



Ph.D. Tézisfüzet

**Elektromágneses hullámterjedés szimulációja
lineáris és nemlineáris strukturált
dielektrikumokban**

Szarvas Tamás

Témavezető: Dr. Kis Zsolt
Wigner Fizikai Kutatóközpont
Kvantumoptikai és
Kvantuminformatikai Osztály

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2020

Bevezetés

Elektromágneses hullámok terjedését polarizálható közegekben (dielektrikumok) a közeg számos tulajdonsága határozza meg, úgymint a lineáris és nemlineáris szuszceptibilitás, az anizotrópia, valamint inhomogén közegek esetén a dielektrikum struktúrája. Amennyiben a dielektrikum strukturáltsága a fény hullámhosszával összemérhető, vagy még ennél is finomabb (fotonikus kristályok és elektromágneses metaanyagok), olyan új tulajdonságok jelennek meg a fényterjedés szempontjából, melyek kiterjedt, homogén dielektrikumokban nem figyelhetők meg. Ilyen jelenség például periodikus egy-, két-, vagy háromdimenziós közegekben a fény módussűrűségének sávosszerű szerkezete, mely a szilárdtestekben létrejövő elektronhullámok sáv szerkezetéhez hasonló [1, 2]. Az elektromágneses hullámok terjedésének, elhajlásának és szóródásának elméleti leírása jól kidolgozott, ám ha a struktúra geometriája komplex, mint fotonikus kristályok esetén, numerikus szimulációs módszerek alkalmazása elengedhetetlenné válik [3].

Fotonikus kristályokon alapuló eszközöket már jó ideje gyártanak, például sokrétegű dielektrikum tükrök formájában, melyek egydimenziós struktúrák. Habár ilyen többrétegű struktúrákkal nagyon jó optikai tulajdonságokat lehet elérni, vannak hátrányaik. Az optikai elemek termikus rezgései zajt okozhatnak nagy precizitású interferométerekben [4], kiderült, hogy többrétegű tükröket használva magasabb lesz a termikus zaj, mint monolitikus struktúráknál (ugyanazon anyagból, hullámhossz finomságú megmunkálással kapott fotonikus struktúra) [5]. Az elsőrendű szuszceptibilitás mellett, a magasabb rendű szuszceptibilitásokban is létrehozható periodikus struktúra, amelyre példa a periodikusan átforgatott doménű lítium-niobát kristály. Ezzel a technikával kvázi-fázisillesztés érhető el nemlineáris folyamatokban [6]. Az egydimenziós másodharmonikus keltés elméleti és szimulációs módszerekkel történő leírása jól kidolgozott. Manapság a domén átforgatás fejlett technológiája olyan gyártási eljárást tesz lehetővé bizonyos nemlineáris kristályoknál, mint a lítium-niobát (LiNbO_3), vagy a lítium-tantalát (LiTaO_3), melyeknél a nemlineáris koefficiens előjele kétdimenziós minta szerint változik [7]. Ezzel az eljárással kvázi-fázisillesztést lehet elérni másodharmonikus keltésénél két dimenzióban, és ekképpen a másodharmonikus jel fázisillesztett erősödését.

Célkitűzések

A doktori munkám célja egyfelől a lineáris, térben strukturált monolitikus optikai eszközök geometriájának meghatározása az optikai tulajdonságaik optimalizációjával. Ilyen optikai elem lehet például szélessávú tükör, sávszűrő, valamint dikroikus felül- és aluláteresztő szűrő. Másfelől olyan numerikus eljárások kidolgozása, melyekkel a másodrendű szuszceptibilitásukban térben strukturált nemlineáris kristályokat lehet modellezni. A módszer(ek)nek tudnia kell kezelni a homogén másodrendű kristályban történő másodharmonikus hullám keltésén kívül olyan változatos jelenségeket, mint másodharmonikus keltés periodikusan átforgatott doménű kristályban, valamint olyan anyagokban, melyeknek mind az első- mind a másodrendű szuszceptibilitásuk térben strukturált. Kívánatos továbbá, hogy kezelni tudják a hátrafele terjedő másodharmonikus teret, működjenek magas konverziós hatásfoknál is, valamint lehessen velük makroszkopikus méretű struktúrákat szimulálni.

Új tudományos eredmények

A Ph.D munkám során elért eredményeimet az alábbi tézispontok tartalmazzák:

1. Numerikus szimulációs módszerekkel olyan speciális optikai elemek geometriai paramétereit határoztam meg, melyek egy T-alakú felületi rács struktúrából lettek kialakítva. Először egy ilyen tükrözési geometriáját optimalizáltam, hogy a lehető legzélesebb közel infravörös hullámhossz tartományon működjön, peremfeltételeket használva a T alakú struktúra alsó és felső rétegei keskenységének minimumára. Majd egy sávszűrő geometriai paramétereit határoztam meg 1550 nm-es központi hullámhosszra. Végül egy alul- és felüláteresztő dikroikus szűrőt modelleztem. [P1]
2. A véges differenciák a frekvencia tartományon (FDFD) lineáris szimulációs módszert általánosítottam másodharmonikus nemlineáris esetekre, bemutatva, hogy ténylegesen lehet másodharmonikus keltést szimulálni a kapott nemlineáris véges differenciák a frekvencia tartományon (NL-FDFD) módszerrel. Az új módszert kidolgoztam egyrészt kétdimenziós szimulációs rácsra, amelyen 3m szimmetriával rendelkező kristályokat lehet szimulálni, valamint bemutattam az általános formalizmust három dimenziós szimulációs rácsra, tetszőleges szimmetriával rendelkező kristály esetére. Homogén, valamint periodikusan átfogatott doménű nemlineáris kristályban modelleztem másodharmonikus keltést, és az eredményként kapott konverziós határfokok térbeli eloszlása tökéletesen egyezett az analitikus görbékkel. Továbbá kétdimenziós, rezonáns hullámvezető rács struktúrákat szimuláltam, melyek egy egy sorban, valamint egy öt sorban végtelenül ismétlődő nemlineáris hengerekből álltak. Ennélfogva ezek a közegek mind az első-, mind a másodrendű szuszceptibilitásukban térben strukturáltak voltak. Megmutattam, hogy a reflexiós spektrum, a másodharmonikus hullám normalizált reflexiós ereje, valamint a rezonancia frekvencián kialakuló elektromágneses mező térbeli eloszlása nagyon jól egyezik egy korábbi cikkben [8] szemi-analitikus módszerrel kapott eredményekkel. [P2]
3. Megmutattam hogyan lehet a pszeudospektrális módszert az FDFD módszernél alkalmazni, amelyből eredő új eljárást pszeudospektrális differenciák a frekvencia tartományon (PSFD) módszernek neveztem el. Ezután a nemlineáris pszeudospektrális differenciák a frekvencia tartományon (NL-PSFD) módszert vezettem be és hasonlítottam az NL-FDFD módszerhez. Bemutattam hogyan kell ferdeszögű megvilágítást megvalósítani a PSFD módszernél. Meghatároztam a konverziós határfokot és a keletkezett másodharmonikus hullám terjedési irányát egy ferdeszögű fázisillesztett nemlineáris periodikus struktúrán, melyet kétféleképpen szimuláltam: először

merőleges beesés esetén a struktúra volt ferde a rács tengelyéhez képest, majd a struktúra párhuzamos volt a rács tengelyével és a beeső síkhullám volt ferde ugyanolyan mértékben. A kapott eredmények helyességét ellenőriztem mind egymással, mind az analitikus megoldással való direkt összehasonlítással. [P3]

4. Az NL-PSFD módszerből kiindulva egy új eljárást fejlesztettem ki makroszkopikus méretű szimulációs tartományokra olyan struktúrákra, ahol a lineáris szuszeptibilitás vagy homogén, vagy speciális téreloszlást mutat. Ennél az új módszernél az alapmátrix nincs felskálázva ritka blokkmátrixszá (mint az FDFD és PSFD módszereknél), hanem a mérete megegyezik a szimulációs rács méretével. Az így kapott NL-PSFD-SYLV módszer mátrix egyenlete Sylvester típusú, amely megoldását a konjugált gradiens módszert használva iteratív úton kapjuk meg. A módszer hatékonyságát egy makroszkopikus méretű, ténylegesen kétdimenziós, nemlineáris fotonikus kristályon mutattam be, amely struktúrában a periodikusan átforgatott henger alakú domének centrált négyzetrácsban vannak elhelyezve. A nemlineáris fázisillesztés nem kollineáris módon valósul meg a másodrendű szuszeptibilitás első Fourier komponensén keresztül. A fázisillesztés feltételéből meghatároztam a gerjesztő hullám beesési szögét, valamint keltett másodharmonikus hullám elméleti terjedési irányát is. A szimuláció eredményéből mind a másodharmonikus hullám terjedési irányát, mind a konverziós hatásfokot kiszámítottam, melyek jól egyeznek az elméleti várakozásokkal. [P3]

Tudományos közlemények

A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

- [P1] T. Szarvas and Zs. Kis, "Optimization of a T-shaped optical grating for specific applications." *Optical Engineering*, **55**(7): 077103 (2016).
- [P2] T. Szarvas and Zs. Kis, "Numerical simulation of nonlinear second harmonic wave generation by the finite difference frequency domain method." *Journal of the Optical Society of America B*, **35**(4): 731–740 (2018).
- [P3] T. Szarvas and Zs. Kis, "Application of pseudospectral method to the finite difference frequency domain method." *Journal of the Optical Society of America B*, **36**(2): 333–345 (2019).

További publikációk és konferenciák

- [P4] T. Szarvas and Zs. Kis, "Simulation of wave propagation in periodically structured dielectrics." In "Kvantumelektronika 2014: VII. Szimpózium a hazai kvantumelektronikai kutatások eredményeiről," (2014).
- [P5] T. Szarvas and Zs. Kis, "Optimization of surface relief grating for band filter application by numerical simulation." In "17th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON)," (2015).
- [P6] T. Szarvas and Zs. Kis, "Optical simulation of monolithic grating structure." In "Mesterpróba 2015" (2015).
- [P7] T. Szarvas and Zs. Kis, "Simulation of second harmonic wave generation by extended Finite Difference Frequency Domain method." In "International OSA Network of Students (IONS) Balvanyos 2017," (2017).
- [P8] T. Szarvas and Zs. Kis, "Simulation of electromagnetic wave propagation in structured dielectrics." In "Wigner Research Centre for Physics Seminar," (2018).
- [P9] T. Szarvas and Zs. Kis, "Másodharmonikus keltés numerikus modellezése az FDFD módszer kiterjesztésével." In "Kvantumelektronika 2018: Szimpózium a hazai kvantumelektronikai kutatások eredményeiről," (2018).
- [P10] T. Szarvas and Zs. Kis, "Simulation of nonlinear photonic crystals by modified finite difference frequency domain method." In "Frontiers in Optics / Laser Science," (2018).

Hivatkozások

- [1] I. A. Sukhoivanov and I. V. Guryev. *Photonic Crystals - Physics and Practical Modeling*. Springer Series in Optical Sciences (2009).
- [2] A. R. McGurn. *Nonlinear Optics of Photonic Crystals and Meta-Materials*. Morgan & Claypool Publishers (2015).
- [3] T. Rylander, P. Ingelström, and A. Bondeson. *Computational Electromagnetics*. Springer (2005).
- [4] V. Braginsky, M. Gorodetsky, and S. Vyatchanin. „[Thermodynamical fluctuations and photo-thermal shot noise in gravitational wave antennae.](#)” *Physics Letters A*, **264**: 1–10 (1999).
- [5] G. M. Harry, A. M. Gretarsson, P. R. Saulson, et al. „[Thermal noise in interferometric gravitational wave detectors due to dielectric optical coatings.](#)” *Classical and Quantum Gravity*, **19**: 897–917 (2002).
- [6] R. Boyd. *Nonlinear Optics 3rd Edition*. Elsevier, Academic Press (2008).
- [7] M. Manzo, F. Laurell, V. Pasiskevicius, et al. „[Two-dimensional domain engineering in LiNbO3 via a hybrid patterning technique.](#)” *Optical Materials Express*, **1**(3): 365–371 (2011).
- [8] L. Yuan and Y. Y. Lu. „[Analyzing second harmonic generation from arrays of cylinders using Dirichlet-to-Neumann maps.](#)” *Journal of the Optical Society of America B*, **26**(4): 587–594 (2009).