

# 结合 ANN 的 $\text{VO}_2/\text{GST}$ 光子结构的多级动态光谱选择性调控

宋奎龙 谢鸣 艾青

(哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨 150001)

**摘要** 光谱选择性吸收/发射的微纳光子结构广泛应用在诸多领域。本文提出了结合两种相变材料的简单多层光子结构的设计。首先采用 FEM 对该结构的光谱反射进行计算, 建立数据集并训练了快速计算的 ANN 模型。最后展示了结合相变材料  $\text{VO}_2$  和 GST 的光子结构的多级动态光谱选择性调控。结果显示光子结构参数为  $d_1=0.1\ \mu\text{m}$ 、 $d_2=0.3\ \mu\text{m}$  时, ANN 模型计算时间为 1.5 s, 节省了计算耗时; 此光子结构的四种模式表现不同的光谱选择性吸收。为光谱选择性调控提供了多级动态调控的新设计思路。

**关键词** 光子结构; 光谱选择性调控; 多级动态调控; 人工神经网络

**中图分类号:** TK121 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2024)09-2732-04

## $\text{VO}_2/\text{GST}$ Photonic Structure Combined with ANN for Multi-level Dynamic Spectral Selectivity

SONG Kuilong XIE Ming AI Qing

(School of Energy Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

**Abstract** Photonic structure with selective absorption performance and emission control ability are widely applied in many fields. In this work, a design of multilayer photonic structure including two phase-changing materials is presented. Firstly, the spectral reflectivity of the structure is calculated by FEM method, and a dataset is established to train a ANN model. Finally, the multi-level dynamic spectral selectivity of the photonic structure combined with phase-changing material  $\text{VO}_2$  and GST is demonstrated. The results show that when the structural parameters are  $d_1=0.1\ \mu\text{m}$  and  $d_2=0.3\ \mu\text{m}$ , the calculation time of the ANN model is 1.5 s, which saves the calculation time. The four modes of this photonic structure exhibit different spectral selective absorption. This work provides an idea of multi-level dynamic control for spectral selectivity.

**Key words** photonic structure; spectral selective tuning; multi-level dynamic tuning; artificial neural network

## 0 引言

具有光谱选择性吸收/发射的微纳光子结构广泛应用在红外隐身<sup>[1]</sup>、太阳能吸收<sup>[2]</sup>等领域。一些光子结构如光子晶体和超材料<sup>[3]</sup>, 可实现光谱选择性吸收, 不改变物理结构时, 这些结构一般不能实现光谱选择性吸收的动态调控。然而在一些应用中, 如红外伪装和热管理, 热开关<sup>[4]</sup>和可调热发射<sup>[5]</sup>也是必要的。

相变材料具有可变的光学常数, 其在光子结构中的应用为实现光谱选择性调控提供了一种设计思路, 通过外部激励, 其光学常数会发生突变, 无

需改变物理结构, 就可以改变电磁响应<sup>[6]</sup>。在光谱选择性调控中应用的相变材料常见的二氧化钒( $\text{VO}_2$ )<sup>[7]</sup>和  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST)<sup>[8]</sup>, 具有良好的相变特性。 $\text{VO}_2$  在  $68^\circ\text{C}$  左右会发生由绝缘相 ( $\text{iVO}_2$ ) 到金属相 ( $\text{mVO}_2$ ) 的可逆相变, 同时光学性质也发生可逆突变; 当退火温度高于  $160^\circ\text{C}$  (或高功率脉冲激光照射) 时, GST 会从非晶态 (aGST) 转变为晶态 (cGST), 并且能够在室温下维持晶态, 通过超过  $640^\circ\text{C}$  的退火 (或连续低功率脉冲激光照射), 可以使 GST 从晶态逆转变为非晶态<sup>[9]</sup>。传统的光子

收稿日期: 2023-05-17; 修订日期: 2024-08-22

基金项目: 国家自然科学基金国家重大科研仪器研制项目 (No.52227813); 国家重点研发计划引力波探测重点专项 (No.2022YFC2204300)

作者简介: 宋奎龙 (1994-), 男, 博士生, 主要从事光谱选择性的优化设计研究。

通信作者: 艾青, 教授, hiaiqing@hit.edu.cn。

结构的设计方法是电磁场仿真, 如时域有限差分方法 (FDTD)、有限元法 (FEM)、严格耦合波分析法 (RCWA) 或者 T 矩阵法 (TMM)。这种研究过程的求解很耗时, 研究对象越复杂, 计算耗时越久 [10]。因此, 发展一种高效快速的计算方法是必要的, 近年来, 机器学习方法的兴起, 为高效快速的光子结构的设计提供了很好的方法, 已有很多结合机器学习的相关研究 [11,12]。

本文设计了一种结合两种相变材料的简单多层光子结构。首先采用 FEM 对该结构的光谱反射进行计算, 建立数据集并训练了 ANN 模型; 最后展示了结合两种相变材料 VO<sub>2</sub> 和 GST 的光子结构的多级动态光谱选择性调控, 相比于传统只采用一种相变材料的设计, 本文的设计更具有光谱选择性调控的灵活。

## 1 模型建立

### 1.1 光子结构设计与仿真

VO<sub>2</sub> 在不同状态下的光学常数从文献 [13] 中获得。GST 的光学常数从文献 [14] 中获得。基于相变材料设计的结构, 只需通过外部的激励, 就可以改变电磁响应。基于一种相变材料的光子结构只具有两种状态, 结合两种相变材料所设计的光子结构, 至少有四种不同的状态, 就可实现多个级别的调控。结合两种相变材料设计一种简单光子结构, 如图 1 所示, 实现多级动态调控光谱选择性。顶层为 VO<sub>2</sub>, 厚度为  $d_2$ , 中间层为 GST, 厚度为  $d_1$ , 底层为 Au, 厚度为 0.1  $\mu\text{m}$ 。通过外部温度激励, 此光子结构可具有四种模态 ( $M$ ), 分别为 iVO<sub>2</sub>-aGST-Au、iVO<sub>2</sub>-cGST-Au、mVO<sub>2</sub>-aGST-Au 和 mVO<sub>2</sub>-cGST-Au。

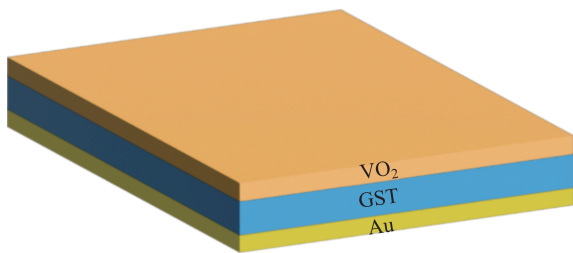


图 1 基于相变材料 VO<sub>2</sub> 和 GST 的简单光子结构

Fig. 1 Simple photonic structure based on phase-changing materials VO<sub>2</sub> and GST

为了计算多层微结构的光学特性, 可以用 Helmholtz 方程描述电磁场的传播, 并采用有限元方法 (FEM) 进行求解计算:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r \mathbf{E} = 0 \quad (1)$$

式中,  $\mathbf{E}$  为电场,  $\epsilon_r$  为相对介电常数,  $\epsilon_r = (n - ik)^2$ ,  $n - ik$  为复折射率,  $\omega$  为角频率,  $c$  为光速。

### 1.2 人工神经网络模型构建

人工神经网络 (artificial neural networks, ANN) 是深度学习方法的一种, 能够高精度的逼近许多物理过程 [12]。传统的电磁场数值方法包括时域有限差分方法、有限元方法和有限差分方法等, 可以准确的模拟电磁波的传播过程。但是数值计算方法需要划分精密的网格, 耗费时间和计算机内存, 结构越复杂, 时间和计算机资源越大。ANN 训练完毕, 只需要存储权值、阈值、网络结构等参数, 存储量非常小, 无需像查询表方法那样存储大型数据库, 其省时特性是数值方法无法比拟的。

本文基于广泛应用的 Tensorflow 构建 ANN 模型, 以简单多层光子结构的结构参数为输入, 以光谱反射率为输出, 训练深度学习模型, 如图 2 所示为人工神经网络模型。

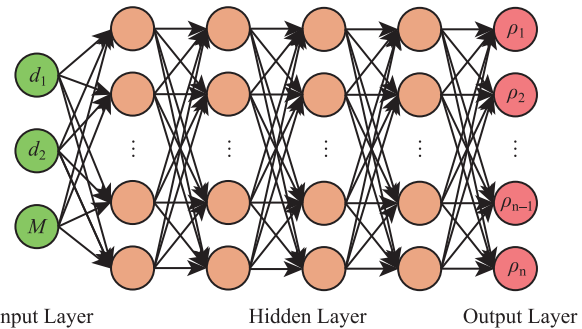


图 2 人工神经网络结构图 (以简单光子结构的各层厚度为输入, 光谱反射率为输出)

Fig. 2 Framework of artificial neural network (The thickness of each layer of the simple photonic structure is taken as the input, and the spectral reflectance is the output)

建立数据集是机器学习的必要准备工作, 本文采用 FEM 方法计算简单光子多层结构在 3~14  $\mu\text{m}$  波段的光谱反射率。M=1、2、3、4 分别代表光子结构的四种模态, 结构参数  $d_1$  和  $d_2$  分别设置为 0.1~1  $\mu\text{m}$  和 0.1~2  $\mu\text{m}$ , 我们通过对结构参数进行系统采样来建立数据集,  $d_1$  和  $d_2$  取值数分别为 50 和 25。最终数据集的大小为 5000。数据集将被随机分为训练集 (数据集的 80%) 和验证集 (数据集的 20%)。

本文将建立一个 5 层 ANN 结构, 隐藏层的神经元个数分别为 500、600、1000、500, 输出层神经元个数为 100。

选用均方差 (mean square error, MSE) 作为损失函数:

$$\text{MSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{\rho_i - \hat{\rho}_i}{\bar{\rho}} \right)^2} \quad (2)$$

式中,  $\rho_i$  为由 FEM 方法计算的光谱反射率,  $\hat{\rho}_i$  为 ANN 模型预测值,  $\bar{\rho}$  为由 FEM 方法计算的光谱反射率的平均值,  $n$  为数据个数。

激活函数选用 ReLU 函数, ReLU 函数定义如下:

$$f(x) = \max(0, x) \quad (3)$$

优化求解器选用 RMSprop 求解器, 该求解器的具体形式可见文献 [15]。学习率 (learning rate) 在训练模型中起着关键作用, 决定了权重在每个时期的调整程度, 本文选用了指数衰减学习率, 初始学习率设置为 0.001, 衰减速度为 3000, 即训练中每 3000 步学习率衰减一次, 学习率衰减设置为 0.96。

## 2 结果与讨论

图 3 中给出了 ANN 模型的相关性能参数。从图 3(a) 中可以看出训练损失 (training loss) 和验证损失 (validation loss) 迅速减小, 训练频数设置为 15000, MSE 可达到  $1\text{E}-4$ 。为了验证输出结果的准确性, 设置结构参数为  $d_1=0.1\text{ }\mu\text{m}$ 、 $d_2=0.3\text{ }\mu\text{m}$ , 并分别采用 FEM 方法和 ANN 模型计算, 对比结果如图 3(b), 两者的计算结果吻合较好。此外, 对于这个简单光子结构, 采用 FEM 方法的求解时间为 4 s, 采用 ANN 模型所需要的时间为 1.5 s, 相同的计算案例 ANN 模型要更省时。如果应用在更加复杂的模型中, 只需一次训练, 就可以快速完成后续的设计工作, 节省耗时。

ANN 模型具有一定的可靠性, 可以应用在后续的计算和设计。使用训练的 ANN 模型研究结合  $\text{VO}_2$  和 GST 光子结构在  $3\sim 14\text{ }\mu\text{m}$  波段的选择性调控特性。多层光子结构中 Au 层的厚度为  $0.2\text{ }\mu\text{m}$ , 大于入射光的穿透深度, 可以抑制向结构下方的辐射, 因此, 该结构的光谱吸收率为  $\alpha_\lambda = 1 - \rho_\lambda$ 。由基尔霍夫定律可知  $\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda$ 。图 4 给出了  $d_1=0.2\text{ }\mu\text{m}$ 、 $d_2=0.2\text{ }\mu\text{m}$  时的光谱吸收率/发射率。 $\text{VO}_2$  和 GST 两种相变材料的相变温度不同, 可以实现四种不同的模式, 该光子结构就可以实现四个级别的光谱选择性调控。图中实线曲线表明当  $\text{VO}_2$  处于绝缘相, GST 处于非晶态时, 光谱吸收率较低, 平均发射率为 0.08, 最大吸收率为 0.36 出现在  $4.5\text{ }\mu\text{m}$  附近。通过施加  $68^\circ\text{C}$  的外部温度激励,  $\text{VO}_2$  转变为金属相, GST 仍为非晶态, 即图中点线, 此时光谱吸收率有所升高, 平均发射率为 0.34, 最大吸收率为 0.72 出现在  $3\text{ }\mu\text{m}$  附近。通过施加

$160^\circ\text{C}$  的外部温度激励, 由于 GST 的状态无需温度维持, GST 将在室温下保持晶态,  $\text{VO}_2$  处于绝缘相, 即图中的划线, 此时具有一个窄带高吸收, 最

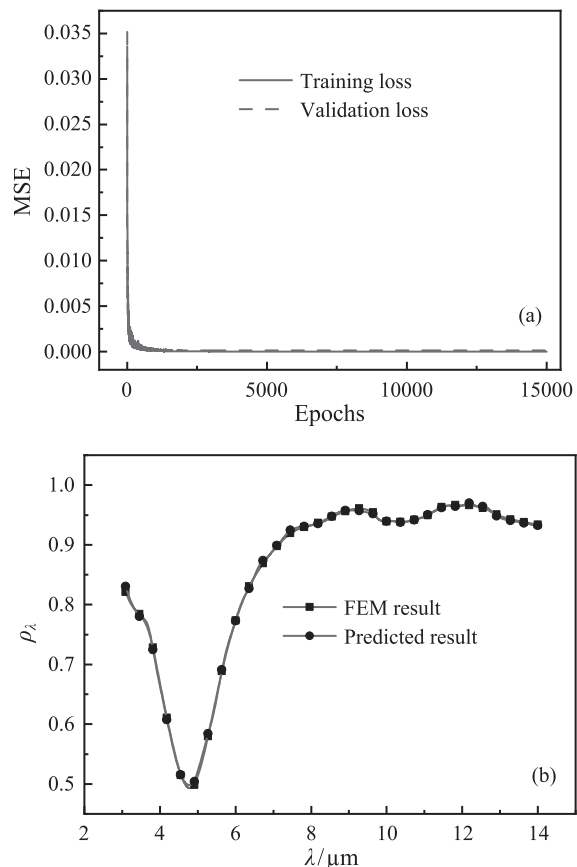


图 3 ANN 模型性能验证: (a) 训练与验证均方差; (b) 光谱反射率的 ANN 预测值与 FEM 方法仿真结果的比较

Fig. 3 ANN model performance verification: (a) Mean square error of training and validation; (b) Relationship between the FEM results and predicted results

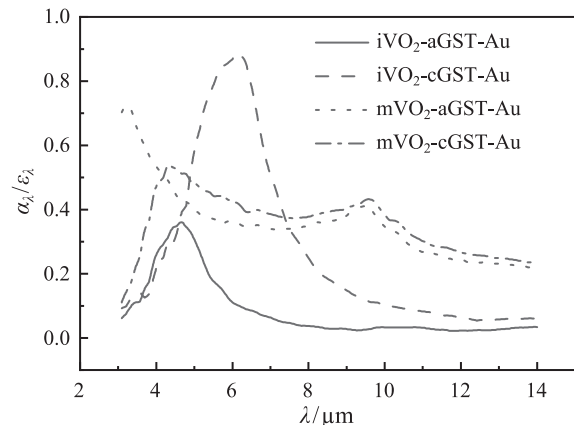


图 4 四种模式下简单光子结构的光谱吸收率/发射率 ( $d_1 = 0.2\text{ }\mu\text{m}$ ,  $d_2 = 0.1\text{ }\mu\text{m}$ )

Fig. 4 Spectral absorptivity/emissivity of simple photonic structure in four modes ( $d_1=0.2\text{ }\mu\text{m}$ ,  $d_2=0.1\text{ }\mu\text{m}$ )

大吸收率为 0.92 出现在 6  $\mu\text{m}$  附近, 在 3~5  $\mu\text{m}$  和 8~14  $\mu\text{m}$  波段的吸收较低, 在 5~8  $\mu\text{m}$  波段的吸收较高。再通过施加 68°C 的外部温度激励, VO<sub>2</sub> 由绝缘相转变为金属相, GST 仍维持在晶态, 即图中的点划线曲线, 此时光子结构的平均吸收率为 0.35, 光谱吸收率变化不大。经过合理的设计, 该简单光子结构能够实现多级动态光谱选择性吸收调控。

### 3 结 论

本文提出一种简单光子结构结合了两种相变材料 VO<sub>2</sub> 和 GST。考虑到光谱特性的快速计算, 首先采用 FEM 进行仿真, 建立数据集并训练 ANN 模型。展示了光子结构参数为  $d_1=0.1 \mu\text{m}$ 、 $d_2=0.3 \mu\text{m}$  时的多级动态光谱选择性调控。得出如下结论:

1) ANN 模型的计算时间为 1.5 s, 而 FEM 方法的计算时间为 4 s, 节省计算耗时;

2) 通过外部温度激励, 此光子结构可具有四种模态;

3) iVO<sub>2</sub>-aGST-Au 平均发射率为 0.08, 最大吸收率为 0.36 出现在 4.5  $\mu\text{m}$  附近; mVO<sub>2</sub>-aGST-Au 平均发射率为 0.34, 最大吸收率为 0.72 出现在 3  $\mu\text{m}$  附近; iVO<sub>2</sub>-cGST-Au 最大吸收率为 0.92 出现在 6  $\mu\text{m}$  附近, 在 3~5  $\mu\text{m}$  和 8~14  $\mu\text{m}$  波段的吸收较低, 在 5~8  $\mu\text{m}$  波段的吸收较高; mVO<sub>2</sub>-cGST-Au 平均吸收率为 0.35, 无明显高吸收峰。

### 参 考 文 献

- [1] Xu Y, Xuan Y, Liu X. Broadband Selective Tailoring of Spectral Features with Multiple-Scale and Multi-Material Metasurfaces [J]. Optics Communications, 2020, 467: 125691
- [2] Yang C, Zheng T, Luo H, et al. Visible-Infrared (0.4–20  $\mu\text{m}$ ) Ultra-Broadband Absorber Based on Cascade Film Stacks [J]. Applied Physics Letters, 2021, 118(14): 143501
- [3] Chang Y, Kildishev A V, Narimanov E E, et al. Metasurface Perfect Absorber Based on Guided Resonance of a Photonic Hypercrystal [J]. Physical Review B, 2016, 94(15): 155430
- [4] Qu Y, Li Q, Cai L, et al. Polarization Switching of Thermal Emissions Based on Plasmonic Structures Incorporating Phase-Changing Material Ge<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>Te<sub>5</sub> [J]. Optical Materials Express, 2018, 8(8): 2312–2320
- [5] Huang L, Duan Y, Yang X, et al. Ultra-Flexible Composite Metamaterials with Enhanced and Tunable Microwave Absorption Performance [J]. Composite Structures, 2019, 229: 111469
- [6] Tian J, Cortecchia D, Wang Y, et al. Phase-Change Perovskite Metasurfaces for Dynamic Color Tuning [J]. Nanophotonics, 2022, 11(17): 3961–3968
- [7] Cuff S, Li D, Zhou Y, et al. Dynamic Control of Light Emission Faster Than the Lifetime Limit Using VO<sub>2</sub> Phase-Change [J]. Nature Communications, 2015, 6(1): 8636
- [8] Qu Y, Li Q, Cai L, et al. Thermal Camouflage Based on the Phase-Changing Material GST [J]. Light: Science & Applications, 2018, 7(1): 26
- [9] Qu Y, Li Q, Du K, et al. Dynamic Thermal Emission Control Based on Ultrathin Plasmonic Metamaterials Including Phase-Changing Material GST [J]. Laser & Photonics Reviews, 2017, 11(5): 1700091
- [10] Yan R, Wang T, Jiang X, et al. Design of High-Performance Plasmonic Nanosensors by Particle Swarm Optimization Algorithm Combined with Machine Learning [J]. Nanotechnology, 2020, 31(37): 375202
- [11] Zhou S, Qiu J, Zhang C, et al. Fast Design and Optimization Method for an Ultra-Wideband Perfect Absorber Based on Artificial Neural Network Acceleration [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2022, 179: 107680
- [12] Chen M, Pang D, Chen X, et al. Optimized Design of Multi-layer Nano-photonic Structures for Selective Absorption Applications by Artificial Neural Networks [J]. Plasmonics, 2021, 16(3): 653–659
- [13] Xu Z, Li Q, Du K, et al. Spatially Resolved Dynamically Reconfigurable Multilevel Control of Thermal Emission [J]. Laser & Photonics Reviews, 2020, 14(1): 1900162
- [14] Du K K, Li Q, Lyu Y B, et al. Control Over Emissivity of Zero-Static-Power Thermal Emitters Based on Phase-Changing Material GST [J]. Light: Science & Applications, 2017, 6(1): e16194–e16194
- [15] Zou F, Shen L, Jie Z, et al. A sufficient condition for convergence of adam and rmsprop [C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on computer vision and pattern recognition, 2019: 11127–11135