

УДК 681.7.036

Диселенид рения как перспективный высокоиндексный материал для применений в диэлектрической нанофотонике

Шубник А.А. (Университет ИТМО), Иорш И.В. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – г.н.с., д.ф.-м.н., Иорш И.В.

(Университет ИТМО)

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

Введение. Диэлектрическая нанофотоника – это область современной нанооптики, рассматривающая методы решения задачи управления светом на наномасштабе с помощью высокоиндексных, то есть обладающих высоким значением показателя преломления, наночастиц [1]. Фундаментальные и прикладные результаты диэлектрической нанофотоники обладают перспективами применения в создании ультратонких линз, субволновых нанорезонаторов, а также в биосенсинге. Основной идеей диэлектрической нанофотоники является замена металлических наноматериалов на диэлектрические. Такой подход позволяет избежать джоулевых потерь и значительно расширить функциональные возможности нанофотоники.

Ключевыми параметрами, определяющими степень взаимодействия наноструктуры со светом, являются её геометрия, а также материал, из которого она изготовлена. Так, из теории Ми следует, что добротность первого электрического дипольного резонанса сферической наночастицы растёт квадратично с ростом показателя преломления, из которого изготовлена данная наночастица. В то же время характерный размер, необходимый для достижения резонанса, такой наночастицы падает обратно пропорционально показателю преломления. Таким образом, внедрение материалов с высокими значениями показателей преломления оказало бы позитивное влияние на развитие диэлектрической нанофотоники.

В то время как для длин волн электромагнитного излучения от радиоволн до среднего инфракрасного диапазона возможно достижение высоких значений показателя преломления, превышающих 10, в оптическом и ближнем инфракрасном диапазонах данная величина не превосходит 5 [2]. Таким образом, очень актуальной является задача поиска материалов, обладающих высоким значением показателя преломления.

Основная часть. В данной работе выдвигается гипотеза о высоком значении показателя преломления диэлектрического диселенида рения ReSe_2 . Данная гипотеза подтверждается при помощи *ab initio* расчётов. Для этого при помощи программного пакета Quantum Espresso [3] решаются следующие задачи:

- 1) Оптимизация пространственной структуры элементарной ячейки ReSe_2
- 2) Проведение самосогласованного расчёта
- 3) Вычисление вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости

Результаты *ab initio* расчётов показывают, что значение показателя преломления ReSe_2 превосходит 5 и подтверждают выдвинутую гипотезу.

Следующим шагом стала экспериментальная проверка данного результата. Мы рассмотрели образец, состоящий из полубесконечного слоя Si, слоя SiO_2 толщиной 1 мкм и слоя ReSe_2 толщиной 6 мкм. Для полученной структуры при помощи матричного метода Берремана [4] была вычислена зависимость коэффициента отражения от проекций волнового вектора на оси X и Y, расположенные в плоскости образца. Аналогичные зависимости были получены экспериментальным путём.

На следующем этапе методами машинного обучения был найден тензор диэлектрической проницаемости, наилучшим образом аппроксимирующий экспериментальные данные. Сравнение полученных таким образом экспериментальных значений диэлектрической проницаемости ReSe_2 и аналогичных величин, найденных из *ab initio* расчётов, хорошо

соотносятся друг с другом.

Выводы. В данной работе при помощи *ab initio* расчётов и экспериментальной проверки была подтверждена гипотеза о высоком значении показателя преломления диселенид рения ReSe_2 . Наши результаты показывают, что диселенид рения может быть очень интересен с точки зрения приложений в диэлектрической нанофотонике.

Список использованных источников:

1. Y. Kivshar, "All-dielectric meta-optics and non-linear nanophotonics," *Natl. Sci. Rev.*, vol. 5, no. 2, pp. 144–158, 2018.
2. Baranov, D. G., Zuev, D. A., Lepeshov, S. I., Kotov, O. V., Krasnok, A. E., Evlyukhin, A. B., & Chichkov, B. N. (2017). All-dielectric nanophotonics: the quest for better materials and fabrication techniques. *Optica*, 4(7), 814-825.
3. Giannozzi, Paolo, et al. "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials." *Journal of physics: Condensed matter* 21.39 (2009): 395502.
4. Berreman, D. W. (1972). Optics in stratified and anisotropic media: 4× 4-matrix formulation. *Josa*, 62(4), 502-510.