VILNIAUS UNIVERSITETAS FIZIKOS FAKULTETAS FOTONIKOS IR NANOTECHNOLOGIJŲ INSTITUTAS

Klemensas Laurinavičius

SUB-BANGINIO DYDŽIO DALELIŲ META-ATOMŲ TYRIMAS FOTONINIŲ ELEMENTŲ KŪRIMUI

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Optoelektronikos medžiagų ir technologijų studijų programa

Studentas	Klemensas Laurinavičius
Darbo vadovas	vyriaus. m. d. Sergejus Orlovas
Konsultantas	prof. habil. dr. Kęstutis Staliūnas
Recenzentas	dr. Viktorija Tamulienė
Centro direktorius	doc. dr. Aidas Matijošius

Vilnius 2020

Turinys

Įv	adas			1	
1	Darbe nagrinėjamos problemos apžvalga			4	
	1.1	Metamedžiagos			
	1.2	Sub-b	oanginės dalelės: optinis diapazonas ir THz	5	
	1.3	Dichro	pizmas, chirališkumas, šviesos savybės	6	
2	Darbo metodai			8	
	2.1	2.1 Mie sklaida			
		2.1.1	Multipoliai, dipolinė aproksimacija	8	
	2.2	Geom	etrinė fazė	9	
		2.2.1	Jones matrica	9	
		2.2.2	Geometrinė fazė, geometrinės fazės elementai	10	
		2.2.3	Radialinės poliarizacijos keitiklis <i>S-waveplate</i>	12	
	2.3	Azimı	ıtinė ir radialinė poliarizacijos	13	
2.4 Vektoriniai pluoštai				14	
	2.5	Lume	rical galimybės	16	
	2.6	Lume	rical laikinis pluošto sklidimo (FDTD) metodas	17	
3	Skaitm	ieninis i	modeliavimas	19	
	3.1	FDTD metodo ir sferinių sub-banginių dalelių pranašumai 19			
	3.2	Meta-atomų savybės			
		3.2.1	Chirališkumas	20	
		3.2.2	Dvejopalūžiškumas	22	
	3.3	Geometrinės fazės elemento modeliavimas naudojant Jones matricas		24	
	3.4	Geom	etrinės fazės elementai	25	
		3.4.1	Daugiasluoksniai geometrinės fazės elementai	29	
		3.4.2	Geometrinės fazės elementai sudaryti iš nehomogeninių chiralinių meta-		
			atomų	33	
Iš	švados				
Li	Literatūros sąrašas			36	
Sa	ntrauka			39	
Su	Summary			40	
Pı	riedas Ni	r. 1		41	
Pı	riedas Ni	r. 2		43	

Įvadas

Per pastarajį dešimtmetį metamedžiagų mokslas susilaukė didelio susidomėjimo. Metamedžiagos įdomios todėl, kad galime sukurti tokias medžiagos savybes, kurios natūraliai gamtoje nėra aptinkamos. Šiame darbe metamedžiagos bus sudaromos iš pavienių meta-atomų ir bus tiriamas jų bendras atsakas. Naudodami tokį metamedžiagos kūrimo būdą galime gauti tokias egzotines savybes kaip neigiamas lūžio rodiklis ir pan. Šio darbo metu nagrinėsime metamedžiagas, skirtas optinių elementų, dar žinomų kaip geometrinės fazės elementų, kūrimui. Geometrinės fazės elementai veikia dėl fazės poslinkio atsirandančio ortogonalioms poliarizacijoms. Tokia metodika leidžia sukurtus geometrinės fazės elementus panaudoti skirtingiems bangos ilgiams, nuo UV iki THz, parinkus tinkamas medžiagas ir išlaikant meta-atomų dydžių santykį su bangos ilgiu.

Poliarizacija yra viena iš šviesos savybių, kuria manipuliuosime šiame darbe. Naudodami vektorinę šviesos poliarizacijos prigimtį galime valdyti šviesos sąveiką su medžiaga. Poliarizacijos sklidimas ir sąveika su medžiaga yra nagrinėjama įvairiose fizinių ir technologijos mokslų srityse, tokiose kaip optinė metrologija, ekranų technologijos, duomenų saugojimo srityje, optinės komunikacijos srityje, medžiagų moksle, astronomijoje ir biologijoje [1]. Naudodamiesi azimutine ir radialine poliarizacijomis [2] galime kietai fokusuoti pluoštą [3], panaudoti tokius pluoštus kaip optinį pincetą [4], optiniam duomenų saugojimui [5] ir pan. Pavykus geometrinės fazės elementais valdyti radialinę ir azimutinę poliarizacijas [6], atsiranda daug naujų galimybių, ypač sistemose, kur yra reikalingi didelių galių pluoštai [7]. Pasitelkdami įvairių programinių įrangų paketus galime modeliuoti tokias sistemas ir nuspėti kaip šviesa sąveikaus su mūsų sukurtais modeliais.

Šio darbo tikslai yra:

- Lumerical aplinkoje sumodeliuoti sub-banginių dalelių klasterius, pasižyminčius dvejopu lūžiu ir chirališkumu;
- Surasti optimalius sub-banginių dalelių parametrus geometrinės fazės elementų kūrimui;
- Lumerical aplinkoje sumodeliuoti geometrinės fazės elementus, sudarytus iš sub-banginių dalelių.

Su studento moksline veikla susiję pranešimai konferencijose:

 S. Orlov, J. Berškys, K. Laurinavičius. "Investigation of geometrical phase elements based on chiral and birefringent clusters of nanoparticles using closed-form Mie theory of vector complex source vortices" Days of Diffraction 2020, 2020 m. gegužės 25–29 d., Sankt Peterburgas, Rusija.

- 2. K. Laurinavičius, J. Berškys, S. Orlovas. "Tailoring response of a cluster of nanoparticles on a substrate and its application for design of geometrical phase elements". SPIE Photonics West 2020, 2020 m. vasario 3-7 d. San Franciskas, JAV.
- J. Berškys, K. Laurinavičius, S. Orlovas. "Closed-form analytical Mie theory of vector complex source vortices". SPIE Photonics West 2020, 2020 m. vasario 3-7 d. San Franciskas, JAV.
- J. Berškys, K. Laurinavičius, S. Orlovas. "Analytical Mie Theory of Vector Complex Source Vortices and its Application for the Investigation of Planar Chiral Structures". CLEO/EUROPE-EQEC, 2019 m. birželio 23–27 d. Miunchenas, Vokietija.
- K. Laurinavičius, J. Berškys, S. Orlovas. "Geometrical phase elements based on clusters of nanoparticles deposited on a glass substrate". E–MRS IUMRS ICAM Spring Meeting, 2019 m. gegužės 27–31 d. Nica, Prancūzija.
- K. Laurinavičius, A. Novičkovas, V. Tamošiūnas. "AAA class solar simulator based on high–power light emitting diodes with mirror system". OpenReadings 2019, 2019 m. Kovo 19–22 d., Vilnius, Lietuva.
- J. Berškys, K. Laurinavičius, S. Orlovas. "Investigation of Chiral Response in Nanoparticle Clusters using T-matrix Method". FizTech2018, 2018 m. spalio 17–18 d., Vilnius, Lietuva.
- K. Laurinavičius, J. Berškys, S. Orlovas. "Investigation of Interaction between Vectorial Complex–Source Beams and Nanoparticles". FizTech2018, 2018 m. spalio 17–18 d., Vilnius, Lietuva.

1 Darbe nagrinėjamos problemos apžvalga

1.1 Metamedžiagos

Metamedžiagos yra dirbtinės medžiagos, kurias kuriame siekdami gauti savybes, kurių įprastai gamtoje nerastume. Metamedžiagas kuriame naudodami meta-atomus, kuriuos varijuojame išdėstymu bei individualiomis savybėmis, taip gaudami reikalingą individualų bei kolektyvinį sistemos atsaką. Meta-atomai gali būti periodiškai išdėstomi siekiant sukurti viendimensines (1D) grandines, dvidimensinius (2D) metapaviršius ar tridimensines (3D) metamedžiagas (1 pav). Meta-atomai dažniausiai yra kuriami iš metalinių dalelių, nors vis dažniau straipsniuose yra kalbama apie dielektrinių sub-banginių dalelių galimybes. Priklausomai nuo bangos ilgio su kuriuo norima dirbti, medžiaga ir meta-atomų matmenys turi būti parenkami atitinkamai, siekiant gauti efektyviausią elektromagnetinės bangos sąveiką su metamedžiaga.



1 pav. Metamedžiagų struktūros. [8] a) Meta-atomas; b) viendimensinė meta-atomų grandinė; c) dvidimensinis metapaviršius; d) tridimensinė metamedžiaga.

Sąveikaujant elektromagnetinei bangai su metastruktūromis, elektromagnetinis atsakas kyla dėl individualių meta-atomų savybių, arba dėl kolektyvinio meta-atomų atsako [9]. Tokios sub-banginės struktūros veikia kaip optiniai osciliatoriai, kurie sugeria ir vėliau išspinduliuoja šviesą pakeitę jos fazę, amplitudę ar poliarizaciją. Šį pokytį galime reguliuoti keisdami metaatomų dydį, formą, medžiagą ir pan. Kuo meta-atomai yra mažesni už bangos ilgį, tuo sistema yra efektyvesnė [10]. Panaudojant įvairias dirbtines struktūras galima gauti tokias optines savybes, kurių negalima išgauti natūraliai randamose medžiagose, pavyzdžiui neigiamas lūžio rodiklis [11] [12]. Didžiausia problema su kuria susiduriama meta-atomų struktūrose, trukdančia kurti efektyvius elementus, tai energijos nuostoliai, atsirandantys dėl sugerties metalinėse sub-banginėse struktūrose. Krentanti banga į mažas daleles, prasiskverbia per visą tūrį, dėl to pirmiausia pasireiškia dipolinis atsakas, kurio rezonansinis dažnis priklauso nuo dalelės formos ir dielektrinės skvarbos. Tačiau didesnių dalelių atveju elektrinis laukas sąveikauja su paviršiniais elektronais, dėl to pasireiškia aukštesnio laipsnio multipoliai [13]. Dėl to didesnėms dalelėms plazmonų rezonansas yra dar jautresnis dalelės formos ir dydžio atžvilgiu. Sferines daleles aprašo Mie sklaida (2.1 skyrius).

1.2 Sub-banginės dalelės: optinis diapazonas ir THz

Kurdami geometrinės fazės elementus sudarytus iš pavienių meta-atomų galime sukurti optinius elementus, kurių storis bent keletas eilių plonesnis nei įprasti lęšiai, veikiantys refrakcijos principu. Dėl savo sumažintų matmenų tokie lęšiai susilaukia daug susidomėjimo (2 pav.).



2 pav. Metalęšiai. [14] a) Įprastas lęšis kuris veikia refrakcijos principu; b) Metalęšis, kuris veikia dėl sub-banginės struktūros sklaidos; c) ir d) parodo, kaip galime valdyti lęšio atsaką skirtingam bangos ilgiui ir poliarizacijai.

Ši optikos sritis dar yra žinoma kaip plokščioji optika (angl. flat optics) [14]. Literatūroje taip pat minima, kad metalęšiai galėtų būti aktyvūs: panaudodami elektros ar mechaninę įtampą galime greitai keisti tokio metalęšio savybes, taip moduliuodami tokio lęšio atsaką krintančiai bangai [15]. Kol kas aktyvieji metalęšiai yra tik planuojami ateityje ir toliau šiame darbe nebus aptariami. Metalęšiai gali būti panaudojami skirtingiems bangos ilgiams, pasirenkant tinkamas medžiagas ir išlaikant dalelių matmenų santyki su bangos ilgiu. 0,1 um – 1 mm bangos ilgiai pagal DIN 5031 (vok. Deutsches Institut für Normung) [16] yra priskiriami optiniam bangos ilgių diapazonui. THz sritis, esanti 0,1 Thz – 10 Thz, yra priskiriama infraraudonųjų spindulių sričiai (3 pav.).



3 pav. Elektromagnetinių bangų spektras.

Thz sritis yra išskiriama iš optinės srities, kadangi optiniais metodais generuoti THz spinduliuotę yra sudėtinga. THz kvanto energija yra artima kambario temperatūros energijai. Kietakūnė elektronika, kuri įprastai yra naudojama mikrobangoms generuoti, taip pat nepajėgia efektyviai generuoti THz, kadangi jie dirba ties savo ribiniu dažniu, kas įprastai yra apie keli šimtai GHz. Ši sritis yra nepatogi generavimui, tačiau turi daug potencialių panaudojimo sričių. THz panaudojamai randami biologijoje, medicinoje, molekulių spektroskopijoje, kadangi molekulinių jungčių virpesių dažniai yra THz srityje, bei kristalų fononų energijos įeina į THz sritį. Kadangi dalis absoliučiai juodo kūno spektro yra THz srityje, todėl THz sritis įdomi ir astronomijoje. THz spinduliuotę stipriai sugeria vanduo, todėl komunikacijoms taikyti THz yra sudėtinga, tačiau tokia sugertis yra naudinga biologinių objektų vaizdinimui. Komunikacijoms THz gali būti naudojami ties tam tikrais dažniais, kuriuose pasireiškia neįprastai mažesnė sugertis, pavyzdžiui 1.51 THz. THz spinduliuotei popierius bei plastikas yra skaidrūs, todėl THz galime naudoti pakuočių turinio kontrolei pašte ar oro uostuose, siekiant aptikti psichotropines medžiagas, sprogmenis ir kitas neleistinas medžiagas [17].

1.3 Dichroizmas, chirališkumas, šviesos savybės

Optinis dichroizmas yra medžiagos savybė, kuri nusako sugerties koeficientų skirtumą skirtingoms šviesos poliarizacijoms ar bangos ilgiams. Apskritiminį dichroizmą turi medžiagos, kurios dešininę apskritiminę poliarizaciją ir kairinę apskritiminę poliarizaciją sugeria skirtingai. Chirališkumas - geometrinė medžiagos savybė nesutapti su savo atvaizdu idealiame plokščiame veidrodyje. Naudodami chiralines medžiagas galime gauti apskritiminį dichroizmą kairinėms ir dešininėms apskritiminėms poliarizacijoms. Informacijos perdavimo spartai didinti, galime naudoti prietaisą, kurį apšvietus dešinine ar kairine apskritimine poliarizacijomis generuojame skirtingos krypties sroves [18]. Tokiu būdu galime padvigubinti optiniu būdu perduodamos informacijos spartą. Elektromagnetinio lauko chirališkumo tankis aprašomas kaip:

$$\chi = \frac{\varepsilon_0}{2} E \cdot \nabla \times E + \frac{1}{2\mu_0} B \cdot \nabla \times B, \qquad (1)$$

kur μ_0 yra laidumas vakuume, o E – elektrinis laukas ir B – magnetinis laukas,

Šviesos savybės yra skirstomos į bazines ir sudėtines. Bazinės savybės susideda iš elektrinio ir magnetinio lauko, jo dažnio, krypties, poliarizacijos, bangos ilgio. Sudėtinės savybės susideda iš elektromagnetinio lauko, kuris sudarytas iš elektrinio ir magnetinio laukų, energijos, Pointingo vektoriaus, kuris nurodo energijos pernešimo kryptį, elektromagnetinės energijos, įtempių tenzoriaus [19] ir pan.

2 Darbo metodai

2.1 Mie sklaida

Šviesos sklaida - tai optinės spinduliuotės srauto pokytis dėl jo sąveikos su medžiaga. Visos medžiagos išskyrus vakuumą sklaido šviesą. Įvairiausi modeliai yra kuriami siekiant aprašyti mažų dalelių sklaidą. Gustav Mie 1908 metais sukūrė teoriją, kuria aprašo aukso dalelių sklaidą ir sugertį vandenyje [20]. Peter Debye maždaug tuo pačiu metu savo disertacijoje aprašė sklaidos mechanizmą kaip spinduliuotės sukeltą slėgį ant mažų dalelių. Nors nei G. Mie, nei P. Debye nebuvo pirmieji, kurie aprašė sferinės dalelės sklaidos mechanizmus, tačiau dažniausiai yra naudojama Mie teorija. Mie teorija yra pagrįsta Maxwell'o lygčių sprendiniais. Mie sklaida galioja dalelėms, kurių dydžiai yra artimi arba didesni nei bangos ilgis. Norėdami aprašyti daleles, kurios yra daug mažesnės už bangos ilgi $\lambda/10$ naudojame Relėjaus sklaidos aprašymą (4 pav.).



4 pav. Sklaidos mechanizmų iliustracija.

2.1.1 Multipoliai, dipolinė aproksimacija

Skleidimas multipoliais yra sistemos aprašymo metodas, kurį patogu naudoti esant sferinėms koordinatėms. Šiuo metodu dažniausiai naudojamasi aprašant elektromagnetinius arba gravitacinius laukus. Šiuo metodu galime pasirinkti norimą simuliacijos tikslumą didindami multipolio laipsnį, tačiau didinant multipolio laipsnį didėja ir simuliacijai reikalingas laikas. Šiuo metodu svarbu atrasti optimalų multipolio laipsnį, kuriuo gausime pakankamą skaičiavimo tikslumą. Pasirinkus per didelį multipolio laipsnį skaičiavimui reikalingi pajėgumai ir laikas gali išaugti iki turimas galimybes viršijančių verčių.

DeVoe [21] 1964 metais sukūrė dipolinės aproksimacijos sprendimo metodą siekdamas apra-

šyti molekulių optines savybes. Norėdami aprašyti sklaidą sudėtingoms struktūroms, kurioms Maksvelo lygčių sprendiniai nėra skirti, naudojame dipolinę aproksimaciją. Šiuo metodu norimas struktūras padaliname į daug lengviau aprašomų sferų ar cilindrų (5 pav.).



5 pav. Skleidimo dipoliais iliustracija [22].

2.2 Geometrinė fazė

2.2.1 Jones matrica

1941 metais R. Carl Jones pristatė metodą, kuriuo galime aprašyti šviesos poliarizaciją. Krintančio pluošto elektrinį lauką E aprašius Jones metodu, turime dvi komponentes

$$E = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix},\tag{2}$$

kuriame E_x ir E_y atitinka poliarizacijos komponentes atitinkamomis ašimis. Optinį elementą aprašome naudodami Jones matricą pagal tai, kaip optinis elementas sąveikauja su kritusiu spinduliu.

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix},\tag{3}$$

kur m_{ij} bendru atveju yra kompleksiniai. Sudauginę elemento Jones matricą J su kritusio lauko Jones vektoriumi E_{in} , galime paskaičiuoti kaip atrodys su elementu sąveikavęs pluoštas E_{out} :

$$\mathbf{E}_{out} = \mathbf{J}\mathbf{E}_{in} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}$$
(4)

Perrašius Jones matricą, tokią pačią metodiką galime naudoti su dvejopai laužiančiais elementais. Tokia Jones matrica yra vadinama vėlinimo Jones matrica [23]. Dvejopai laužiantys elementai turi lėtąją ašį su n_l lūžio rodikliu ir greitąją ašį su n_g lūžio rodikliu. Dėl skirtumo tarp lūžio rodiklių, atsiranda fazių skirtumas tarp E_x ir E_y elektrinio lauko komponenčių. Šis procesas dar vadinamas vėlinimu. Įvedame dydį $\Delta \tau$, kuris ir nusako fazės skirtumus:

$$\Delta \tau = (n_l - n_g) d \frac{2\pi}{\lambda}.$$
(5)

Tokiu atveju, vėlinimo Jones matrica bus

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & e^{i\Delta\tau} \end{bmatrix} \tag{6}$$

Naudodami šią Jones vėlinimo matricą, galime aprašyti geometrinės fazės elementus.

2.2.2 Geometrinė fazė, geometrinės fazės elementai.

Naudodami geometrinės fazės efektą, kuris atsiranda keičiant krintančio spindulio poliarizaciją pagal Poincare sferos uždarą kontūrą, galime gauti geometrinės fazės elementus [24] [25]. Tokia geometrinė fazė dar vadinama Pancharatnam–Berry fazė. Bhandari [26] sukūrė geometrinės fazės principu pagrįstą lęšį, sudarytą iš koncentrinių žiedų, kuriuose įrašytos skirtingos orientacijos banginės plokštelės. Į tokį elementą krintantis pluoštas įgautų geometrinę fazę, kuri kinta tolstant nuo optinės ašies [27]. Galime keisti kritusios bangos fazės frontą, keisdami optinio kelio ilgį. Jei medžiaga izotropinė, tai optinį kelią apibrėžiame kaip

$$L_{opt} = nd, \tag{7}$$

kur $n - l\bar{u}$ žio rodiklis, o d – spindulio nueitas kelias medžiagoje. Įprastuose lęšiuose, tolstant nuo optinės ašies, lęšio storis kinta. Jei tolstant nuo optinės ašies lęšis plonėja, turime glaudžiamąjį lęšį, o jei lęšis storėja, turime sklaidomąjį lęšį. Tokiuose lęšiuose fazės pokytį aprašome per dinaminę fazę:

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} nd \tag{8}$$

Jei pluoštas krinta į dvejopai laužiančią medžiagą, tai optinis kelias priklausys nuo krintančio pluošto poliarizacijos. Lūžio rodikliai dvejopai laužiančioje medžiagoje yra žinomi kaip greito-

sios n_g ir lėtosios ašies n_l , kur greitoji ašis turi žemesnį lūžio rodiklį ir didesnį pluošto greitį, o lėtoji– didesnį lūžio rodiklį ir mažesnį pluošto greitį. Tokiu atveju fazės pokytis žinomas kaip:

$$\delta = \frac{\pi}{\lambda} \left(n_l + n_g \right) d \pm 2\alpha, \tag{9}$$

kur kampas α yra efektinės optinės ašies kampas lėtosios ašies atžvilgiu. Todėl, keičiant kampą α , keičiame ir fazės pokytį(vėlinimą). Pasinaudodami šia savybe, galime kurti geometrinės fazės elementus keisdami dvejopai laužiančios struktūros orientaciją. Jones matricos pagrindu įvedame pasukimo matricą:

$$\mathbf{R}\left(\boldsymbol{\alpha}\right) = \begin{bmatrix} \cos\boldsymbol{\alpha} & \sin\boldsymbol{\alpha} \\ -\sin\boldsymbol{\alpha} & \cos\boldsymbol{\alpha} \end{bmatrix}$$
(10)

Pasinaudoję šia išraiška galime skaičiuoti geometrinės fazės elementus.



6 pav. Dvejopai laužiančios struktūros iliustracija. Krintančio pluošto x ašimi ir y ašimi poliarizuotai šviesai lūžio rodikliai yra skirtingi dėl sub-banginės gardelės struktūros [27]

Taigi, turėdami dvejopai laužiančias struktūras, kurios skirtingoms poliarizacijoms turi skirtingą lūžio rodiklį, sukuriame fazės poslinkį - vėlinimą. Pasinaudoję Jones matricomis ir išvesta pasukimo matrica nesunkiai galime aprašyti kaip krintantį pluoštą paveiks dvejopai laužianti struktūra. Tokiu būdu galime modeliuoti geometrinės fazės elementus. Geometriniai fazės elementai gali būti gaminamai ir sub-banginėmis gardelėmis (6 pav.), ir sub-banginių meta-atomų struktūromis (7 pav.).



7 pav. Sub–banginių dalelių struktūros pluošto formavimui. Apačioje – tokios struktūros sugeneruotas sūkurinis pluoštas. [8]

2.2.3 Radialinės poliarizacijos keitiklis S-waveplate

S-waveplate (angl. super-structured wave plates) yra geometrinės fazės elementai, kurie tiesinę poliarizaciją keičia į azimutinę arba radialinę. Tokie elementai dar vadinami Vėlintojais (angl. retarders), kadangi jų veikimas pagrįstas skirtingu faziniu poslinkiu (literatūroje žinomu kaip **vėlinimas**) tarp ortogonalių poliarizacijų. Šis elementas sukurtas profesoriaus Peter G. Kazansky ir jo komandos Optoelektronikos tyrimų institute Southamptono Universitete. Elementas įprastai sudarytas iš dvejopai laužiančių struktūrų sudarytų iš femtosekundiniu lazeriu padarytų pažaidų stikle [28] taip suformuojant nanogardeles. Pažaidų struktūra pavaizduota (8 pav.).



8 pav. S-waveplate pažaidų struktūra elemente. Paveiksliuke elementas segmentuotas dėl atvaizdavimo aiškumo, tačiau gaminant tokį elementą kampo pokytis yra nenutrūkstamas [28].

Sio elemento nanogardelės orientacija priklauso nuo azimuto kampo elemente, kaip $\alpha = \phi/2$, kur α yra nanogardelės pasukimo kampas, o ϕ yra azimuto kampas elemente. Tokiu būdu krintančiam pluoštui sąveika skirtingose pluošto dalyse yra skirtinga, todėl gaunamas pluoštas turi nehomogeninę poliarizaciją. S-waveplate elementas tiesinę poliarizaciją keičia į radialinę ar azimutinę priklausomai nuo tiesinės poliarizacijos krypties.

2.3 Azimutinė ir radialinė poliarizacijos

Azimutinė ir radialinė poliarizacijos priklauso cilindriniams vektoriniams pluoštams. Tokia poliarizacija turi ašinę simetriją ir gali būti generuojama tiek aktyviai, tiek pasyviai [2]. Šiuo metu yra intensyviai tyrinėjami metodai skirti valdyti tokias poliarizacijas. Kadangi jie turi ypatingą poliarizacinę simetriją, tai leidžia tokius pluoštus naudoti didelės skaitinės apertūros(angl. NA) sistemose. Dėl to tokius pluoštu galime kietai fokusuoti [29], o tai leidžia tokius pluoštus panaudoti nano eilės dydžių objektų vaizdinimui ir valdymui [1]. Dėl šių priežasčių vektoriniais pluoštais susidomėjo tokios sritys kaip lazerinis apdirbimas, nuotolinis detektavimas, terahercų technologijos ir pan. Taip pat šie pluoštai turi savybę atstatyti pluoštą net praėjus kliūtis(angl.self-healing) [30].



9 pav. Radialinė (viršuje) ir azimutinė (apačioje) poliarizacijos, ir jų x ir y poliarizacijos komponentės. [1]

2.4 Vektoriniai pluoštai

Skaliariniai pluoštai sferinėje koordinačių sistemoje aprašomi kaip [6]:

$$u(r) = g^n(kR)P_n^l(\cos(\theta))exp(il\phi), \tag{11}$$

čia g^n yra sferinė Beselio funkcija. Prie skaliarinio pluošto pridėję gradientą, gauname:

$$U_L = \nabla \mathbf{u}(r),\tag{12}$$

kuris aprašo vektorinius pluoštus. Priklausomai nuo pasirinktos simetrijos, turime bendrą išraišką:

$$U_M = U_L \times a,\tag{13}$$

kur a yra vektorius. Sferinei simetrija
i $a = Rr_r$, cilindrinei simetrijai $a = e_z$, ir $a = e_x$ arba
 $a = e_y$ Dekarto koordinačių sistemoje. Magnetinio lauko atveju sprendinys:

$$U_N = \frac{1}{k} \nabla \times U_M \tag{14}$$

Sferinių koordinačių atveju, turime:

$$u(r) = U_0 \frac{g_m(ks)}{s^m} [Rsin(\theta)]^m e^{i\alpha m\phi}$$
(15)

Sprendinys yra:

$$\mathbf{U}_{M}^{(s)} = U_{0}R^{m}\sin^{m-1}\theta e^{i\alpha m\phi} \left[\mathbf{e}_{\theta}i\alpha m\frac{g_{m}}{s^{m}} - \mathbf{e}_{\phi} \left(m\cos\theta \frac{g_{m}}{s^{m}} - ikRz_{0}\sin^{2}\theta \frac{g_{m+1}}{s^{m+1}} \right) \right]$$

$$\mathbf{U}_{N}^{(s)} = \frac{U_{0}}{k} (R\sin\theta)^{m-1} e^{i\alpha m\phi} \left(\mathbf{e}_{R}U_{R} + \mathbf{e}_{\theta}U_{\theta} + \mathbf{e}_{\phi}U_{\phi} \right),$$
(16)

čia

$$U_{R} = \left[\frac{g_{m}}{s^{m}}(m^{2}+m) + 2ikRz_{0}\cos\theta(m+1)\frac{g_{m+1}}{s^{m+1}} + k^{2}z_{0}^{2}R^{2}\sin^{2}\theta\frac{g_{m+2}}{s^{m+2}}\right]\sin\theta$$

$$U_{\theta} = \frac{g_{m}}{s^{m}}(m^{2}+m)\cos\theta - k\frac{g_{m+1}}{s^{m+1}}[mR\cos\theta(R-iz_{0}\cos\theta) + iRz_{0}(m+2)\sin^{2}\theta] + ik^{2}R^{2}z_{0}(R-iz_{0}\cos\theta)\sin^{2}\theta \times \frac{g_{m+2}}{s^{m+2}}$$

$$U_{\phi} = im\alpha\left[(m+1)\frac{g_{m}}{s^{m}} - kR(R-iz_{0}\cos\theta)\frac{g_{m+1}}{s^{m+1}}\right]$$
(17)



10 pav. Sumodeliuotas azimutinės
(kairėje) ir radialinės
(dešinėje) poliarizacijos šaltinio pluoštai sferinės simetrijos atveju, kai topologinis krūvi
sm=3.[1]

Cilindrinių koordinačių atveju:

$$u(\mathbf{r}) = U_0 \frac{g_m}{s^m} \rho^m e^{i\alpha m\phi} \tag{18}$$

Sprendinys yra:

$$\mathbf{U}_{M}^{(c)} = U_{0}\rho^{m-1}e^{i\alpha m\phi} \left[\mathbf{e}_{\rho}im\alpha \frac{g_{m}}{s^{m}} - \mathbf{e}_{\phi} \left(m\frac{g_{m}}{s^{m}} - k\rho^{2}\frac{g_{m+1}}{s^{m+1}} \right) \right]
\mathbf{U}_{N}^{(c)} = -U_{0}\rho^{m-1}e^{i\alpha m\phi} \left\{ \mathbf{e}_{\rho} \left(z - iz_{0} \right) \left(m\frac{g_{m+1}}{s^{m+1}} - k\rho^{2}\frac{g_{m+2}}{s^{m+2}} \right)
+ \mathbf{e}_{\phi}im\alpha \left(z - iz_{0} \right) \frac{g_{m+1}}{s^{m+1}} - \mathbf{e}_{z}\rho \left[2(m+1)\frac{g_{m+1}}{s^{m+1}} - k\rho^{2}\frac{g_{m+2}}{s^{m+2}} \right] \right\}$$
(19)

2.5 Lumerical galimybės

Lumerical - programinė įranga skirta fotonikos simuliacijoms, kuri leidžia įvertinti šviesos sąveiką su struktūromis ir medžiagomis. Naudodami šią programinę įrangą galime modeliuoti, išbandyti ir optimizuoti dizainus, taip sumažinant poreikį ir išlaidas patiriamas kuriant prototipus ir juos matuojant bei analizuojant. Pagrindiniai metodai kuriuos naudoja Lumerical- tai FDTD(Laikinis pluošto sklidimo metodas), FEM(baigtinių elementų metodas), DGTD(Galerkino baigtinių skirtumų metodas), ir kiti, kurie skirti tirti elektromagnetinių bangų sąveikai su medžiagomis bei struktūromis. Lumerical taip pat turi HEAT ir CHARGE metodus, kurie skirti aprašyti atitinkamai šilumos ir krūvininkų pasiskirstymui medžiagoje naudodami Puasono ir dreifo-difuzijos lygčių sistemas. Šiame darbe naudotas Lumerical FDTD metodas (11 pav.). Šiuo metodu galime modeliuoti bet kokios struktūros sistemas. Taip pat galime stebėti elektromagnetinės bangos sklidimo pasiskirstymą kiekvienu laiko momentu, tokiu būdu sukuriant vaizdo medžiagą, kurioje matome kaip bėgant laikui elektrinis arba magnetinis laukas kinta erdvėje. Toks atvaizdavimas padeda lengviau įsivaizduoti, vizualizuoti ir analizuoti elektromagnetinių bangų sąveiką su sudėtingomis struktūromis.



11 pav. Lumerical FDTD programos lango pavyzdys su paaiškinimais.

2.6 Lumerical laikinis pluošto sklidimo (FDTD) metodas

FDTD yra diskretinė Maksvelo lygčių skaičiavimo metodika. Lygtys yra sprendžiamos 3D erdvėje ir laike. Skaičiavimams erdvė yra suskirstoma į tinklelį arba dar vadinamas Yee ląsteles (12 pav). Elektriniai ir magnetiniai laukai yra skaičiuojami kaip laiko funkcijos visoje apibrėžtoje erdvėje. Aprašius elektromagnetinės spinduliuotės šaltinį, šis metodas skaičiuoja to lauko sklidimą erdvėje ir laike. Tokiu būdu galime stebėti aprašytos medžiagos ir jos struktūros sąveiką su krintančiu pluoštu. Galime matuoti elektrinio ar magnetinio lauko pasiskirstymą pasirinktoje plokštumoje, Pointingo vektoriaus pasiskirstymą erdvėje, paskaičiuoti pralaidumą ir panašius parametrus. Rezultatai atvaizduojami Lumerical programoje arba eksportuojami į Matlab programinę įrangą siekiant praplėsti atvaizdavimo galimybes.



12 pav. FDTD skaičiavimo metodo iliustracija. Erdvė padalinamas į tinklelį, ir skirtinguose taškuose skaičiuojamos elektrinio ir magnetinio laukų komponentės. [31]

Elektrinio lauko komponentės aprašomos kaip:

$$E_x^{n+1}(i,j,k) = E_x^n(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)} \left[\frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i,j-1,k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k-1)}{\Delta z} \right]$$
(20)

$$E_{y}^{n+1}(i,j,k) = E_{y}^{n}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)} \left[\frac{H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k-1)}{\Delta z} - \frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i-1,j,k)}{\Delta x} \right]$$
(21)

$$E_{z}^{n+1}(i,j,k) = E_{z}^{n}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)} \left[\frac{H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i-1,j,k)}{\Delta x} - \frac{H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j-1,k)}{\Delta y} \right]$$
(22)

Magnetinio lauko komponentes analogiškai aprašome kaip:

$$H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) = H_{x}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\mu(i,j,k)} \begin{bmatrix} \frac{E_{y}^{n}(i,j,k+1) - E_{y}^{n}(i,j,k)}{\Delta z} - \frac{E_{z}^{n}(i,j+1,k) - E_{z}^{n}(i,j,k)}{\Delta y} \end{bmatrix}$$

$$H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) = H_{y}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\mu(i,j,k)} \begin{bmatrix} \frac{E_{z}^{n}(i+1,j,k) - E_{z}^{n}(i,j,k)}{\Delta x} - \frac{E_{x}^{n}(i,j,k+1) - E_{x}^{n}(i,j,k)}{\Delta z} \end{bmatrix}$$

$$H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) = H_{z}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\mu(i,j,k)} \begin{bmatrix} \frac{E_{x}^{n}(i,j+1,k) - E_{x}^{n}(i,j,k)}{\Delta y} - \frac{E_{y}^{n}(i+1,j,k) - E_{y}^{n}(i,j,k)}{\Delta x} \end{bmatrix}$$

$$(23)$$

$$(24)$$

$$(24)$$

$$(24)$$

$$(25)$$

3 Skaitmeninis modeliavimas

Modeliavimo darbams atlikti naudojame Lumerical programinę įrangą su laikinio pluošto sklidimo metodu (angl. FDTD Finite–Difference Time–Domain). Parametrų erdvės skenavimui dėl greitesnio skaičiavimo naudojame T-matricų metodą. Lumerical programa pasinkta dėl modeliavimo aprašymo paprastumo, atvaizdavimo galimybių bei rezultatų tikslumo. Lumerical programa patogu aprašyti paprastus pluoštus, tokius kaip tiesinė ar apskritiminė poliarizacija. Siekdami aprašyti sudėtingesnius pluoštus, tokius kaip azimutinės ar radialinės poliarizacijos [7], naudojame Matlab programinę įrangą. Pasinaudojus Matlab programinės įrangos galimybėmis, sukuriame norimus pluoštus ir importuojame į Lumerical.

3.1 FDTD metodo ir sferinių sub-banginių dalelių pranašumai

Naudojant FDTD metodą, erdvė yra suskirstoma į tinkliuką. Tokia tinkliuko struktūra leidžia itin tiksliai ir greitai modeliuoti stačiakampes struktūras. Erdvę suskirsčius į smulkesnį tinkliuką, galime modeliuoti ir sferines ar kitas sudėtingesnes struktūras, tačiau prarandame laiko simuliacijos skaičiavimams. Sukurta simuliacija su vienodų matmenų L formos ir tų pačių matmenų trijų sferinių dalelių Mie sklaidos aproksimacijos imitacija (13 pav.), siekiant parodyti FDTD metodo pranašumą prieš metodus aproksimuojančius struktūras kaip Mie sklaidą nuo sferinių dalelių.



13 pav. Kairėje stačiakampė L formos struktūra, o dešinėje stačiakampės struktūros Mie sklaidos aproksimacijos imitacijos struktūra. Matmenys atitinkamai vienodi, tačiau antru atveju turime struktūrą sudarytą iš sferų.

Palyginus simuliacijų rezultatus šioms struktūroms, gauname pralaidumus 86 % sferinių dalelių atveju ir 92 % stačiakampės struktūros atveju. Matome, kad didesnė dalis kritusio pluošto su struktūra sąveikavo sferinių dalelių atveju. Šiuo bandymu matome, kad naudodami sferines daleles gauname efektyvesnę sąveiką su krintančia banga, nei dažnai straipsniuose naudojama stačiakampe L formos struktūra [32].

3.2 Meta-atomų savybės

3.2.1 Chirališkumas

Chirališkomis trijų dalelių struktūromis siekiame gauti kuo didesnį skirtumą tarp dešininės apskritiminės poliarizacijos ir kairinės apskritiminės poliarizacijos sąveikų su medžiaga (sub-banginių dalelių struktūra). Sąveikos skirtumui pamatuoti yra įvertinamas pralaidumas, atspindys ir sugertis. Sumodeliavę sistemą ir pamatavę sistemos pralaidumą esant skirtingoms klasterio struktūroms, prie skirtingų krintančių pluoštų, galime įvertinti sistemos sąveikos su sub-banginių dalelių struktūra efektyvumą. Remiantis kitų tyrimų straipsniais [33], nuspręsta keisti dalelių spindulius, dalelių spindulių santykius, lūžio rodiklius, kampus tarp dalelių (14 pav).



14 pav. Sub–banginių dalelių iliustracija. Keičiame kampą tarp dalelių θ , dalelių spindulius, spindulių santykių optimalias vertes ($R_1 : R_2 : R_3$), ir dielektrinę skvarbą. Krintančio pluošto dydis įprastai yra didesnis nei sub-banginių dalelių struktūra, arba pasirenkama plokščia banga. Pasirinkus plokščią bangą, klasterio padėties erdvėje keisti nebėra prasmės, taip sumažinant simuliacijai reikalingą laiką.

Krintančio pluošto dydis įprastai yra didesnis nei sub-banginių dalelių klasterio matmenys, todėl optimizuodami skaičiavimus, naudojame plokščią bangą. Tokiu atveju, klasterio padėties erdvėje keisti nebėra prasmės, taip sumažinant simuliacijai reikalingą laiką. Straipsniuose efektyviausi sub-banginių dalelių klasteriai gaunami trimatėmis struktūromis [33]. Siekiant trimates struktūras pakeisti paprastesnėmis vienoje plokštumoje išdėstytomis sub-banginių dalelių struktūromis su palygintinu efektyvumu, buvo keičiami individualių sub-banginių dalelių spinduliai. Taip pat būtų galima keisti individualių sub-banginių dalelių dielektrinę skvarbą. Modeliavimo metu buvo atsižvelgiama į tai, kad nusodinti daleles ant padėklo vienoje plokštumoje yra gerokai lengvesnis techninis uždavinys, kurį būtų galima atkartoti eksperimentiškai tolimesnių darbų metu.



15 pav. Pralaidumo skirtumas tarp dešininės ir kairinės apskritiminės poliarizacijos keičiant dielektrinę skvarbą ir kampą tarp dalelių, esant fiksuotiems sub-banginių dalelių spindulių santykiams (1,15:1:0,85), kai centrinis spindulys R = 70nm. Maksimumas yra ties $\varepsilon = 15,95+0,1i$, kampas $\theta = 2,3rad$, gaunamas maksimalus pralaidumo skirtumas yra 4,2 %.

Pasirinkę optimalias vertes sub-banginių dalelių spindulių santykių ir centrinės dalelės spindulio, gauname pralaidumo skirtumų maksimumą ties $\varepsilon = 15,95 + 0,1i$, kampas $\theta = 2,3rad$, parametrų erdvės skenavimo metu gaunamas maksimalus pralaidumo skirtumas yra 4,2 %. Parametrų erdvė buvo pasirinkta θ nuo $\pi/3$ iki π , kampo tarp sub-banginių dalelių ir dielektrinės skvarbos ε nuo -15 iki 25. Toliau atlikta simuliacija su gautomis optimaliomis vertėmis, siekiant patikslinti rezultatą. Krintantis pluoštas šiuo atveju yra plokščia apskritiminės poliarizacijos banga.



16 pav. Elektrinio lauko intensyvumo pasiskirstymas chiralinių struktūrų pjūvyje: (kairėje) Kairinės apskritiminės poliarizacijos (LCP) atveju ir (dešinėje) dešininės apskritiminės poliarizacijos (RCP) atveju. Sub-banginių dalelių spindulių santykiai (1, 15:1:0, 85), centrinės dalelės spindulys R = 70nm, $\varepsilon = 15, 95 + 0, 1i$, kampas $\theta = 2, 3rad$, gaunamas maksimalus pralaidumo skirtumas yra 6 %. Krintančio pluošto bangos ilgis yra $\lambda = 500nm$.

Atlikus simuliaciją su gautomis optimaliomis vertėmis, pralaidumų skirtumas tarp dešininės ir kairinės apskritiminių poliarizacijų yra 6 %, kai sub-banginių dalelių spindulių santykiai yra (1, 15: 1: 0, 85), centrinės dalelės spindulys R = 70nm, $\varepsilon = 15, 95 + 0, 1i$, kampas $\theta = 2, 3rad$, krintant 500 nm bangos ilgio pluoštui. Papildomi tyrimai buvo atliekami šių chiralinių dalelių sąveikos su vektoriniais pluoštais. Rezultatai yra pridedami priede Nr. 1.

3.2.2 Dvejopalūžiškumas

Dvejopam lūžiui naudojant ortogonalias tiesines poliarizacijas, parametrų erdvės vaizdą matome 17 paveiksliuke. Keisdami dalelių spindulį ir santykinę dielektrinę skvarbą, randame optimalias vertes.



17 pav. Pralaidumo skirtumas tarp ortogonalių tiesinių poliarizacijų keičiant dielektrinę skvarbą ir dalelių spindulius. Raudoni taškai nurodo rastas optimalias vertes: pirmasis maksimumas yra 25,7 %, kai $\varepsilon = -2.14 + 0.1i$ ir R = 91nm, o antrasis maksimumas yra 28,9 %, kai $\varepsilon = 19.57 + 0.1i$ ir R = 75nm.

Atlikus skaičiavimus gauname dvi optimalias vertes. Pirmasis pralaidumų skirtumo maksimumas yra 25,7 %, kai sub-banginė dalelė yra metalinė (18 pav.), o antrasis pralaidumų skirtumo maksimumas yra 28,9 %, kai sub-banginė dalelė yra dielektrinė (19 pav.). Kai subbanginės dalelės yra metalinės, jų viduje elektrinio lauko nėra, veikia paviršiniai plazmoniniai dipoliai. Kai dalelės yra dielektrinės, elektrinis laukas matomas ir dalelių viduje, kur susidaro trys magnetiniai dipoliai.



18 pav. Elektrinio lauko intensyvumo pasiskirstymas dvejopo lūžio struktūrų pjūvyje esant tiesinėms poliarizacijoms, kurių kryptys nurodytos raudona rodykle. Metalinės sub-banginės dalelės, kurių $\varepsilon = -2.14 + 0.1i$ ir R = 91nm.



19 pav. Elektrinio lauko intensyvumo pasiskirstymas dvejopo lūžio struktūrų pjūvyje esant tiesinėms poliarizacijoms, kurių kryptys nurodytos raudona rodykle. Dielektrinės sub-banginės dalelės, kurių $\varepsilon = 19.57 + 0.1i$ ir R = 75nm.

Tiek naudojant metalinius tiek dielektrinius meta-atomus, pralaidumų skirtumas yra labai artimas priešingo ženklo atspindžių skirtumui. T.y. sumažėjus pralaidumui, padidėja atspindys. Sugertis išlieka apie 13-14 procentų dielektrinės medžiagos atveju ir 26-28 procentai metalinės medžiagos atveju. Tai rodo, jog elementai ne absorbuoja skirtingos poliarizacijos krintančią šviesą, o ją atspindi. Pasinaudodami dvejopalūžiškumu, galime sumodeliuoti geometrinės fazės elementus. Su šia struktūra sumodeliuoto geometrinės fazės elemento pavyzdys yra pateiktas sekančiame skyriuje. Meta-atomų struktūros forma gali išlikti nepakitusi visuose bangos ilgių diapazonuose, siekiant gauti nepakitusį atsaką krintančiai bangai, išlaikant bangos ilgio ir struktūros matmenų santykį ir parinkus tinkamą medžiagą. Šiame darbe taip pat nagrinėjame ir THz sričiai skirtus meta-atomus, tačiau tuo pačiu principu elementai gali būti pritaikyti visiems bangos ilgiams. Šio darbo metu modeliavimui pasirinkome 1 Thz dažnį (300 μ m). Atlikus simuliaciją, kaip ir tikėjomės, gauname tokiu pačius pralaidumus ir atspindžius, pasirinkę meta-atomo spindulį 45 μ m, kai bangos ilgis yra 300 μ m. Tad mūsų siekis pritaikyti meta-atomus fotoninių elementų kūrimui pasitvirtino.

3.3 Geometrinės fazės elemento modeliavimas naudojant Jones matricas

Panaudojus Jones matricas paskaičiuotas dvejopai laužiančioms dielektrinėms struktūroms (19 pav.), atliktas S-waveplate struktūros modeliavimas. Gautame 20 paveiksliuke matome, kad iš krintančios tiesinės poliarizacijos gavome radialinę ir azimutinę poliarizaciją.



20 pav. Geometrinės fazės elementas sukurtas naudojantis Jones matricomis. Šaltinis yra tiesiškai poliarizuotas plokščias pluoštas X ašimi kairėje, ir Y ašimi dešinėje. Sub-banginių dalelių išdėstymo struktūra yra periodinė ašinės simetrijos, $\phi/2$ kampu. Gaunama pluošto forma yra radialinės poliarizacijos(kairėje) ir azimutinės poliarizacijos(dešinėje).

Dėl sukurto geometrinės fazės elemento sugerties, gaunamo pluošto intensyvumas yra nesimetriškas. Vienoje pusėje pralaidumas geras, kitoje pluošto pusėje didelė dalis pluošto yra sugeriama. Ši struktūra yra tik pavyzdinė, naudodami skirtingus sub-banginių dalelių klasterių išdėstymus, galime gauti įvairiausius geometrinės fazės elementus.

3.4 Geometrinės fazės elementai

Pasirinkę efektyviausias dvejopai laužiančias daleles, kuriame geometrinės fazės elementą. Pasirenkame *S-waveplate* [34] tipo geometrinės fazės elemento struktūrą (21 pav.). Šie elementai tiesinę poliarizaciją keičia į azimutinę arba radialinę, priklausomai nuo krintančios tiesinės poliarizacijos krypties. Tokių elementų veikimas pagrįstas skirtingu faziniu poslinkiu (vėlinimu) tarp ortogonalių poliarizacijų. Įprastai yra naudojamos dvejopai laužiančios nanogardelės, sudarytos iš lazeriu padarytų pažaidų stikle. Šiame darbe siekiame sukurti S-waveplate elementą, sudarytą iš meta-atomų nusodintų ant padėklo (plokštumos).



21 pav. Geometrinės fazės elementas iš dvejopai laužiančių meta-atomų. Struktūra yra Swaveplate elemento tipo. Aprašoma kaip $\alpha = \phi/2$, kur α yra nanogardelės pasukimo kampas, o ϕ yra azimuto kampas elemente.

Struktūra sudaryta iš dielektrinių dvejopai laužiančių dalelių aptartų 3.2.2 skyrelyje. Struktūra pasirinkome S-waveplate [34] su 500 nm atstumu tarp dalelių, kai $\varepsilon = 19.57 + 0.1i$ ir vienos dalelės spindulys R = 75nm. Pirmosios simuliacijos krintantis pluoštas yra 500 nm bangos ilgio tiesiškai poliarizuota (lygiagrečiai x ašiai) plokščia banga. Rezultatas atvaizduojamas 22 paveiksliuke.



22 pav. Elektrinio lauko skirstinys praėjus geometrinės fazės elementą sudarytą iš dvejopai laužiančių dalelių. Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektoriaus kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo (21 pav.).

Gautame elektrinio lauko skirstinyje matome, kad didesnė energijos dalis praleidžiama toje elemento dalyje, kur krintančio pluošto poliarizacija yra lygiagreti meta-atomų orientacijai, o toje dalyje, kur meta-atomų orientacija yra statmena krintančio pluošto poliarizacijai, praėjusio elektrinio lauko intensyvumas mažesnis. Poliarizacijos erdvinė sandara šiuo atveju panaši į piltuvėlį. Darome prielaidą, kad S-waveplate elementui nepakanka vieno sluoksnio meta-atomų sukuriamo vėlinimo, kadangi įprastame S-waveplate elemente yra svarbu ne tik nanogardelės struktūra, bet ir vėlinimas. Todėl sekančiame skyrelyje tęsime tyrimus naudojant 2 ir daugiau sluoksnių. Tiems patiems šaltinio ir elemento parametrams atvaizduojame tik su dalelėmis sąveikavusio elektrinio lauko skirstinį (23 pav.).



23 pav. Sąveikavusio su dalelėmis elektrinio lauko skirstinys praėjus geometrinės fazės elementą sudarytą iš dvejopai laužiančių dalelių. Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektoriaus kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo (21 pav.).

Kaip matome, toje dalyje, kurioje yra stebimas didesnis elektrinio lauko intensyvumas viso praėjusio lauko atveju (22 pav.), yra matomas mažesnis intensyvumas tik sąveikavusio elektrinio lauko atveju (23 pav.). Tokiu atveju lauko intensyvumo sumažėjimas matomas dėl sąveikos su meta-atomais. Sekančiame etape šaltinį keičiame į dešininės ir kairinės apskritiminės poliarizacijos pluoštus. Tokiu atveju krintantį apskritiminės poliarizacijos pluoštą geometrinės fazės elementas paverčia į sūkurio formos pluoštą [28].



24 pav. Elektrinio lauko skirstinys praėjus geometrinės fazės elementą sudarytą iš dvejopai laužiančių dalelių. Kairėje- krintant kairinei apskritiminei poliarizacijai. Dešinėje- krintant dešininei apskritiminei poliarizacijai. Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektoriaus kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo (21 pav.).

Gautuose kairinės ir dešininės poliarizacijos šaltinio sąveikos su S-waveplate elementu rezultatuose (24 pav.) matome susidariusius intensyvumo sūkurius. Sūkurių kryptis priklauso nuo krintančios apskritiminės poliarizacijos krypties. Poliarizacija silpnai deformuojama sūkurio kryptimi.

3.4.1 Daugiasluoksniai geometrinės fazės elementai

Siekdami gauti geresnės kokybės azimutinės ir radialinės poliarizacijos pluoštą (9 pav.), didinsime geometrinės fazės elemento vėlinimą. Norėdami didinti vėlinimą, naudojame kelių sluoksnių geometrinės fazės elementą. Pirmiausia naudojame 2 sluoksnius ir keičiame atstumus d tarp sluoksnių (25 pav.), o vėliau atliksime modeliavimus su 2 ir daugiau sluoksnių.



25 pav. Elektrinio lauko skirstiniai praėjus geometrinės fazės elementą sudarytą iš dviejų sluoksnių dvejopai laužiančių dalelių, keičiant atstumą tarp sluoksnių nuo $\lambda/3$ iki λ . Juodos rodyklės nurodo krintančio pluošto poliarizaciją. Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektoriaus kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo (21 pav.).

Kaip matome, naudojant 2 sluoksnius dvejopai laužiančios S-waveplate struktūros, galime gauti geresnės kokybės (9 pav.) azimutinės ir radialinės poliarizacijos pluoštus, pasirinkdami tinkamą atstumą d tarp sluoksnių. Naudodami X poliarizaciją, gauname radialinę poliarizaciją, o naudodami Y poliarizaciją, gauname azimutinę poliarizaciją. Siekiant patikrinti, ar sluoksnių kiekis daro įtaką gaunamo pluošto kokybei, ar pakanka parinkti tinkamą atstumą tarp sluoksnių d, atliekame bandymą, kuriame naudojame 1, 2, 3 ir 4 sluoksnius (26 pav.). Tarpai tarp sluoksnių išlaikomi vienodi - lygūs bangos ilgiui.



26 pav. Elektrinio lauko skirstiniai praėjus geometrinės fazės elementą sudarytą iš skirtingų kiekių sluoksnių dvejopai laužiančių dalelių, išlaikant atstumą tarp sluoksnių λ . Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektoriaus kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo (21 pav.).

Šio bandymo metu pastebėta, kad didinant sluoksnių skaičių, azimutinės ir radialinės poliarizacijos kokybė gerėja, tačiau bendras sistemos pralaidumas krinta. Vieno sluoksnio atveju pralaidumas 39 %, dviejų sluoksnių - 26 %, trijų sluoksnių - 18 % ir keturių sluoksnių - 12 %. Atlikus S-waveplate geometrinės fazės elemento tyrimą su nemonochromatiniu pluoštu, taip pat galime gauti azimutines ar radialines poliarizacijas, tačiau reikia naudoti daugiau sluoksnių, ypač jei krintančio pluošto bangos ilgio intervalas labiau nukrypsta nuo bangos ilgio kuriam buvo kuriamas elementas (Priedas Nr. 2.).

3.4.2 Geometrinės fazės elementai sudaryti iš nehomogeninių chiralinių metaatomų

Šiame skyrelyje kuriame S-waveplate struktūros (27 pav.) elementą iš chiralinėmis savybėmis pasižyminčių nehomogeninių meta-atomų (nagrinėti 3.2.1 skyrelyje) ir tikrinsime, koks pluoštas susidaro tokiu atveju.



27 pav. Geometrinės fazės elementas iš chirališkų nehomogeninių meta-atomų. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo.

Krintantis pluoštas yra kairinės ir dešininės apskritiminės poliarizacijos. Krinta plokščias 500 nm bangos ilgio pluoštas.



28 pav. Elektrinio lauko skirstinys praėjus geometrinės fazės elementą sudarytą iš chirališkų dalelių. Kairėje- krintant kairinei apskritiminei poliarizacijai. Dešinėje- krintant dešininei apskritiminei poliarizacijai. Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektoriaus kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo (27 pav.).

Gautuose rezultatuose matome elektrinio lauko pasiskirstymą koncentriniais žiedais. Ši Swaveplate struktūra yra tik pavyzdinė. Naudodami skirtingus sub-banginių dalelių klasterių išdėstymus, galime gauti įvairiausius geometrinės fazės elementus.

Išvados

- 1. Dvejopai laužiančioms sub-banginėms dalelėms didžiausi pralaidumų skirtumai 500 nm bangos ilgio krintančiam pluoštui tarp ortogonalių poliarizacijų yra:
 - Metalinių meta-atomų atveju, kai $\varepsilon=-2.14+0.1i$ ir R=91nm, pralaidumų skirtumas yra 25,7 %;
 - Dielektrinių meta-atomų atveju, kai $\varepsilon = 19.57 + 0.1i$ ir R = 75nm, pralaidumų skirtumas yra 28,9 %. Ši struktūra pasirinkta tolimesniems geometrinės fazės elemento modeliavimams.
- 2. Tiriant chiralines savybes turinčius meta-atomus, geriausi efektyvumai gaunami, kai subbanginių dalelių spindulių santykiai yra (1,15 : 1 : 0,85), centrinės dalelės spindulys R =70nm, $\varepsilon = 15,95 + 0,1i$, o kampas $\theta = 2,3rad$. Tokiu atveju gaunamas didžiausias pralaidumo skirtumas tarp kairinės ir dešininės apskritiminių poliarizacijų yra 6 %.
- Ištirtas radialinės poliarizacijos keitiklis (S-waveplate). Naudojant bent 2 geometrinės fazės elemento sluoksnius, sudarytus iš dvejopai laužiančių sub-banginių dalelių, galime suformuoti azimutinės ir radialinės poliarizacijos pluoštus.
- 4. Geriausios kokybės azimutinės ir radialinės poliarizacijos pluoštai gaunami, kai atstumas tarp geometrinės fazės elemento sluoksnių yra lygus bangos ilgiui.
- 5. Didinant sluoksnių kiekį, praėjusio pluošto kokybė gerėja, tačiau bendras pralaidumas mažėja.

Literatūros sąrašas

- Q. Zhan, Cylindrical vector beams: from mathematical concepts to applications, Advances in Optics and Photonics 1(1), 1–57 (2009).
- [2] L. Novotny, *Principles of Nano-Optics* (Cambridge University Press, 2012).
- [3] R. Dorn, S. Quabis, G. Leuchs, Sharper focus for a radially polarized light beam, Physical review letters 91(23), 233901 (2003).
- [4] B. Y. S. Z. W. L. M. Peng, F.; Yao, Trapping of low-refractive-index particles with azimuthally polarised beam, J. Opt. Soc. Am. B (26), 2242–2247 (2009).
- [5] Y. Zhang, J. Bai, Improving the recording ability of a near-field optical storage system by higher-order radially polarized beams, Optics express 17(5), 3698–3706 (2009).
- [6] S. Orlov, P. Banzer, Vectorial complex-source vortex beams, Physical Review A 90(2), 023832 (2014).
- [7] C.-Y. Han, Z.-H. Wei, Y. Hsu, K.-H. Chen, C.-H. Yeh, W.-X. Wu, J.-H. Chen, Generating radially and azimuthally polarized beams by using a pair of lateral displacement beamsplitters, Applied Sciences 6(9), 241 (2016).
- [8] N. Meinzer, W. L. Barnes, I. R. Hooper, Plasmonic meta-atoms and metasurfaces, Nature Photonics 8(12), 889 (2014).
- [9] L. Tsang, J. A. Kong, K.-H. Ding, Scattering of electromagnetic waves: theories and applications, volume 27 (John Wiley & Sons, 2004).
- [10] N. Yu, P. Genevet, F. Aieta, M. A. Kats, R. Blanchard, G. Aoust, J.-P. Tetienne, Z. Gaburro, F. Capasso, Flat optics: controlling wavefronts with optical antenna metasurfaces, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics 19(3), 4700423–4700423 (2013).
- [11] D. R. Smith, J. B. Pendry, M. C. Wiltshire, Metamaterials and negative refractive index, Science 305(5685), 788–792 (2004).
- [12] V. G. Veselago, Reviews of topical problems: the electrodynamics of substances with simultaneously negative values of epsilon and mu, Soviet Physics Uspekhi 10, R04 (1968).
- [13] S. Mühlig, C. Menzel, C. Rockstuhl, F. Lederer, Multipole analysis of meta-atoms, Metamaterials 5(2-3), 64–73 (2011).
- [14] D. Neshev, I. Aharonovich, Optical metasurfaces: new generation building blocks for multifunctional optics, Light: Science & Applications 7(1), 1–5 (2018).

- [15] K. Chen, Y. Feng, F. Monticone, J. Zhao, B. Zhu, T. Jiang, L. Zhang, Y. Kim, X. Ding, S. Zhang, et al., A reconfigurable active huygens' metalens, Advanced materials 29(17), 1606422 (2017).
- [16] D. I. für Normung, Optical radiation physics and illuminating engineering (2015).
- [17] D. M. Mittleman, Perspective: Terahertz science and technology, Journal of Applied Physics 122(23), 230901 (2017).
- [18] M. Schulz, F. Balzer, D. Scheunemann, O. Arteaga, A. Lützen, S. C. Meskers, M. Schiek, Chiral excitonic organic photodiodes for direct detection of circular polarized light, Advanced Functional Materials 29(16), 1900684 (2019).
- [19] J. A. Stratton, *Electromagnetic theory*, volume 33 (John Wiley & Sons, 2007).
- [20] C. F. Bohren, D. R. Huffman, Absorption and scattering of light by small particles (John Wiley & Sons, 2008).
- [21] H. DeVoe, Optical properties of molecular aggregates. i. classical model of electronic absorption and refraction, The Journal of chemical physics 41(2), 393–400 (1964).
- [22] Z. Laczik, Discrete-dipole-approximation-based light-scattering calculations for particles with a real refractive index smaller than unity, Applied optics **35**(19), 3736–3745 (1996).
- [23] F. L. Pedrotti, L. M. Pedrotti, L. S. Pedrotti, *Introduction to optics* (Cambridge University Press, 2017).
- [24] S. Pancharatnam, Generalized theory of interference and its applications 44(6), 398–417 (1956).
- [25] M. V. Berry, Quantal phase factors accompanying adiabatic changes, Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences 392(1802), 45–57 (1984).
- [26] R. Bhandari, Polarization of light and topological phases, Physics Reports 281(1), 1–64 (1997).
- [27] F. S. Roux, Geometric phase lens, JOSA A **23**(2), 476–482 (2006).
- [28] A. Matijošius, P. Stanislovaitis, T. Gertus, V. Smilgevičius, Formation of optical vortices with topological charge |l|= 1 and |l|= 1/2 by use of the s-waveplate, Optics Communications 324, 1–9 (2014).
- [29] R. Dorn, S. Quabis, G. Leuchs, Sharper focus for a radially polarized light beam, Physical review letters 91(23), 233901 (2003).

- [30] G. Milione, A. Dudley, T. A. Nguyen, O. Chakraborty, E. Karimi, A. Forbes, R. R. Alfano, Measuring the self-healing of the spatially inhomogeneous states of polarization of vector bessel beams, Journal of Optics 17(3), 035617 (2015).
- [31] D. M. Sullivan, Electromagnetic simulation using the FDTD method (John Wiley & Sons, 2013).
- [32] S. Yue, S. Liu, Y. Hou, Z. Zhang, Tailorable chiral optical response through coupling among plasmonic meta-atoms with distinct shapes, Optics letters **43**(5), 1111–1114 (2018).
- [33] Z. Fan, A. O. Govorov, Plasmonic circular dichroism of chiral metal nanoparticle assemblies, Nano letters 10(7), 2580–2587 (2010).
- [34] B. Alonso, I. Lopez-Quintas, W. Holgado, P. G. Kazansky, C. Hernández-García, Í. J. Sola, Complete spatiotemporal and polarization characterization of ultrafast vector beams, arXiv preprint arXiv:1912.11014 (2019).

Klemensas Laurinavičius

SUB-BANGINIO DYDŽIO DALELIŲ META-ATOMŲ TYRIMAS FOTONINIŲ ELEMENTŲ KŪRIMUI

Santrauka

Siame darbe tiriame sub-banginius meta-atomus, skirtus geometrinės fazės elementų kūrimui, naudodami Lumerical FDTD programinę įrangą. Geometrinės fazės elementai veikia dėl fazės poslinkio atsirandančio ortogonalioms poliarizacijoms. Darbo metu randami optimalūs meta-atomų parametrai tiek chiralinėms savybėms, tiek dvejopalūžiškumui. Išlaikydami bangos ilgio ir struktūros matmenų santykį bei parinkę tinkamas medžiagas, tokius elementus galime pritaikyti plačiam bangos ilgių ruožui. Apsirašę pavienių meta-atomų sąveiką su krintančiu pluoštu per Jones matricas, sumodeliuojame S-waveplate elementą. Vėliau naudodami Lumerical FDTD programinę įrangą atlikti S-waveplate modeliavimai tiek su 500 nm tiek su 300 μ m. Naudojant dvejopalūžiškumo savybes turinčius meta-atomus, modeliuojame S-waveplate radialinės poliarizacijos keitiklį. Vieno sluoksnio radialinei ar azimutinei poliarizacijai gauti nepakanka, todėl padidiname fazinį vėlinima naudodami kelis sluoksnius. Keičiant atstumus tarp sluoksnių buvo rastas optimalus atstumas, kuris yra lygus bangos ilgiui. Didinant sluoksnių kiekį gauname vis geresnės kokybės pluoštus, tačiau bendras pralaidumas sparčiai krinta. Naudodami chiralines savybes turinčius meta-atomus taip pat modeliuojame S-waveplate elemento struktūrą ir rezultatuose stebime spiralės formos pluoštą. Įvertinę nemonochromatinių pluoštų sąveiką su elementais pastebime, kad, didinant bangos ilgių intervalą, pluošto kokybė sparčiai krinta, tačiau, siauram bangos ilgių ruožui, elementas gali suformuoti azimutinę ar radialinę poliarizacijas.

Klemensas Laurinavičius

INVESTIGATION OF SUB-WAVELENGTH META-ATOMS FOR DEVELOPMENT OF PHOTONIC ELEMENTS

Summary

During the past years there has been a rapid development of various complex nanostructures which led to an emergence of novel type optical elements. These compact and flat elements can control and shape wavefront, can be used in place of conventional lenses or as polarisation sensitive devices. The purpose of this work is to design a cluster of nanoparticles which could be used as a single meta-atom for a more complex metasurface. Here we engineer collective vector response to the polarisation of the source beam by using the concept of geometrical phase. In this way we can design such elements as S-waveplates, top hat converters, flat axicons etc. For numerical simulations we use Lumerical's Finite-Difference Time-Domain (FDTD) and T-Matrix methods. We use the T-matrix method which is faster to sweep different cluster parameters, but this method can accumulate rounding errors to a significant level. Therefore we use the Lumerical FDTD software for confirmation and visualisation of the results. The parameter space of three nanoparticles consists of dielectric constant, particle radius and inner geometry of the cluster. We find the optimal values and use such meta-atom for design of S-waveplate element. We have observed that one layer of meta-atoms is not sufficient, therefore multiple layers has been used. By varying the distance between 2 layers we have found that the most efficient distance between layers is equal to the wavelength of the incident beam. After simulating multiple layers we have observed that more layers produce better quality beam, but the overall transmission of the system decreases dramatically.

Priedas Nr. 1. Rezultatai su vektoriniais pluoštais

Per Matlab aprašytus vektorinius pluoštus importavę į Lumerical, galime simuliuoti tokių pluoštų sąveiką su sub-banginėmis dalelėmis. Simuliacijai naudojame chiralinę struktūrą, kurios spindulys R=70 nm, ε =15,95+0,1i, kampas θ =2,3 rad. Pirmu atveju, turime azimutinės poliarizacijos sąveiką su klasteriu:



29 pav. Azimutinė poliarizacija krintanti sferinės simetrijos atveju ties sub-banginių dalelių pjūviu. Elektrinio lauko intensyvumas atvaizduotas spalvomis ir poliarizacija rodyklėmis. Kairėje pritrauktas vaizdas, kuriame matosi elektrinis laukas klasteryje, o dešinėje visa simuliacijos erdvė ties klasterių pjūviu.

Antru atveju, turime radialinės poliarizacijos sąveiką su klasteriu:



30 pav. Radialinė poliarizacija krintanti sferinės simetrijos atveju ties sub-banginių dalelių pjūviu. Elektrinio lauko intensyvumas atvaizduotas spalvomis ir poliarizacija rodyklėmis. Kairėje pritrauktas vaizdas, kuriame matosi elektrinis laukas klasteryje, o dešinėje visa simuliacijos erdvė ties klasterių pjūviu.

Gavę skirtingus pralaidumus skirtingoms poliarizacijoms, galime tokias struktūras panau-

doti kaip optinius elementus. Gauti pralaidumai 76% radialinės poliarizacijos atveju ir 65% azimutinės poliarizacijos atveju. Radialinės poliarizacijos atveju didžiausias elektrinio lauko intensyvumas pasiskirstęs ties didžiausia sub-banginių dalelių struktūros sfera. Azimutinės poliarizacijos atveju, elektrinio lauko intensyvumas pasiskirstęs santykinai tolygiai. Gebėdami valdyti azimutinę ir radialinę poliarizacijas praplečiame jų panaudojimo ir valdymo galimybes. Cilindrinės simetrijos atveju gauname (31 pav.) ir (32 pav.).



31 pav. Kompleksinis vektorinis šaltinis (angl. Flower) cilindrinės simetrijos atveju ties subbanginių dalelių pjūviu. Elektrinio lauko intensyvumas atvaizduotas spalvomis ir poliarizacija rodyklėmis. Kairėje pritrauktas vaizdas, kuriame matosi elektrinis laukas klasteryje, o dešinėje visa simuliacijos erdvė ties klasterių pjūviu.



32 pav. Kompleksinis vektorinis šaltinis (angl. Web) cilindrinės simetrijos atveju ties subbanginių dalelių pjūviu. Elektrinio lauko intensyvumas atvaizduotas spalvomis ir poliarizacija rodyklėmis. Kairėje pritrauktas vaizdas, kuriame matosi elektrinis laukas klasteryje, o dešinėje visa simuliacijos erdvė ties klasterių pjūviu.

Cilindrinės simetrijos atveju, kompleksiniai vektoriniai pluoštai sub-banginėse dalelėse pasiskirstę panašiai, skiriasi tik pasiskirstymo intensyvumas ir pralaidumas.

Priedas Nr. 2. Pluoštų nemonochromatiškumas

Siekiant ištirti S-waveplate elementų veiksmingumą esant nemonochromatiškam krintančiam pluoštui, pasirenkame bangos ilgių intervalą nuo 400 nm iki 600 nm (3 pav.). Geometrinės fazės elementas S-waveplate (21 pav.), sudarytas iš 2 sluoksnių ir atstumas tarp sluoksnių d = 500 nm.



33 pav. Krintančio pluošto spektras.



34 pav. Elektrinio lauko skirstinys praėjus geometrinės fazės elementą sudarytą iš 2 (a)(b) ir 4 (c)(d) sluoksnių dvejopai laužiančių meta-atomų. Kairėje- krintant X poliarizacijai. Dešinėjekrintant Y poliarizacijai. Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektoriaus kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo (21 pav.).

Kaip matome iš gautų rezultatų, naudojant nemonochromatišką pluoštą su geometrinės

fazės elementu S-waveplate, azimutinės ar radialinės poliarizacijos pluoštai gaunami, tačiau kokybė prastesnė nei monochromatiško pluošto. Parametrų vertės, kurios yra svarbios kokybiškam pluoštui gauti, priklauso nuo krintančio pluošto bangos ilgio. Todėl mūsų sukurto S-waveplate elemento nemonochromatiškam pluoštui reikia daugiau sluoksnių, norint pasiekti tvarkingos poliarizacijos.