

## ОТЧЕТ О ПРОДЕЛАННОЙ РАБОТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ИВЦ НГУ

### 1. Аннотация

Посредством численного полноволнового трехмерного моделирования в программе Comsol исследовался электромагнитный отклик одиночных золотых нанополосок, представляющих собой параллелепипед. Геометрические размеры нанополосок подбирались для изучения широкополосного резонансного отклика в оптической области спектра и в терагерцовом диапазоне. Получены зависимости коэффициентов рассеяния, поглощения и экстинкции таких антенн. Показано, что, изменяя толщину и глубину таких нанополосок можно добиться уширения резонансного отклика при неизменной длине нанополоски, вдоль которой направлен вектор электрического поля падающей волны. Получены зависимости частоты резонансного отклика (показана возможность тонкой подстройки резонансной частоты) и ширины резонансной кривой от глубины и ширины антенны. Зависимости носят существенно нелинейный характер.

Кроме того, выполнен расчет для метаповерхностей заполненной периодической структурой из прямоугольных нанополосок. Моделирование проводилось для трехмерной геометрии с периодическими граничными условиями. Геометрические размеры нанополосок подбирались для изучения широкополосного резонансного отклика в терагерцовой области спектра. Получены результаты для коэффициентов отражения и пропускания в зависимости от частоты излучения. На резонансной кривой видны некоторые особенности, а именно, резонансы поглощения, которые интерпретированы как «аномалии Вуда», т.е. возбуждение резонансных поверхностных плазмонов.

### 2. Тема работы

Исследование фазово-градиентных металл-диэлектрических структурированных пленок (метаповерхностей) при взаимодействии с электромагнитным полем в ближнем ИК и видимом диапазонах.

### 3. Состав коллектива

1. Вергелес Сергей Сергеевич, научный сотрудник ИТФ им. Л.Д.Ландау РАН, МФТИ, доцент кафедры теоретической физики, кандидат физико-математических наук, руководитель проекта
2. Ефремова Екатерина Александровна, доцент кафедры общей физики 1, физический факультет, Санкт-Петербургский Государственный Университет (СПбГУ), исполнитель
3. Крылов Игорь Ратмирович, доцент кафедры общей физики 1, физический факультет, Санкт-Петербургский Государственный Университет (СПбГУ), научный консультант
4. Прохорова Ульяна Витальевна, ведущий инженер учебной лаборатории квантовой электроники, физический факультет, Санкт-Петербургский Государственный Университет (СПбГУ), исполнитель

## 4. Научное содержание работы

### 4.1. Постановка задачи

Проект направлен на решение вопросов конструирования метаповерхностей с заданным однородным широкополосным электромагнитным откликом. Нашей целью являлось исследовать коэффициенты отражения и пропускания периодических металл-диэлектрических структур со сложным периодом и освоить процесс расчёта структур для изготовления метаповерхностей с заданным оптическим откликом. Также нашей задачей стояло выявить условия возникновения резонансного отклика для поверхностных волн, которые могут значительно ограничивать диапазон резонансного отклика для отраженного и проходящего излучения. Для достижения данных целей мы решали задачи численного моделирования электромагнитного резонансного отклика одиночных наноантенн с различной геометрией в видимом и ИК диапазоне и периодически упорядоченных метаповерхностей (состоящих из промоделированных, исследованных наноантенн).

### 4.2. Современное состояние проблемы

Существует большое количество работ, в которых изучается резонансный отклик металлических и диэлектрических наночастиц на внешнее электромагнитное поле. Особый интерес для приложений представляют собой оптический диапазон, ближний ИК диапазон (телекоммуникационные длины волн) и терагерцовый диапазон. Существует класс задач, для которых важен широкополосный резонансный отклик. Это задачи широкополосной фильтрации в телекоммуникационных технологиях и задачи создания сенсоров, в которых на фоне широкого плазмонного резонанса регистрируются сложные спектры поглощения и т.п. Только за последнее время было опубликовано несколько интересных работ ориентированных на построение принципиальной схемы (геометрии) для получения широкополосного отклика для более или менее конкретных технологических приложений, таких как поляризационный конвертор, широкополосный поглотитель, управление хроматическими аберрациями [1-4]. Но получаемые широкополосные отклики сильно ограничены частотным диапазоном и неоднородны внутри каждого рассматриваемого диапазона

В этой связи является актуальным развитие подходов для предсказания и управления шириной плазмонного резонанса как одиночной антенны и исследование коэффициентов отражения и пропускания, обусловленное, коллективным откликом периодической (упорядоченной) структуры из наноантенн расположенных на подложке (метаповерхность). Кроме того, следует учитывать важность простоты нанесения наночастиц на твердотельную подложку, в частности методом нанолитографии при изготовлении упорядоченных метаповерхностей. Наиболее простыми в изготовлении являются наноантенны с близкими к прямоугольным или квадратным сечениям, именно такая геометрия отдельных наноблоков использовалась и в работах [1-4].

Отметим также, что в случае антенны прямоугольного сечения существует три независимых параметра для подстройки резонансной частоты и ширины резонанса: длина, ширина и глубина. Фиксируя, например длину и ширину, и меняя глубину антенны, мы можем подстраивать частоту резонансного отклика, в частности как это показано в работе [5], где исследовался оптический отклик наноантенны цилиндрической формы в зависимости от форм-фактора, который представляет собой отношение длины цилиндра к его диаметру. В работе [5] показано существенное изменение частоты отклика в зависимости от такого форм-фактора, но ширина полученного резонанса не входило в приоритетное рассмотрение авторов. Для геометрии, рассматриваемой в данной работе (см. рис 1.) можно ввести два форм фактора: отношение длины ( $l$ ) к толщине ( $h$ ) и отношение

длины ( $l$ ) к ширине ( $d$ ). Появляющаяся в рассматриваемой геометрии еще одна независимая координата дает дополнительную степень свободы для подбора ширины резонанса.

1. Linbo Zhang, Peiheng Zhou, Haipeng Lu, Li Zhang, Jianliang Xie, and Longjiang Deng Realization of broadband reflective polarization converter using asymmetric cross-shaped resonator. *OPTICAL MATERIALS EXPRESS* Vol. 6 № 4, (2016). DOI:10.1364/OME.6.001393
2. Arvind Nagarajan, Kumar Vivek, Manav Shah, Venu Gopal Achanta, and Giampiero Gerini. A Broadband Plasmonic Metasurface Superabsorber at Optical Frequencies: Analytical Design Framework and Demonstration. *Adv. Optical Mater.* 1800253, (2018), DOI: 10.1002/adom.201800253
3. Hui-Hsin Hsiao, Yu Han Chen, Ren Jie Lin, Pin Chieh Wu, Shuming Wang, Bo Han Chen, and Din Ping Tsai, Integrated Resonant Unit of Metasurfaces for Broadband Efficiency and Phase Manipulation. *Adv. Optical Mater.* 6, 1800031 (2018), DOI: 10.1002/adom.201800031
4. Fei Zhang, Ming Zhang, Jixiang Cai, Yi Ou, and Honglin Yu Metasurfaces for broadband dispersion engineering through custom-tailored multi-resonances. *Applied Physics Express* 11, 082004 (2018) DOI: 10.7567/APEX.11.082004
6. G. W. Bryant, F. J. G.de Abajo, and J. Aizpurua. *NanoLetters* 8, 631-636 (2008).
7. Q. Zhang, J. You and Ch. Liu, *Equivalent Nanocircuit Theory and Its Applications*. Chapter 10, <http://dx.doi.org/10.5772/67681>

#### 4.3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Нами были проведены полноволновые трехмерные расчеты для нанополоски из золота с прямоугольным сечением со следующими параметрами (Рис.1). Мы дали ей название «нанополоска», чтобы подчеркнуть отличие от наностержня цилиндрической формы. Длина нанополоски  $l=500$  нм. Толщина  $h$  выбиралась исходя из размеров скин-слоя, а именно должна быть не больше скин-слоя. Такой выбор толщины обусловлен тем, что при выводе аппроксимирующих аналитических выражений можно в первом приближении предполагать существование равномерного распределения по толщине (вдоль оси  $z$ ). Мы рассматривали нормальное падение внешнего электромагнитного поля на нанополоску для длин волн от 600 нм до 3500 нм. Были рассчитаны электромагнитные отклики нанополоски для  $h=5, 10$  и  $20$  нм. Ширина нанополоски варьировалась от 20 до 900 нм. Ниже приведены графики (Рис. 2) сечения рассеяния в зависимости от длины падающего излучения.

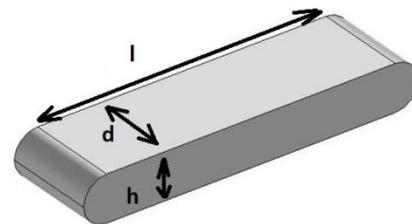


Рис. 1. Исследуемая нанополоска

Также было проведено полноволновое трехмерное моделирование (FDTD, Comsol) отклика периодической структуры, состоящей из нанополосок и находящихся на подложке из CaF. В этом случае мы масштабировали размеры антенны для ТГц диапазона, т.к. с одной стороны изготовление более крупных антенн проще, а с другой стороны именно в этом диапазоне работает большинство биологических сенсоров. На Рис.6 (синяя линия) представлена расчетная кривая зависимости энергетического коэффициента прохождения от частоты на которой отчетливо видны особенности – две линии поглощения внутри широкого контура пропускания. Аналогичные особенности широкополосного отклика имеются и в работе [1]. Эти особенности мы интерпретируем как «аномалии Вуда». Тем не менее в проведенных экспериментах нашей группы, при весьма хорошем совпадении расчетной и экспериментальной кривой эти особенности не наблюдаются. Это может быть объяснено, тем, что в численном моделировании рассматривалась бесконечная плоскость с падающей на нее плоской волной. В эксперименте использовалось сфокусированное излучение, одно с пятном фокусировки – 60  $\mu\text{m}$  и 150  $\mu\text{m}$ . Для кривой, соответствующей

большому пятну фокусировки, можно заметить «некоторое начало» образования особенностей поглощения. Кроме того, при большом пятне фокусировки форма линии имеет более пологую (однородную), не заостренную верхнюю часть, т.е. более равномерный отклик пропускания по некоторому диапазону частот. Указанные различия (размер пятна фокусировки, и плоская волна, в расчетном случае) означают различную степень пространственной когерентности падающего излучения, которая, как можно предположить отвечает не только за форму резонансной кривой, но сказывается на ширине и однородности частотного отклика. Описанные здесь предположения требуют дальнейшего исследования, в том числе и моделирования процесса отклика метаповерхности на частично когерентное излучение.

#### 4.4. Полученные результаты.

Налажена методика расчета оптических характеристик как одиночных наноантенн, так и метаповерхностей. Отработанная методика предполагает отслеживание корректной нормировки, использование уравнений пользователя в рамках программы Comsol Multiphysics.

В настоящем разделе мы приводим результаты, полученные полноволновым моделированием методом FDTD для нанобалки с прямоугольным сечением, а также анализ изменения резонансной частоты и ширины резонанса в зависимости от толщины ( $h$ ) и ширины нанобалки ( $d$ ).

Графики имеют резонансный характер, резонанс соответствует первой дипольной моде. При увеличении ширины нанобалки ( $d$ ) резонансная длина волны уменьшается, а ширина резонанса увеличивается. На левом краю резонанса видна особенность, которая, по всей видимости, является резонансом третьей моды. При изменении ширины нанобалки ( $d$ ) резонансы первой и третьей моды двигаются навстречу друг другу. При нормальном падении света вторая мода не возбуждается.

На рисунке 2а представлен график зависимости резонансного отклика от длины падающего излучения для нанобалки толщиной 5 нм и соответствующий график зависимости ширины резонанса от ширины нанобалки (Рис.2б).

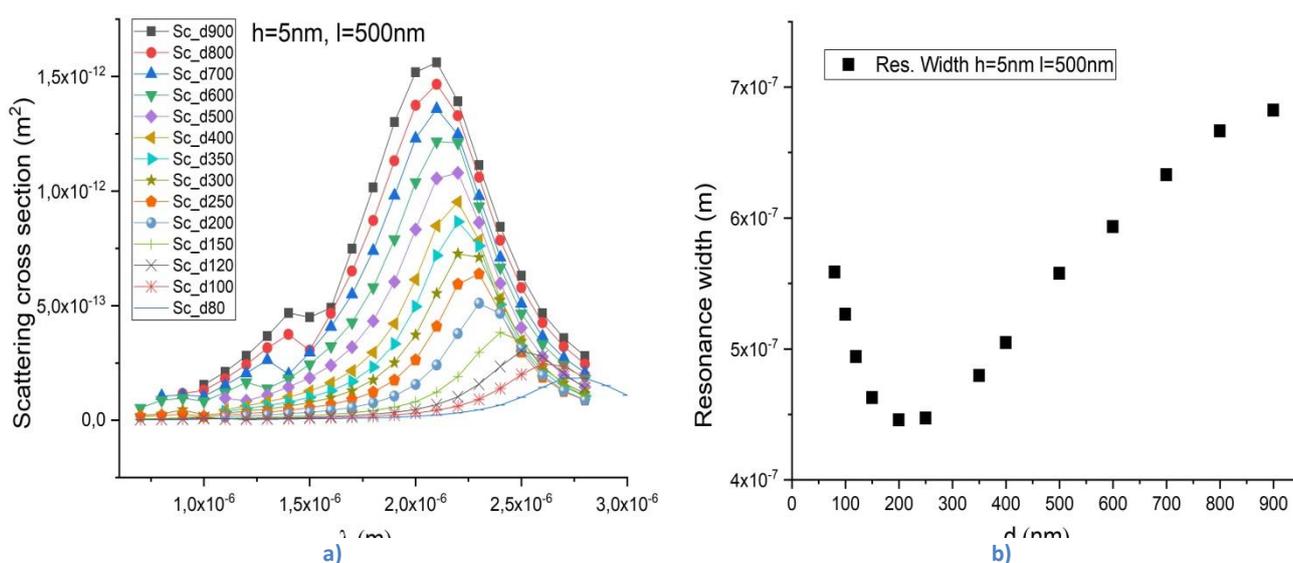


Рис.2

На рисунке 3 представлен график зависимости резонансного отклика от длины падающего излучения для нанобалки толщиной 10 нм и соответствующий график зависимости ширины резонанса от ширины нанобалки.

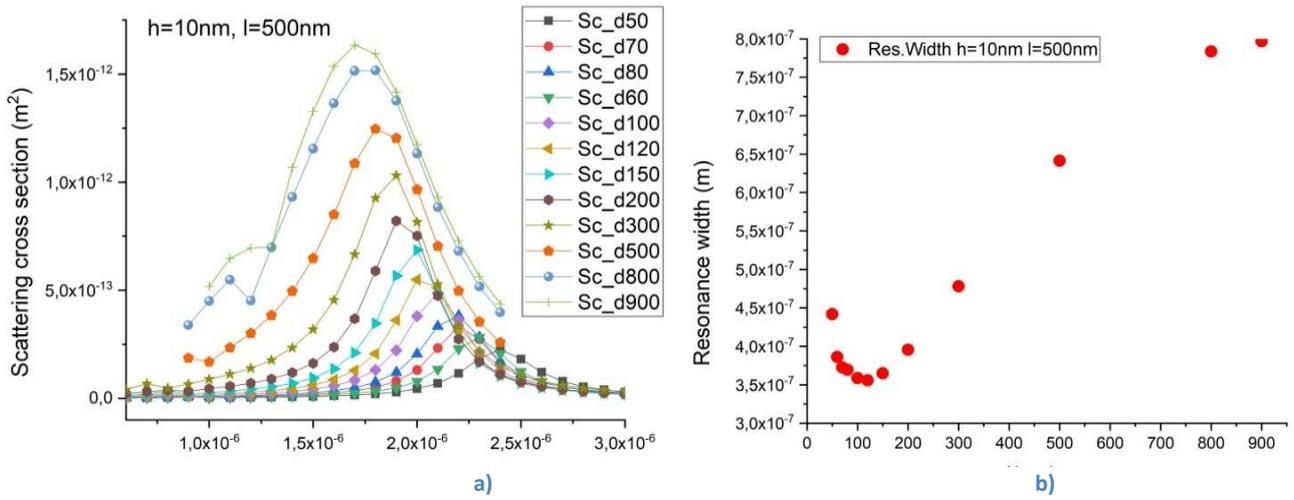


Рис. 3

На рисунке 4 представлен график зависимости резонансного отклика от длины падающего излучения для нанобалки толщиной 20 нм и соответствующий график зависимости ширины резонанса от ширины нанобалки.

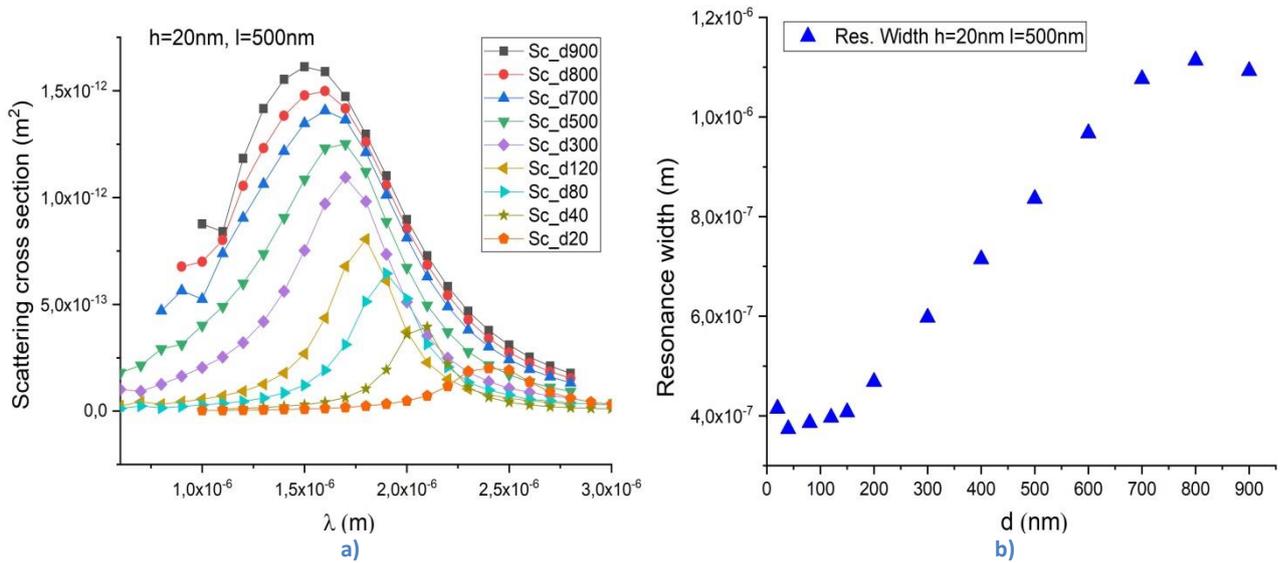


Рис. 4

На рис. 5а приведены графики зависимости ширины резонанса от ширины нанобалки  $d$  для  $h=5, 10, 20$  нм. Видно, что приведенные зависимости имеют существенно нелинейный характер. Кроме того видны следующие особенности: зависимость ширины резонанса от ширины балки имеет минимум, при больших значениях  $d$ , лежащих справа от минимума ширина резонанса тем больше, чем больше толщина балки  $h$ , а для малых ширин нанобалки  $d$ , т.е. лежащих слева от минимума зависимость инвертируется.

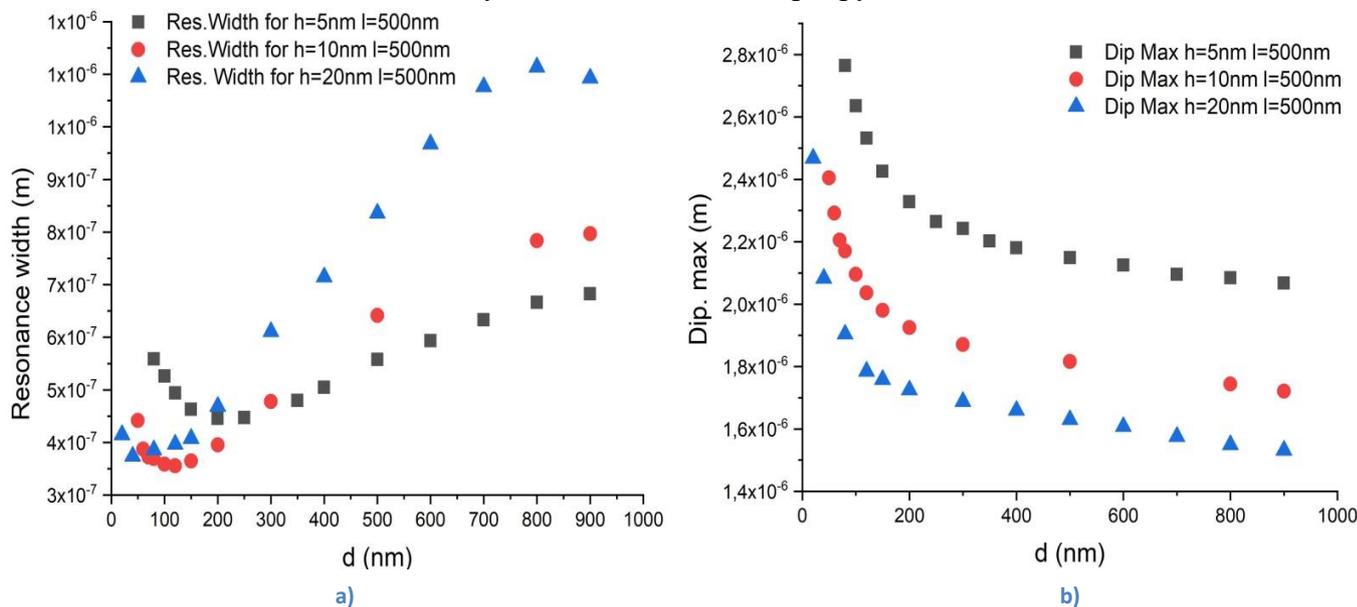
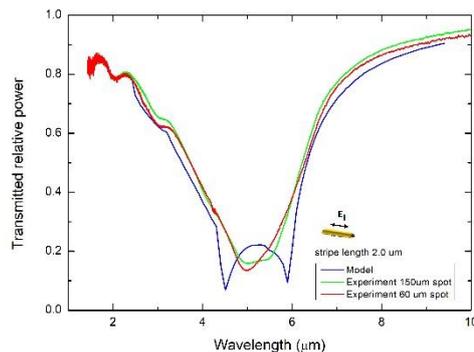


Рис. 5

На рис. 5b показана зависимость значения резонансной длины волны от ширины нанобалки  $d$  из которой видно, что резонансный отклик имеет две характерные области: нелинейная область быстрого изменения примерно до  $d$  примерно 300 нм и линейная область, где резонансная длина волны с увеличением  $d$  меняется очень медленно.

На рис. 6 показана зависимость значения резонансного энергетического коэффициента пропускания от длины волны падающего света (синяя линия расчет в Comsol). Зеленая и красная линии соответствуют экспериментальным данным для изготовленных образцов.



b)

Рис. 6

## 5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Моделирование на кластере позволила рассчитать в трехмерном случае отклики одиночных антенн с прямоугольным сечением в то время, как большинство аналитических расчетов и опубликованных работ предпочитают «иметь дело» с наноантеннами цилиндрической (круглое сечение) формы, т.к. она легче описывается, но на практике, при изготовлении образцов более важную роль играют антенны с прямоугольным сечением. Для антенны с прямоугольным сечением, как было показано при моделировании есть дополнительная степень свободы (три размера: длина, ширина и глубина) в

конструировании частотного резонансного отклика и ширины такого отклика, тогда как для цилиндрической геометрии с круглым сечением, таких параметра только два – длина и диаметр основания цилиндра.

Сопоставление результатов моделирования и экспериментальных результатов позволило выявить некоторые особенности в отклике метаповерхностей в зависимости, как предполагается, от степени пространственной когерентности падающего света. Насколько известно авторам данного отчета, целенаправленные полноценные исследования влияния степени пространственной когерентности на возбуждение резонансных поверхностных волн для периодической 2D структуры не проводились. Так что, можно сказать использование кластера привело, как минимум, к уточнению задачи, а вернее, к дополнительной и интересной с точки зрения как фундаментальной оптики, так и с точки зрения прикладных аспектов задаче.

Полноволновое трехмерное моделирование невозможно проводить на персональном компьютере, поэтому выполненные расчеты могли быть реализованы только на кластере.

**6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть). Если имеется, указать импакт-фактор журнала.**

1. Е.А. Efremova, I. R. Krylov, U.V. Prokhorova. The possibility of managing the width of the resonance for simple single nanoparticles, тезисы конференции STRANN-2018 (доклад принят) <http://www.strann.org/>. Подготовлена полнотекстовая версия доклада для публикации в AIP Conference Proceedings. Благодарность новосибирскому вычислительному кластеру имеется.
7. Коллектив выражает свою благодарность информационно-вычислительному центру Новосибирского государственного университета и надеется на дальнейшее сотрудничество.