

Устименко Никита Алексеевич

Год рождения: 2000

Университет ИТМО,

физический факультет,

студент группы №Z3443,

направление подготовки: 16.03.01 – Техническая физика,

e-mail: nikita.ustimenko@metalab.ifmo.ru

Барышникова Ксения Владимировна

Год рождения: 1991

Университет ИТМО,

физический факультет,

к.ф.-м.н., с.н.с.,

e-mail: k.baryshnikova@metalab.ifmo.ru

УДК 535.015

**МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ В ЗАДАЧАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ
И ОПТИМИЗАЦИИ ОПТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА АНСАМБЛЕЙ
НАНОСТРУКТУР С ИНДУЦИРОВАННЫМИ
МУЛЬТИПОЛЬНЫМИ МОМЕНТАМИ**

Н.А. Устименко

Научный руководитель – к.ф.-м.н. К.В. Барышникова

Работа выполнена в рамках темы НИР №718545 «Исследование функциональных наноструктур, метаматериалов и метаповерхностей, для создания устройств на их основе».

Аннотация

В работе используется модель связанных мультиполей совместно с борновским разложением для моделирования и оптимизации оптического отклика структур кремниевых наносфер вблизи мультипольных резонансов одиночной наночастицы. В результате оптимизации в нулевом борновском приближении получены резонансные структуры кремниевых наносфер для фокусировки света на требуемое расстояние (металинзы). Результаты оптимизации проверены моделированием методом Т-матриц.

Ключевые слова

Нанофотоника, металинза, связанные мультиполи, борновское приближение, оптимизация.

Конечные многочастичные структуры диэлектрических и полупроводниковых нанорезонаторов для фокусировки света – металинзы – рассматриваются научным и промышленным сообществом как перспективная замена обычных преломляющих линз [1]. Однако для разработки функциональных металинз с желаемыми характеристиками необходимы эффективные методы оптимизации. Скорость оптимизации и качество её результата определяются физической моделью, описывающей оптический отклик наночастиц металинзы. В работе рассматриваются металинзы из сферических кремниевых (с-Si) наночастиц, упорядоченных в виде концентрических колец из идентичных одиночных наночастиц. Предлагается аналитическая модель описания коллективного отклика металинзы, в рамках которой оптический отклик наночастицы связывается с несколькими первыми мультиполями (диполями и квадрупольями), которые могут быть резонансно возбуждены внешней волной, а взаимодействие между частицами описывается в борновских приближениях различного порядка. К

достоинствам метода относятся низкое время расчёта, низкое использование ресурсов компьютера и простота аналитического анализа. Найдены условия применимости метода вблизи мультипольных резонансов одиночной частицы, что позволило оптимизировать в нулевом борновском приближении (НБП) металинзы для работы на длинах волн магнитного дипольного и магнитного квадрупольного резонансов частицы. Точность результатов, полученных в НБП, проверена сравнением с результатами, полученными численным методом Т-матриц [2]. Результаты работы показывают большой потенциал метода расчёта на основе борновского разложения для разработки металинз и других устройств нанопотоники.

В металинзе для фокусировки нормально падающего света на оси металинзы частицы должны быть упорядочены в кольца, причём в одном кольце частицы идентичны. Рассмотрим рассеяние плоской волны на кольце N одинаковых кремниевых сфер с диаметром 200 нм (рисунок 1(а)). Основной вклад в рассеяние такой частицы вносят только дипольные и квадрупольные моды электрического и магнитного типов, а вклад мультиполей более старшего порядка пренебрежимо мал (рисунок 1(б)), поэтому для описания оптического отклика кремниевой сферы с диаметром 200 нм достаточно учесть только дипольные и квадрупольные моменты электрического и магнитного типов.

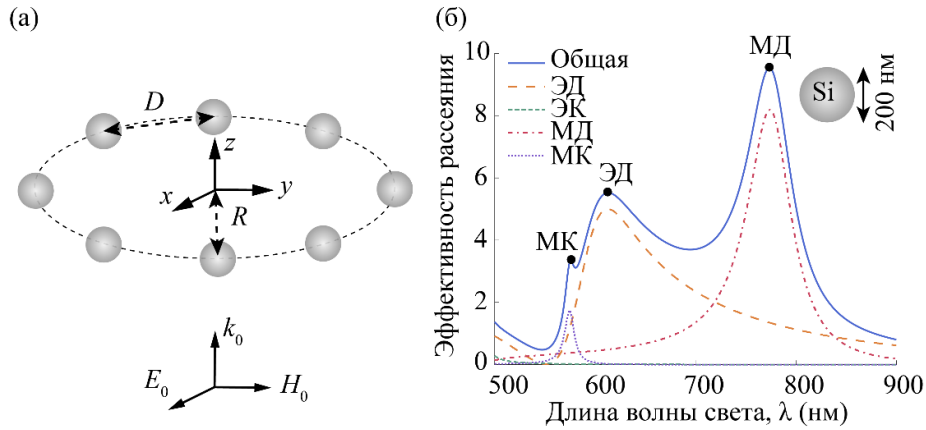


Рисунок 1. (а) Схематическое изображение кольца идентичных сферических наночастиц, введённой декартовой системы координат и падающей плоской волны. (б) Мультипольное разложение эффективности рассеяния сферической частицы из с-Si диаметром 200 нм, расположенной в воздухе, посчитанное в рамках теории Ми [3] с учётом дисперсии с-Si [4]

Дипольные и квадрупольные моменты частиц могут быть найдены в рамках модели связанных мультиполей путём решения системы линейных уравнений (см. систему (25) в [5]):

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_0 + \mathbf{V}\mathbf{Y}. \quad (1)$$

\mathbf{V} – матрица взаимодействия мультиполей размерности $24N \times 24N$ (см. систему (25) в [5]).
 \mathbf{Y} – вектор самосогласованных мультипольных моментов:

$$\mathbf{Y} = [p_x^1, \dots, p_z^N, m_x^1, \dots, m_z^N, Q_{xx}^1, \dots, Q_{zz}^N, M_{xx}^1, \dots, M_{zz}^N]^T,$$

где $\mathbf{p}^j, \mathbf{m}^j, \hat{Q}^j, \hat{M}^j$ – вектор электрического дипольного (ЭД), вектор магнитного дипольного (МД), тензор электрического квадрупольного (ЭК), тензор магнитного квадрупольного (МК) момента, соответственно, частицы с номером j ($j = 1 \dots N$). \mathbf{Y}_0 – вектор мультипольных моментов, возбуждаемых только падающим полем:

$$\mathbf{Y}_0 = [p_{0x}^1, \dots, p_{0z}^N, m_{0x}^1, \dots, m_{0z}^N, Q_{0xx}^1, \dots, Q_{0zz}^N, M_{0xx}^1, \dots, M_{0zz}^N]^T,$$

Эти мультипольные моменты связаны с падающим электрическим \mathbf{E}_0 или магнитным \mathbf{H}_0 полем или их производными при помощи численных коэффициентов – поляризуемостей, которые для сферы могут быть найдены аналитически при помощи теории Ми [5]:

$$\begin{aligned} p_{0\beta}^j &= \alpha_p E_{0\beta}(\mathbf{r}_j), \\ m_{0\beta}^j &= \alpha_m H_{0\beta}(\mathbf{r}_j), \\ Q_{0\beta\gamma}^j &= \frac{\alpha_Q}{2} \left[\frac{\partial E_{0\beta}(\mathbf{r}_j)}{\partial \gamma} + \frac{\partial E_{0\gamma}(\mathbf{r}_j)}{\partial \beta} \right], \\ M_{0\beta\gamma}^j &= \frac{\alpha_M}{2} \left[\frac{\partial H_{0\beta}(\mathbf{r}_j)}{\partial \gamma} + \frac{\partial H_{0\gamma}(\mathbf{r}_j)}{\partial \beta} \right], \end{aligned}$$

где $\alpha_p, \alpha_m, \alpha_Q, \alpha_M$ – Ми-поляризуемости ЭД, МД, ЭК, МК моментов, соответственно (см. формулы (30, 31) в [5]); \mathbf{r}_j – координата j -ой частицы, индексы $\beta = x, y, z$ и $\gamma = x, y, z$. Отметим, что для несферической частицы поляризуемости являются не скалярами, а тензорами 3×3 .

Решение уравнения (1) с полным учётом взаимодействия мультиполей записывается в следующем виде:

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{I} - \mathbf{V})^{-1} \mathbf{Y}_0 \quad (2)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица размерности $24N \times 24N$. Разложив матрицу $(\mathbf{I} - \mathbf{V})^{-1}$ по степеням матрицы \mathbf{V} , можно записать решение (1) в виде борновского ряда

$$\mathbf{Y} = \mathbf{IY}_0 + \mathbf{VY}_0 + \mathbf{V}^2 \mathbf{Y}_0 + \mathbf{V}^3 \mathbf{Y}_0 + \dots \quad (3)$$

Заменив ряд (3) на конечную сумму, можно получить решение системы (1) в борновском приближении. Борновское приближение нулевого порядка определяется следующим образом:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_0. \quad (4)$$

Борновское приближение (БП) n -ого порядка выражается через БП предыдущего порядка по следующей формуле:

$$\mathbf{Y}_n = \mathbf{Y}_0 + \mathbf{VY}_{n-1}. \quad (5)$$

Решение системы (1) в борновских приближениях, включая нулевое, может быть корректным, только если взаимодействие между частицами достаточно слабое. Важно отметить, что борновский ряд (3) расходится в условии конфигурационного резонанса системы, когда $\det(\mathbf{I} - \mathbf{V}) = 0$. В таком случае взаимодействие между частицами очень сильное, и оно не может быть аппроксимировано БП любого порядка.

Главным преимуществом подхода на основе борновского разложения является значительно более низкое время расчёта по сравнению с точным решением (2), что важно в задачах оптимизации. Для структуры из N частиц расчёт по мультипольным моментам по формуле (2) требует $O(N^3)$ расчётных единиц, в борновском приближении n -ого порядка (5) ($n > 0$) – $O(nN^2)$, а в НБП (4) – всего лишь $O(N)$.

Зная мультипольные моменты частиц, можно рассчитать полное электрическое \mathbf{E} и полное магнитное \mathbf{H} поля (используя формулы (13)-(16) в [5]) и нормированную плотность энергии электромагнитного поля вблизи структуры частиц

$$\frac{w(\mathbf{r})}{w_0} = \frac{|\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 + Z^2 |\mathbf{H}(\mathbf{r})|^2}{2|E_0|^2}, \quad (6)$$

где \mathbf{r} – точка наблюдения, Z – волновой импеданс свободного пространства, E_0 – амплитуда электрического поля падающей волны. Все численные расчёты проводились в программе MATLAB.

На рисунке 2(а) показано распределение плотности энергии (б) вблизи кольца

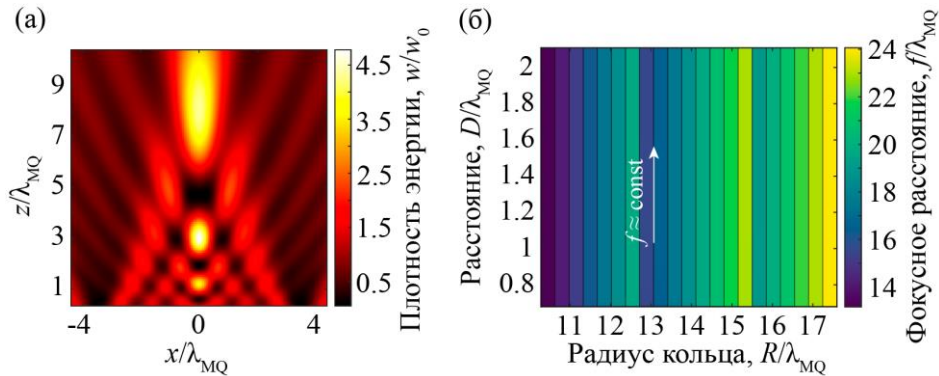


Рисунок 2. (а) Распределение нормированной плотности электромагнитной энергии (б) вблизи кольца наночастиц ($R = 2$ мкм, $N = 62$) на длине волны МК резонанса одиночной наночастицы ($\lambda_{\text{МК}} = 574$ нм). Плотность энергии падающей плоской волны обозначена как w_0 . (б) Зависимость фокусного расстояния кольца от его радиуса и расстояния между центрами частиц на длине волны МК резонанса. Расчёты сделаны в НБП (4)

наночастиц. Видно, что кольцо наночастиц обладает фокусирующими свойствами, то есть создает горячие пятна энергии, которые возникают благодаря интерференции падающего и рассеянного полей. Поскольку структура обладает осевой симметрией, то энергетические максимумы расположена на оси кольца (оси z). Будем называть главный максимум плотности энергии (б) фокусом кольца, а расстояние от фокуса до плоскости кольца (x) – фокусным расстоянием кольца f . Фокусное расстояние кольца определяется преимущественно его радиусом и не зависит от расстояния между частицами (рисунок 2(б)), при этом зависимость от радиуса немонотонная. Таким образом, можно взять несколько колец разного размера с максимумом энергии в одной точке, согласовать фазы рассеянных волн, приходящих от разных колец в точку максимума, и получить линзу с требуемым фокусным расстоянием. В процессе оптимизации определяется оптимальное количество колец и подбираются их параметры, такие как радиус кольца и количество частиц, чтобы получить фокусировку в требуемой точке.

Фокусное расстояние f и плотность энергии в фокусе w_f – основные параметры металлинзы, определяющие её функции и свойства. Ошибка расчёта этих величин в борновских приближениях различных порядков была исследована для кольца наночастиц на длинах волн МД и МК резонансов (770 нм и 574 нм, соответственно). Ошибка расчёта величины V определяется следующим образом:

$$\Delta V^{(n)} = \frac{|V^{(n)} - V^{(CMM)}|}{V^{(CMM)}} \times 100\%, \quad (7)$$

где $V^{(n)}$ и $V^{(CMM)}$ – значения величины V , посчитанные с использованием мультипольных моментов (2) и (5), соответственно. На рисунке 3 показана ошибка плотности энергии в фокусе кольца наночастиц $\Delta w_f^{(n)}$ в зависимости от порядка БП и расстояния между частицами при фиксированном радиусе кольца. Как и ожидалось, с ростом порядка БП ошибка расчёта оптического отклика уменьшается, что происходит, вообще говоря, если борновский ряд (3) сходится. Для расчёта плотности энергии в фокусе с ошибкой меньше 10% практически для всех рассматриваемых параметров кольца достаточно пятого БП на МД резонансе и первого БП на МК резонансе. Однако ошибка растёт с ростом порядка БП, если ряд расходится, а именно при $D \lesssim 0.4\lambda_0$ и $D \approx \lambda_0$ (рисунок 3), где λ_0 – резонансная длина волны. Таким образом, борновский ряд, записанный для кольца, расходится, если

длина волны соответствует мультипольному резонансу одиночной частицы λ_0 ,

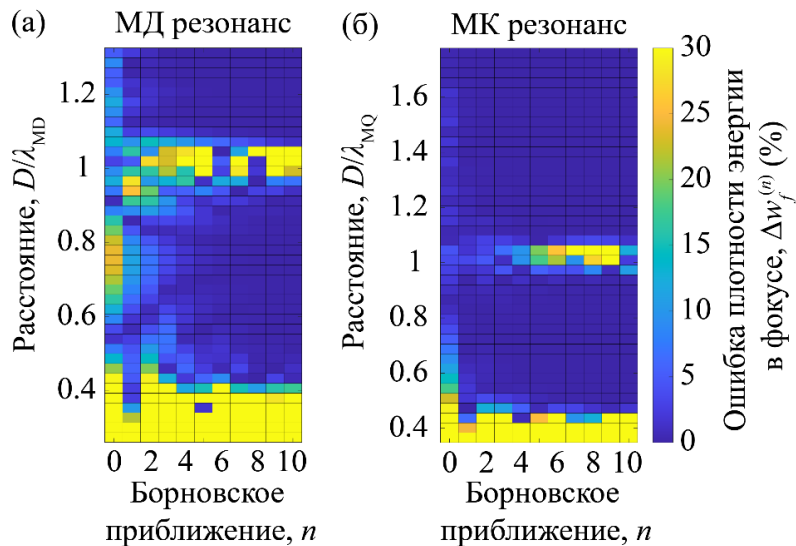


Рисунок 3. Ошибка плотности энергии в фокусе кольца для БП разных порядков $\Delta W_f^{(n)}$ (определённая по формуле (7)) на длине волны (а) МД резонанса ($\lambda_{MD} = 770$ нм) и (б) МК резонанса ($\lambda_{MQ} = 574$ нм) в зависимости от расстояния между частицами в кольце с радиусом $R = 8.6$ мкм

а расстояние между частицами $D = m\lambda_0$ (m – целое), что является условием конфигурационного брэгговского резонанса кольца, либо D достаточно маленькое, когда взаимодействие между мультиполями сильное.

Поскольку расчёт полей в процессе оптимизации металинзы осуществляется в НБП (4), то остановимся подробнее на ошибке НБП ($n = 0$ в формуле (7)). Были рассчитаны ошибки $\Delta f^{(0)}$ и $\Delta W_f^{(0)}$ как функции радиуса кольца $6 \text{ мкм} \leq R \leq 10 \text{ мкм}$ и расстояния между частицами $200 \text{ нм} \leq D \leq 1200 \text{ нм}$. Было получено, что ошибка $\Delta f^{(0)} \leq 3\%$ для обоих резонансов и всех рассматриваемых параметров кольца, а ошибка $\Delta W_f^{(0)}$ меньше либо порядка 10%, только если $D \geq 0.92\lambda_{MD}$ для МД резонанса и $D \geq 0.66\lambda_{MQ}$ для МК резонанса. Назовём эти расстояния предельными. Таким образом, НБП может быть использовано для моделирования свойств фокуса кольца (металинзы), если расстояние между центрами любых двух частиц в структуре больше предельного.

НБП напрямую совместимо с алгоритмами оптимизации. Для оптимизации металинзы был выбран эволюционный многокритериальный алгоритм SEMO. В процессе оптимизации преследовались две цели: минимизировать расстояние между фокусом данной линзы и желаемым положением фокуса (здесь $f = 5$ мкм) и максимизировать плотность энергии в фокусе. Для достижения этих целей алгоритм мог менять число колец, размер кольца и количество частиц в кольце, пока другие параметры оставались постоянными: диаметр частицы 200 нм, максимальный размер линзы 20 мкм, рабочая длина волны 574 нм или 770 нм, минимальное допустимое расстояние между соседними частицами $1.07\lambda_{MD}$ на МД резонансе и $1.11\lambda_{MQ}$ на МК резонансе. На рисунке 4 показаны результаты оптимизации на длинах волн МД и МК резонансов одиночной сферы. Обе металинзы фокусируют свет вблизи точки $z = 5$ мкм (см. на рис. 4 распределение плотности энергии вблизи металинзы).

Плотность энергии электромагнитных полей, создаваемых металинзами, также была рассчитана методом Т-матриц [2]. Для обеих структур фокусное расстояние определяется одинаково обоими методами: 4.9 мкм для МД резонанса и 5 мкм для МК резонанса. Ошибка плотности энергии в фокусе металинзы, посчитанная в НБП относительно значения, полученного методом Т-матриц, равна 3% для МД резонанса и 5.7% для МК резонанса. Таким образом, благодаря оптимизации в НБП были получены

металлинзы с заданным фокусным расстоянием. Поскольку в получившихся металлинзах расстояние между частицами больше их диаметра, то в дальнейшем такие структуры могут быть изготовлены методом лазерной печати наночастиц, который позволяет получать структуры из частиц с практически идеальной сферической формой.

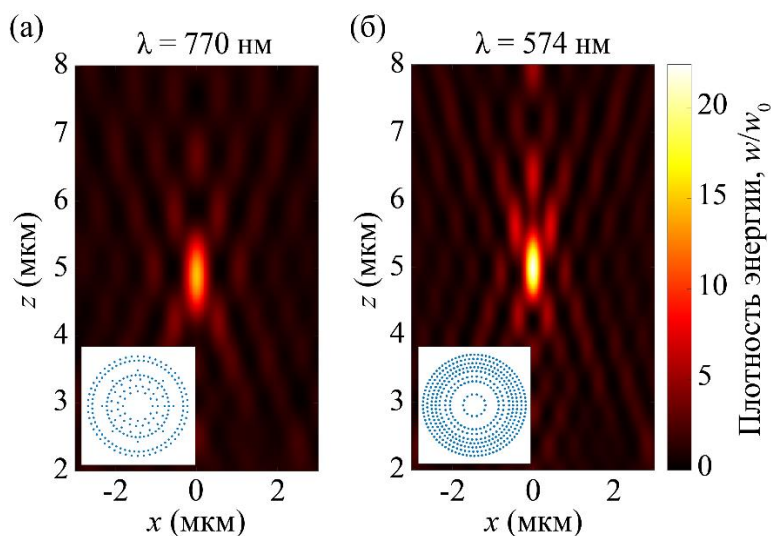


Рисунок 4. Распределение нормированной плотности электромагнитной энергии в плоскости (xz) вблизи металлинз, работающих на (а) МД резонансе ($\lambda_{\text{МД}} = 770 \text{ нм}$) и (б) МК резонансе ($\lambda_{\text{МК}} = 574 \text{ нм}$). Профили рассчитаны в НБП. На вставках синими точками показано распределение наночастиц в металлинзах, находящихся в плоскости (xy)

В работе разработан метод моделирования оптического отклика конечных систем наночастиц, имеющих мультипольные Ми-резонансы в оптическом диапазоне. Метод основан на расчёте мультипольных моментов частиц в борновских приближениях различных порядков. Исследована применимость метода для расчёта свойств фокуса кольца идентичных кремниевых наночастиц. При помощи эволюционного алгоритма и нулевого борновского приближения были оптимизированы положения кремниевых наночастиц и получены ультратонкие металлинзы с заданным фокусным расстоянием, работающие на длинах волн МД и МК резонансов одиночной наночастицы металлинзы. Результаты оптимизации в НБП были проверены методом Т-матриц и получено хорошее согласие.

В дальнейшей работе планируется использовать предлагаемый расчётный метод для разработки металлинз для различных приложений, например, для фокусировки излучения точечного квантового эмиттера.

Литература

1. Chen W. T., Zhu A. Y., Capasso F. Flat optics with dispersion-engineered metasurfaces // *Nat. Rev. Mater.* — 2020. — Т. 5, № 8. — С. 604–620.
2. CELES: CUDA accelerated simulation of electromagnetic scattering by large ensembles of spheres / A. Egel [и др.] // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* — 2017. — Т. 199. — С. 103–110.
3. Bohren C. F., Huffman D. R. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, — Wiley, New York, 1983.
4. Aspnes D. E., Studna A. A. Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV // *Phys. Rev. B.* — 1983. — Т. 27. — С. 985.
5. Babicheva V., Evlyukhin A. Analytical model of resonant electromagnetic dipolequadrupolecoupling in nanoparticle arrays // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Т. 99. — С. 195444.