

# Inverse Design of Metasurface for Absorbance Optimization

逆向設計超表面以實現吸光度優化

研究領域: 光電

組別: A312

指導教授: 洪毓珽教授

組員: 吳昕和

研究時間: 2022/09/01 to 2023/04/30

## Abstract

Metasurfaces can be regarded as two-dimensional metamaterials. Due to the periodic subwavelength structures, it can miniaturize and planarize optical components, and provide powerful phase modulation capabilities. By changing the structure, or arranging micro-antennas of different shapes or sizes, resulting in changes in phase, scattering amplitude, and polarization, the control of the incident light wavefront is achieved.

In the process of learning the construction of the Metal-Insulator-Metal (MIM) structure in a metasurface, we started with simulating the unit cell and then combined different lengths of unit cells to form a supercell (1D metasurface) to simulate anomalous reflection phenomena. Then, using Python to manipulate the simulation software, we constructed the unit cell and generated randomly sized micro-antennas. We then optimized the structure unit using a genetic algorithm to simulate the one with the best absorption efficiency. In addition to determining the best absorption efficiency, other properties such as phase or reflectance can also be obtained. With this, more complex structures, such as one- or two-dimensional superlattices, can be designed to achieve higher working efficiency.

## 摘要

超表面可被視為二維的超材料，由於是週期性的亞波長結構組成，使光學元件小型化和，並提供強大的相位控制能力。通過改變結構，或是以不同形狀或尺寸的微型天線進行排列，造成相位、散射震幅及偏振上的改變，達成對入射光波前的調控。

在學習建構金屬-絕緣體-金屬(MIM)結構的超表面過程中，先從 unit cell 的模擬開始，然後將不同長度的 unit cell 組合成一個 supercell (一維超表面)，模擬異常反射現象。再利用 Python 操控模擬軟體，建置出前面的 unit cell，再生成隨機長度寬度的微型天線，並以基因演算法優化，模擬出擁有最佳吸收度的結構單元。除了求得最佳吸光度以外，也可以求其他性質，比如相位或反射率，而如此便能設計出更複雜的結構，比如一維甚至是二維的超表面了，並獲取到更高的工作效率。

## 1. Introduction

傳統光學元件通過給定折射率的介質傳播累積相位變化，達到操縱光束的目的，例子有透鏡、波片，但是他們體積龐大且笨重，不適合現代對元件集成和小型化日益苛刻的要求。

超材料就是人為把一些週期的亞波長單元結構排列起來形成一種新的“材料”，能實現自然界材料所不能實現的一些性質，而這個可以通過廣義斯乃爾定律(Generalized Snell's Law)描述，而廣義斯乃爾定律如(1)式所述 [1]。

$$\begin{cases} \sin(\theta_t)n_t - \sin(\theta_i)n_i = \frac{\lambda_0}{2\pi} \frac{d\Phi}{dx} \\ \sin(\theta_r) - \sin(\theta_i) = \frac{\lambda_0}{2\pi} \frac{d\Phi}{dx} \end{cases} \quad (1)$$

$\theta_t, \theta_r$  為折射角與反射角， $n_i$  和  $n_t$  是兩種介質的折射率， $\lambda_0$  為真空中的波長，

$\frac{d\Phi}{dx}$  為相位梯度，而此時可以分別推出兩者的全反射臨界角：

$$\begin{cases} \theta_c = \arcsin\left(\pm \frac{n_t}{n_i} - \frac{\lambda_0}{2\pi n_i} \frac{d\Phi}{dx}\right) \\ \theta_c' = \arcsin\left(1 - \frac{\lambda_0}{2\pi n_i} \left|\frac{d\Phi}{dx}\right|\right) \end{cases} \quad (2)$$

通過(1)(2)式，調整界面的相位梯度就可以在不發生全反射情況下達到任一角度折射或反射。

超表面就是二維的超材料，而除了 $d\Phi/dx$ 外，可再引入另一方向的相位梯度( $d\Phi/dy$ )，可以在三維球座標上造成方位角 (azimuth angle) 變化。而本專題使用的 MIM 結構超表面，組成為上方的金屬微型天線加上金屬基質，中間夾有介電質薄膜，透過天線與接地金屬的耦合，使絕緣體的磁共振被激發，達到相位調節 [2]，且反射率幾乎能來到 100%，但若共振太強，會造成歐姆損耗，導致入射光在金屬間反覆反射而被吸收，故只利用在進行反射的應用上 [3]。

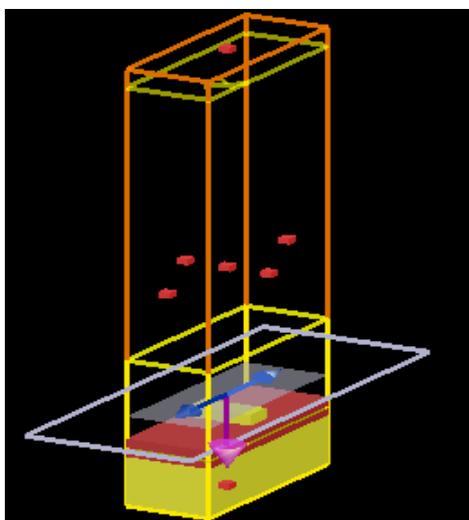
## 2. Purpose

由於超表面只要有稍微一個 unit cell 的特徵些許改變，就容易導致整個光學性質不復存在，而手動調整效率太低，所以使用演算法優化模擬過程，將有效提升研究進度。

### 3. Method

本次專題使用 Lumerical FDTD 商業軟件包來模擬電磁波的行為。Lumerical FDTD 是一款基於有限時域差分法(FDTD)求解 Maxwell 方程的仿真軟件，被視為模擬奈米光學元件的標準工具。它將 Maxwell 方程式以差分法 (Difference approximation) 加以近似和離散化，而離散後的每個點賦予電場和磁場分量，隨著時間變化每個點跳躍式更新數值，直到時間結束為止得到暫態或穩態的電磁場。

設置 MIM 結構 unit cell，選定金屬為金，介電質層為  $MgF_2$ ，平面波源設定工作波長為 850 nm，可放置監視器監測電場、磁場、相位.....等數據，設置完成大略如下方圖(1)。這次專題設置的 unit cell 改變微型天線的 x,y 方向長度(之後簡稱寬度與長度)，尋找能有最大吸收率的 unit cell。



圖(1) Lumerical 的 unit cell 建置圖

透過 Lumerical 中內建模組 lumapi，使在 Python 環境下能操縱 Lumerical 軟體建立結構，或是執行模擬檔，由於 Lumerical 中也有內建的程式語言，但能進行的操作並不像 Python 一樣多樣，故可先設置好基礎結構，再以 Python 進行需要調變的地方。

基因演算法(以下簡稱 GA)是基於模擬自然界的天擇而開發的算法，利用適者生存的概念，以生成出的適應度分數大小，機率性對種群中的個體進行選擇、交叉、變異、取代等操作，以下是各操作的意義：

- 選擇: 隨機選取上世代分數高的個體進入新的種群，對應適者生存概念。
- 交叉: 分數較高的個體彼此交換各自的特徵，對應自界的交配產生新個體。
- 變異: 隨機改變個體內裡的資料，對應自然界中的基因突變。
- 取代: 隨機選取個體加入新的種群，對應外來個體加入種群。

因為進行機率性的操作，所以最佳解也有可能被淘汰，且可能通過變異特徵遭到改變，或是交叉產生的個體並沒有遺傳到優良特徵，所以可以用於搜尋全域最佳解，不容易在收斂於區域最佳解。而使用原因是 unit cell 中只要變量產生細微改變，光學性質便產生極大的變化，所以能搜尋到全域最佳解的算法便是最佳選擇。

### 3.1. Genetic Algorithm Process Flow

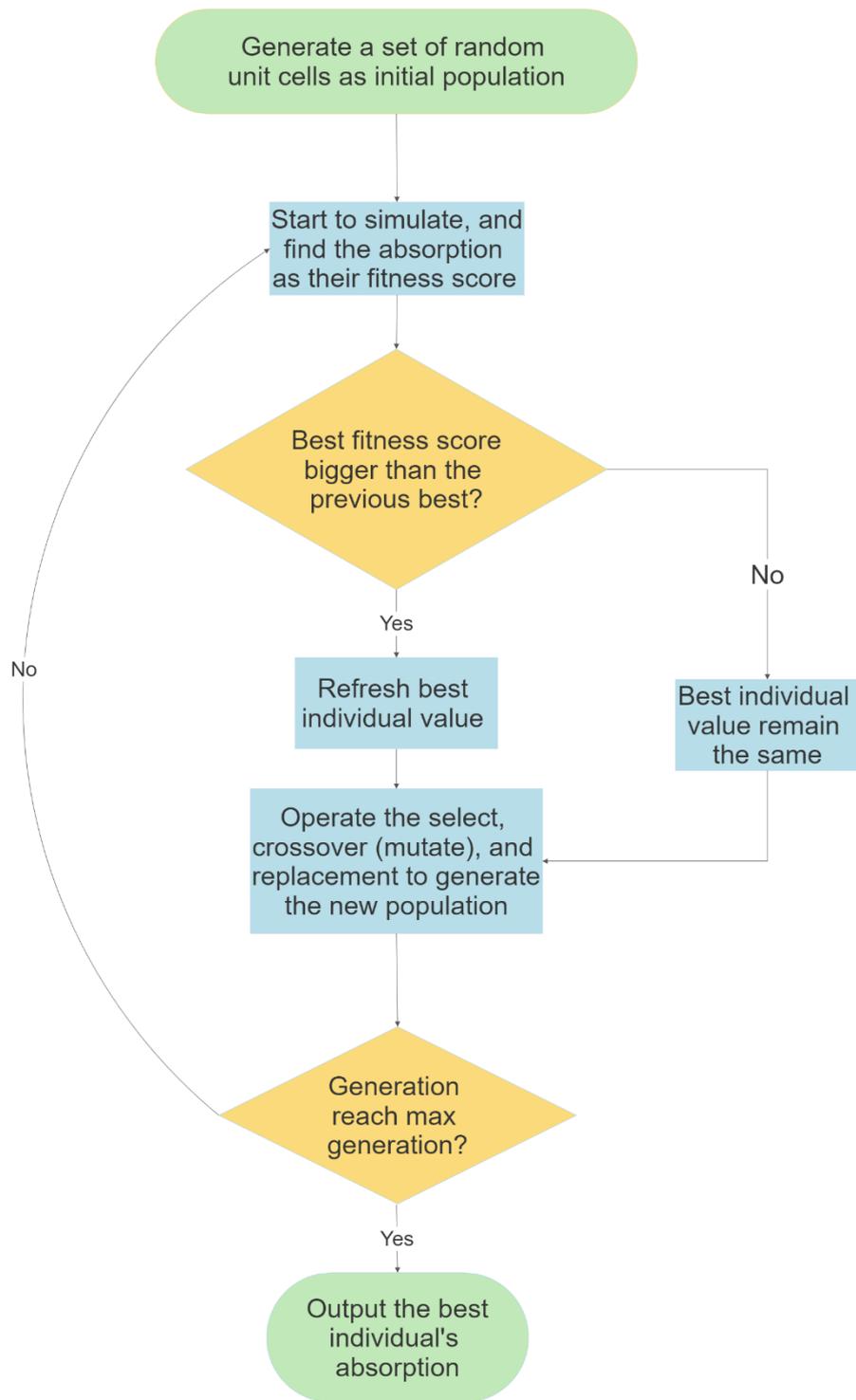
首先，創造一組變數紀錄微型天線長度與寬度，紀錄  $n$  組 unit cell 作為整個種群。之後便把變數輸入 Lumerical 中產生 unit cell，並將所算出的吸收率傳回 Python 中，找出吸收率最高的 unit cell 並記錄。

之後便開始進行 GA 優化。首先，對如何進行機率性的運算進行討論(之後都以機率性運算代稱)。先生成一個  $0\sim 1$  間的隨機變數，然後去與設定好的操作機率值進行比較，若小於機率便進行操作。只要隨機生成的數字夠隨機，那麼產生小於操作值的亂數機率就會大約等於該數值，便可做到機率性運算的操作。

接下來，先進行選擇函數的操作。進行機率性運算判斷，若要進行，便會對所有個體分配一個選擇機率，而分數越高的個體，選擇機率就會越大。接下來以選擇機率做機率性選擇，原理與機率性運算相同，所以便可依分數大小選擇到上一世代分數較佳的個體，若沒有選中任何個體，便選擇最大分數個體進入下一世代。

第三，進行交叉操作。先隨機抽樣  $k$  個個體出來，並取出當中分數最高的個體，並交換彼此的長度寬度，便生成了兩個新個體。交叉結束後，再對生成個體進行變異操作，先進行機率性運算判斷是否操作，如果決定進行，便隨機改變長度或寬度其中一個特徵，產生全新個體。最後將兩個個體(無論有無變異)加入到下一世代。

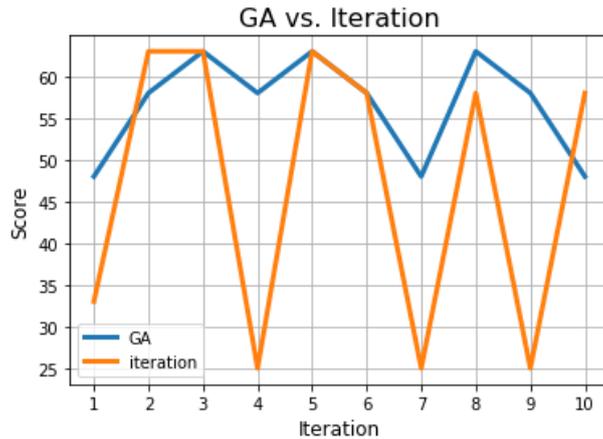
最後，進行取代操作，進行機率性運算判斷是否操作，若決定進行，便隨機產生一組長度寬度，加入下一世代。完成一次選擇-交叉(變異)-取代循環後，若是下一世代個體數還未達到  $n$  組，便會重複循環，若下一世代個體數達到  $n$  組後，便開始進行下一次的模擬運算，如此不斷循環直到達到最大世代數，最後輸出最佳子代及其適應度分數，算法整體流程圖如圖(2)。



圖(2) GA 優化流程圖

### 3.2. Comparison with Iteration

GA 優化建置完成後，與隨機生成寬的方式進行對比，觀察何者較快趨近於最佳解，圖(3)即為比較結果，可看出 GA 優化雖不會次次優化到最佳解，但都能優化到較大的吸收率範圍，大於單純生成變數的次數也是較多的。

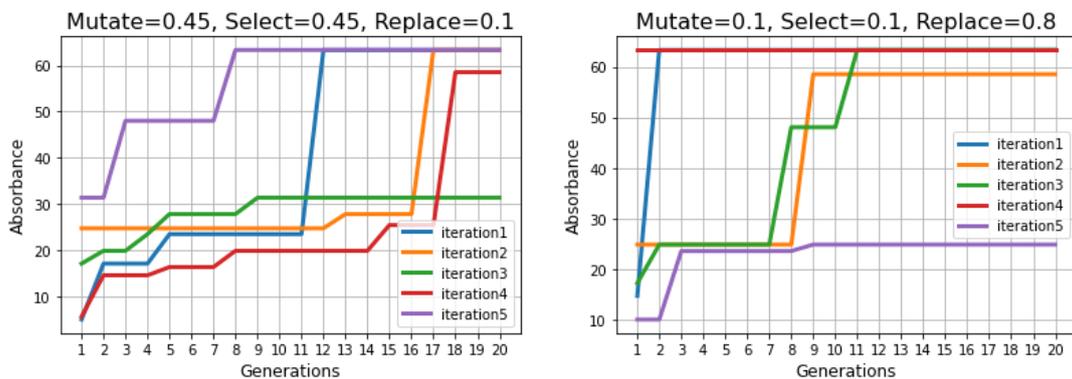


圖(3) GA 優化與單純變數迭代最佳分數比較圖

也可以通過改變各項機率，造成不同結果，圖(4) (a)、(b) 即是改變三者機率做出之圖。若取代機率較高，收斂較快，但調太高的話就會與單純迭代類似，個體間相似度低，且容易在某些值便達到收斂較適合應用於不那麼複雜的求解問題上；若調高變異與選擇機率，則收斂較慢，但到最後幾乎都會收斂到較高之值，之後應用較為適合用做搜尋全域最佳解。

(a)

(b)



圖(4) (a) 選擇機率為 0.45、變異機率為 0.45、取代機率為 0.1

(b) 選擇機率為 0.1、變異機率為 0.1、取代機率為 0.8

## 4. Conclusion

由於 Lumerical 提供 lumapi 模組，使模擬可以透過 Python 進行，並在其中以演算法對過程進行優化。透過 GA 優化演算，比單純生成隨機變數擁有更高機率收斂到最佳解，個體間吸收率相似度也較高，且可以隨意改變操作機率，調高與單純迭代類似操作機率適合複雜度較低的問題，或調高交換彼此特徵的操作機率，便適合全域最佳解易改變的問題。

此研究中透過基因演算法最佳化超表面結構，由吸收率結果圖也成功演  
示，優化後的超表面套用在太陽能電池上可以進一步提高工作效率 [4]。超表  
面除了可以討論吸收率以外，預期中也可以進一步取得 unit cell 的相位，進行  
梯度排列，並使用 GA 優化排列方式，可更快速調整出預想的反射角及效率，  
有效縮短超表面設計之時間，並應用於光束掃描、光學雷達、光通訊多進多出  
元件、或《哈利波特》中的隱形斗篷也是應用之一。[2]

## 5. 感謝

謝謝我的專題指導老師洪毓珽教授引領我進入超表面這個專業領域，也謝  
謝負責指導我的實驗室研究生李冠宏學長，帶著我操作 Lumerical FDTD，由於  
我是一個外系生，光電這方面的知識我並不是那麼了解，但教授與學長都不因  
此給我差別待遇，有不懂的地方便教導我，或是提供我方向去找答案，真的十  
分感謝他們對我的耐心與悉心教導。

Lumerical FDTD 是我第一個使用的商用化專業模擬軟體，雖然介面相比我  
之後看到的一些軟體易讀許多，但是仍是有需多細節要注意，常常模擬了許久  
才發現自己有那裡沒注意到，導致時間都白白浪費了，所以模擬真是一點都馬  
虎不得啊!而做了一年後，我感覺仍有許多軟體上面的功能我尚未使用，所以希  
望以後仍可以再繼續使用 Lumerical 做更多有趣的模擬。

## 6. Reference

- [1] Nanfang Yu et al. ,Light Propagation with Phase Discontinuities: Generalized  
Laws of Reflection and Refraction.Science334,333-  
337(2011).DOI:10.1126/science.1210713
- [2] Hou-Tong Chen et al 2016 Rep. Prog. Phys. 79 076401
- [3] Anders Pors and Sergey I. Bozhevolnyi, "Plasmonic metasurfaces for efficient  
phase control in reflection," Opt. Express 21, 27438-27451 (2013)
- [4] Mohammad Ali Shameli and Leila Yousefi, "Absorption enhancement in thin-film  
solar cells using an integrated metasurface lens," J. Opt. Soc. Am. B 35, 223-230  
(2018)