

拓撲優化實現特定顏色波長選擇的高品質因子超穎介面
Topology Optimization Enables High-Q Metasurface for Color Selectivity

國立陽明交通大學 電機學院光電工程學系 蘇煥騰 碩士
指導教授：黃耀緯 博士

摘要

非局域超穎介面，以共振波導光柵(RWG)為例，其透過擴展諧振模式在空間上配置波前，實現在頻譜中反射窄頻、窄角度的波段，或是高品質因子特性。雙週期 RWGs 的設計已驗證可過濾波長並任意選擇繞射方向，但效率過低。為此，本研究提出了一種基於拓撲優化的超穎共振波導光柵(MRWG)，其由二氧化鈦(TiO_2)構成並製作於玻璃基板上，能在可見光波段中高效繞射藍、綠、黃和紅光波段。透過基於伴隨法(adjoint-based)的拓撲優化，並考慮非局域效應，我們顯著提升了其繞射效率，使其數值模擬效率高達78%，品質因子達1362。在實驗驗證中，我們獲得了最高59%的繞射效率，且品質因子達到93。

相信未來具有特定波長高反射效率與高品質因子的 MRWG，有望改變光學合成器和擴增實境的應用，成為未來光學技術的基石。

關鍵字：超穎介面、共振波導光柵、拓撲優化

一、 簡介

超穎介面(Metasurfaces)可根據其結構特性與單元行為分為局域(local)與非局域(nonlocal)兩類^[1]。在超穎介面領域，這兩種類型展現出顯著不同的特性。局域超穎介面透過預先計算的光學響應來調控入射光的相位^[2]，這種方式使得光學元件的前向設計直觀且便捷，例如超穎透鏡(metalenses)^[3]、超穎介面全像片 (metasurface holograms)和渦旋雷射(vortex lasers)^[4]等。然而，這類元件通常在頻譜控制方面存在局限性。由於光學交互受限於亞波長結構內，其通常表現出寬頻特性，導致在廣泛的頻率範圍內波前變形。相較之下，非局域超穎介面(nonlocal metasurfaces)，如波導共振光柵(RWG)^[5]、準束縛連續態(q-BIC)結構以及微擾結構(perturbative structures)，則展現出更為尖銳的頻譜特徵。這是因為波導共振光柵可近似為純平板波導(slab waveguide)，能在不同波長下同時激發多個模態，從而實現較高的品質因子(Q-factor)。此外，q-BIC 結構透過引入微擾破壞平面內反演對稱性，使得 q-BIC 具備高但有限的 Q 值。然而，傳統的前向設計方法應用於 RWGs 和 q-BIC 結構時，通常會面臨較低的效率問題^[5]。雙週期 RWGs，由兩個不同週期 U1 和 U2 組成，已被證實能夠選擇性地過濾特定波長並靈活地引導光。其示意圖如圖 1c 所示。由於這兩個 RWGs 具有不同的週期，出射模式的方向與入射光不同，但在波導層內仍共享相同的波導。透過改變第二個 RWG 的週期，RWGs 結構可以選擇性地過濾白光的某些頻譜範圍，並將其重新導向至直接反射或繞射階次。然而，此設計在特定繞射階次上的效率較低，這一挑戰可望透過逆向設計(inverse design)來解決。逆向設計方法從目標功能出發，透過計算演算法優化結構幾何參數。近年來，超穎介面設計的逆向設計策略已獲得多項突破，包括拓撲優化(topology optimization)^[6]、基於梯度的逆向設計 (gradient-based inverse design)、基因樹優化 (genetic-type tree optimization)、演化優化(evolutionary optimization)、深度學習(deep learning)^[7]以及這些方法的混合組合。這些技術主要應用於局域超穎介面的性能提升。儘管深度學習可以考慮全域特性，但其需要大量數據集來訓練。小數據學習(small-data learning)^[7]方法雖然可在較少數據點下運作，但仍需要高度特徵化的數據。然而，生成與特定光譜數據對應的高度特徵化奈米結構極具挑戰性。相比之下，拓撲優化無需預先存在的數據集，而是基於梯度特性進行優化，使其更具適用性。這類創新方法展現了逆向設計在高 Q 值與非局域超穎介面設計中的變革潛力，為多樣化應用奠定基礎。在本研究中，我們透過實驗展示了一種超穎共振波導光柵 (MRWG，如圖 1d 所示)^[8]，其具有優異的顏色選擇性與光線重導向能力，並且其高品質因子(Q-factor)遠超傳統的波導共振光柵(RWG)。我們採用了基於伴隨法(adjoint-based)的拓撲優化方法，將多種優化策略應用於光柵結構設計，以實現卓越的光學性能。此方法克服了傳統設計的限制，消除了對特定耦合區域的需求，使得光柵可實現全區域的輸入與輸出耦合，大幅提升了系統靈活性，並增加了光與結構相互作用的橫截面積，進而提高繞射效率與品質因子。透過拓撲優化，我們能夠在考慮非局域效應的前提下，最佳化光柵結構，實現對光行為的全面控制與精確的光學功能調控。

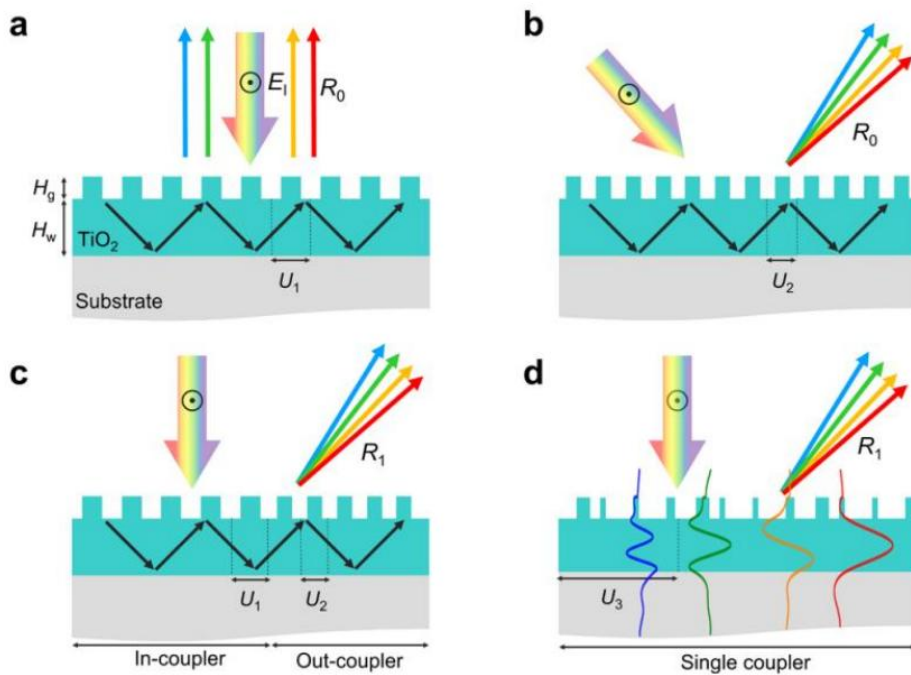


圖 1. (a)正常繞射的 RWG 示意圖，週期為 U_1 。(b)傾斜繞射的 RWG 示意圖，週期為 U_2 。(c)由入耦合器和出耦合器組成的 RWG 示意圖，工作於可見光範圍。(d)由拓撲優化設計的 MRWG 示意圖，使用單一耦合器實現同時的入耦合和出耦合。

二、 研究設計

我在設計過程中，理解優化背後的基本物理機制對於進一步推進反向設計至關重要。我們首先對兩種類型的波導共振光柵(RWG)進行模擬：一種是週期為 U_1 、適用於正向入射光的 RWG (圖 1a)，另一種是週期為 U_2 、適用於斜入射光的 RWG (圖 1b)。在這些模擬中，我們調整了 U_1 、 U_2 、波導層高度($H_w=405\text{ nm}$)及光柵高度($H_g=160\text{ nm}$)等參數，以確保它們的反射光譜在共振波長處重疊。此策略有助於選擇性地濾除特定波長，從而產生窄頻共振效應。我們選擇在兩種結構中使用相同的 H_w 和 H_g ，這與文獻中的設計方法一致 (圖 1c) [5]。然而，根據文獻報導，此方法的繞射效率通常低於 10% [5]。因此，為了實現更高的效率，我們採用拓撲優化 (圖 1d)，使整個結構區域同時參與輸入與輸出耦合。此外，透過自由形態結構的優化，我們能夠在特定波長下顯著提升繞射效率，從而克服傳統設計的限制。我們首先計算出理想的光柵週期為 $870\text{ nm}(U_3)$ ，該值為 U_1 和 U_2 的整數倍，確保在可見光範圍內僅產生一階繞射。接下來，我們對光柵進行基於伴隨法的拓撲優化 (圖 2a)。我們從隨機材料分佈 $\rho(x)$ 作為初始圖案開始，其數值連續變化範圍為 0 至 1，對應於介電常數從 ϵ_{Air} 到 ϵ_{TiO_2} 的線性變化 [6]。隨後，我們利用 RCWA 軟體進行光柵的電磁模擬，並設定參數，如入射角、各層的折射率分佈以及結構的幾何參數等。在前向模擬中，我們計算了繞射效率、一階複振幅，以及光柵內部的前向電場分佈。其中， 532 nm 波長下的一階繞射效率作為本次優化的目標函數(FoM)。接著，我們執行反向模擬，透過前向模擬所得的一階複振幅來確定入射波相位，進而計算伴隨電場。透過結合前向與伴隨電磁模擬，我們能夠計算出 MRWG 結構中每個像素的 FoM 梯度(∇FoM)。此梯度標識了圖案中($\rho(x)$)有助於提升 FoM 的關鍵像素位置。最後一步涉及基於 FoM($\rho(q)$) 及其梯度 ∇FoM ，迭代更新圖案 $\rho(q+1)(x)$ ，其中 q 代表第 q 次迭代。在優化過程中，我們添加約束條件，以確保最終圖案收斂為僅具有兩種相對介電常數(ϵ_{Air} 和 ϵ_{TiO_2})的二元設計。

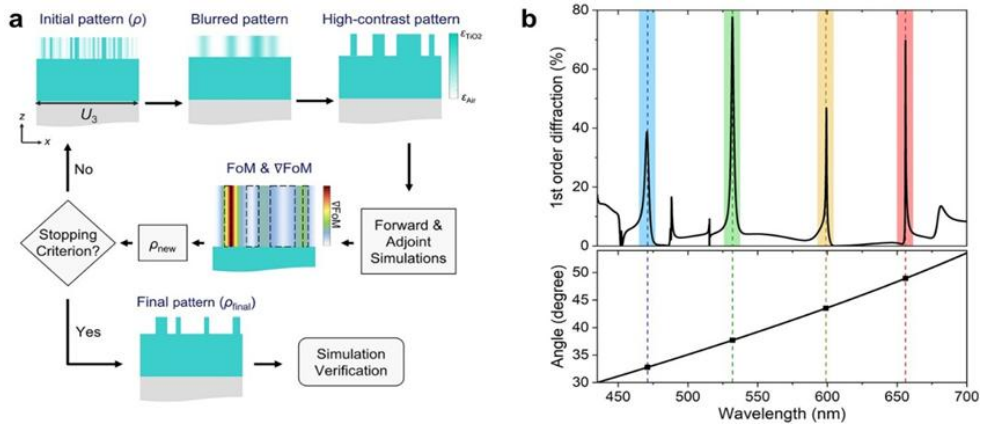


圖 2. (a)迭代優化過程的流程圖。(b) MRWG 的模擬一階繞射效率與角度。彩色區域表示四種峰值波長： $\lambda_1 = 471 \text{ nm}$ 、 $\lambda_2 = 532 \text{ nm}$ 、 $\lambda_3 = 599 \text{ nm}$ 和 $\lambda_4 = 656 \text{ nm}$ 。

我們通過檢驗模擬結果來驗證了優化後的 MRWG。圖 2b 顯示了繞射效率。入射光垂直照射，覆蓋可見光波段範圍。結果顯示，峰值出現在 471、532、599 和 656 nm 的波長，表明該 MRWG 成功地在可見光範圍內反射藍光、綠光、黃光和紅光。四個峰值的半高寬範圍從 0.48 到 3.59 nm。我們通過拓撲優化設計的 MRWG 顯著提高了效率，達到了 77.7%。此外，Q 值由波導模態決定，我們的結果顯示 Q 值範圍從 131 到 1367，詳細數值見 Table 1。

Table 1. 數值模擬

	Wavelength (nm)	Efficiency (%)	FWHM (nm)	Diffraction angle Q-factor (degree)	
λ_1	471	38.8	3.59	131	32.8
λ_2	532	77.7	2.25	237	37.7
λ_3	599	46.8	0.95	631	43.6
λ_4	656	69.7	0.48	1367	49.0

我們採用了動量分析方法來研究 MRWG 結構中的共振波長現象。首先，以紅光(λ_4)處的共振為例，物理現象可延伸至其他波長。光耦合進入波導的橫向動量可以通過入射耦合的動量守恆方程來獲得(Eq. 1)，其形式為：

$$k \sin \theta_{in} + m G_{in} = \beta_n. \quad (1)$$

在這裡， k 代表波數， β_n 是橫向動量， θ_{in} 是入射角， G 是光柵動量，定義為 $G = 2\pi / U_3$ 。當光線垂直入射到 MRWG 時，來自光的橫向動量為零。進一步地，耦合到波導內的動量由 G 的 m_{in} 倍決定。

此外，從波導耦合出的光的橫向動量 β_n 可以通過動量守恆方程來得到 (Eq. 2)：

$$\beta_n + m G k_{out} = \sin\theta_{out}. \quad (2)$$

繞射角 θ_{out} 隨後被估算，其中動量 $k \sin\theta_{out}$ 受到加入 β_n 以及 m_{out} 倍光柵動量 G 的影響。圖 3a 和圖 3b 直觀展示了上述動量守恆過程。在這裡， (m_{in}, m_{out}) 的值為 $(-3, 4)$ ，其中負值表示在波導內部傳播的導模具有負方向或動量 ($\beta_n = -3G$)。如圖 3b 所示， $-3G$ 動量對應於從波長 λ_4 到 λ_1 的特定模態編號 (n^{th})。同樣地，當光從波導耦合出來時，光經歷 $4G$ 的動量進入空氣層，從而導致根據 Eq. 2 計算出來的正繞射角 θ_{out} 。該結構也提供了可能的 (m_{in}, m_{out}) 值為 $(4, -3)$ ，但其效率較低，例如圖 2b 中顯示的在 452 nm、488 nm 和 515 nm 的共振。

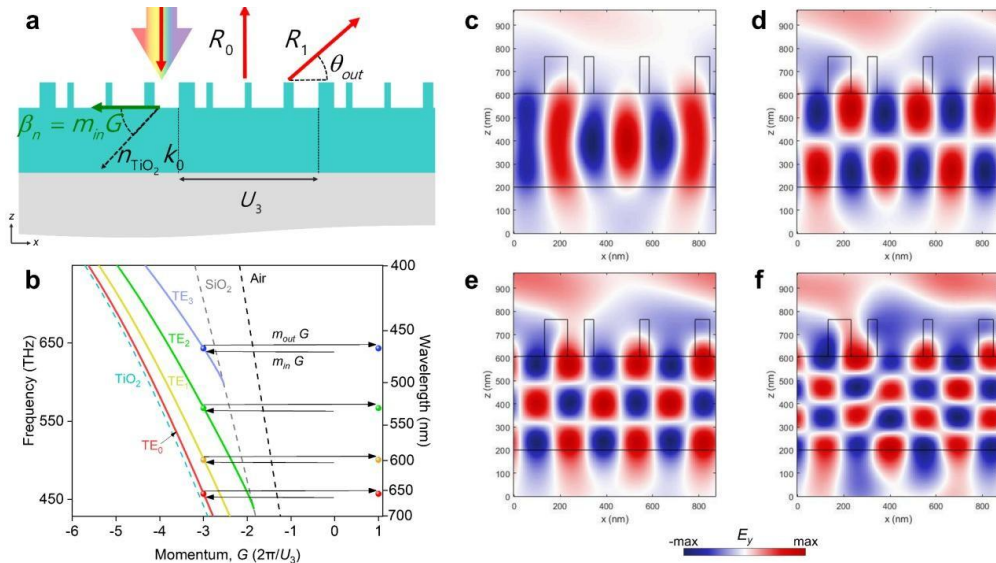


圖 3. (a)垂直入射 MRWG 的動量關係示意圖。(b) TiO_2 波導的模態關係圖。黑色、灰色和青色虛線分別為 Air、 SiO_2 和 TiO_2 的動量。左側的水平箭頭表示由正入射所激發光柵動量。右側的箭頭表示從 TE_n 模態解耦至第一階繞射。(c-f) 波導共振效應的電場 (E_y)：(c) 656 nm (TE_0)；(d) 599 nm (TE_1)；(e) 532 nm (TE_2)；(f) 470 nm (TE_3)。

最終，我們利用圖 3b 確定了當 $\beta_n = -3G$ 時對應於模態編號 (n^{th}) 的共振波長。這一過程得到了四個共振模態的橫截面圖像，如圖 3c-f 所示。電場在 z 方向上表現為 0(1、2、3)個節點，分別對應於 $TE_0(TE_1、TE_2、TE_3)$ 模態。

三、實驗結果與討論

圖 4a 顯示了我們製作的 MRWG 樣品的掃描電子顯微鏡(SEM)圖像，其中包含大約 3 個週期，且結構分佈與 MRWG 一致。隨後，我們使用實驗設置對第一階反射繞射效率隨波長的變化進行了光譜測量，如圖 4b 所示。在這個光譜中，紅線代表實驗結果，可以觀察到四個明顯的峰值。值得注意的是，在藍光區域，效率特別高(59.1%)，且 Q 因子達到相對較高的 93.2。然而，我們觀察到實驗測量的峰值相比優化結果出現藍移，並且效率相對較低。我們發現這一結果可能是由於製程不準確和 TiO_2 折射率偏差造成的。這些因素導致了較低的效率和峰值藍移。圖 4b 顯示了經過調整參數的模擬光譜(黑線)與實驗光譜(紅線)中峰值波長的良好對齊。模擬光譜表明， TiO_2 的折射率較低，且在實驗中波導的刻蝕過度。

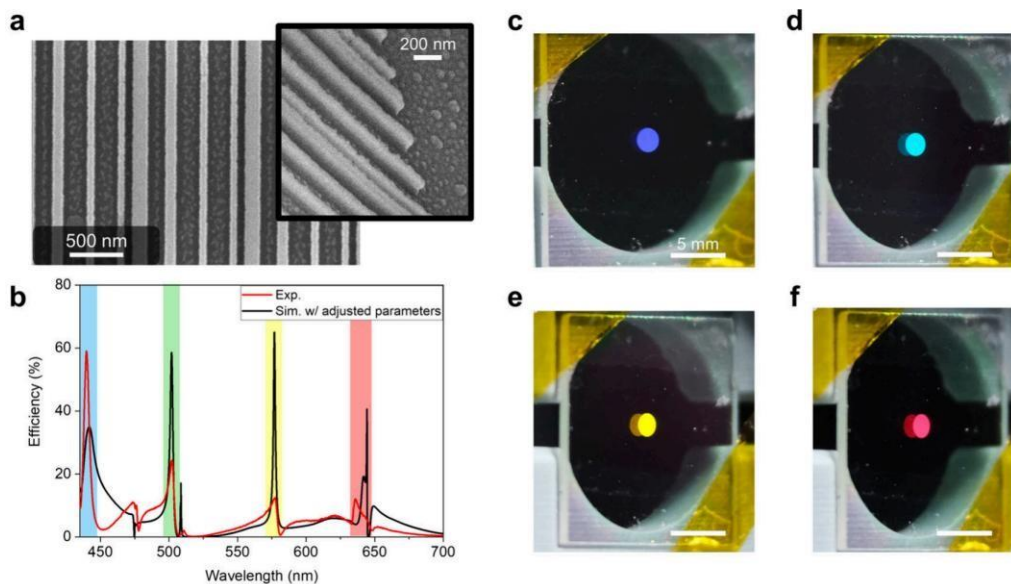


圖 4. (a)顯示 MRWG 樣品的 SEM 圖像，插圖顯示樣品部分的 45°視角圖。(b)比較測量的 MRWG 光譜(紅線)和調整參數後的模擬光譜(黑線)。彩色區域顯示了峰值波長的良好對齊。(c-f) 使用微聚焦相機拍攝的 MRWG 反射圖像。

圖 4c-f 顯示了使用微焦點相機拍攝的 MRWG 圖像。我們將相機放置於對應於 4 個繞射峰的特定角度，並相應地捕捉圖像。這一過程需要精確調整相機的位置，以便觀察並捕捉光學效果。在這些捕獲的圖像中，從左到右顯示了不同顏色的反射效果，分別對應於藍色、青色(綠色藍移)、黃色和紅色光。不同顏色代表了 MRWG 在 4 個設計波長下的繞射峰，這些效果僅在特定角度下可見，進一步展示了 MRWG 的色選擇性特徵。

四、 結論

在本研究中，我們實驗性地展示了一種新型的 MRWG，該設計利用基於伴隨的拓撲優化方法，實現了卓越的波長選擇性、繞射定向能力和高 Q 因子。成功克服了傳統 RWG 的限制，例如需要特定的耦合區域，我們的 MRWG 設計提供了完整的區域來實現輸入和輸出耦合，從而提高了系統的靈活性和交互區域，進一步增強了整體效率和 Q 因子。將非局部效應納入拓撲優化過程，使得光行為得以精確控制，實現了高效的濾波和高 Q 因子。

MRWG 設計成功地繞射了藍色、綠色、黃色和紅色光束，並在實驗結果中達到峰值效率。儘管由於製程不準確和折射率不理想，實驗與模擬結果之間存在輕微的偏差，但 MRWG 的波長選擇性特徵得到了明確展示，並為各種光學應用提供了有前景的機會。總結來說，本研究中展示的 MRWG 設計代表了超穎介面技術的一項重大進展，展示了其在實際應用中的波長選擇性和繞射定向能力。此外，對於一維優化，我們的 FoM 設置為單一波長，因此成功優化了 4 個高 Q 波長。這是因為 1D 優化中自由度較低，會導致共振波長的耦合。如果將來需要抑制特定波長或僅選擇單一波長，則需要更多的結構自由度，例如 2D 優化。

我們的 MRWG 設計適用於包括生物傳感器、基因篩查、近眼顯示和擴增實境等在內的廣泛應用。本研究為超穎介面技術的發展做出了貢獻，推動了光譜工程和窄帶納米光子學的多樣化應用。

五、參考資料

- [1] A. Overvig and A. Alù, "Diffractive Nonlocal Metasurfaces," *Laser Photonics Rev.* 16(8), 2100633 (2022).
- [2] N. Yu, P. Genevet, M. A. Kats, F. Aieta, J.-P. Tetienne, F. Capasso, and Z. Gaburro, "Light Propagation with Phase Discontinuities: Generalized Laws of Reflection and Refraction," *Science* 334(6054), 333–337 (2011).
- [3] M. Khorasaninejad, W. T. Chen, R. C. Devlin, J. Oh, A. Y. Zhu, and F. Capasso, "Metalenses at visible wavelengths: Diffraction-limited focusing and subwavelength resolution imaging," *Science* 352(6290), 1190–1194 (2016).
- [4] H. Sroor, Y.-W. Huang, B. Sephton, D. Naidoo, A. Vallés, V. Ginis, C.-W. Qiu, A. Ambrosio, F. Capasso, and A. Forbes, "High-purity orbital angular momentum states from a visible metasurface laser," *Nat. Photonics* 14(8), 498–503 (2020).
- [5] G. Quaranta, G. Basset, O. J. F. Martin, and B. Gallinet, "Color-Selective and Versatile Light Steering with up-Scalable Subwavelength Planar Optics," *ACS Photonics* 4(5), 1060–1066 (2017).
- [6] D. Sell, J. Yang, S. Doshay, R. Yang, and J. A. Fan, "Large-Angle, Multifunctional Metagratings Based on Freeform Multimode Geometries," *Nano Lett.* 17(6), 3752–3757 (2017).
- [7] C.-H. Lin, S.-H. Huang, T.-H. Lin, and P. C. Wu, "Metasurface-empowered snapshot hyperspectral imaging with convex/deep (CODE) small-data learning theory," *Nat. Commun.* 14(1), 6979 (2023).
- [8] H.-T. Su, L.-Y. Wang, C.-Y. Hsu, Y.-C. Wu, C.-Y. Lin, S.-M. Chang, and Y.-W. Huang, "Topology Optimization Enables High-Q Metasurface for Color Selectivity," *Nano Lett.* 24(33), 10055–10061 (2024).