基于遗传算法的双层亚波长金属光栅优化

安超,褚金奎*,张然

大连理工大学机械工程学院,辽宁大连 116023

摘要 为改善光栅性能,基于遗传算法,并结合时域有限差分法,在可见光波段优化设计了一种双层亚波长金属光栅结构。经仿真分析,该结构能够实现蓝色波段的偏振滤波功能,透射率最大值能达到 77%,消光比最大值达到 20 dB,半峰全宽为 35 nm。通过分析光栅参数对光栅性能的影响,证明该结构具有较大的工艺容差。相比以往的 结构,优化后的光栅具有更好的透射性能和滤波性能,在偏振导航、偏振探测、显示器、成像传感器等领域具有良好 的应用前景。

关键词 光栅;双层亚波长金属光栅;遗传算法;偏振滤波;时域有限差分方法 中图分类号 O436.3 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP56.220501

Optimization of Bilayer Sub-Wavelength Metallic Grating Based on Genetic Algorithm

An Chao, Chu Jinkui*, Zhang Ran

School of Mechanical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning 116023, China

Abstract Herein, a bilayer sub-wavelength metallic grating structure is optimized in the visible-light band using genetic algorithm and finite-difference time-domain method to improve the grating performance. Through simulation analysis, the structure can achieve polarization filtering function of blue band with a maximum transmittance of 77%, maximum extinction ratio of 20 dB, and full width at half maximum of 35 nm. By analyzing the influences of grating parameters on grating performance, it is proven that the structure has a large process tolerance. In comparison with the conventional structure, the optimized grating has good transmission performance and filtering performance, and it has good application prospects in fields such as polarization navigation, polarization detection, display, and imaging sensing.

Key words gratings; bilayer sub-wavelength metallic grating; genetic algorithm; polarization filter; finitedifference time-domain method

OCIS codes 050.2770; 050.6624; 050.1755

1 引 言

亚波长金属光栅能够将自然光转变为偏振光, 具有体积小、偏振性能好、允许入射角度大、易于集 成等优点,在偏振导航、偏振探测、光通讯、液晶显示 等领域具有广泛的应用。近年来,亚波长光栅器件 在紫外波段^[1-2]、可见光波段^[3-5]、红外波段^[6-9]都得 到了广泛的研究和应用,光栅的性能也逐渐得到改 善。Xue 等^[10]设计一种带有高折射率介质层和高 折射率介质光栅的单层铝金属光栅结构,它能在可见光波段能同时实现偏振和滤波功能,在中心波长处透射率大于75%,消光比大于30 dB。Kumagai等^[11]设计一种柔性的光学透射滤波器,该滤波器由Parylene-N柔性介质中镶嵌单层铝金属光栅制作 而成,能够实现彩色滤波,在中心波长处透射率大于65%。Chu等^[12]设计一种带有多凹槽结构的金属 光栅结构,该结构利用不同波长的光在凹槽内干涉 相消达到滤波的效果,中心波长处透射率大于

收稿日期: 2019-04-30;修回日期: 2019-05-08;录用日期: 2019-05-15

基金项目:国家自然科学基金(51675076,51505062)

65%,消光比大于 41 dB。从相关文献中发现,一般 的光栅设计过程,需要进行复杂的理论分析以及探 讨光栅参数对性能的影响规律,整个过程所需时间 长,尤其是当遇见较为复杂的光栅结构时,参数较 多,人为设计较为繁琐,所以不再适合采用以往的设 计方法。基于此,为提高各种光栅结构的性能,研究 者们采用优化算法代替人工对光栅结构进行优化设 计^[13-17]。利用这种优化算法,不需要考虑光栅结构 是否复杂,只要给定目标性能,就可以较为迅速地得 到理想的光栅结构。

遗传算法(GA),起源于自然界中生物进化的规 律,作为一种常用的优化算法,在寻找全局最优值方 面具有较为广泛的应用,具有程序简单、收敛快、结 果准确等特点。GA 能模拟自然界生物进化的过 程,在迭代的过程中,适应性强的个体才会被保留, 并通过选择、交叉、变异产生新的个体,而适应性弱 的个体则会被淘汰,以此循环往复,不断产生新的个 体,一直达到终止条件才会停止。本文把光栅的结 构参数作为 GA 中的设计变量,对传统光栅结构进 行优化,简化了设计流程,根据所给定的目标性能可 以较为快速地得到理想的光栅结构。

2 基本原理

2.1 光栅模型

文献[18]中通过集成双层亚波长金属光栅和光 电探测器制作了偏振光探测器件,其所设计的光栅 结构对蓝光敏感,并且具有良好的偏振特性,在偏振 导航领域具有广阔的应用前景,但是该光栅结构的 最大透射率只有 56%,并且旁带透射率较高。为改 善透射和滤波性能,本文仍选择双层亚波长金属光 栅作为基本结构,并以蓝色波段滤波为目标性能进行 优化。光栅结构如图 1 所示,设定残余层厚度为 0, TM 偏振光(电场方向垂直于光栅方向)和 TE 偏振光 (电场方向平行于光栅方向)垂直入射,由于亚波长金 属光栅具有偏振特性,TM 光会透过光栅,TE 光则会 被光栅反射,金属光栅材料选择铝金属,基底材料选 择 SiO₂, n_c 表示介质的折射率,t表示上下层金属光 栅高度,h表示介质光栅高度,p表示光栅周期,占空 比 f = w/p, w表示金属光栅的宽度。



图 1 双层亚波长金属光栅结构 Fig. 1 Schematic of bilayer sub-wavelength metallic grating structure

2.2 数值计算

对于亚波长结构,标量衍射理论不再适用,应采 用矢量衍射理论进行分析计算。时域有限差分方 法^[19-20]是一种常用的矢量衍射理论,其核心思想是 把带有时间变量的麦克斯韦旋度方程转换为差分形 式,从而模拟电子脉冲与导体作用的时域响应。该 方法具有广泛的应用性、较小的运算和存储空间、简 单通用的程序等特点。通过时域有限差分法可以得 到二维空间中的 TM 波和 TE 波的迭代方程。

TM 波:

$$H_{x}^{n+1/2}(i,j+1/2) = H_{x}^{n-1/2}(i,j+1/2) - \frac{\Delta t}{\Delta d\mu(i,j+1/2)} \left[E_{z}^{n}(i,j+1/2) - E_{z}^{n}(i,j) \right], \qquad (1)$$

$$H_{y}^{n+1/2}(i+1/2,j) = H_{y}^{n-1/2}(i+1/2,j) + \frac{\Delta t}{\Delta d\mu(i+1/2,j)} [E_{z}^{n}(i+1,j) - E_{z}^{n}(i,j)], \qquad (2)$$

$$E_{z}^{n+1}(i,j) = \frac{2\varepsilon(i,j) - \Delta t\sigma(i,j)}{2\varepsilon(i,j) + \Delta t\sigma(i,j)} E_{z}^{n}(i,j) + \frac{2\Delta t}{\Delta d \left[2\varepsilon(i,j) + \Delta t\sigma(i,j)\right]} \left[H_{y}^{n+1/2}(i+1/2,j) - H_{y}^{n+1/2}(i-1/2,j) + H_{x}^{n+1/2}(i,j-1/2) - H_{x}^{n+1/2}(i,j+1/2)\right],$$
(3)

TE波:

$$E_{x}^{n+1}(i+1/2,j) = \frac{2\varepsilon(i+1/2,j) - \Delta t\sigma(i+1/2,j)}{2\varepsilon(i+1/2,j) + \Delta t\sigma(i+1/2,j)} E_{x}^{n}(i+1/2,j) + \frac{2\Delta t}{\Delta d [2\varepsilon(i+1/2,j) + \Delta t\sigma(i+1/2,j)]} \times [H_{z}^{n+1/2}(i+1/2,j+1/2) - H_{z}^{n+1/2}(i+1/2,j-1/2)], \qquad (4)$$

$$E_{y}^{n+1}(i,j+1/2) = \frac{2\varepsilon(i,j+1/2) - \Delta t\sigma(i,j+1/2)}{2\varepsilon(i,j+1/2) + \Delta t\sigma(i,j+1/2)} E_{y}^{n}(i,j+1/2) - \frac{2\Delta t}{\Delta d [2\varepsilon(i,j+1/2) + \Delta t\sigma(i,j+1/2)]} \times [H_{z}^{n+1/2}(i+1/2,j+1/2) - H_{z}^{n+1/2}(i-1/2,j+1/2)],$$
(5)
$$H_{z}^{n+1/2}(i+1/2,j+1/2) = H_{z}^{n-1/2}(i+1/2,j+1/2) - \frac{\Delta t}{\Delta d\mu(i+1/2,j+1/2)} \times [E_{y}^{n}(i+1,j+1/2) - E_{y}^{n}(i,j+1/2) + E_{x}^{n}(i+1/2,j) - E_{x}^{n}(i+1/2,j+1)],$$
(6)

式中: Δd 为离散单元的边长,这里取离散单元为正 方形,即 $\Delta x = \Delta z = \Delta d$; Δt 为迭代的时间步长; σ 为 材料的电导率; ϵ 为材料的介电常数; μ 为磁导率; H 和E 分别为空间中的磁场和电场;上标 n 为时间 迭代步数;下标 x、y、z 为在三个方向上的分量;i、j为二维空间中的坐标。为保证计算稳定性和精度, 选取的单元尺寸应小于最短入射波长的 1/10,以减 小数值色散,这里取单元尺寸 Δd 为 5 nm,时间步长 计算公式为 $\Delta t = \Delta d/(2v)$,v 为真空中的光速。为保 证收敛速度,在x 方向采用周期性边界条件^[21],在z方向采用完美吸收边界条件^[22],色散材料铝金属的 光学参数取自文献[23]。光源以平面波的形式入射, 最终获得光栅的透射率T,其表达式为

$$T(\lambda) = \frac{\frac{1}{2} \int \operatorname{real}[\boldsymbol{P}(\lambda)] dS}{L}, \qquad (7)$$

式中:L 为入射光能量; λ 为入射波长; $P = H \times E$, 为坡印廷矢量,H 和E 为透射区域的磁场和电场。 通过坡印廷矢量的实部对透射曲面S 进行积分并 归一化后得到透射率的值。

2.3 遗传算法

选择光栅周期 p、金属光栅厚度 t、介质光栅厚度 h、介质折射率 n。、占空比 f 作为 GA 中的设计变量。 在 GA 中,种群中的每一个个体都有一条染色体,包 含设计变量的信息。染色体一般以一串二进制数表 示,二进制数的每一位代表染色体中的一个基因。这 里采用 40 位二进制数表示上述 5 个光栅参数,每个 参数用 8 位二进制数表示,染色体结构如图 2 所示。

p	t	h	$n_{ m c}$	f
\frown				\frown
10110101	10110101	10110101	10110101	10110101

40-bit binary number

图 2 个体的染色体结构

Fig. 2 Chromosome structure of individual

对光栅结构参数的大小进行约束,设定金属光 栅厚度 t 变动范围为 20~200 nm,介质光栅高度 h 变动范围为 50~400 nm,介质折射率 n。变动范围为 1~3,占空比 f 变动范围为 0.1~0.9。为避免光栅 周期过大从而对透射率和偏振性能产生影响,要求 光栅中只存在 0 级衍射,此时需要根据临界周期 点^[24]对周期的最大值进行限制,根据入射条件及基 底折射率计算得到临界周期点约为 308 nm,所设计 周期应小于临界周期点,所以最终设定周期变动范 围为 150~300 nm。8 位二进制数从 00000000 到 11111111 变化,分别对应光栅各个参数从最小值到 最大值的变化。为评判个体的适应性大小,定义适 应性函数 F 为

$$F = 1 / \sqrt{\sum (T - T_0)^2}, \qquad (8)$$

式中:T。为设定的目标透射性能;T 为所设计光栅 的实际透射性能。因为优化目标是对蓝色波段进行 滤波,所以设定中心波长为 450 nm,中心波长处透 射率为 90%,在 430 nm 和 470 nm 波长处透射率为 45%,其余旁带透射率皆为 0。适应性函数值越大, 表示实际光栅性能越接近于目标性能。图 3 为 GA 的优化流程图,其优化过程主要分为以下几个步骤:

i)初始化种群,设定种群大小为 20,初始种群 随机产生;

ii) 计算适应性函数,给定目标性能 T₀,通过(8)式得到个体的适应性大小;

iii)判断是否达到终止条件,设定终止条件为迭代 1000 代;

iv) 通过轮盘选择法进行选择,各个个体被选 中的概率与其适应性大小成正比;

v) 定义交叉的最大概率为 0.9,最小概率为 0.6,随机产生交叉点,各个个体进行交叉的概率与 其适应性大小成反比,能避免丢失最优解;

vi) 定义变异的最大概率为 0.1, 最小概率为 0.001, 采用单点变异, 各个个体进行变异的概率与 适应性大小成反比, 能避免丢失最优解;

vii) 经过选择、交叉、变异得到的新种群重新回 到步骤 ii),直到满足迭代条件后输出最后的结果。



图 3 GA 优化流程图 Fig. 3 Flowchart of optimization of GA

3 仿真结果

考虑到GA具有一定的随机性,为保证得到的

结果足够准确,需要进行多次优化,然后从中选取最 优的结果。图4为适应性函数随迭代次数变化的情况,适应性函数的值随着迭代次数的增加而逐渐增 大,表明光栅的性能越来越接近目标性能,在400代 之后适应性函数的大小不再发生改变,说明达到稳 定状态,光栅性能达到最优。优化后的光栅结构参 数以及传统光栅结构参数^[18]如表1所示。



图 4 适应性函数与迭代次数之间的关系 Fig. 4 Relationship between fitness function

and iteration number

表 1 光栅的结构参数

Table 1 Structural parameters of gratings

Structure	p∕nm	f	t /nm	h /nm	Residual layer /nm	n _c
Optimized structure	240	0.7	40	210	0	2.1
Conventional structure ^[18]	200	0.375	70	180	27.5	1.6

根据光栅结构参数可以得到光栅 TM 透射率 随波长变化的曲线,如图 5 所示,实线为所给定的目 标性能,实心点曲线是优化后的实际透射性能,中心 波长为 445 nm,中心波长处 TM 透射率为 77%,半 峰全宽(FWHM)为35 nm,可以看到在波峰处两者 拟合程度较高,说明 GA 可以根据所设定的目标性 能较为准确地得到对应的光栅结构。空心点曲线为 传统光栅结构的透射性能,中心波长为 440 nm,中 心波长处透射率为 56%, FWHM 为120 nm。经对 比,采用 GA 对光栅结构优化后,最大透射率由 56% 增加到 77%, FWHM 由 120 nm 缩小到 35 nm, 并且 旁带透射率得到极大的抑制,光栅的透射和滤波性能 都得到了较大改善。图 6 为消光比随波长变化的曲 线,消光比定义为 $10 \times lg(T_{TM}/T_{TE}), T_{TM}$ 为 TM 偏 振光的透射率,T_{TE}为 TE 偏振光的透射率,实心点曲 线为所设计光栅的消光比性能。可见,与传统结构光 栅相比,设计光栅的消光比略有下降,但在中心波长 处消光比可达到 20 dB,满足偏振要求。

1.0 0.9 0.8 0.7 0.6 0.5 0.4 0.3 0.2 0.4 400 500 600 700 Wavelength /nm

图 5 光栅 TM 透射率特性





4 工艺容差分析

通过 GA 对光栅结构进行优化可以得到更加理

想的性能,但考虑到实际的制作过程,光栅的各个参数会存在一定的误差,需要对所设计的结构进行工艺容差分析,验证实际制作的可能性。由于介质折射率 n。由材料本身的物理性质决定,制作过程中一般不会发生变化,这里不再考虑。选择优化后的光栅尺寸作为基本的结构参数,采用单一变量法,研究周期 p、金属光栅厚度 t、介质光栅厚度 h、占空比 f 对偏振滤波性能的影响。

图 7(a)和图 7(b)分别为 TM 透射率和消光比 与周期的关系。随着周期从 220 nm 到 260 nm 逐 渐变大,中心波长的位置从 420 nm 红移到 480 nm, 但中心波长仍然处在蓝色波段范围内,中心波长处 TM 透射率和消光比大小几乎没有变化。图 7(c) 和图 7(d)分别为 TM 透射率和消光比与占空比之 间的关系。随着占空比从 0.68 到 0.72 逐渐变大,中 心波长位置几乎没有变化,中心波长处的 TM 透射率 略有下降,但最小值仍大于 73%,消光比略有上升。 图 7(e)和图 7(f)分别为 TM 透射率和消光比与介质 光栅高度之间的关系。随着介质光栅的高度从 190 nm到 230 nm 逐渐增大,中心波长位置基本没有 变化,中心波长处的 TM 透射率略有下降,但最大值 仍大于 72%,消光比基本没有变化。图 7(g)和图 7 (h)分别为 TM 透射率和消光比与金属光栅高度之间 的关系。随着金属光栅高度从30 nm到 50 nm 逐渐 增大,中心波长位置略有红移,但变化较小,中心波长 处的 TM 透射率略有下降,但最小值能够达到 70%; 当金属光栅高度为 30 nm 时,消光比达到最小值,但 中心波长处消光比仍大于 15 dB。



图 7 工艺容差分析。(a)(c)(e)(g) TM 透射率;(b)(d)(f)(h)消光比

Fig. 7 Analyses of process tolerance. (a)(c)(e)(g) TM transmittance; (b)(d)(f)(h) extinction ratio

整体来看,所设计的结构具有较好的工艺容差, 偏振滤波特性受光栅参数的影响较小,可以避免制 作过程中误差的影响。

5 结 论

为改善光栅性能,结合 GA 和时域有限差分方

法对传统的双层金属光栅结构进行了优化设计。在 优化过程中,根据设定的目标性能,不断改变光栅结 构参数的大小,直到满足终止条件后输出最后结果。 仿真分析表明,优化后的光栅结构可以实现蓝色波 段的偏振滤波功能,最大透射率达到 77%,消光比 最大为 20 dB,FWHM 为 35 nm。通过分析光栅各 个参数对光栅性能的影响,证明了所设计的结构具 有较大的工艺容差。与传统的光栅结构相比,优化 后的光栅具有更佳的透射性能和滤波性能,实现了 高透射和窄带宽,在偏振导航、偏振探测等领域具有 广阔的应用前景。

参考文献

- Yang Z Y, Lu Y F. Broadband nanowire-grid polarizers in ultraviolet-visible-near-infrared regions
 [J]. Optics Express, 2007, 15(15): 9510-9519.
- Weber T, Käsebier T, Kley E B, et al. Broadband iridium wire grid polarizer for UV applications [J]. Optics Letters, 2011, 36(4): 445-447.
- [3] Ekinci Y, Solak H H, David C, et al. Bilayer Al wire-grids as broadband and high-performance polarizers[J]. Optics Express, 2006, 14(6): 2323-2334.
- [4] Chu J K, Zhang Y J, Wang Z W, et al. Transmission properties of triple-layer subwavelength grating [J]. Nanotechnology and Precision Engineering, 2013, 11(5): 442-446.
 褚金奎,张英杰,王志文,等. 三层亚波长光栅结构 的透射特性[J]. 纳米技术与精密工程, 2013, 11 (5): 442-446.
- [5] Tan Q, Xu Q F, Xie N. Design of sub-wavelength radially polarized grating [J]. Opto-Electronic Engineering, 2017, 44(3): 345-350.
 谭巧,徐启峰,谢楠.亚波长径向偏振光栅的设计 [J].光电工程, 2017, 44(3): 345-350.
- [6] Barho F B, Gonzalez-Posada F, Milla-Rodrigo M J, et al. All-semiconductor plasmonic gratings for biosensing applications in the mid-infrared spectral range[J]. Optics Express, 2016, 24 (14): 16175-16190.
- [7] Yamada I, Kintaka K, Nishii J, et al. Mid-infrared wire-grid polarizer with silicides [J]. Optics Letters, 2008, 33(3): 258-260.
- [8] Li N, Kong W J, Ji S Y, et al. Broadband achromatic phase retarder based on subwavelength metal dielectric gratings [J]. Acta Optica Sinica, 2017, 37(2): 0205001.
 李娜,孔伟金,季淑英,等.基于亚波长金属介质膜 光栅的宽光谱消色差相位延迟器[J].光学学报,

光栅的宽光谱消色差相位延迟器[J].光学学报, 2017,37(2):0205001.

[9] Chen Y, Tian Y N, He L, et al. Research on subwavelength metal grating/dielectric/metal hybrid waveguide sensing structure [J]. Chinese Journal of Lasers, 2018, 45(1): 0110001. 陈颖,田亚宁,何磊,等.亚波长金属光栅/电介质/ 金属混合波导传感结构的研究[J].中国激光,2018, 45(1):0110001.

- [10] Xue Y F, Wang C, Zhang G J, et al. Compound polarized wavelength filters with a single subwavelength structure [J]. Optics Communications, 2011, 284(1): 501-509.
- [11] Kumagai H, Honma H, Ishida M, et al. Fabrication of a thin plasmonic color sheet embedded with Al subwavelength gratings in parylene [J]. Displays, 2016, 45: 63-69.
- [12] Chu J K, Zhang Y J, Wang Z W, et al. Polarizing color filter based on subwavelength metallic grating with grooves carved in [J]. Optics Communications, 2014, 315: 32-36.
- [13] Okamoto H, Noda K, Sakamoto M, et al. Genetic algorithm-based design method for multilevel anisotropic diffraction gratings [J]. Optical Review, 2017, 24(4): 510-516.
- [14] Semwal G, Rastogi V. Design of LPWG broad band filter with genetic algorithm optimization[J]. Journal of Optics, 2014, 43(3): 165-168.
- [15] Teng F C, Yin W W, Wu F, et al. Application of genetic algorithm in quasi-static fiber grating wavelength demodulation technology [J]. Optoelectronics Letters, 2007, 3(4): 271-274.
- [16] Gao J, Wang Q K, Wang D Y. Design of transmittance filters based on particle swarm optimization algorithm[J]. Laser Technology, 2018, 42(5): 617-621.
 高健,王庆康,王丹燕.基于粒子群优化算法的透射 滤光片设计[J].激光技术, 2018, 42(5): 617-621.
- [17] Che W K, Kong W J, Zhang Y L, et al. Broadband polarization beam splitter based on subwavelength grating sandwiched between silica layers [J]. Laser Journal, 2018, 39(7): 12-15.
 车卫康,孔伟金,张晔岚,等.二氧化硅夹层式亚波 长光栅宽带偏振分束器[J].激光杂志, 2018, 39 (7): 12-15.
- [18] Chu J K, Wang Z W, Zhang Y J, et al. Integrated blue-sensitive polarization-dependent photodetector
 [J]. Nanolithography, MEMS, and MOEMS, 2013, 12(3): 033005.
- [19] Yee K S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1966, 14(3): 302-307.
- [20] Taflove A, Hagness S C, Piket-May M. 9-

computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method [M] // The Electrical Engineering Handbook. Singapore: Elsevier, 2005: 629-670.

- [21] Veysoglu M E, Shin R T, Kong J A. A finitedifference time-domain analysis of wave scattering from periodic surfaces: oblique incidence case [J]. Journal of Electromagnetic Waves and Applications, 1993, 7(12): 1595-1607.
- [22] Berenger J P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves [J]. Journal of

Computational Physics, 1994, 114(2): 185-200.

- [23] Palik E D. Handbook of optical constants of solids[M]. America: Academic Press, 1997, 3: 369-406.
- [24] Zhang N, Chu J K, Zhao K C, *et al*. The design of the subwavelength wire-grid polarizers based on rigorous couple-wave theory [J]. Chinese Journal of Sensors and Actuators, 2006, 19(5): 1739-1743.
 张娜,褚金奎,赵开春,等.基于严格耦合波理论的 亚波长金属光栅偏振器设计[J]. 传感技术学报, 2006, 19(5): 1739-1743.