

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ

УЧЕРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

имени М. В. ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ

КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ НЕЛИНЕЙНОСТЕЙ В МЕТАМАТЕРИАЛАХ

С ПОМОЩЬЮ ФУРЬЕ-МОДАЛЬНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ

Выполнила

студентка 4 курса группы 421

Дмитриева Ольга Алексеевна

Научный руководитель:

проф. Тиходеев Сергей Григорьевич

Допущена к защите _____

Зав. кафедрой _____

Москва

2018

Содержание

Введение	3
1. Обзор литературы	4
2. Метод расчёта эффективности генерации	10
2.1. Распределение поля в структуре	11
2.2. Распространение поля из структуры	16
3. Объект исследования	18
3.1. Геометрия структуры	18
3.2. Диэлектрическая проницаемость материала. Введение искусственного поглощения	19
4. Результаты численного моделирования	21
4.1. Спектры эффективности генерации	21
4.2. Поле внутри структуры	23
4.3. Диаграммы направленности	24
Выводы	26
Заключение	27
Список использованных источников	28

ВВЕДЕНИЕ

Пространственно-модулированные структуры находят широкий круг применений благодаря предоставляемым ими возможностям по управлению световыми потоками. В частности, при прохождении электромагнитных волн через подобные структуры наличие пространственной модуляции диэлектрической проницаемости может приводить к перераспределению и усилению электромагнитного поля внутри структуры, причём усиление поля по сравнению с однородной структурой может достигать нескольких порядков величины. Одним из возможных применений этого свойства может быть увеличение эффективности генерации оптических гармоник.

В рамках выполнения работы написана программа, позволяющая на основании разработанных ранее способов расчёта распределения поля с заданной частотой в структуре рассчитывать эффективность генерации оптических гармоник в этой структуре. С её помощью получены спектры эффективности генерации третьей гармоники для слоя излучающего вещества с квадратной решёткой круглых отверстий, а также диаграммы направленности излучения на частоте третьей гармоники для отдельных значений длины волны накачки.

1. Обзор литературы

С развитием нанотехнологий большое внимание стали привлекать наноразмерные оптические структуры — фотонные кристаллы и метаматериалы [1–3].

Фотонными кристаллами называются материалы, обладающие периодически изменяющейся в пространстве диэлектрической проницаемостью, причём период её изменения сопоставим с длиной волны излучения, для взаимодействия с которым предназначен образец. Например, простейший одномерный фотонный кристалл представляет собой чередование слоёв двух материалов с различными показателями преломления (рис. 1, а).

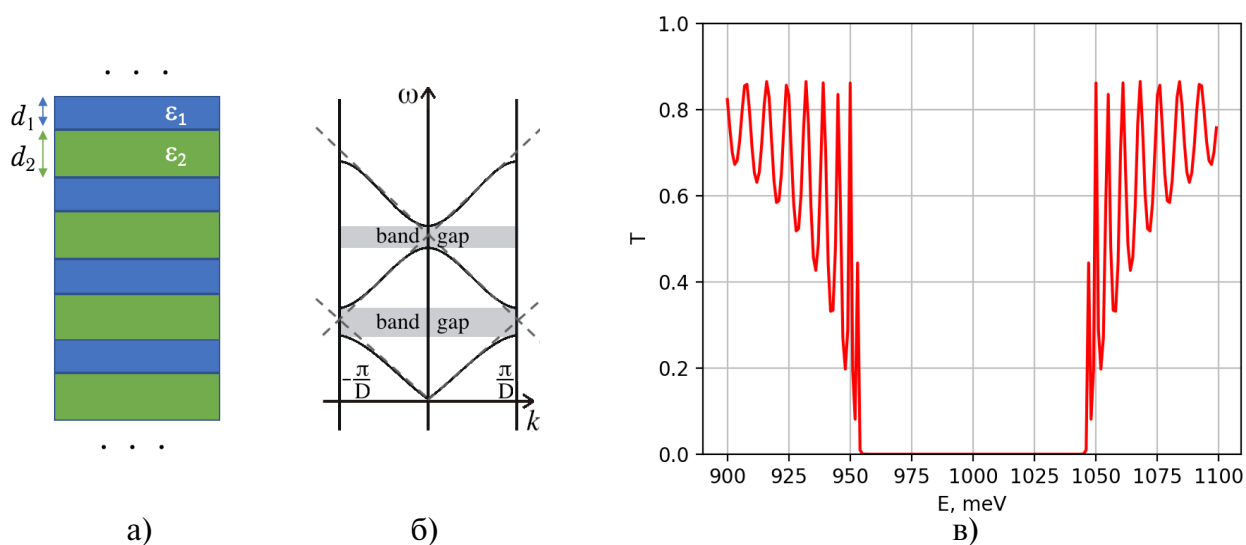


Рисунок 1 - а) Простейший пример фотонного кристалла — брэгговское зеркало; б) образование зонной структуры одномерного фотонного кристалла: пунктирные линии — закон дисперсии фотона в вакууме, сплошные — в фотонном кристалле с периодом D ; в) спектр пропускания брэгговского зеркала из 100 пар слоёв, рассчитанный для значений параметров $d_1 = 1031$ nm, $d_2 = 893$ nm, $\epsilon_1 = 9$, $\epsilon_2 = 12$

Наличие пространственной периодичности приводит к образованию фотонных запрещённых зон, то есть областей энергий, в пределах которых фотоны не могут распространяться в структуре (рис. 1, б). С этим

свойством фотонных кристаллов связаны уникальные возможности по управлению светом. В частности, возможно построение периодических структур с идеальным отражением или, наоборот, пропусканием в определённом диапазоне частот [4,5] (например, см. рис. 1, в). С другой стороны, дефекты (нарушения периодичности) в фотонных кристаллах могут служить волноводами [6–8] или микрорезонаторами [9, 10].

С фотоннокристаллическими устройствами связывают возможность конструирования логических интегральных схем, сигнал в которых может передаваться при помощи света и преобразовываться различными оптическими устройствами [11, 12]. Такие схемы, полностью основанные на оптических сигналах, могут работать на частотах, существенно превышающих достижимые для электронной техники. Для создания таких схем необходимо наличие оптических нелинейных элементов, обладающих маленьким временем реакции и при этом достаточно большой величиной нелинейного эффекта, не требующей гигантской рабочей мощности или значительного рабочего объёма. Одним из способов получения элементов с подобными свойствами является значительное усиление поля в небольшой области (фокусировка) за счёт перераспределения энергии поля, для чего могут быть использованы наноразмерные структуры. В данной работе проводится исследование свойств такой структуры и возможностей её использования для усиления нелинейных эффектов.

Как правило, в оптических наноструктурах можно выделить два различных пути возникновения нелинейности [13]. Первый связан с наличием в ней металлических компонентов, проявляющих нелинейные свойства, которые хорошо описываются в рамках гидродинамической модели свободного электронного газа. Второй возникает в диэлектрических материалах и описывается с помощью тензора нелинейной ди-

электрической восприимчивости. В связи с наличием больших потерь в металлических структурах особый интерес представляют нелинейные элементы с восприимчивостью второго типа, т. е. состоящие из диэлектрических материалов [14, 15].

Рассматривая возможную геометрию наноразмерных структур с нелинейностью, можно выделить несколько различных типов систем. Существует множество работ, в которых для создания нелинейных элементов используются дефекты в фотоннокристаллической структуре. Наличие дефекта вызывает значительное увеличение электрического поля в его области. С помощью подобного метода, например, создаются оптические переключатели, в которых возможность распространения одного оптического сигнала регулируется наличием или отсутствием другого оптического сигнала [11]. Возможно его использование и для генерации оптических гармоник [12]. В ряде других работ исследуются нелинейные эффекты, связанные с резонансным рассеянием на наночастицах [14, 16]. Ещё один вариант системы с оптической нелинейностью представляет собой фотонный кристалл без дефектов, в котором усиление поля достигается за счёт взаимодействия падающей волны с собственными модами структуры [13, 15].

Один из перспективных типов структуры представляет собой двумерно-периодический фотоннокристаллический слой. Анализ линейных оптических свойств подобных систем проведён в работе [17]. При падении на структуру электромагнитной волны благодаря взаимодействию приходящего света с квазиволноводными модами в структуре возникают резонансы характерной асимметричной формы (рис. 2), известные как резонансы Фано [18–21].

Резонансы Фано возникают во множестве систем, например, при от-

ражении хроматической световой волны от металлической дифракционной решетки (резонансные аномалии Вуда-Фано [18]), рассеянии Ми на металлических наночастицах, микроскопических частицах диэлектрика сферической или цилиндрической формы, в спектрах неупругого рассеяния электронов в благородных газах и т. д. [19–21]. Причиной их возникновения является наличие конструктивной и деструктивной интерференции узкого дискретного резонанса (в случае двумерного фотонного кристалла — Брэгговского резонанса) с широкой спектральной линией или континуумом, причём природа интерферирующих процессов может быть различной, чем и объясняется универсальность явления и его появления в самых разнообразных системах. В данной работе рассматривалась возможность увеличения поля внутри структуры за счёт резонанса Фано и, таким образом, усиление проявления её нелинейных свойств.

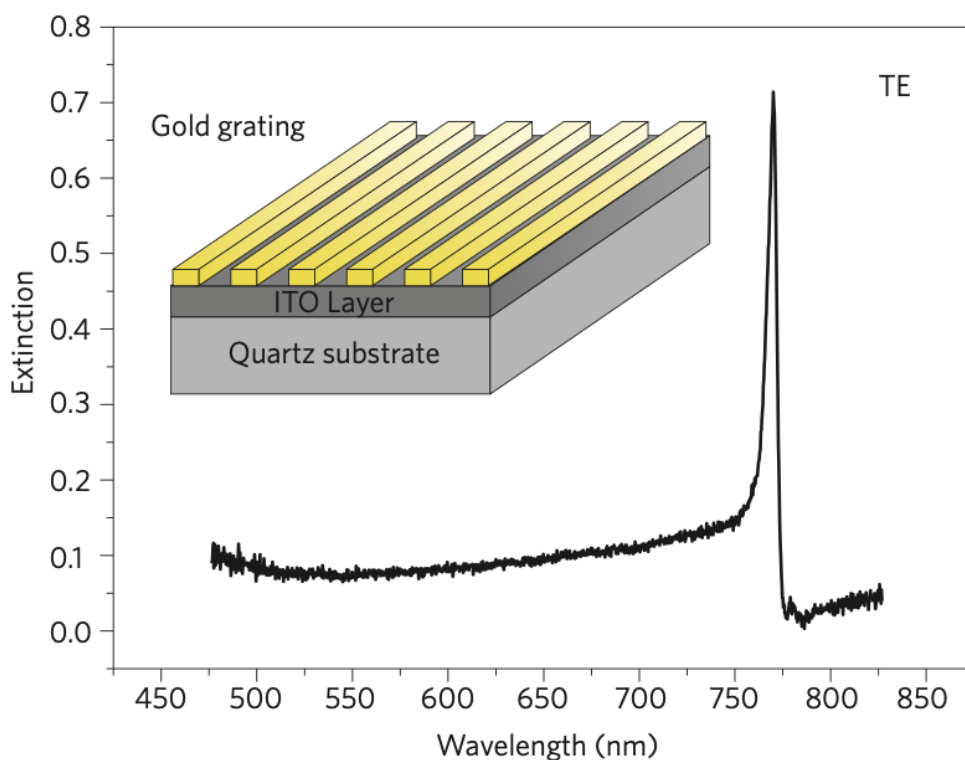


Рисунок 2 - Резонанс Фано в спектре поглощения дифракционной решётки с полосами из золота [20]

Для численного анализа линейных свойств фотонных кристаллов может быть использован метод оптической матрицы рассеяния [17, 22, 23]. Он позволяет рассчитывать оптические свойства структуры, состоящей из нескольких двумерно-периодических слоёв с общим периодом, решая уравнения Максвелла в каждом из слоёв с помощью разложения поля в бесконечную сумму по Брэгговским гармоникам и затем объединяя результат по всем слоям методом матрицы рассеяния. При реальном расчёте производится суммирование только по некоторому конечному числу гармоник, необходимому для достижения заданной точности. В случае структуры, границы которой не лежат на линиях прямоугольной сетки производится переход к криволинейным координатам, для которых границы оказываются лежащими на линиях координатной сетки [22].

Для анализа нелинейных свойств структур при небольшой величине нелинейности можно считать распространение поля накачки в приближении линейности среды [24]. В этом случае распределение поля накачки в структуре может быть рассчитано методом оптической матрицы рассеяния. Далее при известной зависимости нелинейной поляризации вещества на частоте третьей гармоники от электрического поля накачки возникает задача расчёта излучения структуры с известной зависимостью поляризации от координат, опирающаяся на задачу расчёта излучения точечного диполя, находящегося внутри структуры. Решение этой задачи было описано и использовано в том числе для анализа генерации оптических гармоник в работах [25–27]. Для расчёта излучения используется метод оптической матрицы рассеяния. Образец разделяется на две части: ниже и выше диполя, для каждой из частей производится расчёт матрицы рассеяния, далее считается общий результат с учётом связи скачков векторов поля в плоскости диполя с величиной его дипольного момента.

С другой стороны, известен более эффективный с точки зрения времени вычисления метод расчёта нелинейных эффектов, использующий принцип взаимности [28–30]. Преимущество этого метода состоит в том, что не требуется рассчитывать излучение новой (умноженной) частоты от каждого из точечных диполей внутри структуры, достаточно один раз рассчитать распределение в структуре электрического поля на новой частоте, что позволит найти сразу излучение каждого из точечных диполей. В данной работе для расчёта излучения третьей гармоники используется этот метод.

Целью данной работы является анализ эффективности генерации третьей гармоники из двумерно-периодического слоя фотонного кристалла с использованием Фурье-модального разложения и формализма матрицы рассеяния для расчёта распределения электрического поля в структуре и метода, основанного на принципе взаимности, для расчёта излучения на частоте третьей гармоники в дальней волновой зоне.

2. Метод расчёта эффективности генерации

При распространении в структуре электромагнитной волны с частотой ω вызываемую ей поляризацию вещества структуры можно разложить в ряд по степеням напряжённости поля \mathbf{E} [24]:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{(\omega)} + \mathbf{P}^{(2\omega)} + \mathbf{P}^{(3\omega)} + \dots, \quad (1)$$

Нелинейная поляризация $\mathbf{P}^{(n\omega)}$ служит источником излучения частоты $n\omega$. Таким образом, задача о нахождении излучения с частотой n -й гармоники может быть разделена на три подзадачи:

1. нахождение распределения электрического поля накачки в структуре,
2. вычисление по известному полю накачки распределения в структуре нелинейной поляризации с требуемой частотой $\mathbf{P}^{(n\omega)}$,
3. расчёт поля n -й гармоник, распространяющегося из структуры.

В данной работе рассматривается генерация третьей гармоники. Считая вещество изотропным, величину нелинейной поляризации на частоте третьей гармоники в некоторой точке структуры можно записать в виде

$$\mathbf{P}^{(3\omega)} = \chi^{(3)} (\mathbf{E}^{(\omega)} \cdot \mathbf{E}^{(\omega)}) \mathbf{E}^{(\omega)}, \quad (2)$$

где $\mathbf{E}^{(\omega)}$ — комплексная векторная амплитуда электрического поля накачки в этой точке, $\chi^{(3)}$ — восприимчивость третьего порядка. Таким образом, вторая подзадача сводится к применению соотношения (2) для каждой точки структуры.

Далее рассмотрим способы решения подзадач 1 и 3.

2.1. Распределение поля в структуре

А. Для нахождения решений уравнения Максвелла в структуре используется метод Фурье-модального разложения. Пусть исследуемая структура представляет собой один или несколько слоёв, каждый из которых периодичен по двум направлениям x и y и однороден вдоль оси z (пример подобной структуры, а также геометрия падения электромагнитной волны изображены на рис. 3).

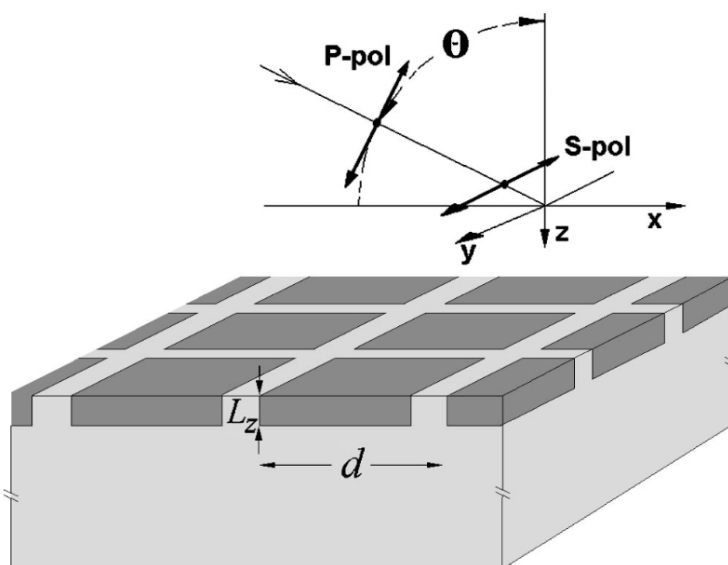


Рисунок 3 - Пример двумерно-периодического слоя. Светло-серым цветом изображён материал подложки, тёмно-серым — вещество с большей диэлектрической проницаемостью [17].

Пусть на структуру падает волна с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$, где

$$\begin{aligned}k_x &= \frac{\omega}{c} \sin \theta \cos \varphi, \\k_y &= \frac{\omega}{c} \sin \theta \sin \varphi, \\k_z &= \frac{\omega}{c} \cos \theta\end{aligned}\quad (3)$$

Учитывая, что все поля гармонические и для каждого из них взятие производной по времени сводится к домножению на $-i\omega$, для комплексных

векторных амплитуд полей из уравнений Максвелла получим:

$$\begin{cases} [\nabla \times \mathbf{E}] = i \frac{\omega}{c} \mathbf{B} \\ [\nabla \times \mathbf{H}] = -i \frac{\omega}{c} \mathbf{D} \end{cases} \quad (4)$$

Добавив материальные уравнения

$$\begin{cases} \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad \varepsilon = \varepsilon_\omega \\ \mathbf{B} = \mathbf{H} \end{cases} \quad (5)$$

и выражая магнитное поле из первого уравнения системы (4), получаем для электрического поля:

$$\begin{cases} -\Delta \mathbf{E} + \text{grad div } \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{D} \\ \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \end{cases} \quad (6)$$

Для решения уравнений (6) применим к ним Фурье-разложение.

Вследствие периодичности структуры в плоскости слоя и однородности вдоль оси z внутри каждого слоя, решение для электрического поля внутри слоя, в соответствии с теоремой Блоха [31, гл. 8], представляет собой произведение плоской волны на периодическую функцию $u(x, y)$ с периодом, равным периоду структуры:

$$\mathbf{E} = \exp(ik_x x + ik_y y + iKz)u(x, y), \quad (7)$$

В таком случае представим это решение в виде суммы плоских волн, разлагая $u(x, y)$ в ряд Фурье:

$$\mathbf{E} = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{E}_{\mathbf{G}} \exp(ik_{x,\mathbf{G}}x + ik_{y,\mathbf{G}}y + iKz), \quad (8)$$

где $k_{x,\mathbf{G}} = k_x + G_x$, $k_{y,\mathbf{G}} = k_y + G_y$, \mathbf{G} — вектор обратной решётки:

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{d}(g_x, g_y, 0), \quad g_x, g_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9)$$

Тот же вид будут иметь вектора электрической индукции \mathbf{D} и напряжённости \mathbf{H} магнитного поля.

Заметим, что точное решение выражается через бесконечное число гармоник, но для практического расчёта необходимо ограничиться конечным числом слагаемых, т. е. $g_x, g_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm g_{max}$, тогда полное количество гармоник равно $N_g = (2g_{max} + 1)^2$.

Материальное уравнение для векторов \mathbf{D} и \mathbf{E} после Фурье-преобразования примет вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mathbf{G}} &= \sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \mathbf{E}_{\mathbf{G}'}, \\ \varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} &= \frac{1}{S} \int_{(S)} \varepsilon(\mathbf{r}) \exp [i(\mathbf{G}' - \mathbf{G})\mathbf{r}] d^3r, \end{aligned} \quad (10)$$

\mathbf{G}, \mathbf{G}' — вектора обратной решётки, интегрирование производится по площади элементарной ячейки S .

После Фурье-преобразования с учётом (10) из первого уравнения системы (6), исключая $E_{z, \mathbf{G}}$, можно получить систему линейных уравнений на поиск собственных векторов и собственных значений:

$$\mathcal{M} \vec{\mathcal{E}}_{\parallel} = \mathcal{K}^2 \mathcal{N} \vec{\mathcal{E}}_{\parallel}, \quad (11)$$

где $\vec{\mathcal{E}}_{\parallel}$ — вектор Фурье-амплитуд электрического поля:

$$\vec{\mathcal{E}}_{\parallel} = \left(E_{x, \mathbf{G}_1}, \dots, E_{x, \mathbf{G}_{N_g}}, E_{y, \mathbf{G}_1}, \dots, E_{y, \mathbf{G}_{N_g}} \right)^T, \quad (12)$$

\mathcal{K}^2 — диагональная матрица собственных значений \mathcal{K}^2 размерности $2N_g \times 2N_g$, \mathcal{M}, \mathcal{N} — заданные матрицы размерности $2N_g \times 2N_g$, зависящие от частоты ω , компонент волнового вектора k_x, k_y и периода структуры d , задающего период обратной решётки. Фурье-амплитуды компоненты электрического поля, параллельной оси z , известным образом [17] выражаются через Фурье-амплитуды компонент, перпендикулярных z .

Таким образом, решение уравнений Максвелла сводится к задаче (11) для собственных значений и собственных векторов $\mathcal{E}_{\parallel} = \left(\vec{\mathcal{E}}_{\parallel}^{(1)}, \vec{\mathcal{E}}_{\parallel}^{(2)}, \dots, \vec{\mathcal{E}}_{\parallel}^{(2N_g)} \right)$.

В. Для объединения решений в разных слоях и расчёта комплексных векторных амплитуд электрического поля в зависимости от координат может быть использован формализм матрицы рассеяния.

Решение уравнений Максвелла в слое раскладывается в сумму $2N_g$ собственных векторов, распространяющихся вдоль направления оси z и противоположно ему. Введём вектор размерности $4N_g$, состоящий из амплитуд этих собственных векторов в данной плоскости постоянного значения координаты z :

$$\vec{\mathbb{A}}(z) = \begin{pmatrix} \vec{\mathcal{A}}^+(z) \\ \vec{\mathcal{A}}^-(z) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где $\vec{\mathcal{A}}^+(z)$, $\vec{\mathcal{A}}^-(z)$ — $2N_g$ -мерные вектора амплитуд волн, распространяющихся по и противоположно оси z . Вектор компонент электрического поля в плоскости для данного z выражаются через матрицу собственных векторов и матрицу амплитуд как

$$\vec{\mathcal{E}}_{\parallel}(z) = (\mathcal{E}_{\parallel}, \mathcal{E}_{\parallel}) \vec{\mathbb{A}}(z) \quad (14)$$

Таким образом, чтобы найти распределение поля в данном перпендикулярном оси z «срезе» структуры, зная собственные значения \mathcal{E}_{\parallel} , нужно узнать вектор амплитуд собственных волн $\vec{\mathbb{A}}(z)$ для соответствующего значения z .

Введём матрицу рассеяния, связывающую вектор амплитуд волн, входящих в участок структуры (z_1, z_2)

$$\vec{\mathbb{B}}_{in}(z_1, z_2) = \begin{pmatrix} \vec{\mathcal{A}}^+(z_1) \\ \vec{\mathcal{A}}^-(z_2) \end{pmatrix} \quad (15)$$

с вектором амплитуд исходящих из него волн

$$\vec{\mathbb{B}}_{out}(z_1, z_2) = \begin{pmatrix} \vec{\mathcal{A}}^+(z_2) \\ \vec{\mathcal{A}}^-(z_1) \end{pmatrix} \quad (16)$$

с помощью соотношения

$$\vec{\mathbb{B}}_{out}(z_1, z_2) = \mathbb{S}(z_1, z_2)\vec{\mathbb{B}}_{in}(z_1, z_2) \quad (17)$$

Введённая таким образом матрица рассеяния может быть рассчитана итерационным образом. Например, если уже рассчитана матрица рассеяния $\mathbb{S}(z_1, z' + 0)$ и участок структуры (z', z'') однороден вдоль оси z , то новая матрица рассеяния $\mathbb{S}(z_1, z'' - 0)$ может быть получена из старой известным преобразованием [17]. Далее, если на уровне $z = z''$ в структуре происходит переход между различными слоями, то зная матрицу рассеяния $\mathbb{S}(z_1, z'' - 0)$, с помощью известного преобразования [17], полученного с учётом материальных уравнений, можно найти матрицу рассеяния $\mathbb{S}(z_1, z'' + 0)$. Таким образом, приняв исходно $\mathbb{S}(z_1, z_1) = \mathbb{I}$ (где \mathbb{I} — единичная матрица соответствующей размерности), можно, добавляя по очереди слои однородного материала и интерфейсы между различными материалами, рассчитать результирующую матрицу рассеяния $\mathbb{S}(z_1, z_2)$.

Для того, чтобы с помощью матрицы рассеяния найти вектор амплитуд собственных волн для выбранного значения $z = z_0$, нужно учесть вид векторов, падающих на структуру в целом:

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{A}}_{v,\alpha}^+ &\equiv \vec{\mathcal{A}}_{\alpha}^+(-0) = (e_x^{(\alpha)}, 0, \dots, 0, e_y^{(\alpha)}, 0, \dots, 0)^T, \\ \vec{\mathcal{A}}_{s,\alpha}^- &\equiv \vec{\mathcal{A}}_{\alpha}^-(z_{\max} + 0) = (0, \dots, 0)^T, \end{aligned} \quad (18)$$

где α обозначает поляризацию падающей волны, а ненулевые компоненты e_x и e_y заданы для S поляризации как $e_x^{(S)} = \sin(\varphi)$, $e_x^{(S)} = -\cos(\varphi)$, для P поляризации как $e_x^{(P)} = \cos(\theta) \cos(\varphi)$, $e_x^{(P)} = \cos(\theta) \sin(\varphi)$.

Для нахождения векторов амплитуд $\vec{\mathcal{A}}^-(z_0)$, $\vec{\mathcal{A}}^+(z_0)$ запишем два урав-

нения, связывающих их с векторами амплитуд на границах структуры:

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} \vec{A}^+(z_0) \\ \vec{A}^-(-0) \end{pmatrix} = \mathbb{S}(-0, z_0) \begin{pmatrix} \vec{A}_v^+ \\ \vec{A}^-(z_0) \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \vec{A}^+(z_{\max} + 0) \\ \vec{A}^-(z_0) \end{pmatrix} = \mathbb{S}(z_0, z_{\max} + 0) \begin{pmatrix} \vec{A}^+(z_0) \\ \vec{A}_s^- \end{pmatrix} \end{cases} \quad (19)$$

Система (19) состоит из $8N_g$ уравнений, которые определяют $8N_g$ переменных $\vec{A}^+(z_0)$, $\vec{A}^-(z_0)$, $\vec{A}^-(-0)$, $\vec{A}^+(z_{\max} + 0)$.

Таким образом, рассчитывая матрицы рассеяния $\mathbb{S}(-0, z_0)$ и $\mathbb{S}(z_0, z_{\max} + 0)$ и решая уравнения (19), можно найти вектор амплитуд собственных волн $\vec{A}(z_0)$ для любого «среза» z_0 структуры, через него с помощью соотношения (13) вычислить вектор Фурье-амплитуд электрического поля $\vec{\mathcal{E}}(z_0)$ для этого «среза», и, наконец, суммируя ряд (8), найти значения комплексных векторных амплитуд электрического поля $\mathbf{E}(x, y, z_0)$ в выбранном «срезе».

2.2. Распространение поля из структуры

Чтобы найти поле, излучаемое в требуемой поляризации и под требуемым углом (например, по отношению к направлению падения накачки на структуру), необходимо рассчитать поле, излучаемое диполем в данной точке структуры [25, 26, 30], и далее, воспользовавшись линейностью этой части задачи для излучения третьей гармоники, просуммировать такие поля по излучившим их точкам структуры. При этом дипольный момент каждого такого диполя, разумеется, равен произведению рассчитанной поляризации на соответствующий малый объём.

Однако на практике рассчитать распределение полей в структуре, вызванное падающей под заданным углом в заданной поляризации волной удобнее, чем поле, распространяющееся из структуры под этим углом в

этой поляризации. Чтобы свести задачу расчёта излучения диполя, расположенного в структуре, к задаче расчёта поля, создаваемого падающей волной в заданной точке структуры, используем электродинамический принцип взаимности. Он гласит [32, §89], что если в пространстве расположены два диполя, излучающих на одинаковой частоте, то

$$(\mathbf{E}_2(\mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{p}_1) = (\mathbf{E}_1(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{p}_2), \quad (20)$$

где источники соответственно расположены в точках \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , имеют комплексные векторные амплитуды дипольного момента \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 и излучают поля с комплексными векторными амплитудами \mathbf{E}_1 и \mathbf{E}_2 .

Пусть первый диполь расположен в структуре, а второй — вдали от неё, так что излучение второго диполя, падающее на структуру, можно считать плоской волной. Тогда, зная связь между дипольным моментом \mathbf{p}_2 и создаваемым им полем $\mathbf{E}_2(\mathbf{r}_1)$, можно использовать принцип взаимности для расчёта значения поля $\mathbf{E}_1(\mathbf{r}_2)$ в требуемой поляризации α , выбирая соответствующее ей направление $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_2(\alpha)$. Если модуль \mathbf{p}_2 задать равным единице, то получим:

$$E_{1\alpha}(\mathbf{r}_2) = (\mathbf{E}_2(\mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{p}_1) \quad (21)$$

С учётом этих соображений, для интенсивности генерации из всей структуры в заданной поляризации, проинтегрировав (21) по объёму излучающего вещества и взяв квадрат модуля поля, получим:

$$I_\alpha \propto \left| \int_{(V)} (\mathbf{E}_{in}^{3\omega}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{P}^{3\omega}(\mathbf{r})) d^3r \right|^2 \quad (22)$$

Далее можем рассчитать эффективность генерации, отнесённую к аналогичной эффективности для структуры без пространственной модуляции (в линейной поляризации, при падении по нормали к структуре):

$$\mathcal{I}_\alpha = \frac{I_\alpha}{I_p^{\text{homo},0}} \quad (23)$$

3. Объект исследования

3.1. Геометрия структуры

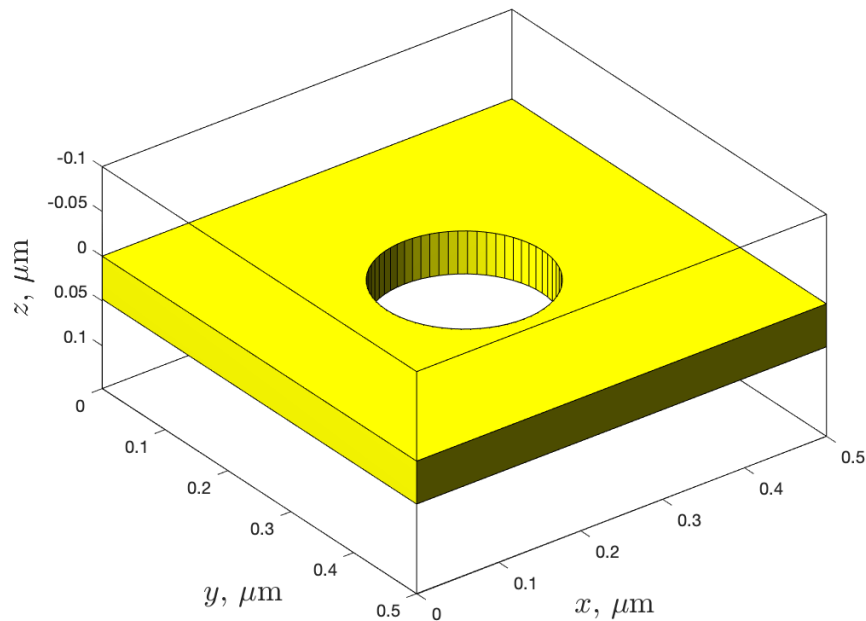


Рисунок 4 - Элементарная ячейка исследуемой структуры

В данной работе рассматривается генерация третьей гармоники в плоской двумерно-периодической структуре, окружённой с обеих сторон вакуумом. Для сравнения производились также расчёты для однородного слоя той же толщины. Излучение накачки падает по нормали к структуре, изучается эффективность генерации третьей гармоники в направлении, коллинеарном накачке, то есть «вперёд».

Объектом изучения является пластина оксида алюминия Al_2O_3 с квадратной решеткой сквозных круглых отверстий (рис. 4). Расчёты проводились для пластины толщиной 48 нм с величин периода структуры 500 нм, радиус отверстий изменялся в пределах от 10 нм до максимального значения, равного половине периода структуры.

3.2. Диэлектрическая проницаемость материала. Введение искусственно-го поглощения

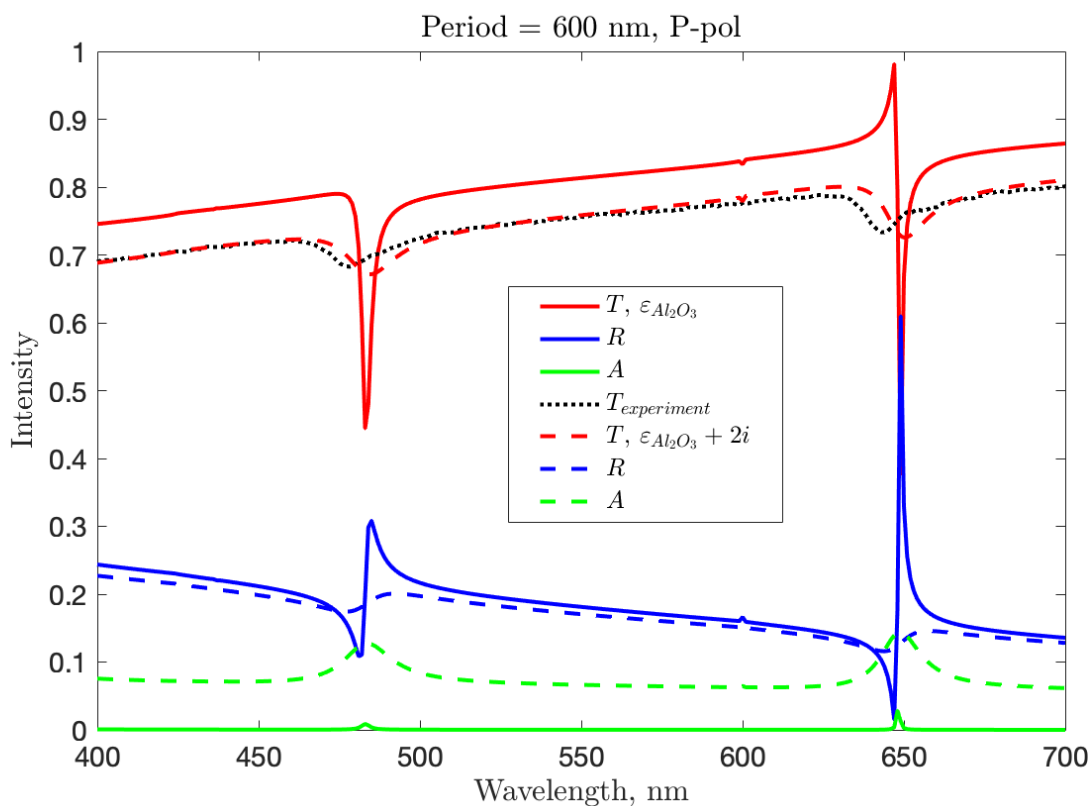


Рисунок 5 - Спектры пропускания, отражения и поглощения структуры при нормальном падении в Р-поляризации: рассчитанные без искусственного затухания и с добавлением затухания и экспериментальный спектр пропускания.

Для расчёта распределения электромагнитного поля в структуре необходима информация о диэлектрической проницаемости оксида алюминия. Исходно были использованы эллипсометрические данные, полученные на однородных плёнках [33]. С их помощью были рассчитаны спектры пропускания, отражения и поглощения для исследуемой структуры (рис. 5, сплошные линии). Однако, рассчитанные таким образом данные несколько расходятся с экспериментальным результатом (экспериментальный спектр пропускания [33] — рис. 5, пунктирная линия). Согласие с экспериментом улучшается, если прибавить к используемым значениям диэлектрической проницаемости на всех частотах слагаемое

$\delta\varepsilon = 0.2i$, то есть добавить дополнительное затухание (рис. 5, штриховые линии). Подобное появление дополнительных потерь может быть связано с дефектами изготовления структуры, вызывающими диффузное рассеяние в тонкой области вокруг отверстий.

К сожалению, были доступны данные [27] только для одной структуры. В то же время, как мы увидим в дальнейшем, эффективность генерации третьей гармоники чрезвычайно чувствительно к величине этих добавочных «технологических» потерь. Поскольку расчеты нам хотелось провести для различных структур, возникла необходимость привлечь дополнительные предположения для определения величины добавочного затухания, связанного с технологическими неточностями изготовления. Разумным представляется предположение, что такие потери, в расчете на элементарную ячейку структуры, пропорциональны периметру отверстий (а значит, и их радиусу), но не зависят от объёма излучающего вещества при постоянном радиусе. Поэтому было принято решение ввести дополнительное объёмное поглощение для разных значений периода структуры P и радиуса отверстий R по формуле

$$\delta\varepsilon(P, R) = \delta\varepsilon(P_0, R_0) \frac{R P_0^2 - \pi R_0^2}{R_0 P^2 - \pi R^2}, \quad (24)$$

где $P_0 = 600$ нм, $R_0 = 95$ нм — значения периода структуры и радиуса отверстий, для которых наилучшее согласие с экспериментом получено при $\delta\varepsilon(P_0, R_0) = 0.2i$.

Далее будут приведены результаты расчётов на основании значений диэлектрической проницаемости с добавлением потерь, введённым по формуле (24), а также — для сравнения — на основании значений ε с постоянной величиной удельных потерь:

$$\delta\varepsilon(P, R) \equiv \delta\varepsilon(P_0, R_0) \quad (25)$$

4. Результаты численного моделирования

4.1. Спектры эффективности генерации

Были рассчитаны спектры эффективности генерации третьей гармоники при накачке по нормали к структуре и по направлению вперед (т. е. коллинеарно накачке) для разных соотношений радиуса отверстия и периода структуры. Результаты, полученные при использовании диэлектрической проницаемости с постоянной поправкой в соответствии с (25) (рис. 6, а, б), значительно отличаются от результатов, полученных при введении затухания по формуле (24) (рис. 6, в, г). Видно, что при $\delta\varepsilon(P, R) \equiv \text{const}$ с увеличением радиуса отверстия (а значит, и уменьшением объёма, в котором введено дополнительное затухание) значительно повышается эффективность генерации. При этом в случае $\delta\varepsilon = \delta\varepsilon(P, R)$ максимальное усиление эффективности генерации достигается для $R = 125$ нм, что составляет четверть периода структуры. Так как модель с $\delta\varepsilon = \delta\varepsilon(P, R)$ кажется более разумной, далее обсуждаются результаты именно для этой модели. Для проверки этих результатов необходимо, разумеется, сравнить их с экспериментом, что пока не было сделано из-за отсутствия экспериментальных данных о структурах с различными значениями радиуса отверстий.

Обнаружено, что особенности рассчитанных спектров совпали с резонансами Фано на первой гармонике для той же структуры и имеют характерный профиль Фано. В зависимости от отношения радиуса отверстия к периоду структуры наблюдалось как усиление, так и ослабление генерации третьей гармоники в резонансе по сравнению с однородным слоем оксида алюминия той же толщины. Значительное усиление эффективности генерации третьей гармоники наблюдается только при линейной

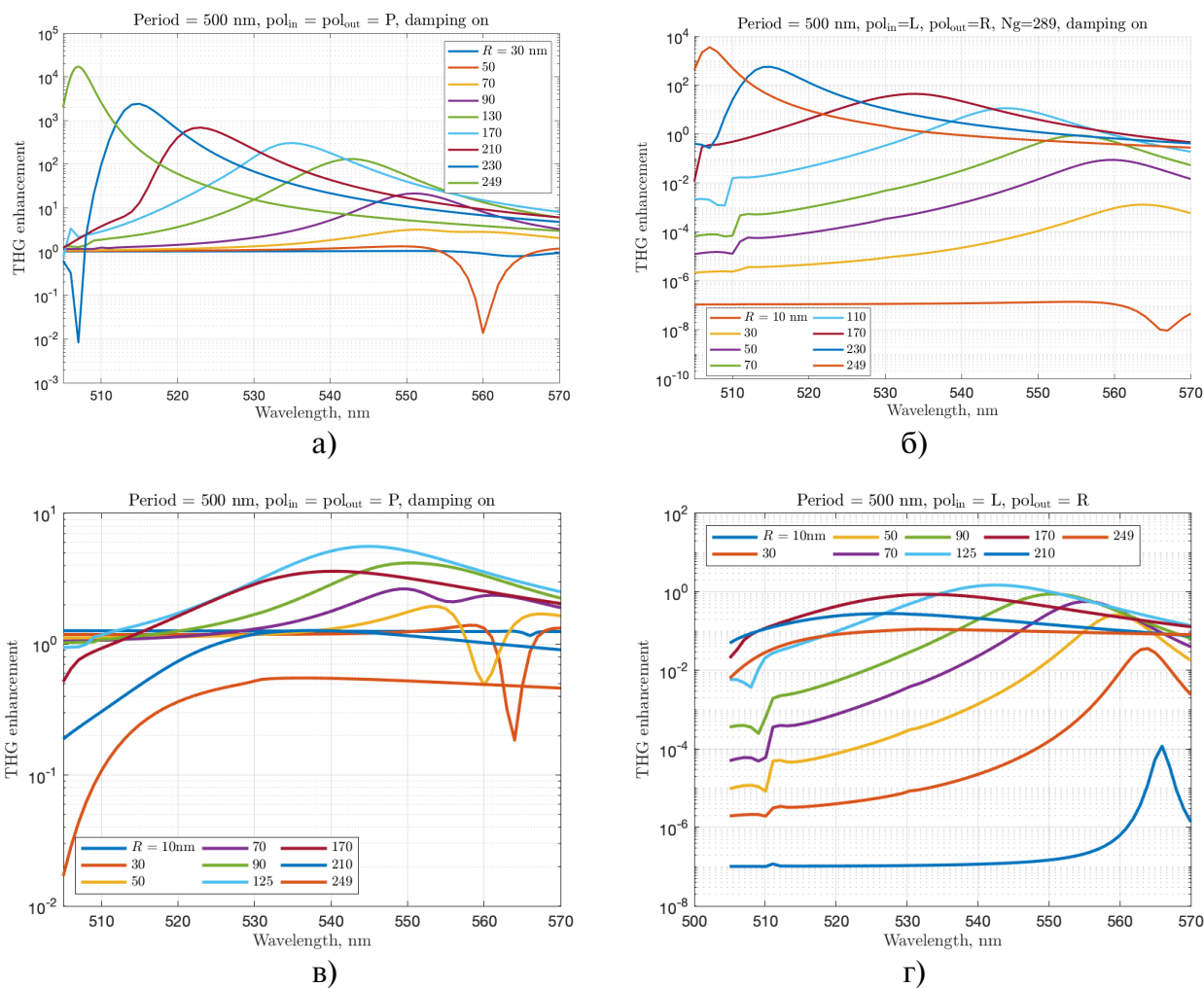


Рисунок 6 - Спектры усиления эффективности генерации третьей гармоники при нормальном падении излучения накачки на структуру в линейной (а, в) и в циркулярной (б, г) поляризациях по нормали к структуре в направлении, коллинеарном накачке для разных значений радиуса отверстия. Результаты (а, б) получены для $\delta\varepsilon(P, R) \equiv \text{const}$, результаты (в, г) — для $\delta\varepsilon(P, R)$, введённого в соответствии с (24).

поляризации накачки. Максимальная величина усиления составляет 5.6.

Эффективность генерации третьей гармоники при циркулярно-поляризованной накачке в однородном слое равна нулю вследствие формулы (2), так как для циркулярной поляризации $(\mathbf{E}^{(\omega)} \cdot \mathbf{E}^{(\omega)}) = 0$. Таким образом, наличие периодической модуляции приводит к появлению ненулевой эффективности генерации третьей гармоники при циркулярно-поляризованной накачке. Подобное явление наблюдалось и ранее [34]. При этом максимальная достигаемая эффективность гене-

рации не только больше нуля, но и превышает таковую для однородного слоя при линейной поляризации накачки, падающей на структуру по нормали.

4.2. Поле внутри структуры

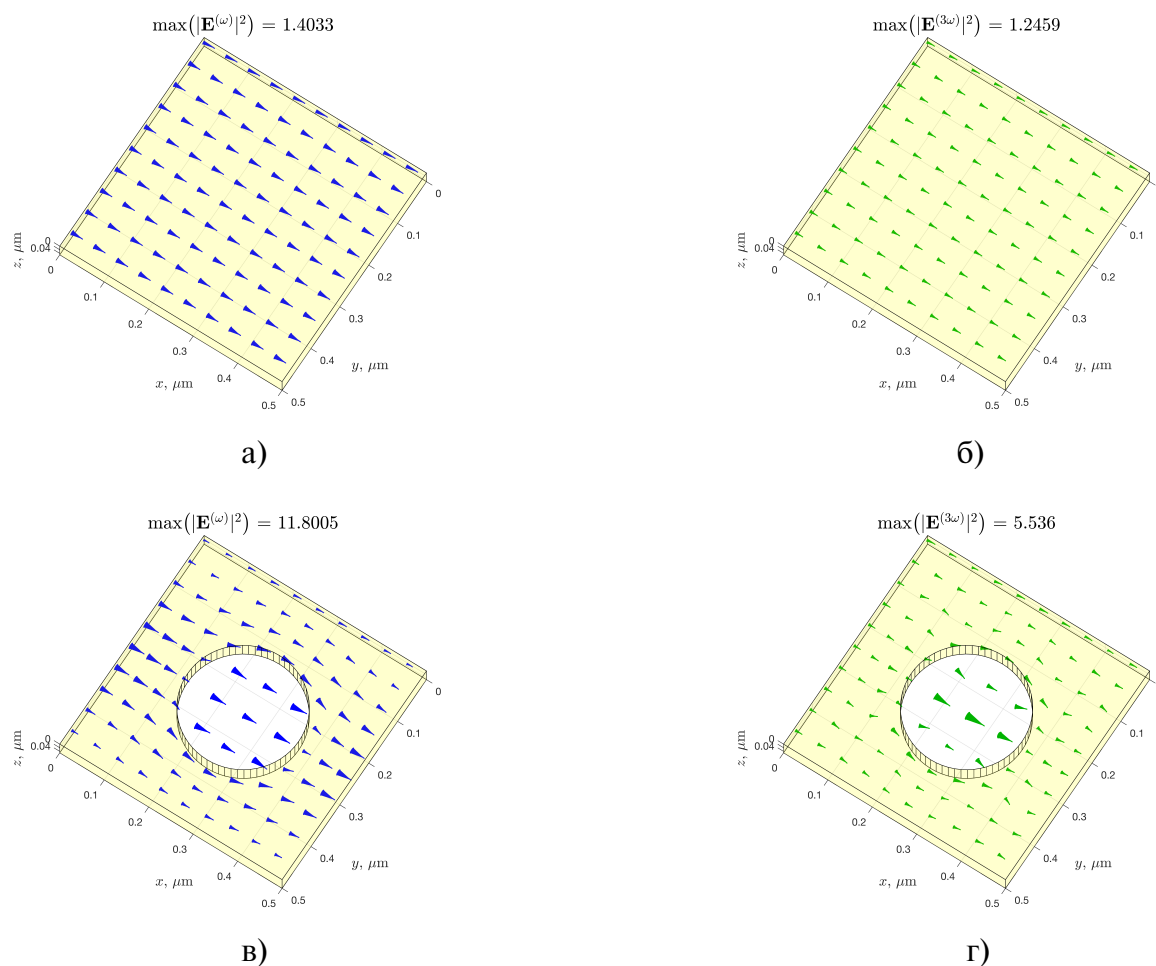


Рисунок 7 - Распределение поля накачки в однородном слое (а, б) и в изучаемой структуре (в, г) с периодом 500 нм и радиусом отверстия 249 нм при нормальном падении линейно поляризованного излучения на длине волны 507 нм, соответствующей максимальной эффективности генерации из структуры (а, в), и для соответствующего излучения третьей гармоники. Все рисунки выдержаны в одном масштабе

Было рассчитано распределение поля в структуре для однородного слоя и для слоя с периодической модуляцией (рис. 7) при нормальном падении линейно поляризованной волны на частоте первой и третьей

гармоник. Можно убедиться, что наличие периодической модуляции значительно усиливает амплитуду как поля накачки в структуре, так и эффективность излучения поля третьей гармоникой из структуры (что видно по усилению поля в структуре при облучении её волной на частоте третьей гармоникой), что и вызывает повышение эффективности генерации третьей гармоникой.

4.3. Диаграммы направленности

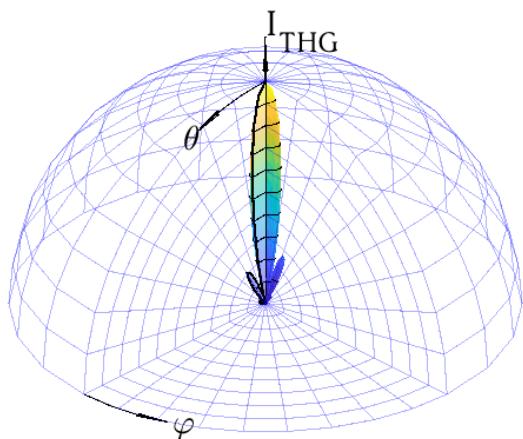
К практически важным характеристикам излучателя относится его диаграмма направленности [35]. Для исследуемой структуры получены диаграммы направленности эффективности генерации третьей гармоникой при нормальном падении накачки с частотой, соответствующей максимуму эффективности генерации третьей гармоникой вперед (рис. 8).

Обнаружено, что как для линейной, так и для циркулярно направленной накачки на диаграмме направленности наблюдается выраженный главный лепесток, направленный по нормали к структуре. Для линейной поляризации накачки ширина главного лепестка по половинной интенсивности равна 11 градусов, коэффициент направленного действия¹ составляет 6.11 дБ, уровень боковых лепестков 3.01 дБ. Для циркулярно поляризованной накачки КНД составил 4,28 дБ, ширина по половинной интенсивности — 14 градусов, уровень боковых лепестков 2.32 дБ.

Таким образом, для структуры с наибольшим усилением эффективности генерации излучение на третьей гармонике обладает значительной направленностью, причём при линейно поляризованной накачке направленность оказывается выше, чем при циркулярно поляризованной.

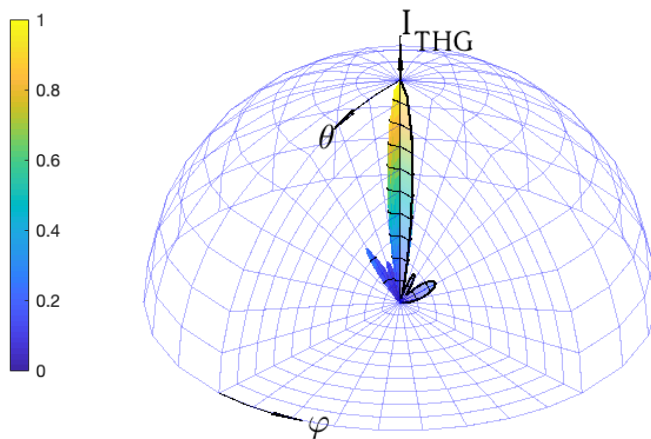
¹ Коэффициентом направленного действия (КНД) излучателя называется отношение среднего за период высокой частоты потока мощности (среднее значение вектора Пойнтинга), излучаемого в данном направлении, к усреднённому по всем направлениям значению плотности потока мощности [35].

$\text{pol}_{\text{in}} = \text{P}, \text{pol}_{\text{out}} = \text{P}; \max(\mathcal{I}_{\text{THG}}) = 5.576$



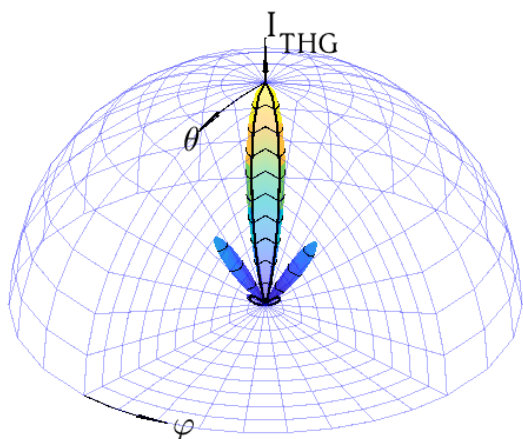
а)

$\text{pol}_{\text{in}} = \text{P}, \text{pol}_{\text{out}} = \text{S}; \max(\mathcal{I}_{\text{THG}}) = 5.5417$



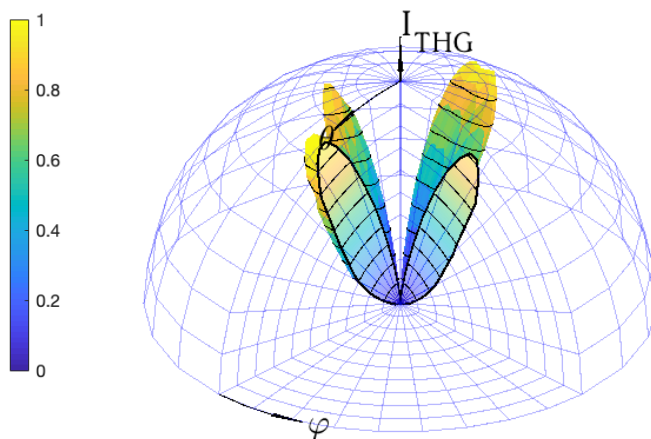
б)

$\text{pol}_{\text{in}} = \text{L}, \text{pol}_{\text{out}} = \text{R}; \max(\mathcal{I}_{\text{THG}}) = 1.3615$



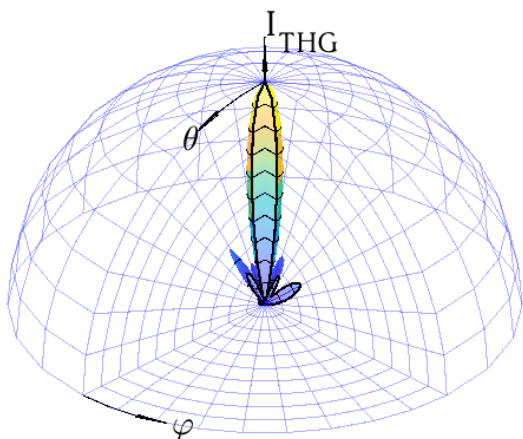
в)

$\text{pol}_{\text{in}} = \text{L}, \text{pol}_{\text{out}} = \text{L}; \max(\mathcal{I}_{\text{THG}}) = 0.44913$



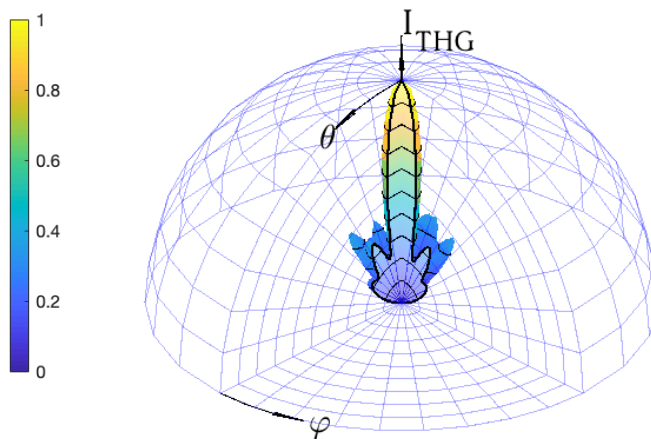
г)

$\text{pol}_{\text{in}} = \text{P}, \text{pol}_{\text{out}} = \text{all}; \max(\mathcal{I}_{\text{THG}}) = 5.576$



д)

$\text{pol}_{\text{in}} = \text{L}, \text{pol}_{\text{out}} = \text{all}; \max(\mathcal{I}_{\text{THG}}) = 1.3615$



е)

Рисунок 8 - Нормированные на максимальное значение диаграммы направленности эффективности генерации третьей гармоники в направлении, коллинеарном накачке, при нормальном падении излучения накачки с длиной волны 546 нм на структуру. Период структуры 500 нм, радиус отверстий 125 нм. Поляризация накачки pol_{in} и излучения на третьей гармонике pol_{out} указаны на рисунках.

ВЫВОДЫ

1. Исследуемая двумерно-периодическая структура, представляющая собой пластину с квадратной решеткой сквозных круглых отверстий, может быть использована для генерации третьей гармоники. Возможно усиление эффективности генерации до 5.6 раз по сравнению с однородным слоем той же толщины.
2. Особенность в спектре генерации возникает при той же длине волны накачки, что и резонанс Фано в спектре пропускания структуры для первой гармоники.
3. Эффективность генерации третьей гармоники для этой структуры существенно зависит от радиуса отверстий и достигает максимального значения при диаметре отверстия, равном половине периода структуры.
4. Наличие периодической модуляции приводит к появлению ненулевого излучения на третьей гармонике при циркулярно поляризованной накачке, которое полностью отсутствует в однородном слое.
5. Излучение третьей гармоники для данной структуры при значениях радиуса отверстий и длины волны накачки, для которых наблюдается максимальная эффективность генерации, обладает значительной направленностью при падении как линейно, так и циркулярно поляризованного поля накачки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работы была исследована возможность усиления генерации оптических гармоник за счёт использования пространственно-модулированных структур.

На основании готовой программы для вычисления распределения поля в структуре исследуемого типа при падении на неё данной плоской волны написан код, позволяющий рассчитать эффективность генерации третьей гармоники в заданном направлении в заданной поляризации.

С его помощью получены спектры эффективности генерации структуры для разных значений характеризующего её параметра — радиуса отверстий в пластине. Получено значение радиуса, при котором достигается максимальное значение эффективности генерации. Также проведено дополнительное исследование диаграмм направленности эффективности генерации третьей гармоники при некоторых значениях параметров.

Проведённые расчёты показывают перспективность использования подобной структуры в качестве оптического элемента со значительной величиной нелинейности.

В заключение мне хочется выразить благодарность моему научному руководителю, Сергею Григорьевичу Тиходееву, за постановку интересной задачи и всяческую помощь в моей работе; проф. Николаю Алексеевичу Гиппиусу (Сколтех) и проф. Томасу Вайссу (Prof. Dr. Thomas Weiss, Stuttgart University) за предоставленную программу расчета распределения полей в ближневолновой зоне фотонно-кристаллического слоя методом фурье-модального разложения; а также д-ру Куниаки Кониши и проф. Макото Гоноками (Dr. Kuniaki Konishi and Prof. Makoto Gonokami, The University of Tokyo) за обсуждения и оптическую характеризацию пленочных образцов Al_2O_3 .

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2059 (1987)
- [2] J. Joannopoulos, P. Villeneuve, S. Fan, *Nature* 386, 143–149 (1997)
- [3] Y. Liua and X. Zhang, *Chem. Soc. Rev.*, 2011, 40, 2494–2507
- [4] T. Baba and D. Ohsaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol. 40 (2001) pp. 5920–5924
- [5] S. Amuthavalli, M. Chattopadhyay, 2018 2nd International Conference on Trends in Electronics and Informatics (ICOEI)
- [6] J. Broeng, T. Sondergaard, S. E. Barkou, P. M. Barbeito and A. Bjarklev, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* 1 (1999) 477–482
- [7] C. Jamois, R.B. Wehrspohn, L.C. Andreani, C. Hermann, O. Hess, U. Goesele, *Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications* 1 (2003) 1–13
- [8] H. S. Dutta, A. K. Goyal, V. Srivastava, S. Pal, *Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications* 20 (2016) 41–58
- [9] H. Inouye, M. Arakawa, Jing Yong Ye, T. Hattori, H. Nakatsuka, and K. Hirao, *IEEE J. Quantum Electronics*, Vol. 38, No. 7 (2002)
- [10] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O’Brien, P. D. Dapkus, and I. Kim, *Science* 284, 1819–1824 (1999)
- [11] Marin Soljacic, J. D. Joannopoulos, *Nat. Matt.* Vol. 3 211-219 (2004)
- [12] J. Bravo-Abad, A. Rodriguez, P. Bermel, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and Marin Soljacic, *Opt. Express*, Vol. 15, No. 24 16162 (2007)

- [13] T. Paul, C. Rockstuhl, and F. Lederer, *J. Opt. Soc. Am. B*, Vol. 27, No. 5 (2010)
- [14] K. I. Okhlopkov, P. A. Shafirin, A. A. Ezhov, N. A. Orlikovsky, M. R. Shcherbakov, and A. A. Fedyanin, *ACS Photonics* 2019, 6, 189-195
- [15] G. Ban, C. Gong, C. Zhou, S. Li, R. Barille, X. Liu, and Y. Wang, *Opt. Lett.* Vol. 44, No. 1 (2019)
- [16] L. Carletti, S. S. Kruk, A. A. Bogdanov, C. De Angelis, and Y. Kivshar, *Phys. Rev. Research* 1, 023016 (2019)
- [17] S. G. Tikhodeev, A. L. Yablonskii, E. A. Muljarov, N. A. Gippius, and Teruya Ishihara, *Phys. Rev. B* 66, 045102 (2002)
- [18] U. Fano, *Journal of the Opt. Soc. of America* Vol. 31, Issue 3, pp. 213-222 (1941)
- [19] U. Fano, *Phys. Rev.* 124, 1866–1878 (1961)
- [20] B. Luk'yanchuk, N. I. Zheludev, S. A. Maier, N. J. Halas, P. Nordlander, H. Giessen and C. Chong, *Nat. Matt.* Vol. 9 707, 2010
- [21] M. F. Limonov, M. V. Rybin, A. N. Poddubny and Y. S. Kivshar, *Nat. Photonics* Vol. 11 543, 2017
- [22] T. Weiss, G. Granet, N. A. Gippius, S. G. Tikhodeev, and H. Giessen, *Opt. Express* 17, 8051–8061 (2009)
- [23] Th. Weiss, *Advanced numerical and semi-analytical scattering matrix calculations for modern nano-optics. Diss. Dr. rer. nat. (Physikalisches Institut der Universitaet Stuttgart, 2011)*
- [24] Бломберген Н. *Нелинейная оптика.* (Москва, Мир, 1966)

- [25] S. V. Lobanov, T. Weiss, N. A. Gippius, and S. G. Tikhodeev, JETP Lett., Vol. 93, No. 10, pp. 555–558 (2011)
- [26] S. V. Lobanov, T. Weiss, D. Dregely, H. Giessen, N. A. Gippius, and S. G. Tikhodeev, Phys. Rev. B 85, 155137 (2012)
- [27] J. Defrance, M. Schaeferling, and T. Weiss, Opt. Express, Vol. 26, No. 11 13746 (2018)
- [28] S. Roke, M. Bonn, A. V. Petukhov, Phys. Rev. B 70, 115106 (2004)
- [29] P. Then, G. Razinskas, T. Feichtner, P. Haas, A. Wild, N. Bellini, R. Osellame, G. Cerullo, and B. Hecht, Phys. Rev. A 89, 053801 (2014)
- [30] S. V. Lobanov, T. Weiss, N. A. Gippius, S. G. Tikhodeev, V. D. Kulakovskii, K. Konishi, and M. Kuwata-Gonokami, Opt. Lett. Vol. 40, No. 7 (2015)
- [31] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твёрдого тела. Том 1. (Москва, Мир, 1979)
- [32] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика, т. VIII. Электродинамика сплошных сред.(Москва, Физматлит, 2005)
- [33] K. Konishi, The University of Tokyo, private communication, 2019
- [34] S. Chen, G. Li, F. Zeuner, W. H. Wong, E. Y. B. Pun, T. Zentgraf, K. W. Cheah, and S. Zhang, Phys. Rev. Lett. 113, 033901 (2014)
- [35] Кочержевский Г.Н., Ерохин Г.А., Козырев Н.Д. Антенно-фидерные устройства (Москва, Радио и связь, 1989)