

# 遗传算法优化设计三角晶格光子晶体<sup>\*</sup>

龚春娟<sup>†</sup> 胡雄伟

(中国科学院半导体研究所集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

(2006 年 4 月 29 日收到, 2006 年 6 月 9 日收到修改稿)

将遗传算法应用于三角晶格光子晶体的禁带设计过程. 考虑到可制备性, 算法以第五能级下最大绝对禁带为优化目标, 采用粗粒度像素表示原胞结构. 通过引入傅里叶变换数据备份机制以提高禁带计算速度和算法效率, 从而快速搜索到了具有较大绝对禁带的“介质空气柱”散射体形状的三角晶格光子晶体, 其最大绝对禁带的相对宽度值(绝对禁带宽度和中心高度的比值)为 23.8%.

关键词: 二维光子晶体, 三角晶格, 光子带隙, 遗传算法

PACC: 4270Q, 7820P

## 1. 引 言

光子晶体(photonic crystals, PCs)<sup>[1,2]</sup>中因周期性结构而存在的频率禁带称为光子禁带(photonic band gap, PBG). 光子禁带的存在是光子晶体具有广泛应用前景<sup>[3,4]</sup>的重要原因. 禁带越大, 可控光的频带也越宽, 因而如何设计合适的晶体结构以获得大的光子禁带一直是研究和应用的重点与热点<sup>[5]</sup>.

传统的光子晶体设计思路一般是采用有限的几种对称图形(如圆柱、正方柱等)作为晶格结构或原胞, 通过调整这些散射体的几何参数尽量获得大禁带的光子晶体, 并经验性地提炼可能的设计规律(例如通过降低晶格结构、原胞和材料的对称性<sup>[6]</sup>可以使光子晶体的能带增加、能级退简并甚至产生新的能带).

遗传算法(genetic algorithms, GAs)作为一种有效可行的优化设计方法, 已逐渐应用于光通信领域的研究<sup>[7]</sup>. 在光子晶体设计方面, 文献[8]基于遗传算法寻找正方晶格二维光子晶体大绝对禁带相对值, 并得到了 20.1% 的好结果, 但  $1000 \times 1000$  的原胞像素结构限制了实际制备的可行性, 也使算法运行速度深受影响. 文献[9]利用遗传算法优化正方晶格二维光子晶体, 针对 TE 极化波得到了较大的禁带值. 本小组<sup>[10]</sup>也曾将工艺特性融入遗传算法而

获得了易制备的具有较大绝对禁带的正方晶格二维光子晶体. 对三角晶格光子晶体而言, 大量研究已表明其晶格结构的低对称性能导致更宽的绝对禁带<sup>[5]</sup>, 但利用遗传算法的搜索优势设计三角晶格的研究还相当少.

本文将遗传算法应用到三角晶格光子晶体的优化设计中, 寻找具有大绝对禁带的光子晶体. 对像素型结构表达的三角晶格光子晶体, 采用平面波展开法(plane wave expansion method, PWM)<sup>[11]</sup>计算禁带结构. 利用傅里叶变换位移特性, 在传统遗传算法<sup>[8,12,13]</sup>中引入傅里叶变换数据备份机制以提高计算速度. 算法以第五能级以下的大绝对禁带为优化目标, 以使结果适用于二维光子晶体平板系统, 原胞结构采用  $10 \times 10$  粗粒度像素表示以满足实际工艺条件限制. 从而高效快速的搜索到了易制备的具有大绝对禁带的三角晶格二维光子晶体.

## 2. 理论模型与计算方法

### 2.1. 原胞结构

本文考虑由两种介电材料(硅和空气)构成的三角晶格二维光子晶体, 原胞采用具有反演对称性的平行四边形表示(图 1(a)), 其基矢为  $a_1 = a$  和  $a_2 = \frac{1}{2}a + \frac{\sqrt{3}}{2}ai$ . 与常规设计思路不同, 每个原胞被均匀

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 60477035, 60507006)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: luey@red.semi.ac.cn

分割为  $N \times N$  的小像素,在各像素中填充硅( $\epsilon_a = 11.56$ )或空气( $\epsilon_b = 1$ )即可形成特定的原胞结构.此时,光子晶体的结构设计问题转化为像素中介电材料的选择问题.显然,当  $N$  足够大时原则上可以表达任意形状的结构,但此时搜索规模往往呈指数形

式增长,而且像素粒度过小也给工艺制备带来了难度.本文综合考虑运算能力和制备工艺的限制,研究反演对称条件下大粒度像素( $N = 10$ )的光子晶体结构设计问题,对应的第一布里渊区如图 1(b)所示.

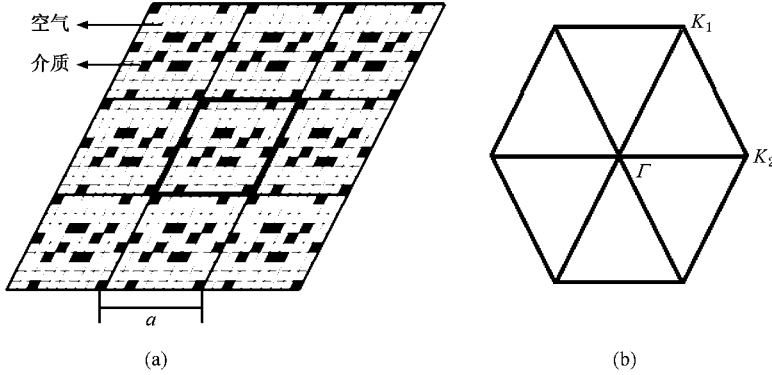


图 1 满足反演对称性的像素型三角晶格二维光子晶体示例 (a)原胞结构;(b)第一布里渊区

### 2.2. 平面波展开法

对上述像素型光子晶体,采用平面波展开法<sup>[11]</sup>计算其能带.将 Bloch 定理应用于 Maxwell 方程组可分别得到 TE, TM 偏振波的本征方程

$$\sum_{G'} |k + G| |k + G'| \epsilon^{-1}(G - G') h_1(G') = \frac{\omega^2}{c^2} h_1(G), \quad \text{TM 波}, \quad (1)$$

$$\sum_{G'} (k + G) \cdot (k + G') \epsilon^{-1}(G - G') h_2(G') = \frac{\omega^2}{c^2} h_2(G), \quad \text{TE 波}, \quad (2)$$

求解该方程组即可分别得到 TM, TE 偏振波的色散关系.

上述方程的求解中,介电常数倒数的傅里叶变换  $\epsilon^{-1}(G - G')$  至关重要.对像素型光子晶体,可以根据位移特性来计算任意分布的介电常数倒数的傅里叶变换  $\epsilon^{-1}(G)$ .

设  $P_a$  为原胞中填充介质  $\epsilon_a$  的像素集合.首先,计算中心点像素  $p_0 \in P_a$  (图 2) 介电常数  $\epsilon(k_1, k_2)$  的傅里叶变换  $\epsilon_0(G)$ ,  $\epsilon(k_1, k_2)$  表示为

$$\epsilon(k_1, k_2) = \epsilon_b + (\epsilon_a - \epsilon_b) \mathcal{S}(k_1, k_2), \quad (3)$$

其中

$$\mathcal{S}(k_1, k_2) = \begin{cases} 1, & |k_1| \leq \frac{a}{2N}, \quad |k_2| \leq \frac{a}{2N}, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases} \quad (4)$$

可求出  $\epsilon(k_1, k_2)$  的傅里叶变换  $\epsilon_0(G)$  为

$$\epsilon_0(G) = \begin{cases} \int (\epsilon_a - \epsilon_b) \text{sinc}\left(\frac{G_x a}{2N}\right) \text{sinc}\left[\left(G_x + \sqrt{3}G_y\right) \frac{a}{4N}\right], & G \neq 0, \\ \int (\epsilon_a - \epsilon_b) + \epsilon_b, & G = 0, \end{cases} \quad (5)$$

其中, 占空比  $f = \left(\frac{1}{N}\right)^2$ .

根据平移特性,任一填充  $\epsilon_a$  介质的像素  $p_r \in P_a$  (图 2,中心点位置为  $r$ ) 的傅里叶变换为

$$\epsilon_r(G) = \epsilon_0(G) e^{iG \cdot r}, \quad (6)$$

由(6)式可以计算像素型光子晶体介电常数分布的傅里叶变换  $\epsilon(G)$  为

$$\begin{aligned} \epsilon(G) &= \sum_{r \in P_a} \epsilon_r(G) \\ &= \sum_r \epsilon_r(G) \delta(r) \\ &= \epsilon_0(G) \sum_r e^{iG \cdot r} \delta(r), \end{aligned} \quad (7)$$

其中  $\delta(r) = \begin{cases} 1, & r \in P_a, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$

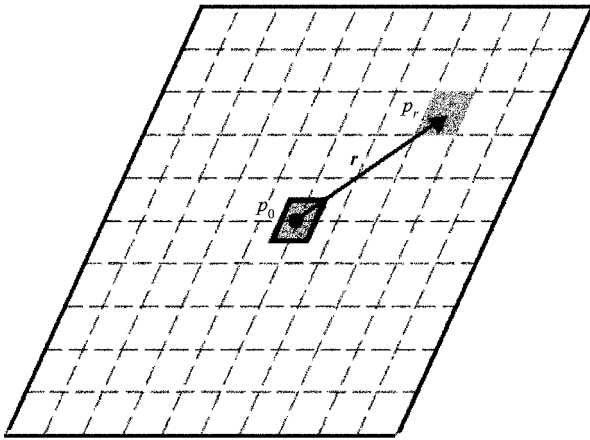


图2 位移特性

设  $e(G) = [e^{iG \cdot r_1}, e^{iG \cdot r_2}, \dots, e^{iG \cdot r_L}]$ ,  $r_k$  表示原胞中第  $k$  个像素的中心点位置;某一原胞结构的像素介电常数分布矢量表示为

$$\delta = [\delta(r_1), \delta(r_2), \dots, \delta(r_L)], \quad (8)$$

则(7)式等价于

$$\epsilon(G) = \epsilon_0(G) e(G) \cdot \delta. \quad (9)$$

由于  $e(G)$  可以离线计算并存储(9)式表明,给定任意原胞结构  $\delta$  后,即可采用加法计算  $\epsilon(G)$ ,从而大大降低运算量。

### 2.3. 遗传算法

由于像素型光子晶体的结构设计空间随  $N$  增加而呈指数爆炸趋势(例如具有反演对称性的光子晶体,  $N=10$  时其可能的结构总数约为  $10^{15}$ , 以每秒种计算 1000 个结构的计算机为例, 搜遍所有结构大约需要 3 万多年), 很难用穷尽枚举的方法来获得最优结构。遗传算法作为一类鲁棒性的全局搜索方法<sup>[12-14]</sup>很好的显示了求解该类问题的潜力。本文利用傅里叶变换的位移特性, 设计了一种新的遗传算法, 以快速寻找具有大禁带的三角晶格光子晶体。

#### 2.3.1. 基因表达

像素型二维光子晶体结构采用如(8)式所示的二进制字符串  $\delta = [\delta(r_1), \delta(r_2), \dots, \delta(r_L)]$  表示, 1 和 0 分别表示硅和空气。反演对称性条件下, 则仅需一半像素即可描述整个原胞( $N=10$  时, 遗传个体长度为  $L=50$ )。每个遗传个体采用平面波展开法(平面波个数取为 729)计算所对应的三角晶格二维光子晶体的禁带结构。为使设计的晶格结构更适用于二维光子晶体平板系统, 本文将目标禁带中心控

制在第五能级之下, 这样可以将绝对禁带尽可能地限制在光锥以下的区域。

#### 2.3.2. 算法流程

遗传算法流程如图 3 所示。

- 1) 输入待求解的问题参数(如介电常数、平面波个数、像素尺度  $N$  等);
- 2) 初始化: 生成初始种群  $P$  本文设定种群大小为 100;
- 3) 计算个体适应度: 每个遗传个体采用平面波展开法计算对应光子晶体的禁带结构, 以第五能级以下的绝对禁带的相对值作为个体的适应度值;
- 4) 依次执行选择、交叉和变异等遗传操作生成下一代种群。其中, 选择采用保留精英的轮盘赌机制, 两个父代个体采用多点交叉产生子代个体(交叉率 0.9); 个体变异采用位变异机制(变异率 0.05);
- 5) 判断种群是否满足终止条件, 若满足, 输出最优结果, 否则返回步骤 4)。

与一般遗传算法(simple genetic algorithm, SGA)<sup>[7,9,10]</sup>有所不同, 该算法中增加了傅里叶变换参数存储机制。算法启动时计算并存储傅里叶变换所需的基本参数如  $G, \epsilon_0(G), e(G)$  等, 演化过程中, 对每个遗传个体直接根据(9)式计算  $\epsilon(G)$ , 以提高算法速度。

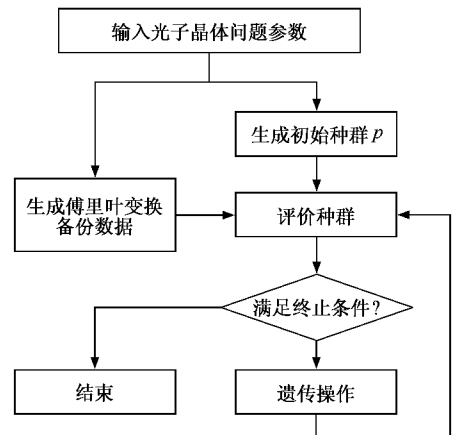


图3 遗传算法流程

## 3. 结果与分析

对三角晶格二维光子晶体, 采用快速遗传算法搜索到的原胞结构如图 4(a)所示, 该结构的占空比为 52%。对应的色散关系见图 4(b), 其中, 实线对应 TE 波, 虚线对应 TM 波。在第五能级下最大禁带

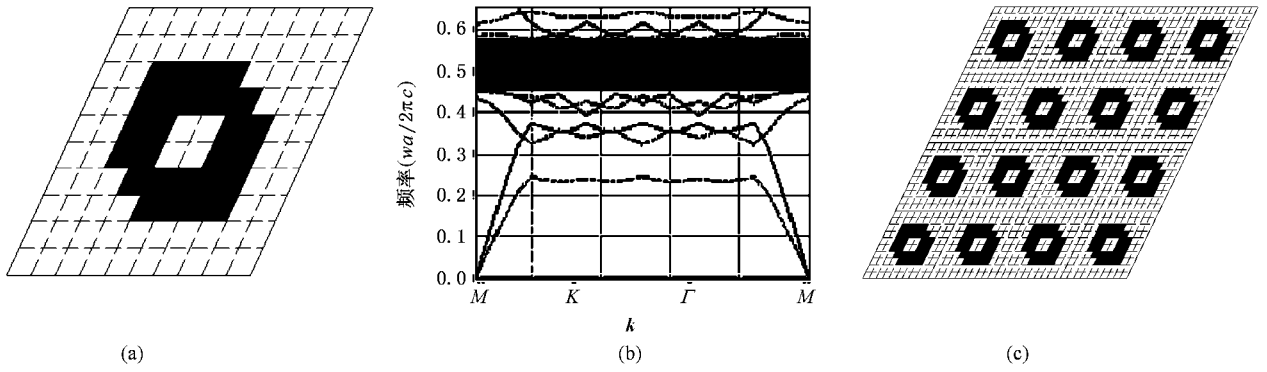


图 4 最优原胞结构(  $N = 10$  )及其禁带 (a)原胞结构 ;(b)第五能级以下禁带结构 ;(c)  $4 \times 4$  原胞结构

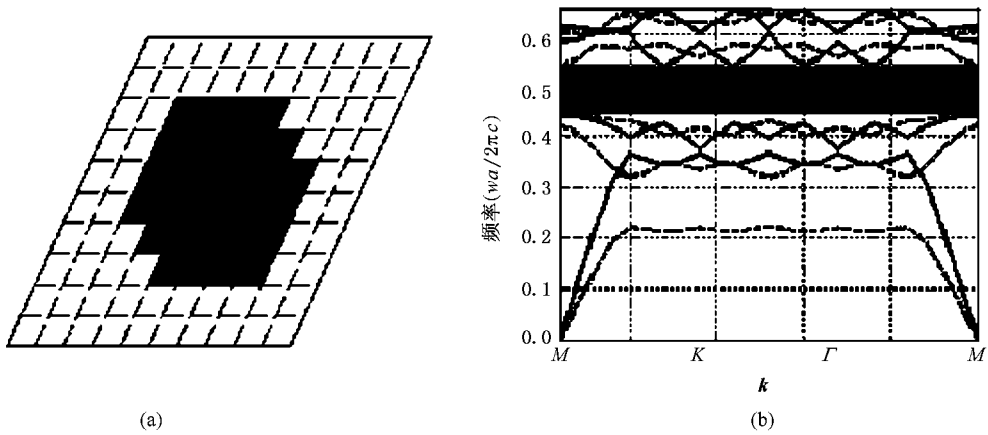


图 5 绝对禁带相对值最低的原胞(  $N = 20$  ) (a)原胞结构 ;(b)第五能级以下禁带结构

的中心频率为  $0.5149(2\pi c/a)$  ,禁带宽度为  $0.1197(2\pi c/a)$  ,最大禁带的相对值为  $23.25\%$  ,是以往像素型三角晶格光子晶体禁带(  $13.1\%$  )的近两倍<sup>[15]</sup> ,显示了遗传算法设计像素型光子晶体的明显优势. TE 波 2—3 能级之间和 TM 波 3—4 能级之间的禁带所对应的频率范围相同 ,两个极化波的禁带完美重叠.

进一步分析散射体结构(图 4(c)) ,原胞结构可以看作扭曲的六角形介质中间镂空平行四边形状. 已有研究表明<sup>[5]</sup> ,三角晶格光子晶体要取得宽禁带 ,散射子形状需为六角形 ,而此处遗传算法优化出的晶体结构也正是平行四边形基元所能填充出的六角形结构 ,并且此六角形结构存在一定程度的扭曲 ,因而可以得到较宽的绝对禁带值.

目前还没有采用这种介质柱中间镂空空气柱(“介质空气柱”)散射体结构获得大绝对禁带的相关报道. 就制备而言 ,近红外波段的光子晶体的最小结构尺寸为几百 nm ,而目前流制备技术如电子束

曝光、聚焦离子束刻蚀等的制备精度都已达到几十 nm ,这种新型的“介质空气柱”散射子的光子晶体结构是可以实现的 ;重点是该结构中不仅存在绝对禁带 ,而且相当宽 ,所以这种光子晶体结构是有着广泛的应用前景的. 为深入分析其禁带形成机理 ,将图 4 原胞细分为  $20 \times 20$  的像素形结构 ,保持介质柱外围形状不变 ,遍历内部像素(空气柱位置)的各种介质组合. 在完全填充没有空隙的情况下(图 5(a)) ,绝对禁带的相对值最低为  $18.48\%$  (图 5(b)) . 这表明介质柱中的空气孔对获得大的绝对禁带相当重要 ,这也正和绝对禁带的存在倾向相呼应 ,即高介电材料分布既相互孤立又相互连接.

图 4 进一步精细化后得到的具有最大禁带的原胞结构如图 6(a)所示 ,其绝对禁带相对值为  $23.81\%$  (图 6(b)) . 可以发现此介质柱中的空气孔形状亦为平行四边形像素所能表示出的六角形结构 ,这说明六角形是三角晶格光子晶体获得大绝对禁带的最佳散射形状.

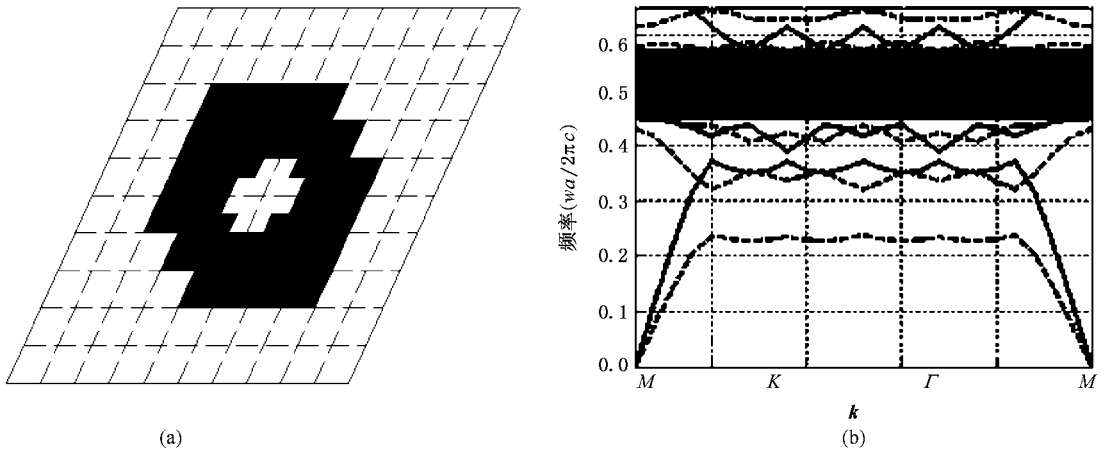


图6 最优原胞结构( $N=20$ )及其禁带 (a)原胞结构;(b)第五能级以下禁带结构

## 4. 小 结

通过引入物理思想,设计了一种快速遗传算法并获得了易于制备的具有大禁带结构的三角晶格光子晶体( $10 \times 10$  像素,最大禁带相对值 23.25%;  $20 \times 20$  像素,最大禁带相对值为 23.8%),且散射体

形状为六角形介质柱中镂空六角形空气孔.今后,将针对“介质空气柱”这一类新型散射体形状进行研究,希望通过合理有效的参数优化而得到具有更大绝对禁带的三角晶格光子晶体结构.另外,还可以进一步拓展个体的表达机制,并将更多的领域知识融入到遗传算法中以提高算法搜索效果和效率.

- [ 1 ] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [ 2 ] Joannopoulos J D 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [ 3 ] Liu J T, Zhou Y S, Wang F H, Gu B Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3336 (in Chinese) [ 刘江涛、周云松、王福合、顾本源 2004 物理学报 **53** 3336 ]
- [ 4 ] Lou S Q, Wang Z, Ren G B, Jian S S 2004 *Chin. Phys.* **13** 1052
- [ 5 ] Wang R Z, Wang X H, Gu B Y 2001 *J. of Appl. Phys.* **90** 4307
- [ 6 ] Cai X H, Zheng W H, Ma X T, Ren G, Xia J B 2005 *Chin. Phys.* **14** 2507
- [ 7 ] Sanchis L, Hakansson A, Lopez-Zanon D, Bravo-Abad J, Sanchez-Dehesa J 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 4460
- [ 8 ] Shen L F, Ye Z, He S L 2003 *Phys. Rev. B* **68** 035109-1
- [ 9 ] Preble S, Lipson M, Lipson H 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 061111-1
- [ 10 ] Gong C J, Ho X W 2006 *IEEE Inter. Confer. of Nano/Micro Eng. and Mol. Sys.* (in press)
- [ 11 ] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3152
- [ 12 ] Holland J H 1975 *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (Ann Arbor: University of Michigan Press)
- [ 13 ] Bäck T, Hammel H, Schwefel H P 1997 *IEEE Trans. on Evol. Comp.* **1** 3
- [ 14 ] Gong C J, Hu X W *Chin. J. of Semiconductors* (accepted) (in Chinese) [ 龚春娟、胡雄伟 半导体学报 (已接收) ]
- [ 15 ] Feng S K, Shen L F, He S L 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1540 (in Chinese) [ 冯尚申、沈林放、何赛灵 2004 物理学报 **53** 1540 ]

# Design of triangular lattice photonic crystals using genetic algorithms<sup>\*</sup>

Gong Chun-Juan<sup>†</sup> Hu Xiong-Wei

( *State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China* )

( Received 29 April 2006 ; revised manuscript received 9 June 2006 )

## Abstract

Genetic Algorithms ( GAs ) were used to design triangular lattice photonic crystals with large absolute band-gap. Considering fabricating issues , the algorithms represented the unit cell with large pixels and took the largest absolute band-gap under the fifth band as the objective function. By integrating Fourier transform data storage mechanism , the algorithms ran efficiently and effectively and optimized a triangular lattice photonic crystal with scatters in the shape of ' dielectric-air rod '. It had a large absolute band gap with relative width ( ratio of gap width to midgap ) 23.8% .

**Keywords** : two-dimensional photonic crystals , triangular lattice , photonic band gap , genetic algorithm

**PACC** : 4270Q , 7820P

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 60477035 60507006 )

<sup>†</sup> E-mail : lucy@red.semi.ac.cn