A NAGY NUMERIKUS APERTÚRÁJÚ FÓKUSZÁLÁS VEKTORIÁLIS SLEPIAN-ELMÉLETE

PhD tézisfüzet

JAHN KORNÉL

Témavezető:
DR. BOKOR NÁNDOR

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM,
FIZIKA TANSZÉK

2017

A kutatás előzménye

Koherens fény lehető legkisebb foltra való fókuszálása központi szerepet tölt be napjaink alkalmazott optikájának számos területén, mint például a lézeres pásztázó mikroszkópiában, az optikai litográfiában vagy az optikai adattárolásban. Ezekben az alkalmazásokban rendszerint nagy numerikus apertúrájú (NA) fókuszáló rendszerek használatosak, mivel ismert, hogy a diffrakciólimitált foltméret a NA növelésével csökken (a NA arányos a rendszer félszögapertúrájának a szinuszával). Ezen túlmenően egyre növekvő igény mutatkozik a fókuszfolt részletesebb kontrolljára is, mely például annak intenzitás- vagy polarizációprofiljára irányul. Az ilyesfajta "fókuszmező-tervezés" utat nyitott olyan új nanofotonikai módszerek felé, mint a háromdimenziós (indukált emissziós kioltáson alapuló) STED-mikroszkópia [Klar, 2000] és -litográfia [Klar, 2014], vagy az egyes molekulák térbeli orientációjának meghatározása [Novotny, 2001]. Mindezek tükrében a pontos elméleti modelleknek az erősen fókuszált mezők tervezésében betöltött szerepét nem lehet eléggé hangsúlyozni.

A hagyományos skalárdiffrakció-elmélet nem alkalmas a nagy NA-jú fókuszáló rendszerek fókuszmezőjének leírására, mert a vektoriális (polarizációs) hatások jelentőssé válnak a NA növelésével. Az értekezés által tárgyalt távoltéri fókuszálás esetén a fókuszmező vektoriális leírására leggyakrabban az ún. Debye—Wolf-integrál használatos, mely a fókuszmezőt a fókuszpontot elérő fénysugarakhoz társított, homogén (vektoriális) síkhullámok szuperpozíciójaként reprezentálja [Wolf, 1959]. Magának az integrálnak a kiértékelését célzó legfontosabb módszerek vagy a gyors Fourier-transzformáción (FFT) [Leutenegger, 2006], vagy különböző sorfejtéseken [Foreman, 2011] alapulnak. Míg számítási idő tekintetében az FFT-alapú eljárások járnak élen, a gyorsan konvergáló sorfejtések előnyösebbek lehetnek bizonyos esetekben, például amikor egy optimalizációs probléma kapcsán a paraméterek számát kívánjuk csökkenteni.

A fókuszálás ún. multipólelmélete [Sheppard, 1997] egyike a sorfejtésen alapuló módszereknek. A fókuszmezőt (a Maxwell-egyenleteket egzakt módon kielégítő) forrásmentes vektoriális multipólmezők szuperpozíciójaként reprezentálja. Egyrészről ezek a mezők relatíve egyszerű, zárt alakba írhatóak, éppúgy, ahogy a síkhullám-amplitúdójukat megadó tangenciális vektoriális gömbharmonikusok is. E tulajdonság számítási szempontból vonzóvá teszi őket. Másrészt azonban a síkhullám-felbontásukban az összes lehetséges irányban terjedő homogén síkhullámkomponens részt vesz, melyek egymással szemben terjedő párokat alkotnak. Következésképpen a vektoriális multipólmezők lényegében gömbi állóhullámok, és mint olyan, nem emlékeztetnek a szokásos haladó fókuszmezőkre, melyeknél a síkhullámkomponensek terjedési iránya – jó közelítéssel – egy, a fókuszáló rendszer szögapertúrája által meghatározott gömbsapkára korlátozódik (a Debye—Wolf-elmélet értelmében). Ez utóbbi tulajdonságot a fókuszmező “irányítottságának” nevezhetjük [Moore, 2009].

Feltételezhetjük, hogy a fókuszált mezőket a multipól-közelítésnél kevesebb kifejtési taggal közelíthetjük akkor, ha a bázisfüggvényeket úgy választjuk meg, hogy azok maguk is rendelkeznek a fókuszáló rendszer által megszabott irányítottsággal [Moore, 2009]. Továbbá az ilyen bázisfüggvények a Debye—Wolf-integrál egyszerű invertálására is módot adnak, mivel garantálják, hogy az eredményül kapott síkhullám-amplitúdók a fenti gömbsapkára korlátozódnak.

Célkitűzések

A PhD kutatásom első célja olyan vektoriális bázisfüggvények megalkotása volt (vektoriális gömbharmonikus reprezentációból kiindulva), melyek jól lokalizáltak egy gömbsapkára nézve és ezáltal természetes bázisként szolgálnak a Debye—Wolf-elmélet síkhullám-amplitúdóinak közelítésére. Sőt, a probléma általános jellegéből fakadóan a kapott bázisfüggvények a fizika más területein is hasznosíthatóak.

Második célul azoknak a fókuszmező-bázisfüggvényeknek a megalkotását tűztem ki, melyek az előző bekezdés síkhullámamplitúdó-bázisfüggvényeinek feleltethetőek meg és a fókuszmező approximációjára használhatóak.

A harmadik cél a fenti új bázisfüggvények alkalmazhatóságának numerikus szemléltetése volt direkt és inverz fókuszálási problémákra. Előbbi a fókuszmező kiszámítását jelenti adott belépőpuilla-mező esetén, míg az utóbbi olyan belépőpupilla-mező előállítását jelenti, mely egy előre megadott fókuszmezőt hoz létre. Az inverz problémák kapcsán a hangsúlyt olyan esetekre fektettem, melyeknél csak a (fókuszpont környéki) elektromos mező abszolútérték-négyzetére vonatkozóan teszünk előírást, mert az ilyen előírások közelebb állnak a valóságos problémákhoz.

Módszerek

Gömbsapkára lokalizált vektoriális bázisfüggvényeknek megalkotása céljából megoldottam az ún. Slepian-féle koncentrációs problémát sávkorlátozott tangenciális vektormezőkre.

Slepian és munkatársai az 1960-as években úttörő kutatásokat folytattak a valós számok halmazán értelmezett, négyzetesen integrálható, sávkorlátozott függvények koncentrálási problémáját illetően. Olyan Fourier-értelemben sávkorlátozott függvényt kerestek, melynek az “energiája” (abszolútérték-négyzetének integrálja) maximális mértékben az értelmezési tartományának egy véges részintervallumába esik. Ennek a variációs problémának a megoldása azonban ortonormált függvények egy egész rendszerét szolgáltatja, melynek egy részhalmaza kiváló koncentrációs tulajdonsággal rendelkezik az említett intervallumra nézve [Slepian, 1961].

Később Slepian koncentrációs problémáját gömbön értelmezett skalármezők esetére is adaptálták [Grünbaum, 1982; Simons, 2006]. Ennek a problémának a tanulmányozása értékes ötletekkel szolgált a sávkorlátozott, gömbre nézve tangenciális *vektormezők* koncentrációs problémájának megoldásához.

Az értekezésben bevezetett új fókuszmező-bázisfüggvények (az ún. vektoriális Slepian-multipólmezők) segítségével kiszámolt fókuszmezőket a fentebb említett Debye—Wolf-integrál segítségével validáltam.

Új tudományos eredmények

1. Megoldottam a sávkorlátozott, tangenciális vektormezők gömbsüvegre vonatkozó, Slepian-féle koncentrációs problémáját oly módon, hogy rögzített rendű, az $\{\mathbf{Y}_{lm}(\theta,\phi),\mathbf{Z}_{lm}(\theta,\phi)\}$ vektoriális gömbharmonikus bázisra vonatkozó koncentrációs mátrixok sajátérték-problémájára vezettem vissza. A koncentrációs probléma megoldásainak (az ún. vektoriális Slepian-harmonikusoknak) kifejtési együtthatóit a sajátvektorok tartalmazzák. Megmutattam, hogy (1) a sajátérték-spektrum a Slepian-féle koncentrációs problémákra általánosan jellemző lépcsőszerű alakkal rendelkezik, továbbá azt, hogy (2) a kapott vektoriális Slepian-harmonikusok kettős ortogonalitási tulajdonsággal bírnak.
   Kapcsolódó publikáció: [1]

2. Sávkorlátozott, tangenciális vektormezők gömbsüvegre vonatkozó, Slepian-féle koncentrációs problémájának alternatív megoldásait alkottam meg oly módon, hogy a $\{\mathbf{Q}^{+}_{lm}(\theta,\phi), \mathbf{Q}^{-}_{lm}(\theta,\phi)\}$ kevert vektoriális gömbharmonikus bázisban felírt, rögzített rendű koncentrációs mátrixok sajátérték-problémáját oldottam meg. Megmutattam, hogy ebben az utóbbi formalizmusban (1) a vektoriális koncentrációs probléma skalárproblémára, az ún. vektoralapú skaláris koncentrációs problémára vezethető vissza, valamint azt, hogy (2) a vektoriális Slepian-harmonikusok az $F_{lm}(\cos\theta)$ Sheppard–Török-függvényeket tartalmazó szorzatalakba írhatóak. A vektor Slepian-harmonikusok numerikus kiértékelésére hatékony számítási módszert javasoltam, mely a Sheppard–Török-függvények általam felfedezett speciális összefüggésein alapul (egy explicit formulán a legalacsonyabb fokú függvényekre ill. egy háromtagú rekurziós összefüggésen).
   Kapcsolódó publikációk: [2, 5]

3. Megmutattam, hogy a Sheppard–Török-bázisban a $\mathcal{J}_m$ differenciáloperátor J_m mátrixa tridiagonális (ritka) és kommutál a mátrixszorzásra nézve a K_m sűrű, rögzített rendű koncentrációs mátrixszal, mely a vektoralapú skaláris koncentrációs problémához tartozik. A vektoriális Slepian-harmonikusok kifejtési együtthatóinak kiszámítása kisebb számításigénnyel valósítható meg, ha a K_m sűrű mátrixok helyett a J_m ritka mátrixok sajátérték-problémáját tekintjük. A K_m mátrixokkal ellentétben a J_m mátrixok egyszerű sajátérték-spektrummal rendelkeznek, így a sajátérték-probléma megoldható duplapontosságú aritmetikát használva és mentes a K_m mátrixok sajátérték-problémájára jellemző numerikus instabilitástól.
   Kapcsolódó publikáció: [5]

4. A vektoriális Slepian-harmonikusokra síkhullám-amplitúdókként tekintve új, ún. vektoriális Slepian-multipólmezőket definiáltam, melyek a megfelelő fókuszmezőket reprezentálják és kielégítik a forrásmentes vektoriális Helmholtz-egyenletet. A vektoriális Slepian-multipólmezőket, illetve -harmonikusokat bázisfüggvényekként használtam erősen fókuszált mezőknek, illetve azok síkhullám-amplitúdóinak approximációjára. Megmutattam, hogy – azonos sávkorláthoz tartozó vektoriális multipólmező- és vektoriális gömbharmonikus-közelítéssel összehasonlítva – a fenti Slepian-függvények segítségével lényegesen kevesebb számú kifejtési taggal érhető el azonos nagyságrendű $\mathcal{L}^2$-approximációs hiba. A tagok számát közelítőleg az approximációban figyelembe vett rendekhez tartozó parciális Shannon-számok összege adja meg.
   Kapcsolódó publikáció: [1]

5. A fókuszmezőt vektoriális Slepian-multipólmezők lineáris kombinációjaként reprezentálva általános módszert javasoltam a nagy numerikus apertúrájú fókuszálás inverz problémájának közelítő megoldására, vagyis olyan elektromos térerősség-eloszlás kiszámítására a fókuszáló rendszer belépő pupillájánál, mely egy előírt fókuszmezőt hoz létre. Mindenekelőtt demonstráltam azt, hogy a módszer jól alkalmazható olyan inverz optimalizációs problémáknak a megoldására is, amelyeknél csupán az elektromos mező abszolútérték-négyzete van előírva a fókuszpont környezetében.
   Kapcsolódó publikációk: [3, 4]

Az eredmények hasznosítása

Ahogy azt az értekezésben szemléltettem, a vektoriális Slepian-harmonikusok és -multipólmezők a fókuszálás direkt és inverz problémájának hasznos megoldási eszközei. Sőt, mivel a vektoriális Slepian-harmonikusok bázist alkotnak a gömbön négyzetesen integrálható, tangenciális vektorfüggvényekre nézve, alkalmazhatóságuk túlmutat az optika területén. Használhatóak például olyan legkisebb négyzetek módszerén alapuló illesztési problémák esetén, melyeknél a vektoriális mérési adatok zajjal terheltek és csak egy gömbsapkán belül állnak rendelkezésre [Plattner, 2015].

Fontos megjegyezni, hogy a vektoriális Slepian-harmonikusokat tőlem függetlenül bevezették A. Plattner és F. J. Simons geofizikusok is [Plattner, 2012; Plattner, 2014]. Ők kiterjesztették a koncentrációs problémát gömbsapkától eltérő tartományokra is, valamint a radiális irányra is megoldották. A vektoriális Slepian-függvények e szélesebb halmazát (mely a radiális függvényeket is tartalmazza) hatékonyan lehet használni számos geofizikai potenciálmező-becslési problémában, mely a potenciálgradiens mérési adatain alapul [Plattner, 2015].

Simons és Plattner a harmadik tézispontban szereplő – a J_m mátrixokon alapuló – számítási módszerre „izgalmas felfedezés”-ként utalt a *Handbook of Geomathematics* c. könyv második kiadásában [Simons, 2015]. Kiemelték azt is, hogy – gömbsapka alakú tartomány esetén – a J_m mátrixokat használva „a számítások mindig gyorsak és [numerikusan] stabilak”.

A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

[1] <u>K. Jahn</u> and N. Bokor. “Vector Slepian basis functions with optimal energy concentration in high numerical aperture focusing,” *Opt. Commun.* **285**(8), 2028–2038 (2012).
DOI: 10.1016/j.optcom.2011.11.107

[2] <u>K. Jahn</u> and N. Bokor. “The connection between tightly focused beams and the concentration problem on the sphere,” in: *Proceedings of the PhD Conference organised by the Doctoral School of Physics of the Faculty of Natural Sciences, Budapest University of Technology and Economics (June 22, 2012)*. Ed. by G. Mihály (Doctoral School of Physics of the Faculty of Natural Sciences, Budapest, Hungary, 2012). 10–13. ISBN: 978-963-313-065-0

[3] <u>K. Jahn</u> and N. Bokor. “Vector Slepian functions and the inverse problem of high numerical aperture focusing,” in: *Optical Systems Design 2012*. Ed. by L. Mazuray *et al.* Vol. 8550. Proc. SPIE (2012). 855038.
DOI: 10.1117/12.979311

[4] <u>K. Jahn</u> and N. Bokor. “Solving the inverse problem of high numerical aperture focusing using vector Slepian harmonics and vector Slepian multipole fields,” *Opt. Commun.* **288**, 13–16 (2013).
DOI: 10.1016/j.optcom.2012.09.051

[5] <u>K. Jahn</u> and N. Bokor. “Revisiting the Concentration Problem of Vector Fields within a Spherical Cap: A Commuting Differential Operator Solution,” *J. Fourier Anal. Appl.* **20**(2), 421–451 (2014).
DOI: 10.1007/s00041-014-9324-7

További tudományos közlemények

[6] K. Jahn and N. Bokor. “Intensity control of the focal spot by vectorial beam shaping,” *Opt. Commun.* **283**(24), 4859–4865 (2010).
DOI: 10.1016/j.optcom.2010.07.030

[7] Bacsárdi L., Belső Z., Bérces M., Gombkötő B., Gulácsi L., Gyöngyösi L., Imre S., Jahn K., Kis Zs., Koller I., Kornis J., Mazroa D., Mráz A., Orosz L., Paksy G., Papp Zs., and Szabó Á. “Kísérletek folytonos változójú kvantumos kulcsmegosztó eszköz megvalósítására,” in: *Kvantumelektronika 2014: VII. szimpózium a hazai kvantumelektronikai kutatások eredményeiről (Budapest, 2014. november 28.)* szerk. Ádám P. and Almási G.(Pécsi Tudományegyetem, Pécs, 2014). P01.
ISBN: 978-963-642-697-2

[8] Y. Iketaki, H. Kumagai, K. Jahn, and N. Bokor. “Creation of a three-dimensional spherical fluorescence spot for super-resolution microscopy using a two-color annular hybrid wave plate,” *Opt. Lett.* **40**(6), 1057–1060 (2015).
DOI: 10.1364/OL.40.001057

[9] H. Kumagai, Y. Iketaki, K. Jahn, and N. Bokor. “Fabrication of two-color annular hybrid wave plate for three-dimensional super-resolution microscopy,” in: *Three-Dimensional and Multidimensional Microscopy: Image Acquisition and Processing XXIII.* Ed. by T. G. Brown, C. J. Cogswell, and T. Wilson. Vol. 9713. Proc. SPIE (2016). 971311.
DOI: 10.1117/12.2211871

Irodalmi hivatkozások listája

[Foreman, 2011] M. R. Foreman and P. Török. “Computational methods in vectorial imaging,” *J. Mod. Opt.* **58**(5-6), 339–364 (2011).
DOI: 10.1080/09500340.2010.525668

[Grünbaum, 1982] F. A. Grünbaum, L. Longhi, and M. Perlstadt. “Differential operators commuting with finite convolution integral operators: some non-Abelian examples,” *SIAM J. Appl. Math.* **42**(5), 941–955 (1982).
DOI: 10.1137/0142067

[Klar, 2000] T. A. Klar, S. Jakobs, M. Dyba, A. Egner, and S. W. Hell. “Fluorescence microscopy with diffraction resolution barrier broken by stimulated emission,” *Proc. Nat. Acad. Sci.* **97**(15), 8206–8210 (2000).
DOI: 10.1073/pnas.97.15.8206

[Klar, 2014] T. A. Klar, R. Wollhofen, and J. Jacak. “Sub-Abbe resolution: from STED microscopy to STED lithography,” *Phys. Scripta* **2014**(T162) (2014).
DOI: 10.1088/0031-8949/2014/T162/014049

[Leutenegger, 2006] M. Leutenegger, R. Rao, R. A. Leitgeb, and T. Lasser. “Fast focus field calculations,” *Opt. Express* **14**(23), 11277–11291 (2006).
DOI: 10.1364/OE.14.011277

[Moore, 2009] N. J. Moore and M. A. Alonso. “Closed-form bases for the description of monochromatic, strongly focused, electromagnetic fields,” *J. Opt. Soc. Am. A* **26**(10), 2211–2218 (2009).
DOI: 10.1364/JOSAA.26.002211

[Novotny, 2001] L. Novotny, M. R. Beversluis, K. S. Youngworth, and T. G. Brown. “Longitudinal field modes probed by single molecules,” *Phys. Rev. Lett.* **86**(23), 5251 (2001).
DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.5251

[Plattner, 2012] A. Plattner, F. J. Simons and L. Wei. “Analysis of real vector fields on the sphere using Slepian functions”. In: *2012 IEEE Statistical Signal Processing Workshop*. (IEEE, Ann Arbor, MI, USA, 2012). 1–4. ISBN: 978-1-4673-0182-4.
DOI: 10.1109/SSP.2012.6319659

[Plattner, 2014] A. Plattner and F. J. Simons. “Spatiospectral concentration of vector fields on a sphere,” *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **36**(1), 1–22 (2014).
DOI: 10.1016/j.acha.2012.12.001

[Plattner, 2015] A. Plattner and F. J. Simons. “Potential-Field Estimation Using Scalar and Vector Slepian Functions at Satellite Altitude”. In: *Handbook of Geomathematics*. Ed. by W. Freeden, M. Z. Nashed, and T. Sonar. 2nd ed. (Springer, Berlin, Germany, 2015). 2003–2055. ISBN: 978-3-642-54550-4

[Sheppard, 1997] C. J. R. Sheppard and P. Török. “Efficient calculation of electromagnetic diffraction in optical systems using a multipole expansion,” *J. Mod. Opt.* **44**(4), 803–818 (1997).
DOI: 10.1080/09500349708230696

[Simons, 2006] F. J. Simons, F. A. Dahlen, and M. A. Wieczorek. “Spatiospectral concentration on a sphere,” *SIAM Rev.* **48**(3), 504–536 (2006).
DOI: 10.1137/S0036144504445765

[Simons, 2015] F. J. Simons and A. Plattner. “Scalar and Vector Slepian Functions, Spherical Signal Estimation and Spectral Analysis”. In: *Handbook of Geomathematics*. Ed. by W. Freeden, M. Z. Nashed, and T. Sonar. 2nd ed. (Springer, Berlin, Germany, 2015). 2563–2608. ISBN: 978-3-642-54550-4

[Slepian, 1961] D. Slepian and H. O. Pollak. “Prolate Spheroidal Wave Functions, Fourier Analysis and Uncertainty–I,” *Bell Syst. Tech. J.* **40**(1), 43–63 (1961).
DOI: 10.1002/j.1538-7305.1961.tb03976.x

[Wolf, 1959] E. Wolf. “Electromagnetic diffraction in optical systems. I. An integral representation of the image field,” *Proc. R. Soc. A* **253**(1274), 349–357 (1959).
DOI: 10.1098/rspa.1959.0199