

太赫兹导模谐振滤波器的自动化设计方法研究

邵天宇, 谷建强*, 师文桥

天津大学太赫兹研究中心, 精密仪器与光电子工程学院, 光电信息技术教育部重点实验室, 天津 300072

摘要 太赫兹窄带滤波器是太赫兹波段无线通信、高分辨光谱分析和被动式安检成像等技术设备中不可或缺的功能器件,而介质光栅中的导模谐振(GMR)效应是实现高品质因数太赫兹窄带滤波器的重要方法。目前,常使用严格耦合波分析法(RCWA)描述光栅的辐射特性并结合粒子群算法(PSO)优化结构参数来设计导模谐振滤波器(GMRF)。然而,该方法的建模过程复杂并且不能设计广义的超材料光栅。本文提出一种新的自动化设计方法,使用电磁仿真软件 CST 和 PSO 相结合设计导模谐振滤波器,采用含有惩罚项的目标函数对滤波器参数进行优化。运用该设计方法分别设计了中心频率位于 0.65 THz 的一维矩形光栅带阻滤波器和中心频率位于 0.6 THz 的二维偏振无关的超材料导模谐振滤波器,并通过光刻和反应离子刻蚀加工所设计的高阻硅光栅,分别测量了光栅在 TE 偏振态下的正入射光谱和入射角为 4°、8°的斜入射光谱,谐振的分布和变化规律与仿真结果一致,验证了设计方案的有效性。该研究为太赫兹波段导模谐振器件的研究提供了新的设计方法,并由此推动太赫兹无线通信、光谱分析和被动成像的发展。

关键词 太赫兹技术; 导模谐振; 粒子群算法; 光栅

中图分类号 O436 **文献标志码** A

doi: 10.3788/CJL202148.2014001

1 引言

太赫兹波是指频率介于 0.1~10 THz 的电磁波,该波段对于大多数非极性材料表现出较高的透过率,许多物质的特征谱线也分布在这个频段,因此太赫兹波在光谱分析、安检成像、无线通信等领域具有广阔的应用前景^[1-6]。然而,这些应用的实现离不开能够调制太赫兹波的功能器件,比如完美吸收体^[7]、偏振片^[8]、滤波器^[9]等。其中,滤波器是一种广泛使用的功能器件,而窄带滤波器在太赫兹被动成像、太赫兹高精度光谱分析和太赫兹高速通信中是不可或缺的元件。为了获得高品质因数的滤波效果,研究人员采用了频率选择表面^[10]、超表面^[11]和导模谐振效应来设计各类滤波器。和基于其他原理的窄带滤波器相比,介质光栅中的导模谐振效应的欧姆损耗更低,也更容易产生高品质因数的谐振。导模谐振效应是 1902 年由 Wood 发现的广泛存在于光栅中的异常现象^[12],光栅外的电场随着波长和

入射角等入射条件的变化,表现为剧烈的谐振,因此导模谐振在传感器、滤波器上有广泛的应用。具体到太赫兹波段,2016 年,Zhao 等^[13]在太赫兹波段研究了电磁诱导透明与导模谐振之间的动态转换过程。2017~2018 年,洪治课题组对利用超材料实现导模谐振进行了系列化研究^[14-17]。2018~2019 年,Jeon 的课题组提出了多层平板波导和可调谐的太赫兹导模谐振滤波器^[18-22]。2020 年,Han 等^[23]在全介质的超表面中观察到了导模谐振并且发现小角度入射会导致非对称保护的连续域束缚态现象。以上进展很大程度上推进了太赫兹波段滤波器的研究,但在导模谐振滤波器的自动化设计领域的相关研究工作还很少,依据具体应用所需的光学响应来反向设计导模谐振滤波器依旧是一个亟待解决的问题。为此,本文提出一种太赫兹导模谐振滤波器的自动化设计方法,即通过粒子群优化(PSO)算法调用电磁仿真软件 CST 计算光栅的透射率进而优化结构参数。文中围绕中心频率位于 0.65 THz 的横截面为矩

收稿日期: 2021-02-07; 修回日期: 2021-03-05; 录用日期: 2021-03-15

基金项目: 国家自然科学基金(61975143, 62027820, 61622505)

通信作者: *gjg@tju.edu.cn

形的一维硅基光栅和中心频率位于 0.6 THz 的金属超材料光栅展开了流程设计。为了验证设计结果的有效性,我们开展了导模谐振滤波器在实际应用中的滤波效果,我们开展了导模谐振滤波器在不同入射角度下的透射率测量实验。通过反应离子刻蚀,使用电阻率大于 $10000 \Omega \cdot \text{cm}$ 的硅片加工了中心频率位于 0.65 THz 的一维光栅结构。利用光谱分辨率为 5 GHz 的 8F 太赫兹时域光谱系统测量了高阻硅光栅在 0° 、 4° 、 8° 的透射光谱,在与仿真结果比较后确定了 0.69 THz 的谐振是导模谐振,28 GHz 的线宽基本满足设计要求与实际使用的需要。这种新的设计方法不仅推动了太赫兹波段导模谐振滤波器的研究,还为其他功能器件的自动化设计提供了参考和借鉴。

2 设计过程和结果

2.1 算法流程图

自从光栅中的导模谐振效应被发现以来,导模谐振效应在滤波器和传感器领域表现出巨大的应用前景,研究人员发展了多种分析模型来理解导模谐振,但是到 20 世纪末,设计具有指定光学响应的导模谐振滤波器仍缺乏成熟、统一的方法,直至各种进

化算法的快速发展为这一问题提供了解决思路。Tibuleac 和 Magnusson^[24] 在 2000 年成功地使用遗传算法设计了导模谐振窄带滤波器,开启了导模谐振滤波器自动化设计的研究。随后,又出现了将牛顿型算法、PSO 算法、模拟退火算法、蛙跳算法、文化算法应用到导模谐振滤波器设计的研究工作^[25-29]。其中,PSO 是一种受到自然界鸟类群体觅食所启发而衍生出的一种仿生群智能算法,其原理简单易于实现,而且研究表明采用自适应惯性权重变化的 PSO 相比于遗传算法更容易收敛到全局最优解,因此成为了导模谐振滤波器设计中的常用算法。本文采用的优化工具正是离散二进制编码的 PSO,但与以往不同的是,本文计算的工具有了商用的电磁仿真软件,而经典的设计大多采用严格耦合波分析法(RCWA)作为光栅透射率或反射率的计算工具,后者是一种非迭代的确定性计算方法,虽然具有较高的精度,但是针对不同的模型需要重新建立电磁边界方程,过程繁琐而且不适合处理表面结构复杂的模型。而本文中选择使用商用电磁仿真软件 CST 替代 RCWA 作为计算透射率的工具,搭建如图 1 所示的联合仿真平台:1) 在初始化过程中,主要限定

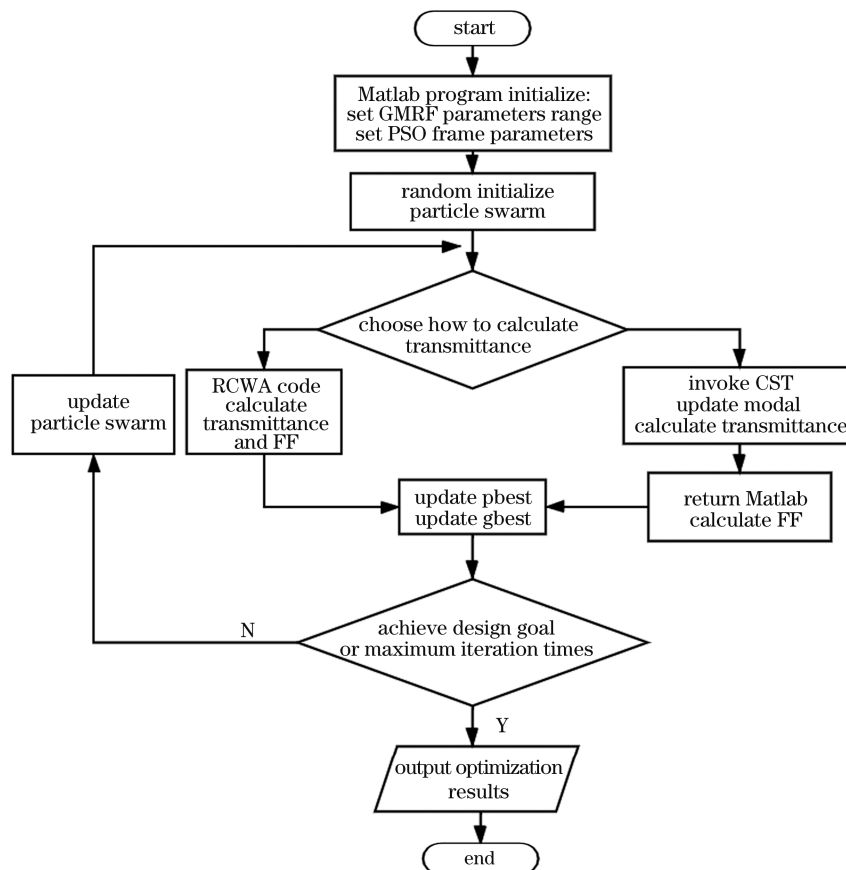


图 1 导模谐振器件自动化设计的算法流程图

Fig. 1 Flowchart of the automated design of guided mode resonance filters

导模谐振滤波器待优化参数的划分方式和范围,设置 PSO 框架的参数;2) 程序随机生成初始粒子群;3) 调用 CST 软件计算粒子群所描述滤波器的透射率;4) 将所得结果输出到 matlab 中计算适应度函数 (FF, 评价个体优劣的数学函数, 也称目标函数);5) 与以往的个体最优解和全局最优解进行择优更新^[30];6) 将更新后的最优粒子群透射率与设计目标进行比较;7) 未达到设计要求则更新粒子群重新开始步骤 3~7 的过程, 达到要求则输出结构参数和透射率, 完成整个设计过程。为了与调用 RCWA 的自动化设计进行对比, 如图 1 所示, 我们也编写了调用 RCWA 的传统 PSO 设计流程, 与本文所提方法最大不同在于, 计算透射率时采用的方法是 RCWA 算法。

2.2 硅光栅的设计结果

图 2 是参数待优化的硅光栅的横截面示意图和顶视图, 图中 x 轴为光栅周期分布的方向, y 轴垂直于入射面, z 轴垂直于光栅与衬底的边界, n_0 、 n_1 、 n_2 分别是空气、硅衬底层以及光栅的等效介质层^[31]的折射率。 h_1 和 h_2 则分别表示光栅层的高度和衬底层的厚度。 p 是光栅的周期, w 是结构的宽度, 定义占空比为 $f = w/p$ 。 θ_{+1} 和 θ_{-1} 分别代表 +1 和 -1 级的衍射角。线偏振的平面波垂直入射到光栅表面, 经过光栅衍射后耦合进波导层, 如果衍射波恰好满足波导层的相位匹配条件, 那么将会在一些

分立的频率位置出现导模谐振效应^[15]。定义电矢量垂直于入射面的电磁波为 TE 波, 定义电矢量平行于入射面的电磁波为 TM 波。本文只考虑入射波与衍射波共处于入射面的平面衍射情况。

算法开始阶段, 需要分别对 PSO 算法中的关键参数和导模谐振器件的结构参数等进行初始化。设置粒子数为 50, 算法迭代次数为 80, 个体分量和社会分量的学习因子均取 1.5, 惯性权重的最大值为 0.9、最小值为 0.4, 惯性权重随着算法的执行线性变化。实验结果表明上述粒子群算法的参数设置可以很好地平衡计算时间与求解精度。设置导模谐振滤波器的总高度 ($h_1 + h_2$) 为 $300 \mu\text{m}$ 。考虑到加工后结构的稳定性, 将衬底厚度 h_2 的范围限制在 $150 \sim 250 \mu\text{m}$, 周期 p 的范围限制在 $50 \sim 200 \mu\text{m}$, 占空比 f 的范围限制在 $0.2 \sim 0.8$ 。将以上三个参数进行二进制编码后顺次连接, 即构成了待优化的解向量, 编码的位数越多则求解精度越高。光栅的透射率 $T(\lambda)$ 可以选择使用 RCWA 代码或者 CST 计算, 代入求解前需要把已经编码的结构参数 h_2 、 p 、 f 映射回实数范围。在调用 CST 前, 需要进行边界条件的设置。为了提高求解速度, 采用时域求解器计算, 对于 TE 偏振态的入射波, y 方向上采用电壁边界条件, x 方向上采用磁壁边界条件。

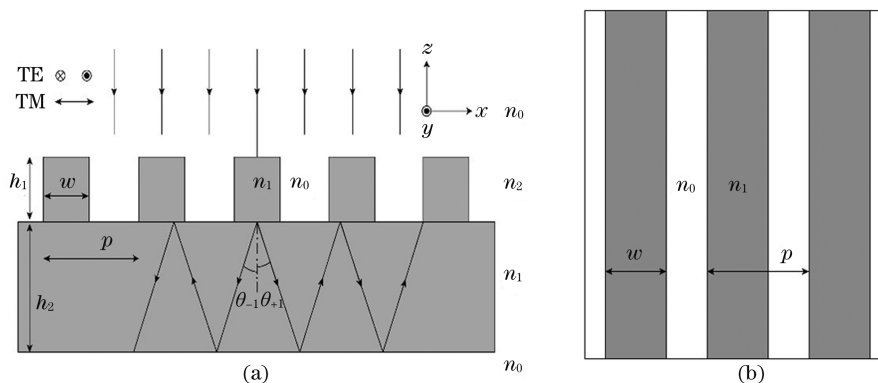


图 2 正入射条件下的硅光栅示意图。(a) 光栅的横截面示意图; (b) 光栅的顶视图

Fig. 2 Schematic diagram of the silicon grating under normal incidence. (a) Schematic diagram of cross section; (b) top view of the grating

算法执行期间需要根据适应度函数值筛选最优解, 适应度函数值由两部分组成, 第一部分是迭代过程中计算出的透射率 $T(\lambda)$ 相对于目标透射率 $O(\lambda)$ 的均方误差平方根。第二部分是为了限制中心频率所添加的惩罚项, (1) 式中的 M 、 λ_{\min} 、 λ_{\max} 、 λ_c 分别表示设计频段中的采样点数、最小频率、最大频率、中心频率。显然, 对于一个透射式的带阻滤波器

而言, 理想的中心频率处的透射率应该是零, 如果在优化过程中出现了中心频率处的透射率接近于 1 的情况, 则会导致惩罚项趋于无穷。因为 PSO 的更新过程是通过比较解向量的适应度函数值与个体最优值和全局最优值, 从而保留适应度函数更小的解向量^[31], 所以惩罚项的添加可以有效地排除错误的解, 增加获得理想设计结果的概率。

$$X_{\text{FF}} = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{\lambda=\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} [T(\lambda) - O(\lambda)]^2} + P_{\text{penalty}},$$

$$P_{\text{penalty}} = \frac{1}{1 - T(\lambda_c)}.$$
 (1)

表1 罗列出了分别使用 CST 和 RCWA 计算的

表1 使用 CST 和 RCWA 优化出的光栅的结构参数和谐振频率

Table1 Parameters and resonance frequencies of the gratings optimized by CST and RCWA

Method	Polarization	$h_1/\mu\text{m}$	$h_2/\mu\text{m}$	$p/\mu\text{m}$	f	f_d/THz	f_n/THz
RCWA	TE	126	174	165	0.32	0.6514	0.6502
RCWA	TM	50	250	200	0.48	0.6442	0.6655
CST	TE	118	182	162	0.32	0.6522	0.6512
CST	TM	85	215	139	0.50	0.6533	0.6559

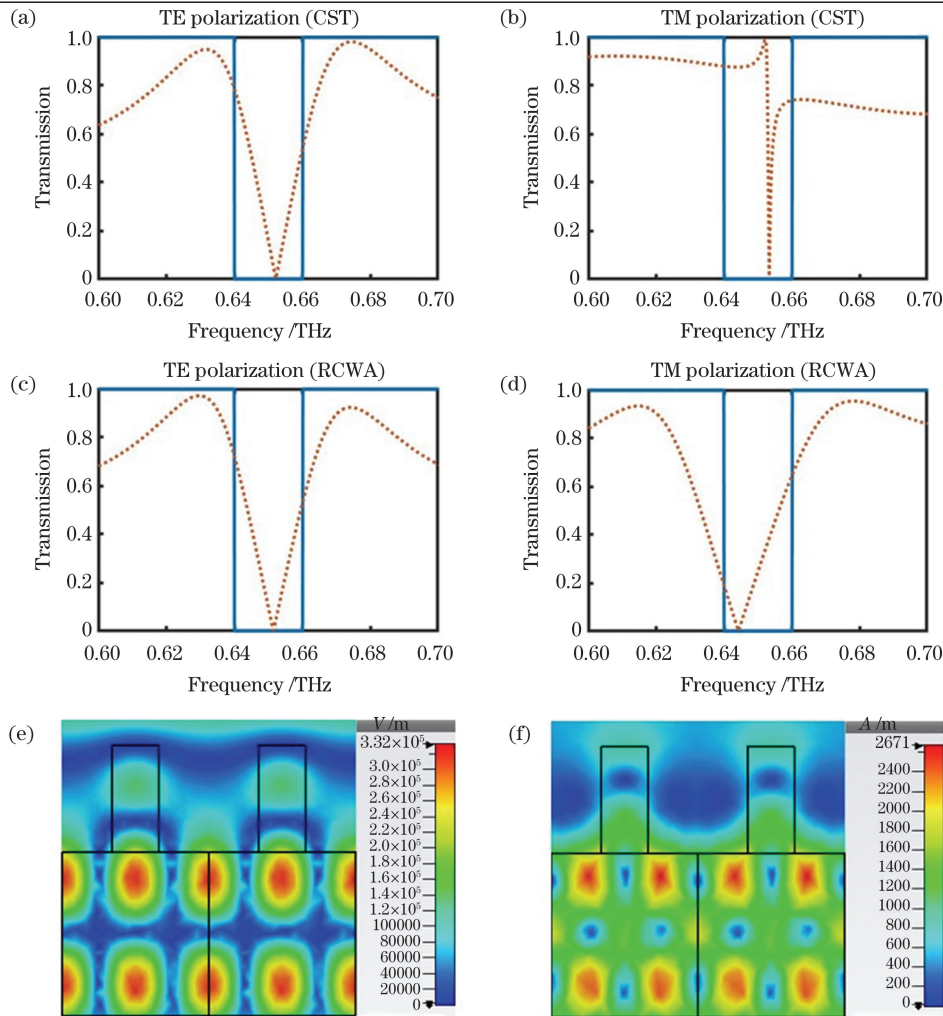


图3 硅光栅的透射率及电磁场分布图。(a)使用 CST 模拟的硅光栅在 TE 偏振态入射波时的透射率;(b)使用 CST 模拟的硅光栅在 TM 偏振态入射波时的透射率;(c)使用 RCWA 计算出的硅光栅在 TE 偏振态入射波时的透射率;(d)使用 RCWA 计算出的硅光栅在 TM 偏振态入射波时的透射率;(e)结果(a)在 0.6522 THz 的电场分布;(f)结果(a)在 0.6522 THz 的磁场分布

Fig. 3 Transmission and electromagnetic field distributions of silicon grating. (a) Transmission of silicon grating calculated by CST under TE polarization; (b) transmission of silicon grating calculated by CST under TM polarization; (c) transmission of silicon grating calculated by RCWA under TE polarization; (d) transmission of silicon grating calculated by RCWA under TM polarization; (e) electric field distribution of Fig. 3(a) at 0.6522 THz; (f) magnetic field distribution of Fig. 3(a) at 0.6522 THz

理想的透射率分布,点线对应表1中四种设计结果的透射率分布,可以看到对TE偏振态,基于CST和RCWA的两个设计结果高度相似,说明了使用CST可以获得与RCWA一样的高精度设计结果,而更值得注意的是,在TM偏振态的设计结果中,使用CST设计的结果的品质因数明显优于RCWA的设计结果,说明了CST在高品质因数器件的设计中可能具有广阔的发展空间。图3(e)、(f)中给出了图3(a)中谐振频率处的电场和磁场分布,入射的平面波经过光栅衍射后被局域在了波导层中。从图中可以明显看到波节和波腹,这种驻波形式的场强分布恰好符合导模谐振的特点。

2.3 超材料光栅的设计结果

使用CST来设计导模谐振器件的最显著优势在于,省去了对模型建立严格的电磁方程的步骤,通过内嵌的有限积分求解算法,只需要建立好模型并正确设置边界条件,即可计算出指定结构的透射率等信息。本文所提方法的优越性集中展示在图4中,即使用PSO调用CST优化出的一种超材料光栅的结构图和透射率仿真结果。超材料作为一种能对入射电磁波实现周期性调制的元件,是符合光栅

的广义定义的,因此也具有产生导模谐振的可能,有研究者已经利用超材料实现了导模谐振^[13],然而RCWA无法对图4(a)这样表面结构复杂的情况建模,但是采用CST建模仿真则毫无困难。图4(b)中, p 表示周期, w 表示金属条线宽, f 表示占空比。金属选择CST材料库中内置的铝,硅在太赫兹波段是一种无色散的介质,固定硅的折射率为3.45。金属层的厚度为 $3\ \mu\text{m}$,衬底的厚度为 $300\ \mu\text{m}$ 。采用图1的算法结构,对 p 、 w 、 f 进行优化,最终周期 p 为 $187.6\ \mu\text{m}$,线宽 w 为 $10\ \mu\text{m}$,占空比 f 为0.476。图4(c)是超材料在 $0.55\sim 0.65\ \text{THz}$ 波段的透射率,实线表示设计目标,点线表示设计结果。图4(d)是 $0.6\ \text{THz}$ 处超材料横截面的电场分布,由图可见,电场主要局域在衬底组成的波导层中,并有明显的驻波特点,因此属于导模谐振而非表面电流产生的谐振。 $0.6322\ \text{THz}$ 处的谐振通过场图分析也属于导模谐振,尽管出现了设计目标以外的次谐振,但设计结果在指定波段符合预期,尤其是惩罚项的使用很好地限制了谐振的频率位置。从此例可见,本文提出的设计方法具有更为广泛的适用范围和远大的发展空间。

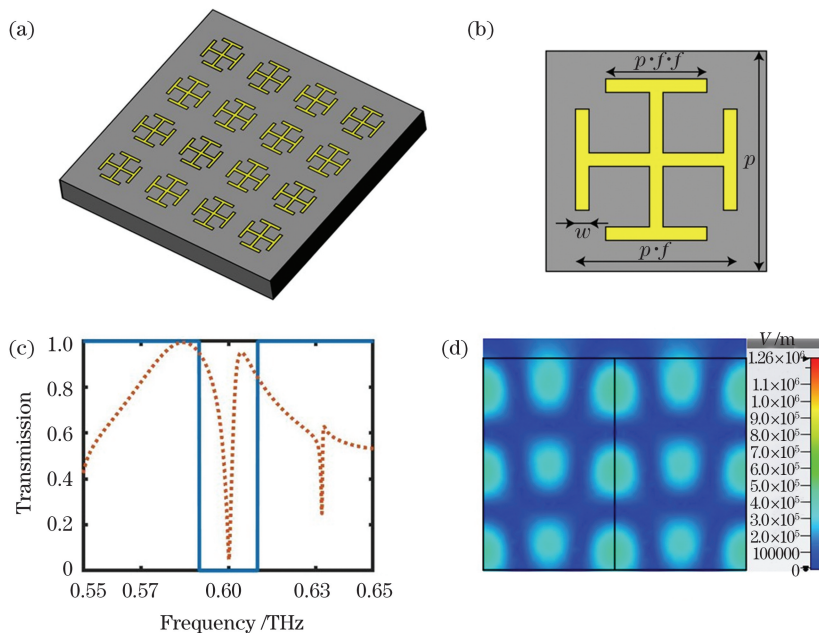


图4 超材料光栅的结构示意图及设计结果。(a)三维视图;(b)方形单元结构;(c) $0.55\sim 0.65\ \text{THz}$ 之间的透射率分布;(d) $0.6\ \text{THz}$ 处的横截面电场分布

Fig. 4 Schematic and design result of the metasurface grating. (a) Three-dimensional view; (b) square cell structure; (c) transmission distribution between $0.55\ \text{THz}$ and $0.65\ \text{THz}$; (d) cross section electric field distribution at $0.6\ \text{THz}$

3 样品加工及实验

为了实验验证本文所提的自动化设计方法的有效性,我们采用光刻和深反应离子刻蚀的方法加工

了图2(a)对应的硅光栅,光栅的周期为 $162\ \mu\text{m}$,结构宽度为 $52\ \mu\text{m}$,光栅层高度为 $118\ \mu\text{m}$,波导层厚度为 $182\ \mu\text{m}$ 。首先,使用匀胶机把光刻胶AZ4620均匀地旋涂在晶圆表面。然后在热板上保持

100 °C, 加热 3 min。把烘干后的晶圆放入光刻机, 通过紫外光照射使得光刻胶变性从而将光栅图样转移到光刻胶涂层。取出曝光后的硅片, 放在 80 °C 的热板上烘干 5 min, 放入显影液中显影。经过显影后的光刻胶图层将只保留光栅的图形区域。在反应离子刻蚀阶段, 我们分别使用 C_4F_8 和 SF_6 作为钝化气体和刻蚀气体, 交替进行钝化与刻蚀可以使得样品被持续地垂直刻蚀。图 5 给出了加工出的光栅

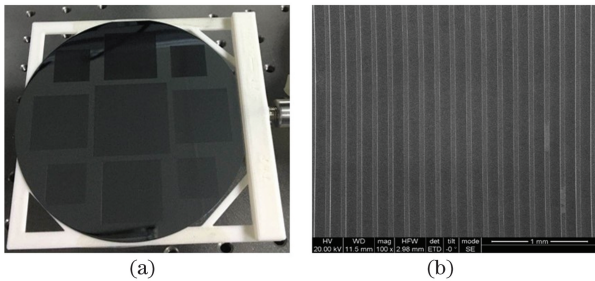


图 5 硅光栅样品图。(a)硅光栅的照片;(b)中心样品的扫描电镜图像

Fig. 5 Photographs of silicon grating sample. (a) Photograph of silicon grating; (b) SEM of the central sample

的实物图和中心样品的扫描电镜图像(SEM)。

硅光栅透射率的测量是使用如图 6 所示的典型的 8F 太赫兹时域光谱系统完成的, 太赫兹源和探测器都是基于光电导天线的原理, 可以覆盖 0.2~3 THz 的频率范围。图 6(a)、(b)分别给出了 8F 太赫兹时域光谱系统的太赫兹传播光路原理图和实物图, 由光电导天线激发出的太赫兹波先后经过四个 90°离轴抛物面镜最终会聚到探测天线, 待测的 GMRF 放置在抛物面镜 2 和 3 之间的焦平面处。由于待测量的光栅是工作在 TE 偏振态下的, 实验中需要保持 TE 偏振态的太赫兹波垂直入射到样品表面。导模谐振是一种高品质因数的谐振类型, 为了获得足够的频率分辨率, 每一个时域光谱都是在 200 ps 的延迟时间下采集的, 相应的频谱可以达到 5 GHz 的分辨率。

图 7(a)和(b)分别给出了硅光栅在 TE 偏振态的太赫兹波正入射条件下的时域信号和频域光谱。其中, 频域光谱是把无样品的空扫光谱作为参考值处理后的相对值, 以此处理空气中水分对太赫兹的吸收问题。图 7(c)中给出了硅光栅在 0.5~0.8 THz 的

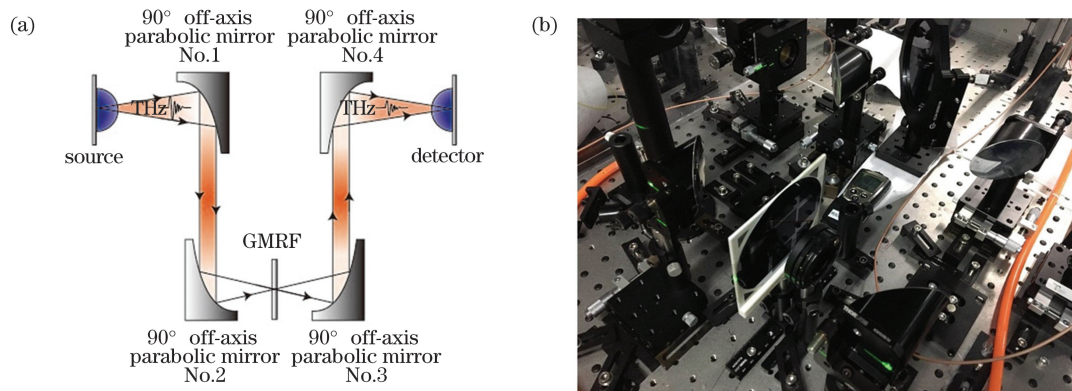


图 6 8F 太赫兹时域光谱系统。(a)太赫兹传播光路原理图;(b)实验装置的照片

Fig. 6 8F terahertz time domain spectroscopy system. (a) Terahertz beam path diagram; (b) picture of experimental facility

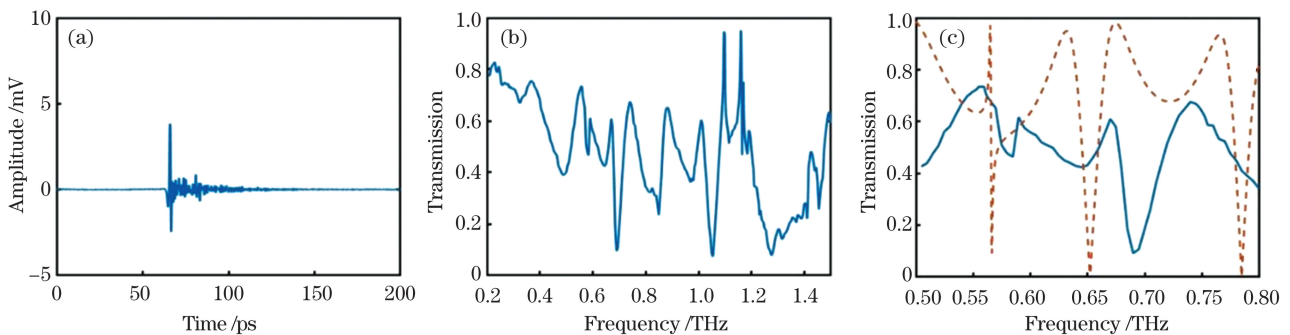


图 7 硅光栅中心样品的测量结果。(a) 时域太赫兹信号;(b) 太赫兹频谱;(c) 仿真(点线)与实验结果(实线)的对比

Fig. 7 Measurement results of the central sample of silicon grating. (a) Time domain THz signal; (b) its corresponding amplitude spectrum; (c) comparison between simulation results (dot line) and experimental results (solid line)

频段的实验结果(实线)与仿真结果(点线)的对比,可以清楚地观察到在 0.69 THz 的线宽为 28 GHz 的导模谐振。与设计值 0.65 THz 相比,实验测量的中心频率发生了 40 GHz 的蓝移。考虑到导模谐振效应对结构参数的变化非常敏感,我们通过改变光栅周期和高度的方法来模拟加工误差对透射率测量的影响,图 8 给出了尺寸误差对谐振分布影响的仿真结果。图 8(a)中,周期分别取 160 μm 、

162 μm 、164 μm ,其余参数不变。随着周期增大,谐振频率向低频移动,反之,向高频移动。图 8(b)中,光栅高度 h_1 分别取 116 μm 、118 μm 、120 μm ,总高度固定为 300 μm ,其余参数保持不变。随着刻蚀深度增加,谐振频率蓝移,反之,红移。因此,刻蚀深度变大或者光栅周期的减小都可能导模谐振向高频地移动。此外,表面缺陷导致的局部对称性的破坏也可能使得实际测量的谐振频率偏离设计值。

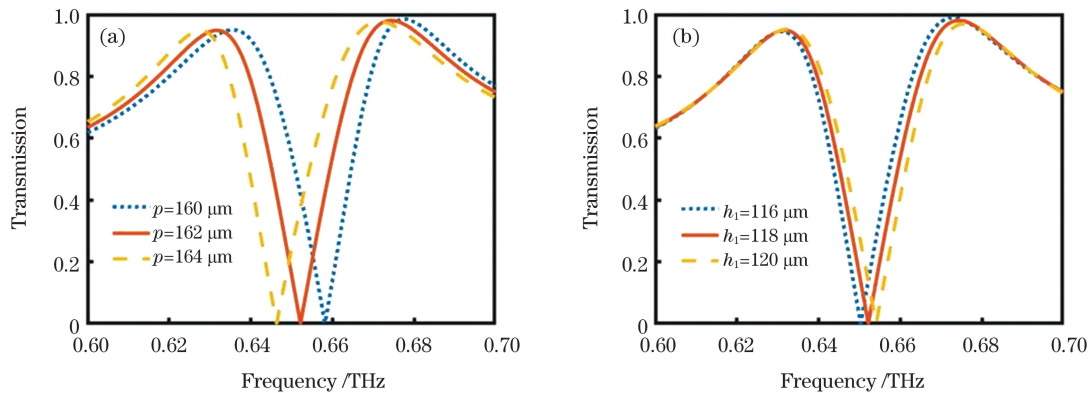


图 8 样品尺寸误差对谐振频率的影响;(a)水平误差的影响;(b)深度误差的影响

Fig. 8 Influence of size error on the resonance frequency. (a) Influence of horizontal error; (b) influence of depth error

为了进一步确认 0.69 THz 的谐振是否为所设计的导模谐振,我们测量了硅光栅在不同入射角度下的透射率。在图 6 实验装置的基础上,通过在样品架底端增加旋转台,可以使硅光栅沿着对称轴 y 轴旋转。我们分别测量了硅光栅在 0° 、 4° 、 8° 三个入射角下的透射谱,结果如图 9(b)所示。斜入射时,位于 0.69 THz 的谐振劈裂成两个对称分布的谐振。随着入射角增大,两个谐振将远离中心频率。倾斜入射将打破波导层中的 ± 1 级衍射的对称性,因此两束衍射波不再满足原有的相位匹配条件,从而

导致两个新的谐振出现。通过仿真,可以在图 9(a)中发现中心频率在 0.65 THz 的硅光栅具有相同的变化规律,所以实验测得的谐振可以确认是导模谐振。实验测量的透射率平均值低于仿真结果,可能三个原因:1)硅片的阻值不是无限大;2)导模谐振品质因数与样品整体尺寸大小紧密相关^[32],而实验中样品尺寸仅为 3.24 cm \times 3.24 cm;3)样品加工的误差导致了谐振频率分散,这些因素都会造成品质因数的下降。在后续的研究中,如何提高导模谐振滤波器的品质因数将是一个持续发力的研究方向。

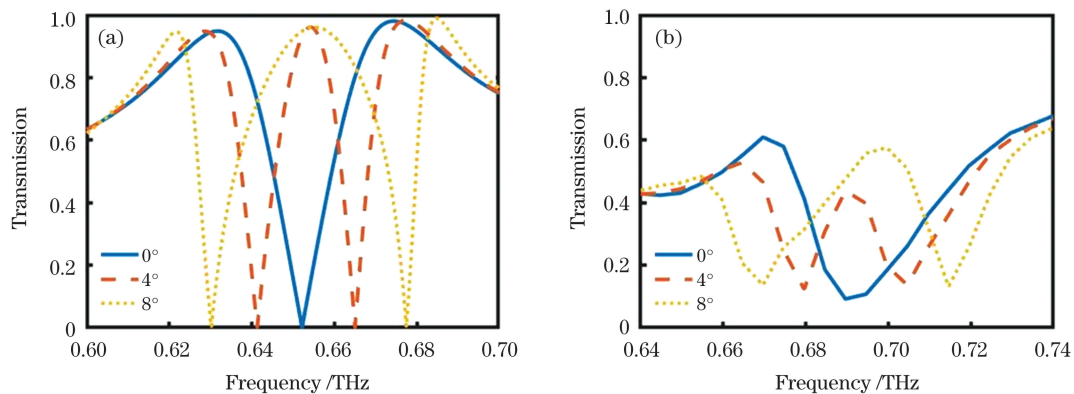


图 9 硅光栅在入射角为 0° 、 4° 、 8° 时的光谱。(a) 仿真结果;(b) 实验结果

Fig. 9 Spectra of the silicon grating at 0° , 4° , and 8° incident angles. (a) Simulation result; (b) experimental results

4 结 论

本文提出了一种自动化设计太赫兹导模谐振滤波器的方案,通过 PSO 调用 CST 软件的方式,设计了中心频率位于 0.65 THz 的硅光栅和中心频率位于 0.6 THz 的广义上的超材料光栅。不同于传统的使用 RCWA 计算光栅透射率的方法,使用 CST 的方式不仅可以获得更高的计算精度,还可以对表面结构复杂的超材料进行建模计算。通过光刻以及反应离子刻蚀的方法,我们加工了在 TE 偏振态下工作的高阻硅光栅,水平方向和垂直方向的加工误差均为 $\pm 2 \mu\text{m}$ 。实验中,采用光谱分辨率为 5 GHz 的 8F 太赫兹时域光谱系统测量,发现硅光栅在正入射的条件下存在中心频率为 0.69 THz 线宽为 28 GHz 的谐振,与设计目标极为相近。并且进一步利用导模谐振对入射角敏感的特点,通过测量光栅在入射角为 0° 、 4° 、 8° 时的透射率,发现 0.69 THz 的谐振分裂成两个新的谐振,斜入射的测量结果与仿真结果的变化规律一致,说明了 0.69 THz 的谐振类型就是原设计方案的导模谐振,从而实验上验证了自动化设计方法的可行性。本文设计思路将推动太赫兹窄带滤波器设计研究,并为太赫兹无线通信、太赫兹光谱分析和太赫兹被动成像做出一份贡献。

参 考 文 献

- [1] Tonouchi M. Cutting-edge terahertz technology[J]. *Nature Photonics*, 2007, 1(2): 97-105.
- [2] Jepsen P U, Cooke D G, Koch M. Terahertz spectroscopy and imaging: modern techniques and applications[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2011, 5(1): 124-166.
- [3] Wang B, Wang X K, Yu Y, et al. Terahertz linear array fast scanning imaging [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(6): 0614029.
王彪, 王新柯, 俞跃, 等. 太赫兹线阵快速扫描成像 [J]. *中国激光*, 2019, 46(6): 0614029.
- [4] Deng Y Q, Sun Q, Yu J, et al. Progress of terahertz radiometry and international comparison[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(3): 0314001.
邓玉强, 孙青, 于靖, 等. 太赫兹辐射功率计量研究进展与国际比对 [J]. *中国激光*, 2017, 44(3): 0314001.
- [5] Wei B G, Yuan H, Zhao Y J, et al. Super-resolution terahertz wave spectrometer[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(6): 0614036.
魏白光, 袁慧, 赵跃进, 等. 超分辨太赫兹波频谱仪系统 [J]. *中国激光*, 2019, 46(6): 0614036.
- [6] Yuan Y H, Chen X Y, Hu F R, et al. Terahertz amplitude modulator based on metasurface/ion-gel/graphene hybrid structure [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(6): 0614016.
袁莹辉, 陈懿宇, 胡放荣, 等. 基于人工超表面/离子凝胶/石墨烯复合结构的太赫兹调幅器件 [J]. *中国激光*, 2019, 46(6): 0614016.
- [7] Tao H, Landy N I, Bingham C M, et al. A metamaterial absorber for the terahertz regime: design, fabrication and characterization [J]. *Optics Express*, 2008, 16(10): 7181-7188.
- [8] Ferraro A, Zografopoulos D C, Missori M, et al. Flexible terahertz wire grid polarizer with high extinction ratio and low loss [J]. *Optics Letters*, 2016, 41(9): 2009-2012.
- [9] Zhu Y H, Vegesna S, Zhao Y, et al. Tunable dual-band terahertz metamaterial bandpass filters [J]. *Optics Letters*, 2013, 38(14): 2382-2384.
- [10] Ferraro A, Zografopoulos D C, Caputo R, et al. Broad- and narrow-line terahertz filtering in frequency-selective surfaces patterned on thin low-loss polymer substrates [J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2017, 23(4): 1-8.
- [11] Yu Z, Chen H, Liu J J, et al. Guided mode resonance in planar metamaterials consisting of two ring resonators with different sizes [J]. *Chinese Physics B*, 2017, 26(7): 077804.
- [12] Wang S S, Moharam M G, Magnusson R, et al. Guided-mode resonances in planar dielectric-layer diffraction gratings [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1990, 7(8): 1470-1474.
- [13] Zhao X L, Zhu L, Yuan C, et al. Reconfigurable hybrid metamaterial waveguide system at terahertz regime [J]. *Optics Express*, 2016, 24(16): 18244-18251.
- [14] Chen H, Liu J J, Hong Z. Guided mode resonance with extremely high Q-factors in terahertz metamaterials [J]. *Optics Communications*, 2017, 383: 508-512.
- [15] Sun Y R, Chen H, Li X J, et al. Electromagnetically induced transparency in planar metamaterials based on guided mode resonance [J]. *Optics Communications*, 2017, 392: 142-146.
- [16] Liu J J, Chen H, Jing X F, et al. Guided mode resonance in terahertz compound metamaterial waveguides [J]. *Optik*, 2018, 173: 39-43.
- [17] Wang Y H, Li X J, Lang T T, et al. Multiband guided-mode resonance filter in bilayer asymmetric metallic gratings [J]. *Optics & Laser Technology*, 2018, 103: 135-141.
- [18] Bark H S, Baek I H, Jang K H, et al. All-dielectric

- Guided-mode resonance filters in THz region [C] // 2019 44th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz), September 1-6, 2019, Paris, France. New York: IEEE Press, 2019: 1-2.
- [19] Bark H S, Jeon T I. Dielectric film sensing with TE mode of terahertz guided-mode resonance[J]. *Optics Express*, 2018, 26(26): 34547-34556.
- [20] Bark H S, Jeon T I. Tunable terahertz guided-mode resonance filter with a variable grating period [J]. *Optics Express*, 2018, 26(22): 29353-29362.
- [21] Bark H S, Kim G J, Jeon T I. Transmission characteristics of all-dielectric guided-mode resonance filter in the THz region[J]. *Scientific Reports*, 2018, 8(1): 13570.
- [22] Lee S B, Bark H S, Jeon T I. Enhancement of THz resonance using a multilayer slab waveguide for a guided-mode resonance filter [J]. *Optics Express*, 2019, 27(20): 29357-29366.
- [23] Han S, Rybin M V, Pitchappa P, et al. Guided-mode resonances in all-dielectric Terahertz metasurfaces[J]. *Advanced Optical Materials*, 2020, 8(3): 1900959.
- [24] Tibuleac S, Magnusson R. Resonant grating filters with diffractive thin-film layers realized with genetic algorithms[C]//*Diffractive Optics and Micro-Optics 2000*, June 18-22, 2000, Québec City, Canada. Washington, D.C.: OSA, 2000: DMB1.
- [25] Bao G, Huang K. Computational design for guided-mode grating resonances[J]. *Journal of the Optical Society of America. A, Optics, Image Science, and Vision*, 2005, 22(7): 1408-1413.
- [26] Shokooh-Saremi M, Magnusson R. Particle swarm optimization and its application to the design of diffraction grating filters[J]. *Optics Letters*, 2007, 32(8): 894-896.
- [27] Ma J Y, Fan Y T, Zhou C H, et al. Application to the design of guide-mode resonance grating filter with using simulated annealing method [J]. *Holography, Diffractive Optics, and Applications IV*, 2010, 7848: 784818.
- [28] Shokooh-Saremi M, Bahar M A. Design of GMR-based narrow bandpass filters using improved shuffled frog leaping algorithm [J]. *Electronics Letters*, 2015, 51(6): 497-499.
- [29] Khorrani Y, Fathi D, Rumpf R C. Fast optimal design of optical components using the cultural algorithm [J]. *Optics Express*, 2020, 28 (11): 15954-15968.
- [30] Eberhart R, Kennedy J. A new optimizer using particle swarm theory[C]//MHS'95. *Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science*, October 4-6, 1995, Nagoya, Japan. New York: IEEE Press, 1995: 39-43.
- [31] Bräuer R, Bryngdahl O. Design of antireflection gratings with approximate and rigorous methods[J]. *Applied Optics*, 1994, 33(34): 7875-7882.
- [32] Bendickson J M, Glytsis E N, Gaylord T K, et al. Guided-mode resonant subwavelength gratings: Effects of finite beams and finite gratings[J]. *Journal of the Optical Society of America. A, Optics, Image Science, and Vision*, 2001, 18(8): 1912-1928.

Automated Design Study of Guided-Mode Resonance Filters Working at Terahertz Frequencies

Shao Tianyu, Gu Jianqiang*, Shi Wenqiao

Center for Terahertz Waves, School of Precision Instrument and Opto-Electronics Engineering, Key Laboratory of Optoelectronic Information Technology, Ministry of Education, Tianjin University, Tianjin 300072, China

Abstract

Objective Terahertz narrowband filters are indispensable functional devices for terahertz wireless communication, high-resolution spectroscopy, and passive security imaging techniques; the guided-mode resonance (GMR) effect in dielectric grating is a promising route for realizing these narrowband filters. The combination of the particle-swarm optimization (PSO) algorithm and rigorous coupled-wave analysis (RCWA) is a widely used method for devising GMR filters. However, Maxwell equations are usually hard to establish and solve when dealing with more complicated gratings, especially for metasurface gratings. This study proposes a novel automated design method that uses the PSO algorithm to invoke the commercial software, CST, to calculate dielectric grating transmission. By adding a “penalty” item in the fitness function, we design a silicon grating with a GMR at 0.65 THz and a polarization-

independent metasurface grating with a GMR at 0.6 THz. The proposed automated design method provides a novel approach for investigating terahertz GMR devices, which may greatly promote the development of terahertz communication, spectroscopy, and passive imaging.

Methods Silicon is almost lossless and nondispersive in a terahertz band, making it suitable for narrowband filters. In this study, we set the refractive index of silicon to 3.45, which has been widely used in previous studies. We aimed to design a silicon grating that worked at 0.65 THz and avoided absorption from water vapor. The whole design process was completed using MATLAB, where the PSO algorithm was easy to implement and converge. The whole design process began from program initialization and setting the parameters, in which the binary-coded PSO was used conveniently control the parameters' resolution. The fitness function adopted herein comprised two parts: the root-mean-square error between the objective and the calculated transmittance and the penalty item used to limit the central frequency. We used the same PSO frame to invoke an RCWA code and the commercial software CST for calculating the grating transmissions (Table 1). The results proved that our method outperforms the RCWA method regarding the design with complicated structures. To experimentally verify our design concept, the designed silicon grating was fabricated using photolithography and deep-reactive ion etching, followed by the measurements with a home-built $8F$ terahertz time domain spectroscopy system (Fig. 6) at incident angles of 0° , 4° , and 8° .

Results and Discussions In the case of a transverse electric (TE)-polarized incident wave, the result obtained from the method using the CST is similar to that obtained by the method using the RCWA. For a transverse magnetic (TM) polarization incident wave, the silicon grating designed by the CST shows a much higher quality factor [Fig. 3(b)]. Moreover, our method can be used to handle more complicated structures, such as metasurface gratings [Fig. 4(a)]. The penalty item in the fitness function limits the central frequency of the metasurface grating at 0.6 THz. Although an additional resonance is located at the higher frequency side, the high- Q resonance satisfies the design requirement. The monitored electric field distribution [Fig. 4(d)] shows nodes and antinodes, which are typical standing wave characteristics, proving that the obtained resonance belongs to the GMR. The fabricated grating sample (Fig. 5) shows an obvious resonance at 0.69 THz under the TE polarization, which slightly deviates from the expected resonance at 0.65 THz. The simulated results illustrate that the resonance of the proposed silicon grating blue-shifts with a decreasing periodicity and an increasing grating height (Fig. 8), which may contribute to the resonance shifts. Changing the incident angles in the measurement splits the resonance at 0.69 THz owing to the broken symmetry of the phase matching condition (Fig. 9), which is consistent with the simulation and proves the GMR attribute of the 0.69 THz resonance.

Conclusions In this study, we propose an automated design method for devising terahertz GMR filters. The parameters of a silicon grating working at 0.65 THz and a more complicated metasurface grating working at 0.6 THz are obtained by invoking CST under the PSO framework. The simulated electric field distributions verify the GMR feature of the resonances realized in the gratings. More importantly, compared with the traditional method using the RCWA, our method can achieve high quality factor resonance and handle complex structures. The fabricated silicon grating is experimentally measured to prove our simulation results with 5 GHz spectral resolution. The grating sample shows an obvious resonance at 0.69 THz with 28 GHz linewidth under the normal incident wave. The GMR attribute of this resonance is well proven by the transmittances at the incident angles of 0° , 4° , and 8° and the simulation results show a splitting behavior caused by the angle dependence of the GMR. This automated design method may promote the research on terahertz narrowband filters.

Key words terahertz technology; guided-mode resonance; particle swarm optimization; grating

OCIS codes 300.6495; 230.1950; 230.7408