Квазикристаллические структуры с узкополосной спектрально-угловой селективностью

В. А. Чистяков⁺¹⁾, М. С. Сидоренко⁺, А.Д. Саянский⁺, М. В. Рыбин^{+*}

+Университет ИТМО, Физический факультет, 191002 С.-Петербург, Россия

* Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 22 марта 2023 г. После переработки 12 апреля 2023 г. Принята к публикации 17 апреля 2023 г.

Методы дизайна в обратном пространстве позволяют получать структуры с желаемыми свойствами. Мы представляем результаты по разработке квазикристаллических фотонных структур, которые обеспечивают селективное рассеяние электромагнитной волны, падающей на образец. Максимумы Фурьеобраза искомого распределения диэлектрической проницаемости в обратном пространстве были расположены вдоль двух дуг на сфере Эвальда, соответствующей рассеянию волны с требуемыми параметрами: длина волны и угол падения. Переход к прямому пространству позволил найти распределение материала. После бинаризации показателя преломления формировалась структура с малым диэлектрическим контрастом. Теоретическое исследование свойств полученной структуры подтвердило спектральноугловую селективность рассеяния. Результаты численных расчетов показывают возможность получения эффективного рассеяния и поглощения электромагнитной энергии до 94 % в узкой полосе частот и для узкого диапазона углов падения при диэлектрическом контрасте двух материалов 1.07.

DOI: 10.31857/S1234567823100051, EDN: cllimc

За последние десятилетия широкое распространение получили фотонные кристаллы (Φ K) [1–3] и другие резонансные структуры [4–6], обеспечивающие возможность управления электромагнитным излучением. Ключевым свойством Φ K является существование полосы запрещенных частот, возникающей вследствие брэгговского рассеяния на кристаллических слоях в структурах с периодически меняющимися показателями преломления. Однако периодичность фотонного кристалла ограничивает количество возможных симметрий, образующих фиксированное число возможных пространственных групп.

К настоящему времени методы разработки фотонных структур претерпели смену парадигмы от интуитивных методов проектирования к методам обратного дизайна с использованием численной оптимизации, включая искусственный интеллект [7–11]. Эти методы приводят к сложному распределению материала по пространству, однако такие структуры обладают требуемой функциональностью. Благодаря достижениям цифровых аддитивных технологий было продемонстрировано множество фотонных структур, использующих более сложную структуру по сравнению с ФК: гипероднородные структуры [12, 13], квазикристаллы [14], муаровые решетки [15] и поверхности Фурье [16].

Недавно в работе [17] на основе метода дизайна в обратном пространстве была продемонстрирована квазикристаллическая структура, обладающая полной запрещенной зоной при малом диэлектрическом контрасте, которого можно достичь, используя полимерные материалы. В прямом пространстве такие структуры соответствуют наложению множества решеток с равномерным распределением ориентаций в полном телесном угле 4π . Для двумерного случая было продемонстрировано, что отсутствие трансляционной симметрии у упорядоченных квазикристаллических структур не сказывается на величине модуляции локальной плотности состояний электромагнитного поля [18]. Кроме этого, интерес представляют исследования локализации волн в апериодических системах [19–23]. В случае неупорядоченных структур одним из наиболее интригующих свойств является эффект андерсоновской локализации [24], который наблюдался во множестве структур [25, 26]. Также в недавней работе было продемонстрировано экспериментальное наблюдение внутренней локализации света в 3D икосаэдрическом квазикристалле [14]. В апериодических структурах эффекты рассеяния и локализации возникают в широкой полосе час-

 $^{^{1)}}$ e-mail: v.chistyakov@metalab.ifmo.ru



Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схематическое изображение квазикристаллической структуры в реальном пространстве, сгенерированное на основе 40 максимумов в обратном пространстве. Длина стороны в продольном сечении составляет $L_y = 10\lambda_0$, а для поперечного сечения $L_x = 50\lambda_0$, где λ_0 – рабочая длина волны. (b) – Построение Эвальда при нормальном падении волны \mathbf{k}_{inc} , сфера Эвальда (оранжевая кривая) пересекает максимумы в обратном пространстве (черные точки), что приводит к эффективному рассеянию волны \mathbf{k}_{sca} в поперечном направлении. (c) – Построение Эвальда при большой длине волны и нормальном падении волны \mathbf{k}_{inc} , соответствующее отсутствию рассеяния. (d) – Построение Эвальда при большой длине волны и нормальном падении, соответствующее отсутствию рассеяния

тот и для разных направлений. При этом о возможности сделать структуру, селективно рассеивающую волну в заданном направлении и на заданных частотах, до сих пор не сообщалось [27].

В этой работе мы предлагаем низкоконтрастные квазикристаллические структуры со спектральноугловой селективностью рассеяния падающей электромагнитной волны. Для создания структуры мы используем метод обратного дизайна. Используя построение Эвальда, мы задаем в обратном пространстве некоторую функцию, у которой значения отличные от нуля, или максимумы расположены таким образом, чтобы излучение определенной длины волны и направления эффективно рассеивалось структурой образца. Мы выполнили рассчеты распространения электромагнитной волны в образцах, с учетом реалистичного коэффициента поглощения материала, которые полностью подтверждают наличие ожидаемого эффекта.

В электромагнитных задачах рассеяние задается пространственным распределением диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{r})$. Для определения квазикристаллической структуры с желаемыми свойствами был использован дизайн в обратном пространстве [28]. Напомним, что в низкоконтрастных диэлектрических структурах рассеяние падающей волны с волновым вектором \mathbf{k}_{inc} в волну с волновым вектором \mathbf{k}_{sca} зависит от интенсивности Фурье образа $\varepsilon(\mathbf{r})$ в точке с координатами $\mathbf{k}_{sca} - \mathbf{k}_{inc}$. Для определения условий возникновения рассеяния удобно использовать построение Эвальда. Сфера радиуса $k_0 = |\mathbf{k}_{inc}|$ с центром в $-\mathbf{k}_{inc}$ определяет все возможные направления упругого рассеяния. В случае попадания максимума Фурье-образа $\varepsilon(\mathbf{r})$ на сферу Эвальда возникает рассеяние для соответствующего направления. Для рассматриваемой нами задачи сфера Эвальда соответствует окружности. В обратном пространстве мы задаем максимумы вдоль дуг окружности, которые определяют рассеяние волны, падающей по нормали. Таким образом, рассеянные волны будут распространятся внутри образца в секторах, образованных дугами (рис. 1b). На рисунках 1с и d качественно показаны два случая: отклонение по углу от нормали и отклонение от заданной длины волны. Видно, что в этих случаях сфера Эвальда не пересекает максимумы и эффективного рассеяния не возникает, а структура оказывается прозрачной.

Переход к распределению коэффициента преломления в прямом пространстве осуществляется при помощи преобразования Фурье. Чтобы в прямом пространстве получить вещественное распределение, максимумы в обратном пространстве должны быть распределены симметрично, относительно начала координат. Это дополнительное условие приводит к появлению вспомогательных максимумов в нижней полуплоскости (рис. 1b-d).

Технически нам было удобнее задавать распределение диэлектрической проницаемости в прямом пространстве при помощи набора наложенных синусоидальных функций [17, 18]. Поэтому на дугах вдоль окружности радиуса, заданного требуемой длиной волны λ_0 , формируется набор максимумов, соответствующих параметрам таких решеток. Мы ограничиваем дуги, вдоль которых имеются максимумы в диапазоне углов $[-\alpha_c...\alpha_c]$, где $\alpha_c = 1/\overline{n}$, а \overline{n} – средний показатель преломления среды. Изображе-



Рис. 2. (a) – Иллюстрация вычисления распределения показателя преломления путем наложения синусоидальных функций, соответствующих в обратном пространстве максимумам Фурье-образа $\varepsilon(\mathbf{r})$. (b) – Изображение структуры с непрерывным распределением показателя преломления, сгенерированное на основе 40 максимумов. (c) – Изображение структуры после бинаризации показателя преломления

ния решеток, направления и период которых задаются в соответствии с максимумами, распределенными вдоль дуг, показаны на рис. 2а. При этом распределение материала квазикристаллической структуры задается суперпозицией синусоидальных одномерных решеток (рис. 2b):

$$\Delta n_g(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} \Delta n_i \cos\left(\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{r} + \varphi_i\right), \qquad (1)$$

где Δn_i – амплитуда модуляции показателя преломления для решетки с индексом *i*, *N* – общее количество решеток на окружности в верхней полуплоскости, \mathbf{g}_i – направление нормали к решетке с индексом *i*, φ_i – случайная фаза. Отметим, что при одинаковой фазе всех решеток в начале координат появляется особенность, которая может приводить к нежелательным эффектам. Случайные фазы фактически смещают эту особенность далеко за пределы образца.

Для получения структуры, состоящей только из двух диэлектрических материалов, применяется процедура бинаризации функции непрерывного показателя преломления $\Delta n_q(\mathbf{r})$:

$$n_b(\mathbf{r}) = \overline{n} + \Delta n \operatorname{sign} \left[\Delta n_g(\mathbf{r}) \right], \qquad (2)$$

где Δn – отклонение коэффициента преломления от среднего значения \overline{n} . В результате квазикристаллическая структура с желаемыми свойствами может быть изготовлена из двух материалов с коэффициентами преломления $n_1 = \overline{n} + \Delta n$ и $n_2 = \overline{n} - \Delta n$. Пример такой структуры представлен на рис. 2с.

При изучении апериодических структур мы не можем использовать теорему Блоха, поэтому требуется проводить исследования полноразмерных структур. В данной работе мы исследуем двумерную квазикристаллическую структуру, которую можно реализовать экспериментально для ТМполяризованного электромагнитного излучения,

помещая образец в плоскопараллельный металлический волновод. На рисунке 1а схематически показана квазикристаллическая структура, сгенерированная на основе формул (1) и (2) для N = 40решеток. Структура имеет размеры $L_x = 50\lambda_0$ и $L_y = 10\lambda_0, \ \lambda_0 = 2\pi/k_0$ – рабочая длина волны, на которой должно происходить эффективное рассеяние света при условии нормального падения электромагнитной волны. Структура состоит из материалов с коэффициентами преломления $n_1 = 1.48$ и $n_2 = 1.58$, которые соответствуют широкодоступным полимерным материалам, используемых для трехмерной печати [29, 30]. Технологический процесс позволяет локально изменять плотность напечатанного материала, что обеспечивает диэлектрический контраст. Также мы учитываем поглощение у обоих материалов $\tan \delta = 0.003$. Важно отметить, что описанные результаты имеют только количественную зависимость от выбора конкретных значений коэффициентов преломления и величины контраста. Вдоль оси х мы использовали периодические граничные условия, которые позволяют предсказать результаты для протяженных структур. На границах, через которые проходит падающее излучение, было добавлено четвертьволновое просветляющие покрытие, чтобы минимизировать нежелательное рассеяние, связанное с прохождением раздела двух сред. Внешней средой для структуры является воздух с показателем преломления, близким к 1, поэтому коэффициент преломления для просветляющего покрытия $n_c = \sqrt{\overline{n}}$, а толщина слоя $L_c = \lambda_0 / 4n_c.$

Теоретические расчеты проводились при помощи коммерческого программного обеспечения для моделирования распространения электромагнитных волн CST Studio Suite. На рисунке 3а показаны спектры пропускания T и отражения R при условиях нормального падения. На спектре пропускания наблю-



Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Голубая и оранжевая линия представляют, соответственно, зависимости коэффициента прохождения T и отражения R от безразмерной частоты λ_0/λ при нормальном падении ТМ-волны. (b) – Зависимость коэффициента поглощения энергии от безразмерной частоты λ_0/λ при нормальном падении ТМ-волны

дается резкий провал на полосе вокруг безразмерной частоты $\lambda_0/\lambda = 1$ на фоне почти полного пропускания вне этой полосы. При этом спектр отражения во всем диапазоне не превышает 0.1. Волна, рассеявшись в поперечном направлении, распространяется в образце до тех пор, пока не поглотится или не перерассеется в направлениях пропускания или отражения. Чтобы определить количественные характеристики квазикристаллической структуры, рассмотрим величину захваченной энергии. Закон сохранения энергии позволяет определить поглотившуюся энергию как A = 1 - T - R. Спектр поглощения демонстрирует пик на длинах волн, соответствующих полосе непрозрачности структуры $\lambda \approx$ $\approx \lambda_0$ (рис. 3b). Максимум пика поглощения достигает 94 %. Таким образом, квазикристаллическая структура демонстрирует выраженную спектральную селективность поглощения.

Теперь исследуем угловую селективность предложенной квазикристаллической структуры. Использованные для увеличения протяженности образца периодические граничные условия позволяют задать падающую волну, распространяющуюся вдоль оси y. При этом для случая наклонного падения период вычислительной области изменяется с длиной волны. Поэтому вместо изменения угла падения мы поворачиваем саму структуру в обратном пространстве на угол θ , оставляя внешние границы образца неизменными. Полученные при таком подходе результаты не дадут качественного отличия от случая изменения угла падения волны на образец.

На рисунке 4а представлена зависимость спектра пропускания от угла поворота квазикристаллической структуры θ . Видно, что минимум пропускания соответствует длине волны $\lambda = \lambda_0$ и $\theta = 0$. По мере изменения угла наблюдается расщепление провала на две полосы, которые быстро теряют свою интенсивность и при углах $\theta > 10$ практически исчезают. Зависимость спектра поглощения показана на рис. 4b. Видно, что характер особенностей в спектрах пропускания и поглощения полностью совпадает.



Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектральные характеристики в зависимости от ориентации осей в обратном пространстве относительно границ образца θ° и безразмерной частоты λ_0/λ . (а) – Спектр коэффициента прохождения T. (b) – Спектр коэффициента поглощения A

Поведение спектральных особенностей хорошо согласуется с моделью на основе построения Эвальда. При нормальном падении волна рассеивается только при выполнении условия $\lambda = \lambda_0$, когда сфера Эвальда перекрывается со всеми максимумами вдоль двух дуг (см. рис. 1). Изменение длины волны соответствует изменению радиуса сферы Эвальда и нарушению условия перекрытия с максимумами. Отметим, что для образцов конечного размера максимумы в обратном пространстве размываются из-за соотношения неопределенности координатаволновой вектор (импульс). При небольшом отклонении от нормального падения в обратном пространстве остается перекрытие сферы Эвальда лишь с частью максимумов. В результате при отклонении угла от нулевого значения в спектрах пропускания наблюдаются два провала, которые определяются пересечением одного из максимумов со сферой Эвальда большего радиуса и другого максимума со сферой Эвальда меньшего радиуса. Пересечение лишь с частью максимумов приводит к снижению эффективности интегрального рассеяния падающей волны, что приводит к деградации спектральных особенностей, наблюдаемой на рис. 4а.

Для подтверждения предсказания о формировании селективного рассеяния электромагнитной волны в поперечном направлении были проведены вычисления вектора потока энергии. На рисунке 5 показано распределение по образцу значения величины и направления вектора Пойнтинга для трех разных длин волн. Для длин волны $\lambda_0 = 0.9\lambda$ (рис. 5а) и $\lambda_0 = 1.1\lambda$ (рис. 5с) структура прозрачная, и направление вектора Пойнтинга в среднем соответству-



Рис. 5. (Цветной онлайн) Нормированная интенсивность потока мощности электромагнитного поля в структуре при прохождении ТМ-поляризованной плоской волны для нормального падения ((a), (b), (c) – $\lambda_0/\lambda = 0.9, \ \lambda_0/\lambda = 1, \ \lambda_0/\lambda = 1.1$). Белые стрелки показывают направление потока

ет направлению падения. Для рабочей длины волны $\lambda = \lambda_0$ наблюдается другая картина (рис. 5b). Образец перенаправляет энергию падающей волны в перпендикулярном направлении, как предполагалось при дизайне квазикристаллической структуры в обратном пространстве с использованием построения Эвальда.

Таким образом, мы продемонстрировали квазикристаллическую структуру с частотно-угловой селективностью рассеяния электромагнитных волн, заданную на основе метода дизайна в обратном пространстве. Однородное распределение максимумов по дугам в обратном пространстве соответствует множеству решеток в прямом пространстве. Рассеяние и последующее поглощение электромагнитных волн в такой структуре наблюдается только при заданном угле падения и на определенной частоте. Мы показали, что можно достичь до 94% селективного поглощения при низком контрасте материалов 1.07. Картина распределения потока мощности электромагнитного поля в плоскости структуры продемонстрировала направленный перенос энергии вдоль структуры только для заданной длины волны. Мы ожидаем, что предложенные квазикристаллические структуры откроют широкие возможности при создании новых фотонных устройств с беспрецедентными свойствами.

Авторы благодарят А. Ю. Петрова за обсуждение идеи работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 20-79-10316).

- 1. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).
- J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, and S. Fan, Nature 386, 143 (1997).
- J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, Princet. Univ. Press. Princeton, NJ [ua] (2008).
- M. V. Rybin and M. F. Limonov, Phys.-Uspekhi 62, 823 (2019).
- 5. P. Tonkaev and Y. Kivshar, JETP Lett. 112, 615 (2020).
- A.M. Chernyak, M.G. Barsukova, A.S. Shorokhov, A.I. Musorin, and A.A. Fedyanin, JETP Lett. 111, 46 (2020).
- S. Molesky, Z. Lin, A. Y. Piggott, W. Jin, J. Vucković, and A. W. Rodriguez, Nat. Photonics 12, 659 (2018).
- M. M. R. Elsawy, S. Lanteri, R. Duvigneau, J. A. Fan, and P. Genevet, Laser Photonics Rev. 14, 1900445 (2020).
- K. R. Safronov, V. O. Bessonov, and A. A. Fedyanin, JETP Lett. 114, 321 (2021).
- P. R. Wiecha, A. Arbouet, C. Girard, and O. L. Muskens, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. 9, B182 (2021).
- P. R. Wiecha, A.Y. Petrov, P. Genevet, and A. Bogdanov, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. 52, 101084 (2022).
- P. M. Piechulla, B. Fuhrmann, E. Slivina, C. Rockstuhl, R. B. Wehrspohn, and A. N. Sprafke, Adv. Opt. Mater. 9, 2170068 (2021).
- W. Man, M. Florescu, K. Matsuyama, P. Yadak, G. Nahal, S. Hashemizad, E. Williamson, P. Steinhardt, S. Torquato, and P. Chaikin, Opt. Express 21, 19972 (2013).
- A. D. Sinelnik, I. I. Shishkin, X. Yu, K. B. Samusev, P. A. Belov, M. F. Limonov, P. Ginzburg, and M. V. Rybin, Adv. Opt. Mater. 8, 2001170 (2020).
- P. Wang, Y. Zheng, X. Chen, C. Huang, Y.V. Kartashov, L. Torner, V.V. Konotop, and F. Ye, Nature 577, 42 (2020).
- N. Lassaline, R. Brechbühler, S. J. Vonk, K. Ridderbeek, M. Spieser, S. Bisig, B. Le Feber, F. T. Rabouw, and D. J. Norris, Nature 582, 506 (2020).
- L. Maiwald, T. Sommer, M.S. Sidorenko, R. R. Yafyasov, M. E. Mustafa, M. Schulz, M. V. Rybin, M. Eich, and A.Y. Petrov, Adv. Opt. Mater. 10, 2100785 (2022).
- V. A. Chistyakov, M. S. Sidorenko, A. D. Sayanskiy, and M. V. Rybin, Phys. Rev. B 107, 014205 (2023).
- K. C. Neuman and S. M. Block, Rev. Sci. Instrum. 75, 2787 (2004).

- 20. K. X. Wang, Z. Yu, V. Liu, A. Raman, Y. Cui, and S. Fan, Energy Environ. Sci. 7, 2725 (2014).
- T. M. Mercier, T. Rahman, C. Krishnan, E. Khorani, P. J. Shaw, M. E. Pollard, S. A. Boden, P. G. Lagoudakis, and M. D. Charlton, Nano Energy 84, 105874 (2021).
- 22. C. Guo, T. Sun, F. Cao, Q. Liu, and Z. Ren, Light Sci. Appl. 3, e161 (2014).
- 23. R. Saive, Progress in Photovoltaics: Research and Applications **29**, 1125 (2021).
- 24. P.W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958).
- 25. S. John, Phys. Rev. Lett. 58, 2486 (1987).

- L. Levi, M. Rechtsman, B. Freedman, T. Schwartz, O. Manela, and M. Segev, Science 332, 1541 (2011).
- 27. A. Petrov (private communications in December of 2021).
- 28. L. Maiwald, S. Lang, D. Jalas, H. Renner, A. Y. Petrov, and M. Eich, Opt. Express 26, 11352 (2018).
- 29. Y. Kim, M. M. Tentzeris, and S. Lim, Materials 12, 402 (2019).
- G. Boussatour, P.-Y. Cresson, B. Genestie, N. Joly, and T. Lasri, IEEE Microw. Wirel. Compon. Lett. 28, 374 (2018).