

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ОТРАЖЕНИЯ ПЕРФОРИРОВАННЫХ МНОГОСЛОЙНИКОВ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЙ НАНОФОТОНИКИ

**Нижник Виталий Дмитриевич**

*магистрант*

**Михалев Александр Алексеевич**

*магистрант*

**Стародубцев Евгений Генрихович**

*кандидат физико-математических наук, доцент*

*Гомельский государственный технический университет имени П.О.Сухого  
г. Гомель, Республика Беларусь*

### 1. Введение

Быстрое развитие теории и технологий нанопотоники, оптики метаматериалов и метаповерхностей привело к уменьшению размеров многих оптоэлектронных и оптических устройств. Используя различные особенности взаимодействия электромагнитного поля с наноструктурированными материалами, удалось получить преобразователи и модуляторы характеристик излучения, голограммы, сенсоры, оптические системы обработки данных с толщинами в несколько нанометров [1-5]. Эффективное преобразование фазы и амплитуды электромагнитной волны при нанометровых размерах композитного материала требуется для многих ультратонких оптических устройств. Для решения таких задач успешно используются метаповерхности, реализованные на основе различных физических принципов [2, 4, 5-8]. Однако технологии получения метаповерхностей включают сложные и дорогие методы нанолитографии, что ограничивает разработку устройств большой площади (например, фильтров, голограмм). Поэтому активно предлагаются альтернативные методы для разработки метаповерхностей и реализации их функциональности для приложений. В работах [9-12] предложены теоретически и обоснованы методами аналитического моделирования новые подходы для разработки ультратонких преобразователей фазовых и энергетических характеристик когерентного электромагнитного излучения, основанные на использовании слоистых систем, включающих слои «нулевых» ( $\epsilon$ -near-zero, ENZ) электромагнитных метаматериалов. Такие материалы характеризуются малыми значениями диэлектрической и маг-

нитной проницаемостей и представляют большой интерес для современной оптики [13-18].

Целью настоящей работы является дальнейшее математическое и компьютерное моделирование отражения электромагнитных волн многослойными системами [10], включающими перфорированные слои и подложки из ENZ метаматериалов, а также оптимизация характеристик и режимов работы данных оптических элементов.

Для достижения указанной цели были решены следующие задачи:

1) Доработка и адаптация аналитической модели исследуемой системы, предложенной в [10] на основе точных решений граничных электродинамических задач, для реализации в программном комплексе, использующем технологии объектно-ориентированного программирования.

2) Разработка программного комплекса на основе программного обеспечения Python 3.7.9, библиотек math, smath, matplotlib, numpy, фреймворка PyQt.

3) Численное моделирование, графический анализ и оптимизация оптических характеристик исследуемой системы.

## **2. Постановка задачи**

Рассмотрим отражение плоской монохроматической электромагнитной волны от перфорированной слоистой системы при наклонном падении излучения. Схема моделируемой оптической системы приведена на рис. 1 [10].

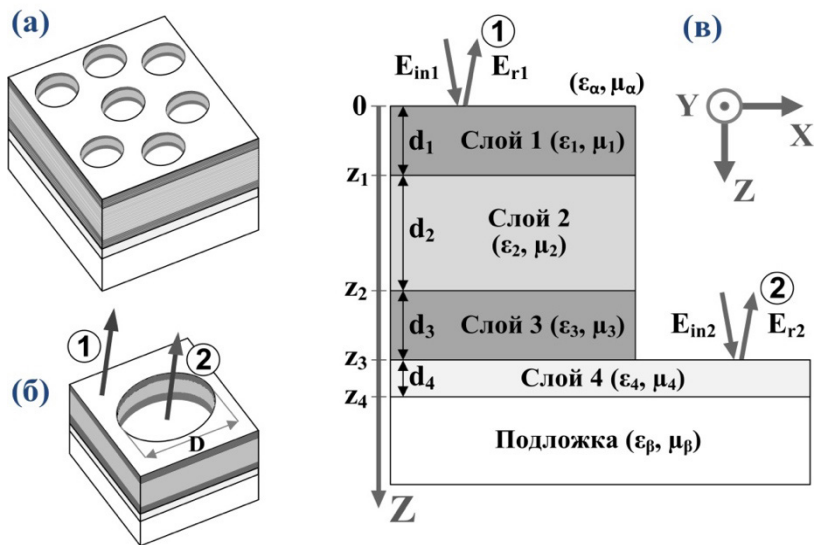
В частности, при использовании таких систем с большим количеством микроотверстий в качестве фазовых бинарных наноголограмм [19], каждое микроотверстие представляет собой один пиксель голограммы. Микроотверстия также могут быть использованы в качестве основных и простых в получении «рабочих элементов» не только наноголограмм, но и различных ультратонких преобразователей фазы и амплитуды отраженного излучения. Микроотверстия в многослойной системе могут быть получены разными способами, например, при использовании технологий лазерной абляции [19]. Многослойник включает дополнительные (защитные, управляющие) слои из обычных материалов (слои 1, 3, 4), основной слой 2 и оптически толстую подложку, электромагнитные свойства которой могут соответствовать ENZ метаматериалам.

## **3. Математическая модель, алгоритмы расчета и особенности их программной реализации**

Обобщенная графическая схема алгоритма расчетов приведена на рис. 2. Диаграмма классов разработанного программного комплекса представлена на рисунке 3. Программный комплекс состоит из 5 классов. В классе Main находятся методы для вызова основной логики. Класс ResultGraph содержит методы, которые отображают графики и позволяют задавать параметры

содержимого графиков. Класс CalculationRef содержит основные программные методы, которые рассчитывают характеристики прошедшего излучения. Этот класс является ядром всей системы. В классах RangeOperations и CalcGraphParams находятся методы, создающие массивы значений для оси X и выполняющие вызовы математических методов из класса CalculationRef.

Для реализации программного комплекса использованы технологии объектно-ориентированного программирования на языке Python [20, 21]. Для работы с комплексными числами в программном комплексе используется библиотека cmath, позволяющая выполнять все необходимые операции над комплексными числами. Используя параметры real и imag, возможно получение вещественной и мнимой частей комплексных чисел. Для работы со стандартными математическими операциями используются средства библиотеки math.



**Рисунок 1** – (а) Схема перфорированной многослойной системы. (б) Схема одного микроотверстия. Лучи, отраженные от многослойника, обозначены цифрами 1 и 2 (падающая волна, волны внутри слоёв и подложки не показаны).  $D$  – диаметр микроотверстия. (в) Геометрия соответствующих граничных электродинамических задач. Для каждого слоя указаны толщины, диэлектрические и магнитные проницаемости материалов слоев.  $E_{in1,2}$  и  $E_{r1,2}$  – напряженности электрического поля падающих и отраженных волн,  $d_1+d_2+d_3$  – глубина микроотверстия.

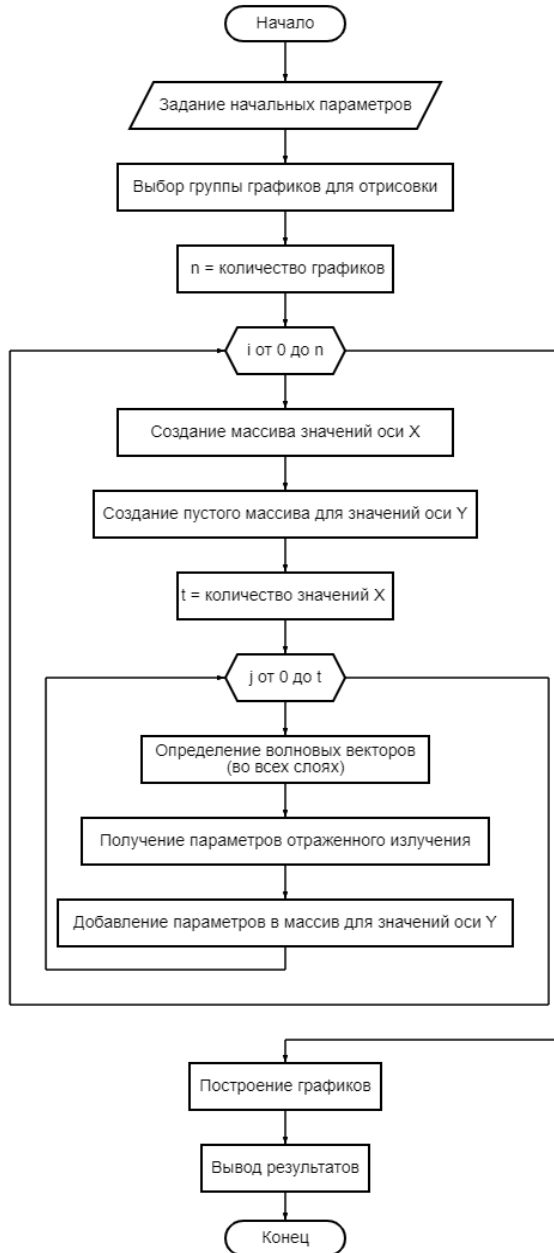
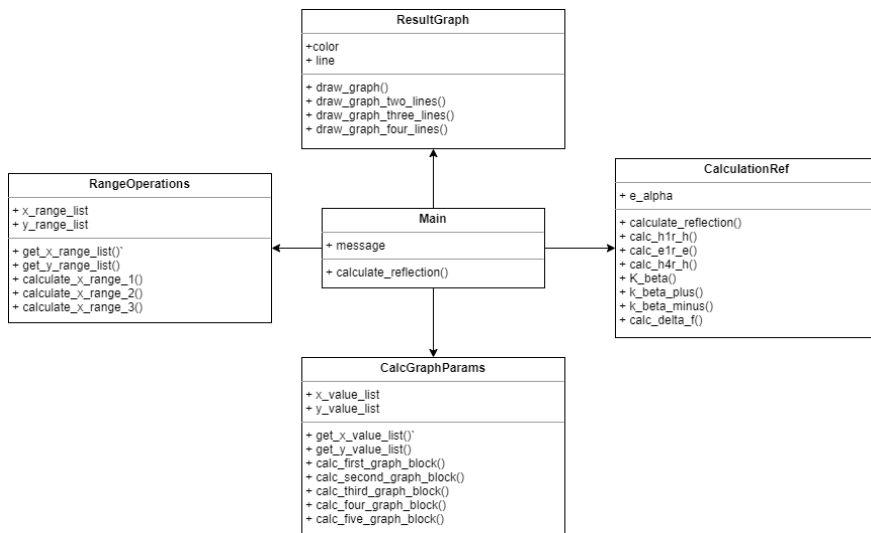


Рисунок 2 – Обобщенная графическая схема алгоритма расчётов



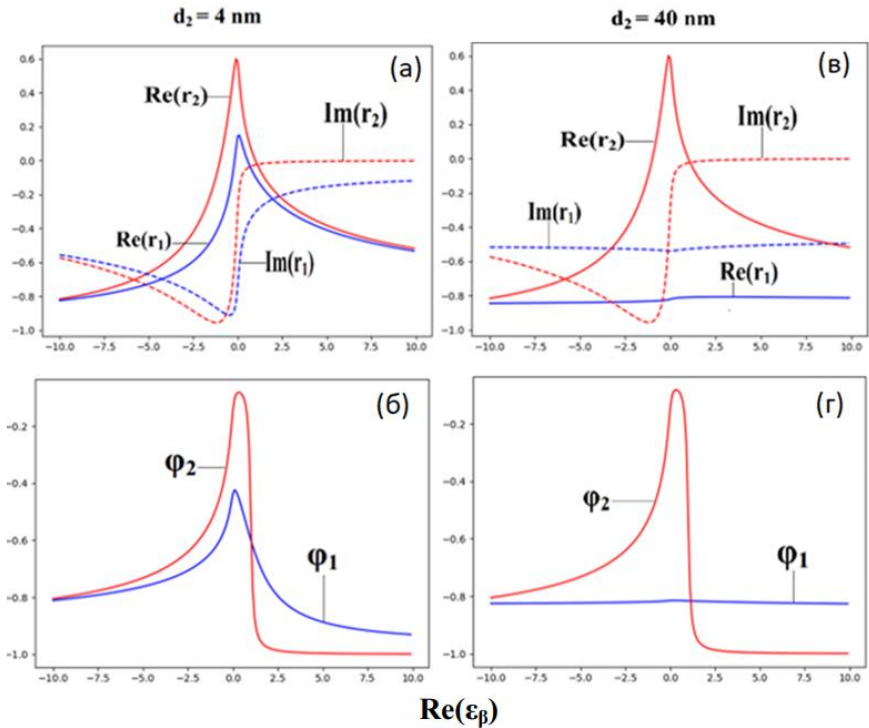
*Рисунок 3 – Диаграмма классов разработанного программного комплекса*

#### 4. Основные результаты компьютерного моделирования оптических свойств перфорированных многослойников

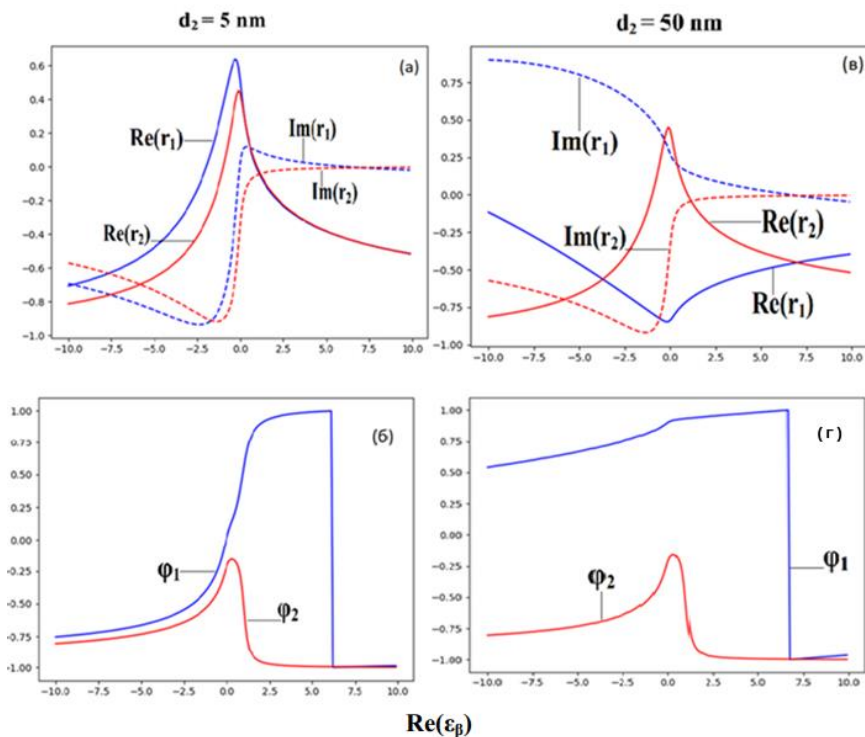
Целью моделирования являлось определение наиболее оптимальных диапазонов параметров исследуемой системы для её потенциального применения в приложениях нанопотоники. В частности, исследовались возможности получения больших значений разности фаз волн 1 и 2 для минимальных (субволновых) толщин слоёв (рис. 1) при достаточно высоком отражении системы. Для компьютерного моделирования в качестве материальных параметров слоёв использовались электромагнитные параметры реализуемых ENZ метаматериалов и два типа материалов, часто применяемых в приложениях фотоники: серебро в качестве металлического компонента и материалы с фазовым переходом (phase-change materials, PCM), широко используемые в оптических устройствах хранения данных, оптоэлектронике, голографии и других приложениях. При изменениях температуры в PCM происходят фазовые переходы, ведущие, в частности, к значительным изменениям диэлектрических свойств данных материалов. В результате имеются широкие возможности термического и оптического управления устройствами на основе PCM. Исследовались случаи, когда основной слой 2 или подложка образованы серебром или PCM ( $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ ,  $\text{VO}_2$ ). Фазы и разности фаз на графиках рассчитаны в единицах радианы/ $\pi$ . Для всех графиков ниже материалы слоёв предполагались изотропными, и рассматривалось нормальное падение электромагнитных волн на исследуемую систему. Основные допущения ис-

ходной аналитической модели и значения её параметров приведены в [10].

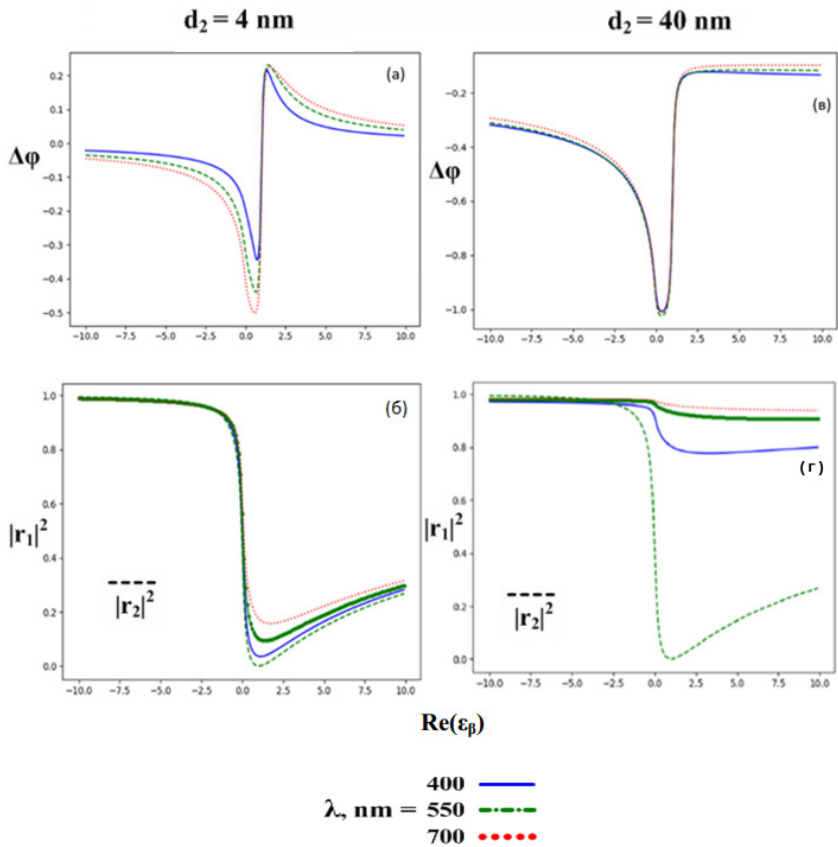
Приведенные на рис. 4-6 данные характеризуют возможности значительного увеличения разности фаз волн 1 и 2 при достаточно высоком отражении излучения. Результаты моделирования показывают, что рассмотренные эффекты могут быть реализованы при существенно субволновых толщинах слоев в случае электромагнитных свойств подложки, близких к ENZ материалам.



**Рисунок 4** – Влияние параметра  $Re(\epsilon_{\beta})$  на действительную и мнимую части амплитудных коэффициентов отражения волн 1 и 2 (а, в), фазы волн 1 и 2 (б, г). Толщина основного слоя:  $d_2 = 4$  нм (а, б), 40 нм (в, г). Значения параметров для всех графиков:  $d_{1,3,4} = 0$ , длина волны возбуждающего излучения  $\lambda = 550$  нм,  $Im(\epsilon_{\beta}) = 0.1$ ,  $\mu_{\beta} = 1$ , материал основного слоя – серебро. Параметр  $Re(\epsilon_{\beta})$  используется в качестве оси абсцисс для всех графиков.



**Рисунок 5** – Влияние параметра  $Re(\epsilon_\beta)$  на действительную и мнимую части амплитудных коэффициентов отражения волн 1 и 2 (а, в), фазы волн 1 и 2 (б, г). Толщина основного слоя:  $d_2 = 5$  нм (а, б), 50 нм (в, г). Значения параметров для всех графиков:  $d_{1,3,4} = 0$ , длина волны возбуждающего излучения  $\lambda = 650$  нм,  $Im(\epsilon_\beta) = 0.2$ ,  $\mu_\beta = 1$ , материал основного слоя –  $VO_2$ . Параметр  $Re(\epsilon_\beta)$  используется в качестве оси абсцисс для всех графиков.



**Рисунок 6** – Зависимости разности фаз (а, в) и энергетических коэффициентов отражения (б, г) волн 1 и 2 от параметра  $\text{Re}(\varepsilon_\beta)$  при разных длинах волн возбуждающего излучения. Толщина основного слоя:  $d_2 = 4 \text{ нм}$  (а, б),  $40 \text{ нм}$  (в, г). Значения параметров для всех графиков:  $d_{1,3,4} = 0$ ,  $\text{Im}(\varepsilon_\beta) = 0.1$ ,  $\mu_\beta = 1$ , материал основного слоя – серебро. Параметр  $\text{Re}(\varepsilon_\beta)$  используется в качестве оси абсцисс для всех графиков.

### 5. Заключение.

В результате работы аналитическая модель взаимодействия электромагнитного излучения с перфорированными многослойниками [10] адаптирована для разработки программного комплекса, основанного на технологиях объектно-ориентированного программирования. Соответствующие алгоритмы модернизированы, разработаны классы и методы, реализованные с по-



мощью языка программирования Python и его библиотек, а также модули расчета и графического анализа оптических характеристик отраженного излучения. Данные моделирования подтверждают результаты работы [10] и могут быть использованы для дальнейшей оптимизации параметров и режимов работы исследованных систем.

### Список литературы

1. Walther, B. *Diffractive optical elements based on plasmonic metamaterials.* / B. Walther, C. Helgert, C. Rockstuhl, T. Pertsch // *Applied Physics Letters.* – 2011. – Vol. 98. – P. 191101–1–3.
2. Nanfang, Y. *Light Propagation with Phase Discontinuities: Generalized Laws of Reflection and Refraction.* / Y. Nanfang, P. Genevet, F. Aieta, F. Capasso // *Science.* – 2011. – Vol. 334. – P. 333–337.
3. Larouche, S. *Infrared metamaterial phase holograms.* / S. Larouche, T. Talmage // *Nature materials.* – 2012. – Vol. 11. – P. 450–454.
4. Aieta, F. *Reflection and refraction of light from metasurfaces with phase discontinuities.* / F. Aieta, F.A. Kabiri, P. Genevet, N. Yu, M.A. Kats, Z. Gaburro, F. Capasso // *Journal of Nanophotonics.* – 2012. – Vol. 6. – P. 063532–1–9.
5. Kildishev, A.V. *Planar photonics with metasurfaces.* / A.V. Kildishev, A. Boltasseva, V.M. Shalaev // *Science.* – 2013. – Vol. 339. – P. 1232009–1–6.
6. Yu, N. *Flat optics with designer metasurfaces.* / N. Yu, F. Capasso // *Nature materials.* – 2014. – Vol. 13. – P. 139–150.
7. Ye, W. *Spin and wavelength multiplexed nonlinear metasurface holography.* / W. Ye, F. Zeuner, X. Li, S. He // *Nature Communications.* – 2016. – Vol. 7. – P. 11930–1–7.
8. Genevet, P. *Recent advances in planar optics: from plasmonic to dielectric metasurfaces.* / P. Genevet, F. Capasso, F. Aieta, M. Khorasaninejad, R. Devlin // *Optica.* – 2017. – Vol. 4. – P. 139–152.
9. Starodubtsev, E.G. *Analytical modeling of nanometric perforated multilayers as perspective materials for ultra-thin holograms and phase transformers of reflected radiation* / E.G. Starodubtsev // *Materials Research Express.* – 2018. – Vol. 5. – P. 1–16.
10. Starodubtsev, E. *Features of reflection of electromagnetic waves from nanometric perforated multilayers including epsilon-near-zero metamaterials* / E. Starodubtsev // *EPJ Appl. Metamat.* – 2019. – Vol. 6. – P. 1–13.
11. Starodubtsev, E. *Features of transmission of electromagnetic waves through composite nanoresonators including epsilon-near-zero metamaterials* / E. Starodubtsev // *EPJ Appl. Metamat.* – 2020. – Vol. 7. – P. 1–14.

12. Starodubtsev, E. *Transmission of layered nanoresonators including epsilon-near-zero metamaterials: interference-enabled opportunities to realize ultrathin polarization converters* / E. Starodubtsev // *Journal of Electromagnetic Waves and Application* (Published online: 16 Dec 2020, <https://doi.org/10.1080/09205071.2020.1860835>).

13. Ziolkowski, R.W. *Wave propagation in media having negative permittivity and permeability* / R.W. Ziolkowski, E. Heyman // *Physical Review E*. – 2001. – Vol. 64. – P. 056625 – 1 – 15.

14. Alù, A. *Epsilon-near-zero metamaterials and electromagnetic sources: Tailoring the radiation phase pattern* / A. Alù, M.G. Silveirinha, A. Salandrino, N. Engheta // *Physical Review B*. – 2007. – Vol. 75. – P. 155410 – 1 – 13.

15. Lindell, I.V. *Zero axial parameter (ZAP) medium sheet* / I.V. Lindell, A.H. Sihvola // *Progress In Electromagnetics Research*. – 2009. – Vol. 89. – P. 213 – 224.

16. Starodubtsev, E.G. *Characteristic properties of electromagnetic wave interaction with uniaxial absorbing metamaterials: A case of the near-zero axial parameter* / E.G. Starodubtsev // *Metamaterials*. – 2010. – No. 4. – P. 32 – 43.

17. Maas, R. *Experimental realization of an epsilon-near-zero metamaterial at visible wavelengths* / R. Maas, J. Parsons, N. Engheta, A. Polman // *Nature Photonics*. – 2013. – Vol. 7. – P. 907 – 912.

18. Kinsey, N. *Near-zero-index materials for photonics* / N. Kinsey, C. DeVault, A. Boltasseva, V.M. ShalaeV // *Nature Reviews Materials*. – 2019. – Vol. 4. – P. 742 – 760.

19. Yue, Z. *Nanometric holograms based on a topological insulator material* / Z. Yue, G. Xue, J. Liu, Y. Wang, M. Gu // *Nature Communications*. – 2017. – Vol. 8. – P. 15354 – 1 – 5.

20. Downey, A.B. *Think Python: How to Think Like a Computer Scientist, 2nd edition* / A.B. Downey. – O'Reilly Media, 2015. – 292 p.

21. Scopatz, A. *Effective Computation in Physics: Field Guide to Research with Python* / A. Scopatz, K.D. Huff. – O'Reilly Media, 2015. – 552 p.