Письма в ЖЭТФ, том 122, вып. 10, с. 619 – 626

Интерполяция матрицы рассеяния для моделирования резонансных фотонно-кристаллических структур фурье-модальным методом

С. А. Дьяков, Н. С. Салахова, И. М. Фрадкин, Н. А. Гиппиус[1)]

Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 октября 2025 г.
После переработки 15 октября 2025 г.
Принята к публикации 15 октября 2025 г.

В статье представлен эффективный алгоритм для расчета спектрально-угловых зависимостей оптических коэффициентов отражения, пропускания и поглощения фотонно-кристаллического слоя, содержащих узкие резонансы, такие как связанные состояния в континууме. Традиционный подход с использованием фурье-модального метода требует проведения прямых вычислений на очень мелкой спектральной сетке для адекватного разрешения таких резонансов, что приводит к значительным вычислительным затратам. Предлагаемый метод позволяет существенно ускорить расчет без потери точности. Его ключевая идея заключается в разделении резонансного слоя на два нерезонансных подслоя. Для каждого из этих подслоев матрицы рассеяния рассчитываются лишь на редкой спектральной сетке. Затем выполняется интерполяция элементов этих матриц на требуемую мелкую сетку, и окончательный оптический коэффициент вычисляется уже на ее основе. Показано, что разработанный алгоритм позволяет достичь ускорения вычислений не менее, чем в 4 раза по сравнению с прямым расчетом на мелкой сетке, при этом сохраняя достаточную точность описания резонансных особенностей. Данный подход открывает возможности для быстрого и точного дизайна составных фотонных структур.

DOI: 10.31857/S0370274X25110149

1. Введение. Фурье-модальный метод (ФММ) является одним из наиболее мощных и широко применяемых численных подходов для моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с периодическими структурами. Его теоретические основы были заложены в работах [1, 2], а дальнейшее развитие, включая устойчивые и эффективные алгоритмы вычисления матрицы рассеяния [3–9], позволило ему стать стандартом для анализа дифракционных решеток, фотонных кристаллов (ФК) и метаповерхностей [10–12]. Метод универсален и применим к расчету оптических свойств одномерных, двумерных и трехмерных периодических объектов произвольного профиля и из материалов с комплексной диэлектрической проницаемостью. С его помощью можно напрямую рассчитывать спектры, содержащие узкие резонансные особенности, такие как связанные состояния в континууме и резонансы Фано, которые представляют значительный интерес для создания различных оптических устройств.

Однако прямая реализация ФММ для исследования таких явлений сталкивается с двумя ключевыми вычислительными проблемами. Во-первых, адекватное разрешение узких резонансов требует проведения расчетов на очень мелкой сетке параметров, таких как частота или угол падения. Во-вторых, довольно часто для достижения высокой точности необходимо использовать достаточно большое число пространственных гармоник, что увеличивает размерность матрицы рассеяния, а следовательно, и время расчета. В совокупности это приводит к тому, что построение двумерных карт, таких как спектрально- угловые зависимости, может требовать существенных вычислительных ресурсов.

Для преодоления этих ограничений был предложен ряд методов, направленных на ускорение расчетов. Их можно условно разделить на две основные группы: а) методы, направленные на улучшение сходимости алгоритма, которые позволяют достигать требуемой точности при меньшем числе гармоник [3, 13]; б) методы, использующие резонансное приближение для матрицы рассеяния [14–16]. Что касается методов, направленных на улучшение сходимости, такие подходы, как правила факторизации, хотя и позволяют снизить количество необходимых гармоник, все же требуют прямого вычисления матрицы рассеяния для каждой точки сетки по энергии и волновому вектору, что остается вычислительно затратным при построении подробных карт. С другой стороны, методы, основанные на резонансном

[1)]e-mail: n.gippius@skoltech.ru

приближении для матрицы рассеяния, более глубоко используют аналитические свойства системы, представляя ее отклик в виде суперпозиции резонансов, плавно зависящих от параметров задачи. Однако их ключевым недостатком является необходимость параметризации и последующей сортировки резонансов, что на практике часто требует ручного вмешательства и затрудняет автоматизацию процесса. В данной работе мы предлагаем альтернативный путь, позволяющий избежать как необходимости расчета в каждой точке, так и параметризации резонансов.

Мы представляем алгоритм, в котором не требуется ни модификация ядра ФММ для улучшения сходимости, ни параметризация резонанса. Вместо этого предлагается подход, основанный на разделении резонансного ФК слоя на два нерезонансных подслоя. Матрицы рассеяния для каждого такого подслоя являются плавными функциями параметров задачи, что является ключевым наблюдением данной работы. Это свойство позволяет рассчитать их на редкой сетке, с последующей быстрой интерполяцией элементов на требуемую мелкую сетку, и окончательным вычислением коэффициента отражения уже для полной структуры. Как показано ниже, такой подход позволяет существенно сократить общее время вычислений без существенной потери в точности.

2. Краткое описание Фурье-модального метода. ФММ применяется для расчета многослойных структур, состоящих из одного или нескольких слоев, каждый из которых является однородным или периодическим в горизонтальной плоскости и однородным по вертикальной оси. Пример такой структуры, содержащий один периодический слой на однородной подложке, представлен на рис. 1. Решение уравнений Максвелла в такой системе осуществляется в формализме матрицы рассеяния, основанном на решении задачи на собственные значения в каждом слое и последующем соединении решений для соседних слоев.

Сформулируем задачу на собственные значения для вертикально-однородного слоя. Учитывая материальные уравнения в виде

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E},\ \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \tag{1}$$

и предполагая временную зависимость полей в виде $\exp(-i\omega t)$, в отсутствии зарядов и токов можно записать первые два уравнения Максвелла в следующей форме:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= ik_0\mu\mathbf{H}(\mathbf{r}), \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -ik_0\varepsilon\mathbf{E}(\mathbf{r}), \end{aligned} \tag{2}$$

где $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ – компоненты электрического и магнитного полей, ε и μ – диэлектрическая и магнитная проницаемости, $k_0 = \omega/c$ – модуль волнового вектора. В периодических фотонных структурах поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ удовлетворяют теореме Блоха:

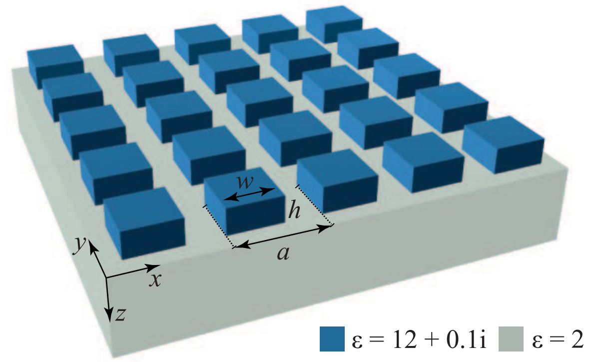

Рис. 1. (Цветной онлайн) ФК слой с квадратной решеткой для демонстрации метода интерполяции матрицы рассеяния. Период структуры $a = 1000$ нм, сторона квадрата высокоиндексного материала $w = 800$ нм, толщина периодического слоя $h = 250$ нм

$$F_\tau(x,y,z) = \sum_{n=1}^{N_g} \mathrm{F}_\tau(z) e^{i\left(k_x + g_x^{(n)}\right)x + i\left(k_y + g_y^{(n)}\right)y}, \tag{3}$$

где F – поле E или H, $\tau = x$, y или z, $g_x^{(n)}$ и $g_y^{(n)}$ – две координаты Фурье-гармоники в k-простанстве, характеризующейся целым числом n, пробегающим значения от 1 до N_g, k_x и k_y – компоненты волнового вектора в первой зоне Бриллюэна, а $\mathrm{F}_\tau(x)$ – $(\mathrm{N}_g \times 1)$-размерный гипервектор Фурье-компонент электрического или магнитного полей. Поскольку поля удовлетворяют теореме Блоха, мы можем ввести пространство Фурье, в котором поля характеризуются гипервекторами $\mathrm{E}_\tau(x)$ и $\mathrm{H}_\tau(x)$, а не их пространственными функциями $\mathbf{E}(x,y,z)$ и $\mathbf{H}(x,y,z)$. После подстановки выражений (3) в систему уравнений Максвелла (2) и последующих математических преобразований, мы получим систему бесконечного количества дифференциальных уравнений для x- и y-компонент полей, которую можно записать в компактном виде:

$$-i\frac{d}{dz}\mathrm{F}(z) = \mathbb{M}\mathrm{F}(z), \tag{4}$$

где $\mathrm{F}(z)$ – гипервектор Фурье-компонент полей:

$$\mathrm{F}(z) = \begin{bmatrix} \mathrm{E}_x(z) \\ \mathrm{E}_y(z) \\ \mathrm{H}_x(z) \\ \mathrm{H}_y(z) \end{bmatrix}, \tag{5}$$

а блочная матрица $\mathbb{M}$ имеет следующие компоненты:

$$\begin{aligned}
\mathbb{M}_{11} &= k_0 \begin{bmatrix} -\tilde{\mu}_{23}K_y - K_x\tilde{\varepsilon}_{31} & +\tilde{\mu}_{23}K_x - K_x\tilde{\varepsilon}_{32} \\ +\tilde{\mu}_{13}K_y - K_y\tilde{\varepsilon}_{31} & -\tilde{\mu}_{13}K_x - K_y\tilde{\varepsilon}_{32} \end{bmatrix} \\
\mathbb{M}_{12} &= k_0 \begin{bmatrix} +\tilde{\mu}_{21} + K_x\tilde{\varepsilon}_{33}K_y & +\tilde{\mu}_{22} - K_x\tilde{\varepsilon}_{33}K_x \\ -\tilde{\mu}_{11} + K_y\tilde{\varepsilon}_{33}K_y & -\tilde{\mu}_{12} - K_y\tilde{\varepsilon}_{33}K_x \end{bmatrix} \\
\mathbb{M}_{21} &= k_0 \begin{bmatrix} -\tilde{\varepsilon}_{21} - K_x\tilde{\mu}_{33}K_y & -\tilde{\varepsilon}_{22} + K_x\tilde{\mu}_{33}K_x \\ +\tilde{\varepsilon}_{11} - K_y\tilde{\mu}_{33}K_y & +\tilde{\varepsilon}_{12} + K_y\tilde{\mu}_{33}K_x \end{bmatrix} \\
\mathbb{M}_{22} &= k_0 \begin{bmatrix} -\tilde{\varepsilon}_{23}K_y - K_x\tilde{\mu}_{31} & +\tilde{\varepsilon}_{23}K_x - K_x\tilde{\mu}_{32} \\ +\tilde{\varepsilon}_{13}K_y - K_y\tilde{\mu}_{31} & -\tilde{\varepsilon}_{13}K_x - K_y\tilde{\mu}_{32} \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{6}$$

В формуле (6) операторы K_x и K_y – это диагональные матрицы, состоящие из соответствующих проекций координат Фурье-гармоник в пространстве волновых векторов:

$$K_\tau = \frac{1}{k_0}\begin{bmatrix} k_\tau + g_\tau^{(1)} & 0 & \cdots \\ 0 & k_\tau + g_\tau^{(2)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \tag{7}$$

где $\tau = x$ или y, а операторы $\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}$ и $\tilde{\mu}_{\alpha\beta}$ представляют собой матрицы, получающиеся из разложения пространственных функций $\varepsilon(x, y)$ и $\mu(x, y)$ на Фурье гармоники и обращения их по правилам факторизации Ли [13].

Поскольку мы рассматриваем z-однородные слои, то решение системы (4) будем искать в виде распространяющихся вдоль оси z плоских волн:

$$\mathrm{F}(z) = \mathrm{F}e^{ik_z z}, \tag{8}$$

где k_z – проекция волнового вектора плоской волны на ось z. В результате подстановки (8) в (4) мы получаем следующую задачу на собственные значения

$$\mathbb{M}\mathrm{F} = k_z\mathrm{F}, \tag{9}$$

в которой заранее неизвестная k_z компонента волнового вектора плоской волны в слое играет роль собственного числа. Каждое решение этой задачи на собственное значения будет представлять собой волну, способную распространяться или затухать в рассматриваемом z-однородном слое. Любая линейная комбинация таких решений также будет удовлетворять системе (9), и поэтому ее общее решение можно представить в виде:

$$\mathrm{F}(z) = \mathbb{F}\mathrm{A}(z) \equiv \mathbb{F}\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1(z) \\ \mathbf{a}_2(z) \end{bmatrix}, \tag{10}$$

где матрица $\mathbb{F}$, называемая материальной матрицей, состоит из собственных векторов оператора $\mathbb{M}$

$$\mathbb{F} \equiv [\mathrm{F}_1\ \mathrm{F}_2\ \mathrm{F}_3\ \cdots], \tag{11}$$

а гипервектор $\mathrm{A}(z)$ представляет собой набор коэффициентов линейной комбинации в общем решении задачи на собственные значения (9) и называется вектором амплитуд.

Полная матрица рассеяния находится как последовательность произведений Редхеффера [17, 18] матриц рассеяния слоев и интерфейсов:

$$\mathbb{S}^{\mathrm{tot}} = \mathbb{S}^{\mathrm{N_s,N}} \otimes \mathbb{S}^{\mathrm{N}} \otimes \mathbb{S}^{\mathrm{N,N-1}} \otimes \cdots \otimes \mathbb{S}^{21} \otimes \mathbb{S}^{1} \otimes \mathbb{S}^{10}, \tag{12}$$

где N_s – число слоев в многослойной структуре, $\mathbb{S}^i$ – матрица рассеяния i-го слоя, $\mathbb{S}^{ij}$ – матрица рассеяния интерфейса между i-м и j-м слоем, а символ $\otimes$ означает произведение двух матриц рассеяния (произведение Редхеффера) $\mathbb{S} = \mathbb{S}^a \otimes \mathbb{S}^b$ [1, 17]. Матрица рассеяния n-того слоя может быть найдена следующим образом:

$$\mathbb{S}^n = \begin{pmatrix} e^{i\mathrm{K}_z^{(n)}d_n} & 0 \\ 0 & e^{i\mathrm{K}_z^{(n)}d_n} \end{pmatrix}, \tag{13}$$

где $\mathrm{K}_z^{(n)}$ – диагональная матрица собственных значений k_z задачи на собственные значения (9) в n- м слое, а $\mathbb{F}_n$ – материальная матрица в n-м слое. Матрица рассеяния интерфейса между двумя соседними слоями a и b задается следующим выражением:

$$\mathbb{S}^{ab} = \begin{pmatrix} \mathbb{F}_{11}^a & -\mathbb{F}_{12}^b \\ \mathbb{F}_{21}^a & -\mathbb{F}_{22}^b \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbb{F}_{11}^b & -\mathbb{F}_{12}^a \\ \mathbb{F}_{21}^b & -\mathbb{F}_{22}^a \end{pmatrix}, \tag{14}$$

где используются блочные элементы материальных матриц $\mathbb{F}^a$ и $\mathbb{F}^b$

$$\mathbb{F}^a = \begin{bmatrix} \mathbb{F}_{11}^a & \mathbb{F}_{12}^a \\ \mathbb{F}_{21}^a & \mathbb{F}_{22}^a \end{bmatrix}, \qquad \mathbb{F}^b = \begin{bmatrix} \mathbb{F}_{11}^b & \mathbb{F}_{12}^b \\ \mathbb{F}_{21}^b & \mathbb{F}_{22}^b \end{bmatrix}. \tag{15}$$

Представленная численная схема нахождения решения уравнений Максвелла в слое и во всей многослойной структуре требует проверки сходимости по числу гармоник Фурье. Известно, что в периодических структурах с высоким контрастом диэлектрической проницаемости в слое элементы матрицы в (6) могут сходиться медленно. Ли показал [13], что для получения лучшей сходимости, при вычислении оператора $\mathbb{M}$ необходимо использовать правила факторизации.

Матрица рассеяния содержит полную информацию об оптических свойствах системы. Ее знание позволяет рассчитывать характеристики системы, такие как коэффициенты отражения, пропускания, поглощения и излучаемости, анализировать распределение поля в системе, а также исследовать ее резонансные свойства. Особенность представленного алгоритма заключается в том, что он требует применения численного решения для каждой требуемой пары параметров $(\omega, \mathbf{k})$ – частоты и волнового вектора. Это обстоятельство, в сочетании с необходимостью разрешения высокодобротных особенностей на спектрах, может приводить к значительным вычислительным затратам и существенному увеличению времени расчета.

3. Ускорение расчета при помощи интерполяции. Одним из подходов к решению проблемы необходимости расчета матрицы рассеяния на мелкой частотной сетке для моделирования спектров с узкими резонансами является использование метода разложения исходной резонансной системы на две нерезонансные подсистемы.

В качестве примера рассмотрим периодическую структуру, изображенную на рис. 2a, и проанализи-

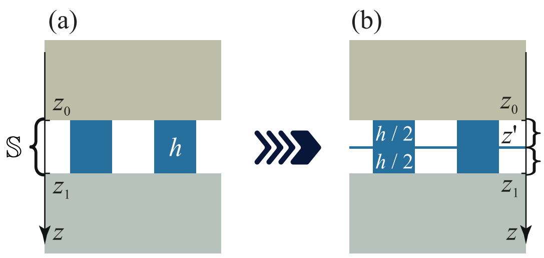

Рис. 2. (Цветной онлайн) Разбиения резонансного слоя на два нерезонансных подслоя. (a) – Изначальный периодический слой, окруженный сверху и снизу полубесконечными средами. (b) Эквивалентная структура, состоящая из двух подслоев, разделенных высокоиндексным материалом с нулевой толщиной (сплошная горизонтальная линия)

руем зависимость элементов ее $\mathbb{S}$-матрицы от частоты. Данная структура представляет собой ФК слой, окруженный полубесконечными средами с диэлектрическими проницаемостями, меньшими, чем средняя проницаемость этого слоя. Как известно, такая структура поддерживает квазиволноводные моды. Резонансная природа этого слоя проявляется в виде полюсов матрицы рассеяния $\mathbb{S}$, вычисленной между точками z_0 и z_1, что и приводит к возникновению узких спектральных особенностей в оптических спектрах отражения, пропускания и поглощения.

Для того чтобы избежать необходимости разрешения полюсов в $\mathbb{S}$-матрицах, данный волновод может быть разбит на две части путем введения слоя с нулевой толщиной (см. рис. 2b), диэлектрическая проницаемость которого превышает среднюю проницаемость периодического слоя. Очевидно, что добавление слоя с нулевой толщиной никаким образом не изменит свойства исходной структуры. Помещая такой слой в любой координате между z_0 и z_1 (например, как показано на рис. 2, посередине), получаем две подструктуры, ограниченные координатами z_0 и z', и координатами z' и z_2, обе из которых являются нерезонансными. Соответственно, матрицы рассеяния каждой из этих подсистем, $\mathbb{S}_1$ и $\mathbb{S}_2$, не имеют особенностей в виде полюсов на комплексной плоскости частот и являются гладкими функциями параметров, в том числе и частоты.

Таким образом, гладкая зависимость матриц рассеяния $\mathbb{S}^a$ и $\mathbb{S}^b$ верхней и нижней нерезонансных подсистем от частоты и других параметров позволяет с высокой точностью вычислять их значения на мелкой сетке с помощью интерполяции по известным значениям, рассчитанным на существенно более крупной сетке:

$$\begin{aligned} \mathbb{S}^a_{\text{int}}(\mathbf{p}) &= \mathcal{I}\left[\mathbf{p}, \{\mathbf{p}_i\}, \{\mathbb{S}^a_i\}\right], \\ \mathbb{S}^b_{\text{int}}(\mathbf{p}) &= \mathcal{I}\left[\mathbf{p}, \{\mathbf{p}_i\}, \{\mathbb{S}^b_i\}\right], \end{aligned} \tag{16}$$

где $i = 1 \ldots N_j$, N_j – количество точек в пространстве параметров, в которых матрица рассеяния вычисляется точно, $j = a$ или b, $\mathcal{I}$ – оператор интерполяции элементов матрицы $\mathbb{S}^j$ в заданный набор параметров $\mathbf{p}$ по известным значениям этой матрицы, $\mathbb{S}^j_i$, вычисленным на крупной сетке наборов параметров $\mathbf{p}_i$. После вычисления матриц рассеяния $\mathbb{S}_1$ и $\mathbb{S}_2$ по формуле (16), их необходимо объединить при помощи оператора Редхеффера на каждом наборе параметров $\mathbf{p}$:

$$\mathbb{S}^{\text{tot}}_{\text{int}}(\mathbf{p}) = \mathbb{S}^a_{\text{int}}(\mathbf{p}) \otimes \mathbb{S}^b_{\text{int}}(\mathbf{p}). \tag{17}$$

Отметим, что набор параметров $\{\mathbf{p}_i\}$, как и непосредственно метод интерполяции, определяется особенностями верхней и нижней подсистем, и поэтому не обязательно должен быть одинаковым для интерполяции матриц рассеяния $\mathbb{S}^a$ и $\mathbb{S}^b$.

Критически важным условием для применения данной схемы является отсутствие собственных резонансов в верхней и нижней подсистемах в заданном диапазоне параметров $\mathbf{p}$. В частности, необходимо исключить существование в этом диапазоне таких резонансных мод, как поверхностные волны (поверхностные плазмон-поляритоны, волны Дьяконова и др.), локализованные поверхностные состояния или резонансы Ми. Наличие подобных особенностей у подсистем привело бы к появлению полюсов в их матрицах рассеяния, что нарушило бы условие гладкости и сделало бы интерполяцию невыгодной с точки зрения вычислительных ресурсов. Здесь также следует оговориться, что описанная схема работает в предположении, что мы находимся вдали от аномалий Рэлея, соответствующих открытию дифракционных каналов в полубесконечных средах и в тонком разделяющем слое.

Как показывают эксперименты на численном примере, интерполяционный подход позволяет значительно сократить вычислительные ресурсы, необходимые для анализа полной резонансной системы.

4. Численный пример. Для демонстрации эффективности предложенного алгоритма рассмотрим расчет спектрально-угловых зависимостей ФК структуры, изображенной на рис. 1. Структура представляет собой слой толщиной $h = 250$ нм, содержащий двумерный периодический массив столбиков квадратного сечения с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 12 + 0.1i$ (аналог кремния в ближнем ИК-диапазоне) и со стороной квадрата $w = 800$ нм. Период решетки составляет $a = 1000$ нм. Структура расположена на полубесконечной подложке с $\varepsilon = 2$ (диоксид кремния). Все материалы считаются бездисперсионными. Падение волны происходит из воздуха.

В соответствии с предложенным алгоритмом, исходный резонансный ФК слой был разделен горизонтальной плоскостью на два нерезонансных подслоя равной толщины ($h_1 = h_2 = 125$ нм) с добавлением материала с $\varepsilon = 12$ в качестве нижней полубесконечной среды верхнего подслоя и верхней полубесконечной среды для нижнего подслоя. На рисунке 3 представлены рассчитанные нормы матриц рассеяния для верхнего и нижнего подслоев. Как и ожидалось, они являются плавными функциями энергии и волнового вектора. Единственные особенности на картах соответствуют аномалиям Рэлея, связанным с рождением дифракционных порядков. Важно подчеркнуть, что несмотря на плавность матриц рассеяния отдельных подслоев, матрица рассеяния полной структуры (рис. 3c, 4), полученная в результате процедуры перемножения матриц рассеяния подслоев, демонстрирует ярко выраженные узкие резонансы, которые являются квазиволноводными модами структуры. Данное наблюдение подтверждает ключевую идею метода: наличие областей, где матрицы рассеяния подслоев плавны, позволяет избежать прямых вычислений на мелкой сетке для описания резонансных мод полной системы.

В качестве численного эксперимента матрицы рассеяния каждого подслоя были рассчитаны с помощью прямого ФММ лишь в 30 точках параметрического пространства (энергия, волновой вектор), отмеченных крестиками на рис. 4. Затем их элементы были интерполированы полиномиальной интерполяцией третьего порядка на мелкую равномерную

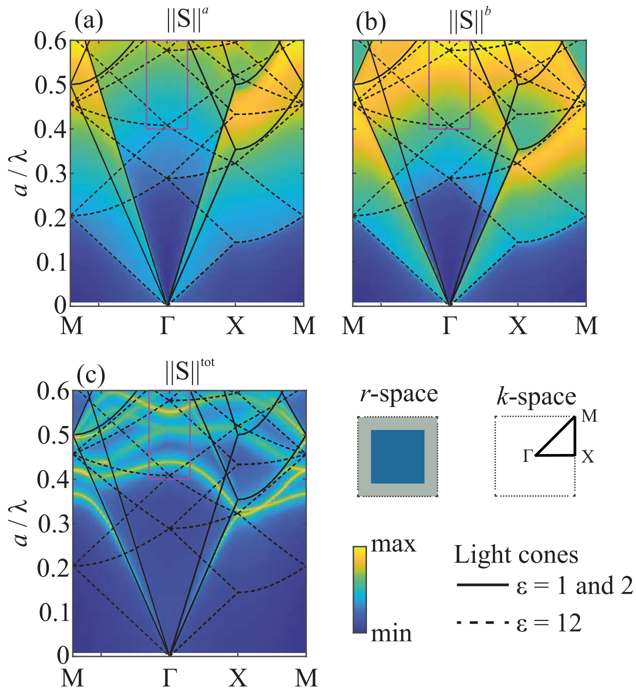

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости нормы матрицы рассеяния от энергии и волнового вектора фотона. (a) – Норма матрицы рассеяния верхнего подслоя; (b) – нижнего подслоя; (c) – полной ФК структуры. На легенде показаны элементарная ячейка структуры и ее первая зона Бриллюэна. Цветовая шкала справа отображает значения нормы матрицы рассеяния в линейном масштабе. Сплошными и пунктирными линиями показаны аномалии Рэлея. Прямоугольники показывают область для которой будет применен метод интерполяции матрицы рассеяния

сетку, и для этих интерполированных матриц была вычислена матрица рассеяния полной структуры и, как следствие, коэффициент поглощения. Результаты сравнения точного расчета (прямой ФММ на мелкой сетке) и приближенного расчета по предлагаемому методу представлены на рис. 4. Как видно из рис. 4a, b, спектрально-угловые зависимости нормы матрицы рассеяния и коэффициента поглощения, полученные двумя способами, визуально неразличимы. Предложенный алгоритм корректно воспроизводит положение, форму и добротность всех резонансов, включая наиболее узкие, что демонстрирует его высокую точность и применимость для анализа связанных состояний в континууме и других резонансных явлений.

На рисунке 5a представлено абсолютное отклонение приближенного значения усредненного по поляризации коэффициента поглощения ($(A_s + A_p)/2$) от точного в координатах "энергия – волновой вектор". Из этого рисунка видно, что предложенный метод

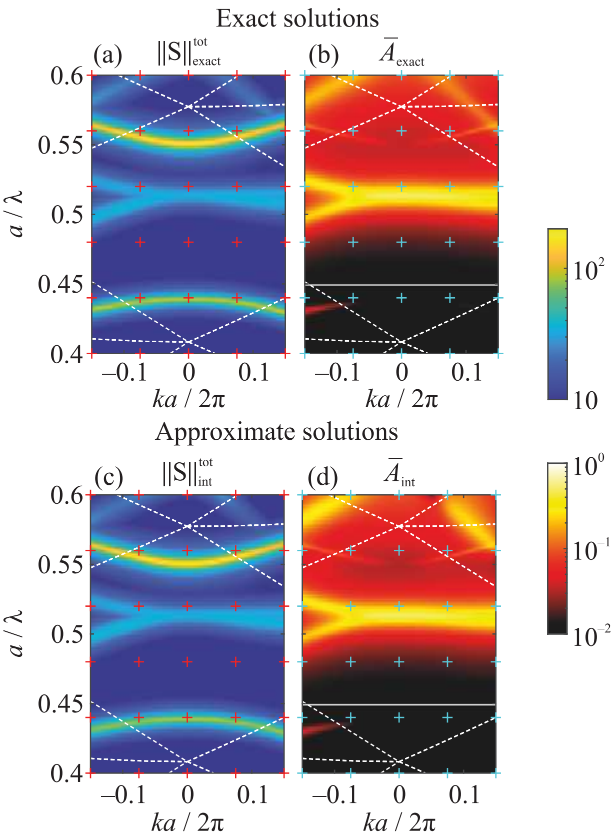

Рис. 4. (Цветной онлайн) Верификация метода интерполяции матриц рассеяния для ФК структуры. Сверху (a), (b): карты нормы матрицы рассеяния и усредненного по поляризации коэффициента поглощения в координатах "энергия–волновой вектор". Снизу (c), (d): соответствующие величины, рассчитанные по интерполированным матрицам рассеяния. Точки прямого расчета матриц рассеяния подслоев отмечены крестами

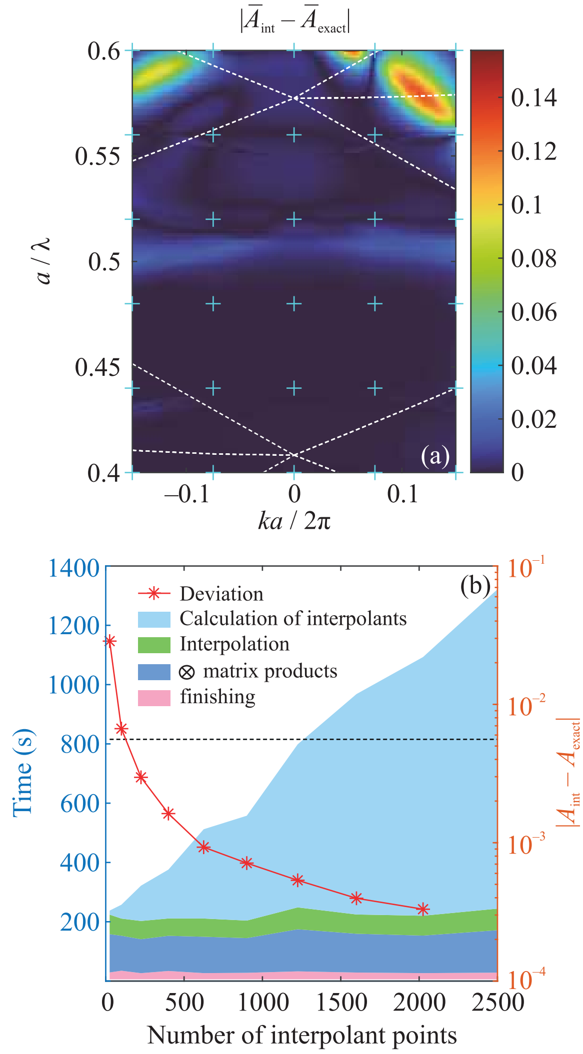

Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Карты модуля отклонения среднего по поляризации коэффициента поглощения $(A_s + A_p)/2$ в координатах энергия – волновой вектор, полученного при помощи интерполяции матрицы рассеяния, от точного значения. Точки прямого расчета матриц рассеяния подслоев отмечены крестами. Аномалии Рэлея показаны пунктирными линиями. (b) – Зависимости времени вычисления карты отражения от количества базовых точек, а именно, времени расчета базовых точек (голубая область), времени интерполяции (зеленая область), времени сшивке матриц рассеяния (синяя область) и времени вычисления коэффициентов поглощения по заданным матрицам рассеяния (розовая область). Горизонтальная пунктирная линия показывает время расчета классическим ФММ

интерполяции демонстрирует высокую точность, в основном, в области ниже дифракционных порогов. В этой зоне отклонение не превышает 2 %, что подтверждает адекватность метода для широкого диапазона расчетов. В то же самое время в области выше дифракционных порогов наблюдается существенный рост погрешности, где отклонение достигает 16 %. Данный факт указывает на возрастающую сложность интерполяции матрицы рассеяния в этом режиме в связи с корневыми особенностями матрицы рассеяния вблизи дифракционных порогов.

Для исследования точности предложенного интерполяционного метода был проведен расчет среднего по спектру и волновому вектору в области $a/\lambda = (0.46\ldots0.53, ka/2\pi = -0.15\ldots0.15)$ (где отрицательные k соответствуют Г-М направлению) модуля отклонения приближенного коэффициента поглощения от точного решения для разного числа базовых точек N_b, в которых матрицы рассеяния подслоев рассчитываются напрямую. Как видно из рис. 5b, средняя точность метода закономерно возрастает с увеличением N_b. В рассмотренном выше случае с $N_b = 30$ среднее отклонение рассчитанного коэффициента поглощения от точного решения составляет порядка 0.03. При увеличении количества базовых точек до $N_b = 100$, погрешность уменьшается до уровня примерно в 1 %, что является достаточным для большинства практических задач.

Соответствующая зависимость общего времени расчета от N_b представлена на рис. 5b. Анализ вклада отдельных этапов алгоритма показывает, что с ростом N_b увеличивается лишь время, затрачиваемое на прямой расчет матриц рассеяния подслоев в базовых точках (голубая область). Время, необходимое для собственно интерполяции (зеленая область), объединения матриц методом Редхеффера (синяя область) и вычисления итоговых коэффициентов поглощения (розовая область), остаются практически постоянными, так как эти операции выполняются на одной и той же мелкой сетке. Таким образом, общее время расчета приблизительно линейно зависит от N_b, что предоставляет исследователю гибкий инструмент для балансировки между точностью и вычислительными затратами.

Важно отметить, что применение описанного метода к более сложным многослойным структурам, таким как, например, приближенные z-однородными слоями сферы или другие объемные ФК элементы, обещает обеспечить значительно больший выигрыш в скорости расчета по сравнению с традиционным ФММ, чем продемонстрировано в данном примере. Это связано с тем, что точный расчет матриц рассеяния подобных подструктур с большим числом слоев в каждой базовой точке является особенно ресурсоемкой операцией, время которой резко возрастает с усложнением системы. Ключевое преимущество метода заключается в том, что время интерполяции T_{int} и последующего объединения матриц не зависит от "предыстории" их получения, то есть от сложности и времени прямого расчета в базовых точках T_{calc}. Следовательно, для сложной структуры общее время расчета $T_{\text{tot}} = T_{\text{calc}}(N_b) + T_{\text{int}}$ будет определяться, в основном, первым слагаемым. Таким образом, можно ожидать, что применение этого подхода к реальным задачам моделирования сложных резонансных систем может давать многократно более высокий прирост производительности, чем показано на рис. 5b.

5. Выводы. В данной работе предложен и верифицирован эффективный алгоритм ускорения ФММ, предназначенный для расчета одномерных и многомерных зависимостей (таких, как спектральные, спектрально-угловые и другие) оптических параметров составных фотонных структур. Метод основан на разделении резонансного слоя на нерезонансные подслои, ключевым свойством которых является плавная зависимость их матриц рассеяния от параметров задачи. Это позволяет с высокой точностью интерполировать данные, рассчитанные на редкой сетке, для последующего восстановления полной картины резонансного рассеяния.

Проведенный численный эксперимент для моделированной кремниевой структуры на диэлектрической подложке показал, что алгоритм позволяет достичь многократного ускорения вычислений без существенной потери точности в описании позиций, форм и добротностей резонансов, включая связанные состояния в континууме. В отличие от методов, основанных на резонансном приближении, предлагаемый подход не требует параметризации и сортировки мод и при условии отсутствия аномалий Рэлея в рассчитываемой области является полностью автоматизированным.

Таким образом, разработанный метод представляет собой практичный инструмент для быстрого и точного дизайна сложных резонансных фотонных устройств, таких как сенсоры, фильтры и элементы нелинейной оптики, где требуется интенсивное сканирование по параметрам. Перспективой развития метода является его распространение на случай перехода через дифракционные аномалии Рэлея.

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 22-12-00351-П).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. S.G. Tikhodeev, A. Yablonskii, E. Muljarov, N.A. Gippius, and T. Ishihara, Phys. Rev. B **66**(4), 045102 (2002).
2. M. Moharam, E.B. Grann, D.A. Pommet, and T. Gaylord, J. Opt. Soc. Am. A **12**(5), 1068 (1995).
3. T. Weiss, G. Granet, N.A. Gippius, S.G. Tikhodeev, and H. Giessen, Opt. Express **17**(10), 8051 (2009).
4. A.A. Shcherbakov and A.V. Tishchenko, Quantum Electron. **40**(6), 538 (2010).
5. S. Spiridonov and A.A. Shcherbakov, J. Comput. Sci. **67**, 101936 (2023).
6. I.M. Fradkin, S.A. Dyakov, and N.A. Gippius, Phys. Rev. B **99**(7), 075310 (2019).
7. I.M. Fradkin, S.A. Dyakov, and N.A. Gippius, Phys. Rev. B **102**(4), 045432 (2020).
8. N.S. Salakhova, I.M. Fradkin, S.A. Dyakov, and N.A. Gippius, Phys. Rev. B **104**(8), 085424 (2021).
9. I.A. Smagin, S.A. Dyakov, and N.A. Gippius, arXiv preprint arXiv:2510.05973 (2025).
10. D.A. Bykov and L.L. Doskolovich, J. Light. Technol. **31**(5), 793 (2012).

11. D. A. Bykov and L. L. Doskolovich, arXiv preprint arXiv:1711.01195 (2017).
12. D. A. Bykov, E. A. Bezus, and L. L. Doskolovich, Opt. Express **25**(22), 27298 (2017).
13. L. Li, Journal of Optics A: Pure and Applied Optics **5**(4), 345 (2003).
14. N. Gippius, S. Tikhodeev, and T. Ishihara, Phys. Rev. B – Condens. Matter Mater. Phys. **72**(4), 045138 (2005).
15. D. Gromyko, S. Dyakov, S. Tikhodeev, and N. Gippius, Photonics Nanostruct.: Fundam. Appl. **53**, 101109 (2023).
16. D. A. Gromyko, S. A. Dyakov, S. G. Tikhodeev, and N. A. Gippius, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **53**, 101110 (2023).
17. R. Redheffer, J. Appl. Math. Mech. **8**(3), 349 (1959).
18. R. C. Rumpf, Prog. Electromagn. Res. B **35**, 241 (2011).