

Построение структуры одномерного фотонного кристалла по заданному спектру коэффициента отражения

П. С. Емельянцев⁺¹⁾, Н. И. Пышков⁺¹⁾, С. Е. Свяховский⁺¹⁾

⁺ Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 апреля 2023 г.

После переработки 1 мая 2023 г.

Принята к публикации 2 мая 2023 г.

Предложен и экспериментально реализован метод решения обратной задачи проектирования структуры одномерного фотонного кристалла. Известно, что одномерный фотонный кристалл, показатель преломления которого модулирован в виде синусоиды, имеет узкую фотонную запрещенную зону на частоте, однозначно связанной с пространственной частотой этой синусоиды. Мы предлагаем метод обратного проектирования одномерных фотонных кристаллов с произвольным заданным спектром отражения путем разложения этого спектра по элементарным фотонным запрещенным зонам и последующего их суммирования. В работе показано применение этого метода для изготовления примеров фотонных кристаллов с простыми формами спектральных кривых отражения.

DOI: 10.31857/S1234567823110058, EDN: djmrkd

Введение. Интерес к структурам с периодически меняющимся показателем преломления берет свое начало с работ Яблоновича [1] и Джона [2], в которых впервые было показано, что с помощью этих структур можно эффективно управлять распространением света аналогично тому, как полупроводники изменяют свойства электронов в физике твердого тела. Фотонные кристаллы (ФК) – твердотельные структуры, в которых показатель преломления пространственно модулирован с периодом порядка длины волны. Такое устройство структуры ФК ведет к возникновению фотонных запрещенных зон (ФЗЗ), областей частот, в которых распространение света внутри ФК невозможно. Наличие ФЗЗ делает возможным возникновение некоторых интересных оптических эффектов, таких как усиление Рамановского рассеяния [3], эффект Парселла [4], генерация второй и третьей оптической гармоники [5, 6] и других. ФК обладают исключительной гибкостью в возможностях управления потоком света, достигаемой посредством использования широкого числа конструктивных степеней свободы этих структур. Благодаря этой гибкости становится возможным реализация компактных и высокоэффективных логических устройств на основе фотонных структур, что критически важно для дальнейшего развития фотонных и оптоэлектронных технологий. В этом случае возникает проблема обратного проектирования ФК с

заданными оптическими характеристиками, которая решалась различными способами, от методов математической оптимизации до применения самообучающихся алгоритмов.

Существующие методы обратного проектирования ФК. В работе [7] используется градиентная оптимизация – возможно наиболее популярная техника обратного проектирования фотонных структур [8, 9]. Задача оптимизации заключается в нахождении экстремумов целевой функции в некоторой области конечномерного векторного пространства. В данном случае аргументами такой функции являются настраиваемые параметры фотонного устройства – показатели преломления и толщины слоев. В рамках каждой итерации вычисляется градиент целевой функции по настраиваемым параметрам, а затем эти параметры меняются вдоль направления градиента для улучшения производительности фотонного устройства. Авторы работы [7] использовали метод градиентной оптимизации для улучшения добротности фотоннокристаллического резонатора малого объема более чем на два порядка. Также метод градиентной оптимизации может применяться и для обратного проектирования оптических [10] и акустических [11] метаматериалов. Для обратного проектирования ФК используются такие методы оптимизации, как например, оптимизация на основе математической инверсии [12] или так называемая выпуклая оптимизация [13], которая в работе [14] была использована для создания компактного оптического демультиплексора.

¹⁾ e-mail: emelyantsev97@mail.ru; kolyagod12@gmail.com; sse@shg.ru

Большая часть существующих работ в области решения задачи обратного проектирования фотонных структур в той или иной степени включает в себя использование машинного обучения, нейронных сетей (НС) и других подобных алгоритмов [15–18]. В работе [19] описывается метод, совмещающий классические алгоритмы оптимизации и НС для обратного проектирования ФК. Имея возможность изучать функции из обучающего набора данных, нейронные сети могут выполнять как прямое прогнозирование, так и обратное проектирование различных фотонных структур. Объединение традиционных методов обратного проектирования и оптимизации с НС позволяет еще больше повысить эффективность, гибкость и возможности моделей. Помимо НС, в настоящее время в различных областях науки и производства набирают популярность алгоритмы машинного обучения. Основным их отличием от НС является то, что они требуют вмешательства человека в процессе их обучения, а также то, что они нацелены на более простые задачи и умеют работать только со структурированным набором данных. В работах [20–23] показано успешное применение алгоритмов машинного обучения для обратного проектирования различных фотонных структур. Стоит также отметить возможность применения генетических алгоритмов [24] для обратного проектирования ФК.

Однако вышеприведенные методы не являются регулярными, в каждом конкретном случае существование и единственность решения не очевидны.

В этой работе мы предлагаем метод решения обратной задачи восстановления структур одномерных фотонных кристаллов (ФК) по спектру отражения. Рассматриваемый метод позволяет получить структуру ФК с произвольным заданным спектром отражения, что открывает огромный простор для возможных применений. Произведены численные расчеты нескольких структур ФК для различных заданных спектров отражения, были изготовлены опытные образцы одномерных ФК.

Прямая задача: расчет спектра коэффициента отражения. Вначале укажем использованное нами решение прямой задачи построения спектра ФК по известной структуре. Для этого используется метод матриц распространения [25]. Мы используем рекуррентный метод, который является переформулированным матричным методом и на практике отличается более быстрой скоростью счета. Метод основан на классическом способе суммирования многократно отраженных лучей. Используемый нами рекуррентный метод позволяет вычислить коэффициенты отражения и прохождения структуры, состоя-

щей из $m+1$ слоев, если эти коэффициенты известны для m слоев [26]. Пусть на слоистую структуру, показатели преломления и толщины которой для каждого m -го слоя равны соответственно n_m и d_m , под углом θ падает монохроматическая волна вида:

$$E(\mathbf{r}, t) = E(\mathbf{r})e^{i\omega t}. \quad (1)$$

Далее рассмотрим только пространственное распространение волны вдоль x – нормального направления к поверхностям слоев, $E(\mathbf{r}) = E(x)$. Тогда поле в слое m представимо в виде:

$$E_m(x) = A_me^{ik_0\sigma_m x} + B_me^{-ik_0\sigma_m x}. \quad (2)$$

Здесь коэффициент $\sigma_m = (n_m^2 - \sin^2 \theta_m)^{1/2}$, $k_0 = 2\pi/\lambda$ – волновой вектор падающей волны, θ_m – угол распространения преломленной волны к оси x . Волны с амплитудами A_m и B_m распространяются, соответственно, вдоль и противоположно оси x . Эти амплитуды могут быть получены из граничных условий для электрического и магнитного полей и из формул Френеля. Коэффициенты отражения от m -го и $(m+1)$ -го слоев, $r_{m+1} = \frac{B_m}{A_m}$ и $r_{m+1} = \frac{B_{m+1}}{A_{m+1}}$ связаны рекуррентным соотношением Паррета:

$$r_m = \frac{r_{m+1} + W_m}{1 + r_{m+1}W_m} e^{2ik_0\sigma_m d_m}. \quad (3)$$

Данное выражение было получено с учетом непрерывности x -компонент волновых векторов на границе раздела m -го и $(m+1)$ -го слоев, а также граничные условия для s - и p -поляризаций света. Здесь введено обозначение:

$$W_m = \frac{\sigma_m - \sigma_{m+1}P_m}{\sigma_m + \sigma_{m+1}P_m}, \quad (4)$$

где P_m – поляризационный фактор, равный $P_m = 1$ для S -поляризации и $P_m = (\frac{n_m}{n_{m+1}})^2$ для P -поляризации. Расчет по рекуррентной формуле Паррета начинается с последнего слоя, для которого $r_{m+1} = 0$. Коэффициент отражения для всей системы по интенсивности равен $R = r_0^2$.

Обратная задача: метод построения структуры ФК. Рассмотрим одномерный ФК суммарной оптической толщиной L , показатель преломления которого модулирован следующим образом:

$$n(x) = A \sin(k_0 x + \phi) + B, \quad (5)$$

где x – оптический путь, $k_0 = \frac{4\pi}{\lambda_0}$ – волновое число, ϕ – начальная фаза. Выберем A и B таким образом, чтобы $n(x)$ менялся в фиксированных пределах от

n_1 до $n_2 > n_1$: $A = (n_2 - n_1)$, $B = n_1$. В этом примере значение ϕ не повлияет на результат, поэтому выберем $\phi = 0$. Получаем:

$$n(x) = (n_2 - n_1) \sin(k_0 x) + n_1. \quad (6)$$

ФК с такой модуляцией показателя преломления имеет очень узкую ФЗЗ на длине волны λ_0 . Для вычисления спектра коэффициента отражения этой структуры приблизим непрерывную зависимость (6) кусочно-постоянной, т.е. разделим кристалл на слои оптической толщиной $\delta l \ll \lambda_0$. Координата границы каждого m -го слоя $x_m = m \cdot \delta l$, его показатель преломления $n_m = n(x_m)$. Физическая толщина слоев определяется как $d_m = \delta l / n_m$. Приемлемость аппроксимации непрерывной функции $n(x)$ кусочно-постоянной обсуждается в [27]. Результат вычисления показан на рис. 1. На вставке показана кусочно-постоянная зависимость показателя преломления от толщины кристалла, использованная при расчете. В спектре действительно присутствует узкая ФЗЗ на заданной длине волны.

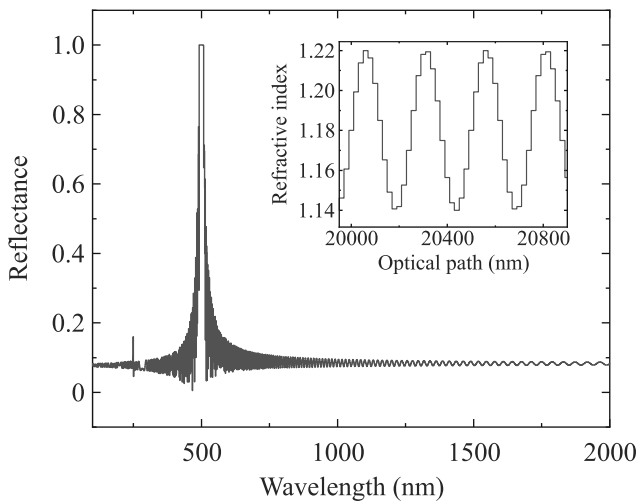


Рис. 1. (Цветной онлайн) Теоретически рассчитанный спектр отражения ФК с модуляцией показателя преломления (6) для s -поляризации. Результат получен для $L = 40$ мкм, оптическом пути каждого слоя $\delta l = 20$ нм, $n_1 = 1.14$, $n_2 = 1.22$, $\lambda_0 = 500$ нм. Вставка: зависимость показателя преломления от глубины фотонного кристалла, показан участок от 20.0 до 20.8 мкм

Это приводит нас к идее обратного проектирования одномерных ФК путем аппроксимации любого заданного спектра отражения этими узкими запрещенными зонами. Естественное ограничение, накладываемое на задаваемый спектр, состоит в том, что он не должен иметь слишком узких спектральных особенностей: спектральная ширина особенности не

должна быть меньше минимальной ширины запрещенной зоны.

Пусть $A(\lambda)$ – спектр отражения, для которого мы хотим подобрать соответствующую структуру одномерного ФК. Сделаем эту функцию дискретной: пусть этот спектр состоит из N точек $a_i(\lambda_i)$, $i \in [1, N]$. Пусть кристалл имеет M слоев, толщина m -ого слоя d_m , оптический путь на каждом m -ом слое равен $l_m = n_m d_m$, $x_m = \sum_{k=1}^m n_k d_k$ – оптический путь от поверхности ФК до начала $(m+1)$ -го слоя, $m \in [1, M]$. Показатель преломления меняется от n_1 до n_2 . Тогда, в соответствии с уравнением (6), получим выражение для показателя преломления m -го слоя:

$$n(x_m) = \Delta n \left[C_1 \sum_{i=1}^N a_i(\lambda_i) \sin\left(\frac{4\pi}{\lambda_i} x_m + \phi_i\right) + C_2 \right] + n_1. \quad (7)$$

Здесь C_1 , C_2 – нормировочные коэффициенты, которые выбраны таким образом, чтобы выражение в квадратных скобках попадало в интервал $[0, 1]$. $\Delta n = n_2 - n_1$. Так, например, пусть для каждого оптического расстояния x_m сумма N гармонических функций равна:

$$S_m = \sum_{i=1}^N a_i(\lambda_i) \sin\left(\frac{4\pi}{\lambda_i} x_m + \phi_i\right), \quad (8)$$

и $S_m^{\max}$, $S_m^{\min}$ – максимальное и минимальное значения S_m на протяжении всего кристалла соответственно, то $C_1 = \frac{1}{S_m^{\max} - S_m^{\min}}$, $C_2 = \frac{S_m^{\min}}{S_m^{\max} - S_m^{\min}}$. Остается вопрос выбора фазы ϕ_i . Для каждой i -ой гармонической функции фаза выбирается следующим образом: $\phi_i = 2\pi \frac{i}{N} \frac{L}{\lambda_m}$, где λ_m – средняя длина волны спектрального диапазона, в котором решается обратная задача. Такая зависимость была выбрана, чтобы равномерно распределить по толщине кристалла возникающие между близкими гармониками биения.

Примеры решения обратной задачи. Для использования описанного выше метода в случае каждого заданного спектра необходимо выбрать суммарную толщину кристалла L . Далее кристалл разбивается на $M = L/\delta l$ слоев, толщина каждого слоя δl много меньше длины волны света. В данной работе выбрана величина $\delta l = 20$ нм.

В качестве первого примера была смоделирована структура одномерного ФК, спектр отражения которого представляет собой треугольную функцию шириной от 470 до 710 нм с вершиной на 590 нм, значение функции в вершине 0.9 – такой выбор обусловлен тем, что функция отражения не может превосходить

1, и при этом единичное значение коэффициента отражения фотонного кристалла может быть получено слишком легко и тривиально. Суммарный оптический путь $L = 50000$ нм, количество слоев $M = 2500$, число гармонических функций $N = 256$. В качестве предельных значений показателей преломления слоев были выбраны $n_1 = 1.14$ и $n_2 = 1.22$. Сравнение задаваемого спектра отражения и спектра отражения, рассчитанного рекуррентным методом для данной структуры ФК, представлено на рис. 2а, а вид данной структуры показан на рис. 2б. Спектр достаточно близок к желаемому, имеются паразитные осцилляции, вызванные интерференцией Фабри–Перо на границах структуры.

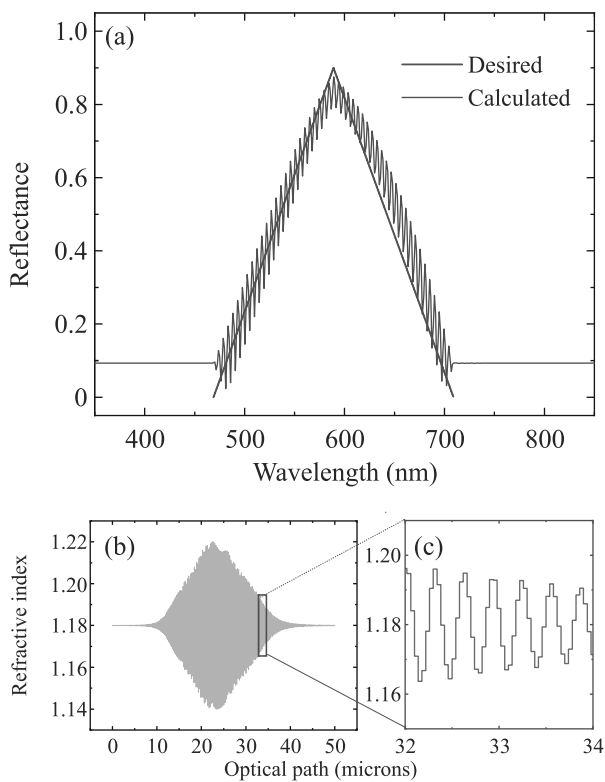


Рис. 2. (Цветной онлайн) Теоретические расчеты для фотонного кристалла со спектром отражения в виде треугольника: (а) – задаваемый спектр отражения и спектр отражения, рассчитанный с помощью рекуррентного метода; (б) – представление структуры данного кристалла как зависимость показателя преломления от оптического пути внутри кристалла; (с) – увеличенный участок от 32 до 34 мкм

Для выяснения значимости такого параметра, как толщина структуры, была смоделирована серия фотонных кристаллов с треугольной формой спектрального отклика. В пределах серии ставилось различное ограничение на суммарную оптическую толщину структуры L от 10 до 50 мкм. Результаты мо-

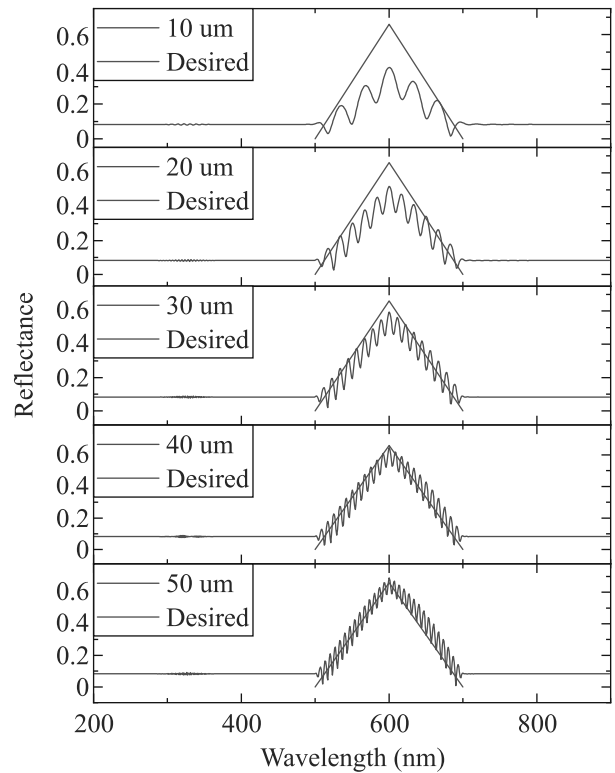


Рис. 3. (Цветной онлайн) Теоретический расчет фотонного кристалла с треугольным спектром отражения в сравнении с желаемым спектром для значений суммарной оптической толщины структуры L от 10 до 50 мкм

делирования представлены на рис. 3. Заметно, что при увеличении толщины структуры уменьшается амплитуда и увеличивается частота паразитных осцилляций, спектр постепенно приближается к желаемому. Отметим, что число гармонических функций, которые используются для приближения спектра, во всех случаях постоянно и равно $N = 256$, таким образом, их число не влияет на паразитные осцилляции. Отметим, что на длине волны 300 нм имеется незначительный артефакт – ФЗЗ второго порядка.

В качестве второго примера был смоделирован ФК со спектром отражения в виде параболы шириной от 580 до 820 нм с вершиной на 700 нм. Суммарный оптический путь $L = 250000$ нм, предельные значения показателя преломления те же, что и для ФК с треугольным спектром. Сравнение задаваемого и рассчитанного спектров представлено на рис. 4а, вид структуры ФК показан на рис. 4б. Теоретический спектр достаточно хорошо аппроксимирует заданный.

Изготовление экспериментальных образцов. Для экспериментальной проверки предлагаемого метода были изготовлены одномерные

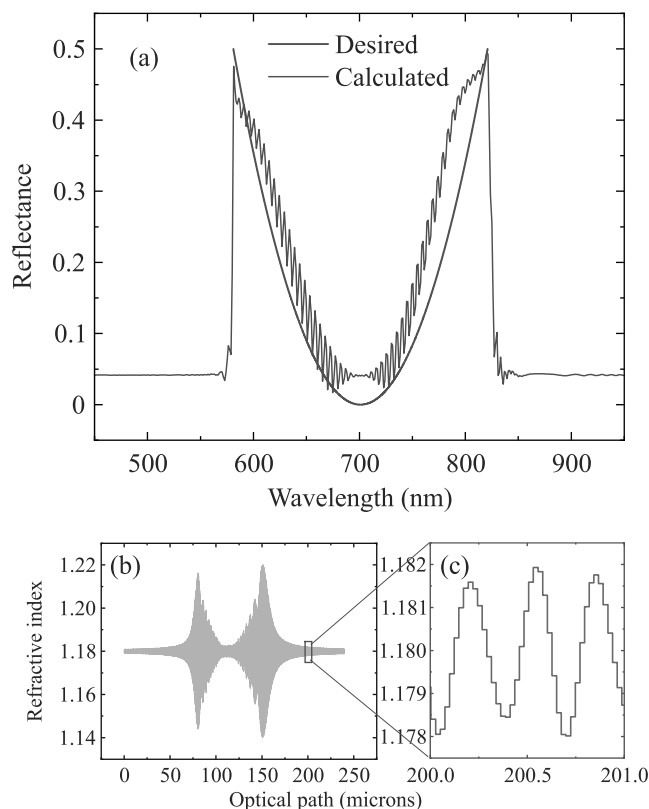


Рис. 4. (Цветной онлайн) Теоретические расчеты для фотонного кристалла со спектром отражения в виде параболы: (a) – задаваемый спектр отражения и спектр отражения, рассчитанный с помощью рекуррентного метода; (b) – представление структуры данного кристалла как зависимости показателя преломления от оптического пути внутри кристалла; (c) – увеличенный участок 200–201 мкм

фотоннокристаллические структуры и измерены их оптические спектры. В данной работе для изготовления одномерных ФК используется методика электрохимического травления кремния, описанная в [28]. Было показано, что при помощи данной методики можно изготавливать фотонные кристаллы с тысячами слоев, при этом оптические потери определяются главным образом рэлеевским рассеянием, не превосходят нескольких процентов для середины оптического диапазона даже для образцов толщиной 100 мкм и быстро падают с ростом длины волны.

В этой работе использовались следующие параметры процесса травления: сырьем является кристаллический кремний ориентации поверхности (100), удельным сопротивлением 0.005 Ом·см, минимальная и максимальная плотности токов $j_{\min} = 40 \text{ мА/см}^2$, $j_{\max} = 160 \text{ мА/см}^2$, в качестве электролита используется водно-спиртовой рас-

твор фтороводородной кислоты (HF) в массовой концентрации 28 %.

На основе полученных расчетов были изготовлены опытные образцы одномерных ФК, их модуляция показателя преломления соответствовала изображенным на рис. 2b и 4b. Параметры образцов (профиль $n(x)$ и толщина L) соответствовали расчетным. Измерение оптических спектров выполнялось по методике, описанной в [28]. Спектры отражения полученных образцов снимались с помощью лабораторного спектрометра OceanInsight QEPRO при нормальном падении. Источником света служила галогеновая лампа со спектральным диапазоном 400–1200 нм. Измеренные спектры отражения для обоих примеров представлены на рис. 5, 6.

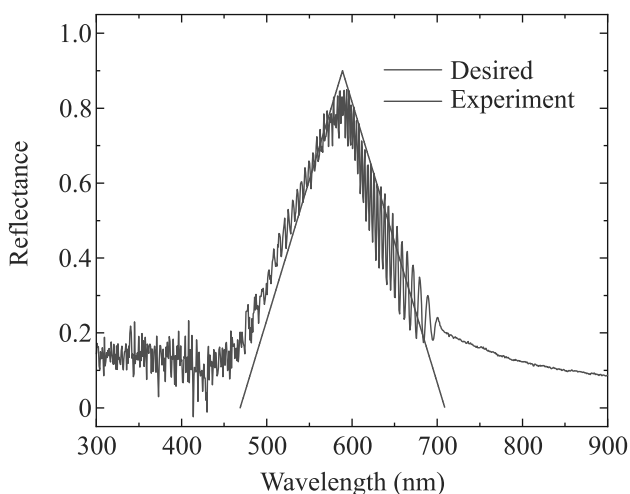


Рис. 5. (Цветной онлайн) Экспериментальный спектр коэффициента отражения ФК в сравнении с желаемой функцией спектрального отклика, имеющей форму треугольника

Как можно увидеть, экспериментальные спектры находятся в хорошем соответствии с изначально заданными спектрами, как по форме, так и по положению. Так же, как и на теоретических графиках, присутствуют паразитные осцилляции, амплитуда которых не превышает 10 % от величины полезного сигнала. Для случая параболического спектра на краях диапазона имеются уширения, связанные с конечной минимальной шириной запрещенной зоны ФК. Экспериментально полученная форма функции в заданной области соответствует заданной.

Заключение. Был продемонстрирован новый метод обратного проектирования одномерных ФК, позволяющий по заданной спектральной функции коэффициента отражения построить структуру ФК как зависимость показателя преломления от глуби-

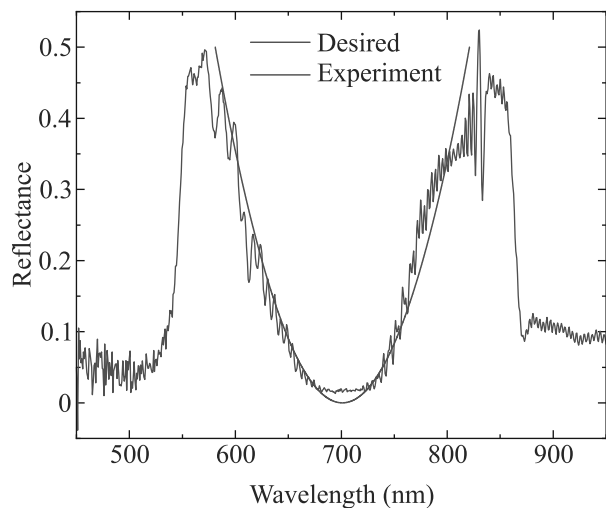


Рис. 6. (Цветной онлайн) Экспериментальный спектр коэффициента отражения ФК в сравнении с желаемой функцией спектрального отклика, имеющей форму параболы

ны структуры. Показаны примеры применения метода на спектральных функциях простой формы. Метод подтвержден экспериментально, образцы ФК были изготовлены при помощи электрохимического травления кремния. Рассматриваемый метод может быть пригоден для других методов изготовления, в которых имеется техническая возможность задавать произвольный пространственный профиль $n(x)$, например, электрохимическое травление алюминия, титана и двухфотонная фотополимеризация с градиентным изменением показателя преломления.

Авторы выражают благодарность за финансовую поддержку этой работы Российским научным фондом, проект 21-72-10103, <https://rscf.ru/en/project/21-72-10103/>.

1. E. Yablonovitch. Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
2. S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
3. M. Ashurov, A. Baranchikov, and S. Klimonsky, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**(17), 9630 (2020).
4. S. Noda, M. Fujita, and T. Asano, Nat. Photonics **1**(8), 449 (2007).
5. J. Martorell, R. Vilaseca, and R. Corbalan, Appl. Phys. Lett. **70**(6), 702 (1997).
6. M. Martemyanov, E. Kim, T. Dolgova, A. Fedyanin, O. Aktsipetrov, and G. Marowsky, Phys. Rev. B **70**(7), 073311 (2004).

7. M. Minkov, I. A. D. Williamson, L. C. Andreani, D. Gerace, B. Lou, A. Y. Song, T. W. Hughes, and S. Fan, ACS Photonics **7**(7), 1729 (2020).
8. J. Jensen and O. Sigmund, Laser Photonics Rev. **5**, 308 (2011).
9. C. Lalau-Keraly, S. Bhargava, O. Miller, and E. Yablonovitch, Opt. Express **21**, 21693 (2013).
10. W. Chen, K. Diest, C.-Y. Kao, D. E. Marthaler, L. A. Sweatlock, and S. Osher, *Gradient Based Optimization Methods for Metamaterial Design*, Springer Netherlands, Dordrecht (2013), c. 175.
11. L. Fahey, F. Amirkulova, and A. Norris, J. Acoust. Soc. Am. **146**(4), 2830 (2019).
12. J. Geremia, J. Williams, and H. Mabuchi, Phys. Rev. E Statistical, nonlinear, and soft matter physics **66**, 066606 (2003).
13. S. Boyd and L. Vandenberghe, *Convex Optimization*, Cambridge University Press, Cambridge (2004).
14. A. Y. Piggott, J. Lu, K. G. Lagoudakis, J. Petykiewicz, and T. M. Babinec, Nat. Photonics **9**(6), 374 (2015).
15. Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, Nature **521**, 436 (2015).
16. Y. Lecun and Y. Bengio, The handbook of Brain Theory and Neural Networks **1**, 255 (1995).
17. A. Jain, J. Mao, and K. Mohiuddin, Computer **29**(3), 31 (1996).
18. P. Domingos, *The Master Algorithm: How the Quest for the Ultimate Learning Machine Will Remake Our World*, Basic Books, N.Y. (2015).
19. L. Deng, Y. Xu, and Y. Liu, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **52**, 101073 (2022).
20. A. Nikulin, I. Zisman, M. Eich, A. Y. Petrov, and A. Itin, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **52**, 101076 (2022).
21. Z. Liu, D. Zhu, L. Raju, and W. Cai, Adv. Sci. **8**(5), 2002923 (2021).
22. P. R. Wiecha, A. Arbouet, C. Girard, and O. L. Muskens, Photon. Res. **9**(5), B182 (2021).
23. B. Duan, B. Wu, J.-h. Chen, H. Chen, and D.-Q. Yang, Frontiers in Materials **8**, 1 (2022).
24. J. Sanchez-Dehesa, A. Hakansson, and L. Sanchis, *Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering*, Bellingham, WA (2004), v. 5450, p. 200.
25. A. Luce, A. Mahdavi, F. Marquardt, and H. Wankerl, JOSA A **39**(6), 1007 (2022).
26. Т. Крылова, *Интерференционные покрытия*, Машиностроение, Л. (1976).
27. P. Baumeister, Appl. Opt. **25**(16), 2644 (1986).
28. S. E. Svyakhovskiy, A. I. Maydykovsky, and T. V. Murzina, J. Appl. Phys. **112**(1), 013106 (2012).