

基于相位收敛驱动的通用化超构器件伴随优化方法

张越 尹浩然 王硕 韩晓泉 邹承均 吴晓斌

A generalized adjoint optimization method for metasurfaces enabled by phase-convergence

ZHANG YUE, YIN Hao-ran, WANG SHUO, HAN Xiao-quan, ZOU Cheng-jun, WU Xiao-bin

引用本文:

张越, 尹浩然, 王硕, 韩晓泉, 邹承均, 吴晓斌. 基于相位收敛驱动的通用化超构器件伴随优化方法[J]. *中国光学*, 优先发表. doi: 10.37188/CO.2025-0161

ZHANG YUE, YIN Hao-ran, WANG SHUO, HAN Xiao-quan, ZOU Cheng-jun, WU Xiao-bin. A generalized adjoint optimization method for metasurfaces enabled by phase-convergence[J]. *Chinese Optics*, In press. doi: 10.37188/CO.2025-0161

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.37188/CO.2025-0161>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

无源非厄密超构表面奇异点现象研究进展

Research progress in the phenomenon of exceptional point on passive non-Hermitian metasurfaces

中国光学 (中英文). 2025, 18(1): 17 <https://doi.org/10.37188/CO.2024-0119>

面向偏振成像的超构表面研究进展

Recent advances in metasurfaces for polarization imaging

中国光学 (中英文). 2023, 16(5): 973 <https://doi.org/10.37188/CO.2022-0234>

利用级联超构表面同时测量径向角位移和纵向线位移

Simultaneous measurement of radial angular displacement and longitudinal linear displacement with cascade metasurfaces

中国光学 (中英文). 2025, 18(5): 1016 <https://doi.org/10.37188/CO.2025-0033>

基于硫系玻璃的宽带消色差远红外超透镜参数化拓扑优化设计

Design of broadband achromatic far-infrared metalens based on chalcogenide glass using parameterized topology optimization

中国光学 (中英文). 2025, 18(6): 1475 <https://doi.org/10.37188/CO.EN-2025-0003>

角度复用的光学加密超表面的超快激光嵌套加工方法研究

Angle-multiplexed optically encrypted metasurfaces fabricated by ultrafast laser induced spatially selective-modified nanograting structures

中国光学 (中英文). 2023, 16(4): 889 <https://doi.org/10.37188/CO.2022-0228>

基于狄拉克半金属的可调谐反射自旋解耦编码超表面

Tunable reflective spin-decoupled encoding metasurface based on Dirac semimetals

中国光学 (中英文). 2025, 18(4): 968 <https://doi.org/10.37188/CO.EN-2024-0037>

文章编号 2097-1842(xxxx)x-0001-13

基于相位收敛驱动的通用化超构器件伴随优化方法

张越^{1,2}, 尹浩然², 王硕^{1,2}, 韩晓泉^{1,2}, 邹承均^{1*}, 吴晓斌^{1,2*}
(1. 中国科学院微电子研究所, 光电技术研发中心, 北京 100029;
2. 中国科学院大学, 北京 100049)

摘要:超构表面一般由亚波长共振单元构成,能够在亚波长尺度上对入射光场进行灵活调控,是构建轻量化与紧凑型光学系统的重要途径。传统的超构表面设计方法依赖结构单元局部周期分布的假设,当单元尺寸变化较大时,近场电磁耦合会导致器件性能显著下降。基于伴随优化的逆向设计虽能克服这一问题,但现有方法在不同类型超构器件的设计中缺乏统一性:伴随激励源必须依据具体目标场单独构造,不仅增加了设计流程的复杂度,而且在远距离或离轴目标下还会带来计算域膨胀与传播误差积累等困难。为此,本文构建了一种以相位调控机制为核心的超构器件通用伴随优化方法。该方法的核心在于建立了一个梯度-结构映射模型,将复数域的伴随梯度转化为物理可实现的结构更新量,从而在结构扰动与相位响应之间确立了稳定的迭代关系,最终实现对器件表面相位的逐点精确调控。其中伴随仿真始终采用单个电偶极子激励,无需针对不同设计任务重新构建伴随源;不同功能需求的差异完全通过结构更新映射的调整来实现,从而使该方法能够在统一仿真模型下高效处理多类型波前调控任务。在此基础上,完成了多类超构器件的数值设计验证。二维纳米柱超透镜实现了接近衍射极限的聚焦性能,衍射效率为 83.9%;基于线性相位梯度的超光栅实现了 30° 的输出偏折, +1 级衍射效率为 72.4%;设计的双焦点透镜汇聚效率达到 67.2%;全息超表面能够清晰重建中空三角形图案,对应能量集中度约为 60.3%。结果表明,所提出方法具有伴随源构建简单、计算效率高、结构类型适应性强等优势,可在统一框架下高效完成不同类型超构器件的逆向设计,为超构表面在成像、波前工程、紫外探测等领域的深入应用提供了一种可行方案。

关键词:超构表面;伴随优化;相位收敛调控;单电偶极子伴随源

中图分类号: TP394.1; TH691.9 文献标志码: A doi: 10.37188/CO.2025-0161 CSTR: 32171.14.CO.2025-0161

A generalized adjoint optimization method for metasurfaces enabled by phase-convergence

ZHANG YUE^{1,2}, YIN Hao-ran², WANG SHUO^{1,2}, HAN Xiao-quan^{1,2}, ZOU Cheng-jun^{1*}, WU Xiao-bin^{1,2*}
(1. R & D Center of Optoelectronic Technology, Institute of Microelectronics of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

* Corresponding author, E-mail: zouchengjun@ime.ac.cn; wuxiaobin@ime.ac.cn

Abstract: Metasurfaces enable lightweight, highly integrated optical systems, offering a compact alternative to conventional bulky components. However, forward design methods based on local periodic approximation

收稿日期: 2025-12-25; 修订日期: xxxx-xx-xx

基金项目: 中国科学院战略性先导科技专项资助项目 (No. XDA0380104)

Supported by the Strategic Priority Research Program of the Chinese Academy of Sciences (No. XDA0380104)

inevitably suffer from efficiency degradation resulting from inter-element couplings. While adjoint-based inverse design methods can overcome these limitations, current adjoint optimization algorithms remain task-specific across different metasurface designs. Their adjoint excitations must be reconstructed for each prescribed target field, making the workflow cumbersome and often incurring high computational costs and propagation errors for far-field or off-axis objectives. To address this challenge, we propose a generalized adjoint-optimization method enabled by a phase-convergence mechanism. Central to this method is a gradient-to-structure mapping model that translates complex-valued adjoint gradients into physically realizable structural updates, establishing a stable iterative relation between structural perturbations and the resulting phase response. This mechanism ensures monotonic phase convergence at the device plane, enabling meta-element-level control of arbitrary phase profiles. Within this formulation, the adjoint simulation employs a single electric dipole excitation, independent of the desired metasurface function. Functional diversity is achieved solely by adjusting the update mapping rather than redefining the adjoint source or modifying the simulation model. This establishes a unified and computationally efficient inverse-design framework capable of handling multiple types of wavefront-shaping functionalities. As proof of concept, numerical validations are performed on diverse metadevices. Specifically, a 2D nanopillar metalens and a linear phase gradient metagrating achieved efficiencies of 83.9% and 72.4% (at 30° deflection), respectively. For arbitrary wavefront shaping, a bifocal lens showed a focusing efficiency of 67.2% and a holographic metasurface generated a hollow triangle pattern with 60.3% energy efficiency. Our results confirm that the proposed method features simplified source construction, high computational efficiency, and strong adaptability, providing a unified and viable framework for the engineering of metasurfaces in imaging, wavefront engineering, and ultraviolet detection.

Key words: metasurfaces; adjoint optimization; phase convergence control; single electric dipole adjoint source

1 引言

超构表面是一类由亚波长尺度结构单元组成的光学器件,能够在亚波长尺度下实现对光场振幅、相位、偏振等特性的灵活调控^[1-3]。与传统光学元件相比,超构表面具有结构紧凑、易于集成等优点^[4-6],在成像^[7-9]、光刻^[10-11]、传感^[12-14]以及光计算^[15-17]等领域展现出广阔的应用前景。目前,大多数超构表面的设计仍采用传统的单元库方法,即在周期性边界假设下通过参数扫描构建结构与相位、振幅等特性的映射关系,再以此构建出对应设计目标相位、振幅分布的器件^[18-19]。这类正向设计方法具有计算成本低、易于拓展的优点。然而,在实际设计中相邻单元的结构通常不同,非周期性的排布改变了每个单元所处的局部电磁环境,这使得它们在单元库中基于周期性假设计算出的响应不再准确,最终导致器件整体效

率降低^[20]。这一问题在目标相位分布变化剧烈的器件(如高数值孔径透镜)中尤为严重^[21-22]。

相比之下,逆向设计将超构表面视为一个整体进行优化,能够将不同结构单元间的相互作用内在地包含于设计过程中,从而可以突破传统方法的设计局限^[23]。根据优化策略的不同,逆向设计可分为启发式算法和基于梯度的算法^[24-25]。遗传算法、粒子群算法等启发式方法无需梯度信息,具备全局搜索能力,但其计算量随设计自由度的增加急剧增大,难以胜任大尺寸、高自由度器件的设计^[26]。对于许多原理上基于局部优化的器件设计,基于梯度的伴随算法在每次迭代中具有明确的优化方向,能高效地高维参数空间中搜索最优解^[27],已广泛应用于光栅耦合器^[28]、偏振分束器^[29]、超光栅^[30-31]以及超表面^[32-33]的设计。其核心优势在于,所需梯度可借助伴随方法高效求解,仅需一次正向仿真和一次伴随仿真,即可获得优化评价函数关于所有设计参数的梯度信息^[34]。

尽管伴随优化方法十分高效,但伴随仿真中激励源(即伴随源)的构建这一关键环节,在实际应用中仍面临挑战。伴随源通常与目标场的分布形式有关,例如选取目标场分布的复共轭^[35-36]。但在数值仿真中精确构建伴随源面临两大挑战:其一,远场目标带来的计算困境。当目标位于远场时,伴随仿真需在庞大的计算域中模拟光的长距离传播,这不仅急剧增加了计算资源消耗,而且累积的数值误差会降低仿真结果的精度。其二,复杂目标的设置难题。对于离轴或形态复杂的目标场,在仿真软件中直接设置对应的伴随源操作复杂且精度受限。若采用截取中间场作为等效源的替代方案,有限边界条件导致的激励场边缘截断和二次衍射一般会引入难以量化的误差,最终影响优化结果的可靠性。

针对上述问题,本文提出了一种基于相位收敛驱动的超构器件通用伴随优化方法。该方法的核心在于解耦了伴随源构建形式和设计目标的关系:在伴随仿真中始终采用简单的单电偶极子作为激励,从根本上规避了复杂伴随源的构建难题。我们通过引入复数梯度与几何更新步长之间的相位锁定映射机制,建立了器件表面局部相位与结构参数间的定量演化关系。借助该机制,设计者只需调整算法中的空间相位参数,即可引导结构向任意预设的波前目标收敛。需指出的是,本文并未采用自由形式的拓扑优化,而是将基于网格分布的参数化的典型超构单元作为设计验证的示例,这有利于同时兼顾设计效率和工艺可行性^[36]。为验证该方法的有效性,本文首先从理论上推导了基于单偶极子伴随源的通用相位调控模型,明确了空间相位参数,伴随源设置方法对相位收敛的作用机理;其次,以聚焦超透镜为基准模型,分别验证了静态相位锁定机制与动态自适应反馈策略的物理正确性;最后,完成了超光栅、双焦点透镜及全息超表面等典型器件的设计,展示了该方法在统一仿真设置下处理任意复杂波前调控任务的普适性与高效性。

2 相位收敛驱动的伴随优化原理

2.1 单元级电磁响应的相位调控机制

基于伴随优化逆向设计的核心思路是通过建

立目标光场与结构微扰间的映射关系,以迭代逼近设计目标的方式来优化器件设计,从而克服正向设计方法中的忽略耦合效应、光场采样率不足等问题。为实现对超构器件出射相位的可控、可预测与逐点精确调制,有必要首先从单个散射单元的电磁响应出发。本文采用的超构单元结构如图 1(a) 所示,基底材料为石英玻璃 (SiO_2),纳米柱材料为氮化硅 (Si_3N_4),结构周期 P 为 300 nm,纳米柱高度 H 为 800 nm,设计工作波长为 550 nm 可见光。

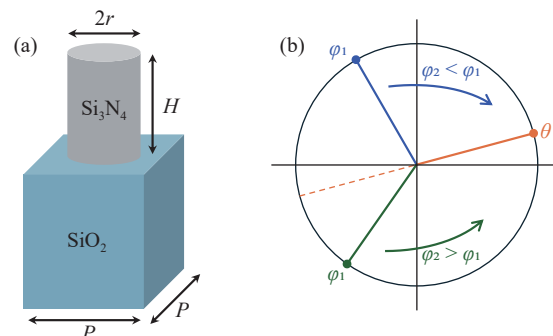


图 1 超构单元结构及其相位锁定机制。(a) 单元结构示意图; (b) 目标点相位负反馈更新示意图。

Fig. 1 Unit cell design and phase-locking mechanism. (a) Schematic of the meta-atom (nanopillar) unit cell. (b) Negative-feedback phase-locking update at the target point.

根据麦克斯韦方程的互易定理,目标点的电场关于圆柱半径的梯度可表示为:

$$\frac{d\mathbf{E}_{\text{tar}}}{dr} = \frac{\varepsilon_0(n^2 - 1)}{p_{\text{adj}}} \int_{\Omega} \mathbf{E}_{\text{fwd}} \cdot \mathbf{E}_{\text{adj}} ds, \quad (1)$$

式中, \mathbf{E}_{tar} 为圆柱单元在目标点激发的电场, r 为圆柱半径, ε_0 为真空介电常量, n 为圆柱材料的折射率, p_{adj} 为伴随电偶极子源的电偶极矩, 积分区域 Ω 为圆柱侧表面, \mathbf{E}_{fwd} 与 \mathbf{E}_{adj} 分别为正向仿真和伴随仿真中圆柱侧壁处的电场分布(推导细节见附录 S1)。正向仿真的激励源为平面波; 伴随仿真的激励源为位于目标点处的单个电偶极子, 其振幅在整个迭代过程中保持不变, 相位固定为 0。

圆柱受平面波照明, 在目标点激发的电场 \mathbf{E}_{tar} 可视作半径 r 的函数, 即:

$$\mathbf{E}_{\text{tar}}(r) = A(r)e^{i\varphi(r)}, \quad (2)$$

其中, $A(r)$ 和 $\varphi(r)$ 分别为目标点电场的振幅和相位, 反映了超构单元对入射波的调制作用。扫描

圆柱半径发现: 透过率保持在 95%–100% 的高水平范围, 平均值为 97.2%, 整体波动较小, 仅约 5.1% (详见附录 S2)。在平面波入射且传播路径固定的条件下, 目标点处电场的振幅主要由单元透射振幅所决定。因此, 当透过率随半径的变化较弱时, 可知目标点电场振幅 $A(r)$ 的变化也相对有限。基于此, 我们做出一个关键的简化假设: 忽略振幅项随半径的变化, 即 $A'(r) \approx 0$, 并将单元对目标点电场的调制聚焦于相位项 $\varphi(r)$ 。在该假设下, 目标点处电场梯度可简化为:

$$\mathbf{E}'_{\text{tar}}(r) = A(r)e^{i\varphi(r)} \cdot i\varphi'(r) \quad , \quad (3)$$

值得注意的是, 电磁仿真中的电场量通常以复数形式表示, 由式 (1) 得到的梯度亦为复数量, 但单元的结构参数为实值。因此需要建立一种从复数梯度 $\mathbf{E}'_{\text{tar}}(r)$ 到实参数更新量 Δr 的映射, 使得更新方向能够精确指向预期的相位变化。为此, 我们构建了一种梯度 $\mathbf{E}'_{\text{tar}}(r)$ 实部和虚部的线性组合作为更新策略:

$$\Delta r = l[\cos\theta \text{Re}\{\mathbf{E}'_{\text{tar}}(r)\} + \sin\theta \text{Im}\{\mathbf{E}'_{\text{tar}}(r)\}] = lA \sin[\theta - \varphi(r)]\varphi'(r) \quad , \quad (4)$$

式中, l 为步长系数, θ 为人为设定的目标相位方向。式 (4) 揭示了该过程的物理核心——相位锁定机制: 结构更新的方向和幅度取决于当前相位 $\varphi(r)$ 与目标参数 θ 的差值。

考虑一次微小扰动, 目标点处相位更新为:

$$\varphi(r_2) = \varphi(r_1) + lA[\varphi'(r_1)]^2 \cdot \sin[\theta - \varphi(r_1)] \quad , \quad (5)$$

当 $\varphi(r_1) > \theta$ 时, 相位减小 $\varphi(r_2) < \varphi(r_1)$, $\varphi(r_2)$ 向 θ 靠近, 反之亦然, 如图 1(b) 所示。这一过程构成了一个负反馈闭环, 使得在迭代过程中, 单元在目标点产生的电场相位被约束并收敛到 θ 。而当 $\varphi(r_1) = \theta$ 时, 半径增量 $\Delta r = 0$, 即迭代收敛。

需要指出的是, 当采用其他材料、尺寸参数或工作波长时, 上述关于目标点电场振幅 $A(r)$ 为常量的假设可能不再成立。此时, 若仍沿用式 (4) 所示的步长更新方式, 则迭代收敛后单元在目标点处的电场相位将偏离目标相位 θ 。该偏离量取决于振幅的变化程度 $A'(r)$ (推导细节见 S3)。此时可以加入适当的调整项 $\Delta\theta$, 适度补偿 $A'(r)$ 的影响。

上述推导均基于伴随仿真中电偶极子源的相

位设置为 0 的前提。当伴随源相位不为零时, 式 (1) 中的梯度将整体引入相位偏移。若记 $\mathbf{E}'_0(r)$ 为 $\alpha = 0$ 时的梯度, 则一般相位下的梯度可写成:

$$\mathbf{E}'_{\alpha}(r) = \mathbf{E}'_0(r) \cdot e^{i\alpha} = A e^{i[\varphi(r)+\alpha]} \cdot i\varphi'(r) \quad , \quad (6)$$

对应的结构更新步长由式 (3) 导出为:

$$\Delta r_{\alpha} = lA \sin[(\theta - \alpha) - \varphi(r)]\varphi'(r) \quad , \quad (7)$$

可见, 伴随源的相位 α 等价于对收敛目标相位的平移, 使得有效的收敛目标由 θ 变为 $(\theta - \alpha)$ 。这意味着, 我们不仅可以设定静态目标, 还可以通过迭代更新 α (记作变相位伴随源策略) 来改变迭代优化的收敛行为, 甚至加速优化过程。

前述推导表明, 结构更新的目标相位参数 θ 决定了单元在目标点 (即伴随源位置) 处的电场相位收敛方向。从单元表面到目标点的相位积累完全由几何光程决定, 即:

$$\beta = \theta - k \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} \quad , \quad (8)$$

其中, $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ 为目标点相对单元的坐标, k 为波矢大小, β 为单元表面出射电场的相位。那么参数 θ 对目标点相位的调控, 实际上等价于对单元表面相位的调控。更进一步, 这种调控方法与偶极子伴随源的位置无关: 给定 β , 任意改变伴随源的位置, 总可以调整 θ 以保证 β 不变。这意味着, 偶极子伴随源在伴随优化中, 仅充当计算梯度的载体, 不承担实际的目标场功能, 真正的优化设计对象是单元表面的电磁响应。伴随源位置的高度自由赋予了压缩仿真资源消耗, 提高优化效率的可能: 总可以使用近距离的偶极子伴随源实现所需的相位调控。

不同轮次间, 式 (2) 的形式或有不同 (与电磁环境有关), 但式 (4) 所代表的相位更新方向是始终成立的。这允许伴随优化方法在复杂电磁环境下, 精确地调控单元的相位延迟量, 而不是基于周期性分布假设做近似计算。

2.2 阵列级波前调控的通用设计方法

前述分析表明, 通过设定局部目标参数 θ , 我们能够将任意单元的透射相位约束到指定数值。将这一相位调控机制推广至超构表面整体阵列, 即可构建出面向任意波前调控的通用伴随优化方法。

在阵列设计中, 每个单元 (坐标 x, y) 的结构更

新是独立的, 均遵循式 (4)。各单元的目标参数 θ 不必是全局统一的常数, 而是根据任务需求构建的空间分布函数 $\theta(x, y)$ 。假设伴随仿真中偶极子源位于 $(0, 0, z_{adj})$, 式 (8) 可拓展为:

$$\beta(x, y) = \theta(x, y) - k \sqrt{x^2 + y^2 + z_{adj}^2}, \quad (9)$$

其中 $\beta(x, y)$ 即为器件表面的出射相位分布。式 (9) 是本优化方法的核心方程, 它建立了物理目标 $\beta(x, y)$ 、算法参数 $\theta(x, y)$ 与仿真设置 (伴随源位置) 之间的定量联系。基于此, 我们可以针对不同的波前调控任务, 通过反解 $\theta(x, y)$ 来指导逆向优化过程。图 2 给出了通用伴随优化的整体流程: 首先由目标 $\beta(x, y)$ 计算得到 $\theta(x, y)$, 并给定初始超表面结构阵列; 随后每一轮迭代执行一次正向与伴随仿真以获得复梯度 $E'_{tar}(r)$, 再按式 (4) 将复梯度映射为几何更新步长 Δr , 并据此更新各单元结构参数。通常当 Δr 低于预设阈值时, 可认为结构演化已趋于稳定并终止迭代; 必要时可参考设计目标的变化情况辅助判断, 以提高收敛判定的稳健性。

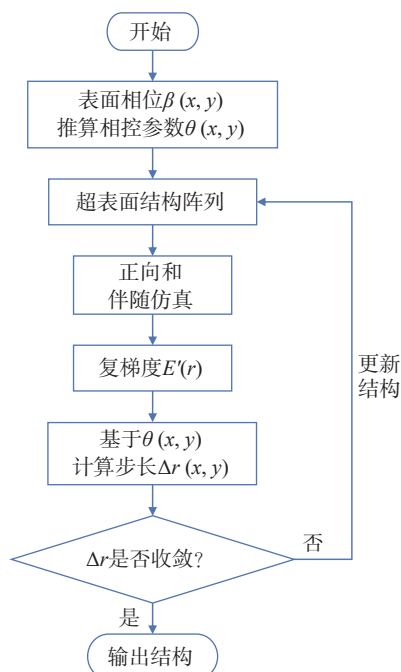


图 2 伴随优化流程图。其中相位参数 $\theta(x, y)$ 的推算除依赖 $\beta(x, y)$ 外, 通常还需预先确定伴随仿真中偶极子源的位置, 见式 (9)。

Fig. 2 Adjoint optimization flowchart. The parameter $\theta(x, y)$ is determined from $\beta(x, y)$ once the dipole-source position in the adjoint simulation is specified; see Eq. (9).

2.2.1 聚焦超透镜设计 (θ 为常数)

聚焦是本方法最直接的应用形式。当所有单元共享相同的收敛目标, 即 $\theta(x, y) = C$ (常数) 时, 代入式 (9) 可知, 器件表面的出射相位将自动形成如下分布:

$$\beta(x, y) = C - \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{x^2 + y^2 + z_{adj}^2}, \quad (10)$$

这正是焦距 $f = z_{adj}$ 的理想双曲相位分布, 偶极源伴随源所在位置即为焦点。相同的收敛目标 θ 意味着所有单元在焦点处的电场相位将趋于一致 (同相叠加), 从而自发实现聚焦。这种情况下, 优化过程等价于最大化目标焦点处的电场强度。

2.2.2 任意波前整形设计 (θ 为空间函数)

波前整形实际上是对器件表面相位分布 $\beta(x, y)$ 的精确重构。无论是光束偏折、多焦点聚焦还是全息成像, 其功能需求均可首先转化为特定的器件表面相位分布 $\beta(x, y)$ 。然后根据式 (9) 即可反解出用于指导优化的空间参数分布 $\theta(x, y)$ 。本节将以上述三类典型器件为例进行说明。

超光栅旨在将正入射的平面波调制为倾斜出射的平面波。假设入射波沿 z 轴传播, 出射波矢仅在 xz 平面内偏转, 则器件表面的相位分布应满足:

$$\beta(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda} \sin(\psi)x, \quad (11)$$

其中, ψ 为入射波矢与出射波矢之间的夹角。当 $\psi > 0$ 时, 器件表面沿 x 轴呈现线性相位延迟, 相位沿 $+x$ 方向递增, 出射波矢顺时针偏折; 若 $\psi < 0$, 则发生逆时针偏转。

双焦点透镜的功能是将入射平面波同时聚焦至空间中两个不同的位置。双焦点设计的关键在于同时构建两个汇聚球面波, 通过将这两个球面波反向传播至阵列表面并进行矢量叠加, 即可获得双焦点聚焦所需的复振幅分布, 进而提取出用于伴随优化的器件表面相位分布 $\beta(x, y)$ 。

全息超表面的目标相位分布构建相对复杂, 通常需借助计算全息 (Computer Generated Holography, CGH) 算法。对于简单的全息图案, 可采用一种更为直接的方法: 通过仿真计算目标图案传播至器件表面的衍射场, 利用光传播的可逆性, 直接提取共轭电场的相位作为伴随优化的目标相位分布 $\beta(x, y)$ 。这一方法直观、灵活, 并便

于定量评估成像质量。

与传统伴随优化方法相比,式(9)给出的统一相位构造模型在形式上解耦了目标场与伴随源之间的依赖关系。无论是聚焦、偏折还是全息成像,伴随仿真均只需保持同一电偶极子源,而目标波前的差异完全通过空间调制的 $\theta(x,y)$ 体现。这种分工方式显著降低了设计流程的复杂性,避免了为满足特定目标场而构造复杂伴随激励的过程。更为重要的是,在远距离或大角度离轴目标设计中,传统方法需将伴随源放置于真实目标位置,导致仿真计算域过大,不仅降低效率也容易积累传播误差。而在本模型中,伴随源可自由移动至任意近场位置,通过 $\theta(x,y)$ 实现等效补偿,大幅降低了数值开销。由此,本方法有效兼顾了功能多样性与计算效率,该解耦机制在短波长(如紫外)下可有效缓解高分辨率全波仿真的计算负担,为紫外探测器件优化提供可扩展路径。

2.3 变相位偶极子伴随源:自适应相位调控

前述章节确立了相位调控的通用设计方法,其中偶极子伴随源的相位 α 为一个静态常数。而现有的伴随优化研究中,随迭代过程动态调整伴随源也是一种常用的策略^[37]。参考该策略,本节将聚焦问题作为通用方法的一个特例与深化,探讨一种基于变相位偶极子伴随源的优化策略。该策略旨在利用焦点的实时反馈信息,通过动态调整伴随源的相位,建立一种自适应的相位调控机制。

具体而言,在第 n 次迭代中,偶极子伴随源的相位 $\alpha^{(n)}$ 设定为当前代正向仿真中目标焦点相位 $\varphi_{\text{fwd}}^{(n)}$ 的相反数:

$$\alpha^{(n)} = -\varphi_{\text{fwd}}^{(n)}, \quad (12)$$

根据式(6),伴随源产生的梯度场的相位发生了平移。若采用梯度实部进行更新 $\Delta r = \text{Re}\{E'(r)\}$ (对应 $\theta = 0$),则阵列在焦点的相位收敛目标变为:

$$\theta - \alpha^{(n)} = \varphi_{\text{fwd}}^{(n)}, \quad (13)$$

该式揭示了变相位策略的物理本质:将优化的收敛目标从一个外部预设的绝对相位,转化为系统当前的内部状态。即第 n 代的相位收敛目标是当前正向仿真中目标焦点的相位。

超表面单元阵列中每一个圆柱单元对焦点处电场均有贡献:

$$A_{\text{fwd}} e^{i\varphi_{\text{fwd}}} = \sum_{j=1}^k A_j e^{i\varphi_j}, \quad (14)$$

式中, A_j 和 φ_j 分布为第 j 个圆柱在焦点处电场的振幅和相位, k 为圆柱单元的总数。可见,焦点相位 φ_{fwd} 实际上是相位序列 $\{\varphi_j\}$ 的振幅加权平均值。因此,该策略不再强迫所有单元向某个固定值靠拢,而是驱动它们向当前的加权平均相位看齐:相位小于均值的单元会被推高,而相位大于均值的单元会被压低。虽然不同迭代步数间 φ_{fwd} 会发生变化,但整体上相位分布 $\{\varphi_j\}$ 会从相对无序的状态逐渐趋向于一致,即相位分布列 $\{\varphi_j\}$ 的方差逐代减小。当相位分布列足够集中时,目标焦点处即达成了同相叠加,从而实现聚焦。图3描绘了这种自适应相位锁定的优化过程。与恒定相位策略中单元向固定目标(图3(a),红色虚线)的被动对齐不同,变相位策略驱动单元向系统的实时均值(图3(b),蓝色虚线)收敛。通常情况下,相位分布 $\{\varphi_j\}$ 与其自身均值的偏差要小于其与某个特定固定值的偏差,因此,变相位策略在迭代初期的收敛速度相较恒定相位策略更快,但在后期由于收敛目标始终变动,收敛速度会有所减缓。

需要注意的是,变相位策略引入了动态目标,这也使得算法对梯度更新方向的选择变得非常敏感。若采用梯度虚部进行更新 $\Delta r = \text{Im}\{E'(r)\}$ (对应 $\theta = 90^\circ$),此时相位收敛目标变为:

$$\theta - \alpha^{(n)} = 90^\circ + \varphi_{\text{fwd}}^{(n)}, \quad (15)$$

此时,相位收敛目标不再是当前相位分布列 $\{\varphi_j\}$ 的加权平均相位,而是始终领先于均值 90° 。这意味着在每一次迭代中,相位分布列中的绝大部分单元都处于落后于收敛目标的状态。为了缩小这一差距,优化算法会驱动相位分布列 $\{\varphi_j\}$ 整体增大;然而,由于收敛目标绑定于均值, $\{\varphi_j\}$ 的整体增长必然导致其加权均值 φ_{fwd} 同步升高,进而使得下一代的收敛目标继续前移。这种机制导致相位分布列持续趋近于一个动态目标的情况,最终表现为目标焦点相位 φ_{fwd} 沿逆时针方向持续旋转,相位分布列 $\{\varphi_j\}$ 也难以达到聚焦所需的稳定均匀的状态。

为了获得正确的更新方向,应确保每一代的相位收敛目标取为当前相位分布的平均相位,在使用通用形式计算半径更新步长时,偶极子伴随

源的相位应动态设置为:

$$\alpha^{(n)} = \theta - \varphi_{\text{fwd}}^{(n)}, \quad (16)$$

参数 $\theta = 0$ 时即对应式 (12) 的情况; 若仅使用梯度的虚部进行优化, 则每一代偶极子源的相位应设置为 $(90^\circ - \varphi_{\text{fwd}}^{(n)})$ 。

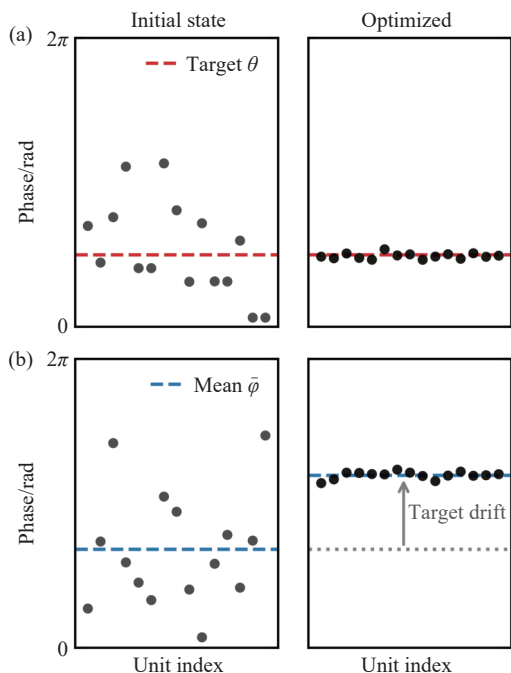


图3 两种伴随源策略下相位序列的收敛对比。(a) 恒定相位策略: 单元相位(黑点)向固定目标(红色虚线)对齐。(b) 变相位策略: 单元相位向自身均值(蓝色虚线)收敛。

Fig. 3 Comparison of convergence mechanisms under two different adjoint-source strategies. (a) Constant phase strategy: unit phases (black dots) align with a fixed target (red dashed line). (b) Variable phase strategy: unit phases converge toward their own mean (blue dashed line).

值得注意的是, 这种变相位策略依赖于单一焦点相位的实时反馈, 因此目前主要适用于聚焦类设计。对于全息等具有复杂空间相位分布的目标, 因难以定义单一的全局平均相位, 构建有效的动态反馈仍具挑战。尽管如此, 针对超透镜场景, 该策略提供了一种在不增加计算成本前提下, 提升收敛效率的有力工具。

3 基于超透镜的相位调控理论验证

3.1 静态相位锁定机制的验证

第 2.1 节建立了伴随优化中步长计算参数

θ 与伴随源偶极子相位 α 对目标焦点相位 φ 的定量控制关系。对于聚焦超透镜而言, 其焦点相位本质上是全阵列单元相位的相干叠加结果。因此, 通过观测焦点相位是否如理论预测般收敛至 $\theta - \alpha$, 即可直观地验证相位锁定机制的有效性。为此, 我们基于相同的初始结构, 分别开展了两组超透镜的设计验证。两组设计的目标参数均为焦距 $f = 8 \mu\text{m}$, 数值孔径 $\text{NA} = 0.35$, 但焦点相位的调控方法有所不同, 分别对应 $\varphi \sim \theta$ (固定 $\alpha = 0$) 和 $\varphi \sim \alpha$ (固定 $\theta = 0$) 两种控制情形。简化起见, 这些超透镜由一维排布的纳米圆柱阵列构成。

图 4 展示了焦点相位的迭代过程与收敛结果。图 4(a) 和 (c) 分别描绘了在不同 θ 和 α 参数设置下, 焦点电场相位随迭代轮次的演化过程。结果显示, 所有设计均表现出良好的收敛特性, 焦点相位在最初 10 次迭代内迅速逼近目标值, 并在约 30 次迭代内达到稳定收敛状态。图 4(b) 与 (d) 则定量展示了收敛后的焦点相位与设计参数(目标相位及伴随源相位)的依赖关系。仿真结果理论预测值(即 $\theta - \alpha$) 高度吻合, 最大偏差小于 3° 。该偏差主要源于数值仿真中的网格离散误差: 网格越细, 梯度计算及波前传播的相位累积越准确, 但计算资源消耗也随之急剧增加。当前网格设置已在仿真精度与计算效率之间取得了较好的平衡。

上述结果验证了静态相位锁定机制在相位调控精度上的有效性。进一步地, 为定量评估本文方法在计算资源方面的优势, 我们以一维超透镜为例 ($f = 8 \mu\text{m}$, $\text{NA} = 0.35$), 对比了传统伴随源方案^[37] (源位于 $z = f$) 与本文近距离伴随源方案 ($z = 4 \mu\text{m}$)。鉴于本文方法具备对焦点相位的显式调控能力, 我们选取了 $\xi = \{0^\circ, 90^\circ, 180^\circ\}$ 三个典型目标焦点相位作为代表性设置。两种方案均采用各自稳定的步长系数设置, 并以半径最大更新量小于 0.2 nm 为终止准则。表 1 汇总了两种方案在相同聚焦目标下的计算资源消耗、收敛行为以及优化效果(相关仿真说明见 S4)。结果表明, 两者收敛速度相近, 而本文方案可通过压缩计算域显著降低了仿真耗时, 约 30%, 同时在部分目标相位 θ 下, 获得更高的目标焦点强度与更小的焦点位置偏差。需要说明的是, 由于梯度构造中采用了近似处理(忽略振幅项导数贡献), 不同目标相位参数 ξ 会对应不同的结构更新路径, 使得目标点

强度与焦点位置偏差等指标呈现一定的 ξ 敏感性。这种敏感性代表了一种可调的设计自由度,

使得在同一设计目标下能够探索更丰富的性能-误差折中解。

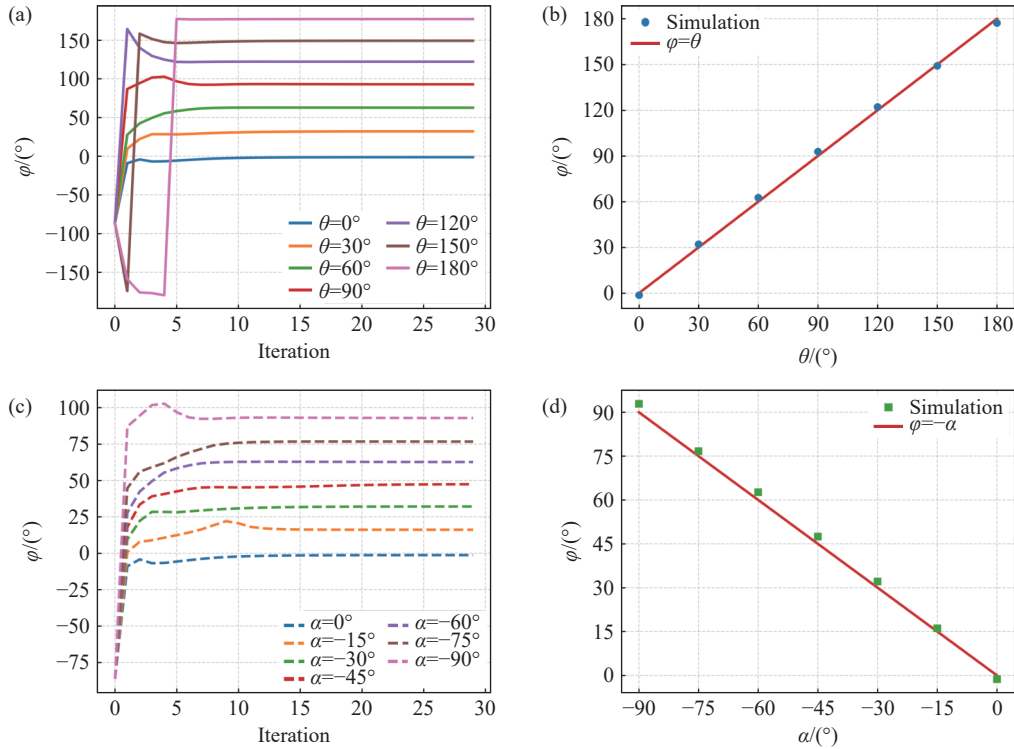


图 4 焦点相位在不同参数设置下的迭代与收敛情况。(a)(b) 为 $\alpha = 0$ 条件下的 θ 扫描; (c)(d) 为 $\theta = 0$ 条件下的 α 扫描。相位均以 $(-180^\circ, 180^\circ]$ 包裹。

Fig. 4 Iteration and convergence of the focal phase under different parameter settings. (a, b) θ sweeps with $\alpha = 0$; (c, d) α sweeps with $\theta = 0$. All phase values are wrapped to $(-180^\circ, 180^\circ]$.

表 1 传统与本文伴随源构造的定量对比

Tab. 1 Quantitative comparison of conventional and proposed adjoint-source constructions

指标	传统方案	本文方案
FDTD Yee 网格节点总数	3.76 MNodes	2.62 MNodes (模型相同)
单轮仿真时间 (正向+伴随)	174.4 s	121.5 s (典型值, $\xi=0^\circ$)
稳定所需代数	18	19 (典型值, $\xi=0^\circ$)
优化后目标焦点相位	77.2°	2.8°, ($\xi=0^\circ$) 90.9°, ($\xi=90^\circ$) 178.2°, ($\xi=180^\circ$)
优化后目标焦点强度 (归一化)	1	1.13, ($\xi=0^\circ$) 1.29, ($\xi=90^\circ$) 0.95, ($\xi=180^\circ$)
优化后实际焦点位置误差	0.52 μm	0.35 μm , ($\xi=0^\circ$) 0.30 μm , ($\xi=90^\circ$) 0.68 μm , ($\xi=180^\circ$)

为进一步验证相位调控理论的普适性, 我们设计了一个由二维纳米圆柱阵列组成的超透镜, 其焦距和数值孔径与一维设计相同, 目标焦点相位设定为 0 (即 $\alpha = 0, \theta = 0$)。图 5 展示了该器件

的聚焦效果。图 5(a) 和 (c) 分别给出了光轴截面 (xz 平面) 及焦平面 (xy 平面) 内的光强分布, 图 5(d) 展示了焦点处光强分布沿 x 轴的归一化曲线。由图可知, 该器件实现了高质量的聚焦效果, 其焦斑半高全宽 (FWHM) 为 520 nm , 非常接近衍射极限 ($\frac{\lambda}{2\text{NA}} = 518.9 \text{ nm}$)。在能量效率方面, 器件表现优异: 绝对效率达到 69.6% (定义为焦斑 $3 \times \text{FWHM}$ 范围内的能量与入射总能量之比^[38]), 衍射

效率高达 83.9% (焦斑能量与焦平面总能量之比)。作为对比, 根据单元库方法构建了相同设计目标的二维超透镜: 同一仿真设置下, 焦斑半高全宽为 528 nm , 绝对效率为 60.9% 。这一结果表明, 本文方法优于基于单元库的传统方案: 改善聚焦质量并提高效率约 14.3% 。

需要注意的是, 图 5(a) 中实际焦点位置相较于目标位置出现约 $0.19 \mu\text{m}$ 的 z 向轻微偏移。这一

误差主要来源于二维阵列对连续双曲相位分布的离散化采样。通过增大透镜口径或提高单元排布密度, 可有效抑制该误差。图 5(b) 进一步展示了目标焦点附近电场实部的分布情况, 可见焦点处电场实部恰好处于最大值状态, 对应相位约为

0° (实际偏差仅 0.26°), 非常契合设计目标。相较于一维单元阵列, 二维阵列在 y 方向上能够更完整地构建双曲相位分布, 并在伴随优化过程中更充分地考虑单元间的近场耦合效应, 从而具有更高的相位调控精度。

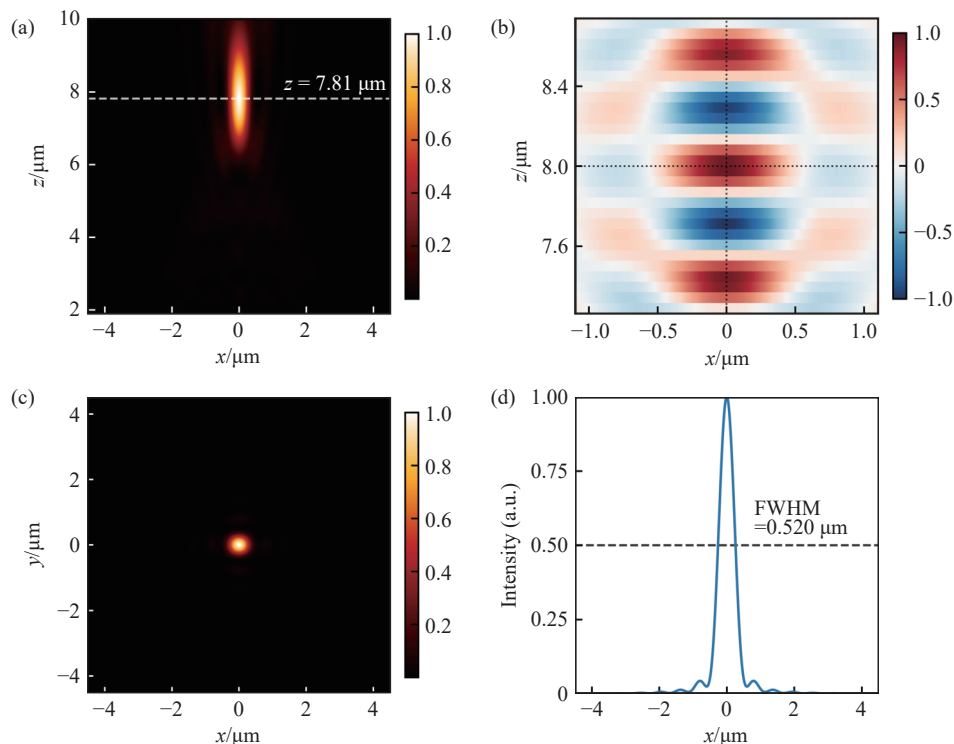


图 5 (a) xz 平面中的归一化光强分布, 虚线标识实际焦点的位置。(b) 目标焦点附近的电场归一化实部分布。(c) xy 平面中的归一化光强分布。(d) 焦平面内焦点处沿 x 方向的归一化光强分布。

Fig. 5 (a) Normalized intensity distribution in the xz -plane, with the dashed line indicating actual focal position. (b) Normalized real part of the electric field in the vicinity of the target focus. (c) Normalized intensity distribution in the xy -plane. (d) Normalized intensity profile along the x direction in the focal plane.

上述一维与二维设计结果充分验证了第 2 章提出的相位调控理论: 阵列各单元在目标焦点处的同相叠加是实现聚焦的核心机制, 而参数 θ 与 α 则是精确操控这一过程的关键作用量。

3.2 动态自适应反馈机制的验证

为了验证第 2.3 节提出的变相位伴随源策略, 我们对同一规格的超透镜 (焦距 $8\mu\text{m}$, $\text{NA} = 0.35$, 一维阵列结构) 进行了数值优化实验。变相位伴随源在每一代迭代中依据式 (12) 动态刷新偶极子相位。实验中对比了两种半径更新策略:

1. 实部梯度更新: $\Delta r = \text{Re}\{E'(r)\}$, 对应 $\theta = 0$;
2. 虚部梯度更新: $\Delta r = \text{Im}\{E'(r)\}$, 对应 $\theta = 90^\circ$ 。

图 6(a) 和 6(b) 分别展示了这两种策略下焦

点电场强度与相位的迭代历程, 结果呈现出截然不同的演化特征。在采用梯度实部更新时 (实线), 焦点电场强度稳步提升, 约 20 次迭代后, 振幅与相位同步趋于稳定。这表明相位分布列 $\{\varphi_j\}$ 成功收敛至同相状态, 实现了预期的聚焦功能。而在采用梯度虚部更新时 (虚线), 焦点电场并未表现出持续增强的趋势, 部分迭代中甚至出现性能回退。更为显著的是, 焦点相位在 $-\pi$ 至 π 之间呈现出持续的周期性旋转。这表明相位分布列 $\{\varphi_j\}$ 未能趋于稳定, 不满足聚焦同相叠加的条件。

上述结果与第 2.3 节的理论分析完全一致。在式 (12) 对应的更新策略下, 当 $\theta = 0$ (取梯度实部) 时, 收敛目标被锚定为当前相位分布的加权均值。由于目标位于群体中心, 迭代过程驱动各单

元相位 $\{\varphi_j\}$ 向自身均值靠拢, 最终实现稳定的同相叠加。反之, 当 $\theta = 90^\circ$ (取梯度虚部) 时, 每一代的收敛目标被设定为当前平均相位 $+90^\circ$ 的相位偏置目标。这种机制导致收敛目标始终领先于群体均值, 迫使相位分布列始终处于趋近一个不断前移的动态目标的状态。这种无法闭环的追逐机制, 最终在宏观上表现为焦点相位的持续旋转, 导致器件无法通过迭代实现聚焦所需的同相叠加的状态。

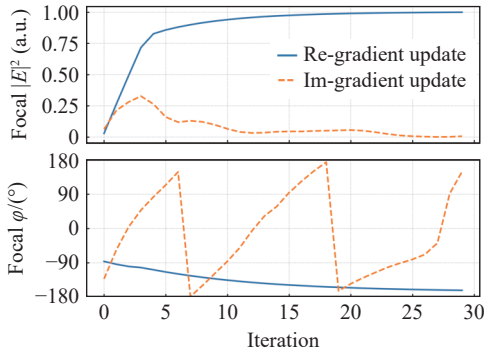


图6 不同更新策略的优化对比。(a) 归一化焦点电场强度, 以蓝线最大值为基准; (b) 焦点电场相位, 范围为 $(-180^\circ, 180^\circ]$ 。蓝色实线和橙色虚线分别对应实部与虚部梯度更新。

Fig. 6 Comparison of optimization strategies. (a) Normalized focal electric field intensity, referenced to the maximum value of the blue solid line. (b) Focal electric field phase, wrapped to $(-180^\circ, 180^\circ]$. The blue solid and orange dashed lines indicate gradient updates based on the real and imaginary parts, respectively.

4 基于空间相位映射 $\theta(x,y)$ 的通用波前调控实现

第 2.2 节建立了基于空间参数 $\theta(x,y)$ 的通用波前调控框架: 即通过反解目标波前所需的相位分布, 将其转化为空间上逐点变化的收敛目标 $\theta(x,y)$, 即可在统一的单偶极子伴随源模型下实现任意波前调控。为了验证该框架在处理复杂波前时的普适性与有效性, 本章设计并仿真了三类典型的非聚焦或复杂聚焦器件: 超光栅 (线性相位)、双焦点透镜 (多点相位) 及全息超表面 (复杂相位)。值得说明的是, 由于上述器件的目标场相位分布复杂, 难以像单焦点透镜那样提取单一的

相位反馈信号, 因此本章的设计均采用恒定相位伴随源策略。

超光栅的设计基于式 (11) 中的线性相位梯度, 其中偏折角设定为 $\psi = 30^\circ$ 。图 7(a) 显示了沿 z 轴入射的平面波经器件后向 x 方向偏转的场分布, 图 7(b) 给出了出射场的频谱分析。仿真结果显示出射波发生了 30.34° 的偏折, 偏折角相对误差仅为 1.1%, 与目标偏折角 ψ 高度一致。该误差部分归因于数值离散与角度提取过程中的分辨率限制。超光栅绝对衍射效率 (+1 级衍射能量与入射能量之比^[31]) 达到 72.4%, 表明入射能量主要集中在目标单一衍射级中, 有力验证了上述波前调控方法构建线性相位梯度的准确性。

在双焦点聚焦透镜的设计中, 目标焦点位于 $z=4.8 \mu\text{m}$ 的平面内, 左右对称分布, 间距为 $6 \mu\text{m}$ 。器件表面的目标相位分布 $\beta(x,y)$ 由两束反向传播的球面波干涉获得。图 7(c) 和 (d) 分别展示了焦点所在 xz 平面和 xy 平面内的光强分布, 两者均呈对称分布。实际焦点 (光强最大点) 位于 $z=4.53 \mu\text{m}$ 的平面, 焦点间距 $5.9 \mu\text{m}$; 横向间距相对误差仅为 1.7%, 精度较高; 纵向焦距缩短约 $0.27 \mu\text{m}$ (5.6%)。上述偏差主要源于叠加得到的 $\beta(x,y)$ 在局部区域变化较为剧烈, 离散阵列的相位采样分辨率有限, 会引入残余波前误差, 降低了波前重构的精度。图 7(d) 中的焦点轮廓线标示了电场强度下降至峰值 10% 的区域。能量分析表明, 两个聚焦斑内的能量占焦平面总能量的 67.2%, 占器件总透射能量的 60.5%。上述结果证明该伴随设计方法能够准确调控复数波场的叠加, 在保证焦点位置精度的同时实现了较高的能量利用率。

最后, 为验证该方法对任意复杂波前的调控能力, 设计了一个能够重建中空三角形图案的全息超表面。全息设计的目标图案被设定为平面波穿过中空三角形光阑后的近场透射场。随后, 我们将该透射场传播 $8.0 \mu\text{m}$ 至超表面所在平面, 并提取该处衍射场的相位作为器件表面的相位分布 $\beta(x,y)$ 。图 7(e) 给出了透射场 (目标图案) 的光强分布, 图 7(f) 则展示了全息超表面的重建结果。对比可见, 重建图案与目标图案在几何形貌上高度相似, 清晰地还原了中空三角形的主要特征, 目标图案与重建图案的强度分布之间的皮尔逊相关

系数 (Pearson Correlation Coefficient, PCC) 为 0.895, 表明两者具有较高一致性。提高表面相位 $\beta(x,y)$ 的采样精度有助于增强重建效果。落在三

角形光阑区域内的能量约占该观察平面总能量的 60.3%。图像对比度和能量聚焦效果均较理想, 充分说明了该方法在复杂全息术中的应用潜力。

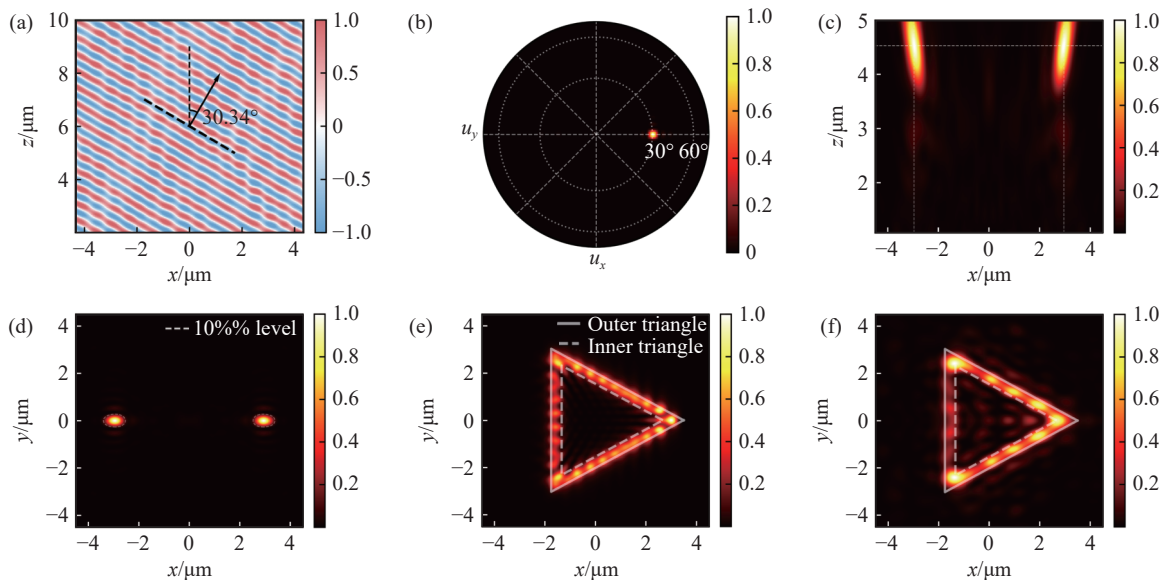


图 7 超光栅器件: (a) 波前偏折分布, 箭头示意偏折方向; (b) 出射场频谱分布, 其中 u_x, u_y 为方向余弦。双焦点器件: (c) xz 平面归一化光强分布, 虚线交点标示仿真得到的实际最大光强位置; (d) 焦平面(xy)的归一化光强分布。全息器件: (e) 目标中空三角形图案的光强分布, 三角形外缘与孔径边界分别以实线和虚线表示; (f) 器件重建的全息图案。

Fig. 7 Metagrating: (a) Deflected wavefront distribution, with the arrow indicating the deflection direction; (b) spatial spectrum of the transmitted field, where u_x and u_y denote the directional cosines. Bifocal lens: (c) Normalized intensity distribution in the xz -plane, where the intersection of the dashed lines marks the simulated position of maximum intensity; (d) normalized intensity distribution on the focal (xy) plane. Holographic metasurface: (e) Target intensity pattern of the hollow triangle, with its outer boundary and inner aperture indicated by solid and dashed lines, respectively; (f) reconstructed holographic pattern.

综上所述, 上述设计案例有力证实了: 仅需维持单一形式的电偶极子伴随源, 即可通过统一的伴随优化流程实现截然不同的波前调控目标。这种通用的逆向设计架构避免了针对特定任务调整光源模型或边界条件的繁琐过程, 不仅展示了该方法在多样化器件设计中的普适性, 也从实践层面充分验证了基于 $\theta(x,y)$ 的相位调控理论的正确性。

5 结 论

本文提出了一种基于相位收敛驱动的超构器件通用逆向设计框架, 并系统验证了其在多样化波前调控任务中的有效性。该方法创新性地采用单一形式的电偶极子作为通用伴随源, 通过构建复数梯度与几何更新步长之间的相位锁定映射机制, 实现了对器件表面局部相位的精准操控。理论推导表明, 步长计算参数 $\theta(x,y)$ 与伴随源相位共

同决定了梯度的收敛方向, 是构建目标相位分布的关键变量。在超透镜的数值实验中, 本文证实了该理论的正确性, 表明该机制能够有效引导结构演化, 实现高效的同相聚焦与精确的相位锁定。基于这一方法, 本文进一步展示了其在复杂波前设计中的普适性: 在保持伴随源和仿真设置不变的前提下, 仅需根据目标场反解并重构空间参数 $\theta(x,y)$, 即可灵活实现从线性梯度(超光栅)、多重球面波(双焦点透镜)到任意复杂全息图的相位分布。这一特性实现了伴随源形式与设计目标的解耦, 显著降低了复杂超表面设计的任务难度与计算成本。

综上所述, 本文提出的基于相位收敛驱动的优化方法在算法架构的简洁性、计算效率及通用性方面具有显著优势。其统一的理论框架打破了传统伴随优化中逐任务定制的伴随源设置限制, 为高效、通用的超表面逆向设计提供了一条可

行的新途径。未来工作可进一步结合自由形式（Free-form）拓扑优化与深度学习策略，进一步探索该方法在紫外探测、光信息处理等复杂场景下的工程化应用潜力。

参考文献:

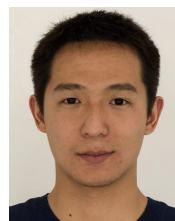
- [1] YU N F, CAPASSO F. Flat optics with designer metasurfaces[J]. *Nature Materials*, 2014, 13(2): 139-150.
- [2] PERTSCH T, XIAO SH M, MAJUMDAR A, *et al.*. Optical metasurfaces: fundamentals and applications[J]. *Photonics Research*, 2023, 11(5): OMFA1-OMFA3.
- [3] QIU Y, YAN D X, FENG Q Y, *et al.*. Vanadium dioxide-assisted switchable multifunctional metamaterial structure[J]. *Optics Express*, 2022, 30(15): 26544-26556.
- [4] KILDISHEV A V, BOLTASSEVA A, SHALAEV V M. Planar photonics with metasurfaces[J]. *Science*, 2013, 339(6125): 1232009.
- [5] HU ZH K, GU M N, TIAN Y, *et al.*. Review for optical metalens based on metasurfaces: fabrication and applications[J]. *Microsystems & Nanoengineering*, 2025, 11(1): 189.
- [6] XU M X, YAN D X, WANG Y, *et al.*. Graphene-assisted dual-frequency third harmonic generation in nonlinear metamaterials for high-efficiency on-chip terahertz integration[J]. *Frontiers of Physics*, 2026, 21(4): 044201.
- [7] CHEN W T, ZHU A Y, SANJEEV V, *et al.*. A broadband achromatic metalens for focusing and imaging in the visible[J]. *Nature Nanotechnology*, 2018, 13(3): 220-226.
- [8] KIM J, KIM Y, KIM W, *et al.*. 8" wafer-scale, centimeter-sized, high-efficiency metalenses in the ultraviolet[J]. *Materials Today*, 2024, 73: 9-15.
- [9] ZENG Y H, ZHONG H P, LONG ZH W, *et al.*. From performance to structure: a comprehensive survey of advanced metasurface design for next-generation imaging[J]. *npj Nanophotonics*, 2025, 2(1): 39.
- [10] KAMALI S M, ARBABI E, KWON H, *et al.*. Metasurface-generated complex 3-dimensional optical fields for interference lithography[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2019, 116(43): 21379-21384.
- [11] KAGIAS M, LEE S, FRIEDMAN A C, *et al.*. Metasurface-enabled holographic lithography for impact-absorbing nanoarchitected sheets[J]. *Advanced Materials*, 2023, 35(13): 2209153.
- [12] ZHAO J, ZHANG L, LIANG H W. Advances in metasurface - based terahertz sensing[J]. *Advanced Physics Research*, 2024, 3(12): 2400077.
- [13] IWANAGA M, HU Q, TANG Y H. Metasurface biosensors: status and prospects[J]. *Applied Physics Reviews*, 2025, 12(2): 021305.
- [14] CAO Y J, WU CH J, LI X J, *et al.*. A deep learning-surrogate optimization strategy for the design of two-dimensional terahertz metamaterial absorbers[J]. *Infrared Physics & Technology*, 2026, 153: 106350.
- [15] COTRUFO M, ESFAHANI S, KOROBKIN D, *et al.*. Temporal signal processing with nonlocal optical metasurfaces[J]. *npj Nanophotonics*, 2024, 1(1): 39.
- [16] ZHOU H Q, ZHAO CH L, HE C, *et al.*. Optical computing metasurfaces: applications and advances[J]. *Nanophotonics*, 2024, 13(4): 419-441.
- [17] LI L L, ZHAO H T, LIU CH, *et al.*. Intelligent metasurfaces: control, communication and computing[J]. *eLight*, 2022, 2(1): 7.
- [18] ARBABI A, HORIE Y, BAGHERI M, *et al.*. Dielectric metasurfaces for complete control of phase and polarization with subwavelength spatial resolution and high transmission[J]. *Nature nanotechnology*, 2015, 10(11): 937-943.
- [19] PAN M Y, FU Y F, ZHENG M J, *et al.*. Dielectric metalens for miniaturized imaging systems: progress and challenges[J]. *Light: Science & Applications*, 2022, 11(1): 195.
- [20] ISNARD E, HÉRON S, LANTERI S, *et al.*. Advancing wavefront shaping with resonant nonlocal metasurfaces: beyond the limitations of lookup tables[J]. *Scientific Reports*, 2024, 14(1): 1555.
- [21] CHOI M, PARK J, SHIN J, *et al.*. Realization of high-performance optical metasurfaces over a large area: a review from a design perspective[J]. *npj Nanophotonics*, 2024, 1(1): 31.
- [22] ZHOU Y L, LIU Y K, LIANG H W, *et al.*. Efficient inverse design of large-scale, ultrahigh-numerical-aperture metalens[J]. *Photonics*, 2024, 11(10): 940.

- [23] LI ZH Y, PESTOURIE R, LIN Z, *et al.*. Empowering metasurfaces with inverse design: principles and applications[J]. *ACS Photonics*, 2022, 9(7): 2178-2192.
- [24] ELSAWY M M R, LANTERI S, DUVIGNEAU R, *et al.*. Numerical optimization methods for metasurfaces[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2020, 14(10): 1900445.
- [25] KANG C, PARK C, LEE M, *et al.*. Large-scale photonic inverse design: computational challenges and breakthroughs[J]. *Nanophotonics*, 2024, 13(20): 3765-3792.
- [26] YANG G T, XIAO Q X, ZHANG ZH L, *et al.*. Exploring AI in metasurface structures with forward and inverse design[J]. *iScience*, 2025, 28(3): 111995.
- [27] PAN Z Y, PAN X M. Deep learning and adjoint method accelerated inverse design in photonics: a review[J]. *Photonics*, 2023, 10(7): 852.
- [28] ZHONG G B, XU H D, ZHANG R T, *et al.*. Highly efficient perfectly vertical grating couplers based on the adjoint optimization for O-band operation[J]. *Optics Communications*, 2025, 596: 132505.
- [29] XU H D, TIAN Y, LI Y, *et al.*. Inverse design of highly-efficient and broadband polarization beam splitter on SOI platform[J]. *Optics Communications*, 2024, 572: 130986.
- [30] SELL D, YANG J J, DOSHAY S, *et al.*. Large-angle, multifunctional metagratings based on freeform multimode geometries[J]. *Nano Letters*, 2017, 17(6): 3752-3757.
- [31] 桑迪, 徐明峰, 安强, 等. 基于拓扑优化的自由形状波分复用超光栅[J]. *物理学报*, 2022, 71(22): 224204.
SANG D, XU M F, AN Q, *et al.*. Freeform wavelength division multiplexing metagrating based on topology optimization[J]. *Acta Physica Sinica*, 2022, 71(22): 224204. (in Chinese).
- [32] DAINESE P, MARRA L, CASSARA D, *et al.*. Shape optimization for high efficiency metasurfaces: theory and implementation[J]. *Light: Science & Applications*, 2024, 13(1): 300.
- [33] ZHANG D S, LIU ZH ZH, YANG X T, *et al.*. Inverse design of multifunctional metasurface based on multipole decomposition and the adjoint method[J]. *ACS Photonics*, 2022, 9(12): 3899-3905.
- [34] MILLER O D. *Photonic design: from fundamental solar cell physics to computational inverse design*[D]. Berkeley: University of California, 2012.
- [35] MANSOUREE M, KWON H, ARBABI E, *et al.*. Multifunctional 2.5D metastructures enabled by adjoint optimization[J]. *Optica*, 2020, 7(1): 77-84.
- [36] MANSOUREE M, MCCLUNG A, SAMUDRALA S, *et al.*. Large-scale parametrized metasurface design using adjoint optimization[J]. *ACS Photonics*, 2021, 8(2): 455-463.
- [37] PHAN T, SELL D, WANG E W, *et al.*. High-efficiency, large-area, topology-optimized metasurfaces[J]. *Light: Science & Applications*, 2019, 8: 48.
- [38] PARK J S, LIM S W D, AMIRZHAN A, *et al.*. All-glass 100 mm diameter visible metalens for imaging the cosmos[J]. *ACS Nano*, 2024, 18(4): 3187-3198.

作者简介:



张 越(2001—), 男, 安徽阜阳人, 2023 年于清华大学获得学士学位, 现为中国科学院微电子研究所硕士研究生, 主要从事微纳器件的设计和紫外超构光学方面的研究。E-mail: zhangyue24@ime.ac.cn



邹承均(1990—), 男, 江西九江人, 博士, 研究员, 2017 年于阿德莱德大学获得博士学位。主要从事动态超表面、微纳器件智能设计、空间光计算器件研究等领域的研究。E-mail: zouchengjun@ime.ac.cn



吴晓斌(1979—), 男, 浙江东阳人, 博士, 研究员, 2009 年于清华大学获得博士学位。主要从事先进光刻, 精密光学检测等方面的研究。E-mail: wuxiaobin@ime.ac.cn