeficienty \mathbf{r} a \mathbf{t} vyjadrené, difrakčnú účinnosť cez elektrické pole vyjadríme v tvare

$$\eta^r = \frac{\mathbf{k}_z^I}{\sqrt{\varepsilon_1\mu_1}k \cos \varphi} |\mathbf{r}|^2 \quad (18)$$

pre odrazené difrakčné rády, a

$$\eta^t = \frac{\sqrt{\mu_1}\mathbf{k}_z^{II}}{\sqrt{\varepsilon_1\mu_2}k \cos \varphi} |\mathbf{t}|^2 \quad (19)$$

pre prepustené difrakčné rády.

Výsledky dizertačnej práce

Numerický program

Na základe uvedenej metódy RCWA sme vytvorili numerický program (s názvom RawDog – rigorous analysis of wave diffraction on gratings), pomocou ktorého dokážeme určiť difrakčnú účinnosť rôznych periodických štruktúr. Program pracuje v prostredí MATLABu a je voľne dostupný na stránke <http://rawdogapp.weebly.com/> s podrobným manuálom na použitie. RawDog dokáže simulovať šírenie vlny cez nasledovné štruktúry:

- dvojnásobne periodická štruktúra (so štvorcovou a hexagonálnou vzorkou)
- jednonásobne periodická mriežka s ľubovoľným dopadom
- jednonásobne periodická mriežka s klasickým dopadom
- jednonásobne periodická anizotropná mriežka s náhodnými permitivitami
- striedajúce sa homogénne vrstvy (Braggovo zrkadlo)

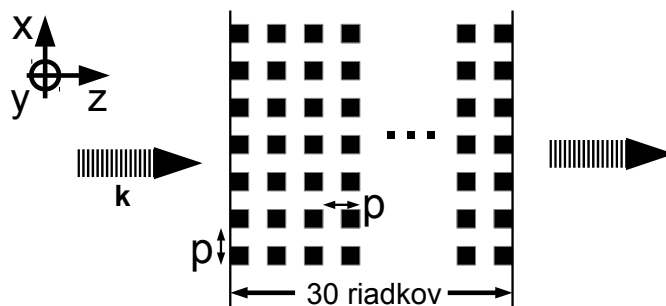
V programe môžeme zadať nasledovné parametre:

- počet módov Fourierovho radu (N)
- uhol polarizácie (ψ)
- uhol dopadu (φ)
- uhol roviny dopadu (θ)
- vlnová dĺžka (λ)
- súčiniteľ zaplnenia (q)
- hrúbka mriežky (d)
- komplexná permitivita a permeabilita
- preddefinovaná alebo vlastná disperzná závislosť materiálu mriežky

Navyše je možnosť definovať fotonickú štruktúru a pridať lineárny defekt do štruktúry. Program umožňuje uložiť si konfiguráciu parametrov a výsledkov.

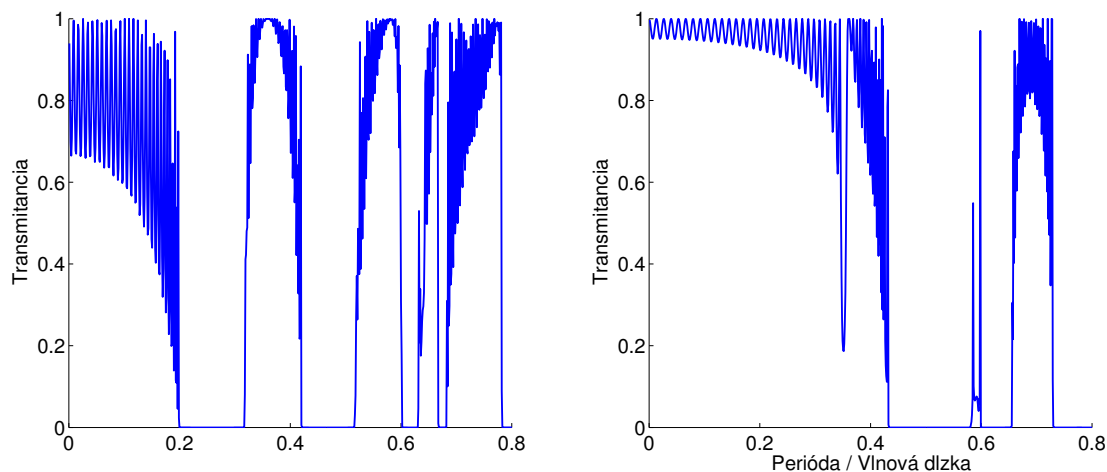
Fotonický kryštál s lineárnym defektom

Transmisné spektrum obyčajného pravidelného fotonického kryštálu vykazuje tzv. zakázané frekvenčné pásy, kde dopadajúca vlna nemôže prejsť cez kryštál, a preto sa úplne odrazí. Amplitúda vlny exponenciálne klesá v smere šírenia vlny. Pridaním lineárneho defektu pozdĺž kryštálu, vznikne v každom zakázanom páse frekvencia, s ktorou je už vlna schopná cez štruktúru prejsť. Táto frekvencia zodpovedá frekvencii vlastného módu štruktúry. Pre takúto frekvenciu sa pozdĺž lineárneho defektu môže šíriť elektromagnetická vlna. Na tomto princípe fungujú optické vlnovody z fotonických vlákien.



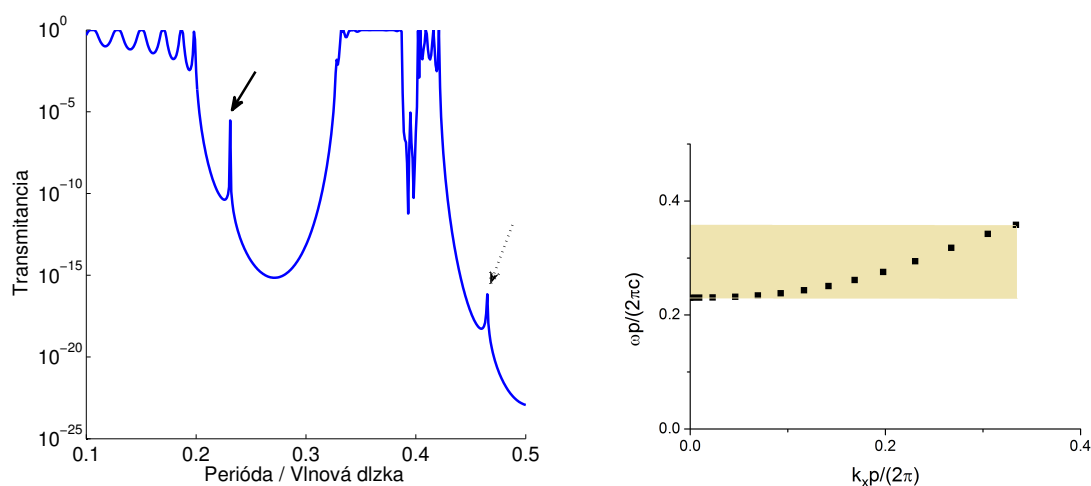
Obr. 2: Schéma fotonického kryštálu. Počet riadkov v smere šírenia vlny je 30.

Uvažujme pravidelný fotonický kryštál na Obr. 2. Relatívna permitivita kryštálu je 12, okolo tyčiek je vzduch, podobne nad a pod kryštálom. Transmittancia kolmého dopadu je znázornená na Obr. 3, kde vidíme zakázané pásy.



Obr. 3: Transmittancia fotonického kryštálu pre TE (vľavo) a TM (vpravo) polarizáciu.

Teraz modifikujeme predchádzajúci kryštál tak, že rozšírime homogénnu vrstvu v strede štruktúry zo šírky $p/2$ na $2p$. Tým vzniká lineárny defekt v smere x . Na Obr. 4 vľavo je transmittancia multého rádu danej štruktúry s defektom v logaritmickej škále pre TE polarizáciu a uhol dopadu $\varphi = 30^\circ$. Objaví sa rezonančná frekvencia v každom zakázanom páse. Pre rezonančnú frekvenciu transmittancia prudko stúpa, jednotková je v prípade symetrickej štruktúry (defekt sa nachádza v strede kryštálu). Šírka píku súvisí s počtom riadkov, pre hrubší kryštál je pík užší. Poloha píku závisí od šírky defektu pre daný uhol dopadu. Určením polohy rezonančnej frekvencie pre rôzne uhly dopadu vlny, môžeme zostrojiť disperznú závislosť defektu vo fotonickom kryštáli pre prvý vedený mód TE polarizovanej vlny (Obr. 4 vpravo).



Obr. 4: Vľavo: vo vnútri zakázaného pásu vzniká jednotková priepustnosť pre prvú (šípka) a druhú (prerušovaná šípka) vlastnú frekvenciu defektu. Vpravo: disperzný diagram prvého vedeného módu defektu. Na vodorovnej osi je uhol dopadu $k_x = k \sin \varphi$. Vyznačený je zakázaný pás.

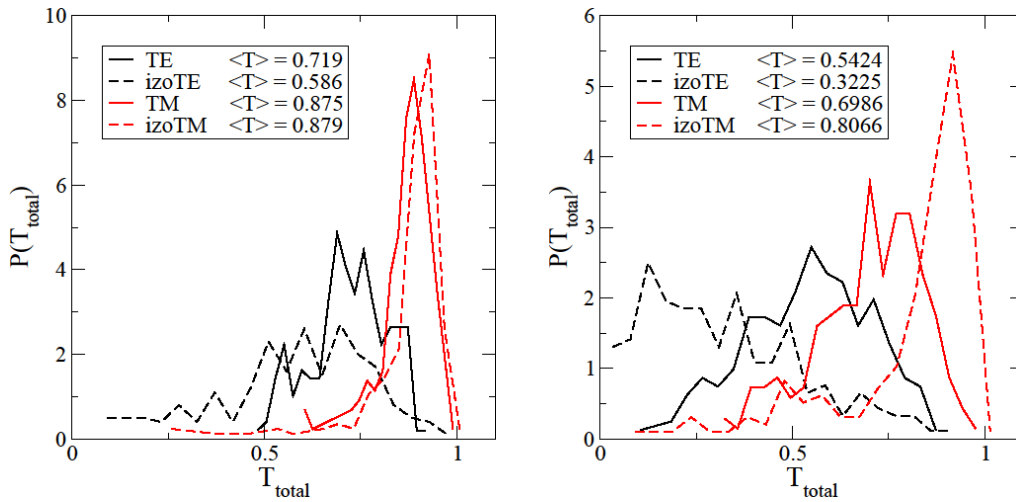
Náhodná anizotropná štruktúra

V neusporiadanom fotonickom kryštáli nastáva lokalizácia elektromagnetických vln. V dôsledku rozptylov elektromagnetickej vlny na náhodne rozmiestnených tyčkách (resp. na tyčkách s fluktujúcou permitivitou) sa vlna prestane v kryštáli šíriť, zostane lokalizovaná. V numerických výpočtoch sa lokalizácia prejaví exponenciálnym poklesom koeficientu prechodu pri narastaní hrúbky vzorky. Tento jav je analogický lokalizácii elektrónov v 2D neusporiadanej štruktúre [16]. V 2D elektrónových modeloch však existuje možnosť, ako sa lokalizácii vyhnúť: ak elektrón môže v procese rozptylu meniť orientáciu svojho spinu, zmení sa fyzikálna symetria modelu a systém zostáva, aspoň pre dostatočne slabú neusporiadanosť, delokalizovaný [17]. Podobnosť s elektrónovými modelmi nás vedie k predpokladu, že v neusporiadanom fotonickom kryštáli by zmena polarizácie vlny mohla, podobne ako zmena spinu v elektrónových modeloch, viesť k delokalizácii. Pokúsili sme sa tento predpoklad numericky overiť.

Nech sa elementárna bunka štruktúry skladá z 11-tych tyčiek, ktoré majú náhodnú relatívnu permitivitu $\epsilon_x = \epsilon_y$ z intervalu (4, 12) a $\epsilon_{xy} = 4$ definované tenzorom

$$\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_x & \epsilon_{xy} & 0 \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (20)$$

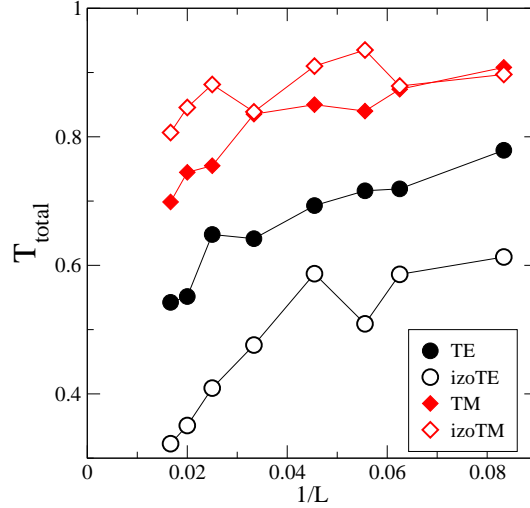
V simuláciách sme uvažovali periódu $p = 200$ nm a vlnovú dĺžku 1888 nm kolmo dopadajúcej vlny. Táto vlnová dĺžka je dostatočne veľká na to, aby nedopadla do zakázaného pásu.



Obr. 5: Štatistické rozdelenie transmitancií pre $L = 16$ (vľavo) a $L = 60$ (vpravo) riadkov.

Obr. 5 ukazuje, že koeficient prechodu je štatistická veličina s pravdepodobnostným rozdelením, ktorého tvar závisí od dĺžky vzorky L . Transmitancia bola vygenerovaná pre 200 náhodných štruktúr.

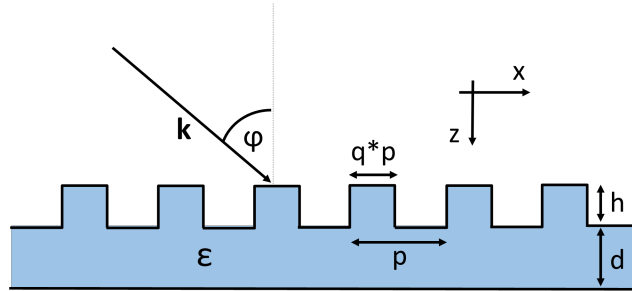
Na Obr. 6 vidíme závislosť celkovej transmitancie s najväčšou pravdepodobnosťou T_{total} (súčet transmitancií všetkých rádo) od počtu riadkov L pre rôzne polarizácie (TE a TM) dopadajúcej vlny zvlášť pre izotropny ($\epsilon_{xy} = 0$) a anizotropny ($\epsilon_{xy} = 4$) prípad. Výsledky naznačujú, že koeficient prechodu sa zvýši pre TE polarizáciu, ale je nižší pre TM polarizáciu. Nenašli sme ale zatiaľ jednoznačný opis, ako anizotropia ovplyvňuje prechod vln. Dôvodom je veľká numerická náročnosť výpočtov.



Obr. 6: Závislosť transmitancie od hrúbky (L) anizotropného fotonického kryštálu.

Vlastné rezonancie korogovanej dielektrickej vrstvy

Je známe, že transmisné spektrum tenkej dielektrickej vrstvy vykazuje Fabry-Perotove interferenčné minimá a maximá. Keď tenkú vrstvu periodicky upravíme v smere x a/alebo y (viď Obr. 7), objavujú sa vo frekvenčnej závislosti transmisie pre určité frekvencie rezonančné zákmity (Obr. 8), za ktoré sú zodpovedné vlastné módy korogovanej mriežky, excitované dopadajúcou vlnou.



Obr. 7: Tenká vrstva s relatívnou permitivitou $\varepsilon = 4$ a hrúbkou $d = 1000$ nm je periodicky korogovaná s $p = 260$ nm. Hĺbka vrypov je $h = 10$ nm.

Jednoduchý model vlastných rezonančných módov vychádza z disperzného vzťahu vedenej vlny v tenkej homogénnej vrstve [18]. Vedená vlna vo vnútri tenkej vrstvy s hrúbkou d sa šíri v smere z so zložkou vlnového vektora k_z , pričom vonku je vlna evanescentná so zložkou κ_z v smere z . Pre TE polarizáciu je medzi nimi vzťah

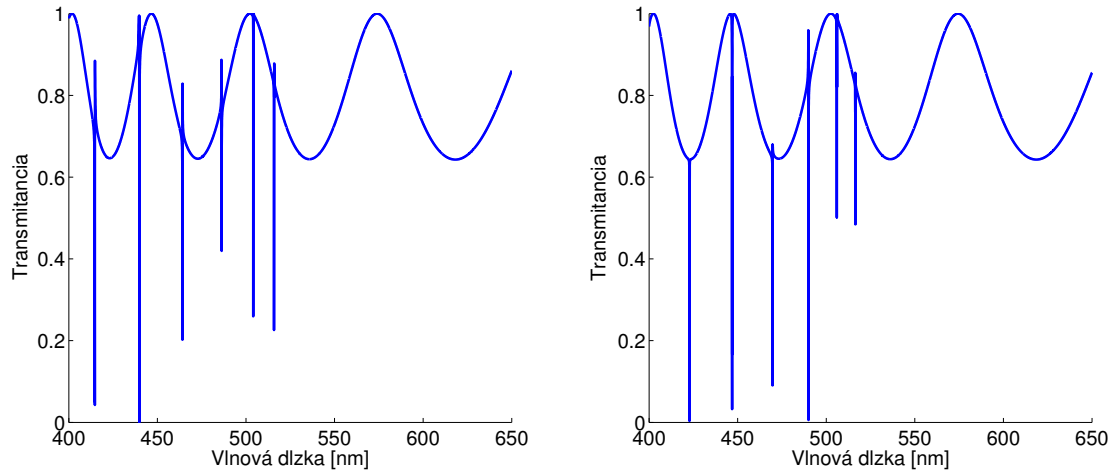
$$\frac{k_z}{\kappa_z} = \tan \frac{\kappa_z d}{2} \quad (21)$$

pre symetrické módy, a

$$\frac{\kappa_z}{k_z} = -\cot \frac{\kappa_z d}{2} \quad (22)$$

pre antisymetrické módy. Symetrický mód obsahuje nepárny násobok polvlnovej dĺžky, antisymetrický mód obsahuje párny násobok polvlnovej dĺžky vlny. Pre TM polarizáciu majú rovnice tvar

$$\frac{\varepsilon k_z}{\kappa_z} = \tan \frac{\kappa_z d}{2} \quad (23)$$



Obr. 8: Transmittancia uvedenej štruktúry pre TE (vľavo) a TM (vpravo) polarizáciu. Rezonančné zákmity v spektre sú uvedené v Tabuľke 2.

a

$$\frac{\kappa_z}{\varepsilon k_z} = -\cot \frac{\kappa_z d}{2} \quad (24)$$

Vyjadríme z -ové zložky ako

$$k_z^2 = \varepsilon k^2 - k_x^2 \quad (25)$$

a

$$\kappa_z^2 = k_x^2 - k^2 \quad (26)$$

kde k_x je dané ako

$$k_x = k \sin \varphi + \frac{2\pi}{p} s \quad (27)$$

Pomocou jednoduchého modelu vypočítame rezonančné vlnové dĺžky a porovnáme ich s hodnotami, ktoré sme získali z numerického výpočtu (Tab. 2).

Tab. 2: Porovnanie prvých šiestich vlastných módov z teórie a zo simulácie (Obr. 8). Hodnoty sú v nanometroch.

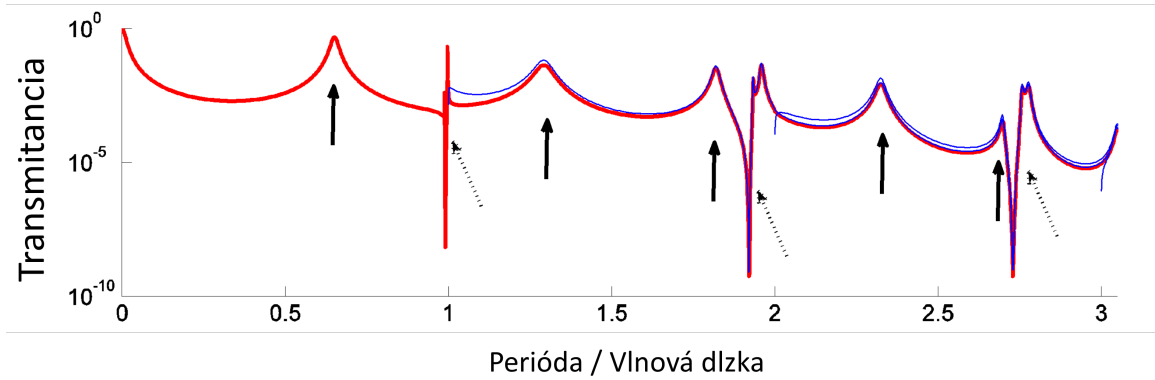
m	RCWA TE	Teória TE	RCWA TM	Teória TM
1	516.4	516.5	515.9	515.9
2	505.9	506.0	504.1	504.0
3	489.9	490.0	486.3	486.0
4	469.6	469.5	464.2	464.0
5	446.8	446.5	439.8	439.5
6	422.7	422.5	414.7	414.0

Zvýšená transmitancia kovovej mriežky

Na Obr. 9 je znázornené transmisné spektrum tenkej kovovej mriežky (z Obr. 10) s parametrami: $p = 1000$ nm, $d = 300$ nm, $h = 10$ nm. Dopad je kolmý, TM polarizácia. Relatívna permitivita mriežky je disperzná a daná rovnicou

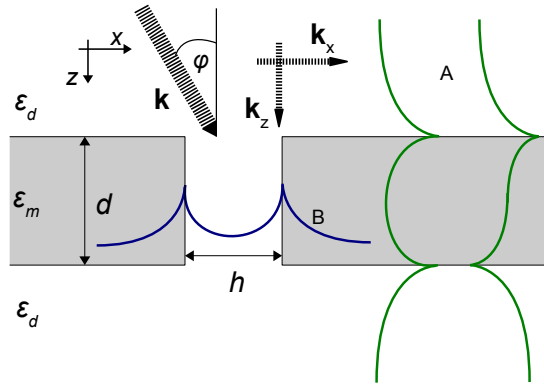
$$\varepsilon_m(f) = 1 - \frac{f_p^2}{f^2 + if\gamma} \quad (28)$$

kde $f_p = 2147$ THz je plazmónová frekvencia a $\gamma = 5$ THz je koeficient útlmu.



Obr. 9: Transmitancia kovovej mriežky. Pozoruhodné sú Fanove rezonančné zákmity (pre-rušovaná šípka) a zvýšená priepustnosť charakteru Fabry-Perot (šípka).

Pre niektoré frekvencie pozorujeme zvýšenú priepustnosť typu Fabry-Perot alebo rezonančné zákmity typu Fanových rezonancií (Obr. 9). Ukázali sme, že za tieto javy sú zodpovedné povrchové plazmóny, ktoré sa šíria buď pozdĺž mriežky na povrchu (Obr. 10 A) alebo vo vnútri medzery naprieč mriežkou (Obr. 10 B).



Obr. 10: Tri typy plazmónov sú excitované: priečny plazmón (B), symetrický (A vľavo) a antisymetrický (A vpravo) plazmón.

Pozdĺžny plazmón, ktorý sa šíri pozdĺž mriežky na povrchu mriežky, je opísaný disperzným vzťahom pre tenkú vrstvu

$$\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_d} = -\frac{\kappa_z^m}{\kappa_z^d} \tanh \frac{\kappa_z^m d}{2} \quad (29)$$

pre symetrický plazmón a

$$\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_d} = -\frac{\kappa_z^m}{\kappa_z^d} \coth \frac{\kappa_z^m d}{2} \quad (30)$$

pre antisymetrický plazmón, kde

$$(\kappa_z^m)^2 = k_x^2 - \varepsilon_m k^2 \quad (31)$$

$$\left(\kappa_z^d\right)^2 = k_x^2 - \varepsilon_d k^2 \quad (32)$$

S rozhraním rovnobežná zložka vlnového vektora je daná rovnicou

$$k_x = k \sin \varphi + m \frac{2\pi}{p}, \quad m = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (33)$$

Z týchto poznatkov môžeme určiť rezonančné frekvencie pozdĺžneho plazmónu a porovnať s numerickými výsledkami (Tab. 3).

Priečny plazmón, ktorý sa šíri cez mriežky, je daný disperzným vzťahom pre tenkú vrstvu

$$\frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m} = -\frac{\kappa_x^d}{\kappa_x^m} \tanh \frac{\kappa_x^d h}{2} \quad (34)$$

pre symetrický plazmón a

$$\frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m} = -\frac{\kappa_x^d}{\kappa_x^m} \coth \frac{\kappa_x^d h}{2} \quad (35)$$

pre antisymetrický plazmón, kde

$$(\kappa_x^m)^2 = k_z^2 - \varepsilon_m k^2 \quad (36)$$

$$\left(\kappa_x^d\right)^2 = k_z^2 - \varepsilon_d k^2 \quad (37)$$

kde z -ová zložka vlnového vektora spĺňa podmienku Fabry-Perot rezonátora

$$k_z = \frac{\pi}{d} m, \quad m = 1, 2, \dots \quad (38)$$

Z týchto poznatkov môžeme určiť rezonančné frekvencie priečného plazmónu a porovnať ich s numerickými výsledkami (Tab. 3).

Tab. 3: Porovnanie hodnôt získaných z numerickej simulácie (Obr. 9) s hodnotami z teórie.

m	Pozdĺžny p.	RCWA	Priečny p.	RCWA
1	0.99	0.99	0.70	0.65
2	1.92	1.92	1.36	1.29
3	2.73	2.73	1.93	1.82
4	3.33	3.38	2.34	2.32
5	3.86	3.85	2.79	2.70

Záver

Cieľom predkladanej práce bol opis numerickej metódy RCWA, pomocou ktorej sme modelovali šírenie elektromagnetickej vlny cez periodické štruktúry. Najprv sme rekapitulovali dejiny metódy. Porovnali sme ju s inými známymi numerickými modelmi. Predviedli sme jej silné a slabé stránky.

Predložili sme detailný popis metódy pre dvojnásobne periodickú štruktúru s ľubovoľným dopadom, jednonásobne periodickú štruktúru s ľubovoľným a klasickým dopadom. Na simuláciu štruktúry s viacerými vrstvami sme používali maticu prechodu. Numerickej nestabilitu inverzie matice, ktorá obsahuje exponenciálne rastúce evanescentné vlny, sme vyriešili renormalizačnou technikou. Prezentovali sme metódu pre anizotropnú mriežku s náhodným rozložením relatívnej permitivity.

Na základe uvedenej metódy sme vytvorili a implementovali numerický program na výpočet difrakčnej účinnosti periodických štruktúr. Tento program je schopný simulovať šírenie (prechod a odraz) vlny cez štruktúru s meniacimi sa parametrami mriežky a dopadajúcej vlny. Program je voľne dostupný na internete.

Pomocou nášho numerického programu sme analyzovali rôzne štruktúry a fyzikálne problémy. Dokázali sme existenciu zakázaných pásov vo fotonickom kryštáli. Identifikovali sme rezonančné frekvencie lineárneho defektu vo vnútri kryštálu. Zostrojili sme disperznú závislosť vlastného rezonančného módu lineárneho defektu.

Demonštrovali sme zvýšenú priepustnosť kovovej mriežky s pravidelnými otvormi. Vysvetlili sme pôvod tohto javu a dokázali sme, že efekt je výsledkom plazmónových rezonancií – pozdĺžneho plazmónu, ktorý sa šíri na povrchu mriežky a priečneho plazmónu, ktorý sa šíri cez vzduchové otvory cez mriežky. Pozorovali sme plazmónové rezonancie aj v prípade mriežky z metamateriálu.

Študovali sme fotonický kryštál s anizotropnou relatívnou permitivitou. Vyšetřili sme, ako sa mení priepustnosť fotonického kryštálu s náhodným rozdelením relatívnej permitivity v prítomnosti anizotropie.

Prezentovali sme transmisné spektrum periodicke korugovanej tenkej vrstvy. Ukázali sme, že za vzniknuté rezonančné zákmy sú zodpovedné vlastné módy tenkej vrstvy.

Literatúra

- [1] RAYLEIGH, L.: On the dynamical theory of gratings, *Proc. Royal Soc. London A* **79**, 399 (1907)
- [2] BURCKHARDT, C. B.: Diffraction of a plane wave at a sinusoidally stratified dielectric grating, *J. Opt. Soc. Am.* **56**, 1502 (1966)
- [3] KOGELNIK, H.: Coupled wave theory for thick hologram gratings, *Bell Syst. Tech. J.* **48**, 2909 (1969)
- [4] KASPAR, F. G.: Diffraction by thick, periodically stratified gratings with complex dielectric constant, *J. Opt. Soc. Am.* **63**, 37 (1973)
- [5] PENG, S. T.; TAMIR, T.; BERTONI, H. L.: Theory of periodic dielectric waveguides, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **MTT-23**, 123 (1975)
- [6] MAGNUSSON, R.; GAYLORD, T. K.: Equivalence of multiwave coupled-wave theory and modal theory for periodic-media diffraction, *J. Opt. Soc. Am.* **68**, 1777 (1978)
- [7] MOHARAM, M. G.; GAYLORD, T. K.: Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction, *J. Opt. Soc. Am.* **71**, 811 (1981)
- [8] MOHARAM, M. G.; GAYLORD, T. K.: Diffraction analysis of dielectric surface-relief grating, *J. Opt. Soc. Am.* **72**, 1385 (1982)
- [9] MOHARAM, M. G.: Coupled wave analysis of two dimensional dielectric gratings, *Holographic optics: design and applications* **883**, 8 (1988)
- [10] LI, L.: Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures, *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 1870 (1996)
- [11] GRANET, G.: Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution, *J. Opt. Soc. Am. A* **16**, 2510 (1999)
- [12] HUGONIN, J. P.; LALANNE, P.: Perfectly matched layers as nonlinear coordinate transforms: a generalized formalization, *J. Opt. Soc. Am. A* **22**, 1844 (2005)
- [13] BISCHOFF, J.: Improved diffraction computation with a hybrid C-RCWA-method, *Proc. SPIE* **7272** (2009)
- [14] PENDRY, J. B.: Photonic band structures, *J. Mod. Optics* **41**, 209 (1994)
- [15] PENDRY, J. B.; MACKINNON, A.; ROBERTS, P. J.: Universality classes and fluctuations in disordered systems, *Proc. Roy. Soc. Mathematical and Physical Sciences* **437**, 67 (1992)
- [16] SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N.; GREST, G. S.; COHEN, M. H.: Existence of Anderson localization of classical waves in a random two-component medium, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 575 (1989)
- [17] KRAMER B.; MACKINNON, A.: Localization: theory and experiment, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993)
- [18] MARKOŠ, P.; SOUKOULIS, C. M.: Wave propagation: from electrons to photonic crystals and left-handed materials, *Princeton University Press* (2008)

Publikačná činnosť

Vedecké práce v karentovaných časopisoch:

- KAJTÁR, G.; MARKOŠ, P.: Transmission properties of one-dimensional metallic and left-handed material gratings, *Opt. Commun.* **313**, 382 (2014)

Publikované príspevky na vedeckých konferenciách:

- KAJTÁR, G.; MARKOŠ, P.: The role of surface plasmon resonance in enhanced transmission through metallic gratings, *INTERNATIONAL SCHOOL OF ATOMIC AND MOLECULAR SPECTROSCOPY: Nano-structures for optics and photonics*, publ. Springer (in press) (2014)
- KAJTÁR, G.: Analysis of periodic structures using RCWA, *APCOM 2012. Applied Physics of Condensed Matter: Proceedings of the 18th International Conference*, publ. STU Bratislava ISBN 978-80-227-3720-3 (2012)
- KAJTÁR, G.: Analysis of 2D photonic crystals with linear defect using RCWA, *14th Conference of Doctoral Students – ELITECH'12*, publ. STU Bratislava ISBN 978-80-227-3705-0 (2012)

Príspevky na vedeckých konferenciách:

- KAJTÁR, G.; MARKOŠ, P.: Analysis of diffraction on periodic structures using RCWA, *9th ETOPIIM – Electrical, Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media* (2012)
- KAJTÁR, G.; MARKOŠ, P.: Analysis of diffraction on periodic structures using RCWA, *5th International Workshop on Theoretical and Computational Nanophotonics* (2012)
- KAJTÁR, G.; DRŽÍK, M.; CHLPÍK, J.: Analysis of diffraction on periodic structures using RCWA, *4th International Workshop on Theoretical and Computational Nanophotonics – TACONA* (2011)

Summary

In this thesis, we presented a comprehensive description of the rigorous coupled wave analysis (RCWA). First, we briefly summarized the history of the method. We compared RCWA with other numerical methods and listed its advantages and drawbacks.

Detailed documentation of the model was given for double-periodic structures with arbitrary mounting, single-periodic structures with conical and classical mounting. We used a transfer matrix approach to deal with multilayered structures. In order to avoid numerical instabilities which come with inversion of matrices containing exponentially growing evanescent waves, we applied a renormalization method. We also presented a rigorous analysis of wave propagation through anisotropic lamellar gratings with random distribution of relative permittivity.

Based on the presented theory, we developed and implemented a numerical program for diffraction efficiency calculation of periodic structures. The program is capable to simulate wave propagation through structures with variable parameters – such as relative complex permittivity, relative complex permeability, spatial period, grating thickness, polarization state, angle of incidence and all the others. This program, entitled RawDog, is free for download.

Using our numerical program we analyzed various structures and physical problems. We investigated the propagation of electromagnetic wave through a dielectric photonic crystal and proved the existence of photonic band gaps. We identified the resonant frequencies of a linear cavity inside the photonic crystal and constructed the dispersion diagram of a single guided mode based on the angle of incidence.

We calculated transmission properties of a simple metallic grating and observed two types of enhanced transmissions. We identified these transmission peaks as a result of plasmonic resonances – there is a plasmon propagating along the metallic grating interface and a plasmon propagating through the gaps inside the grating. Similar resonances were observed for lamellar grating made of left-handed material.

Photonic crystal with anisotropic relative permittivity was studied. It was observed that anisotropy closes the band gaps of a regular photonic crystal. If the photonic crystal is isotropic but relative permittivity of the rods is chosen randomly, the transmittance becomes lower for thicker crystals. We examined how the combination of these two effects (anisotropy and disorder) affected the transmittance spectrum. We concluded that the anisotropy does not significantly improve the transmittance of disordered photonic crystal for thicker structures.

We presented transmittance calculation for a periodically corrugated homogeneous slab, where resonant peaks were observed for certain frequencies. These frequencies can be explained as eigenmodes of the given structure. We derived analytically these frequencies from the theory of guided modes of a slab.