

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОПУСКАНИЯ КОМПЗИТНЫХ НАНОРЕЗОНАТОРОВ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЙ НАНОФОТОНИКИ

**Михалев Александр Алексеевич, Нижник Виталий Дмитриевич,
Стародубцев Евгений Генрихович**

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

1. Введение

Развитие теории и технологий нанопотоники, плазмоники, оптики метаматериалов позволило уменьшить размеры многих оптических элементов, таких как модуляторы, фильтры, поглотители, голограммы, резонаторы, вплоть до нанометровых значений. Основные функции таких устройств связаны с управлением характеристиками электромагнитного излучения при существенно субволновых размерах композитного материала или системы. В частности, для многих приложений требуются большие разности фаз двух и более волн на выходе оптической системы. Для решения этой задачи часто используются традиционные подходы, основанные на увеличении разности оптических путей волн. Эти методы требуют увеличения геометрических размеров оптических элементов вплоть до макроскопических величин, а также применения материалов с высокой оптической плотностью, что ведет к нежелательному отражению или малому пропусканию излучения. В работах [1-4] предложены и обоснованы методами аналитического моделирования новые подходы для разработки ультратонких преобразователей фазовых и амплитудных 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 магнитной проницаемостей и представляют большой интерес для многих приложений современной оптики [5-11].

Цель настоящей работы - дальнейшее компьютерное моделирование пропускания электромагнитных волн нанорезонаторами с композитным основным слоем [3], включающими слои ENZ метаматериалов, а также оптимизация характеристик и режимов работы данных оптических элементов. Для достижения указанной цели были решены следующие задачи: 1)

аналитическая модель исследуемой системы, предложенная в [3] на основе точных решений граничных электродинамических задач, была доработана и адаптирована для реализации в программном комплексе, использующем технологии объектно-ориентированного программирования; 2) был разработан программный комплекс на основе программного обеспечения Python 3.7.9 [12, 13], библиотек math, cmath, matplotlib, numpy, фреймворка PyQt; 3) проведено численное моделирование и графический анализ полученных данных, основные результаты которых приведены ниже.

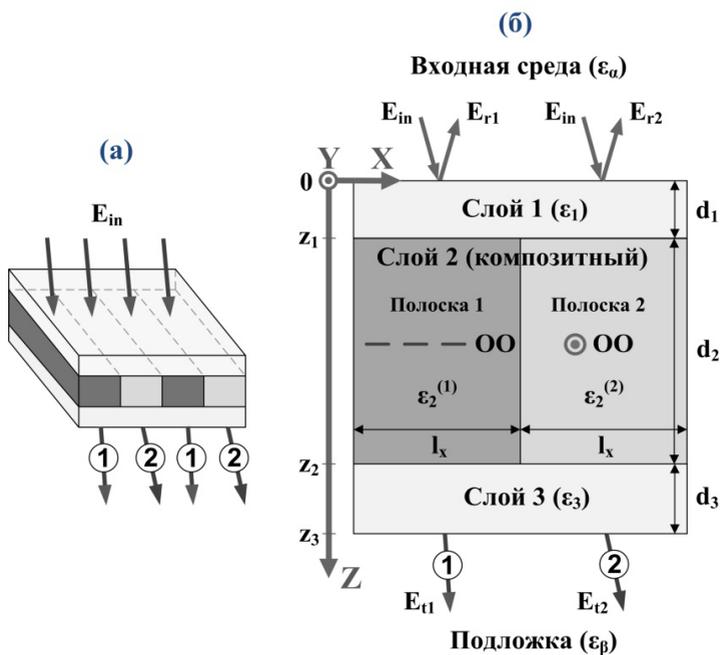


Рисунок 1 – (а) Схема многослойной системы с композитным основным слоем, образованным чередующимися полосками двух материалов, которые могут обладать различными оптическими свойствами (в частности, быть изотропными или оптически одноосными). Лучи в подложке, прошедшие через многослойник, обозначены цифрами 1, 2.

E_{in} – вектор напряженности электрического поля падающей волны (ТМ или ТЕ типа), отраженные лучи и поля внутри системы не показаны. (б) Геометрия соответствующих граничных электродинамических задач.

E_{r1} , E_{r2} и E_{t1} , E_{t2} – поля волн, отраженных и прошедших через полоски 1, 2. Размеры и диэлектрические проницаемости материалов слоев, направления оптической оси (ОО) в материалах слоя 2 указаны на рисунке.

2. Постановка задачи

Рассмотрим прохождение плоской монохроматической электромагнитной волны через слоистую систему при наклонном падении. Схема моделируемой оптической системы приведена на рис. 1 [3].

Основной диэлектрический слой 2 является композитным (образован чередующимися полосками двух различных материалов) и расположен между двумя слоями 1, 3 из ENZ метаматериалов или металлов. Слои 1, 3 могут играть роль, в частности, защитных или управляющих слоев, зеркальных слоев нанорезонатора, в зависимости от условий применения рассматриваемой системы. Среды перед (входная среда) и за (подложка) многослойником предполагаются оптически толстыми и непоглощающими (например, воздух). Основные допущения исходной аналитической модели приведены в [3].

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

Обобщенная графическая схема алгоритма моделирования приведена на рис. 2. После запуска программного комплекса задаются начальные параметры системы. Затем необходимо выбрать группу графиков для отрисовки. В зависимости от количества выбранных графиков приложение зарезервирует необходимое количество памяти и подготовит массивы со значениями параметров, выбранных для оси абсцисс, и внутренние объекты приложения. Для расчета значений и получения параметров прошедшего излучения используются циклы, с помощью которых проводят вычисления требуемых характеристик для каждого из значений по оси абсцисс. В результате моделирования получают группы графиков, на основе которых выполняется последующий графический анализ и оптимизация параметров исследуемой системы.

Диаграмма классов разработанного программного комплекса представлена на рисунке 3. Программный комплекс состоит из 4 классов. В классе Main находятся методы для вызова основной логики. Класс ResultGraph содержит методы, которые отображают графики и позволяют задавать параметры содержимого графиков. Класс TransCalculation 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 TransCalculation.

Пример фрагмента программного кода, выполняющего определение волновых векторов в слоях, приведен на рис. 3. Для работы с комплексными числами в программном комплексе используется библиотека `cmath`. Она позволяет в полном объеме выполнять все операции над комплексными числами

ми. Используя параметры `real` и `imag`, возможно получение вещественной и мнимой частей комплексных чисел. Для работы со стандартными математическими операциями используются средства библиотеки `math`.

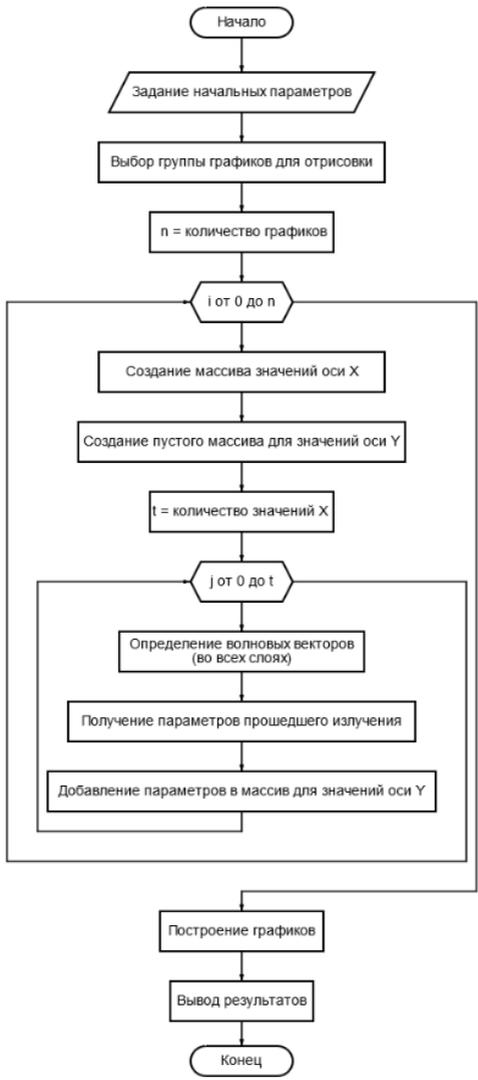


Рисунок 2 – Обобщенная графическая схема алгоритма моделирования

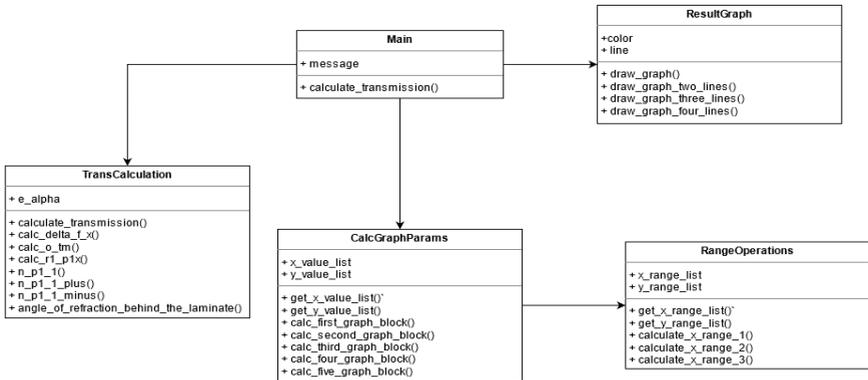


Рисунок 3 – Диаграмма классов разработанного программного комплекса

```

def n_p1_1(e_or, e_oi, e_er, e_ei, e_alpha, y):
    n_p1_1_plus_value = n_p1_1_plus(e_or, e_oi, e_er, e_ei, e_alpha, y)
    n_p1_1_minus_value = n_p1_1_minus(e_or, e_oi, e_er, e_ei, e_alpha, y)
    # Нахождение положительной мнимой части комплексного числа
    if n_p1_1_plus_value.imag > 0:
        return n_p1_1_plus_value
    elif n_p1_1_minus_value.imag > 0:
        return n_p1_1_minus_value

def n_p1_1_plus(e_or, e_oi, e_er, e_ei, e_alpha, y):
    return cmath.sqrt((e_er + e_ei.imag * 1j) * (1 - ((e_alpha * pow(sin(y), 2)) / (e_or + e_oi.imag * 1j))))

def n_p1_1_minus(e_or, e_oi, e_er, e_ei, e_alpha, y):
    return cmath.sqrt((e_er + e_ei.imag * 1j) * (1 - ((e_alpha * pow(sin(y), 2)) / (e_or + e_oi.imag * 1j)))) * (-1)
    
```

Рисунок 4 – Пример фрагмента программного кода

4. Результаты компьютерного моделирования оптических свойств композитных нанорезонаторов

Целью моделирования являлось определение наиболее оптимальных диапазонов параметров исследуемой системы для её потенциального применения в приложениях нанофотоники. В частности, исследовались возможности получения больших значений разности фаз волн 1 и 2 для минимальных (субволновых) толщин основного слоя (рис. 1) при достаточно высоком пропускании системы. В качестве основных начальных параметров использовались [3]: толщины слоев, реализуемые современными методами интегральной оптики; диэлектрические характеристики ENZ метаматериалов, полученные экспериментально (в частности, [5-11]) и серебра – для слоев 1, 3; длина волны возбуждающего излучения λ . В качестве входной среды и подложки (рис. 1) выбран воздух. Толщины слоёв 1, 3 предполагались одинаковыми. В качестве характеристик пропускания волн 1, 2 ис-

пользованы относительные интенсивности T_1, T_2 , фазы φ_1, φ_2 , разность фаз $\Delta\varphi^{TM,TE} = \varphi_1^{TM,TE} - \varphi_2^{TM,TE}$ (для ТМ и ТЕ волн), полученные на основе точного решения граничных задач [3]. Для сравнения также использованы соответствующие разности фаз для случаев «однопроходного» пропускания излучения [3]: 1) через разные полоски основного слоя, $\Delta\Phi^{TE,TM}$; 2) через разные полоски основного слоя, но для случая, когда материалы полосок заполняют весь многослойник ($d_{1,3}=0$), $\Delta\Phi \sim TE,TM$. Фазы и разности фаз на графиках рассчитаны в единицах радианы/ π . Для всех графиков ниже материалы слоев предполагались изотропными, при этом для материалов основного слоя использованы значения параметров: $\varepsilon_2^{(1)} = 2.5 + 10^{-3}i$, $\varepsilon_2^{(2)} = 1$ (материал полоски 2 – воздух).

Данные рис. 5 - 7 иллюстрируют полученные результаты моделирования.

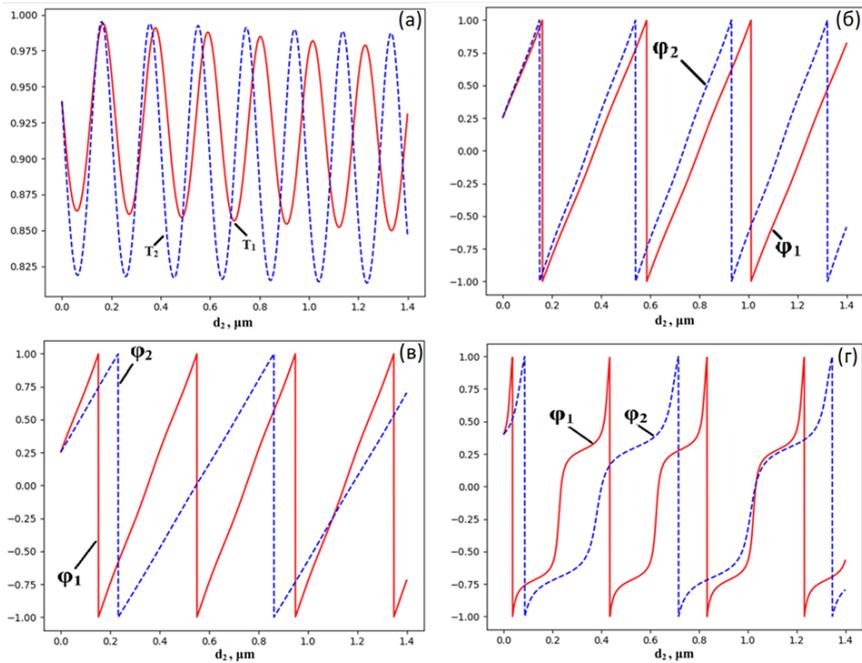


Рисунок 5 – Зависимости величин $T_{1,2}$ (а) и $\varphi_{1,2}$ (б, в, г) от толщины основного слоя для различных материалов слоев 1, 3. Используются параметры: $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 2 + 10^{-3}i$ (а, б); $\varepsilon_1 = 2 + 10^{-3}i$, $\varepsilon_3 = 0.01 + 0.01i$ (в); $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 0.01 + 0.01i$ (г). Для всех графиков: $d_{1,3} = 0.25$ мкм, $\lambda = 0.63$ мкм.

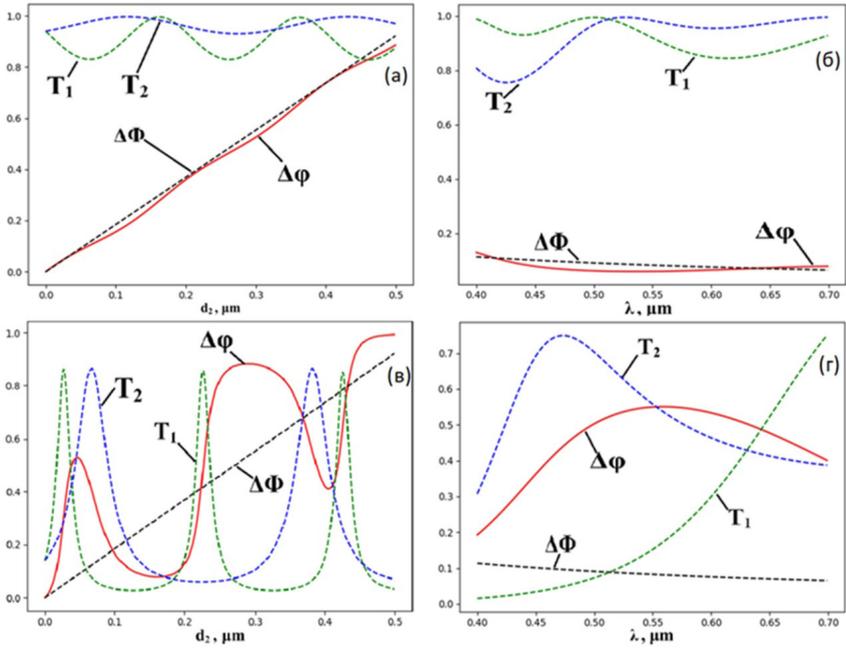


Рисунок 6 – Зависимости величин $T_{1,2}$, $\Delta\varphi$, $\Delta\Phi$ от толщины основного слоя (а, в) и длины волны возбуждающего излучения (б, г) для различных материалов слоев 1, 3. Использованы параметры: $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 2 + 10^{-3}i$

(а, б); $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 0.01 + 0.01i$ (в, г); $d_2 = 39$ нм (б, г);

$d_{1,3} = 0.25$ мкм; $\lambda = 0.63$ мкм (кроме (б), (г)).

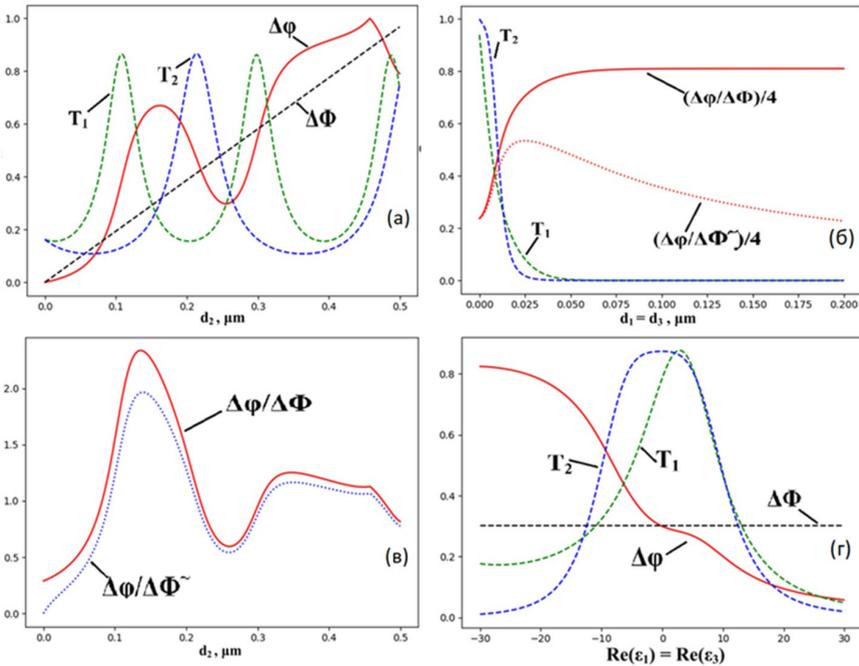


Рисунок 7 – Зависимости величин $T_{1,2}$, $\Delta\phi$, $\Delta\Phi$, $\Delta\phi/\Delta\Phi$, $\Delta\phi/\Delta\Phi^{\sim}$ от толщины основного слоя (а, в), толщины слоев 1, 3 (б), диэлектрических свойств слоев 1, 3 (г) для различных материалов слоев 1, 3. Используются параметры: $\epsilon_1 = \epsilon_3 = -13 + 0.5i$ (а, б, в); $d_2 = 156 \text{ нм}$ (б, г); $\text{Im}(\epsilon_{1,3}) = 0.5$ (г). Для всех графиков: $d_{1,3} = 13 \text{ нм}$ (кроме (б)), $\lambda = 0.6 \text{ мкм}$

Рис. (в) детализирует данные на рис. (а).

Приведенные на рисунках данные характеризуют возможности значительного увеличения разности фаз волн на выходе исследуемой системы (на порядок и более по сравнению со случаем одного композитного слоя) при достаточно высоком пропускании излучения. В качестве дополнительных слоев 1, 3 могут быть использованы как ENZ метаматериалы, так и благородные металлы при определенных диапазонах длин волн [3]. Результаты численного и графического анализа показывают, что рассмотренные эффекты реализуются при существенно субволновых толщинах слоев в условиях проявления многолучевой оптической интерференции в многослойнике.

5. Заключение

В результате выполненной работы физическая аналитическая модель взаимодействия когерентного электромагнитного излучения с композитными нанорезонаторами [3] адаптирована для разработки программного комплекса, основанного на технологиях объектно-ориентированного программирования. Соответствующие алгоритмы модернизированы, разработаны классы и методы, реализованные с помощью языка программирования Python и его библиотек, а также модули для расчета и графического анализа оптических характеристик прошедшего излучения. Данные моделирования подтверждают результаты работы [3], полученные при использовании других программных средств, и могут быть использованы для дальнейшей оптимизации параметров и режимов работы исследованных систем.

Список литературы

1. 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, №12 – P. 126202-1-16.
2. 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.
3. 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.
4. 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>)
5. 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.
6. 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.
7. 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.

8. 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. – № 4. – P. 32-43.

9. 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, №1 – P. 907-912.

10. 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.

11. Valagiannopoulos, C.A. *Giant enhancement of the controllable in-plane anisotropy of biased isotropic noncentrosymmetric materials with epsilon-negative multilayers* / C.A. Valagiannopoulos, N.L. Tsitsas, A. Lakhtakia // *Journal of Applied Physics*. – 2017. – Vol. 121. – P. 063102-1-10.

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

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