

На правах рукописи

Щербаков Алексей Александрович

**Расчет рассеяния света в плоско-слоистых  
диэлектрических средах, содержащих микро- и  
наночастицы**

01.04.03 – Радиофизика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор  
Гладун Анатолий Деомидович

Научный консультант: кандидат физико-математических наук  
Тищенко Александр Валентинович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
Климов Василий Васильевич,  
кандидат физико-математических наук, доцент  
Лындин Николай Михайлович

Ведущая организация: федеральное государственное образовательное автономное учреждение высшего профессионального образования Московский технический университет связи и информатики

Защита состоится « 13 » марта 2012 года в 14-00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.156.03 при федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)», расположенном по адресу: 141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МФТИ.

Автореферат разослан

« \_\_\_\_ » февраля 2012 года.

Ученый секретарь диссертационного совета

Арсенин А. В.

## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** Активные исследования в области органической фотоэлектроники, начавшиеся в начале 90-х годов прошлого века, в настоящее время привели к созданию органических светодиодов (ОСИД), способных конкурировать с неорганическими аналогами. Сейчас ОСИД–дисплеи малого размера применяются в бытовой технике и сотовых телефонах, существуют декоративные элементы освещения, основанные на ОСИД, а массовое производство органических телевизоров и осветительных приборов анонсируется на ближайшие 5 лет. При этом перед производителями еще стоят важные задачи продления срока жизни ОСИД, синтеза и применения новых функциональных материалов, а также повышения внешней эффективности диодов. Следует отметить, что максимизация эффективности особенно важна для осветительных приложений, где основными конкурентами ОСИД являются неорганические светодиоды.

Как правило, ОСИД представляет собой плоскую многослойную структуру, пример которой приведен на Рис. 1а. Эффективность ОСИД определяется как отношение числа эмитированных фотонов к числу электронов, прошедших через диод, либо, как отношение мощности излучаемого света к электрической мощности, потребляемой диодом. При этом выделяют два существенно различных канала потерь мощности. Первый связан с безызлучательной рекомбинацией экситонов в электролюминесцентном слое, и переходе их энергии возбуждения в тепловые колебания. Второй канал определяется долей оптического излучения, выходящего из подложки, на которую нанесен ОСИД, в воздух. В настоящее время за счет использования фосфоресцирующих материалов удается создавать ОСИД с внутренней эффективностью, близкой к 100%. Поэтому, основные усилия по решению проблемы повышения эффективности ОСИД направлены на улучшение вывода оптического излучения из многослойных структур светодиодов.

Наиболее перспективным и приемлемым способом повышения эффективности вывода излучения из ОСИД структур представляется введение дополнительно рассеивающего слоя между прозрачным электродом и подложкой (Рис. 1б). Чтобы подобрать оптимальные параметры рассеивающих слоев для конкретных ОСИД, необходимо иметь возможность моделировать их оптические свойства. Точность такого моделирования должна быть не хуже процента, поскольку полный ожидаемый положительный эффект от использования рассеивающих слоев составляет величину порядка 10%. При этом уравнения Максвелла должны решаться строго, поскольку модель должна учитывать рассеяние затухающих

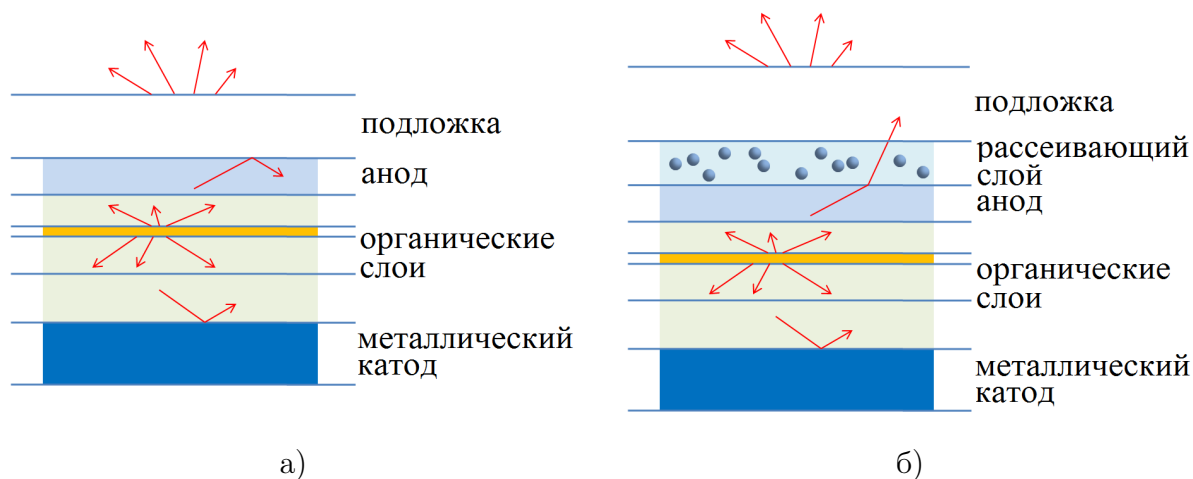


Рис. 1. Примеры ОСИД-структур: а) без рассеивающего слоя и б) с рассеивающим слоем.

волн и изменения полей в ближней зоне излучения в средах со значительным контрастом относительного показателя преломления и характерными неоднородностями порядка длины волны распространяющегося излучения. Несмотря на значительный интерес к задаче моделирования ОСИД с рассеивающими слоями, до настоящего времени не было предложено достаточно достоверных методов ее решения.

**Цель диссертационной работы** состоит в разработке точного метода расчета рассеяния и дифракции света в плоско-слоистых пространственно неоднородных диэлектрических средах, вычислительная сложность которого линейно зависит от числа узлов расчетной сетки; написании программ ЭВМ на основе этого метода; применении метода для точного моделирования внешней эффективности органических светоизлучающих диодов с рассеивающими слоями.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи: вывод аналитических выражений компонент S-матрицы неоднородного плоского слоя; вывод неявного уравнения, описывающего дифракцию электромагнитных волн в неоднородных плоско-слоистых периодических средах; разработка численного метода для решения полученных уравнений; написание и отладка программ ЭВМ, реализующих разработанный численный метод; исследование сходимости численного метода и сравнение результатов расчетов модельных задач с известными решениями и альтернативными методами; проведение численного моделирования рассеяния распространяющихся и затухающих электромагнитных волн на плоских пространственно неоднородных диэлектрических слоях; разработка численного метода для расчета оптических параметров ОСИД; проведение расчетов внешней

эффективности многослойных структур ОСИД с рассеивающими слоями.

**Научная новизна и практическая значимость.** Все выносимые на защиту результаты являются новыми. Впервые представлен численный метод расчета рассеяния и дифракции света в плоско-слоистых диэлектрических структурах, обладающий линейной сложностью относительно числа узлов расчетной сетки, и предоставляющий возможность излучения большого разнообразия типов структур. Проведено точное моделирование спектральной мощности излучения ОСИД с рассеивающим слоем, содержащим диэлектрические частицы с диаметрами порядка нескольких сотен нанометров и контрастом показателя преломления  $\sim 0.1$ .

Изложенные в диссертации методы и разработанные на их основе программы ЭВМ могут быть использованы для расчета и оптимизации оптических свойств органических светодиодов, фотоэлементов, диэлектрических фотонных кристаллов, а также для моделирования дифракции электромагнитного излучения оптического диапазона на диэлектрических решетках, высокоапертурных дифракционных элементах сложной формы и фотомасках для проекционной оптической литографии.

**На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:**

1. Аналитические выражения компонент S-матриц бесконечно тонкого плоского подслоя голографической или профилированной дифракционной решетки;
2. Система алгебраических уравнений, описывающих дифракцию электромагнитных волн светового диапазона на голографических и профилированных дифракционных решетках, периодических в одном или двух направлениях, с произвольным контрастом и пространственным распределением диэлектрической проницаемости;
3. Точный численный метод расчета дифракции электромагнитных волн светового диапазона на голографических и профилированных дифракционных решетках, периодических в одном или двух направлениях, с произвольным контрастом и пространственным распределением диэлектрической проницаемости, вычислительная сложность и требования к памяти которого линейно зависят от числа узлов расчетной сетки в одномерном координатном и двумерном сопряженном пространствах;
4. Численный метод расчета оптических параметров ОСИД, состоящих из любого числа слоев, с помощью S-матриц, позволяющий получать спектральную и угловую мощность излучения ОСИД, а также рассчитывать потери в любой части многослойной структуры ОСИД.

5. Увеличение внешней эффективности ОСИД на несколько процентов по абсолютной величине за счет применения диэлектрического рассеивающего слоя, представляющего собой однородную матрицу, содержащую сферические диэлектрические частицы с диаметрами порядка нескольких сотен нанометров, контрастом показателя преломления  $\sim 0.1$  и концентрацией  $\sim 0.1$ .

**Апробация работы.** Диссертационная работа была выполнена частично в рамках сотрудничества с фирмами Kodak и OSRAM Opto Semiconductors.

Основные результаты диссертации были представлены в виде 9-ти устных докладов и 3-х постерных презентаций на следующих конференциях:

1. 49-я Научная конференция МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук», Долгопрудный, Россия, 24-25 ноября, 2006;
2. 9-th International Conference on Near-field Optics, Lausanne, Switzerland, 10-15 September 2006.
3. 50-я Научная конференция МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук», Долгопрудный, Россия, 23-27 ноября, 2007;
4. XIII International Conference «Laser Optics», St. Petersburg, Russia, 23-28 June, 2008;
5. Mie Theory 1908-2008. Present developments and interdisciplinary aspects of light scattering, Martin Luther University, Halle, Germany, 15-17 September 2008.
6. XVII International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling, Jena, Germany, 17-18 April, 2009;
7. Progress in Electromagnetic Research Symposium, Moscow, Russia, 18-21 August, 2009;
8. The 26<sup>th</sup> Annual Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics, Tampere, Finland, 26-29 April;
9. 18<sup>th</sup> International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling, Cambridge, United Kingdom, 9-10 April, 2010;
10. Solid State and Organic Lightening, Karlsruhe, Germany, 21-24 June, 2010;
11. Days on Diffraction'11, St. Petersburg, Russia, 30 May - 3 June, 2011;
12. Electromagnetic and Light Scattering XIII, Taormina, Italy, 26 - 30 September, 2011;

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 14 печатных работах, из них 5 статей в рецензируемых журналах, включая 4 из списка ВАК, и 9 статей в рецензируемых сборниках трудов международных конференций.

**Личный вклад автора.** Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, библиографии и четырех приложений. Общий объем диссертации 107 страниц, из них 88 страниц текста, включая 34 рисунка и 4 таблицы. Список литературы включает 177 источников.

**Благодарности.** Работа была выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации и Российского фонда фундаментальных исследований.

## Содержание работы

**Во Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, дан список конференций, где были представлены результаты работы, а также указаны выносимые на защиту положения.

**Первая глава** посвящена обзору литературы по проблеме расчета рассеяния и дифракции электромагнитного излучения светового диапазона в плоско-слоистых пространственно неоднородных средах. В ней перечислены и коротко охарактеризованы существующие точные методы, принципиально применимые для решения поставленных задач, а также описаны использованные в диссертационной работе подходы.

Одна из основных задач, решаемых в диссертации — это разработка точного метода расчета рассеяния и дифракции света, основанного на уравнениях Максвелла, в плоско-слоистых диэлектрических пространственно неоднородных средах с толщинами слоев и характерными размерами неоднородностей порядка световых длин волн ( $h_i \sim \lambda, i = 0 \dots N_S$ ) и произвольными показателями преломления  $n_i = \sqrt{\varepsilon_i}$  (обозначения приведены на Рис. 2). Задачу можно разделить на несколько подзадач, включающих представление излучения источников, расчет распространения излучения в однородных плоско-слоистых структурах, и расчет рассеяния и дифракции в неоднородных слоях.

В первом параграфе рассматриваются подходы к изучению однородных многослой-

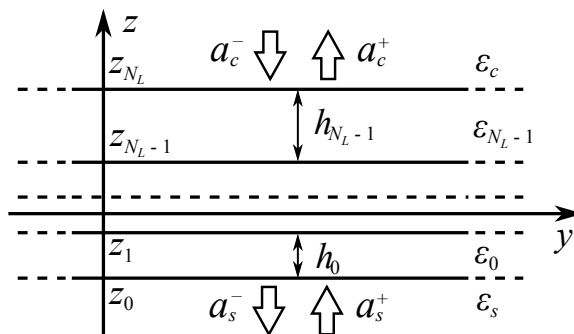


Рис. 2. Схематическое изображение планарной многослойной структуры.

ных структур. Указано, что в диссертационной работе рассматривается два типа источников — бесконечно удаленные, излучение которых приходит к структуре в виде плоских волн и люминесцентные источники, расположенные внутри структуры или вблизи нее в ближней зоне излучения. Второй тип источников в классической электродинамике принято моделировать с помощью дипольного приближения, применимость которого была продемонстрирована во многих работах по изучению люминесценции молекул [1]. Далее отмечено, что основными инструментами для численного моделирования многослойных структур являются S- и T-матрицы. Сделан вывод о том, что S-матрицы являются наиболее предпочтительными для разрабатываемых численных методов. Для набора плоских гармоник, распространяющихся в направлении к некоторой структуре и от нее (см. Рис. 2), S-матрица определяется как

$$\begin{pmatrix} a_s^- \\ a_c^+ \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_s^+ \\ a_c^- \end{pmatrix}. \quad (1)$$

В параграфе 1.1 также приведен ряд аналитических формул, касающихся применения S-матриц в численных расчетах. S-матрицы однородных слоев и границ разделов различных сред имеют весьма простой вид, однако, при переходе к сложным пространственно неоднородным средам элементы S-матрицы необходимо рассчитывать численно.

Во втором параграфе описываются существующие точные методы решения уравнений Максвелла, которые возможно применить к расчету S-матриц неоднородных слоев. Эти методы можно классифицировать на конечно-разностные, конечно-элементные, методы интегральных уравнений, модальные и гибридные. Дано краткое описание методов и указаны их недостатки применительно к решаемым в диссертации задачам. На основании этого анализа обоснована необходимость в разработке новых быстрых методов, точно решающих уравнения Максвелла.



Третий параграф посвящен описанию метода обобщенных источников [2, 3], который стал основой теоретических исследований данной работы. Метод представляет собой абстрактную схему решения электродинамических задач. Его можно описать как последовательность двух шагов. Первый шаг заключается в выделении некоторой базисной среды (характеризующейся пространственным распределением диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_b(\mathbf{r})$ ), допускающей точное аналитическое решение электродинамических уравнений для заданного распределения токов. На втором шаге различия между исходной и базисной структурами необходимо представить в виде обобщенных токов

$$\mathbf{J}_b = -i\omega(\varepsilon - \varepsilon_b)\mathbf{E} \quad (2)$$

на основании чего записывается неявное уравнение

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{inc} + \aleph [-i\omega(\varepsilon - \varepsilon_b)\mathbf{E}] \quad (3)$$

в котором  $\mathbf{E}^{inc}$  есть внешнее заданное поле, а  $\aleph$  — оператор базисного решения.

В четвертом параграфе первой главы дан обзор работ по проблеме моделирования ОСИД и изучения ОСИД с рассеивающими слоями, которая решается в данной диссертации с помощью разработанных методов. Одной из проблем, с которой сталкиваются производители ОСИД, является задача повышения внешней эффективности. Анализ литературы показывает, что одним из перспективных способов решения этой задачи является добавление неоднородного слоя с микро- и наночастицами в ОСИД-структуры, который мог бы эффективно рассеивать волноводные моды в ОСИД и уменьшать потери на полное внутреннее отражение. Точное моделирование таких слоев ранее не проводилось и представляет значительный интерес в связи с необходимостью оптимизации их параметров.

**Во второй главе** приведено поэтапное описание методов, разработанных в диссертационной работе. Первый параграф содержит обоснование перехода от исходной неперiodической задачи рассеяния к задаче дифракции на решетках. Основными предпосылками здесь являются требование описания структур с помощью плоских пространственных гармоник и требование достижения линейной вычислительной сложности метода относительно числа узлов расчетной сетки. При этом уменьшение сложности достигается за счет использования Теплицевой структуры Фурье-матриц и умножения их на векторы с помощью быстрого преобразования Фурье (БПФ).

Во втором параграфе описан вывод базисного решения метода обобщенных источников для плоских токов вида  $\mathbf{J} = \mathbf{j}(z)(ik_x x + ik_y y)$ . В тексте диссертации даны общие

выражения, учитывающие также и возможные магнитные источники, порождаемые неоднородностями магнитной проницаемости, однако, здесь для краткости магнитная проницаемость всюду считается постоянной и равной проницаемости вакуума  $\mu_0$ . Базисное решение для электрического поля записывается как

$$\mathbf{E}(k_x, k_y, z) = \frac{1}{i\omega\varepsilon_b} \tilde{\mathbf{j}}(z) + \int_{-\infty}^{\infty} Y(k_x, k_y, \omega) \mathbf{j}(z') dz', \quad (4)$$

Здесь вектор  $\tilde{\mathbf{j}}$  имеет только ненулевую  $z$ -компоненту, равную  $j_z$ . Неявная зависимость от  $z$  интегрального слагаемого в (4) состоит в различии матрицы  $Y$  для  $z' \leq z$  и  $z' > z$ . Далее производится переход к амплитудам ТЕ- и ТМ-волн и рассматривается  $\delta$ -образный источник  $\mathbf{j}(z) = \mathbf{j}\delta(z)$ . Показано, что амплитуды возбуждаемых им волн имеют вид

$$\begin{aligned} a^{e\pm}(z) &= \frac{\omega\mu_0 k_x}{2\gamma k_z} j_y - \frac{\omega\mu_0 k_y}{2\gamma k_z} j_x + \delta(z) \frac{j_z}{i\omega\varepsilon_0}, \\ a^{h\pm}(z) &= \pm \frac{k_x}{2\gamma} j_x \pm \frac{k_y}{2\gamma} j_y - \frac{\gamma}{2k_z} j_z, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\gamma = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . Формулы (5) также, как и (4), можно рассматривать в качестве базисного решения метода обобщенных источников.

В третьем параграфе с помощью базисных решений метода обобщенных источников получены аналитические выражения для компонент S-матрицы бесконечно тонкого неоднородного плоского слоя. Для случая дифракции на одномерной голографической решетке из изотропного материала их можно записать как

$$\begin{aligned} S_{mn}^{ee\pm\pm} &= \frac{ik_b^2}{2} \frac{1}{\gamma_m k_{zm}} (k_{xm} \Delta_{mn} k_{xn} + k_{ym} \Delta_{mn} k_{yn}) \frac{1}{\gamma_n}, \\ S_{mn}^{he\pm\pm} &= \frac{i\omega\mu_b}{2} \frac{1}{\gamma_m k_{zm}} (k_{xm} \Delta_{mn} k_{yn} - k_{ym} \Delta_{mn} k_{xn}) \frac{\pm k_{zn}}{\gamma_n}, \\ S_{mn}^{eh\pm\pm} &= \frac{i\omega\varepsilon_b}{2} \frac{\pm k_{zm}}{\gamma_m k_{zm}} (-k_{xm} \Delta_{mn} k_{yn} + k_{ym} \Delta_{mn} k_{xn}) \frac{1}{\gamma_n}, \\ S_{mn}^{hh\pm\pm} &= \frac{i}{2} \frac{\pm k_{zm}}{\gamma_m k_{zm}} (k_{xm} \Delta_{mn} k_{xn} + k_{ym} \Delta_{mn} k_{yn}) \frac{\pm k_{zn}}{\gamma_n} + \frac{i}{2} \frac{\gamma_m}{k_{zm}} \bar{\Delta}_{mn} \gamma_n, \end{aligned} \quad (6)$$

где индексы  $m, n$  нумеруют дифракционные порядки, а матрицы  $\Delta_{mn}$ ,  $\bar{\Delta}_{mn}$  состоят из Фурье-образов диэлектрической проницаемости и обратной диэлектрической проницаемости:  $\Delta_{mn} = [\varepsilon/\varepsilon_b]_{mn} - \delta_{mn}$ ,  $\bar{\Delta}_{mn} = \delta_{mn} - [\varepsilon_b/\varepsilon]_{mn}$ . Выражения для компонент S-матриц в общем случае произвольной двумерной решетки приведены в приложении Б текста диссертации. На основании аналитических формул для S-матриц сформулирован численный метод расчета дифракции на решетках. Метод заключается в разбиении слоя с решеткой по

оси, перпендикулярной ее плоскости на подслои достаточно малой по сравнению с длиной волны глубины, так что в каждом подслое зависимость амплитуд полей от координаты  $z$  считается постоянной. Для каждого подслоя производится расчет S-матрицы, после чего S-матрица всей решетки находится с помощью соответствующих правил умножения. Показано, что вычислительная сложность метода равна  $O(N_S N_O^3)$ , где  $N_S$  — число подслоев, а  $N_O$  — число используемых в расчете Фурье-гармоник. В заключение параграфа проанализирована сходимость метода при увеличении числа подслоев для различных значений числа дифракционных порядков. Для ускорения сходимости предложено использовать интерполяцию решения полиномами Лагранжа, и продемонстрировано, что такая интерполяция позволяет повысить точность на несколько порядков по абсолютной величине.

В четвертом параграфе метод, основанный на S-матрицах, модифицирован с целью уменьшения вычислительной сложности точного расчета дифракции. С помощью второго шага метода обобщенных источников сформулировано интегральное уравнение, описывающее дифракцию набора плоских волн. В параграфе рассматриваются голографические решетки, изменения диэлектрической проницаемости которых задаются непрерывными функциями координат  $\varepsilon(\mathbf{r})$ . Для такого типа решеток путем дискретизации интеграла по оси  $Z$ , перпендикулярной плоскости решетки, и обрезания бесконечных сумм Фурье-гармоник получается следующая система линейных алгебраических уравнений для нахождения неизвестных амплитуд ТЕ- и ТМ-гармоник на границах слоя с решеткой  $\mathbf{a}_{out}$ :

$$\mathbf{a}_{out} = \mathbf{a}_{inc} + \text{TPVQ}(\text{I} - \text{RPVQ})^{-1} \mathbf{a}_{inc}. \quad (7)$$

Здесь Q — матрица перехода от амплитуд ТЕ- и ТМ- гармоник к амплитудам электрического поля, матрица P пропорциональна обратному переходу, матрица V содержит Фурье-гармоники функций  $\varepsilon(\mathbf{r})$  и  $1/\varepsilon(\mathbf{r})$ , R состоит из экспоненциальных множителей, описывающих распространение гармоник из одного подслоя в другой, а V описывает распространение гармоник от каждого подслоя к границам слоя с решеткой. Расчет амплитуд электрического поля в подслое решетки с координатой  $z_q$  осуществляется по формуле

$$\mathbf{E}(z_q) = \begin{pmatrix} \text{I} & 0 & 0 \\ 0 & \text{I} & 0 \\ 0 & 0 & [\varepsilon_b/\varepsilon] \end{pmatrix} \text{Q}(\text{I} - \text{RPVQ})^{-1} \mathbf{a}_{inc}, \quad (8)$$

В пятом параграфе описывается численный метод решения уравнений (7) и (8). Для обращения матриц предлагается использовать обобщенный метод минимальных невязок.

Дополнительное ускорение вычислений достигается за счет использования быстрого преобразования Фурье (БПФ). Использование БПФ оказывается возможным за счет Теплицевой структуры матриц, входящих в полученные уравнения. А именно,  $V$  является блочно-Теплицевой относительно Фурье-индексов,  $R$  — блочно-Теплицева относительно индексов подслоев, а  $P$  и  $Q$  — блочно-диагональные. В итоге матрица  $RPVQ$  оказывается двумерной Теплицевой, так что ее можно растянуть в двумерный циркулянт, и выполнять умножение на вектор с помощью БПФ. Результирующая вычислительная сложность метода оказывается  $O(N_S N_O \log(N_S N_O))$ , где  $N_S$  — число подслоев, на которые разбит слой с решеткой,  $N_O$  — число дифракционных порядков, что при большом числе узлов сетки по координате  $Z$  и двумерном Фурье-пространстве, сопряженном плоскости решетки, есть линейная зависимость от произведения  $N_S N_O$ .

Если дифракционная решетка является профилированной, уравнения (7) и (8) неверны. Это связано с тем, что при применении преобразования Фурье поля и диэлектрические проницаемости должны рассматриваться как обобщенные функции. На границах разделов сред  $\varepsilon(\mathbf{r})$  претерпевает разрыв, равно как и нормальная к этим границам компонента электрического поля. Однако, произведение обобщенных функций с совпадающими точками разрыва не определено. Решением данной проблемы, предложенным в [4, 5] в отношении Фурье-модально метода, является деление обеих частей выражения (2), записанного для нормальной компоненты поля, на функцию  $\varepsilon(\mathbf{r})$ . Следствия данного решения рассматриваются в шестом параграфе. Здесь выводятся уравнения, заменяющие (7), (8) для случая профилированной решетки. Сначала получен аналог (7), в котором матрица  $V$  заменяется матрицей  $W$ , содержащей дополнительно Фурье-гармоники тригонометрических функций углов, определяющих локальную систему координат на границах разделов сред. Существенной сложностью новой формулировки оказалось наличие в  $W$  обратных Теплицевых подматриц. Для сохранения быстрого вычислительного алгоритма было предложено разложение  $W = UM^{-1}$ , так что

$$\mathbf{a}_{out} = \mathbf{a}_{inc} + TPU(M - QRPU)^{-1}Q \mathbf{a}_{inc}, \quad (9)$$

$$\mathbf{E}(z_q) = \begin{pmatrix} M_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & M_{yy} & 0 \\ F\Gamma_{zx} & F\Gamma_{zy} & [\varepsilon_b/\varepsilon] \end{pmatrix} (M - QRPU)^{-1}Q \mathbf{a}_{inc}, \quad (10)$$

где  $\Gamma$  состоит из только из Фурье-образов тригонометрических функций углов, определяющих локальную систему координат на границах разделов сред,  $F$  — вспомогательная

матрица. Указанное разложение является важным результатом, так как благодаря ему удалось применить описанный численный метод с линейной сложностью по числу узлов сетки для решеток любого типа и, как будет указано ниже, для достаточно произвольных неперриодических структур.

В седьмом параграфе производится обобщение полученных уравнений (7)-(10) на случай наличия произвольных однородных изотропных сред, граничащих с рассматриваемым слоем. Здесь претерпевают модификацию матрицы  $R$  и  $T$ . Показано, что множественные переотражения от плоских границ между базисной средой слоя  $\varepsilon_b$  и материалами подложки  $\varepsilon_s$  и покрытия  $\varepsilon_c$  (см. Рис. 2) могут быть точно учтены в рамках предложенного метода, и, что весьма существенно, модифицированные матрицы  $R$  и  $T$  по-прежнему можно быстро умножать на векторы, то есть, быстродействие численного алгоритма сохраняется. Итоговый общий алгоритм расчета дифракции на одномерных и двумерных решетках с произвольным профилем можно записать следующим образом:

1. Расчет падающего поля в каждом слое на основании заданных амплитуд на границах рассматриваемого слоя.
2. Расчет Фурье-образов диэлектрической и магнитной проницаемостей в каждом подслое для заданного типа решетки и предвычисление БПФ от полученных матриц.
3. Расчет Фурье-образов компонент матрицы  $\Gamma$  для заданного типа решетки и предвычисление БПФ этой матрицы.
4. Предвычисление БПФ матрицы  $R$ .
5. Обращение матрицы в (7) или (9) обобщенным методом минимальных невязок с умножениями, производимыми посредством БПФ с помощью указанных предвычисленных матриц, и нахождение дифрагированного поля.
6. Расчет амплитуд полей на основании (8) или (10).

В заключительном восьмом параграфе Главы 2 изучается сходимость разработанного метода расчета дифракции света на решетках и производится сравнение получаемых решений с эталонными. В качестве эталонных методов выбраны Фурье-модальный и метод Рэлея, а соответствующие структуры — синусоидальная голографическая и синусоидальная профилированная решетки. Показано, что при расчете голографической решетки метод имеет полиномиальную сходимость. При расчете профилированной решетки для каждого фиксированного числа гармоник увеличение числа подслоев позволяет получать решение с некоторой фиксированной абсолютной ошибкой, уменьшающейся с

увеличением  $N_O$ . Продемонстрировано получение решения с ошибкой порядка  $10^{-5}$  с использованием персонального компьютера с объемом оперативной памяти 8 Гб и частотой процессора 2.5 ГГц.

**В третьей главе** описаны методы расчета рассеяния в неперiodических структурах, расчета оптических параметров ОСИД с однородными и рассеивающими слоями, основанные на результатах, описанных во второй главе.

В первом параграфе обсуждается переход от решения периодической задачи к решению неперiodической, обратный к рассуждениям, приведенным в начале Главы 2. Если рассмотреть отдельный рассеиватель и периодическую структуру, каждый период которой  $\Lambda$  идентичен этому рассеивателю, то при отсутствии перерассеяния на разных периодах решетки, дифракционные порядки будут воспроизводить диаграмму рассеяния в соответствующих направлениях:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} F^{(1)}(\theta) \sum_{n=-N/2}^{n=N/2} \exp(ik_0 n \Lambda \sin \theta) = F^{(1)}(\theta) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(k_0 \Lambda \sin \theta + 2\pi n), \quad (11)$$

где  $F^{(1)}(\theta)$  — амплитуда рассеяния плоской монохроматической волны с волновым числом  $k_0$  на отдельном рассеивателе, находящимся в однородной изотропной среде. Для уменьшения перерассеяния в работе используется наиболее простой подход, а именно, увеличение периода решетки на достаточно большую величину, так что ошибка в диаграмме рассеяния станет меньше требуемой величины.

Оценку величины требуемого числа дифракционных порядков можно получить из следующих соображений. Согласно изначальной идее, описанной во введении к Главе 2, разработанный численный метод требует преобразования геометрических параметров и координатной функции диэлектрической проницаемости структуры в Фурье-пространство. Пусть максимальный рассматриваемый в Фурье-представлении модуль волнового вектора в плоскости  $XU$  равен  $\gamma_{max}$ . Его необходимо выбирать таким образом, чтобы разрешить характерные размеры частиц  $\gamma_{max} \sim \alpha/d_s$ , где коэффициент  $\alpha > 1$ . Если обозначить шаг сетки в сопряженном пространстве как  $\Delta\gamma$ , то  $\Delta\gamma \sim 1/\Lambda$  и  $\gamma_{max} = N_O \Delta\gamma$ . Отсюда следует, что  $N_O \sim \alpha\Lambda/d_s$ . Если выбрать, например,  $\Lambda \sim 5 \text{ мкм}$ ,  $d_s \sim 0.5 \text{ мкм}$  и  $\alpha \sim 10$ , получаем, что число дифракционных порядков в одном измерении должно быть  $N_O \sim 100$ .

Далее для сферической формы рассеивающих частиц, принятой в качестве примера, описывается расчет Фурье-образов соответствующих функций диэлектрической проницаемости и общий подход к расчету тригонометрических функций, определяющих локаль-

ную систему координат на поверхности решетки. В отношении последних предложен новый метод, основанный на доопределении этих функций на периоде решетки с помощью аналитических функций-“шапочек”, являющийся альтернативой развитому в [6, 7] методу генерации поля нормалей на периоде решетки.

Во втором параграфе изучается точность предложенного метода расчета рассеяния путем сравнения результатов с эталонным решением Ми [8], описывающим рассеяние плоской волны на сфере. На Рис. 3 показан пример сходимости к решению Ми с увеличением числа дифракционных порядков для трех фиксированных периодов решетки при моделировании рассеяния плоской волны с длиной  $\lambda = 0.5$  мкм на сфере диаметром 1 мкм и показателем преломления 1.5. Этот пример показывает, что, как ожидалось, для каждого периода имеется фиксированная ошибка, которая убывает с увеличением периода. При этом, во всех расчетах ошибка составляла величину порядка одного процента, что достаточно для большинства приложений.

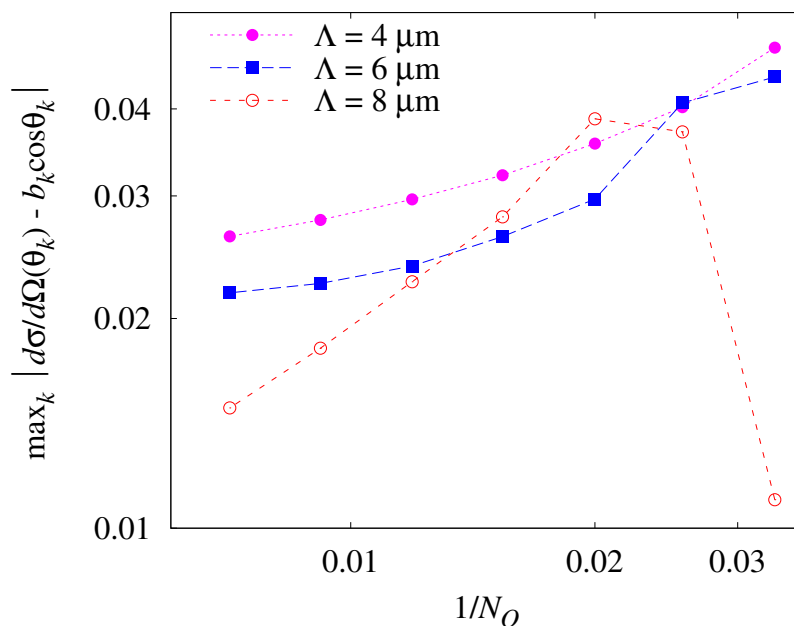


Рис. 3. Сходимость к решению Ми.

Предложенный метод рассчитывает рассеяние на слое когерентно. Однако, в процессе рассеяния в толстых по сравнению с длиной волны слоях происходит потеря когерентности на масштабах порядка нескольких длин волн. Это означает, что описанным методом можно рассчитывать слои глубиной того же порядка — несколько длин волн.

Чтобы изучать рассеяние в толстых слоях, необходимо разбить слой на несколько более тонких вторичных слоев, рассчитать компоненты  $S_{10}$  (1) S-матрицы (если рассматривается рассеяние в прямом направлении) для распространяющихся дифракционных порядков в каждом вторичном слое, а затем рассчитать дифракционные эффективности толстого слоя, последовательно выполняя операцию свертки для вторичных слоев. Отметим, что число элементов S-матрицы в данном случае фиксировано периодом решетки и диэлектрическими проницаемостями матрицы рассеивающего слоя, подложки и покрытия.

Далее приведен пример расчета рассеяния на слое с наночастицами. С помощью численного моделирования продемонстрировано, что уменьшение мощности плоской волны при распространении в рассеивающей среде описывается экспоненциальной функцией  $C \exp(-\kappa h)$ , а коэффициент  $\kappa$  увеличивается линейно с увеличением среднего размера частиц рассеивающего слоя в области, где этот размер сравним с оптическими длинами волн. Дополнительно показан пример зависимости мощности рассеяния затухающей волны от проекции волнового вектора этой волны на плоскость слоя.

В третьем параграфе описывается численная модель расчета оптических параметров ОСИД, включающих спектральную и угловую мощности излучения, а также потери мощности в каждом слое диода. Модель основана на аналитических выражениях для S-матриц, приведенных в Главе 1, и амплитуд плоских волн, излучаемых дипольными источниками. Предложен самосогласованный метод расчета эффективных амплитуд в каждом слое структуры. Получены выражения для  $z$ -компоненты вектора Пойнтинга, учитывающие как распространяющиеся, так и затухающие гармоники в слоях с произвольной диэлектрической проницаемостью:

$$S_z = \frac{1}{2} \left[ \frac{\Re(k_z^e)}{\omega\mu_0} (|a^{e+}|^2 - |a^{e-}|^2) + \Re\left(\frac{k_z^h}{\omega\varepsilon}\right) (|a^{h+}|^2 - |a^{h-}|^2) \right] - \frac{\Im(k_z^e)}{\omega\mu_0} \Im(a^{e+}a^{e-*}) - \Im\left(\frac{k_z^h}{\omega\varepsilon}\right) \Im(a^{e+}a^{e-*}), \quad (12)$$

где  $a^{e,h\pm}$  — амплитуды ТЕ- и ТМ-волн в заданной плоскости, найденные методом S-матриц. Дополнительно предложено учитывать влияние толстой подложки, на которую наносится ОСИД, некогерентно с помощью коэффициентов отражения по мощности. Приведено сравнение результатов расчетов предложенным методом с экспериментальными данными на модельном ОСИД, показавшее состоятельность метода (пример сравнения приведен на Рис. 4).

В заключительной части Главы 3 метод расчета рассеяния на слоях с наночастицами



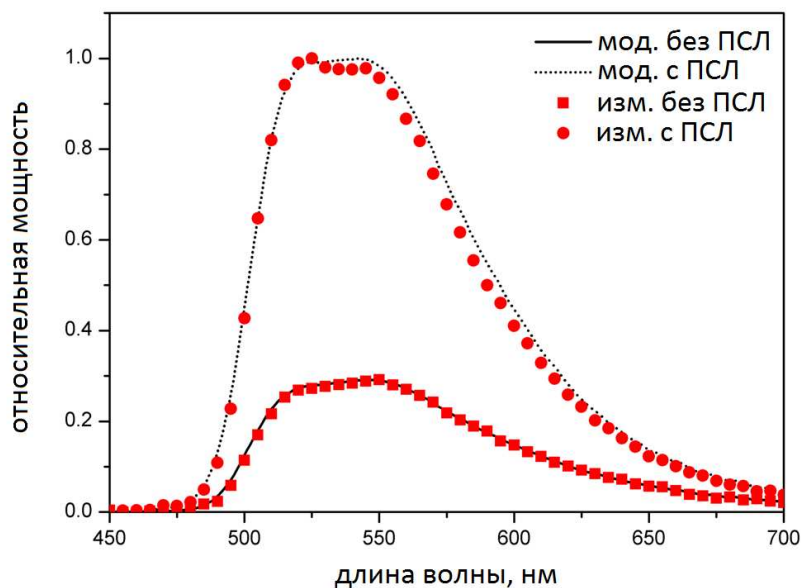


Рис. 4. Сравнение излучаемой спектральной мощности модельного ОСИД с полусферической линзой (ПСЛ) и без, измеренной экспериментально и полученной с помощью моделирования.

и метод расчета параметров ОСИД объединены, и произведен расчет ОСИД с рассеивающим слоем, включенным между прозрачным анодом и подложкой. Рис. 5 демонстрирует спектральную зависимость эффективности ОСИД без рассеивающего слоя и с рассеивающим слоем различной толщины. Большая спектральная эффективность на больших длинах волн объясняется исходя из анализа мод, распространяющихся в диоде. Волноводные ТЕ моды характеризуются весьма широким распределением поля и имеют максимум в области прозрачного анода, и с увеличением длины волны их поле все больше распространяется в зону, куда помещается рассеивающий слой. Кроме того, при изменении длины волны в красную область спектра число таких мод уменьшается, и действительная часть их констант распространения уменьшается, так что эффективность рассеяния этих мод экспоненциально возрастает. На основании приведенных расчетов были сделаны следующие выводы. Во-первых, для достижения максимального положительного эффекта от введения рассеивающего слоя, его толщина должна быть достаточно мала — от нескольких микрометров до нескольких десятков микрометров. Во-вторых, чтобы получить существенное повышение внешней эффективности, до 5-10%, необходимо проводить оптимизацию параметров ОСИД и рассеивающего слоя, что требует достаточно объемных вычислительных затрат. Такая оптимизация имеет смысл лишь при заданных материалах и конкретных

структурах ОСИД, и в данной работе не проводилась.

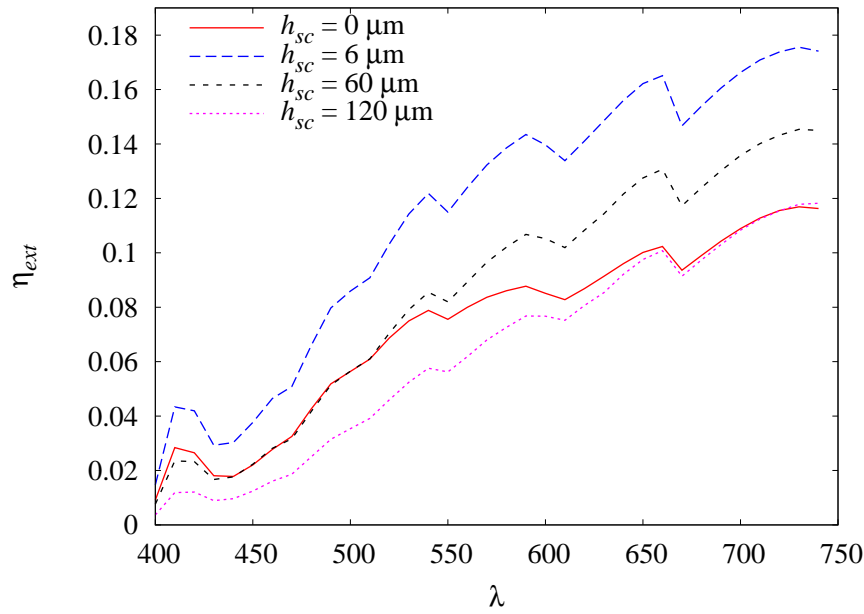


Рис. 5. Сравнение спектральной внешней эффективности ОСИД без рассеивающего слоя и с рассеивающим слоем различной толщины.

В **заключении** сформулированы основные результаты работы, а также обсуждается дальнейшее развитие метода и возможные его применения:

1. Метод обобщенных источников развит для базисного решения, описывающего поля, излучаемые произвольным плоским источником. Получены аналитические выражения компонент S-матриц бесконечно тонких слоев, на которые разбивается плоский слой с дифракционной решеткой и с их помощью сформулирован новый метод расчета дифракции. Показано, что это метод имеет вычислительную сложность порядка  $O(N_S N_O^3)$ , где  $N_S$  — число подслоев,  $N_O$  — число точек в Фурье-пространстве.
2. На основании полученного базисного решения выведено интегральное уравнение, описывающее дифракцию на решетках произвольной формы. Переход к системе линейных алгебраических уравнений осуществляется путем разбиения слоя с решеткой на подслои и обрезания бесконечных рядов Фурье. Показано, что для голографических и профилированных решеток это обрезание должно выполняться различным образом. Для решения полученной системы линейных уравнений предложен алгоритм, основанный применении обобщенного метода минимальных невязок и быст-

рого преобразования Фурье, что позволило получить метод, вычислительная сложность которого есть  $O(N_O N_S)$ , то есть, линейна относительно числа точек расчетной сетки. Кроме того, показано, что наличие произвольных сред на границах изучаемого слоя может быть точно учтено при сохранении преимуществ численного метода. Сравнение результатов расчетов дифракции разработанным методом с эталонными решениями демонстрирует состоятельность метода и возможность контроля ошибки вычислений путем изучения сходимости.

3. Предложен переход от решения задачи дифракции на периодической структуре к задаче рассеяния на непериодической структуре. Показано, что получаемые решения модельной задачи рассеяния на сфере сходятся к эталонному решению Ми, и приведенные графики демонстрируют точность метода порядка 1 %, что является достаточным для большинства приложений. Для моделирования оптических свойств ОСИД развит алгоритм S-матриц, а также получены аналитические выражения, позволяющие производить расчет потоков и потерь мощности во любом подслое ОСИД-структуры. Разработанный метод моделирования ОСИД объединен с методом расчета рассеяния в слоях, содержащих диэлектрические наночастицы, и применен для расчета ОСИД с рассеивающим слоем. Продемонстрировано увеличение внешней эффективности ОСИД благодаря рассеивающему слою на величину порядка нескольких процентов по абсолютной величине. Сделан вывод, что для наилучшего эффекта рассеивающий слой должен быть достаточно тонким (от нескольких микрометров до нескольких десятков микрометров).
4. Отмечено, что разработанный метод расчета дифракции сформулирован таким образом, что в него без изменений можно включить идеально сочетающиеся слои, что, возможно, улучшит получаемые решения непериодических задач. В качестве дальнейших применений метода указывается расчет сложных высокоапертурных дифракционных оптических элементов.

В Приложении А приведены определения и обозначения, используемые в тексте диссертации и описывающие переход от амплитуд полей к амплитудам ТЕ- и ТМ-поляризованных волн. Приложение Б содержит аналитические выражения для компонент S-матриц бесконечного тонкого слоя для общего вида двумерной профилированной дифракционной решетки с произвольным профилем. В Приложении В дан подробный вывод фор-

мул (9), (10). В Приложении Г содержатся таблицы дифракционных эффективностей дифракции на двумерных синусоидальных голографической и профилированной решетках, полученные разработанным методом и эталонными методами, и приведенные в качестве примера в Главе 2.

## Список публикаций по теме диссертации

- A1. Ахмедджанов И. М., Тищенко А. В., Щербаков А. А. Моделирование рассеяния света на наночастицах сложной формы методом обобщенных источников // *Опт. и спектр.* 2008. Т. 105. С. 1034–1039.
- A2. Щербаков А. А., Тищенко А. В. Быстрый численный метод для моделирования одномерных дифракционных решеток // *Квант. электрон.* 2010. Т. 40. С. 538–544.
- A3. Shcherbakov A. A., Tishchenko A. V., Setz D. S., Krummacher B. C. Rigorous S-matrix approach to the modeling of the optical properties of OLEDs // *Organ. Electron.* 2011. Vol. 12. Pp. 654–659.
- A4. Shcherbakov A. A., Tishchenko A. V. Fast and memory-sparing exact electromagnetic analysis of arbitrary profile 2D periodic dielectric structures // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2012. Vol. 113. Pp. 158–171.
- A5. Shcherbakov A. A., Tishchenko A. V. Light scattering calculations in planar non-homogeneous dielectric media by means of the light diffraction calculation on gratings // *AAPP.* 2011. Vol. 89. P. C1V89S1P085.
- A6. Shcherbakov A., Akhmetzhanov I., Tishchenko A. 3D scattering from nanoparticles of arbitrary shape: rigorous modeling by the generalized source method // *9-th International Conference on Near-field Optics.* 2006. P. 278.
- A7. Ахмеджанов И. М., Тищенко А. В., Щербаков А. А. Моделирование рассеяния света на наночастицах сложной формы методом GSM // *Труды 49-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук».* 2006. С. 73–74.
- A8. Щербаков А. А., Тищенко А. В. Моделирование распространения света через слоистые диэлектрические среды, содержащие диэлектрические нано- и микрочастицы

произвольной формы // Труды 50-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук». 2007. С. 112–114.

- A9. Shcherbakov A., Tishchenko A. V. Rigorous modeling of light scattering in dielectric structures by the generalized source method // Mie Theory 1908-2008. Present developments and interdisciplinary aspects of light scattering / Martin Luther University, Halle, Germany. 2008. Pp. 67–71.
- A10. Tishchenko A., Shcherbakov A. Rigorous modeling of 2D arbitrary shaped diffraction gratings with an analytical solution // Book of abstracts of XVIII International Workshop «Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling» / Fraunhofer Institute for Applied Optics and Precision Engineering, Jena, Germany. 2009. P. 17.
- A11. Shcherbakov A. A., Tishchenko A. V. Fast and efficient diffraction modeling by the generalized source method // 26-th Annual Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics. 2010. Pp. 160–165.
- A12. Shcherbakov A. A., Tishchenko A. V. Influence of scattering layers on waveguide modes and external efficiency of OLED structures // Proceedings of Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling Workshop 2010 / University of Cambridge. 2010. P. 82.
- A13. Shcherbakov A. A., Tishchenko A. V. Rigorous S-matrix based modeling of OLEDs // Solid State and Organic Lightning 2010 Conference Proceedings, SOTuC3. 2010.
- A14. Shcherbakov A. A., Tishchenko A. V. Generalized source method for light scattering and diffraction calculations // Proceedings of the Days on Diffraction'11 Conference. 2011. P. 89.

## **Цитированная литература**

1. Chance R. R., Prock A., Silbey R. Molecular fluorescence and energy transfer near interfaces // Adv. Chem. Phys. 1987. Vol. 37. Pp. 1–65.
2. Tishchenko A. V. A generalized source method for wave propagation // Pure and Applied Optics. 1998. Vol. 7. Pp. 1425–1449.
3. Tishchenko A. V. Generalized source method: new possibilities for waveguide and grating problems // Optical and Quantum Electronics. 2000. Vol. 32. Pp. 1971–1980.

4. Lalanne P., Morris G. M. Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization // J. Opt. Soc. Am. A. 1996. Vol. 13. Pp. 779–784.
5. Granet G., Guizal B. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization // J. Opt. Soc. Am. A. 1996. Vol. 13. Pp. 1019–1023.
6. Schuster T., Ruoff J., Kerwein N. et al. Normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings // J. Opt. Soc. Am. A. 2007. Vol. 24. Pp. 2880–2890.
7. Götz P., Schuster T., Frenner K. et al. Normal vector method for the RCWA with automated vector field generation // Opt. Expr. 2008. Vol. 16. Pp. 17295–17301.
8. Mie G. Beiträge zur Optik Trüber Medien, speziell Kolloidaler Metallösungen // Ann. Phys. 1908. Vol. 25. Pp. 377–452.