

Propuesta de Temas de Tesis de Licenciatura

Grupo de Electromagnetismo Aplicado, Dep. de Física, FCEyN-UBA

Temática General: Materiales fotónicos

Abordaje: Teórico-Computacional

Tema de Tesis de Licenciatura: Machine learning aplicado al diseño de materiales fotónicos

Directoras: Diana C. Skigin - Marina E. Inchaussandague

Lugar de Trabajo: Departamento de Física, FCEN-UBA

Contacto: dcs@df.uba.ar, mei@df.uba.ar

Introducción general

El color de la mayoría de los objetos que nos rodean se obtiene mediante pigmentos y/o tinturas. Estos colores se van desgastando con el tiempo, lo cual produce superficies deslucidas que en algunos casos limitan la vida útil del producto. Por otra parte, existen innumerables ejemplos en la naturaleza, tanto en insectos como en aves y plantas, en los cuales, en lugar de pigmentos, la coloración se produce como consecuencia de la interacción de la luz con la microestructura de los tejidos [1]. En estos casos, los colores obtenidos suelen ser llamativos, de apariencia metálica, brillantes e iridiscentes. Inspirándose en las propiedades de color observadas en las especies naturales, se pueden diseñar materiales estructurados con características específicas (geometría, índice de refracción, etc.), que produzcan colores predeterminados que no se desvanezcan con el paso del tiempo y que presenten propiedades angulares específicas [2].

Las redes neuronales fueron introducidas recientemente en el campo de la nanofotónica como una manera alternativa y poderosa de obtener el mapeo no lineal entre la topología y la composición de estructuras nanofotónicas por un lado, y sus propiedades y funciones asociadas por el otro [3]. Teniendo en cuenta los avances recientes en la aplicación del concepto de Machine Learning, se propone aplicar esta herramienta para el diseño de materiales fotónicos con propiedades específicas de color.

A continuación se detallan tres propuestas de trabajos de Tesis de Licenciatura que se enmarcan en esta temática.

1) Diseño de las propiedades de color de sistemas de multicapas corrugadas.

Se analizará la respuesta óptica de una estructura de multicapas corrugadas inspirada en las escamas de la mariposa de la especie *Dione vanillae*, las cuales exhiben una apariencia metálica [4]. Se utilizarán las técnicas de Machine Learning para resolver tanto el problema directo de scattering electromagnético como el problema inverso (problema de optimización), y se analizarán los efectos que produce en la respuesta óptica la variación de diferentes parámetros de la estructura como la geometría, los espesores de las capas y los índices de refracción de los materiales involucrados. Para obtener la base de datos se utilizará un programa desarrollado previamente, basado en el método de Chandezon. Tanto para el armado de dicha base como para la programación de la red neuronal se utilizará el lenguaje Phyton.

2) Diseño y optimización de cristales fotónicos 1D con materiales anisótropos.

Es sabido que ciertos materiales naturales están constituidos por sistemas de multicapas alternadas de materiales inorgánicos y orgánicos. Estos sistemas, como por ejemplo el nácar que se encuentra en algunos moluscos, pueden generar efectos de color muy llamativos como resultado de la interferencia de la luz en dichas multicapas [5]. En muchos casos, los materiales que los constituyen son anisótropos, y esta característica es potencialmente interesante como inspiración para el diseño de materiales con color controlable dependiente de la polarización. Por consiguiente, se propone utilizar técnicas de Machine Learning para optimizar dichas estructuras. Se utilizará un código desarrollado previamente para calcular la respuesta óptica de sistemas de multicapas de materiales arbitrarios, con el cual se podrán obtener los elementos de la base de datos. Luego, se programará la red neuronal utilizando el lenguaje Phyton.

3) Optimización de la topografía de una superficie para propiedades ópticas.

El interés en el modelado de la respuesta electromagnética de superficies corrugadas de perfil complejo ha sido renovado recientemente debido a la respuesta singular que presentan muchos tejidos biológicos con topografías particulares. El estudio de las propiedades ópticas de estas estructuras también resulta fundamental para el diseño de materiales biomiméticos. Por lo tanto, se propone utilizar técnicas de Machine Learning para optimizar la topografía de una superficie con el objetivo de lograr una respuesta óptica específica. Para la resolución del problema de scattering se utilizará un código basado en el método de Rayleigh que fue desarrollado previamente dentro del grupo. Se utilizará el lenguaje Phyton para programar la red neuronal.

Bibliografía

- [1] S. Kinoshita, *Structural Colors in the Realm of Nature*, World Scientific Publishing Co., Singapore, 2008.
- [2] A. Saito, "Material design and structural color inspired by biomimetic approach," *Sci. Technol. Adv. Mater.* 12, 064709 (2011).
- [3] S. Soa, T. Badloea, J. Noha, J. Bravo-Abad and J. Rho, "Deep learning enabled inverse design in nanophotonics," *Nanophotonics* 9, 1041–1057 (2020).
- [4] A. Dolinko, L. Borgmann, C. Lutz, E. Curticean, I. Wacker, M. S. Vidal, C. Szischik, D. Yidenekachew, M. Inchaussandague, D. Skigin, H. Hoelscher, P. Tubaro and A. Barreira, "Analysis of the optical properties of the silvery spot on the wings of the Gulf Fritillary, *Dione vanillae*", *Sci. Reports* (en prensa, Junio 2021).
- [5] J. Salman, C. A. Stifler, A. Shahsafi, C-Y Sun, S. Weibel, M. Frising, B. Rubio-Perez, Y. Xiao, C. Draves, R. Wambold, Z. Yu, D. Bradley, G. Kemeny, P. Gilbert, and M. Kats, "Hyperspectral interference tomography of nacre", *PNAS* 118 (15) e2023623118 (2021).