

基于 Fano 共振超表面的多功能传感器设计

刘海^{1,2*}, 任紫燕^{1,2}, 陈聪^{1,2}, 高鹏^{1,2}, 乔昱嘉^{1,2}, 冯越^{1,2}, 罗灏^{1,2}¹中国矿业大学地下空间智能控制教育部工程研究中心, 江苏 徐州 221116;²中国矿业大学信息与控制工程学院, 江苏 徐州 221116

摘要 基于 Fano 共振超表面所具有的高品质因数 Q 以及电场局域特性设计了一种全介质超表面结构, 探究了超表面结构参数与品质因数 Q 、调制深度之间的关系。通过改变结构实现了单重 Fano 共振至双重 Fano 共振的有效调控。对比同等参数下矩形柱与椭圆柱超表面结构的灵敏度, 选择矩形柱结构并确定其最优参数。矩形柱超表面结构的品质因数 Q 最大可达 3408, 双重 Fano 共振峰的调制深度接近 99%。通过仿真计算可知该结构对甲烷体积分数的测量灵敏度可以达到 1.57 nm/% (对应 dip1) 和 1.66 nm/% (对应 dip2), 对背景折射率的测量灵敏度为 419.45 nm/RIU 和 395.7 nm/RIU, FOM (figure of merit) 值分别为 524.3 RIU⁻¹ 和 542.8 RIU⁻¹。此外, 入射光偏振角度对此传感结构的 Fano 共振透射光谱强度具有一定影响, 这一特性为光学非对称传输、偏振角检测以及超表面多功能复用等提供了新思路。

关键词 传感器; Fano 共振; 全介质超表面; 甲烷传感器; 偏振敏感; 光学传感器

中图分类号 O436

文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL220850

1 引言

超表面^[1-3]是一种具有特殊电磁特性的人工二维层状材料, 可以实现对电磁波振幅、相位、偏振的灵活调控。超表面以其特殊的电磁特性被广泛应用于滤波器^[4-5]、吸收器^[6]、图像编码器^[7-8]等。随着纳米技术的飞速发展, 很多基于超表面的光学传感器被提出来, 如温度传感器^[9]、气体传感器^[10]、折射率传感器^[11]。其中, 折射率传感器在农业、工业、生物医学等领域得到了广泛应用。然而, 众多的超表面传感器是基于金属材料构成的, 而金属超表面往往具有较高的欧姆损耗, 导致传感器的品质因数 Q (小于几十) 和 FOM (figure of merit) 值很低^[12-15], 影响传感器的工作效率。为了解决这一问题, 研究人员选用全介质材料来替代金属材料。

全介质材料具有较低的吸收性能且不存在欧姆损耗, 因此具有较窄的共振峰, 能有效提高传感器的品质因数 Q 和 FOM 值。Modi 等^[16]设计了一种分裂非对称弧结构传感器, 其最大品质因数 Q 为 213.4, 但其 FOM 值仅为 50; Bar-David 等^[17]提出了全介质硅纳米棒超表面, 其共振峰品质因数 Q 较高, 但折射率较小。Fano 共振是一种会产生非对称谱线的散射共振现象, 由近场中的离散态 (暗模式) 和连续态 (亮模式) 相互耦合引起。当具有特定几何形状的全介质材料与入射光相互作用时会产生 Fano 共振, 共振峰的位置

和大小与介质材料的尺寸、背景折射率有关。在 Fano 共振谱线位置, 系统辐射衰减被有效抑制, 导致更大的场增强, 从而使得系统具有较大的品质因数 Q 和 FOM 值。2020 年, Wang 等^[18]通过在圆柱体硅上引入缺口设计了一种多通道折射率传感器, 其 FOM 值可达 260, 灵敏度为 100 nm/RIU; 2021 年, Li 等^[19]通过在硅片上刻蚀两个方形气孔, 设计出了灵敏度为 287.5 nm/RIU、FOM 值为 389 的光学折射率传感器。2021 年, 王子煜等^[20]设计了一种全介质十字腔结构, 并基于该结构实现了透射率高达 93%、 Q 值为 2617 的传感器。可以看出: 与传统的全介质超表面相比, 基于 Fano 共振的全介质超表面具有较高的品质因数 Q 和 FOM 值, 同时灵敏度也比较高。但此类传感器的功能比较单一, 仅能实现单参数测量, 不能应对复杂多变的环境。

本团队提出了一种基于 Fano 共振超表面的多功能应用传感器, 并利用时域有限差分 (FDTD) 方法计算了超表面的电磁场分布和透射谱。该超表面对折射率和浓度的变化较为敏感, 其产生的双重 Fano 共振能够同时测量背景折射率和甲烷的体积分数, 背景折射率和甲烷体积分数的最大测量灵敏度分别达到了 419.45 nm/RIU 和 1.66 nm/%, 品质因数 Q 和 FOM 值分别为 3408 RIU⁻¹ 和 542.8 RIU⁻¹。此外, Fano 共振峰透射率的大小对光源偏振角的变化比较敏感, 能够实现 20°~75° 范围偏

收稿日期: 2022-05-12; 修回日期: 2022-06-16; 录用日期: 2022-06-22; 网络首发日期: 2022-07-09

基金项目: 国家自然科学基金 (51874301)、徐州市重点研发项目 (KC20162)

通信作者: *lhai_hust@hotmail.com

振角的检测。

2 模型的建立与分析

基于单排双椭圆纳米柱的超表面单元结构 Structure A 如图 1 所示,该结构由两个大小不同的椭圆硅纳米柱和二氧化硅基底共两层结构组成。其中,硅纳米柱与基底二氧化硅的折射率分别为 $n_1 = 3.5$ 和 $n_2 = 1.5$,双纳米柱长半轴分别为 $a_1 = 300$ nm 和 $a_2 = 150$ nm,短半轴分别为 $b_1 = 100$ nm 和 $b_2 = 100$ nm,高度 $t = 100$ nm,纳米柱之间的间距为 200 nm,基底在 x 与 y 方向的尺寸分别为 $P_x = 1300$ nm 和 $P_y = 1300$ nm。由于超晶格结构的周期性,在 x 与 y 方向设置周期性边界条件,在 z 方向设置完美匹配层(PML),同时 y 偏振平面波沿 z 轴负方向垂直入射。

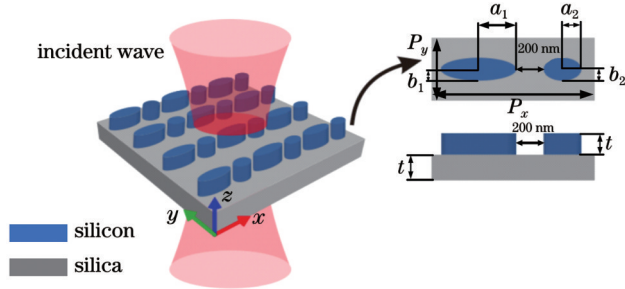


图 1 超表面结构 Structure A 的示意图

Fig. 1 Schematic of proposed metasurface Structure A

具有高品质因数 Q 的超表面对工艺制造要求非常严苛,制造误差会影响超表面的近场耦合效应,使得更多的光辐射到自由空间,进而影响超表面的性能。前期本团队已对该超表面进行了仿真验证,而国内外的最新文献为本次实验提供了重要参考^[21-22]。图 2 给出了全介质超表面的制造过程。采用压力化学气相沉积(LPCVD)法将硅沉积在二氧化硅基板表面,接着在样品表面旋涂电子束光刻胶(ZEP520)并进行烘烤,再采用电子束光刻

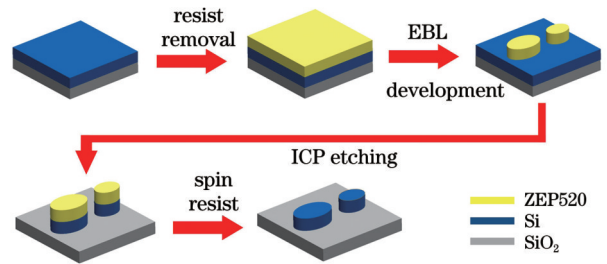


图 2 超表面的制备流程图

Fig. 2 Manufacture procedure chart of required metasurfaces

(EBL)和电感耦合等离子体(ICP)刻蚀去除光刻胶,最后进行等离子体清洗即可获得全介质超表面。该超表面的优势在于其精简的结构设计,这种结构设计使其具有较高的工艺容忍度及工程应用价值。

为分析 Structure A 的光谱图并探究其产生 Fano 共振的机理,利用 FDTD Solutions 电磁仿真软件进行仿真计算。如图 3(a)所示,Structure A 与入射波相互作用,在 1448.7 nm 处出现 Fano 共振峰。如图 3(b)所示,共振峰两侧的电场(E_z)局域在纳米柱表面且呈反相模式,双纳米柱内部形成了环形位移电流。图 3(c)表明纳米柱表面的环形位移电流产生了与之方向垂直的磁场,进而两纳米柱之间形成了环形偶极子(TD)共振。入射光与超表面强耦合形成亮模式,同时激发 TD 共振与入射光弱耦合形成暗模式,两个共振模式通过近场耦合发生相消干涉,产生 Fano 共振,导致在波长 1448.7 nm 处出现了 Fano 共振。通过式(1)可以计算得到 Fano 共振的品质因数和调制深度^[21]。

$$\begin{cases} Q = \frac{\lambda}{\omega_{FWHM}} \\ T = \left[\frac{T_{\text{peak}} - T_{\text{antipeak}}}{T_{\text{peak}} + T_{\text{antipeak}}} \right] \times 100\% \end{cases}, (1)$$

式中: λ 为波长; ω_{FWHM} 为共振的半峰全宽; T_{peak} 为 Fano 共振峰处的透射率; T_{antipeak} 为 Fano 共振谷处的透射率。

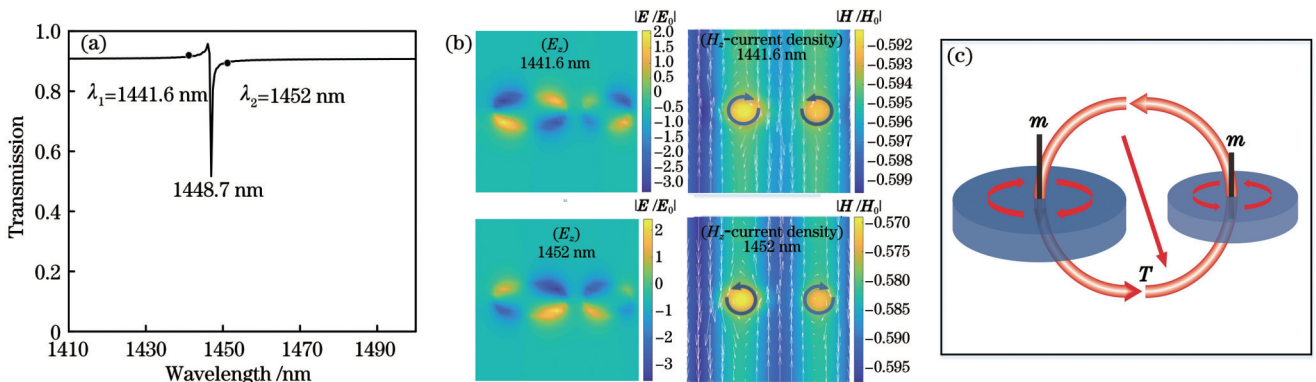


图 3 Structure A 仿真结果。(a) Structure A 的透射光谱图;(b)电场图(E_z)分布和磁场(H_z)电流密度图;(c)TD形成图,其中 m 表示磁偶极矩, T 表示环形磁偶极矩

Fig. 3 Structure A simulation results. (a) Transmission spectrum of Structure A; (b) electric field diagram (E_z) distribution and magnetic field (H_z) current density diagram; (c) toroidal dipole formation diagram, where m denotes magnetic dipole moment and T denotes toroidal magnetic dipole moment

通过计算可得 Structure A 的品质因数和调制深度分别为 895 和 35%。

Fano 共振的品质因数 Q 与单元结构的净偶极矩有关,通过改变单元结构分布或者调节参数大小都可以改变净偶极矩,从而减少辐射损耗,最终调控 Fano 共振的品质因数。在基于单排双椭圆纳米柱结构的基

础上,可以通过增加纳米柱的排数使纳米柱之间的耦合加强,从而进一步提高品质因数 Q 和调制深度。基于双排椭圆纳米柱的整体结构 Structure B 如图 4(a) 所示。Structure B 中两排纳米柱之间的距离为 100 nm,周期为 $P_x=1300$ nm 和 $P_y=700$ nm,其他参数与 Structure A 中的一致。

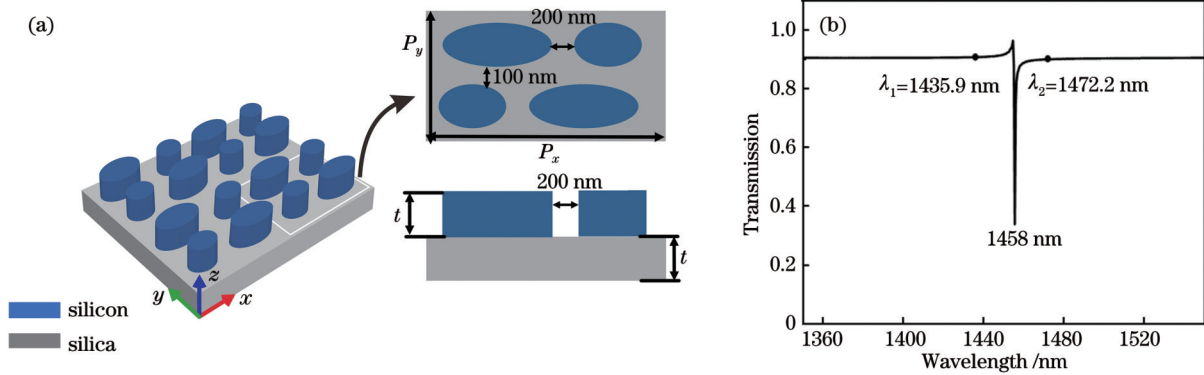


图 4 Structure B 的仿真实验结果。(a)超表面结构 Structure B 的示意图;(b) Structure B 的透射光谱

Fig. 4 Simulation results of Structure B. (a) Schematic of proposed metasurface Structure B; (b) transmission spectrum of Structure B

如图 4(b)透射光谱图所示,在 1458 nm 处出现了 Fano 共振效应。根据式 (1) 计算可得该结构 Fano 共振的品质因数和调制深度分别为 1577 和 48%,其品质因数 Q 相对于 Structure A 来说提高了近一倍。图 5 所示为 Structure B 在 1435.9 nm 和 1472.2 nm 处的电场图和磁场电流密度图。由电场分布图可知,相邻纳米

柱产生了反相电场。由磁场电流密度图可知,纳米柱内部形成了环形位移电流,且其与电流方向相反。在该结构中,单个纳米柱表面的位移电流形成垂直于表面的磁场,进而形成磁偶极子(MD)共振,多个 MD 首尾相连组成一个沿轴向方向的环偶极子。由此可知,环偶极子是由多个 MD 组合形成的一个闭合环的大 MD。

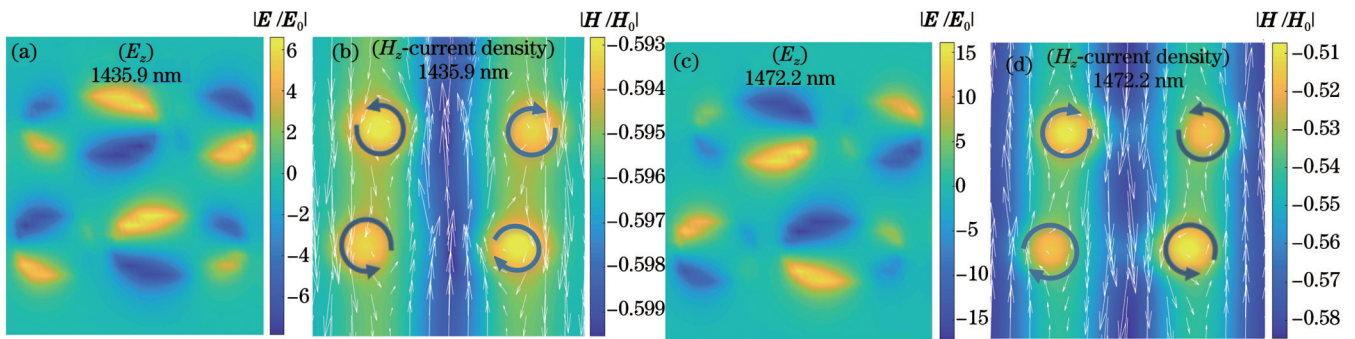


图 5 Structure B 在 1435.9 nm 和 1472.2 nm 处的电场图和磁场电流密度图。(a)1435.9 nm 处的电场图;(b)1435.9 nm 处的磁场电流密度图;(c)1472.2 nm 处的电场图;(d)1472.2 nm 处的磁场电流密度图

Fig. 5 Electric field and magnetic field current density diagrams of Structure B at 1435.9 and 1472.2 nm. (a) Electric field diagram at 1435.9 nm; (b) magnetic field current density diagram at 1435.9 nm; (c) electric field diagram at 1472.2 nm; (d) magnetic field current density diagram at 1472.2 nm

为进一步研究 Structure B 的电磁特性和散射特性,基于纳米柱内部的位移电流利用笛卡儿坐标系中的多级展开,计算多极矩的散射功率。表 1 为笛卡儿坐标系中各个偶极矩和远场散射功率的计算公式,其中 c 是光速, ω 是光的频率, \mathbf{j} 为电流密度; \mathbf{r} 表示坐标系中某一点到坐标系原点的距离。

如图 6(a)所示为 Structure B 中单个椭圆纳米柱的 MD 形成图,图 6(b)为 Structure B 中近邻椭圆纳米柱之间的 TD 形成图。由图 6(c)多极矩的散射功率图可以得出,在 1458 nm 处,TD 共振与 MD 共振共同起

主导作用。这表明 Fano 共振峰是由 TD 共振和 MD 共振同时进行干涉形成的暗模式,而其余共振可视为亮模式,两种模式之间存在强耦合,形成了 Fano 共振峰,故其品质因子 Q 相对于 Structure A 来说提高了近一倍。

增加纳米柱的排数可以有效提高共振峰的品质因数和调制深度。基于此,设计了三排椭圆纳米柱结构 Structure C,如图 7(a)所示。三排纳米柱分成三组,分别为 L1、L2、L3,周期 $P_x=1300$ nm, $P_y=1000$ nm,其他参数和 Structure B 的保持一致。由图 7(b)所示的透射光谱图可以看出,Structure C 在 1591 nm 和 1651 nm

表 1 笛卡儿坐标系中各个偶极矩和远场散射功率的计算公式

Table 1 Formulas for each dipole moment and far-field scattering power in Cartesian coordinate

Order	Dipole moment	Far-field scattering power
Electric dipole	$\mathbf{P} = \frac{1}{i\omega} \int \mathbf{j} d^3 r$	$I_P = \frac{2\omega^4}{3c^3} \mathbf{P} ^2$
Magnetic dipole	$\mathbf{M} = \frac{1}{2c} \int \mathbf{r} \times \mathbf{j} d^3 r$	$I_M = \frac{2\omega^4}{3c^3} \mathbf{M} ^2$
Toroidal dipole	$\mathbf{T} = \frac{1}{10c} \int [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j})\mathbf{r} - 2r^2 \mathbf{j}] d^3 r$	$I_T = \frac{2\omega^6}{3c^5} \mathbf{T} ^2$
Electric quadrupole	$Q_{\alpha,\beta}^{(e)} = \frac{1}{i2\omega} \int [r_\alpha j_\beta + j_\beta r_\alpha - \frac{2}{3}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j})] d^3 r$	$I_{Q^{(e)}} = \frac{\omega^6}{5c^5} \sum Q_{\alpha,\beta}^{(e)} ^2$
Magnetic quadrupole	$Q_{\alpha,\beta}^{(m)} = \frac{1}{3c} \int [(\mathbf{r} \times \mathbf{j})_\alpha r_\beta + (\mathbf{r} \times \mathbf{j})_\beta r_\alpha] d^3 r$	$I_{Q^{(m)}} = \frac{\omega^6}{40c^5} \sum Q_{\alpha,\beta}^{(m)} ^2$

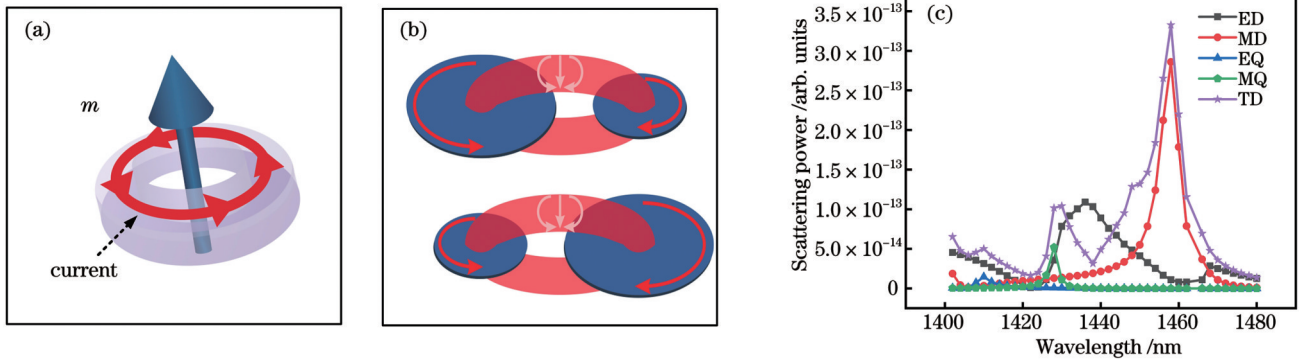


图 6 多极子和散射功率图。(a) Structure B 中单个椭圆纳米柱的 MD 形成图；(b) 近邻椭圆纳米柱之间的 TD 形成图；(c) 多极矩散射功率图，其中 EQ 表示电四极子，MQ 表示磁四极子

Fig. 6 Multipole and scattering power diagrams. (a) MD formation diagram of single elliptic nanorods in Structure B; (b) TD formation diagram between near elliptic nanorods; (c) scattering power of multipole moments, where EQ and MQ denote electric quadrupole and magnetic quadrupole, respectively

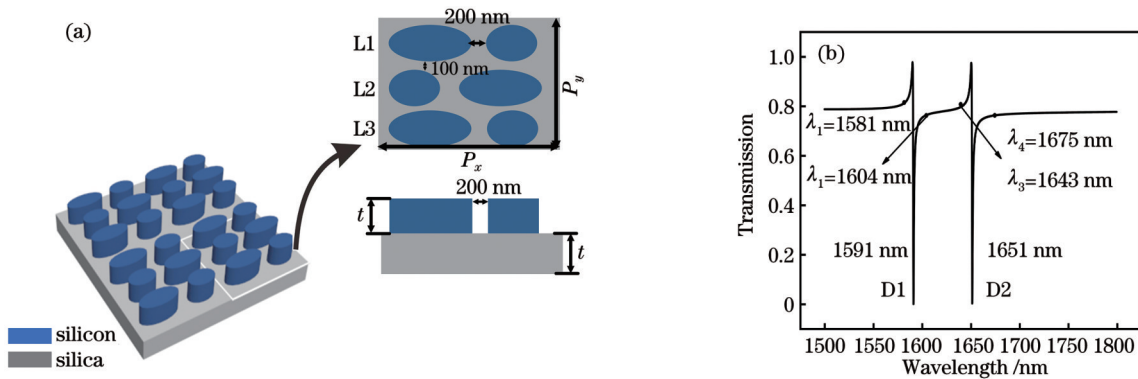


图 7 Structure C 的仿真结果。(a) 超表面结构 Structure C 的示意图；(b) Structure C 的透射光谱

Fig. 7 Simulation results of Structure C. (a) Schematic of proposed metasurface Structure C; (b) transmission spectrum of Structure C

处出现了两个尖锐的 Fano 共振峰。产生双重 Fano 共振要求纳米结构支持多个共振模式，同时调制谱线的共振位置。

为探究 Structure C 产生双重 Fano 共振的机理，分别绘制了双重共振峰两侧的电场图和磁场电流密度图。从图 8(a) 可以看到 D1 两侧的电场呈反相模式；

由磁场电流密度图可知 L1 组和 L3 组纳米柱内部形成了方向相反的环形电流，L2 组内部形成了竖直方向的反向电流。由图 8(b) 所示的电场图可知，D2 两侧的电场同样呈反相模式，但与 D1 两侧的电场分布有所区别；从图 8(b) 所示的磁场电流密度图可知 L1 和 L3 组纳米柱形成了竖直方向的反向电流，L2 组纳米柱形成

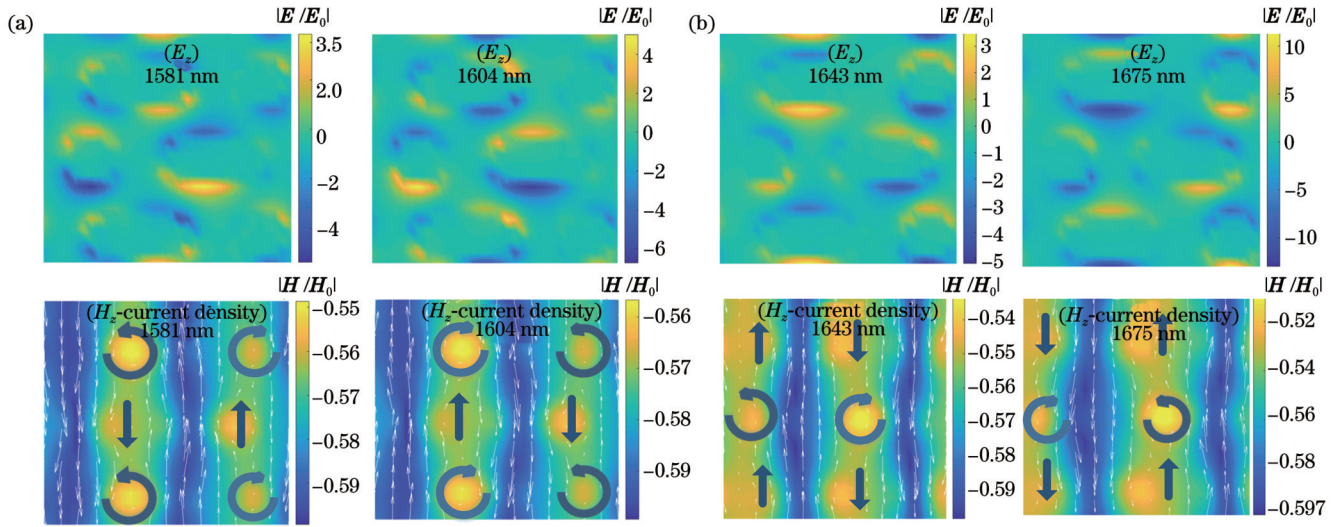


图 8 D1和D2共振峰两侧的电场图和磁场电流密度图。(a)D1共振峰;(b)D2共振峰

Fig. 8 Electric field and magnetic field diagrams of two sides of D1 and D2 resonant peaks. (a) D1 resonant peak; (b) D2 resonant peak

了反向环形电流。

图 9(a)和图 9(b)分别为 Structure C 中 D1 共振峰单个椭圆纳米柱电偶极子(ED)共振和 TD 共振的形成图。由图 9(d)所示的多极矩散射功率图可以看出:在 1591 nm 处,TD 共振起主导作用,并且当 TD 共振

与 ED 共振的散射功率相等时,两者干涉相消形成 Anapole 模式,进而形成尖锐的 Fano 共振峰;在 1651 nm 处,TD 共振和 MD 共振同时进行干涉,形成暗模式,ED 共振和其余共振被当作亮模式,两种模式之间存在强耦合,形成了另一个 Fano 共振峰。

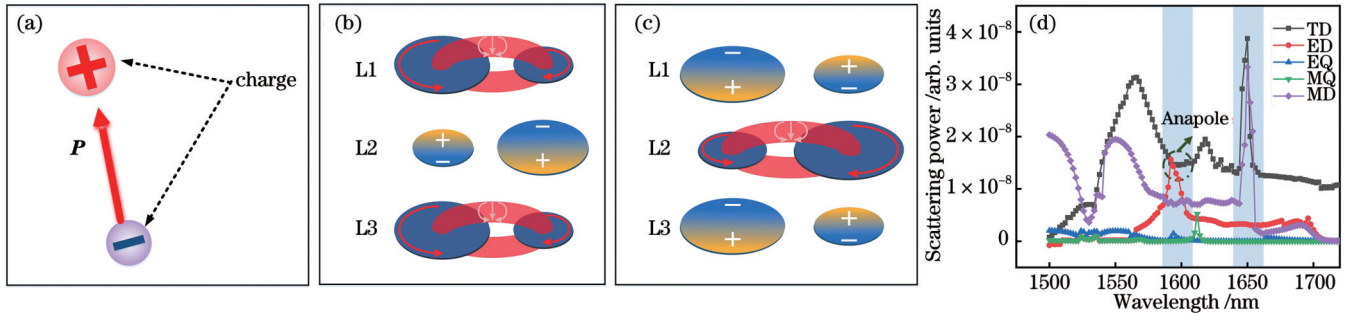


图 9 多极子和散射功率图。(a) Structure C 中单个椭圆纳米柱的 ED 形成图,其中 \mathbf{P} 表示电偶极矩;(b)~(c) 近邻椭圆纳米柱之间的 TD 形成图;(d) 多极矩散射功率图

Fig. 9 Multipole and scattering power diagrams. (a) ED formation diagram of single elliptic nanorod in Structure C, where \mathbf{P} denotes electric dipole moment; (b)~(c) TD formation diagram between near elliptic nanorods; (d) scattering powers of multipole moments

3 传感特性研究

两个 Fano 共振由不同的机制引起,因此,通过改变结构的背景折射率和甲烷气体的体积分数,能够同时调制两个 Fano 共振的频率。在 Structure C 上涂覆一层甲烷气敏膜(甲烷气敏膜选择 UVCFS^[22],该材料对周围环境的温度和湿度不敏感),膜厚为 150 nm,膜的长度、宽度与 Structure C 参数相同。当甲烷气敏膜的折射率在 0%~3% 范围内时,甲烷体积分数每增加一个百分点,甲烷气敏膜的折射率就会在 1.4478~1.4364 范围内降低 0.0038^[23-25],如式(2)所示。

$$N_{\text{eff}} = 14478 - 0.0038C(\text{CH}_4), \quad (2)$$

式中: N_{eff} 为甲烷气敏膜的折射率; $C(\text{CH}_4)$ 为甲烷的体积分数。

传感器的性能一般用灵敏度 S 、FOM 指标(在公式中将此指标记为 α_{FOM})来描述。FOM 定义为 S 与共振的半峰全宽(ω_{FWHM})的比值,即

$$\alpha_{\text{FOM}} = S/\omega_{\text{FWHM}} \quad (3)$$

为评估此传感器的性能,通过仿真得到了不同甲烷体积分数和背景折射率下的透射谱曲线。图 10(a)给出了椭圆柱纳米传感器在不同甲烷体积分数(当背景折射率保持为 1.00 时,甲烷的体积分数分别为 $C=0\%, 0.5\%, 1.0\%, 1.5\%$)下的透射光谱。随着甲烷体积分数增加,两共振峰的波长发生蓝移。dip1 和 dip2 的甲烷体积分数测量灵敏度分别为 $-1.45 \text{ nm}/\%$ 和 $-1.57 \text{ nm}/\%$,如图 10(b)所示。图 10(c)是当甲烷体积分数保持为 0% 时,不同背景折射率(分别为 $n=1.00, 1.02, 1.04, 1.06$)下的透射光谱,可见,两共振峰

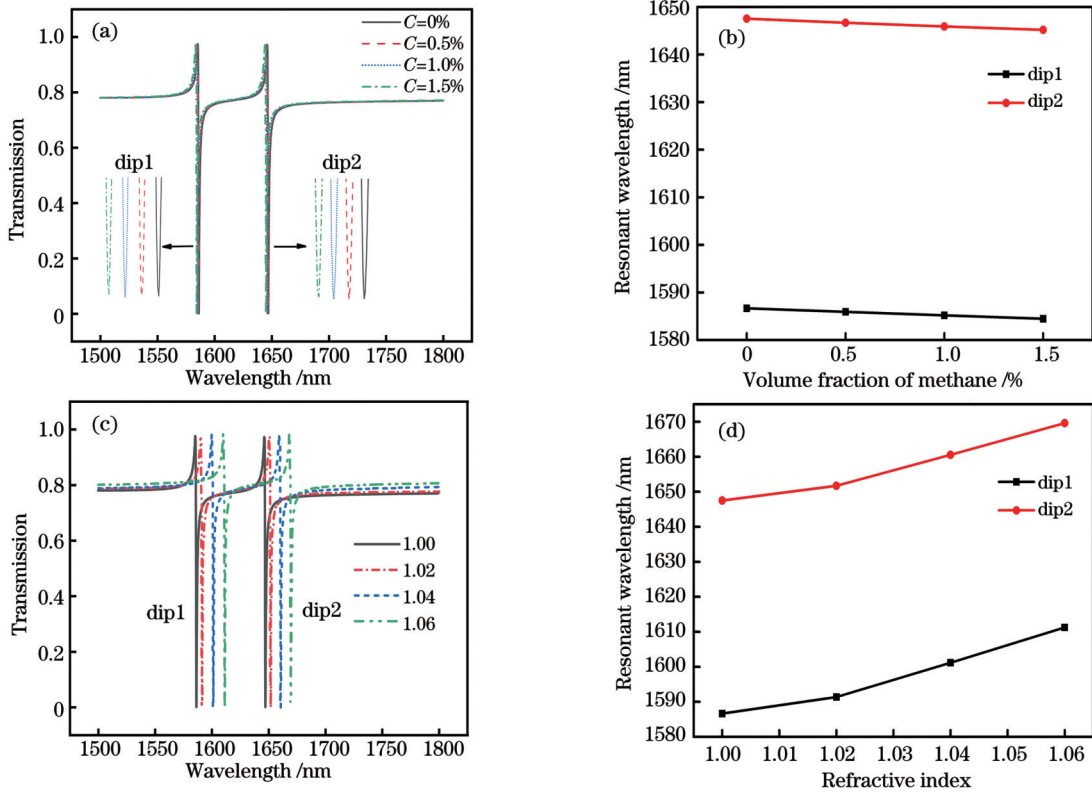


图 10 椭圆传感器的仿真结果图。(a)不同甲烷体积分数下的透射谱;(b)两个 Fano 共振的共振波长 dip1 和 dip2;(c)不同背景折射率下的透射谱;(d)背景折射率从 1.00 变化到 1.06 时两个 Fano 共振的共振波长

Fig. 10 Simulation results of elliptic sensor. (a) Transmission spectra at different volume fractions of methane; (b) resonant wavelengths dip1 and dip2 of two Fano resonances; (c) transmission spectra at different background refractive indexes; (d) resonant wavelength of two Fano resonances when background refractive index varies from 1.00 to 1.06

波长发生红移。dip1 和 dip2 的背景折射率和共振波长不成线性关系,如图 10(d)所示,所以该传感器不能用来测量背景折射率。

考虑到有可能是椭圆结构之间较大的净偶极矩导致 Fano 共振的辐射损耗较高,将椭圆结构纳米柱换成矩形纳米柱进行仿真。参数为 $c_1=600\text{ nm}$, $c_2=300\text{ nm}$, $d_1=d_2=200\text{ nm}$ 的矩形纳米柱传感结构示意图如图 11(a)所示。通过仿真计算可得矩形结构的品质因数 Q 为 3408,调制深度接近 99%。如图 11(b)所示,随

着甲烷气敏膜厚度增加,共振峰红移。不同气敏膜厚度下共振峰移动急剧增加是由于气敏薄膜基本位于矩形纳米柱间隙中。在这种情况下,电场与甲烷气敏膜的相互作用增强,所以共振峰会随着薄膜厚度增加而红移。

图 12(b)所示 dip1 和 dip2 的甲烷体积分数测量灵敏度分别为 $-1.47\text{ nm}/\%$ 和 $-1.56\text{ nm}/\%$,图 12(d)所示 dip1 和 dip2 的背景折射率测量灵敏度分别为 $400.45\text{ nm}/\text{RIU}$ 和 $380.7\text{ nm}/\text{RIU}$ 。进一步优化超表面的结构参数,并将优化结果记录在表 2 中。保持

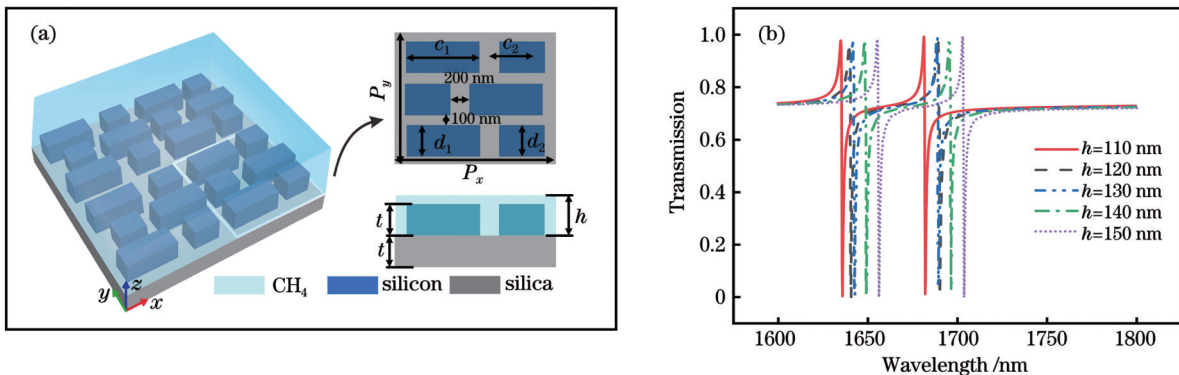


图 11 矩形气体传感器及气敏膜厚度仿真图。(a)矩形结构示意图;(b)不同气敏膜厚度对 Fano 共振峰的影响

Fig. 11 Simulation diagram of rectangular gas sensor and gas sensitive film thickness. (a) Rectangular structure diagram; (b) effect of different gas sensitive film thickness on Fano formant

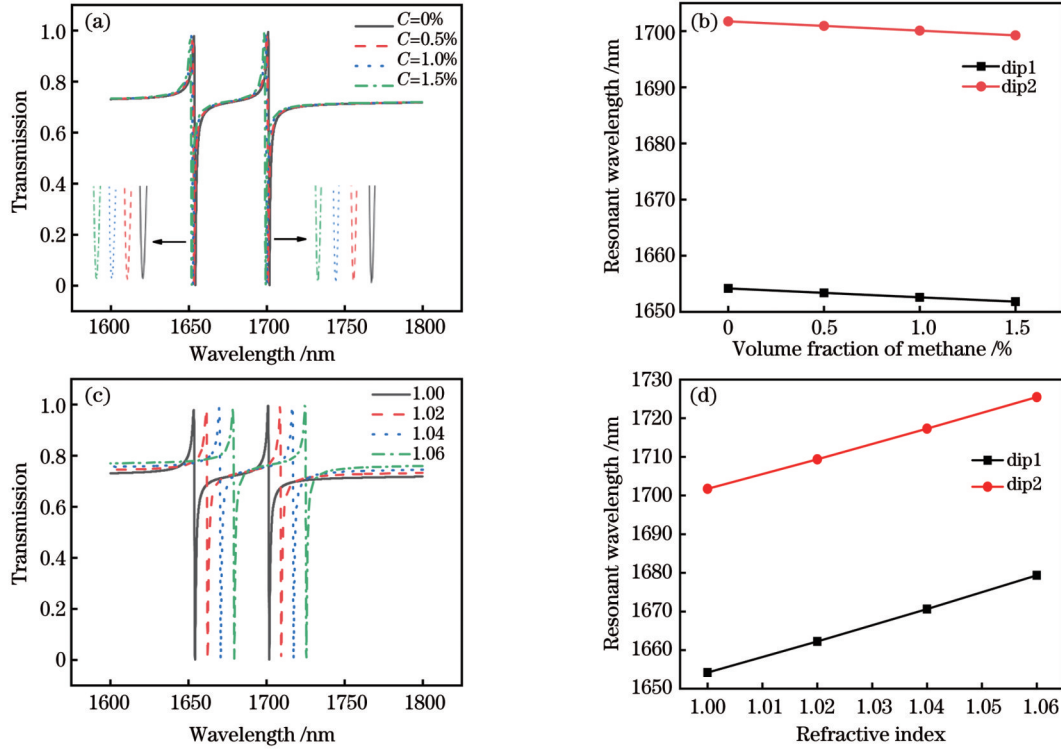


图 12 矩形传感器的仿真结果。(a)不同甲烷体积分数下的透射谱;(b)甲烷体积分数从 0% 变化到 1.5% 时两个 Fano 共振的共振波长;(c)不同背景折射率下的透射谱;(d)背景折射率从 1.00 变化到 1.06 时两个 Fano 共振的共振波长 dip1 和 dip2

Fig. 12 Simulation results of rectangular sensor. (a) Transmission spectra at different methane volume fractions; (b) resonant wavelength of two Fano resonances when methane volume fraction varies from 0% to 1.5%; (c) transmission spectra at different background refractive indexes; (d) two resonant wavelengths dip1 and dip2 when background refractive index varies from 1.00 to 1.06

表 2 参数优化结果
Table 2 Parameter optimization results

S_i	t/nm	c_1/nm	c_2/nm	Sensitivity / (nm · % ⁻¹)	
				Dip1	Dip2
S_1			200	-1.51	-1.57
S_2	100	600	300	-1.56	-1.61
S_3			400	-1.62	-1.74
S_4			200	-1.56	-1.71
S_5	100	700	300	-1.59	-1.64
S_6			400	-1.57	-1.66
S_7			200	-1.69	
S_8	100	800	300	-1.64	-1.67
S_9			400	-1.66	-1.71
S_{10}			200	-1.57	-1.64
S_{11}	110	600	300	-1.47	-1.56
S_{12}			400	-1.54	-1.65
S_{13}			200	-1.55	-1.59
S_{14}	110	700	300	-1.62	-1.63
S_{15}			400	-1.60	-1.67

(续表)

S_i	t/nm	c_1/nm	c_2/nm	Sensitivity / (nm · % ⁻¹)	
				Dip1	Dip2
S_{16}			200	-1.61	
S_{17}	110	800	300	-1.88	-1.59
S_{18}			400	-1.57	-1.71
S_{19}			200	-1.59	-1.70
S_{20}	120	600	300	-1.54	-1.63
S_{21}			400	-1.56	-1.67
S_{22}			200	-1.58	-1.68
S_{23}	120	700	300	-1.60	-1.78
S_{24}			400	-1.63	-1.7
S_{25}			200		-1.63
S_{26}	120	800	300	-1.66	-1.70
S_{27}			400	-1.68	

$P_x=1300\text{ nm}$ 和 $P_y=1000\text{ nm}$ 不变, 选择 3 个参数 t, c_1 和 c_2 (c_1 和 c_2 分别表示双矩形的长) 来分析其对甲烷体积分数测量灵敏度的影响。从表 2 可以看出: 当选择参数 S_{17} 时, dip1 获得最大的甲烷体积分数测量灵敏

度,为 $-1.88 \text{ nm}/\%$;当参数选择 S_{23} 时, dip2 获得最大的甲烷体积分数测量灵敏度,为 $-1.78 \text{ nm}/\%$,但通过仿真可知此时的品质因数 Q 和调制深度不太高。综合考虑后选择 S_6 来最大化 dip1 和 dip2 的灵敏度,甲烷体积分数测量灵敏度分别为 $-1.57 \text{ nm}/\%$ 和 $-1.66 \text{ nm}/\%$,背景折射率测量灵敏度分别为 $419.45 \text{ nm}/\text{RIU}$ 和 $395.7 \text{ nm}/\text{RIU}$,两半峰全宽的长度分别为 0.8 nm 和 0.72 nm ,进而得到 FOM 分别为 524.3 RIU^{-1} 和 542.8 RIU^{-1} 。基于优化结果,接下来进一步研究双参数测量方法。

基于上述参数优化结果,可以通过矩阵 \mathbf{K} 计算所提传感结构对波长的变化。矩阵 \mathbf{K} 的定义为

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中:矩阵元素 K_{11} 、 K_{12} 分别代表 dip1 的折射率测量灵敏度 (R) 和甲烷体积分数测量灵敏度; K_{21} 、 K_{22} 分别代表 dip2 的折射率测量灵敏度和甲烷体积分数测量灵敏度。

双参数传感器可以表示为矩阵 \mathbf{K} ,共振波长的变化可以表示为

$$\begin{bmatrix} \Delta\lambda_1 \\ \Delta\lambda_2 \end{bmatrix} = \mathbf{K} \cdot \begin{bmatrix} \Delta R \\ \Delta C \end{bmatrix}, \quad (5)$$

式中: $\Delta\lambda_1$ 和 $\Delta\lambda_2$ 分别代表 dip1 和 dip2 的谐振波长变化; ΔR 和 ΔC 分别代表背景空间折射率和气体体积分数的变化。

根据线性代数相关知识,背景折射率变化 ΔR 和甲烷体积分数变化 ΔC 可以表示为

$$\begin{bmatrix} \Delta R \\ \Delta C \end{bmatrix} = \mathbf{K}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \Delta\lambda_1 \\ \Delta\lambda_2 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

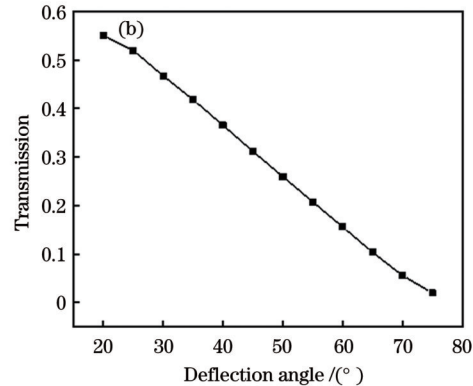
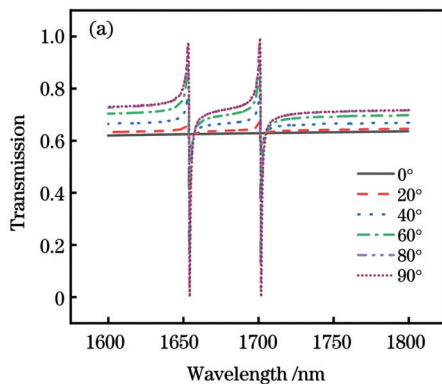


图 13 不同偏转角度下的仿真结果。(a)入射光偏转不同角度的透射图;(b)不同偏转角度入射光在共振峰处的透射强度值
Fig. 13 Simulation results under different deflection angles. (a) Transmission diagram of incident light deflection with different angles; (b) transmission intensity of incident light with different deflection angles at formants

对于所提非对称矩形周期纳米结构传感器,考虑到其在实际制备加工过程中受极限线宽的限制,会不可避免地产生加工尺寸误差,在原尺寸 ($t=100 \text{ nm}$, $c_1=700 \text{ nm}$, $c_2=300 \text{ nm}$, $d_1=d_2=200 \text{ nm}$) 的基础上,通过仿真 $0.1\sim 1.6 \text{ nm}$ 范围内的相对误差对双重 Fano

根据上面的计算,可以计算得到矩阵系数,即

$$\begin{bmatrix} \Delta R \\ \Delta C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 419.45 & -1.57 \\ 395.7 & -1.66 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \Delta\lambda_1 \\ \Delta\lambda_2 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

为了验证双参数传感器同时测量背景折射率和甲烷体积分数的灵敏度,随机抽取了 4 组数据,如表 3 所示。在表 3 中, ΔR 和 ΔC 表示设定的背景折射率变化和甲烷体积分数变化,而 ΔR_c 和 ΔC_c 分别表示基于式 (7) 计算得到的背景折射率变化和甲烷体积分数变化。

表 3 计算结果汇总
Table 3 Summary of calculation results

ΔR	$\Delta C / \%$	$\Delta\lambda_1$	$\Delta\lambda_2$	ΔR_c	$\Delta C_c / \%$
0.02	0.5	8.850	8.44	0.019	0.50
0.04	1.0	18.030	17.02	0.040	1.06
0.04	1.5	18.795	18.00	0.039	1.50
0.06	1.5	27.510	26.23	0.060	1.52

由表 3 可以看出,原设值与计算值之间的差异较小,可以忽略不计。该传感器对光源偏振角度较为灵敏,所以通过改变偏振角度来观察 Fano 共振峰透射强度的变化。由图 13 可以看出:随着偏振角度减小, y 轴上的电场分量逐渐变小, y 方向的电偶极矩也随之变小。当沿 x 轴偏振时, y 轴上的电场分量为 0,电偶极矩也为 0,无法与背景散射光耦合产生 Fano 共振。通过改变入射光的偏振角度能够调制双峰的调制深度。不同偏转角度入射光在共振峰处的透射强度值如图 13(b) 所示。

共振峰位置的影响,得出了该矩形周期结构对尺寸误差的容忍度。图 14 表明该传感器的相对误差在 $0.1\sim 1.3 \text{ nm}$ 时,双 Fano 共振峰的移动较小,可以忽略;当相对误差超过 1.3 nm 时,双 Fano 共振峰的位置会发生较大移动,对传感器的性能产生了一定影响。

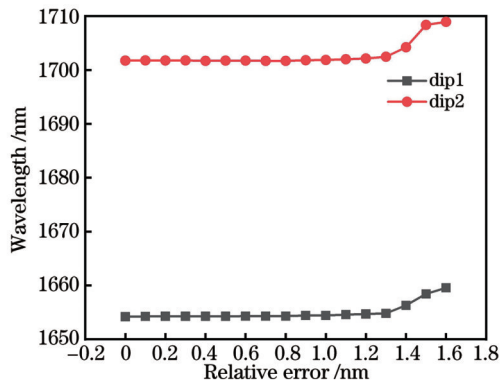


图 14 矩形传感器相对误差对 Fano 共振峰位置的影响

Fig. 14 Effect of relative error of rectangle sensor on Fano resonant peak position

4 结 论

基于全介质低损耗的特性,本文提出了一种矩形纳米柱结构的超表面器件,并将其作为甲烷体积分数和背景折射率双参数传感检测器。该结构可与 y 偏振入射平面波激发产生双重 Fano 共振,两 Fano 共振是 TD 和 ED 耦合产生的杂化共振。基于 FDTD 法分析了该结构的透射特性,并分析了不同结构参数对甲烷体积分数测量灵敏度的影响;选择优化后的结构参数进行仿真分析,得到该传感器的最大 Q 值为 3408,调制深度接近 99%,最大折射率测量灵敏度可达到 419.45 nm/RIU。此外,由于该传感器是非对称结构,入射光的偏振状态会影响透射光谱,故而可以根据共振峰的位置检测出相对应的偏转角度。这一特性为非对称传输、偏振检测以及超表面多功能复用等提供了新思路。

参 考 文 献

- [1] Liu S, Tie J C, Noor A, et al. Negative reflection and negative surface wave conversion from obliquely incident electromagnetic waves[J]. *Light: Science & Applications*, 2018, 7(5): 18008.
- [2] Liu Y N, Xu J Y, Xiao S Y, et al. Metasurface approach to external cloak and designer cavities[J]. *ACS Photonics*, 2018, 5(5): 1749-1754.
- [3] Martini E, Mencagli M, Jr, Maci S. Metasurface transformation for surface wave control[J]. *Philosophical Transactions. Series A, Mathematical, Physical, and Engineering Sciences*, 2015, 373(2049): 20140355.
- [4] Xu Z J, Li N X, Dong Y, et al. Metasurface-based subtractive color filter fabricated on a 12-inch glass wafer using CMOS platform[J]. *Photonics Research*, 2020, 9(1): 13-20.
- [5] Hong J, Son H, Kim C, et al. Absorptive metasurface color filters based on hyperbolic metamaterials for a CMOS image sensor[J]. *Optics Express*, 2021, 29(3): 3643-3658.
- [6] 马栎敏, 徐晗, 刘禹煌, 等. 基于石墨烯超材料的宽频带太赫兹吸收器[J]. *光学学报*, 2022, 42(9): 0923001.
- [7] Ma L M, Xu H, Liu Y H, et al. Broadband terahertz absorber based on graphene metamaterial[J]. *Acta Optica Sinica*, 2022, 42(9): 0923001.
- [8] Chen X G, Tao Z, Chen C, et al. All-dielectric metasurface-based roll-angle sensor[J]. *Sensors and Actuators A: Physical*, 2018, 279: 509-517.
- [9] Baqir M A, Choudhury P K. On the VO_2 metasurface-based temperature sensor[J]. *Journal of the Optical Society of America B*, 2019, 36(8): F123-F130.
- [10] Miyazaki H T, Kasaya T, Iwanaga M, et al. Dual-band infrared metasurface thermal emitter for CO_2 sensing[J]. *Applied Physics Letters*, 2014, 105(12): 121107.
- [11] 陈颖, 张敏, 丁志欣, 等. 基于全介质超表面的微流体折射率传感器[J]. *中国激光*, 2022, 49(6): 0613001.
- [12] Chen Y, Zhang M, Ding Z X, et al. Microfluidic refractive index sensor based on all-dielectric metasurfaces[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2022, 49(6): 0613001.
- [13] Fabas A, Ouazzani H E, Hugonin J P, et al. Dispersion-based intertwined SEIRA and SPR effect detection of 2, 4-dinitrotoluene using a plasmonic metasurface[J]. *Optics Express*, 2020, 28(26): 39595-39605.
- [14] Vogel N, Fischer J, Mohammadi R, et al. Plasmon hybridization in stacked double crescents arrays fabricated by colloidal lithography[J]. *Nano Letters*, 2011, 11(2): 446-454.
- [15] Zhang J F, Hong Q L, Zou J L, et al. Fano-resonance in hybrid metal-graphene metamaterial and its application as mid-infrared plasmonic sensor[J]. *Micromachines*, 2020, 11(3): 268.
- [16] Lu Y Q, Xu J, Xu M, et al. High sensitivity plasmonic metal-dielectric-metal device with two side-coupled Fano cavities[J]. *Photonic Sensors*, 2019, 9(3): 205-212.
- [17] Modi K S, Kaur J, Singh S P, et al. Split-arc-based metasurface for refractive index sensing applications[J]. *Proceedings of SPIE*, 2019, 10928: 109281V.
- [18] Bar-David J, Mazurski N, Levy U. Resonance trimming in dielectric resonant metasurfaces[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2019, 25(3): 4700705.
- [19] Wang W D, Qi J G, Li B Y. Gap-enhanced toroidal dipole and magnetic Fano resonances with polarization independence in all-dielectric metamaterials for sensing[J]. *Journal of Nanophotonics*, 2020, 14(4): 046006.
- [20] Li H, Yu S L, Yang L, et al. High Q -factor multi-Fano resonances in all-dielectric double square hollow metamaterials[J]. *Optics & Laser Technology*, 2021, 140: 107072.
- [21] 王子煜, 邵健, 胡亚新, 等. 基于全介质超材料的高 Q 电磁诱导透明现象研究[J]. *光学学报*, 2021, 41(11): 1116001.
- [22] Wang Z Y, Shao J, Hu Y X, et al. Electromagnetically induced transparency based on all-dielectric metamaterial with high Q factor[J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(11): 1116001.
- [23] Yuan S, Qiu X Z, Cui C C, et al. Strong photoluminescence enhancement in all-dielectric Fano metasurface with high quality factor[J]. *ACS Nano*, 2017, 11(11): 10704-10711.
- [24] Chong K E, Hopkins B, Staude I, et al. Observation of Fano resonances in all-dielectric nanoparticle oligomers[J]. *Small*, 2014, 10(10): 1985-1990.
- [25] Zhao W Y, Jiang H, Liu B Y, et al. Fano resonance based optical modulator reaching 85% modulation depth[J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 107(17): 171109.
- [26] Liu H, Chen C, Zhang Y Z, et al. High-sensitive gas-mixture detection using localized surface plasmon resonance behavior in an optimized MDM array[J]. *IEEE Sensors Journal*, 2020, 20(22): 13444-13450.
- [27] Yang J C, Zhou L, Che X, et al. Photonic crystal fiber methane sensor based on modal interference with an ultraviolet curable fluoro-siloxane nano-film incorporating cryptophane A[J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2016, 235: 717-722.

Multifunctional Sensor Design Based on Fano Resonance Metasurface

Liu Hai^{1,2*}, Ren Ziyan^{1,2}, Chen Cong^{1,2}, Gao Peng^{1,2}, Qiao Yujia^{1,2}, Feng Yue^{1,2}, Luo Hao^{1,2}

¹*The Engineering Research Center of Intelligent Control for Underground Space, Ministry of Education, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, Jiangsu, China;*

²*School of Information and Control Engineering, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, Jiangsu, China*

Abstract

Objective Nanostructures based on metallic materials can modulate the amplitude, phase, and polarization of electromagnetic waves owing to their surface plasmon resonance (SPR) properties. The interference between bright and dark modes forms Fano resonances in metamaterials. Excitation of the dark mode can effectively suppress far-field radiation and enhance near-field radiation. However, the significant heat loss of metallic materials limits their application in optics; therefore, only a few superconfigurable materials based on surface plasma excitations can be used in practical applications. Recent studies have shown that highly refractive index all-dielectric nanostructures with low absorption properties do not undergo heat loss, thus facilitating the realization of high-performance compact devices. In this study, we designed a fully dielectric nanopillar supersurface with a high Fano resonance quality factor, Q , and modulation depth. We hope our design can provide innovative ideas for asymmetric transmission, polarization angle detection, and super-surface multifunctional multiplexing.

Methods In this study, the Fano resonance theory was simulated around a fully dielectric supersurface material. Maxwell's equations describe the electromagnetic-wave propagation law in space, and the equations can be solved to determine the response of the supersurface to the incident light. However, the analytical solution of Maxwell's equations cannot be obtained in general; therefore, the simulation results are typically obtained by solving a system of equations using numerical methods. The two widely used solution methods are the finite element method (FEM) and the finite difference in the time-domain method (FDTD). We used the FDTD Solutions software to simulate the supersurface and perform high-precision simulations to replace the more expensive prototype experiments. The periodic boundary conditions were set in the x - and y -directions owing to the periodicity of the superlattice structure, and a perfect matching layer (PML) was set in the z -direction. In addition, the polarization plane wave was vertically incident in the negative direction of the axis. Simulations were performed sequentially by changing the nanopillar structure to analyze the Fano resonance generation mechanism.

Results and Discussions The designed full-dielectric supersurface has a high-quality factor, Q , and modulation depth. Flexible modulation from single-Fano resonance to double-Fano resonance can be achieved by increasing the number of nanocolumn rows. The transmission spectrum of the first simulated single-row nanocolumn and the electromagnetic field distribution show that the Fano resonance (Fig. 3) was generated by a toroidal dipole but with a decreased quality factor. The coupling between the nanocolumns can be modulated by increasing the number of nanorows such that the toroidal dipole (TD) and magnetic dipole (MD) jointly dominate the dark mode, thus increasing the quality factor and enhancing the near-field coupling (Fig. 6). The final increase to the three rows of nanopillars achieves a double-Fano resonance. The first Fano resonance peak is formed by the TD and electric dipole (ED) resonance when the scattering power values are equal, and both interfere to cancel out each other to produce a radiation-free anapole mode. The second Fano resonance peak is formed by the resonant interference of the TD and MD to form the dark mode, whereas the remaining resonant modes act in the dark mode. The interference between the two modes forms the Fano resonance peak (Fig. 9). The sensitivity of methane volume fraction and the background refractive index can be measured simultaneously, and the simulation calculations show that the sensor has a high sensitivity (Fig. 12).

Conclusions Based on the high Fano resonance quality factor, Q , of the Fano resonance metasurface and the local characteristics of the electric field, this study designed a fully dielectric structure and investigated the relationship between the hypersurface structure parameters and the quality factor Q and modulation depth. Effective control of the single-Fano resonance to double-Fano resonance is achieved via essential parameter optimization. By comparing the sensitivities of the rectangular column and elliptical cylindrical metasurface structures with the same parameters, the rectangular column structure is selected, and its optimal parameters are determined. The quality factor of the rectangular column metasurface structure reaches 3408, and the modulation depth of the double resonance peak is close to 99%. Through simulations, CH₄ volume fraction sensitivity values can reach 1.57 nm/% (for dip1) and 1.66 nm/% (for dip2). The background refractive index sensitivities are 419.45 and 395.7 nm/RIU, and the figure of merit (FOM) values are 524.3 and 542.8 RIU⁻¹, respectively. Knowledge of linear algebra proves that the sensitivity error of the sensor is slight. In addition, the sensor can measure the deflection angle according to the magnitude of the resonance peak, and the manufacturing error tolerance of the sensor did not exceed 1.3 nm.

Key words sensor; Fano resonance; all-dielectric metasurface; methane sensor; polarization sensitivity; optical sensor