

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ

Кафедра квантовой электроники

# ОПТИЧЕСКИЙ ОТКЛИК МИ-РЕЗОНАНСНЫХ НАНОЧАСТИЦ, СВЯЗАННЫХ С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ВОЛНОВОДАМИ

Зав. кафедрой  
квантовой электроники:  
д. ф. -м. н., профессор  
Панов В. И.

Бакалаврская работа  
студента 427 группы

Нестерова К. Е.  
Научный руководитель:  
к. ф. -м. н., н. с.  
Щербаков М. Р.

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Литературный обзор</b>	<b>4</b>
2.1	Метаматериалы . . . . .	4
2.2	Рассеяние Ми . . . . .	5
2.3	Оптический магнетизм . . . . .	7
2.4	Метод конечных разностей во временной области . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Постановка задачи</b>	<b>10</b>
<b>4</b>	<b>Оригинальная часть</b>	<b>11</b>
4.1	Исследуемые наноструктуры . . . . .	11
4.2	Численный расчёт для одиночного нанодиска . . . . .	11
4.3	Численный расчёт для массива нанодисков . . . . .	11
4.4	Обсуждение . . . . .	12
<b>5</b>	<b>Заключение</b>	<b>13</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>14</b>

# 1 Введение

С каждым годом развитие технологических возможностей человечества позволяет производить искусственные структуры с характерными размерами всё меньших порядков. В настоящее время реальностью является управление формой и размерами материалов на наномасштабах, что позволяет создавать композитные материалы с заданными свойствами. Это обуславливает необходимость исследования параметров и области применения подобных метаматериалов. Особо интересным классом метаматериалов являются структуры с оптическим магнетизмом, то есть обладающие резонансом с ненулевым магнитным дипольным моментом на оптических частотах, что невозможно в обычных веществах, встречающихся в природе в естественном виде. Известна возможность возбуждения магнитного дипольного резонанса как для металлических метаматериалов, так и для чисто диэлектрических наноструктур.

При кажущейся простоте металлических решений они обладают существенным недостатком в виде больших омических потерь. Исследование нелинейно-оптических свойств требует высокой интенсивности излучения, порой достигающей порога оптической прочности материалов, что делает подобные решения неприменимыми. Неметаллические наноструктуры выгодно выделяются отсутствием подобного недостатка, однако пока что слабо изучены.

В данной дипломной работе численно определены оптимальные параметры для возбуждения магнитного резонанса в одиночном кремниевом нанодиске, связанном с диэлектрическим волноводом, и оптимизирована конфигурация системы из 20 нанодисков для потенциального создания оптического переключателя (TODO: ?).

## 2 Литературный обзор

### 2.1 Метаматериалы

Метаматериалы являются искусственно созданными материалами с заданными свойствами. Взаимодействие метаматериалов с электромагнитными или звуковыми [24] волнами в первую очередь определяется формой и размерами отдельных и, как правило периодических, элементов, нежели свойствами веществ, из которых они изготовлены. При создании оптических метаматериалов используются микро- и наноструктуры, обладающие характерными размерами сравнимыми с длиной волны взаимодействующего электромагнитного излучения, что приводит к принципиально новым оптическим свойствам и эффектам.

Одними из ярких и принципиально уникальных свойств метаматериалов является их потенциальная возможность реализации отрицательного показателя преломления и так называемого оптического магнетизма. Создав материал с изотропными диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$  и магнитной проницаемостью  $\mu = \mu' + i\mu''$ , удовлетворяющими отношению  $\varepsilon'|\mu| + \mu'|\varepsilon| < 0$ , возможно получить вещество с отрицательной действительной частью показателя преломления  $n = n' + n'' = \sqrt{\varepsilon\mu}$ .

Как правило, все оптические среды обладают положительными проницаемостями  $\varepsilon$  и  $\mu$ . Известно однако, что диэлектрическая проницаемость металлов в оптическом диапазоне может принимать отрицательные значения. К сожалению, в природе не наблюдается материалов, которым одновременно присущи  $\varepsilon < 0$  и  $\mu < 0$ .

Основоположником теории метаматериалов, выдвинувшим в своей статье [25] идею о принципиальной возможности существования материалов с отрицательной действительной компонентой показателя преломления принято считать советского физика В. Г. Веселаго, хотя следует признать, что подобные среды значительно раньше обсуждались и в работах других учёных, например в работе [26] Д. В. Сивухина. Подтверждение существования подобных структур было получено Джоном Пендри (англ. John B. Pendry) из Имперского колледжа в Лондоне и Дэвидом Смитом (англ. David R. Smith) из Калифорнийского университета в Сан-Диего. В своей статье [16] они показали возможность применения метаматериалов с отрицательным показателем преломления для суперлинз – структур, позволяющих получать изображения с разрешением, превосходящим дифракционный предел. В 2004 году была экспериментально продемонстрирована [5] первая суперлинза, обладавшая разрешением в три раза лучше дифракционного предела в микроволновом диапазоне.

## 2.2 Рассеяние Ми

В 1908 году немецким физиком Густавом Ми было получено [10] решение уравнений Максвелла для рассеяния света на сферических частицах произвольного радиуса. В случае когда размер частицы гораздо меньше длины волны рассеиваемого света, рассеяние Ми является частным случаем Рэлеевского рассеяния. Часто под рассеянием Ми подразумевают рассеяние света на частицах с размерами, сравнимыми с длиной волны взаимодействующего света. Распределение электрического поля внутри сферы для первых четырёх мод с комментариями из [2] показано на рисунке 2.1.

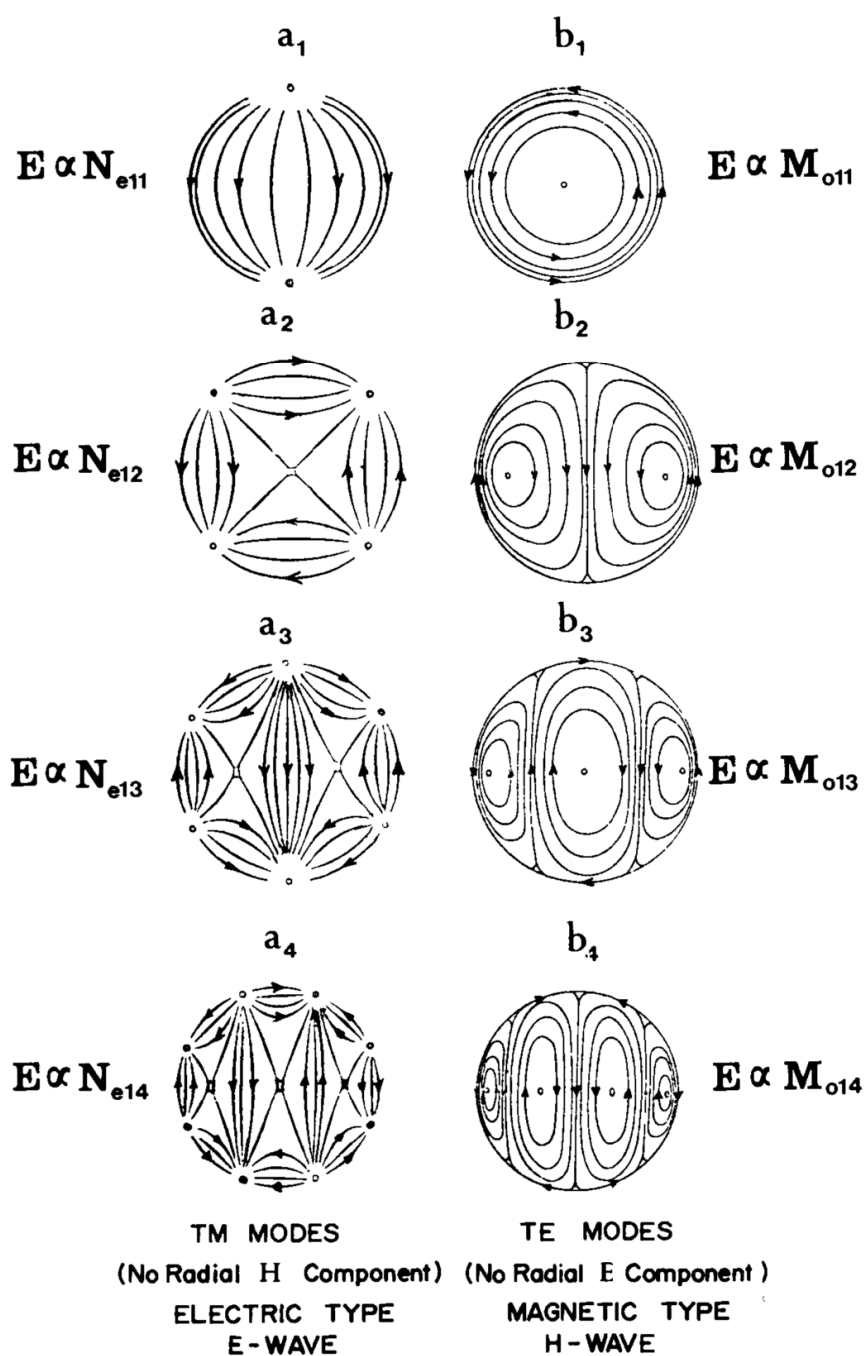


Рис. 2.1. Распределение электрического поля для первых четырёх резонансов Ми

Ми-резонансные наночастицы являются удобным объектом для создания метаматериалов. В 1947 году была предложена [8] модель, описывающая композитный материал, состоящий из массива магнитоэлектрических сфер с  $\varepsilon_1, \mu_1$ , встроенного в фоновый материал ( $\varepsilon_2, \mu_2$ ). В этом случае теория Ми предсказывает следующие значения эффективных диэлектрической и магнитной проницаемостей  $\varepsilon_{eff}$  и  $\mu_{eff}$ :

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_1 \left( 1 + \frac{3v_f}{\frac{F(\theta)+2b_e}{F(\theta)-b_e} - v_f} \right) \quad (2.1)$$

$$\mu_{eff} = \mu_1 \left( 1 + \frac{3v_f}{\frac{F(\theta)+2b_m}{F(\theta)-b_m} - v_f} \right) \quad (2.2)$$

где

$$F(\theta) = \frac{2(\sin \theta - \theta \cos \theta)}{(\theta^2 - 1) \sin \theta + \theta \cos \theta} \quad (2.3)$$

$$b_e = \varepsilon_1/\varepsilon_2, \quad b_m = \mu_1/\mu_2 \quad (2.4)$$

$$v_f = \frac{4}{3}\pi \left( \frac{r_0}{p} \right)^3, \quad \theta = k_0 r_0 \sqrt{\varepsilon_2 \mu_2} \quad (2.5)$$

Уравнение 2.3 показывает что  $F(\theta)$  является резонансной функцией и принимает отрицательные значения в некоторой области параметра  $\theta$  вблизи резонанса, что приводит к отрицательным значениям  $\varepsilon_{eff}$  или  $\mu_{eff}$ .

В этой модели учитывались лишь первые и вторые резонансные моды, поскольку высшие резонансы Ми часто возникают на частотах, на которых не применима формула Клаузиуса — Моссотти. Позже эти расчёты были улучшены в работе [13] путём принятия во внимание электрической поляризуемости сфер, находящихся в режиме магнитного резонанса.

Как уже упоминалось выше, для получения эффективного магнитного резонанса как правило требуется использовать наноструктуры, содержащие металлические элементы [11]. Однако присутствие металла неизбежно приводит к омическим потерям, что делает подобные металлсодержащие среды практически невозможными к использованию в полях высотой интенсивности, требуемой для изучения нелинейно-оптических свойств. Из этого ограничения вытекает интерес и необходимость в реализации магнитного резонанса в чисто диэлектрических метаматериалах. Впервые полностью диэлектрические структуры, обладающие оптическим магнетизмом были получены в работе [17]. Дополнительным плюсом подобных решений является большая независимость от угла и более удобные возможности для интеграции в трёхмерные структуры.

## 2.3 Оптический магнетизм

TODO: очень большая секция, надо будет разбить. Добавить [6] (про inverse design)

TODO: немного теории [19]

TODO: металлические [9, 14, 18]

TODO: сравнение металлических и кремниевых нанодисков [12] + чисто кремниевые [3, 21] + кремниевые цилиндры [15]

TODO: аналогичные по функционалу структуры [1, 4, 7, 20, 22]

## 2.4 Метод конечных разностей во временной области

Методы конечных разностей для зависимых от времени дифференциальных уравнений в частных производных давно используются в решении задач вычислительной гидродинамики. Метод конечных разностей во временной области (FDTD) является логичным обобщением подобных алгоритмов на поле задач электродинамики. Он был разработан [23] Кейном Йи (англ. Kane S. Yee) в 1966 году и его ключевым результатом является определение полей  $E$ ,  $H$  на дискретной по времени сетке.

Алгоритм Йи основывается на дискретизации уравнений Максвелла:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\nabla \times \vec{E} \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{H} \quad (2.7)$$

$$\vec{B} = \mu(\vec{r}, t) \vec{H} \quad (2.8)$$

$$\vec{D} = \varepsilon(\vec{r}, t) \vec{E} \quad (2.9)$$

Следует обратить внимание, что  $\vec{J}$ ,  $\mu$  и  $\varepsilon$  зависят от радиус-вектора и от времени.

Для дискретизации уравнений Максвелла Йи предложил сетку, изображённую на рисунке 2.2, причём сетки для полей  $E$  и  $H$  смещены по отношению друг к другу на полшага не только по пространственным координатам, но и по времени.

$$(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z) \quad (2.10)$$

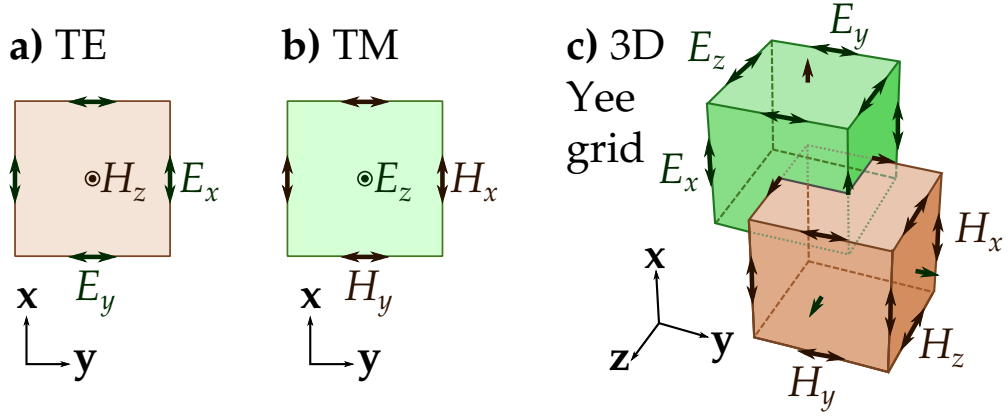


Рис. 2.2. Пространственная сетка в методе Йи

Тогда функция  $F(x, y, z, t)$  превратится в

$$F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = F^{(n)}(i, j, k) \quad (2.11)$$

Из чего, к примеру, следует следующий вид уравнения 2.6 для  $B_x$

$$\begin{aligned} & \frac{B_x^{n+1/2}(i, j + 1/2, k + 1/2) - B_x^{n-1/2}(i, j + 1/2, k + 1/2)}{\Delta t} = \\ & = \frac{E_y^n(i, j + 1/2, k + 1) - E_y^n(i, j + 1/2, k)}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i, j + 1, k + 1/2) - E_z^n(i, j, k + 1/2)}{\Delta y}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

а уравнение 2.7 для  $D_x$  запишется как

$$\begin{aligned} & \frac{D_x^n(i + 1/2, j, k) - D_x^{n-1}(i + 1/2, j, k)}{\Delta t} + J_x^{n-1/2}(i + 1/2, j, k) = \\ & = \frac{H_z^{n-1/2}(i + 1/2, j + 1/2, k) - H_z^{n-1/2}(i + 1/2, j - 1/2, k)}{\Delta y} - \\ & - \frac{H_y^{n-1/2}(i + 1/2, j, k + 1/2) - H_y^{n-1/2}(i + 1/2, j, k - 1/2)}{\Delta z} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Важной частью получения численного решения является задание граничных условий. Существуют два наиболее часто используемых типа условий – поглощающие (PML) или периодические. Условия первого типа используются при моделировании затухания волны на бесконечности, а второй тип условий используется при расчёте параметров периодических структур.

Существует несколько независимых реализаций метода конечных разностей во временной области. Одним из самых мощных и удобных подобных инструментов является программный пакет Lumerical FDTD Solutions, который и использовался в



данной работе.

Примерный алгоритм использования Lumerical FDTD Solutions может выглядеть следующим образом:

- 1) Задание исследуемых структур. Выбор форм и материалов.
- 2) Выбор подходящих источников электромагнитного излучения (включая их профиль, длительность импульса и спектр).
- 3) Выбор граничных условий.
- 4) Выбор области расчёта.
- 5) Задание “мониторов” - областей, в которых будут зафиксированы рассчитанные параметры поля.
- 6) Расчёт.

Также в данной работе для итерации по области параметров использовалась встроенная функция интерпретации скриптов, позволяющая осуществлять расчёты в полуавтоматическом режиме.

### 3 Постановка задачи

TODO: идея (исследованы нанодиски, исследована связь с резонансами высших мод, надо посмотреть что будет на связи с минимально возможной модой)

TODO: пункты исследования (оптимизация одиночного, оптимизация массива в различных конфигурациях (зеркальный) )

## 4 Оригинальная часть

### 4.1 Исследуемые наноструктуры

TODO: сэндвичи, характерные размеры

TODO: картинки одиночного в 4 проекциях

### 4.2 Численный расчёт для одиночного нанодиска

TODO: первая высота

TODO: графики, распределение полей (? возможно стоит пересчитать пару конфигураций)

TODO: вывод что надо меняться, вторая высота

TODO: графики, сперва меняли радиус для нулевого расстояния

TODO: нашли оптимальный радиус

TODO: графики, меняли расстояние, оптимально на слегка вдвинутом

TODO: графики распределения полей внутри нанодиска

TODO: вывод, что нужный резонанс

### 4.3 Численный расчёт для массива нанодисков

TODO: что пытаемся оптимизировать (максимум производной)

TODO: графики для дисков с одной стороны

TODO: идея, что можно добавить дисков снизу

TODO: графики для дисков снизу (сперва зеркально, затем посередине + оптимизированные 4-5 дисков)

TODO: вывод: провал растёт медленно, максимальная производная меньше и резонанс расплывается = не ок

TODO: по-хорошему довести до такого же количества дисков, но с одной стороны и сравнить. В любом случае графики

TODO: графики и вывод для самой эффективной структуры

## 4.4 Обсуждение

TODO: до конца не успеваем досчитать, предположить экстраполяцию

TODO: возможный фундаментальный предел глубины (пока неясно, считается, вроде растёт линейно) и максимума производной (а вот и нет, производная растёт как степень/экспонента(?). ширины провала(очень хорошо описывается убывающей экспонентой))

TODO: графики производных параметров от количества дисков (глубина, ширина, максимальная производная)

TODO: ввести метрику и сравнить с аналогичными функционально структурами

## 5 Заключение

TODO: посчитали, оптимизировали, сравнили с аналогичными. Пересказ постановки задачи + обсуждения, только всё получилось

# Список литературы

- [1] All-optical control of light on a silicon chip / R. Almeida Vilson, A. Barrios Carlos, R. Panepucci Roberto, Michal Lipson // Letters to Nature. — 2004. — Vol. 431, no. October. — P. 1081–1084.
- [2] Bohren Craig F., Huffman Donald R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles / Ed. by Craig F. Bohren, Donald R. Huffman. — Weinheim, Germany : Wiley-VCH Verlag GmbH, 1998. — apr. — ISBN: 9783527618156.
- [3] Demonstration of magnetic dipole resonances of dielectric nanospheres in the visible region / Andrey B. Evlyukhin, Sergey M. Novikov, Urs Zywietz et al. // Nano Letters. — 2012. — Vol. 12, no. 7. — P. 3749–3755.
- [4] Gondarenko Alexander, Levy Jacob S., Lipson Michal. High confinement micron-scale silicon nitride high Q ring resonator. // Optics Express. — 2009. — Vol. 17, no. 14. — P. 11366–70.
- [5] Grbic Anthony, Eleftheriades George V. Overcoming the Diffraction Limit with a Planar Left-Handed Transmission-Line Lens // Physical Review Letters. — 2004. — Vol. 92, no. 11. — P. 117403–1.
- [6] Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer / Alexander Y Piggott, Jesse Lu, Konstantinos G Lagoudakis et al. // Nature Photonics. — 2015. — Vol. 9, no. May. — P. 374–377. — 1504.00095.
- [7] Kippenberg T. J., Spillane S. M., Vahala K. J. Kerr-nonlinearity optical parametric oscillation in an ultrahigh-Q toroid microcavity // Physical Review Letters. — 2004. — Vol. 93, no. 8. — P. 18–21.
- [8] Lewin L. The electrical constants of a material loaded with spherical particles // Journal of the Institution of Electrical Engineers-Part III: Radio and Communication Engineering. — 1947. — jan. — Vol. 94, no. 27. — P. 65–68.
- [9] Magnetic metamaterials at telecommunication and visible frequencies / C. Enkrich, M. Wegener, S. Linden et al. // Physical Review Letters. — 2005. — Vol. 95, no. 20. — 0504774.
- [10] Mie Gustav. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen // Annalen der Physik. — 1908. — Vol. 330, no. 3. — P. 377–445.
- [11] Mie resonance-based dielectric metamaterials / Qian Zhao, Ji Zhou, Fuli Zhang, Didier Lippens // Materials Today. — 2009. — Vol. 12, no. 12. — P. 60–69.

- [12] Miroshnichenko Andrey E., Kivshar Yuri S. Fano Resonances in All-Dielectric Oligomers // Nano Letters. — 2012. — dec. — Vol. 12, no. 12. — P. 6459–6463.
- [13] Modeling of isotropic backward-wave materials composed of resonant spheres / L. Jylhä, I. Kolmakov, S. Maslovski, S. Tretyakov // Journal of Applied Physics. — 2006. — Vol. 99, no. 4. — P. 043102. — 0507324.
- [14] Optical properties of spherical gold mesoparticles / Andrey B. Evlyukhin, A. I. Kuznetsov, S. M. Novikov et al. // Applied Physics B: Lasers and Optics. — 2012. — Vol. 106, no. 4. — P. 841–848.
- [15] Optical spectroscopy of single Si nanocylinders with magnetic and electric resonances. / Andrey B. Evlyukhin, René L. Eriksen, Wei Cheng et al. // Scientific Reports. — 2014. — Vol. 4. — P. 4126.
- [16] Pendry J. B. Negative Refraction Makes a Perfect Lens // Physical Review Letters. — 2000. — oct. — Vol. 85, no. 18. — P. 3966–3969.
- [17] Realizing optical magnetism from dielectric metamaterials / James C. Ginn, Igal Brener, David W. Peters et al. // Physical Review Letters. — 2012. — Vol. 108, no. 9. — P. 1–5.
- [18] Second-harmonic generation from magnetic metamaterials. / Matthias W Klein, Christian Enkrich, Martin Wegener, Stefan Linden // Science (New York, N.Y.). — 2006. — Vol. 313, no. 5786. — P. 502–504.
- [19] Shalaev Vladimir M. Optical negative-index metamaterials // Nature Photonics. — 2007. — jan. — Vol. 1, no. 1. — P. 41–48.
- [20] Soltani Mohammad, Yegnanarayanan Siva, Adibi Ali. Ultra-high Q planar silicon microdisk resonators for chip-scale silicon photonics. // Optics express. — 2007. — Vol. 15, no. 8. — P. 4694–4704.
- [21] Tailoring directional scattering through magnetic and electric resonances in subwavelength silicon nanodisks / Isabelle Staude, Andrey E. Miroshnichenko, Manuel Decker et al. // ACS Nano. — 2013. — Vol. 7, no. 9. — P. 7824–7832.
- [22] Ultrahigh-Q Tunable Whispering-Gallery-Mode Microresonator / M. Pöllinger, D. O’Shea, F. Warken, A. Rauschenbeutel // Physical Review Letters. — 2009. — Vol. 103, no. 5. — P. 1–4. — 0901.4921.
- [23] Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media. — 1966.
- [24] Zhang Shu, Yin Leilei, Fang Nicholas. Focusing Ultrasound with an Acoustic Metamaterial Network // Physical Review Letters. — 2009. — may. — Vol. 102, no. 19. — P. 194301.
- [25] Веселаго В. Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями  $\varepsilon$  и  $\mu$  // Успехи физических наук. — 1967. — Т. 6, № 9. — С. 2861.

- [26] Сивухин Д. В. Об энергии электромагнитного поля в диспергирующих средах. // Оптика и спектроскопия. — 1957. — Т. 3. — С. 308.