Труды школы-семинара «Волны-2020». Нанофотоника и плазмоника

# НАНОФОТОНИКА И ПЛАЗМОНИКА

| Линейные и нелинейные явления в потоке поверхностных плазмон-   |   |
|---|---|
| поляритонов   |   |
| И.В. Дзедолик   | 2 |
| Температурная зависимость диаграмм направленности второй  |   |
| гармоники от резонансных полупроводниковых наноструктур   |   |
| О.И. Пашина, К.С. Фризюк, Г.П. Зограф, М.И. Петров  | 4 |
| Поляризационная степень свободы сильно локализованных волн:<br>от фундаментальных основ до практических устройств |   |
| О.Е. Ермаков, А.А. Богданов   | 8 |
| Управление оптическими ближними полями кремниевой<br>наночастицы за счет наведенной бианизотропии                 |   |
| М.А. Полева, К.В. Барышникова, А.Б. Евлюхин 1   | 0 |
| Борновское разложение для задачи моделирования металинзы  |   |
| Н.А. Устименко, К.В. Барышникова, Д.Ф. Корнован, А.Б. Евлюхин 1   | 3 |
| Детекция этанола в водном растворе посредством  |   |
| плазмонного сенсора   |   |
| Р.А. Павелкин, Д.В. Нестеренко 1  | 7 |

## Линейные и нелинейные явления в потоке поверхностных плазмон-поляритонов

### И.В. Дзедолик

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь igor.dzedolik@cfuv.ru

последнее B время особое внимание уделяется распространению электромагнитных волн на границах раздела сред [1,2], в частности металлов и диэлектриков, в связи с широкими перспективами применения композитных микро- и наноустройств фотонной плазмонной технике [2]. в И Высокочастотное электромагнитное поле вызывает осцилляции как свободных, так и связанных зарядов в диэлектрических, полупроводниковых и металлических средах. При этом, в результате осцилляций зарядов излучаются вторичные электромагнитные волны, которые гибридизируются с волнами поляризации связанных и свободных зарядов и распространяются в объеме среды, либо вдоль границы раздела сред.

Металлы имеют отрицательную диэлектрическую проницаемость на частотах электромагнитного поля, которые ниже плазменной частоты в этом металле [1]. Электромагнитное поле в этих диапазонах частот проникает в металл на глубину скинслоя, имеющего толщину порядка длины волны. В оптическом, рентгеновском и гамма диапазонах частот фотоны вызывают межзонные переходы в металле, при которых классическая модель свободных электронов перестает работать. Межзонные переходы изменяют зависимость диэлектрической проницаемости металла от частоты, т.е. изменяется закон дисперсии, полученный из уравнений классической теории. Для анализа таких процессов необходимо использовать методы квантовой теории. При частотах электромагнитного поля выше плазменной диэлектрическая проницаемость металлов становится положительной, при дальнейшем повышении частоты поля диэлектрическая проницаемость стремится в пределе к единице.

Электромагнитное поле возбуждает колебания плотности электронного заряда в металле. Плазмон – квазичастица, возникающая при коллективных колебаниях плотности заряда электронов в проводящей среде в результате воздействия высокочастотного электромагнитного поля. Плазмоны могут быть как объемными, так и поверхностными, подразделяются на распространяющиеся (плазмонные волны) и локализованные плазмоны (на неоднородностях, на границах, в нанообъектах). Макроскопические модели плазмонов применимы в наночастицах, образованных не менее, чем тысячью атомов [3].

Свойства плазмонов зависят от величины свободного пробега электронов в композитной структуре. Спектр плазмонов в объемном образце отличается от спектра плазмонов в тонком или толстом слоях одного и того же металла, в наночастице и нанопроводе [1-3]. Геометрические размеры и форма объекта влияют на его резонансные свойства, радиационные эффекты и поглощение электромагнитной волны. Помимо этого, свойства поверхностных плазмонов зависят от параметров среды, с которой контактирует поверхность металла.

В первом приближении свободные электроны в металле можно считать газом с изотропным распределением. Внешнее электромагнитное поле действует на электроны с силой Лоренца, вызывая линейный отклик диэлектрической проницаемости металла. При увеличении амплитуды внешнего поля появляются ангармонические колебания связанных электронов и межзонные переходы, которые приводят к проявлению нелинейных объемных поляризационных механизмов [1]. На границе раздела сред металл-диэлектрик происходит скачок диэлектрической проницаемости, т.е. нарушение трансляционной симметрии, что обуславливает возникновение больших поверхностных токов в скин-слое. Это приводит к возникновению нелинейных поверхностных эффектов на границе раздела сред.

Линейные и нелинейные эффекты при генерации и распространении объемных и поверхностных плазмон-поляритонов описываются классическими и квантовыми линейными и нелинейными моделями [4,5], в частности, квантовыми гидродинамическими моделями [6]. Квантовые модели позволяют выявить физические механизмы, влияющие на динамику плазмон-поляритонов.

Интенсивная электромагнитная волна или мощный электромагнитный импульс генерируют нелинейные плазмон-поляритонные волны – кноидальные волны, кинки и солитоны в объеме среды [4], в плазмонном волноводе и на границе раздела проводящей и диэлектрической сред [5]. Свойства и динамика кноидальных волн и солитонов зависят от параметров возбуждающих электромагнитных волн и импульсов, а также от геометрии и свойств среды, в которой возбуждаются плазмон-поляритоны.

Распространение плазмон-поляритонов в плазмонных волноводах, представляющих собой композитные структуры диэлектрик-металл-диэлектрик или металл-диэлектрик-металл определяется параметрами волновода и интенсивностью волны либо мощностью электромагнитного импульса, которые вводятся в волновод [5]. В зависимости от плотности энергии возбуждающего сигнала, в случае возникновения нелинейного отклика структуры меняется период кноидальной волны и форма импульса, распространяющегося по плазмонному волноводу.

Исследование линейных и нелинейных процессов при распространении и взаимодействии поверхностных плазмон-поляритонов на границе раздела металлического слоя и диэлектрической среды и проектирование на их основе плазмонных наноустройств является одним из наиболее перспективных направлений в области современной плазмоники. Уменьшение размеров плазмонных устройств до единиц нанометров позволит реализовывать новые логические элементы и вентили для процессорной техники, управляющей сигналами на оптических частотах.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-72-20154.

- 1. В.М. Агранович, Д.Л. Миллс "Поверхностные поляритоны" М.: Наука, 1985.
- 2. С.А. Майер "Плазмоника: теория и приложения" М.-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2011.
- 3. В.В. Климов "Наноплазмоника" М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.
- 4. А.П. Сухоруков "Нелинейные волновые взаимодействия в оптике и радиофизике" М.: Наука, 1988.
- 5. I.V. Dzedolik "Solitons and nonlinear waves of phonon-polaritons and plasmonpolaritons" New York: Nova Science Publishers, 2016.
- 6. П.К. Шукла, Б. Элиассон // УФН. 2010. Т. 180. № 1. С. 55.

# Температурная зависимость диаграмм направленности второй гармоники от резонансных полупроводниковых наноструктур.

О.И. Пашина, К.С. Фризюк, Г.П. Зограф, М.И. Петров Физико-технический факультет, НИУ ИТМО, Санкт-Петербург, Россия olesiya.pashina@metalab.ifmo.ru

В последние годы резонансные наночастицы с высоким показателем преломления приобретают большой интерес благодаря сильному электрическому и магнитному отклику в видимом оптическом диапазоне, которые наряду с сильным нелинейным откликом делают их привлекательными для усиления нелинейных эффектов на субволновых длинах волн. В этой работе мы показываем теоретически, как повышенная температура нанорезонаторов AlGaAs изменяет эффективность и направленность излучения генерации второй гармоники. Предлагаемая система состоит из фемтосекундного лазера, который генерирует излучение второй гармоники от наночастицы при двух различных температурах: 25° и 325° С. Благодаря термооптическому эффекту показатель преломления материала существенно изменяется с температурой, поэтому мы получаем перестроение диаграммы направленности второй гармоники, обусловленную спектральным сдвигом положения резонансных мод. Мы считаем, что такой подход проложит ПУТЬ для высокоэффективных нелинейных термодатчиков и перестраиваемых наноразмерных антенн.

Наблюдение и использование нелинейных оптических эффектов стало возможным после появления мощных лазерных источников, но эффективность таких процессов как генерация второй гармоники является довольно слабой. Для повышения данной интенсивности оказалось перспективным использовать полупроводниковые материалы с отсутствием центра инверсии в кристаллической решетке, где эффективность второй гармоники достигает значений 10<sup>-5</sup>-10<sup>-4</sup> [1]. Одним из наиболее распространенных оптических материалов с сильным нелинейным откликом стал AlGaAs [2,3]. Однако в предыдущих работах не учитывалась влияние температуры на оптические свойства материала наночастиц. В нашей работе мы исследовали процесс изменения диаграмм направленности второй гармоники при нагреве.

Температура наноструктуры может быть повышена различными способами, такими как освещение нанообъекта лазером непрерывного излучения (CW) и фемтосекундным лазером [4,5] или просто нагревание окружающей среды, ведущее к изменению показателя преломления материала нанообъекта из-за термооптического эффекта [6,7]. В результате оптические свойства наноструктуры, а следовательно рассеяние, направленность, поглощение и другие, будут существенно изменены. В этой работе мы предлагаем использовать эту возможность для перестроения направленности излучения второй гармоники от наноструктуры AlGaAs. Показывается, что нагрев может быть использован для переключения направления нелинейного сигнала в структуре наноцилиндра.

В нашей работе мы исследуем процесс перестроения диаграммы направленности второй гармоники при переходе от комнатной температуры 25° С к повышенной на 325° С. Мы рассматриваем два независимых случая: i) генерация второй гармоники фемтосекундным лазером с высокой интенсивностью, необходимой для реализации этого нелинейно-оптического процесса при комнатной температуре, и ii) тот же процесс, что и в i), но с учетом коэффициента преломления наноцилиндра при более высоком значении температуры, а именно при 325° С. При повышенной температуре показатель преломления наноструктуры изменяется [8], что приводит к сдвигу спектрального положения резонансов. Следовательно, вклад мультипольных мод на длине волны второй гармоники существенно трансформируется, что может привести к сильному изменению диаграммы направленности дальнего поля [9,10].



Рис. 1. а) Спектры сечения рассеяния для нормального падения (зеленая сплошная линия) и углового падения, близкого к 90°, s-поляризация (красная пунктирная линия) для нанодиска с высотой 400 нм и диаметром 386 нм. ВГ и фундаментальная длины волн отмечены черными пунктирными линиями при 785 нм и 1570 нм соответственно. b) Спектры генерации второй гармоники при двух значениях температуры для того же нанодиска, что и а). Синяя пунктирная линия соответствует 25° С, а красная сплошная линия - для случая 325° С. Фундаментальная длина волны составляет 1570 нм и отмечена вертикальной черной линией.

Чтобы проиллюстрировать этот процесс, мы выбрали  $Al_xGa_{1-x}As$  в качестве материала для нелинейного излучения, где x = 0,198, поскольку при данной концентрации он претерпевает сильный термооптический сдвиг [8], обеспечивающий увеличение показателя преломления примерно на  $\Delta n=0,1$  при нагреве на 300° С. Нелинейный тензор AlGaAs имеет вид:

$$\mathbf{P}_{i}^{2w} = 2\chi^{(2)} \mathbf{E}_{j}(w) \mathbf{E}_{k}(w), \ \{i, j, k\} = \{x, y, z\}, \{y, x, z\}, \{z, x, y\},$$
(1)

где  $\chi^{(2)} = 100$  пм/В [11]. В нашем моделировании мы предполагаем, что интенсивность лазера, генерирующего падающее излучение, составляет I<sub>0</sub>=10<sup>13</sup> Вт/ м<sup>2</sup> на длине волны 1570 нм.

Прежде всего, мы рассматриваем нормальное падение и оптимизируем параметры наноцилиндра, чтобы получить спектральное перекрытие двух резонансов на фундаментальной длине волны и длине волны второй гармоники. В случае сферических наночастиц максимальная интенсивность была достигнута, когда магнитный диполь на первой гармонике генерировал электрический октуполь на второй [9]. Для нанодиска и длины волны падающего излучения 1570 нм эти резонансы спектрально совпадают при диаметре 386 нм и высоте 400 нм. На рис. 1(а). Магнитный резонанс, возбуждаемый на фундаментальной длине волны для нормального падения, приводит к генерации электрического октупольного резонанса на длине волны второй гармоники. Однако этот октуполь не может быть возбужден плоской волной под нормальным углом падения, поэтому показано сечение рассеяния также ДЛЯ перпендикулярного направления. Мы также показываем спектры излучения второй гармоники при этих параметров для двух температур Рис. 1 (b). Видно, что резонансный пик спектрально смещается, и ГВГ становится нерезонансной при более высокой температуре.



Рис. 2. Генерация второй гармоники на наноцилиндре с высотой 400 нм и диаметром 386 нм при нормальном падении (а) и при угле падения 45° (b) для диска с высотой 400 нм и диаметром 414 нм. В верхней части (а, b) показаны силовые линии и величина электрического поля на поверхности наночастицы. Диаграммы направленности в нижней части окрашены в той же шкале.

Из-за определенных правил отбора при генерации второй гармоники для цилиндрических наночастиц при нормальном падении возбуждаются только некоторые конкретные мультиполи, а именно с осевыми числами m = 0, 2, 4. В нашем случае мы получаем резонансное возбуждение электрического октуполя с m = 2, который дает основной вклад аналогично случаю сферических наночастиц [9]. На рис. 2(а) мы получаем распределение электрического поля второй гармоники на поверхности наночастицы в соответствии с мультиполем высокого порядка и соответствующую диаграмму направленности. У нее есть четыре главных лепестка из-за утечки в подложку. Когда мы увеличиваем температуру, наночастица становится нерезонансной на длине волны второй гармоники, а распределение поля теряет свою мультипольную структуру. Диаграмма направленности также изменяется, и интенсивность главных лепестков резко уменьшается.

Чтобы получить более существенное изменение диаграммы направленности, мы рассмотрели тот же процесс при угловом падении 45°, s-поляризации, как показано в 2(b). В этом случае резонанс появляется при диаметре 414 нм и высоте 400 нм. Изменение диаграммы направленности при нагревании в этой геометрии аналогична случаю нормального падения, однако перестроение еще более заметно в этом случае.

Таким образом, в этой работе мы продемонстрировали, что диаграмма направленности второй гармоники наноцилиндра AlGaAs может быть термически перестроена благодаря термооптическому эффекту и спектральному сдвигу резонансов. Параметры наноцилиндра были численно оптимизированы, чтобы добиться наложения резонансов как на основной, так и на длине волны второй гармоники. Численное моделирование показало, что существует сильное перестроение диаграммы направленности и интенсивности генерации второй гармоники, вызванное нагревом наноструктуры. Поэтому эти результаты могут найти практическое применение в термооптической настройке наноантенн.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (РНФ) (18-79-00338).

- 1. R. Camacho-Morales et al. // Nano Lett. E. 2016. V. 16. No. 11. P. 7191–7197.
- 2. L. Carletti et al. //Nanotechnology E. 2017 V. 28. No. 11. P. 114005.
- 3. J. D. Sautter et al. // Nano Lett. E. 2019. V. 19. No. 6. P. 3905-3911.
- 4. G. Baffou et al. // Phys. Rev. B. E. 2011 V. 84. No. 3. P. 035415.
- 5. G. P. Zograf et al. // Nano Lett. E. 2017. V. 17. No. 5. P. 2945–2952.
- 6. R. Kamikawachi et al. // Optics Communications E. 2008. V. 281. No. 4. P. 621I625.
- 7. G. Jellison Jr et al. // Phys. Rev. B. E. 1983. V. 27. N. 12. P. 7466-7472.
- 8. S. Gehrsitz et al. // Journal of Applied Physics E. 2000. V. 87. No. 11. P. 7825-7837.
- 9. K. Frizyuk et al. // Phys. Rev. B. E. 2019. V. 99. No. 7. P. 075425.
- 10. C. Renaut et al. // Nano Lett. E. 2019. V. 19. No. 2. P. 877-884.
- 11. I. Shoji et al. // Opt. Soc. Am. E. 1997. V. 14. No. 9. P. 2268–2294.

# Поляризационная степень свободы сильно локализованных волн: от фундаментальных основ до практических устройств

О.Е. Ермаков, А.А. Богданов

Физико-технический факультет, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия o.yermakov@metalab.ifmo.ru

Спектр электромагнитных волн в любой изотропной среде двукратно вырожден по поляризации. Это означает, что дисперсии собственных мод в случае ТЕ и ТМ поляризации полностью совпадают на любой частоте и в любом направлении распространения. Идентичность дисперсий ТЕ и ТМ волн позволяет использовать в качестве базиса свободного пространства циркулярно-поляризованные плоские волны. Принцип действия всех поляризационных устройств, включая четверть- и полуволновую пластины, основан на снятии поляризационного вырождения за счёт двулучепреломляющих сред (чаще всего, одноосных кристаллов). Таким образом, наличие поляризационного вырождения собственных мод даёт широкие возможности для управления поляризацией света и использования поляризационной степени свободы в задачах микроскопии, криптографии, эллипсометрии, сенсоров и других областей оптики.

В случае локализованных, т. е. поверхностных и волноводных, состояний поляризационная степень свободы отсутствует, так как в общем случае законы дисперсии ТЕ и ТМ мод различны и не вырождены. Этот факт существенно ограничивает функциональные возможности планарных структур и развитие устройств плоской оптики. В частности, аналоги поляризационных устройств для локализованных волн не могут быть реализованы из-за отсутствия их поляризационного вырождения.

В этой работе продемонстрированы различные механизмы формирования и дальнейшего использования поляризационной степени свободы (вырожденного по поляризации спектра) поверхностных и волноводных мод двумерных структур. В частности, для реализации поляризационно-вырожденного спектра предложены следующие структуры: (i) плазмонная метаповерхность, описываемая эффективными поверхностными электрическим и магнитным токами; (ii) самокомплементарная метаповерхность, подчиняющаяся принципу Бабине и описываемая при помощи анизотропного тензора поверхностного импеданса [1]; (iii) диэлектрическая метаповерхность на основе периодического массива цилиндров, выполненных из материала с высоким показателем преломления [2,3].

На основе полученных структур с вырожденным по поляризации спектром проверена концепция волноводного поляризатора. предложена численно И преобразующего поляризацию распространяющейся волноводной моды на одной частоте [3]. Его принцип действия аналогичен обычным полу- и четвертьволновой пластине (Рис. 1а). В качестве аналога свободного пространства, поддерживающего вырождение плоских волн по поляризации, используется диэлектрическая метаповерхность с вырожденным по поляризации спектром волноводных мод. В качестве аналога одноосного кристалла, снимающего поляризационное вырождение, используется модифицированная диэлектрическая метаповерхность, состоящая из цилиндров большего радиуса. Рисунок 1b демонстрирует преобразование поляризации волноводной моды из линейной в эллиптическую.

Важно отметить, что на разных частотах набег фазы между модами модифицированной метаповерхности различен, что приводит к различной поляризации на выходе. Например, из линейной 45° (параметр Стокса  $S_2 = 1$ ) поляризации на входе, можно получить линейную 135° (параметр Стокса  $S_2 = -1$ ), правую/левую циркулярную

(параметр Стокса  $S_3 = \pm 1$ ) или эллиптическую поляризацию на выходе в зависимости от рабочей частоты.



Рис. 1. (а) Принцип работы волноводного поляризатора, преобразующего поляризацию волноводной моды из линейной в круговую по аналогии с четвертьволновой пластиной. Использованы следующие параметры цилиндров: период а = 450 нм, высота H = 0.825a, диаметры D = 0.64a и D<sub>2</sub> = 0.8a. Нижняя строка показывает дисперсии TE и TM собственных мод для метаповерхностей с вырожденным и невырожденным спектром. (b) Распределения тангенциальных компонент электрического поля Re[E<sub>j</sub>·e<sup>iT</sup>] (j = y,z) в плоскости YZ до (A) и после (B) волноводного поляризатора для разных моментов времени T на частоте 250 ТГц. Цветом показаны значения компонент электрического поля от отрицательных (синий) до положительных (красный), что позволяет определить направление и абсолютное значение вектора тангенциального электрического поля **Ет** (правые столбцы) [3].

Полученные результаты не только открывают поляризационную степень свободы сильно локализованного света, но и смогут найти применения в оптических системах измерения и обработки данных и потенциально расширить элементную базу и функционал оптических интегральных устройств.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 20-02-00636) и Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

#### ЛИТЕРАТУРА

1. V. Lenets et al. // arXiv: 2004.06038. 2020.

2. O.Y. Yermakov, A.A. Bogdanov // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 1092. No. 1. P. 012169.

3. O.Y. Yermakov, A.A. Bogdanov, A.V. Lavrinenko // IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 2019. V. 25. No. 3. P. 1-7.

# Управление оптическими ближними полями кремниевой наночастицы за счет наведенной бианизотропии

М.А. Полева<sup>1\*</sup>, К.В. Барышникова<sup>1</sup>, А.Б. Евлюхин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Nanophotonics and Metamaterials, ITMO University, Russia <sup>2</sup> Institute of Quantum Optics, Leibniz Universität Hannover, Welfengarten Street 1, 30167 Hannover, Germany \*mashapoleva@gmail.com

Обычно электрические и магнитные свойства однородных материалов электрической описываются раздельным взаимодействием с И магнитной компонентами внешнего поля соответственно. Однако в общем случае электрический отклик среды или частицы может быть связан как с электрической, так и с магнитной компонентой падающего поля, и наоборот, магнитный отклик — не только с магнитной, но и с электрической. Бианизотропия – явление, описывающее такой тип отклика. Среды или частицы с сильной магнитоэлектрической связью называются бианизотропными.

В данной работе мы предлагаем дизайн кремниевой наночастицы, обладающей сильной наведенной бианизотропией в ближней инфракрасной части спектра за счет специально подобранной геометрии, для поляризационного управления ближним оптическим полем. Мы показываем, что частицы в виде призмы с равнобедренным треугольником в основании (см. вставку на Рис. 1) проявляют бианизотропию омегатипа в дипольном приближении [1], что приводит к возбуждению компонент их дипольных моментов перпендикулярных к полям падающей волны. Для того, чтобы убедиться в применимости дипольного приближения для описания оптического отклика частицы, мы рассчитали ее электрические и магнитные мультипольные моменты, возбуждаемые внешней световой волной, и выполнили мультипольные инфракрасного света кремниевой призмой в основном определяется вкладами ее электрического (ED) магнитного (MD) дипольных моментов.



Рис.1. Спектр сечения рассеяния света кремниевой призмой и соответствующие мультипольные вклады: ED электрический диполь; MD Магнитный диполь; EQ электрический квадруполь; MQ магнитный квадруполь, EOC электрический октуполь. Вставка показывает геометрию частицы и условие облучения плоской световой волной (**k** волновой вектор, **E** электрическое поле).

### Труды школы-семинара «Волны-2020». Нанофотоника и плазмоника

Для расчета мультипольных моментов в декартовом представлении были использованы выражения из [3]. Спектры z-компонент, направленные вдоль падения света. электрического р и магнитного m липольных моментов частины представлены на Рис. 2. Используя метод из [3], прямым расчетом мы демонстрируем, что z-компонента ED (MD) возбуждается у-компонентой магнитного (электрического) поля падающей волны, тем самым подтверждая проявление бианизотропного отклика. Возбуждение продольных **z-компонент** дипольных моментов приводит к концентрации электрических и магнитных полей в ближней волновой зоне у оснований призмы в зависимости от поляризации падающей волны. На Рис. За изображено распределение ближнего магнитного, а на Рис. 3b электрического полей вдоль линии над поверхностью призмы, рассчитанных для взаимно перпендикулярных поляризаций падающей волны. С изменением поляризации тип ближнего поля меняется с электрического на магнитный. При этом сами поля направлены перпендикулярно основанию призмы, что согласуется с продольными компонентами соответствующих дипольных моментов. Заметим, что подобный бианизотропный отклик не возникает в кремниевых призмах с равносторонним треугольником в основании.



Рис 2. Абсолютные значение компонент электрического  $\mathbf{p}=(\mathbf{p}_x,\mathbf{p}_y,\mathbf{p}_z)$  и магнитного  $\mathbf{m}=(\mathbf{m}_x,\mathbf{m}_y,\mathbf{m}_z)$  диполей. Слева – волна падает по оси z, электрическое поле направлено по оси x, магнитное поле по оси y. a) – электрический диполь не проявляет бианизотропию; b) – магнитный диполь проявляет бианизотропию. Справа – волна падает по оси z, электрическое поле направлено по оси y, магнитное поле по оси x. с) – электрический диполь проявляет бианизотропию; d) – магнитный диполь не проявляет бианизотропию; d) – магнитный диполь не проявляет бианизотропию. (На вставке изображено условие падения внешней волны для двух различных поляризаций,  $\mathbf{k}$  – волновой вектор,  $\mathbf{E}$  – электрическое поле)

Полученные результаты демонстрируют важность бианизотропного отклика наночастиц, который может найти свое применение в разработке ультракомпактных устройств для управления электромагнитными процессами на субволновых масштабах [4].



Рис. 3. Распределение z-компоненты ближних электрического и магнитного полей вдоль линии над поверхностью призмы.  $\mathbf{k}$  – волновой вектор,  $\mathbf{E}$  – электрическое поле. a) – возбуждается компонента магнитного поля вдоль оси z. b) – при переключении поляризации на взаимно перпендикулярную возбуждается компонента электрического поля вдоль оси z.

- 1. Asadchy, Viktar S., et al. "Bianisotropic metasurfaces: physics and Applications." *Nanophotonics* 7 (2018): 1069–1094.
- 2. Evlyukhin, Andrey B., and Chichkov, Boris N. "Multipole decompositions for directional light scattering." *Physical Review B* 100 (2019): 125415.
- 3. Asadchy, Viktar S., et al. "Determining polarizability tensors for an arbitrary small electromagnetic scatterer." *Photonics and Nanostructures Fundamentals and Applications* 12 (2014): 298–304
- 4. Evlyukhin, Andrey B., et al. "Bianisotropy for light trapping in all-dielectric metasurfaces." *Physical Review B* 101 (2020): 205415.

### Борновское разложение для задачи моделирования металинзы

Н.А. Устименко<sup>1</sup>, К.В. Барышникова<sup>1</sup>, Д.Ф. Корнован<sup>1</sup>, А.Б. Евлюхин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет ИТМО <sup>2</sup>Institute of Quantum Optics, Leibniz Universität Hannover <u>nikita.ustimenko@metalab.ifmo.ru</u>

Нанофотоника изучает взаимодействие света с веществом на наномасштабе. За последние десятилетия интерес к нанофотонике заметно вырос, и она стала активной областью исследований, которая включает в себя как фундаментальные исследования, так и многочисленные приложения: например, высокоскоростные элементы памяти [1,2], обработка информации [3] и визуализация [4]. Сложность нанофотонных устройств растёт с каждым годом, поэтому нужны быстрые и эффективные методы для их разработки. В недавних работах [6-8] обсуждается использование устройств с большим числом внутренних степеней свободы. Одним из таких устройств является металинза [9]. Металинза – это апериодический конечный массив металлических или диэлектрических наночастиц (или метаатомов), расположенных на субволновом расстоянии друг от друга, резонансы которых позволяют локально управлять фазой и амплитудой прошедшего света в соответствии с их пространственным распределением. На основе металинзы уже были сделаны различные устройства: камера [10], спектрометр [11] и тепловизор [12]. Наша работа посвящена решению проблемы моделирования и оптимизации диэлектрических металинз на основе резонансных наночастиц с индуцированными дипольными моментами. Мы исследовали применимость борновского разложения [13] для моделирования конечного массива (кольца) кремниевых наночастиц, которое может фокусировать свет.

Структуры большей части металинз обладают осевой симметрией, потому что металинза должна фокусировать свет в точке на главной оптической оси, соответствующей оси симметрии линзы [15-17]. Более того, частицы, находящиеся на одинаковом расстоянии от центра линзы, должны менять фазу волны на одинаковую величину. Поэтому базовой структурой любой металинзы является кольцо идентичных наночастиц. Давайте посмотрим, как метод борновского разложения работает для такой структуры.

В нашей работе мы исследовали кольцо, состоящее из 16 сферических кремниевых частиц с радиусом 100 нм (см. рис. 1(а)), имеющих только дипольный оптический отклик в окне прозрачности кремния.



Рис. 1. а) Схема исследуемой структуры. б) Относительная погрешность дипольных моментов для различных длин волн.

Это позволяет использовать приближение точечных диполей для описания оптических свойств кольца. Чтобы определить дипольные моменты всех частиц в кольце, нужно решить систему линейных уравнений [18]:

$$\mathbf{p}^{j} = \alpha_{p} \mathbf{E}_{0}(\mathbf{r}_{j}) + \alpha_{p} \frac{k_{0}^{2}}{\varepsilon_{0}} \sum_{l=1, l\neq j}^{N} \left\{ \widehat{G}_{jl} \mathbf{p}^{l} + \frac{i}{ck_{0}} \left[ \nabla \times \widehat{G}_{jl} \mathbf{m}^{l} \right] \right\},$$
$$\mathbf{m}^{j} = \alpha_{m} \mathbf{H}_{0}(\mathbf{r}_{j}) + \alpha_{m} k_{0}^{2} \sum_{l=1, l\neq j}^{N} \left\{ \frac{c}{ik_{0}} \left[ \nabla \times \widehat{G}_{jl} \mathbf{p}^{l} \right] + \varepsilon_{s} \widehat{G}_{jl} \mathbf{m}^{l} \right\}$$

где **E**<sub>0</sub> и **H**<sub>0</sub> – электрическое и магнитное поля падающей волны; **p**<sup>*j*</sup> и **m**<sup>*j*</sup> – электрический и магнитный дипольные моменты *j*-ой частицы, находящейся в точке **r**<sub>*j*</sub> (*j* = 1,2, ..., *N*);  $\alpha_p$  и  $\alpha_m$  – электрическая дипольная (ЭД) и магнитная дипольная (МД) поляризуемости частицы;  $k_0$  – волновое число падающей волны в вакууме; *c* – скорость света в вакууме;  $\varepsilon_S$  – диэлектрическая проницаемость окружающей среды (здесь воздух,  $\varepsilon_S$  = 1);  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная;  $\hat{G}_{jl} = \hat{G}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_l)$  – диадная функция Грина точечного диполя в свободном пространстве;  $\nabla$  - оператор набла. В нулевом приближении (приближении невзаимодействующих частиц) эта система упрощается до тождества:

$$\mathbf{p}_{(0)}^{j} = \alpha_{p} \mathbf{E}_{0}(\mathbf{r}_{j}),$$
$$\mathbf{m}_{(0)}^{j} = \alpha_{m} \mathbf{H}_{0}(\mathbf{r}_{j}),$$



Рис. 2. Интенсивность электрического поля вблизи кольца для различных длин волн в нулевом приближении (верхний ряд) и как результат точного решения системы (нижний ряд).

Каждое следующее борновское приближение номера *n* учитывает ещё одно перерассеяние фотона в каждой паре диполей по сравнению с предыдущим приближением:

$$\mathbf{p}_{(n)}^{j} = \alpha_{p} \mathbf{E}_{0}(\mathbf{r}_{j}) + \alpha_{p} \frac{k_{0}^{2}}{\varepsilon_{0}} \sum_{l=1, l\neq j}^{N} \left\{ \widehat{G}_{jl} \mathbf{p}_{(n-1)}^{l} + \frac{i}{ck_{0}} \left[ \nabla \times \widehat{G}_{jl} \mathbf{m}_{(n-1)}^{l} \right] \right\},$$
$$\mathbf{m}_{(n)}^{j} = \alpha_{m} \mathbf{H}_{0}(\mathbf{r}_{j}) + \alpha_{m} k_{0}^{2} \sum_{l=1, l\neq j}^{N} \left\{ \frac{c}{ik_{0}} \left[ \nabla \times \widehat{G}_{jl} \mathbf{p}_{(n-1)}^{l} \right] + \varepsilon_{S} \widehat{G}_{jl} \mathbf{m}_{(n-1)}^{l} \right\},$$

Решением системы таким методом (методом простой итерации) позволяет значительно сэкономить время расчёта для большего числа частиц, потому что для нахождения точного решения системы (обращением её матрицы) требуется  $O(N^3)$  операций, в то время как решение итерационным методом требует  $O(N_{\rm it}N^2)$  операций (где N – число частиц,  $N_{\rm it}$  – число итераций) [19].

Прежде всего мы выяснили, какое расстояние между частицами является достаточным для применимости нашего итерационного метода. Чтобы это сделать, мы меняли радиус кольца на разных длинах волн падающего света и смотрели на сходимость дипольных моментов, посчитанных в борновских приближениях, к дипольным моментам, полученных обращением матрицы системы. Мы выбрали три длины волны, соответствующих электрическому дипольному резонансу одиночной частицы (615 нм), магнитному дипольному резонансу (770 нм) и нерезонансному случаю (830 нм), в котором выполняется первое условие Керкера [20]. Все вычисления учитывали дисперсию диэлектрической проницаемости кремния [21]. Разным длинам волн соответствует разное критическое расстояние между центрами частиц  $k_0 D$ : для ЭД резонанса  $k_0 D = 4.54$ , для МД резонанса  $k_0 D = 4.46$ , для нерезонансного случая  $k_0 D =$ 2.04. Эти результаты полностью подтверждают известный факт о существовании ограничений на применимость метода борновских приближений вблизи резонансов. Однако метод может быть использован для разработки металинзы. Выберем радиус кольца, равным 2 мкм. Тогда расстояние между частицами будет достаточно большим, чтобы борновские приближения сходились к точному решению для всех длин волн. На рис. 1(б) приведён график зависимости относительной погрешности дипольных моментов от номера борновского приближения для кольца с радиусом 2 мкм.

На рис. 2 показано распределение интенсивности электрического поля в плоскости xz вблизи кольца, находящегося в плоскости x = 0. Ось x является осью симметрии кольца, а также направлением распространения падающей волны. Хорошо видно, что кольцо обладает главным свойством линзы, а именно фокусирует свет в яркое пятно на своей оси симметрии. Оптимизация большого числа частиц позволит уменьшить размер пятна и увеличить интенсивность сфокусированного света. Интересно, что расчёт интенсивности в нулевом приближении (верхний ряд на рис. 2) не только качественно, но и количественно согласуется с результатами точного решения (нижний ряд на рис. 2). Относительная погрешность равна 5.8% для 615 нм, 7.6% для 770 нм и всего 2.7% для 830 нм.

Также мы сравнили наши аналитические результаты с результатами расчета трехмерной электродинамической задачи методом конечных элементов в программе COMSOL Multiphysics. Результаты сравнения приведены на рис. 3. Мы можем сделать вывод о том, что модель точечных диполей работает хорошо, потому что расхождения точного решения и расчета в COMSOL Multiphysics не превосходят 5%. Более того, поля в нулевом приближении могут быть посчитаны с высокой точностью, поэтому оно может быть использовано в дальнейшей оптимизации металинзы.

В заключение, мы исследовали кольцо, базовую структуру диэлектрической металинзы, и проанализировали применимость метода борновских приближений для моделирования этой структуры. Было показано, что интенсивность света может быть



Рис. 3. Относительная погрешность интенсивности электрического поля вдоль оси кольца, посчитанной в нулевом приближении (пунктирная линия) и как результат точного решения системы (сплошная линия). Обе погрешности считаются относительно результата расчета трехмерной электродинамической задачи методом конечных элементов.

рассчитана достаточно точно в нулевом приближении по сравнению с точным решением и расчетом трехмерной электродинамической задачи методом конечных элементов.

- 1. Tian J. et al. // Nature communications. 2019. T. 10. №. 1. C. 1-9.
- 2. Karvounis A. et al. // Applied Physics Letters. 2016. T. 109. №. 5. C. 051103.
- Krizhevsky A., Sutskever I., Hinton G. E. Imagenet classification with deep convolutional neural networks //Advances in neural information processing systems. - 2012. - C. 1097-1105.
- 4. Lin R. J. et al. Achromatic metalens array for full-colour light-field imaging //Nature nanotechnology. 2019. T. 14. №. 3. C. 227-231.
- 5. Yao K., Unni R., Zheng Y. Intelligent nanophotonics: merging photonics and artificial intelligence at the nanoscale //Nanophotonics. 2019. T. 8. №. 3. C. 339-366.
- Molesky S. et al. Inverse design in nanophotonics //Nature Photonics. 2018. T. 12. – №. 11. – C. 659-670.
- 7. Sell D. et al. Ultra-high-efficiency anomalous refraction with dielectric metasurfaces //ACS Photonics. – 2018. – T. 5. – №. 6. – C. 2402-2407.
- 8. Pestourie R. et al. // Optics express. 2018. T. 26. №. 26. C. 33732-33747.
- 9. Khorasaninejad M., Capasso F. // Science. 2017. T. 358. №. 6367. C. eaam8100.
- 10. Engelberg J. et al. Near-IR wide-field-of-view Huygens metalens for outdoor imaging applications //Nanophotonics. 2020. T. 9. №. 2. C. 361-370.
- 11. Lee G. Y. et al. // Nature communications. 2018. T. 9. №. 1. C. 1-10.
- 12. Zhu A. Y. et al. // Apl Photonics. 2017. T. 2. №. 3. C. 036103.
- 13. Newton R. G. Scattering theory of waves and particles. Springer Science & Business Media, 2013.
- 14. Meem M. et al. //Proceedings of the National Academy of Sciences. 2019. T. 116. №. 43. C. 21375-21378.
- 15. Wang S. et al. // Nature communications. 2017. T. 8. №. 1. C. 1-9.
- 16. Khorasaninejad M. et al. // Science. 2016. T. 352. №. 6290. C. 1190-1194.
- 17. Tanriover I., Demir H. V. // Applied Physics Letters. 2019. T. 114. №. 4. C. 043105.
- 18. Evlyukhin A. B. et al. // Physical Review B. 2010. T. 82. №. 4. C. 045404.
- 19. Cormen T. H. et al. Introduction to algorithms. MIT press, 2009.
- 20. Kerker M., Wang D. S., Giles C. L. // JOSA. 1983. T. 73. №. 6. C. 765-767.
- 21. Aspnes D. E., Studna A. A. // Physical review B. 1983. T. 27. №. 2. C. 985.

## Детекция этанола в водном растворе посредством плазмонного сенсора

**Р.А.** Павелкин<sup>1</sup>, Д.В. Нестеренко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Россия, г. Самара, Московское Шоссе 34 <sup>2</sup>ИСОИ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, 443001, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 151 roma.pavelkin@mail.ru

В работе рассматриваются слоистые сенсорные структуры, поддерживающие возбуждение мод поверхностных плазмон-поляритонов (ППП), для детекции этанола с различной концентрацией в водной среде. В рассматриваемых структурах моды ППП распространяются вдоль границ раздела сред металл/раствор. Анализ характеристик резонансного отклика мод ППП и его чувствительности к изменению показателя преломления раствора проводится на основе аппроксимации Фано в рамках теории эффективной среды в видимом и инфракрасном диапазонах. Выявлены области достижения максимальной чувствительности в ближнем и среднем инфракрасном диапазоне, что открывает возможности применения плазмонных структур в сенсорике вне областей поглощения воды.

Исследуемая в численном эксперименте структура в конфигурации Кречмана [1] изображена на рис. 1 и представляет собой трёхслойную структуру, включающую полубесконечный слой 0 высокоиндексного непоглощающего диэлектрика с показателем преломления  $n_0$ , металлический слой 1 конечной ширины h с комплексным показателем преломления *n*<sub>1</sub> и полубесконечный диэлектрический слой 2 с комплексным показателем преломления  $n_2$ , представляющий собой детектируемую среду. Для численного моделирования резонансных характеристик однослойных рассматривались следующие параметры. сенсорных структур В расчётах полубесконечный слой 0 представляет собой высокоиндексную призму из материала ZnSe с показателем преломления n<sub>0</sub> [2], обладающую низким поглощением от зелёной части видимого диапазона до среднего ИК диапазона. В вычислениях поглощение призмы считается малым, и n<sub>0</sub> принимает только действительные значения. Значения показателя преломления n<sub>1</sub> слоя 1 соответствовали Au [3]. В качестве материалов полубесконечного слоя 2 с показателем преломления n<sub>2</sub> рассматривались водные растворы этанола, показатель преломления которых рассчитывался с использованием данных по комплексному показателю преломления воды [4] и 99,9 % этанола [5]. Введем здесь следующие обозначения растворов: раствор С1 – 100% воды и 0% этанола, раствор С<sub>2</sub> – 66% воды и 33% этанола, раствор С<sub>3</sub> – 50% воды и 50% этанола, раствор С<sub>4</sub> – 33% воды и 66% этанола, раствор С<sub>5</sub> – 0% воды и 100% этанола.



Рис. 1. Плазмонная сенсорная структура в конфигурации Кречмана.

Для трехслойной структуры Фано аппроксимация полного коэффициента отражения  $|r_{012}|^2$  описывается формулой [6]

$$\left|\tilde{r}_{012}\right|^{2} = \left|r_{012}^{c}\right|^{2} \frac{(\alpha - \gamma'_{zero})^{2} + \gamma''^{2}_{zero}}{(\alpha - \gamma'_{pole})^{2} + \gamma''^{2}_{pole}},\tag{1}$$

где  $\gamma_{zero} = \gamma'_{zero} + i\gamma''_{zero}$ ,  $\gamma_{pole} = \gamma'_{pole} + i\gamma''_{pole}$ . С помощью параметров Фано аппроксимации *a*, *b*,  $\gamma_{pole}$  и  $\gamma_{zero}$  возможно провести оценку характеристик формы линии ППП резонансов, как ширины резонанса на полувысоте (FWHM), высоты резонанса, положения резонанса в пространственном спектре  $\theta_{res}$ , усиления поля, как это было сделано в [7].

Характеристика чувствительности (FOM) сенсора на основе резонанса ППП, дающая оценку снизу максимальной рефрактометрической чувствительности по интенсивности  $\max_{\alpha} S_{I}(\lambda)$ , определяется как:

$$FOM(\lambda) = S_{\gamma} \frac{\left|\tilde{r}_{012}(\alpha_{\max})\right|^2 - \left|\tilde{r}_{012}(\alpha_{\min})\right|^2}{\Gamma},$$
(2)

где  $\alpha_{\max}$  и  $\alpha_{\min}$  – положения максимума и минимума отражательной способности трехслойной структуры, рассчитываемые как положения экстремумов первой производной выражения (3),  $S_{\gamma} = |\Delta \gamma'_{zero} / \Delta n_2|$  – чувствительность положения резонанса. Поскольку  $\overline{\text{FOM}} = (\text{FOM}_i - \text{FOM}_{i-1})/2 \approx \Delta R_{\max} / \Delta n_2$  [8], где  $\text{FOM}_i$  – FOM структуры при детекции  $C_i$  раствора, то выражение для оценки максимального изменения интенсивности отраженного света при изменении концентрации этанола, растворенного в воде, принимает вид:

$$\Delta R_{\max} \ge \text{FOM} \cdot \Delta n_2, \tag{3}$$

где FOM – среднее значение FOM структуры для C<sub>i</sub> и C<sub>i-1</sub> растворов.

Расчеты FOM проводились для значений длин волн в диапазоне прозрачности ZnSe от 0,5 до 9,9 мкм с шагом 50 нм для различных значений толщины *h* слоя металла в диапазоне от 1 до 100 нм с шагом 1 нм. Чувствительность положения резонанса оценивалась для изменения действительной части показателя преломления  $\Delta n_2 = n_{C_i} - n_{C_{i-1}}$ .  $\Delta R_{\text{max}}$  рассчитывалось для значений длин волн в диапазоне

прозрачности ZnSe от 0,5 до 6 мкм с шагом 50 нм для различных значений толщины h слоя металла в диапазоне от 1 до 100 нм с шагом 1 нм. FOM и  $\Delta R_{\text{max}}$  как функции толщины слоя Au и длины падающей волны приведены на рис. 2.



Рис. 2. Зависимость оценки чувствительности FOM (верхний ряд) при детекции раствора а) C<sub>1</sub>, б) C<sub>2</sub>, в) C<sub>3</sub>, г) C<sub>4</sub>, д) C<sub>5</sub>; и изменение отражательной способности структуры (нижний ряд) для раствора е) C<sub>2</sub>, ж) C<sub>3</sub>, з) C<sub>4</sub>, и) C<sub>5</sub> относительно раствора C<sub>1</sub>.

Видно, что область максимальных величин FOM находится около 40 нм толщины слоя Au и 1,8 мкм длины падающей волны и достигает величины 200 RIU<sup>-1</sup>. При увеличении концентрации этанола в растворе чувствительность структуры увеличивается в области длин волн от 4 до 6 мкм. Нижний ряд рис. 2 демонстрирует изменение отражательной способности структуры при изменении состава раствора вода-этанол, и из рисунков е) – и) видно, что на длинах волн около 2 - 2,5 мкм возможна детекция этанола во всех рассмотренных концентрациях. На длинах волн от 4 до 6 мкм наиболее эффективно детектировать раствор с высоким содержанием этанола.

Для определения оптимальной длины волны и толщины Au, при которых возможно детектировать этанол в растворе для всех рассмотренных концентраций C<sub>i</sub>, рассчитывался показатель  $\Xi = \sqrt[i]{\prod_{i} \Delta R_{maxi}}$ . Величины  $\Xi$  в a.u. отображены на рис. 3.



Рис. 3. Показатель **Ξ** изменения отражательной способности для детекции всех рассматриваемых смесей.

Максимальной величине измерения отражательной способности соответствует толщина Au равная 37 нм и длина волны 2,6 мкм. На рис. 4 представлены пространственные спектры нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО)

сенсорной структуры с h = 37 нм на длине волны 2,6 мкм для детекции пяти растворов с различным соотношением воды и этанола.



Рис. 4. Спектры НПВО структур на основе Au для детекции растворов с различным соотношением воды и этанола, рассчитанные для длины волны 2,6 мкм и *h* = 37 нм.

В работе продемонстрированы спектральные области чувствительности плазмонных сенсоров в конфигурации Кречмана на основе одного слоя Аи к изменению концентрации этанола в воде. Определена оптимальная толщина золотого слоя и длина волны падающего света, при которых обеспечивается детекция этанола с концентрациями 33%, 50% и 66% в водном растворе. Полученные результаты могут быть применены для разработки и оптимизации высокочувствительных сенсоров на основе слоистых плазмонных структур для ИК диапазона для детекции как в жидких растворах, так и в газовых средах.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (соглашение № 007–ГЗ/ЧЗЗ6З/26) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 18–29–20006).

### ЛИТЕРАТУРА

1. E. Kretschmann, H. Raether // Z Naturforsch 1968 23a:2135-6.

2. M.R. Querry "Optical constants of minerals and other materials from the millimeter to the ultraviolet" University of Missouri-Kansas, 1987.

3. E.D. Palik "Handbook of optical constants of solids" Orlando: Academic Press, 1984.

4. D.J. Segelstein "The complex refractive index of water" Kansas City, Missouri: University of Missouri - Kansas City, 1981.

5. E. Sani, A. Dell'Oro // Optical materials 2016 60:137-41.

6. D.V. Nesterenko, S. Hayashi, Z. Sekkat // Phys Rev B 2018 97:235437.

7. Д.В. Нестеренко и др. // Компьютерная оптика 2019 Т. 43 №4 С 596-604.

8. D.V. Nesterenko, Z. Sekkat // Plasmonics 2013 8(4):1585-95.