

УДК 519.6; 538.97

doi 10.26089/NumMet.v18r438

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ИЗОТРОПНОЙ ПОЛНОСТЬЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ НА ПОДЛОЖКЕ

Ж. О. Домбровская¹

Сформулирована математическая постановка задачи об одноволновом безотражательном покрытии на основе метаповерхности. Построена область допустимых значений геометрических параметров структуры. Предложена штрафная функция, благодаря которой обеспечивается применимость физической модели, а искомый минимум становится единственным. В качестве примера рассмотрена задача о безотражательной метаповерхности из шариков PbTe, помещенных на германиевую подложку. Рассчитан спектр отражения такой структуры в диапазоне 8–12 мкм. Проведено сравнение со спектрами метаповерхности без подложки и только с одной подложкой.

Ключевые слова: задача оптимизации, метод штрафных функций, диэлектрическая метаповерхность на подложке, безотражательное покрытие.

1. Введение. В последние годы огромное внимание уделяется проектированию структурированных покрытий с близким к нулю коэффициентом отражения. Такие покрытия перспективны для применения в солнечных батареях и других фотовольтаических элементах, работающих не только в видимом, но и в инфракрасном диапазоне. В отличие от прежних разработок на основе металлов [1–3], для уменьшения джоулевых потерь все чаще используются диэлектрические метаатомы из материалов с высоким показателем преломления [4, 5].

Обычно электродинамические характеристики двумерного метаматериала, расположенного на подложке, рассчитываются численно. Такие вычисления сложны из-за большой разномасштабности характерных геометрических размеров: размер резонаторов может быть в 3–20 раз меньше длины падающей волны λ в зависимости от рассматриваемого частотного диапазона и выбранного материала. Это приводит к необходимости выбирать избыточно мелкий шаг сетки и делает расчет крайне трудоемким, а его использование в дальнейшей оптимизации параметров метаповерхности — неэффективным.

Использование аналитических формул из физической модели существенно повышает экономичность расчетов. Однако физические модели имеют ограниченную область применимости. Это приводит к тому, что оптимизационные параметры могут изменяться лишь в некоторых ограниченных диапазонах. Задачу проектирования устройства нужно рассматривать на допустимом множестве параметров, т.е. ставить задачу на условный экстремум.

Возникновение максимумов и минимумов в спектрах отражения или прохождения связано с резонансным характером отклика метаатомов на внешнее поле. Такие резонансы являются множественными, поэтому задача оптимизации оказывается многоэкстремальной, а результаты минимизации функционала сильно зависят от выбора начального приближения. Поскольку минимумов много, то, разыгрывая начальные приближения и находя некоторые решения, невозможно гарантировать, что наименьший из них является глобальным, а не одним из локальных [6]. Иными словами, перебрав конечное число приближений, нельзя ручаться, что где-то нет еще одного более глубокого локального минимума.

В настоящей статье на основе идеи регуляризации [7] формулируется постановка задачи оптимизации полностью диэлектрической метаповерхности (МП) из сферических частиц на подложке при нормальном падении электромагнитной волны. Предлагаемая постановка позволяет найти глобальный минимум, близительное положение которого известно из физических соображений. Регуляризация сводится к тому, что вводится штраф за отклонение от этого положения. Обсуждаются условия, которые следует наложить на период p структуры и радиус r метаатомов для того, чтобы выполнялось дипольное приближение, которое используется практически во всех физических моделях МП. Приводится пример проектирования безотражательного покрытия для подложки из германия Ge, работающего на одной длине волны в среднем ИК-диапазоне.

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Ленинские горы, 119992, Москва; аспирант, e-mail: dombrovskaya@physics.msu.ru

2. Прямая задача. Согласно подходу Свешникова–Ильинского [8], решение задачи оптимизации сводится к многократному расчету электродинамических характеристик МП на подложке, т.е. к решению прямой задачи с направленно изменяемыми оптимизационными параметрами.

Чтобы упростить вычисления, предпочтительнее моделировать рассматриваемую структуру на основе простых аналитических формул. Для такого рода задач активно применяется комбинирование численных и аналитических алгоритмов, например так, как это делается при проектировании многослойных покрытий с заданными свойствами [9, 10].

2.1. Аналитическая модель. Численное моделирование изотропной полностью диэлектрической МП на подложке (рис. 1), проведенное в [4], показало, что взаимодействие между частицей и подложкой из материала с высоким показателем преломления довольно слабое. Для нахождения величины электрического поля на первом магнитном дипольном резонансе (МДР) вклады подложки и МП могут быть просто просуммированы, с некоторыми оговорками это справедливо вплоть до второго дипольного резонанса — электрического (ЭДР). Строго говоря, между шариком и подложкой существует магнитоэлектрическая связь, которая проявляется на частотах, расположенных между магнитной и электрической дипольными модами, и приводит к усилению МДР и ЭДР [11].

Рассмотрим периодический монослой сферических частиц из вещества с показателем преломления n . А.Б. Евлюхиным предложена модель взаимодействующих индуцированных диполей [12]. Каждый шарик заменялся парой электрического и магнитного диполей, а для учета взаимодействия с другими частицами решетки строилась функция Грина. Такой подход представляется наиболее общим, так как в нем не производится гомогенизации структуры [13]. Модель применима для любых значений p и r в рамках дипольного приближения.

Электромагнитный отклик МП описывается с помощью следующих коэффициентов Френеля для отражения R и прохождения T :

$$R = \frac{ik_0}{2p^2} (\alpha_e^{\text{eff}} - \alpha_m^{\text{eff}}), \quad T = 1 + \frac{ik_0}{2p^2} (\alpha_e^{\text{eff}} + \alpha_m^{\text{eff}}). \quad (1)$$

Здесь k_0 — волновое число в воздухе; α_e^{eff} и α_m^{eff} — эффективные электрическая и магнитная поляризуемости, в которых учтено взаимодействие между частицами. Здесь и далее временная зависимость имеет вид $e^{-i\omega t}$. По коэффициентам $R(\theta)$ и $T(\theta)$, измеренным или рассчитанным для угла падения $\theta = 0$, могут быть найдены электрическая χ_e и магнитная χ_m компоненты поверхностной плотности восприимчивости [14–16]:

$$\chi_e = -\frac{2i}{k_0} \frac{R(0) + T(0) - 1}{R(0) + T(0) + 1}, \quad \chi_m = -\frac{2i}{k_0} \frac{R(0) - T(0) + 1}{R(0) - T(0) - 1}. \quad (2)$$

Для учета подложки в настоящей статье используется подход, предложенный в [2]. МП, лежащая на границе раздела “воздух–диэлектрик”, заменяется воображаемой границей, на которой ставятся обобщенные граничные условия для векторов электромагнитного поля [17, 18]. Коэффициенты отражения R_s и прохождения T_s всей структуры на подложке имеют вид

$$R_s = \frac{(1+e)(1-\sqrt{\varepsilon}m) - (\sqrt{\varepsilon}-e)(1+m)}{(1-e)(1-\sqrt{\varepsilon}m) + (\varepsilon-e)(1-m)}, \quad T_s = \frac{(1+e)(1+m) + (1-e)(1+m)}{(1-e)(1-\sqrt{\varepsilon}m) + (\varepsilon-e)(1-m)}, \quad (3)$$

где ε — диэлектрическая проницаемость подложки, $e = ik_0\chi_e/2$ и $m = ik_0\chi_m/2$. Коэффициент поглощения МП на подложке A_s связан с R_s и T_s следующим соотношением: $|A_s|^2 = 1 - |R_s|^2 - \sqrt{\varepsilon}|T_s|^2$.

Вышеизложенный подход дает неплохое качественное описание свойств диэлектрической МП из сферических частиц на диэлектрической подложке. А именно, он предсказывает количество максимумов и минимумов в спектре и положения дипольных резонансов [5]. Этого вполне достаточно для использования его в качестве блока решения прямой задачи.

2.2. Ограничения на геометрические параметры. Такие ограничения бывают нескольких типов. Во-первых, имеются условия, накладываемые из физических соображений. Очевидно, что геометрические

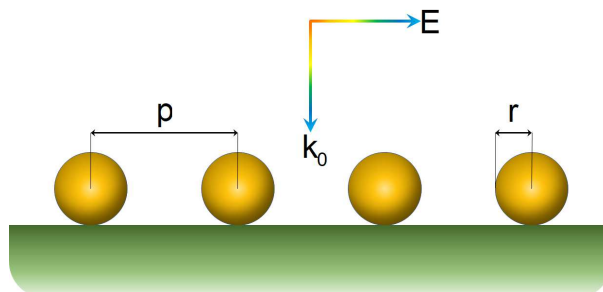


Рис. 1. Схематическое изображение метаповерхности из сферических частиц на полубесконечной подложке. На структуру нормально падает электромагнитная волна

параметры структуры являются положительными величинами $p > 0$ и $r > 0$, а частицы не соприкасаются: $p > 2r$. Во-вторых, существуют ограничения, связанные с процессом изготовления структуры. Так, радиус отдельных идентичных сферических частиц из диэлектрика крайне редко бывает менее $r_{\text{fabric}} \sim 50$ нм. Они располагаются на подложке не вплотную, а с интервалом, равным диаметру частицы или более, поэтому $p \geq 4r$. И в-третьих, следует учитывать условия, при невыполнении которых используемая физическая модель становится неприменимой.

В нашем случае необходимо помнить, что модель Евлюхина корректно работает только в рамках применимости дипольного приближения. В [12] приводится условие для минимального периода МП:

$$p_{\min} = \sqrt{\frac{k_0}{2} \frac{|\alpha_e^{\text{eff}}|^2 + |\alpha_m^{\text{eff}}|^2}{\text{Im}(\alpha_e^{\text{eff}}) + \text{Im}(\alpha_m^{\text{eff}})}}.$$

Максимально допустимый радиус r_{\max} для непоглощающих материалов может быть найден из критерия, требующего, чтобы дипольный вклад в рассеянное излучение на всем рассматриваемом частотном диапазоне составлял не менее 95% [19, 20].

Некоторые условия из перечисленных в этом разделе перекрываются, для нахождения физически осмысленных решений следует использовать наиболее сильные. Кроме того, в качестве ограничения на p сверху представляется разумным выбрать $p \leq \lambda_{\max}$, чтобы исключить из рассмотрения далеко расположенные друг от друга и, тем самым, слабо взаимодействующие метаатомы.

3. Обратная задача. В зависимости от конкретной постановки задачи требуется, чтобы обеспечивалось минимальное или максимальное значение величины отражения $|R_s|^2$, прохождения $|T_s|^2$, поглощения $|A_s|^2$ или их комбинации. Обычно заранее известен список материалов, из которых могут быть изготовлены частицы и подложка. В качестве параметров, подлежащих определению, выступают период структуры p и радиус метаатомов r .

3.1. Постановка задачи о безотражательном покрытии. Рассмотрим простейшую постановку, в которой требуется минимизировать отражение на фиксированной длине волны. Введем описывающий оптимизационные параметры вектор $\mathbf{x} = \{p, r\}$. Обозначим отражательную способность структуры $|R_s(\mathbf{x}, \lambda)|^2$ через $f(\mathbf{x}, \lambda)$. Ее требуется минимизировать на некоторой заданной длине волны $\lambda = \lambda_*$ из рассматриваемого диапазона $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$. Пусть E_2 — двумерное векторное пространство, C_2 — замкнутое выпуклое множество, определяемое как

$$C_2 = \{\mathbf{x} \in E_2 : 4r \leq p \leq \lambda_{\max}, r_{\text{fabric}} \leq r \leq r_{\max}\},$$

где $r_{\max} \approx \lambda_{\min}/(1.3n + 1)$ обеспечивает применимость дипольного приближения во всем актуальном диапазоне (такая оценка является “перестраховочной”). Тогда задача оптимизации безотражательной поверхности заключается в том, чтобы определить вектор \mathbf{x} , который минимизирует функцию

$$f(\mathbf{x}, \lambda) = \min, \quad \mathbf{x} \in C_2. \tag{4}$$

Предварительный анализ поведения функции $f(\mathbf{x}, \lambda)$ показал, что на C_2 она очень сильно зависит именно от радиуса частиц (рис. 3а). При малых r ее значения практически не изменяются. Наличие такого горизонтального плато, являющегося локальным минимумом, приводит к заикливанию вычислений и дальнейшему их срыву. На резонансных радиусах имеются глубокие овраги, в нашем случае только один из них будет находиться левее r_{\max} . Все эти лишние овраги можно откинуть, ограничив r рамками применимости дипольного приближения, однако такое ограничение не устраняет плато. Поэтому задача остается многоэкстремальной.

3.2. Построение минимизируемого функционала с регуляризатором. Сделаем искомым минимум единственным, добавив к $f(\mathbf{x}, \lambda)$ слагаемое вида $y(r) = (Ar + B)^\beta$, где β — четное натуральное число. Для радиуса, соответствующего МДР на длине волны λ_* , известна оценка $r_0 \approx \lambda_*/(2n)$ [21]. Тогда $r_{\text{right}} \approx (4/3)r_0$ — максимально допустимый радиус, для которого выполняется дипольное приближение на λ_* . Отметим, что здесь речь идет лишь об одной длине волны, для которой ищется минимум функционала, а не обо всем диапазоне. Значение $r = r_0$ является центром симметричного “желоба” ширины $(2/3)r_0$, изображенного на рис. 2. Изменяя величину β , можно управлять наклоном стенок и пологостью дна.

Потребуем, чтобы $y(r_0) = 0$, а на стенке желоба $y(r_{\text{right}}) = 1$. Тогда предлагаемая добавка будет иметь вид $y(r) = 3^\beta(r/r_0 - 1)^\beta$. Благодаря выбору $y(r)$ в такой форме, мы отбрасываем минимумы при больших радиусах (для которых дипольное приближение не работает), а плато при малых радиусах перестает быть

горизонтальным. Тем самым, $y(r)$ по сути является штрафной функцией, не позволяющей выходить за пределы некоторого диапазона радиусов. В итоге задача о безотражательном покрытии формулируется следующим образом:

$$F^\beta[\mathbf{x}] = f(\mathbf{x}, \lambda) + 3^\beta \left(\frac{r}{r_0} - 1 \right)^\beta = \min, \quad \mathbf{x} \in C_2. \quad (5)$$

4. Результаты расчетов. Вычисления проводились для структуры, изображенной на рис. 1. МП представляет собой квадратную решетку идентичных сферических частиц из теллурида свинца PbTe ($n = 5.65$). Метаатомы лежат на границе раздела “воздух–германий”, показатель преломления Ge равен 4. Мы не учитывали коэффициенты поглощения обоих материалов, так как согласно [22–24] в диапазоне длин волн $\lambda \in [8, 12]$ мкм их $\text{Im } n$ составляют менее 1% от $\text{Re } n$. Точность измерений в этих работах не превышала 0.1%. Требуется найти такие геометрические параметры МП, чтобы минимизировать отражение $|R_s|^2$ на длине волны $\lambda_* = 10$ мкм, примерно соответствующей температуре человеческого тела. Для решения прямой задачи, входящей в виде одного из блоков в алгоритм проектирования, применялись аналитические формулы (1)–(3). Для нахождения минимума $|R_s|^2$ при $p \in [4r, 12]$ мкм и $r \in [0.05, 0.9873]$ мкм была использована стандартная функция `fmincon` пакета Optimization Toolbox, встроенного в MATLAB. Она ищет минимум скалярной нелинейной функции многих переменных при наличии ограничений с помощью метода внутренней точки [25].

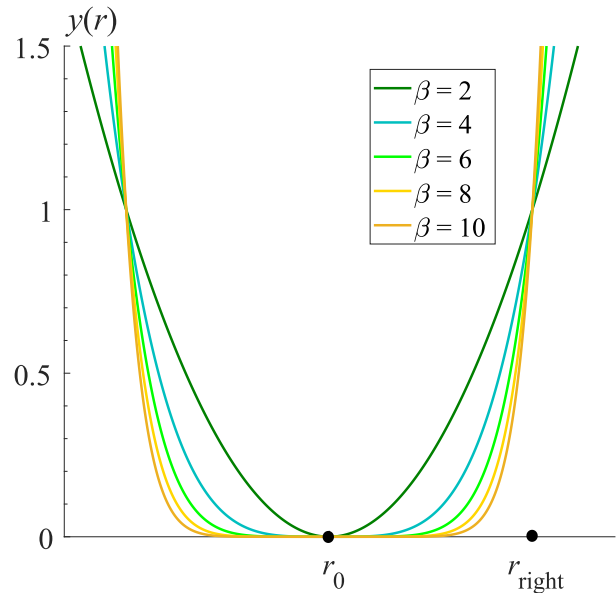


Рис. 2. Штраф при разных значениях степени β

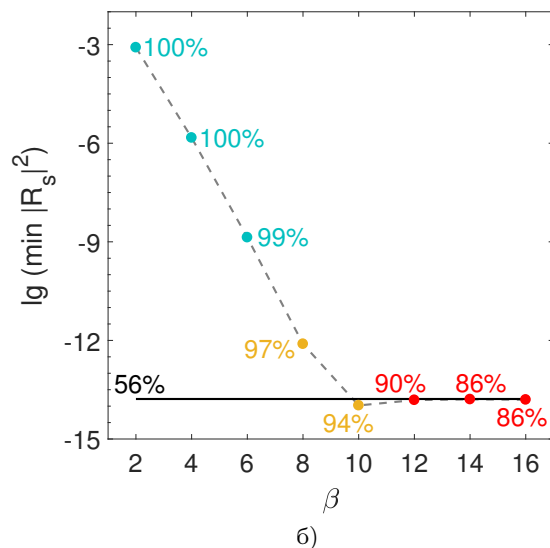
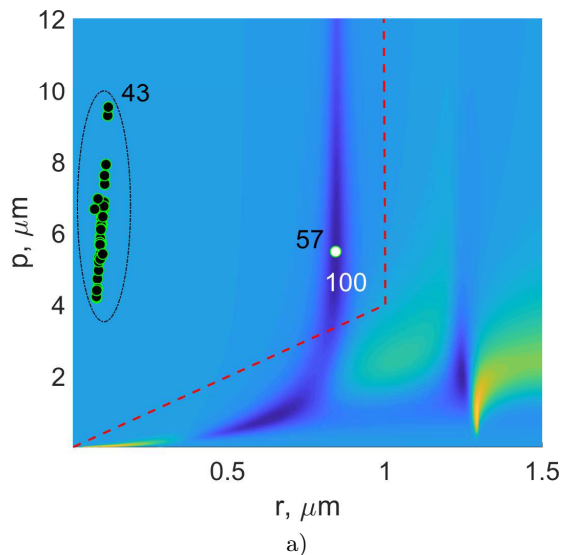


Рис. 3. Результаты оптимизации. Слева (а) зависимость $|R_s(p, r)|^2$. Белыми и черными маркерами показаны найденные минимумы функционалов (5) и (4) соответственно. Рядом указано количество точек. Красные линии — граница C_2 . Справа (б) значения найденного минимума в логарифмическом масштабе для расчетов со штрафом (пунктирная кривая) при разных β и без него (прямая линия). Указано число случайно разыгранных начальных приближений, при которых расчеты с помощью функции `fmincon` сходятся к минимуму в пределах числа шагов, заданных по умолчанию

4.1. Сравнение функционалов. Для демонстрации преимуществ предлагаемого подхода было проведено сравнение результатов минимизации функционалов (4) и (5). Начальные приближения выбирались случайным образом: было проведено 10 расчетов, в каждом из которых разыгрывалось по 100 начальным

точек. Их координаты имели гауссово распределение, среднее и среднеквадратичное отклонение равнялись r_0 для радиуса и $4r_0$ для периода. Каждое из этих начальных приближений использовалось для обоих функционалов: со штрафом и без штрафа.

На рис. 3а представлен вид функционала (4). На рис. 4 показано сечение этой поверхности при фиксированном $p = 5.4676$ мкм. Как можно видеть, такой функционал имеет протяженное горизонтальное плато и узкий глубокий минимум. Функционалы с подобным профилем трудны для минимизации, поэтому рассматриваемый пример является представительным.

Результаты одного из расчетов со 100 случайными розыгрышами нанесены на график зависимости $|R_s|^2$ от p и r (рис. 3а). Красной линией показана область допустимых значений этих аргументов. Маркерами показаны результаты минимизации: светлыми — функционала (5) со штрафом, темными — функционала (4) без штрафа. Видно, что в первом случае все 100 точек сходятся к одному и тому же ответу, который является глобальным минимумом. Однако во втором случае 43 точки “застревают” на плато и не доходят до искомого минимума.

Зависимость глубины минимума $|R_s|^2$ от β в задаче со штрафом представлена на рис. 3б. Для сравнения горизонтальной линией показана величина минимального из найденных значений в задаче без штрафа. Видно, что использование штрафа с небольшой степенью $\beta \in [2, 6]$ делает минимум более мелким. Это связано с тем, что центр штрафной функции r_0 не точно совпадает с минимумом целевого функционала (рис. 4). По мере увеличения β “дно” штрафной функции становится все более пологим и глубина минимума увеличивается. Начиная с $\beta = 10$ она практически не отличается от глубины минимума исходного функционала.

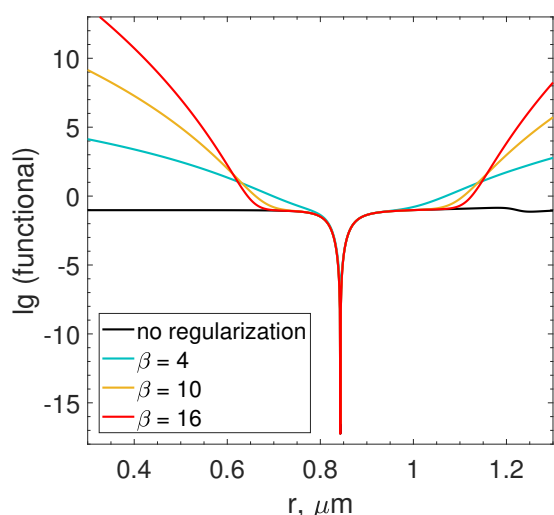


Рис. 4. Зависимости функционалов (5) с разными степенями β и (4) от радиуса метаатомов r при $p = p_{opt}$

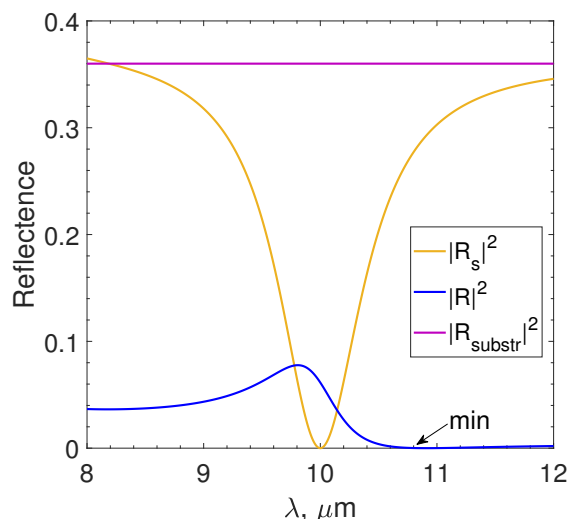


Рис. 5. Отражение от МП на подложке $|R_s|^2$, МП в воздухе $|R|^2$ и подложки $|R_{substr}|^2$ в зависимости от длины волны λ при $p = p_{opt}$ и $r = r_{opt}$

4.2. Практические рекомендации. В значительной части стандартных программ имеется ограничение на максимальное число вычислений функции (т.е. на максимальное число итераций). Так, в функции `fmincon` по умолчанию возможно лишь 3000 вычислений функционала. Этот прием позволяет предотвратить заикливание. Однако он может приводить к тому, что расчеты не достигают минимума.

На рис. 3б около точек указана доля тех начальных приближений, для которых расчеты сошлись к минимуму. Для небольших значений β эта доля составляет 100%. По мере увеличения β она уменьшается. Причина этого заключается в следующем. В функционале со штрафом между крутой стенкой при больших $(r - r_0)$ и минимумом имеются довольно пологие участки (“борта” минимума), которые становятся все более пологими при увеличении β (рис. 4). На этих пологих участках требуется делать большее количество шагов, чем доступно по умолчанию. Расчет прерывается, и функция `fmincon` выдает ошибку. В этом случае рекомендуется брать последние найденные значения p и r и продолжать расчет с ними как с начальными приближениями. Поскольку эти борта пологи, но не горизонтальны, то расчет гарантированно сойдется к точке минимума.

При выборе значения β мы руководствовались следующими соображениями. Штраф вводится для того, чтобы заведомо устранить все локальные минимумы, не расположенные вблизи МДР и ЭДР или

между ними. Поэтому степень штрафного слагаемого должна быть такой, чтобы, с одной стороны, значение штрафа было больше 1 за пределами указанной области (все “лишние” минимумы автоматически исключаются из рассмотрения), а с другой стороны, введение штрафа не должно исказить целевую функцию внутри этой области. Данным требованиям лучше всего удовлетворяет $\beta = 10$. Отметим, что введение штрафа с такой степенью практически не сказывается на точности определения p и r , так как он имеет очень пологое дно и практически не искажает целевой функционал.

4.3. Безотражательное покрытие. Отражение $|R_{\text{substr}}|^2$ от полубесконечной подложки из Ge составляет 0.36. Использование изотропной МП из PbTe с оптимизированными геометрическими параметрами $p_{\text{opt}} = 5.4676$ мкм и $r_{\text{opt}} = 0.8430$ мкм обеспечивает нулевое отражение $|R_s|^2 \approx 1.0552 \cdot 10^{-14}$ на интересующей нас длине волны $\lambda_* = 10$ мкм (рис. 5). Из графика видно, что область малого отражения $|R_s|^2$ находится между максимумом отражения МП в воздухе на 9.81 мкм (МДР) и минимумом отражения от нее $\min(|R|^2) \approx 2.8836 \cdot 10^{-10}$ на 10.81 мкм.

Для длин волн около 8 мкм отражение от всей структуры немного больше, чем только от подложки без МП. Это связано с тем, что радиус сферических частиц не мал и электромагнитный отклик уже не является строго дипольным (согласно используемому критерию, вклад мультиполей высших порядков не превышает 5%). По мере увеличения λ взаимодействие между метаатомами и подложкой возрастает настолько, что на $\lambda_* = 10$ мкм отражение отсутствует. При дальнейшем увеличении λ взаимодействие резко убывает и, следовательно, отражение от МП с подложкой стремится к отражению только от подложки, т.е. влияние МП пропадает.

5. Заключение. Настоящая статья посвящена оптимизации геометрических параметров полностью диэлектрической метаповерхности с высоким показателем преломления, помещенной на полубесконечную диэлектрическую подложку. Для решения прямой задачи предложено использовать аналитическую модель, комбинирующую несколько подходов разных авторов. Обсуждаются ограничения на период структуры и радиус составляющих ее сферических метаатомов. При построении области допустимых значений геометрических параметров метаповерхности учитывались технологические ограничения и границы применимости физической модели.

Впервые предложена постановка задачи об одноволновом безотражательном покрытии на основе двумерного метаматериала, исходящая из предварительных физических соображений о расположении узкого глобального минимума отражения. При построении целевого функционала использовался метод штрафных функций, что позволило отсечь все минимумы кроме интересующего: горизонтальную широкую область при малых радиусах и остальные локальные минимумы для больших частиц за пределами применимости дипольного приближения. Проводится сравнение результатов минимизации со штрафом и без него. Описывается выбор степени штрафного слагаемого, обеспечивающей наилучший результат оптимизации.

Разработанная методика иллюстрируется на примере расчета безотражательной метаповерхности из PbTe на подложке из Ge для длины волны 10 мкм, когда оба материала являются непоглощающими. Построен спектр отражения рассматриваемой структуры в актуальном для приложений диапазоне от 8 до 12 мкм. Показано, что для непоглощающих материалов нулевое отражение возникает между магнитным дипольным резонансом и областью нулевого отражения той же самой метаповерхности, но расположенной в воздухе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 15–01–03524, № 16–31–00418).

Автор выражает благодарность своему научному руководителю профессору А. Н. Боголюбову за ценные замечания и обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Atwater H.A., Polman A.* Plasmonics for improved photovoltaic devices // *Nat. Mater.* 2010. **9**, № 3. 205–213.
2. *Albooyeh M., Morits D., Simovski C.R.* Electromagnetic characterization of substrated metasurfaces // *Metamaterials.* 2011. **5**, № 4. 178–205.
3. *Gu M., Ouyang Z., Jia B., et al.* Nanoplasmonics: a frontier of photovoltaic solar cells // *Nanophotonics.* 2012. **1**, № 3–4. 235–248.
4. *Baryshnikova K.V., Petrov M.I., Babicheva V.E., Belov P.A.* Plasmonic and spherical nanoparticle antireflective coatings // *Sci. Rep.* 2016. **6**. doi 10.1038/srep22136.
5. *Babicheva V.E., Petrov M.I., Baryshnikova K.V., Belov P.A.* Reflection compensation mediated by electric and magnetic resonances of all-dielectric metasurfaces // *J. Opt. Soc. Am. B.* 2017. **34**, N 7. D18–D28.
6. *Калиткин Н.Н., Альшина Е.А.* Численные методы. Кн. 1. М.: Академия, 2013.
7. *Тихонов А.Н.* О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации // *Докл. АН СССР.* 1963. **151**, № 3. 501–504.

8. Свешников А.Г., Ильинский А.С. Задачи проектирования в электродинамике // Докл АН СССР. 1972. **204**, № 5. 1077–1080.
9. Гласко В.Б., Тихонов А.Н., Тихонравов А.В. О синтезе многослойных покрытий // Ж. вычисл. матем. матем. физ. 1974. **14**, № 1. 135–144.
10. Tikhonravov A.V., Zhuravov V.G., Fedoseev V.N., Trubetskov M.K. Design and production of antireflection coating for the 8–10 μm spectral region // Opt. Express 2014. **22**, № 26. 32174–32179.
11. Miroshnichenko A.E., Evlyukhin A.B., Kivshar Yu.S., Chichkov B.N. Substrate-induced resonant magnetoelectric effects for dielectric nanoparticles // ACS Photonics 2015. **2**, N 10. 1423–1428.
12. Evlyukhin A.B., Reinhardt C., Seidel A., Luk'yanchuk B.S., Chichko B.N. Optical response features of Si-nanoparticle arrays // Phys. Rev. B. 2010. **82**, N 4. doi 10.1103/PhysRevB.82.045404.
13. Dombrovskaya Zh.O., Zhuravlev A.V. Investigation of the possibility of metafilm modeling as a conventional thin film // Appl. Phys. A. 2017. **123**, N 1. doi 10.1007/s00339-016-0642-2.
14. Holloway C.L., Dienstfrey A., Kuester E.F., et al. A discussion on the interpretation and characterization of metafilms/metasurfaces: the two-dimensional equivalent of metamaterials // Metamaterials. 2009. **3**, N 2. 100–112.
15. Morits D., Simovski C. Electromagnetic characterization of planar and bulk metamaterials: a theoretical study // Phys. Rev. B. 2010. **82**, N 16. doi 10.1103/PhysRevB.82.165114.
16. Домбровская Ж.О., Журавлев А.В., Белокопытов Г.В., Боголюбов А.Н. Обратная задача восстановления характеристик мета-атома по измеренному прохождению и отражению метапленки // Известия РАН. Серия физическая. 2015. **79**, № 12. 1708–1710.
17. Kuester E.F., Mohamed M.A., Piket-May M., Holloway C.L. Averaged transition conditions for electromagnetic fields at a metafilm // IEEE Trans. Antennas Propag. 2003. **51**, N 10. 2641–2651.
18. Holloway C.L., Kuester E.F., Dienstfrey A. Characterizing metasurfaces/metafilms: the connection between surface susceptibilities and effective material properties // IEEE Antennas Wireless Propag. Lett. 2011. **10**. 1507–1511.
19. Белокопытов Г.В., Журавлев А.В. Дипольная поляризуемость сферических частиц // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2008. **11**, № 1. 41–49.
20. Dombrovskaya Zh.O., Zhuravlev A.V., Belokopytov G.V., Bogolyubov A.N. Phonon-polariton meta-atoms for far infrared range // Phys. Wave Phenom. 2016. **24**, N 2. 96–102.
21. Kuznetsov A.I., Miroshnichenko A.E., Fu Y.H., et al. Magnetic light // Sci. Rep. 2012. **2**. doi: 10.1038/srep00492.
22. Weiting F., Yixun Y. Temperature effects on the refractive index of lead telluride and zinc selenide // Infrared Phys. 1990. **30**, N 4. 371–373.
23. Icenogle H.W., Platt B.C., Wolfe W.L. Refractive indexes and temperature coefficients of germanium and silicon // Appl. Opt. 1976. **15**, N 10. 2348–2351.
24. Li H.H. Refractive index of silicon and germanium and its wavelength and temperature derivatives // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1980. **9**, N 3. 561–658.
25. Byrd R.H., Hribar M.E., Nocedal J. An interior point algorithm for large-scale nonlinear programming // SIAM Journal on Optimization. 1999. **9**, N 4. 877–900.

Поступила в редакцию
09.11.2017

Design of an Isotropic All-Dielectric Metasurface on a Substrate

Zh. O. Dombrovskaya¹

¹ Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics; Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Graduate Student, e-mail: dombrovskaya@physics.msu.ru

Received November 9, 2017

Abstract: A mathematical statement of the problem of one-wavelength antireflective coating based on a metasurface is formulated. The constraints on geometric parameters of the structure are found. A penalty function is proposed to ensure the applicability of the physical model and to provide the uniqueness of the desired minimum. As an example, the problem of antireflective metasurface composed of PbTe spheres located on a germanium substrate is considered. The reflectance spectrum of such a structure is found in the range 8–12 μm and is compared with the spectrum of the metasurface without a substrate and with the spectrum of an uncovered substrate.

Keywords: optimization problem, penalty function method, dielectric metasurface on substrate, antireflective coating.

References

1. H. A. Atwater and A. Polman, "Plasmonics for Improved Photovoltaic Devices," *Nat. Mater.* **9** (3), 205–213 (2010).
2. M. Albooyeh, D. Morits, and C. R. Simovski, "Electromagnetic Characterization of Substrated Metasurfaces," *Metamaterials* **5** (4), 178–205 (2011).
3. M. Gu, Z. Ouyang, B. Jia, et al., "Nanoplasmonics: A Frontier of Photovoltaic Solar Cells," *Nanophotonics* **1** (3–4), 235–248 (2012).
4. K. V. Baryshnikova, M. I. Petrov, V. E. Babicheva, and P. A. Belov, "Plasmonic and Silicon Spherical Nanoparticle Antireflective Coatings," *Sci. Rep.* **6** (2016). doi 10.1038/srep22136
5. V. E. Babicheva, M. I. Petrov, K. V. Baryshnikova, and P. A. Belov, "Reflection Compensation Mediated by Electric and Magnetic Resonances of All-Dielectric Metasurfaces," *J. Opt. Soc. Am. B* **34** (7), D18–D28 (2017).
6. N. N. Kalitkin and E. A. Al'shina, *Numerical Methods, Book 1: Numerical Analysis* (Akademiya, Moscow, 2013) [in Russian].
7. A. N. Tikhonov, "Solution of Incorrectly Formulated Problems and the Regularization Method," *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **151** (3), 501–504 (1963) [*Sov. Math. Dokl.* **4** (4), 1035–1038 (1963)].
8. A. G. Sveshnikov and A. S. Il'inskii, "Design Problems in Electrodynamics," *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **204** (5), 1077–1080 (1972) [*Sov. Phys. Dokl.* **17**, 527–530 (1972)].
9. V. B. Glasko, A. N. Tikhonov, and A. V. Tikhonravov, "The Synthesis of Multilayer Coatings," *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **14** (1), 135–144 (1974) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **14** (1), 135–143 (1974)].
10. A. V. Tikhonravov, V. G. Zhupanov, V. N. Fedoseev, and M. K. Trubetskov, "Design and Production of Antireflection Coating for the 8–10 μm Spectral Region," *Opt. Express* **22** (26), 32174–32179 (2014).
11. A. E. Miroshnichenko, A. B. Evlyukhin, Y. S. Kivshar, and B. N. Chichkov, "Substrate-Induced Resonant Magnetoelectric Effects for Dielectric Nanoparticles," *ACS Photonics* **2** (10), 1423–1428 (2015).
12. A. B. Evlyukhin, C. Reinhardt, A. Seidel, et al., "Optical Response Features of Si-Nanoparticle Arrays," *Phys. Rev. B* **82** (2010). doi 10.1103/PhysRevB.82.045404
13. Zh. O. Dombrovskaya and A. V. Zhuravlev, "Investigation of the Possibility of Metafilm Modeling as a Conventional Thin Film," *Appl. Phys. A* **123** (2017). doi 10.1007/s00339-016-0642-2
14. C. L. Holloway, A. Dienstfrey, E. F. Kuester, et al., "A Discussion on the Interpretation and Characterization of Metafilms/Metasurfaces: The Two-Dimensional Equivalent of Metamaterials," *Metamaterials* **3** (2), 100–112 (2009).
15. D. Morits and C. Simovski, "Electromagnetic Characterization of Planar and Bulk Metamaterials: A Theoretical Study," *Phys. Rev. B* **82** (2010). doi 10.1103/PhysRevB.82.165114
16. Zh. O. Dombrovskaya, A. V. Zhuravlev, G. V. Belokopytov, and A. N. Bogolyubov, "Inverse Problem for Recovering of Meta-Atom Characteristics by Transmittance and Reflectance of a Metafilm," *Izv. Akad. Nauk, Ser. Fiz.* **79** (12), 1708–1710 (2015) [*Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **79** (12), 1496–1498 (2015)].
17. E. F. Kuester, M. A. Mohamed, M. Piket-May, and C. L. Holloway, "Averaged Transition Conditions for Electromagnetic Fields at a Metafilm," *IEEE Trans. Antennas Propag.* **51** (10), 2641–2651 (2003).
18. C. L. Holloway, E. F. Kuester, and A. Dienstfrey, "Characterizing Metasurfaces/Metafilms: The Connection between Surface Susceptibilities and Effective Material Properties," *IEEE Antennas Wireless Propag. Lett.* **10**, 1507–1511 (2011).
19. G. V. Belokopytov and A. V. Zhuravlev, "Dipole Polarizability of Spherical Particles," *Fiz. Volnovykh Protsov. Radiotekh. Sis.* **11** (1), 41–49 (2008).
20. Zh. O. Dombrovskaya, A. V. Zhuravlev, G. V. Belokopytov, and A. N. Bogolyubov, "Phonon-Polariton Meta-Atoms for Far Infrared Range," *Phys. Wave Phenom.* **24** (2), 96–102 (2016).
21. A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, Y. H. Fu, et al., "Magnetic Light," *Sci. Rep.* **2** (2012). doi: 10.1038/srep00492
22. F. Weiting and Y. Yixun, "Temperature Effects on the Refractive Index of Lead Telluride and Zinc Selenide," *Infrared Phys.* **30** (4), 371–373.
23. H. W. Icenogle, B. C. Platt, and W. L. Wolfe, "Refractive Indexes and Temperature Coefficients of Germanium and Silicon," *Appl. Opt.* **15** (10), 2348–2351 (1976).
24. H. H. Li, "Refractive Index of Silicon and Germanium and Its Wavelength and Temperature Derivatives," *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9** (3), 561–658 (1980).
25. R. H. Byrd, M. E. Hribar, and J. Nocedal, "An Interior Point Algorithm for Large-Scale Nonlinear Programming," *SIAM J. Optim.* **9** (4), 877–900 (1999).