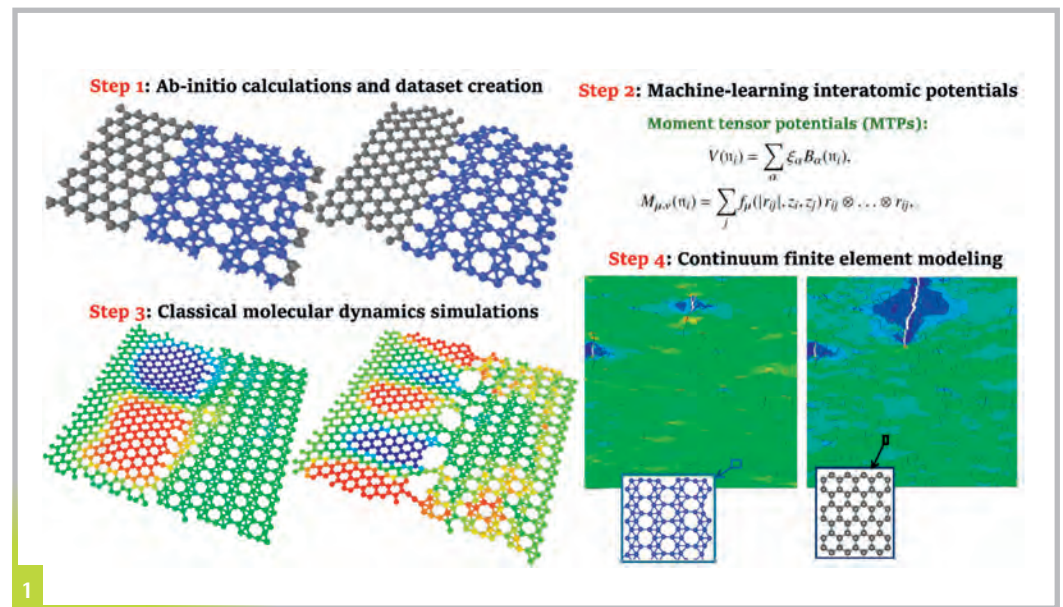


Das Inverse Design

KI für die Gestaltung neuartiger akustischer und optischer Metamaterialien

Licht und Schall sind seit Jahren der Kern der Grundlagenforschung. Insbesondere eine innovative Methode hat die Art und Weise, wie optische Komponenten heute entwickelt werden verändert – das Inverse Design.

Zwei Professor*innen vom Hannoverschen Zentrum für Optische Technologien (HOT) geben einen Einblick in ihre Arbeit.



Photonik und Phononik sind das Herzstück zahlreicher moderner Technologien. Die Photonik befasst sich mit der Natur des Lichtes, sowie der Nutzung optischer Methoden und Technologien in den Bereichen Übertragung, Speicherung und Verarbeitung von Informationen. Prominente Beispiele hierfür sind optische Fasern und Laser, die die Telekommunikation, die Bildgebung, die Sensorik, die Medizin und die Materialverarbeitung de facto revolutioniert haben. Die Phononik umfasst hingegen die Erforschung und Manipulation von Phononen, das heißt Schwingungen in Festkörpern. Sie zielt darauf ab, Phononen für Anwendungen wie Wärmemanagement, Signalverarbeitung und Energiegewinnung zu kontrollieren.

In den vergangenen Jahrzehnten konzentrierte sich die Grundlagenforschung verstärkt darauf, die Interaktion von Licht und Schall mit Strukturen in der Größenordnung von einigen Nanometern, den sogenannten Nanostrukturen, zu verstehen. Dabei ermöglichen technologische Fortschritte in den Fertigungsmethoden, wie der Elektronenstrahlolithographie, der Fokussierung von Ionenstrahlen, dem 3D-Druck mittels Zwei-Photonen-Polymerisation, sowie Bottom-up-Ansätzen wie der (molekularen) Selbstassemblierung und der chemischen Synthese, die praktische Umsetzung von Theorien und die Herstellung von Nanostrukturen mit hoher Präzision und Komplexität.

Vor dem Hintergrund nahezu unbegrenzter Material- und Gestaltungsmöglichkeiten veränderte insbesondere eine innovative Methode die Art und Weise, wie wir optische Komponenten heute designen – das Inverse Design. Diese Methode bereite den Weg zu einer gänzlich neuen Ebene der Effizienz und Kreativität. Traditionell beruhte das Design photonischer und phononischer Komponenten auf einem „Trial-and-Error“ Prinzip, das sich oft als mühsam und zeitaufwändig herausstellt, und dessen maximale Effizienz durch menschliche Intuition auf Basis physikalischer Grundprinzipien beschränkt war. Mit der Anwendung des Inversen Designs verfügen Ingenieure und For-

Abbildung 1
Auf maschinellem Lernen basierende Multiskalenmodellierung für 2D-Materialien.
Quelle: Bohayra 2021

schon nun jedoch über ein umfangreiches Instrumentarium, mit dem sie in kürzester Zeit neuartige Strukturen mit beliebiger Funktionalität kreieren können. Diese computer-gestützte Methode ist zentraler Forschungsschwerpunkt der beiden Teams von Prof. Xiaoying Zhuang und Prof. Antonio Calà Lesina an der LUH, die an neuartigen Designstrategien und Lösungen für Optimierungsprobleme forschen.

KI für 2D-Material-untersuchungen und Inverses Materialdesign

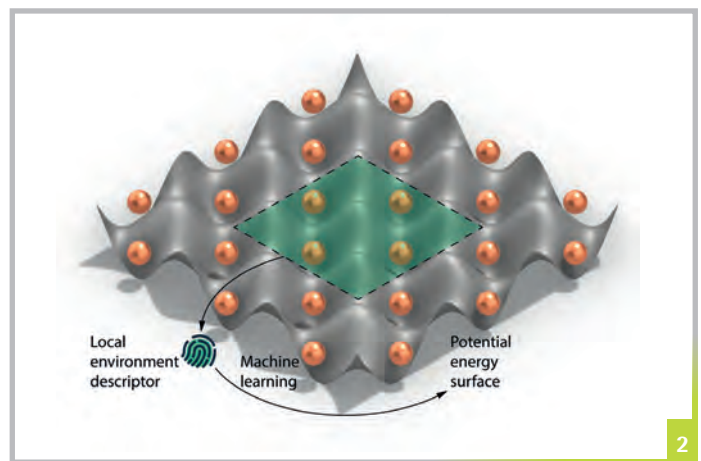
Eine vielversprechende Methode für das Inverse Design bietet das Deep Learning, ein Teilbereich der künstlichen Intelligenz (KI) und des maschinellen Lernens. Deep Learning basiert auf einem Netzwerk künstlicher Neuronen, die über mehrere Schichten Ebenen verwoben sind, inspiriert von der Struktur und Funktion des menschlichen Gehirns. Diese neuronalen Netze ermöglichen es, aus einer großen Menge komplexer Daten Zusammenhänge und Erkenntnisse zu gewinnen und genaue Vorhersagen treffen zu können – eine Aufgabe, die für Menschen auf manuelle Weise nur schwer oder gar nicht zu bewältigen wäre. Ob es um die Erkennung von Objekten in Bildern, das Verstehen und Reproduzieren natürlicher Sprache, die Prognose der Finanzmärkte oder die Optimierung von Fertigungsprozessen geht – die Algorithmen des maschinellen Lernens haben in verschiedenen Anwendungen bereits bemerkenswerte Erfolge erzielt.

Das von Prof. Zhuang geleitete Team an der LUH verfügt über langjährige Erfahrung in der Entwicklung von Methoden des maschinellen Lernens und des Deep Learning für das Inverse Design von 2D-Mate-

rialien und akustischen Metamaterialien. 2D-Materialien haben im Vergleich zu herkömmlichen Materialien einzigartige Eigenschaften, und sind deshalb wichtiger Gegenstand der derzeitigen Forschung. Beispielsweise variieren ihre elektrischen, mechanischen, thermischen und optischen Eigenschaften mit der Anzahl der überlagerten Schichten. Die Optimierung derartiger Materialien mit herkömmlichen Methoden war bisher mit einem erheblichen Aufwand für die Entwicklung und Validierung des dafür benötigten elektrischen Potentials verbunden. Im Zuge der raschen Entwicklung im Bereich künstlicher Intelligenz fanden neue Methoden wie das maschinelle Lernen interatomarer Potentiale (MLIP) Einzug, die diesen Prozess signifikant beschleunigen. Eine genaue Untersuchung der mechanischen Reaktionen von Nanostrukturen ist für die optimale technische Fertigung von Nanobauteilen unerlässlich. Die Dichtefunktionaltheorie (DFT) bietet bewährte Methoden zur Bestimmung der physikalischen Eigenschaften von Festkörpern sowie zur Erforschung neuer Arten von 2D-Nanomaterialien im atomaren Grundzustand, aber geht für große Systeme oder bei endlichen Temperaturen mit einem enormen Rechenaufwand einher. Klassische Molekulardynamiksimulationen (CMD) bieten die Möglichkeit, größere Systeme bei höheren Temperaturen zu untersuchen, erfordern aber die Kenntnis des exakten, interatomaren Potentials. Für die meisten neuartigen Materialien sind diese Potentiale jedoch nicht bekannt, und neue Lösungsstrategien für deren Approximation sind notwendig.

Das Team von Prof. Zhuang präsentierte eine neuartige Methode der Multiskalen-Modellierung von MLIP (Mortazavi 2021), das effizient mit

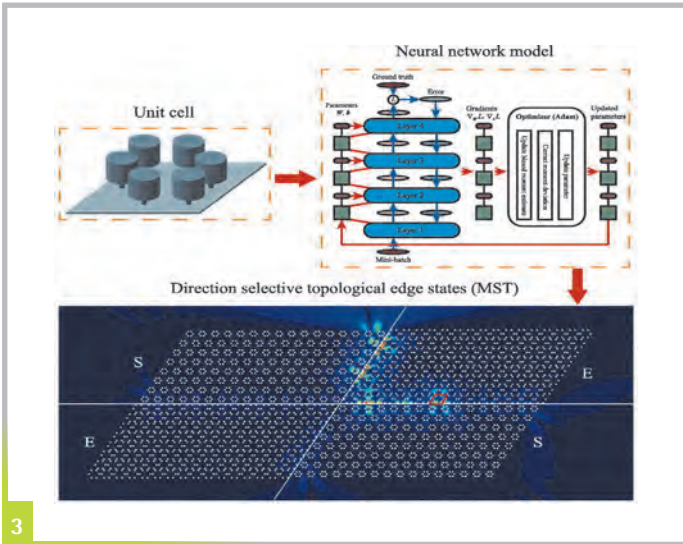
ab-initio-Datensätzen trainiert werden kann (Abb. 1). Ihre Resultate zeigen, dass die mechanischen und Ausfallreaktionen komplexer Nanostrukturen auf der Kontinuumsebene mit der Detailgenauigkeit von anspruchsvollen „First Principle“-Berechnungen untersucht werden können und dies bei überschaubaren Rechenkosten und ohne Zuhilfenahme empirischer Daten. Ein derartiger Ansatz verspricht die Entwicklung vollautomatisierter und vernetzter Plattformen, sowie das Design, die Optimierung und die Erforschung der Eigenschaften von



Materialien auf der Kontinuumsebene, unter Berücksichtigung atomistischer Effekte und der spezifischen Genauigkeit von Berechnungen nach den „First Principles“.

Das von Prof. Zhuang geleitete Team entwickelte zudem die erste Vier-Skalen-Multiskalen-Modellierung auf Grundlage von maschinellem Lernen für das Design und die Erforschung von neuartigen Materialien. Sie haben die Robustheit der Verwendung von MLIP bei der Analyse der mechanischen Stabilität jener Materialien demonstriert und damit die gängigen Methoden der Dichtefunktionaltheorie und der Nutzung empirischer interatomarer Potentiale übertroffen (Abb. 2).

Abbildung 2
Oberfläche der potentiellen Energie, dargestellt durch MLIP.
Quelle: eigene Darstellung

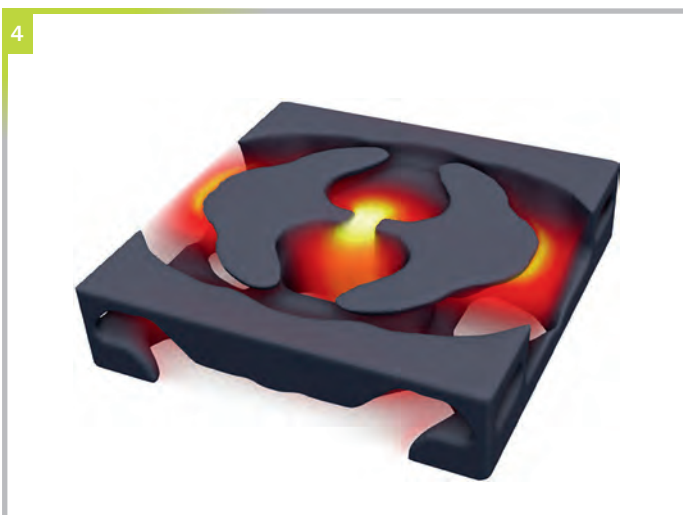


3

Abbildung 3
Inverses Design von topologischen „Metaplates“ für Biege-
wellen mit maschinellem Lernen.
Quelle: He 2021

Die von ihnen entwickelten MLIP dienen auch dazu, die Stabilität, die mechanischen Eigenschaften, die Wärmeleitfähigkeit des Materialgitters, die piezoelektrische und flexo-elektrische Reaktion sowie die photokatalytischen, optischen und elektronischen Eigenschaften zu untersuchen. Darüber hinaus arbeitete die Gruppe am Inversen Design von topologischen „Metaplates“ für Biege-
wellen (Abb. 3), die für Signalverarbeitung, Sensorik und Energiespeicherung verwendet werden können, und stellte kürzlich eine webbasierte Expertensystem-
plattform (AI-DeMat) für rechenintensive Modelle im Materialdesign vor.

Abbildung 4
3D-Nanostruktur aus Silizium
mit optimierter Topologie für die
lokale Feldverstärkung über ein
breites Frequenzspektrum.
Quelle: Gedeon 2023



4

Topologieoptimierung für das Inverse Design in der Nanophotonik

Das Designen von optischen Nanostrukturen und Metamaterialien basiert auf der Optimierung von Struktur- oder Materialparametern, um eine gewünschte Funktionalität und Effizienz zu erreichen. Beispiele hierfür sind die Manipulation des elektrischen Feldprofils, lokale Feldverstärkung oder die Minimierung des Energieverlusts in Wellenleitern.

Das „Trial-and-Error“ Prinzip ist jedoch bei höherer Komplexität des Optimierungsproblems zu rechenintensiv oder gar unzureichend. Mit der computergestützten „Topologieoptimierung“ kann die optimale Materialverteilung der optischen Komponente für eine gewünschte Funktionalität direkt berechnet werden, und stellt als gradientenbasiertes, iteratives Verfahren eine meist adaptivere und effizientere Lösungsstrategie als Deep Learning dar, welches in der Regel eines Trainings mit vorab berechneten Daten bedarf.

Die von Prof. Calà Lesina geführte Gruppe arbeitet an neuartigen Konzepten für die Topologieoptimierung von dreidimensionalen, optischen Nanostrukturen. Die Algorithmen stützen sich auf die Finite-Difference-Time-Domain (FDTD) Methode, die es ermöglicht, optische Komponenten beliebiger (anisotropischer) Materialien für hohe Effizienzen über ein breites Frequenzspektrum zu optimieren – Metalle und Halbleiter eingeschlossen (Abb. 4). Die Optimierung über ein breites Frequenzspektrum weist eine größere Robustheit gegenüber Fertigungstoleranzen und temperaturbedingten Materialschwankungen auf. Die Methode wurde in eine eigens entwickelte, parallelisierte

FDTD-Software eingebettet, um eine effiziente und zeitsparende Optimierung auf Supercomputern gewährleisten zu können, und erlaubt somit die Inangriffnahme von Optimierungsproblemen mit einer sehr großen Anzahl von Designvariablen.

Darüber hinaus setzt das Team um Prof. Calà Lesina die Technik des Inversen Designs im Bereich der integrierten Optik ein, um die Leistungsfähigkeit von integrierten optischen Schaltkreisen zu verbessern. Hierbei können neue Funktionalitäten für Wellenleiter entwickelt und gleichzeitig deren Platzbedarf minimiert werden. Dies wird durch die topologische Veränderungen herkömmlicher Wellenleiter im Nanometerbereich ermöglicht, um so leistungsfähigere „Meta-Wellenleiter“ anzufertigen. Das Team hat außerdem gezeigt, dass es möglich ist, die optische Phase des elektrischen Feldes in integrierten optischen Strahlteilern innerhalb der für solche Bauelemente zulässigen theoretischen Grenzen kontrollieren zu können (Abb. 5). Derartig optimierte, integriertere Strahlteiler stellen einen bedeutenden Beitrag für den Forschungszweig der Quanteninformationsverarbeitung dar.

Die Nachfrage nach kompakten und multifunktionalen optischen Komponenten wächst stetig, und ihre schnelle Optimierung und Fertigung ist ein entscheidender Faktor für den technologischen Fortschritt. Der Einsatz neuer Methoden der Topologieoptimierung hilft Ingenieuren, das Design komplexer Komponenten zu vereinfachen, die Kosten für die Herstellung zu senken und die Entwicklung modernster integrierter Systeme für Anwendungen von der Telekommunikation bis zum Quantencomputing zu beschleunigen.

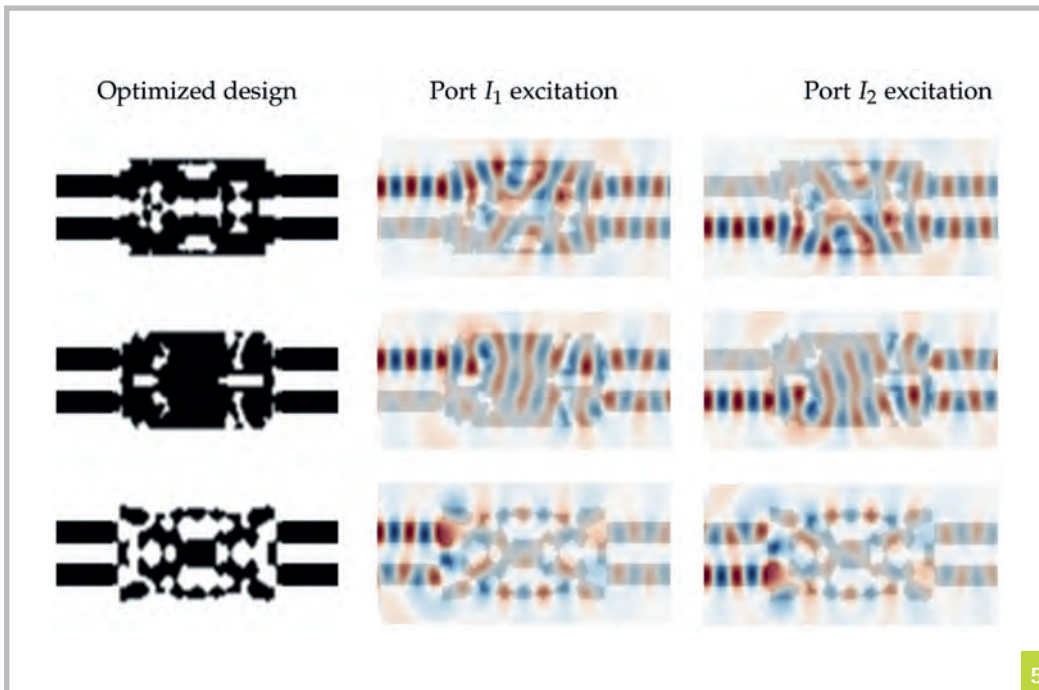


Abbildung 5
Steuerung der optischen Phase
am Ausgangsport eines integrier-
ten Strahlteilers durch Topologie-
optimierung.

Quelle: Nanda 2024

Literatur

- Mortazavi, Bohayra, et al. „First-principles multiscale modeling of mechanical properties in graphene/borophene heterostructures empowered by machine-learning interatomic potentials.“ *Advanced Materials* 33.35 (2021): 2102807
- He, Liangshu, et al. „Inverse design of topological metaplates for flexural waves with machine learning“. *Materials & Design* 199 (2021): 109390
- J. Gedeon, E. Hassan, A. Calà Lesina, Time-domain topology optimization of arbitrary dispersive materials for broadband 3D nanophotonics inverse design, *ACS Photonics*, vol. 10, no. 11, pp. 3875-3887, 2023
- A. Nanda, M. Kues, A. Calà Lesina, Exploring the fundamental limits of integrated beam splitter with arbitrary phase via topology optimization, *Optics Letters*, vol. 49, no. 4, pp. 1125-1128, 2024



Prof. Xiaoying Zhuang

ist Professorin am Institut für Photonik. Ihre Forschungsschwerpunkte sind maschinelles Lernen und Computergestützte Mechanik mit Schwerpunkt auf Multiphysik/Multiskalenmodellierung für das Design neuartiger phononischer Systeme und Metamaterialien. Prof. Zhuang wurde mit dem ERC Starting Grant und dem Heinz-Maier-Leibnitz-Preis ausgezeichnet. Kontakt: zhuang@iop.uni-hannover.de



Prof. Antonio Calà Lesina

ist mit dem Zentrum für Optische Technologien Hannover, dem Institut für Transport- und Automatisierungstechnik (Fakultät für Maschinenbau) und dem Exzellenzcluster PhoenixD verbunden. Sein Team ist spezialisiert auf die Topologieoptimierung, die computergestützte Nanophotonik, und die Modellierung der Licht-Materie-Wechselwirkung auf der Nanoebene für die Simulation und das Design von modulierbaren, optischen Metaoberflächen und integrierten Metaoptiken. Kontakt: antonio.calalesina@hot.uni-hannover.de