

Реконструкция структуры фотонного кристалла по заданному фазовому отклику

П. С. Емельянцев,^{1,*} С. Е. Свяховский^{1,†}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра общей физики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 08.05.2024; после доработки 10.10.2024; подписана в печать 11.11.2024)

Мы представляем метод проектирования одномерных фотонных структур, фазовый отклик которых имеет заранее заданную форму и особенности. Разработан алгоритм построения таких фотонно-кристаллических структур, выполнено численное моделирование их фазового и спектрального откликов.

PACS: 42.70.Qs УДК: 535.44

Ключевые слова: фотонные кристаллы, спектроскопия, обратное проектирование, пористый кремний, фаза коэффициента отражения.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.80.2520401](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.80.2520401)

ВВЕДЕНИЕ

Фотонные кристаллы (ФК) — твердотельные структуры, в которых показатель преломления модулирован с периодом порядка длины волны света видимого диапазона. Благодаря такому устройству структуры ФК возможно возникновение фотонных запрещенных зон (ФЗЗ) — областей частот, на которых распространение света внутри кристалла невозможно [1], что возникает благодаря интерференции вторичных волн, отраженных от периодов ФК [2, 3]. Благодаря исключительной гибкости ФК в возможности управления потоком света, достигаемой за счет множества конструктивных степеней свободы, становится возможным множество разнообразных применений этих структур. В связи с этим большую популярность получила проблема решения обратной задачи построения структуры фотонного кристалла по заданным характеристикам, а именно получение фотонных структур с желаемым спектральным откликом. Большая часть существующих работ в этой области в той или иной степени включает использование машинного обучения, нейронных сетей (НС) и других подобных алгоритмов [4–6]. Также полностью математически исследована обратная задача рассеяния света и спектральная обратная задача для неомогенных диэлектрических сред, который сводятся к решению обратной задачи для уравнения Штурма-Лиувилля [7–11]. Для улучшения тех или иных характеристик ФК используются методы математической оптимизации [12, 13]. Тем не менее описанные выше методы не являются регулярными, в каждом конкретном случае существование

и единственность решения неочевидны. Нашим коллективом ранее был разработан регулярный метод решения обратной задачи восстановления структуры ФК по заданному спектру отражения [14]. В данной работе описывается модификация этого метода для решения задачи восстановления структуры ФК по заданному фазовому отклику.

Существует множество прикладных областей, в которых требуется возможность управления фазой светового пучка. Это фокусировка света [15–17], генерация векторных пучков [18, 19], управление светом [20, 21] и пр. Как правило, для этих целей используют различные метаматериалы [18], двумерные [16] или трехмерные [15] фотонные кристаллы, жидкокристаллические пространственные модуляторы света [19]. Однако на данный момент не было попыток модуляции фазы светового пучка при помощи одномерных ФК. В данной работе реализуется оригинальный алгоритм восстановления структуры одномерного ФК по заданному фазовому отклику, т.е. решение обратной задачи. Для каждого такого решения в целях верификации результатов работы алгоритма проводится решение прямой задачи, а именно численное моделирование спектрального и фазового отклика полученной структуры при помощи метода матриц распространения [22, 23].

1. ОБРАТНАЯ ФАЗОВАЯ ЗАДАЧА

Метод решения обратной задачи для фазового отклика, предлагаемый нами в данной работе, является развитием нашего метода решения обратной задачи восстановления структуры ФК по заранее заданному спектру отражения [14]. Здесь и далее мы проводим расчеты для нормального падения света.

* E-mail: emelyantsev97@mail.ru

† E-mail: sse@shg.ru

Рассмотрим одномерный ФК, показатель преломления которого модулирован следующим образом:

$$n(x) = (n_2 - n_1) \sin(k_0 x + \phi) + n_1. \quad (1)$$

Такой ФК имеет в спектре отражения очень узкую полосу отражения на длине волны λ_0 . Здесь x — оптический путь, $k_0 = \frac{4\pi}{\lambda_0}$ — волновое число, ϕ — начальная фаза; показатель отражения меняется в пределах от n_1 до $n_2 > n_1$. Идея этого способа решения обратной задачи заключается в аппроксимации любого заранее заданного спектра отражения этими узкими ФЗЗ. Для этого требуется реализовать в структуре кристалла множество таких гармонических функций.

Для вычисления спектра отражения таких структур непрерывная зависимость **1** была приближена к кусочно-постоянной, т.е. кристалл поделен 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 слоёв определяется как $d_m = \delta l / n_m$. Приемлемость аппроксимации непрерывной функции $n(x)$ кусочно-постоянной обсуждается в [25]. Пусть $A(\lambda)$ — спектр коэффициента отражения, для которого мы хотим подобрать соответствующую структуру одномерного ФК. Дискретизируем эту функцию: пусть этот спектр состоит из N точек $a_i(\lambda_i)$, $i \in [1, N]$. Пусть кристалл имеет M слоев, толщина m -го слоя d_m , оптический путь на каждом m -м 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 (1), получим итоговое выражение для алгоритма вычисления показателя преломления каждого m -го слоя:

$$n(x_m) = \Delta n \left[C_1 \sum_{i=1}^N a_i(\lambda_i) \sin \left(\frac{4\pi}{\lambda_i} x_m + \phi_i \right) + C_2 \right] + n_1 \quad (2)$$

Здесь C_1, C_2 — нормировочные коэффициенты, которые выбраны таким образом, чтобы выражение в квадратных скобках попадало в интервал $[0, 1]$, $\Delta n = n_2 - n_1$. Остается вопрос выбора фазы ϕ_i . В работе [14] для каждой i -й гармонической функции фазовый множитель был выбран следующим образом: $\phi_i = 2\pi \frac{i}{N} \frac{L}{\lambda_m}$, где λ_m — средняя длина волн спектрального диапазона, в котором решается обратная задача. Такая зависимость была выбрана, чтобы равномерно распределить по толщине кристалла возникающие между близкими гармониками биения. Данный метод был использован для создания опытных образцов ФК со спектральными откликами в виде функций простой формы (треугольник, парабола) [14], в форме контура главного здания МГУ [26], а также было реализовано спектральное кодирование последовательности из 12 цифр [27]. По сути, данный метод заключается

в разложении диэлектрического тензора фотонного кристалла в ряд Фурье, что становится возможным благодаря его периодической структуре [24]. При этом амплитуды этого разложения отвечают за спектральный отклик структуры, а фазы (аргумент комплексного члена ряда Фурье) отвечают за фазовый отклик. Поскольку разложение в ряд Фурье является регулярным, то и разработанный метод также можно считать регулярным.

В данной работе для реализации обратной задачи восстановления структуры ФК с заранее заданным фазовым откликом необходимо модифицировать алгоритм **2**. Модификация будет заключаться в том, что фаза будет задаваться не линейно, как в работе [14], а произвольным образом. При этом спектральный и фазовый отклик задаются независимо, что показано в другой нашей работе [28]. Здесь мы также будем рассматривать нормальное падение света на ФК. Для наглядности будем задавать фазу в виде различных показательных функций. Желаемый фазовый отклик будем задавать в зависимости от волнового числа $k = \frac{4\pi}{\lambda}$ таким образом, что $\phi = C \cdot (k - k_0)^p$ при $k \in [k_0 - \delta k, k_0]$ и $\phi = -C \cdot (k - k_0)^p$ при $k \in [k_0, k_0 + \delta k]$. Спектр отражения кристалла зададим таким образом, чтобы получить ФЗЗ с центром в k_0 , шириной $2\delta k$. Тогда в данном случае $a_i = 1$ при $i \in [1, N]$, $\phi_i = C \cdot (dk)^p \cdot i^p$ при $i \in [1, N/2]$, $\phi_i = -C \cdot (dk)^p \cdot i^p$ при $i \in (N/2, N]$. Здесь $C > 0$, p — задаваемые параметры, $dk = k_i - k_{i-1}$ — шаг по волновому числу. Таким образом, фаза центральной гармоники, приходящейся на центр ФК, равна 0 и уменьшается по степенной функции степени p от $C \cdot (dk)^p$ до $-C \cdot (dk)^p$ при увеличении волнового числа. Выражение $C \cdot dk^p$ требуется задать таким образом, чтобы гармоники были равномерно распределены по толщине кристалла. Если задаваемая ФЗЗ имеет центр на длине волны λ_0 и ширину $2\delta\lambda$, то $C \cdot dk^p = 2\pi L \frac{2\delta\lambda}{\lambda_0^2}$. По аналогии с **2** получаем выражение для m -го слоя:

$$n(x_m) = \Delta n \left[C_1 \sum_{i=1}^N \sin(k_i x_m + \phi_i) + C_2 \right] + n_1. \quad (3)$$

Разберем подробнее выбор нормировочных коэффициентов C_1, C_2 . Так, например, пусть для каждого оптического расстояния x_m сумма N гармонических функций равна:

$$S_m = \sum_{i=1}^N \sin(k_i x_m + \phi_i), \quad (4)$$

и S_m^{max}, S_m^{min} — максимальное и минимальное значения S_m на протяжении всего кристалла соответственно, то $C_1 = \frac{1}{S_m^{max} - S_m^{min}}$, $C_2 = \frac{S_m^{min}}{S_m^{max} - S_m^{min}}$.

При использовании вышеописанного метода требуется подобрать несколько параметров, которые обеспечат оптимальный вид спектра отражения $A(k)$ и фазового отклика $\phi(k)$. Во-первых, в случае каждого заданного фазового отклика необходимо

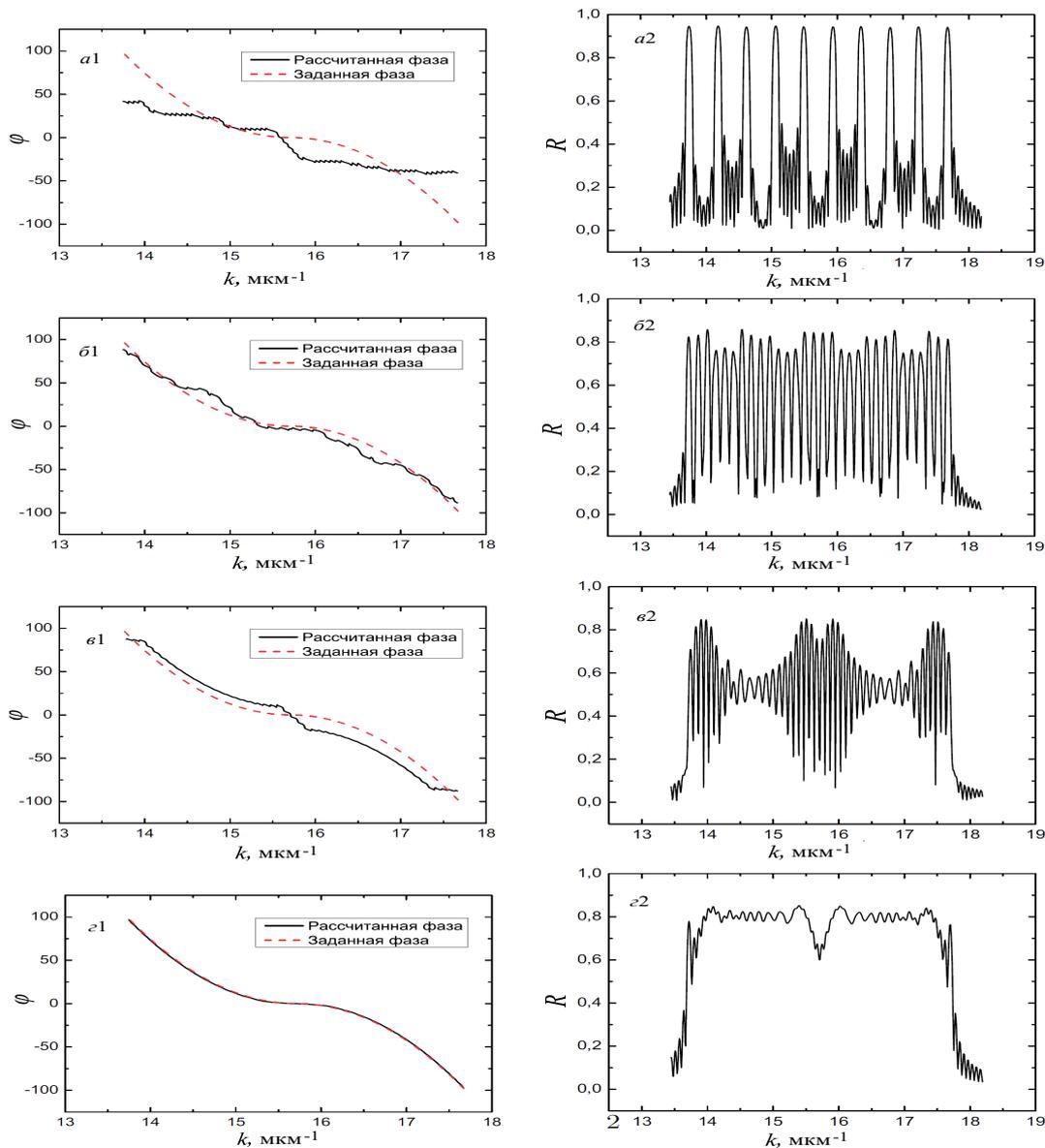


Рис. 1. Рассчитанные фазовые и спектральные отклики ФК для заданной квадратичной фазы для разного количества гармонических функций: $a1$ – $a2$ — 10 гармоник; $b1$ – $b2$ — 30 гармоник; $e1$ – $e2$ — 50 гармоник; $z1$ – $z2$) 70 гармоник

выбрать суммарную оптическую толщину фотонного кристалла L . Для простоты выберем оптическую толщину каждого слоя одинаковой и разобьем кристалл на $M = L/\delta l$ слоёв, толщина каждого слоя δl много меньше длины волны падающего света. В дальнейшем с помощью алгоритма 3 для каждого слоя находятся показатели преломления n_m и рассчитываются толщины $d_m = \delta l/n_m$.

2. ВЫБОР ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ

Подберем оптимальные параметры моделирования. На рис. 1 показаны фазовые и спектральные отклики для заданной квадратичной фазы для разного количества гармоник N . Были фиксиро-

ваны следующие параметры: толщина кристалла $L = 100$ мкм, толщина слоя $\delta l = 10$ нм. При этом кристалл разделен на $M = \frac{L}{\delta l} = 10^4$ слоев. Показатель отражения меняется от $n_1 = 1.14$ до $n_2 = 1.22$. ФЗЗ была выбрана с центром на длине волны $\lambda_0 = 800$ нм с шириной $2\delta\lambda = 200$ нм или для волновых векторов: $k_0 \approx 15,7$ мкм $^{-1}$, $2\delta k \approx 4$ мкм $^{-1}$. При таких параметрах фаза меняется от ~ -98 до ~ 98 рад. Можно увидеть, что при увеличении числа гармоник рассчитанная фаза постепенно приближается к виду заданной фазовой зависимости. При $N = 70$ рассчитанная фаза полностью совпадает с заданной и дальнейшее увеличение числа гармоник не влияет на фазовый отклик структуры. На рис. 1(а2) изображен спектр отражения для случая $N = 10$ гармоник, и поэтому в спектре наблюдается ровно 10 отдельных пиков отражения. Соответ-

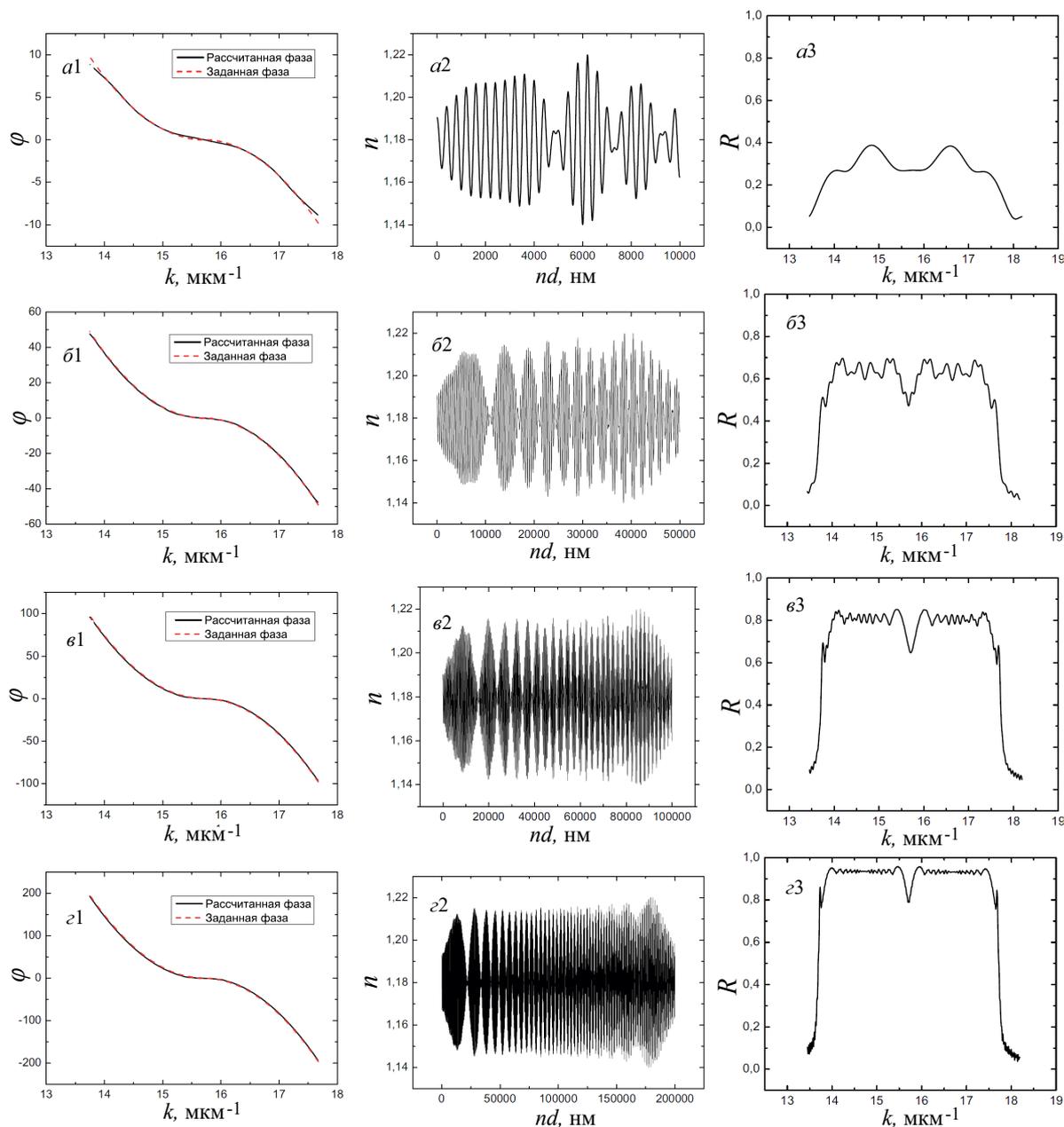


Рис. 2. Рассчитанные фазовые отклики, структура и спектр отражения ФК для заданной квадратичной фазы для разных оптических толщин кристалла: $a1$ - $a3$ — 10 мкм; $b1$ - $b3$ — 50 мкм; $e1$ - $e3$ — 100 мкм; $z1$ - $z3$ — 200 мкм

ственно при увеличении числа гармоник число пиков так же увеличивается, при этом во всех случаях эти N пиков лежат строго в пределах задаваемой ФЗЗ. При $N = 70$ пики перекрывают друг друга, образуя единую ФЗЗ с центром на 15.7 мкм^{-1} и шириной 4 мкм^{-1} . Дальнейшее увеличение числа гармоник существенно не влияет на вид спектра отражения кристалла. Стоит отметить, что для любой толщины кристалла L можно подобрать такое число гармоник N , выше которой фазовый и спектральный отклики будут иметь оптимальный вид.

Теперь подберем оптимальную оптическую толщину кристалла L для заданного квадратичного фазового отклика. При этом кристалл будет делить-

ся на слои толщиной $\delta l = 10$ нм и при увеличении толщины ФК количество слоев M также будет увеличиваться. В данном случае мы зафиксируем число гармоник $N = 500$. ФЗЗ задается так же, как и выше, $k_0 = 15.7 \text{ мкм}^{-1}$, $2\delta k = 4 \text{ мкм}^{-1}$. Результаты моделирования для разной толщины L представлены на рис. 2. На рис. 2, $a1$ - $z1$ видно, что максимальное и минимальное значения фазы также растут при увеличении толщины ФК, поскольку выражение $C \cdot dk^p$ задается прямо пропорционально L . При этом рассчитанный фазовый отклик во всех случаях совпадает с заданным и его форма слабо меняется при увеличении L . Как проиллюстрировано на рис. 2, $a3$ - $z3$, отражательные свойства структуры значительно улучшаются при увеличении тол-

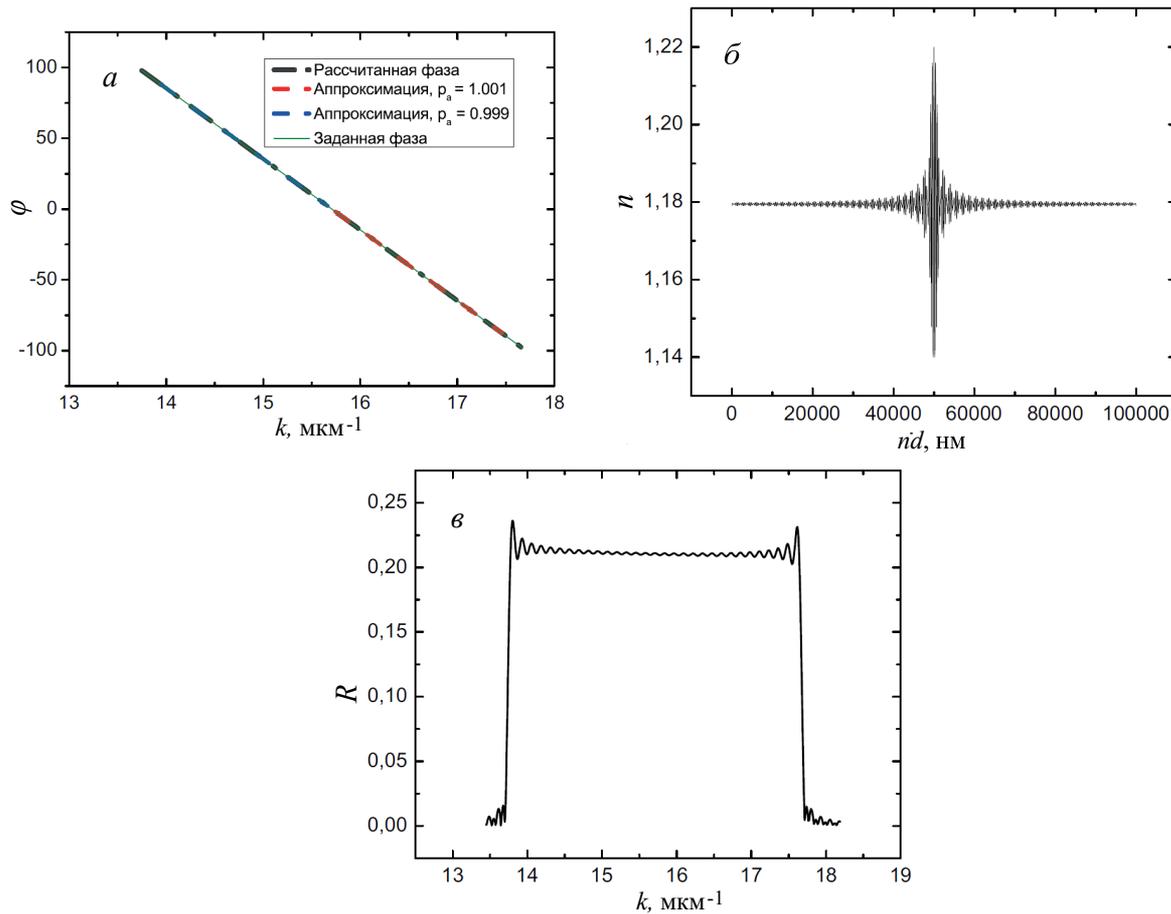


Рис. 3. Результаты моделирования для заданного линейного фазового отклика: *a* — задаваемый фазовый отклик фотонной структуры, фазовый отклик, рассчитанный методом матриц переноса и результаты аппроксимации фазы слева и справа от центра фотонной запрещенной зоны; *б* — структура данного кристалла как зависимость показателя отражения от оптического пути внутри кристалла; *в* — спектр отражения кристалла, рассчитанный методом матриц переноса

пины ФК. При дальнейшем увеличении толщины структуры возможно добиться показателя отражения внутри ФЗЗ вплоть до $R = 1$, однако кристаллы такой толщины и одновременно с таким высоким разрешением по толщине слоя сложны в производстве. Поэтому для дальнейших расчетов мы будем использовать следующие параметры моделирования: $L = 100$ мкм , $N = 500$ гармоник.

3. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ФАЗОВОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Разберем несколько примеров применения алгоритма 3. Выберем общую оптическую толщину кристалла $L = 100$ мкм , толщина слоя $\delta l = 10$ нм , $M = L/\delta l = 10^4$ слоев, число гармоник $N = 500$. Показатель преломления меняется от $n_1 = 1.14$ до $n_2 = 1.22$. ФЗЗ была выбрана с центром на $k_0 = 15.7$ мкм^{-1} , ширина ФЗЗ $2\delta k = 4$ мкм^{-1} .

На рис. 3, *a* и 4, *a* показаны фазовые отклики рассчитанных фотонных структур для заданных линейной и квадратичной зависимостей $\phi(k)$. Видно, что рассчитанные зависимости находятся в пол-

ном соответствии с заданными. Также части рассчитанной фазы слева и справа от центра ФЗЗ хорошо аппроксимируются линейными и квадратичными показательными функциями соответственно. Структура рассчитанных ФК показана на рис. 3, *б* и 4, *б* как зависимость показателя преломления от оптического пути внутрь кристалла. Рассчитанные спектры отражения для обоих случаев на рис. 3, *в* и 4, *в* соответствуют заданным по положению центра и ширине. Тем не менее для линейного фазового отклика максимальный показатель отражения оказался равен приблизительно 0.23. Это означает, что большая часть падающего излучения внутри ФЗЗ будет проходить через все слои ФК без отражения. Для структуры с квадратичным откликом отражение значительно лучше, максимальный показатель отражения равен 0.85. В обоих случаях отраженное излучение будет приобретать заданную фазу. На рис. 5, *г* изображены рассчитанные фазы для заданных фазовых откликов со степенями от $p = 1$ до $p = 2$. Можно увидеть, как при увеличении p фазовый отклик меняется от линейного к квадратичному.

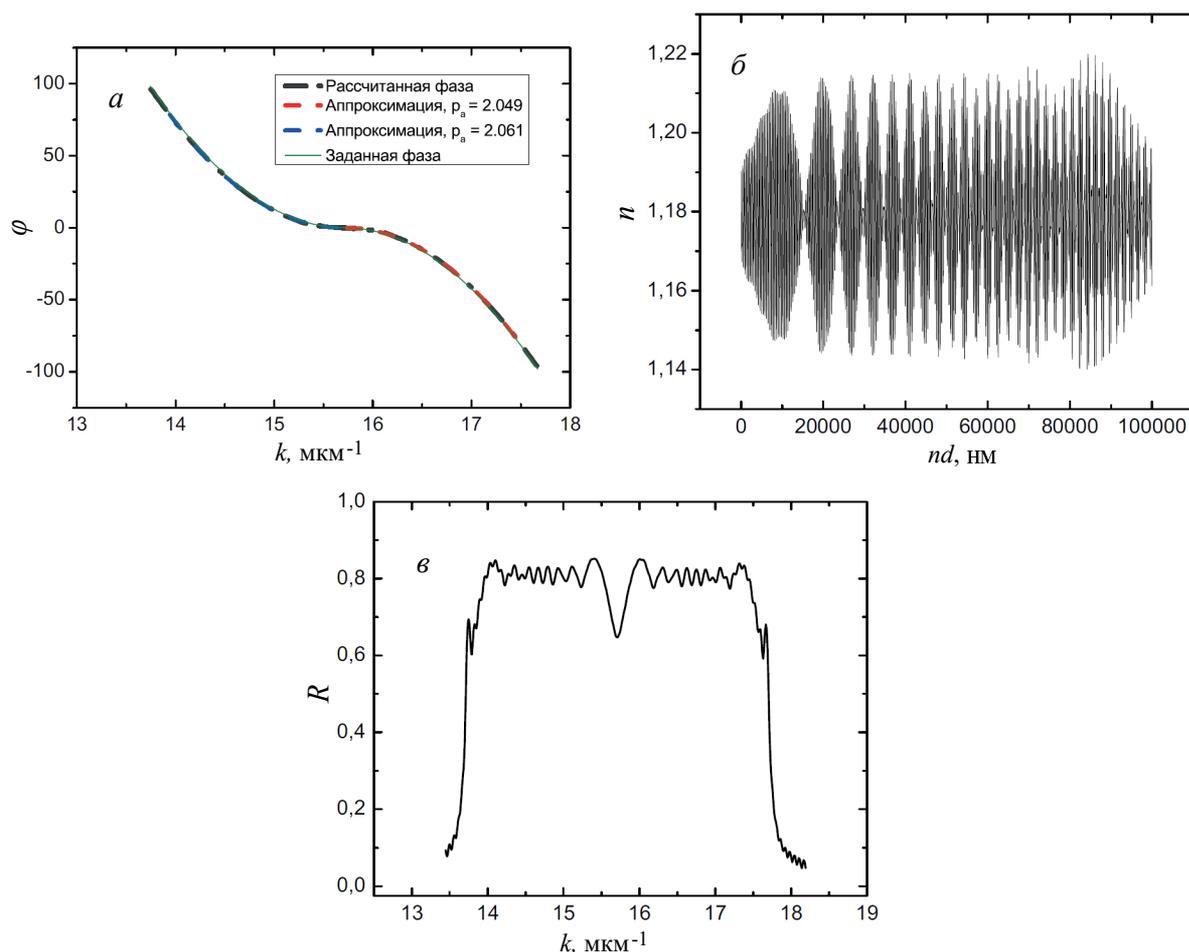


Рис. 4. Результаты моделирования для параболического фазового отклика: *a* — задаваемый фазовый отклик фотонной структуры, фазовый отклик, рассчитанный методом матриц переноса и результаты аппроксимации фазы слева и справа от центра фотонной запрещенной зоны; *б* — структура данного кристалла как зависимость показателя отражения от оптического пути внутри кристалла; *в* — спектр отражения кристалла, рассчитанный методом матриц переноса

Также для иллюстрации того, что фаза в описанном выше методе может задаваться произвольно, на рис. 5, *a-в* показаны рассчитанные фаза, структура и спектр отражения ФК с заданным экспоненциальным фазовым откликом $\phi = C_1 \exp(-C_2 \cdot k) + C_3$. Здесь C_1 и C_3 выбраны таким образом, чтобы фаза менялась от -100 до 100 радиан, а множитель $C_2 > 0$ достаточно мал, чтобы экспонента была хорошо различима в промежутке волновых чисел от 11.7 до 15.7 мкм^{-1} . Фазовый отклик задавался как $R = 0.87$ в том же промежутке по k . Расчеты проводились для ФК с $M = 10^4$ слоев толщиной 10 нм , число гармоник $N = 222$. Можно увидеть, что рассчитанные фазовый и спектральный отклики ФК соответствуют заданным.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Был продемонстрирован метод решения обратной задачи восстановления структуры фотонного кристалла, позволяющий по заданной зависимости

фазы от волнового числа получить структуру ФК в виде зависимости показателя преломления от глубины кристалла. Валидность метода подтверждена численно рассчитанными спектральными и фазовыми откликами фотонных структур для различных заданных фазовых функций. Данный метод может применяться для изготовления одномерных ФК с заданным фазовым откликом, что требуется в таких задачах, как управление фемтосекундными импульсами, неоднородное преобразование оптических импульсов. При этом требуется использовать методы изготовления с достаточно высоким разрешением по толщине слоя, такие как электрохимическое травление кремния, алюминия или титана, а также двухфотонная фотополимеризация с градиентным изменением показателя преломления. В данной работе фазовая задача была решена только для спектральной фазовой зависимости. Тем не менее, при переходе к пространственной обратной задаче для фазового отклика станет доступна широкая сфера применений рассмотренного метода для получения различных пространственных

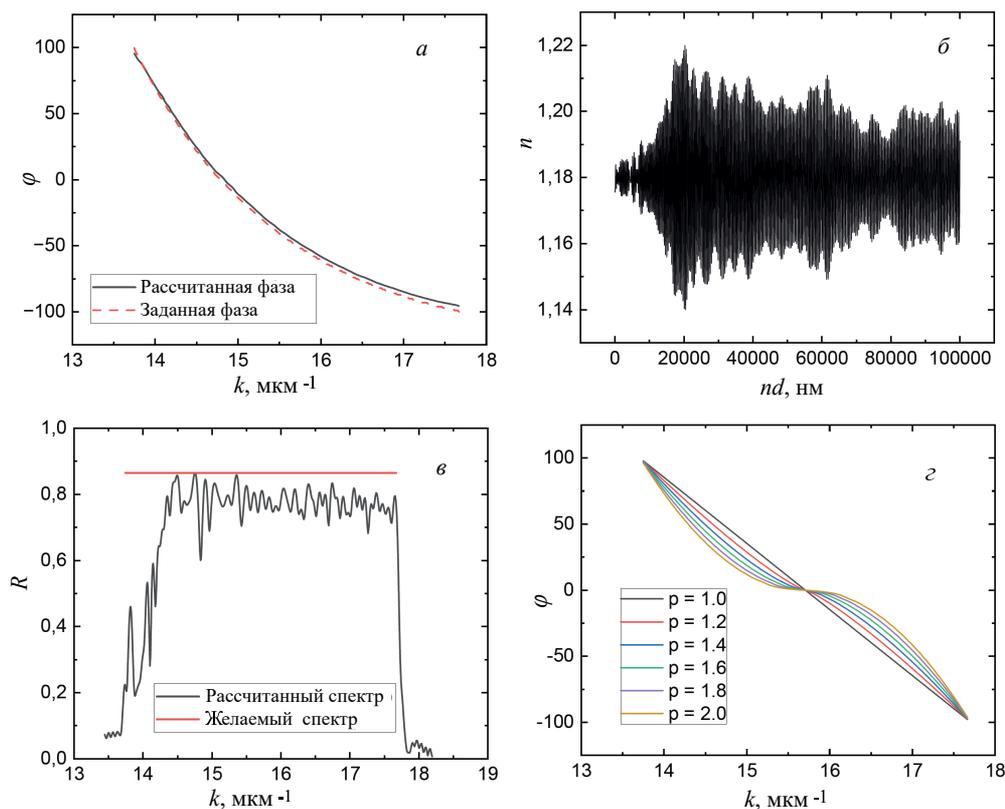


Рис. 5. Результаты моделирования для экспоненциального фазового отклика: а — задаваемый фазовый отклик фотонной структуры, фазовый отклик, рассчитанный методом матриц переноса; б — структура данного кристалла как зависимость показателя отражения от оптического пути внутри кристалла; в — спектр отражения кристалла, рассчитанный методом матриц переноса; г — рассчитанные фазовые отклики кристаллов с заданной фазой в виде показательных функций со степенями от 1 до 2

конфигураций светового пучка. Среди этих применений фокусировка, управление светом, получение векторных пучков и т. д.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-72-10103), <https://rscf.ru/project/21-72-10103/>.

- [1] Yablonovitch E. // *Journal of Modern Optics*. **41**, N 2. 173 (1994).
- [2] John S. // *Phys. Rev. Lett.* **58**. 2486 (1987).
- [3] Joannopoulos J.D., Villeneuve P.R., Fan S. // *Solid State Communications*. **102**, N 2-3. 165. (1997).
- [4] LeCun Y., Bengio Y., Hinton G. // *Nature*. **521**, N 436. (2015).
- [5] Lecun Y., Bengio Y. // *Neural Networks*. 1995. **01**
- [6] Jain A., Mao J., Mohiuddin K. // *Computer*. **29**, N 3. 31. (1996).
- [7] Roger A., Maystre D., Cadilhac M. // *J. Optics (Paris)* **9**, N 2. 83 (1978).
- [8] Xia J., Jordan A.K., Kong J.A. // *J. Opt. Soc. Am. A* **11**, N 3. 1081 (1994).
- [9] Khruslov E.Ya., Shepelsky D.G. // *Inverse Problems* **10**, N 1. 1 (1994).
- [10] Boutet de Monvel A., Shepelsky D. // *Inverse Problems* **18**, N 5. 1377 (2002).
- [11] Brown B.M., Samko V.S., Knowles I.W., Marletta M. // *Inverse Problems* **19**, N 1. 235 (2003).
- [12] Minkov M., Williamson I.A.D., Andreani L.C. et al. // *ACS Photonics*. **7**, N 7. 1729 (2020).
- [13] Piggott A.Y., Lu J., Lagoudakis K.G. et al. // *Nature Photonics*. **9**, N 6. 374 (2015).
- [14] Emeliantsev P.S., Pyshkov N.I., Svyakhovskiy S.E. // *JETP Letters*. **117**, N 11. 821 (2023).
- [15] Mizuguchi J., Tanaka Y., Tamura S. et al. // *Phys. Rev. B*. **67**. 075109 (2003).
- [16] Kurt H., Colak E., Cakmak O. et al. // *Appl. Phys. Lett.* **93**, N 17. 171108 (2008).
- [17] Memarian M., Eleftheriades G.V. // *Light: Science & Applications*. **2**, N 11. e114 (2013).
- [18] Qing Qi M., Tang W.X., Cui T.J. // *Sci. Rep.* **5**, N 1. 11732 (2015).
- [19] Hu Y., Siviloglou G.A., Zhang P. et al. *Self-accelerating Airy Beams: Generation, Control, and Applications*. Springer New York, NY. P. 1–46. (2012).
- [20] Staliunas K., Herrero R. // *Phys. Rev. E*. **73**. 016601 (2006).
- [21] Segal N., Keren-Zur S., Hendler N. et al. // *Nature Photonics*. **9**, N 3. 180 (2015).
- [22] Luce A., Mahdavi A., Marquardt F. et al. // *JOSA A*.

- 39, N 6. 1007 (2022).**
- [23] Крылова Т. Интерференционные покрытия. Л.: Машиностроение. 1976. ISBN 539104729473
- [24] Ярич А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. М.: Мир. 1987. ISBN 0-471-09142-1
- [25] Baumeister P. // *Appl. Opt.* **25**, N 16. 2644 (1986).
- [26] Свяховский Ю.Ю., Пышков Ю.Ю. // *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон.* N 4. 2340401 (2023).
- [27] Свяховский С.Е., Пышков Н.И. // *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон.* N 4. 2340402 (2023).
- [28] Емельянцева П.С., Свяховский С.Е. // *ЖЭТФ.* **166**, № 3. 295 (2024).

Reconstruction of a photonic crystal structure from a given phase response

P.S. Emeliantsev^a, S.E. Svyakhovskiy^b

¹*Department of General Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^aemelyantsev97@mail.ru, ^bsse@shg.ru

We present a method for designing one-dimensional photonic structures of phase response with predefined shapes and features. An algorithm for constructing such photonic crystal structures has been developed, and numerical modeling of structures' phase and spectral responses has been performed.

PACS: 42.70.Qs

Keywords: photonic crystals, spectroscopy, inverse design, porous silicon, phase of reflection coefficient.

Received 08 May 2024.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2025. **80**, No. 2. Pp. .

Сведения об авторах

1. Емельянцева Павел Сергеевич — аспирант; e-mail: emelyantsev97@mail.ru.
2. Свяховский Сергей Евгентович — канд. физ.-мат. наук, доцент; e-mail: sse@shg.ru.