

基于金属裂环谐振器的太赫兹连续域束缚态超表面

张星源, 谷建强*, 师文桥

天津大学太赫兹研究中心精密仪器与光电子工程学院光电信息技术教育部重点实验室, 天津 300072

摘要 连续域束缚态(BIC)是位于系统辐射连续域内的束缚态。在太赫兹波段,BIC为超高品质因数(Q)的功能器件的研发提供了新思路。基于超晶格模式的对称性保护原理,设计并数值研究了由经典金属裂环谐振器(SRR)组成的太赫兹BIC超表面。在BIC向远场泄漏的过程中,通过改变SRR的间隙宽度,系统形成了可观测的准BIC(QBIC)模式。通过采用Drude模型,研究了金属材料的欧姆损耗对QBIC模式Q值的影响。提出的BIC和QBIC模式对入射角度也具有独特的响应特征。所提出的SRR基BIC超表面不仅为开发高Q太赫兹功能器件提供了一个机制清晰且易于实现的框架,而且从损耗和角度依赖特性等方面为后续太赫兹波段BIC超表面的研究提供了思路。

关键词 材料; 连续域束缚态; 太赫兹技术; 超表面; 等离子元

中图分类号 O436 **文献标志码** A

DOI: 10.3788/CJL220750

1 引言

近年来,太赫兹技术在光谱传感、安全成像、无线通信等方面的应用引起了研究者的广泛关注^[1-3]。在这些应用中,具有高品质因数(Q)的太赫兹功能器件如单频传感器^[4-6]、窄线宽滤波器^[7]和波分复用器^[8]的作用至关重要。而近年来以量子级联激光器为代表的太赫兹激光源研究^[9]和基于强场太赫兹技术的非线性研究^[10]也获得了长足的发展,在这些领域中,高Q值意味着更好的单色性、最大化的色散慢光以及更强的太赫兹-物质相互作用,是非常重要的性能指标。然而,已报道的太赫兹器件Q值多在10量级,无法满足实际的应用需求^[4,11-12]。连续域束缚态(BIC)的出现为实现高Q值太赫兹功能器件提供了新的途径^[13-14]。BIC的概念起源于量子力学^[15],是单粒子薛定谔方程的一类特殊解,其位于系统辐射的连续域内,但远场波函数为0(即束缚在近场)。因为是束缚态,所以BIC的Q值在理论上可以无限高;又因为处于连续域,所以BIC具有离散域束缚态所不具备的应用情景。这一概念被借鉴至宏观领域,作为实现超高Q值谐振器件的设计方法。此后,在声波、水波、电磁波等多个领域,宏观体系下的BIC现象得到了广泛的研究^[16-20]。而近年来,借助超表面极高的设计自由度和平面集成化的优势,实现了多款具有超高Q值的BIC光学超表面,并验证了BIC超表面在高灵敏阵列化光学传感、低阈值激光器和高效率光学谐波产生等

领域中的重要作用^[21-24]。在这些工作中,BIC主要通过三种方法实现,即结构对称保护、谐振之间破坏性干涉和逆向构造方法^[25-26],其中对称保护BIC因其清晰的物理图象和易于实现的优点而更受欢迎。到目前为止,此类BIC已经由多种超表面结构实现^[27],例如金属棒对^[28]、双开口裂环谐振器^[29]、块状半导体材料^[30]、纳米量级的带孔圆柱^[31]、倾斜棒对^[21]和自支撑结构^[32]等。

裂环谐振器(SRR)作为超表面中最早被研究、最具代表性的人工微结构,具有谐振强、原理清晰、易于加工的优点,已得到了大量的理论分析与实验验证^[33-36],但SRR在BIC中的应用还没有得到充分的研究。这一方面是因为金属SRR的欧姆损耗在光波段不能忽略,另一方面是因为光波段的SRR结构比介质谐振单元更难加工。在太赫兹波段,基于介质的超表面厚度达到百微米量级,制备难度增加,而金属的欧姆损耗则大大降低。如果利用经典的金属SRR来实现太赫兹波段的BIC,有望实现机制明了且应用方便的高Q值太赫兹功能器件。近两年来,已经有研究人员利用不同大小的SRR环^[37]以及SRR环中的不同模式^[38]来研究干涉相消对SRR中BIC的影响。2019年,Cong等^[29]开创性地在太赫兹波段对金属双开口裂环谐振器中的BIC进行了研究,但所用结构与经典的SRR不同,并指出若仅运用SRR自身结构的对称性保护来实现BIC,将限制BIC超表面的设计思路。而通常认为可忽略的欧姆损耗对太赫兹金属超表面

收稿日期: 2022-04-11; 修回日期: 2022-05-06; 录用日期: 2022-05-10; 网络首发: 2022-05-21

基金项目: 国家自然科学基金(61935015, 61975243, 62005193, 62027820)

通信作者: *gjg@tju.edu.cn

中的 BIC 和准 BIC (QBIC) 是否会有影响以及金属超表面中 BIC 的角度依赖性问题仍然没有得到详细讨论。

本文以经典的金属 SRR 为基本单元, 突破 SRR 自身结构的对称性, 将多个 SRR 排布组合构成新型超晶格。运用电磁模拟软件对 SRR 超晶格进行了数值仿真研究, 通过改变相邻 SRR 的开口宽度, 验证了金属 SRR 超表面中 BIC 的存在, 并同时获得了 BIC 泄漏引起的 QBIC 谐振。更重要的是, 通过运用 Drude 模型构建金属材料, 证明虽然太赫兹波段的欧姆损耗较小, 但 BIC 附近的 QBIC 谐振的 Q 值仍受到欧姆损耗的影响。此外, 通过模拟倾斜入射, 系统地讨论了所提出的太赫兹 BIC 超表面的角度响应特征。本文所设计的金属 SRR 超表面具有机制清晰、便于制备的特点, 同时从欧姆损耗与角度依赖两方面为后续的 BIC 超表面研究提供了新思路。

2 仿真分析

图 1(a) 展示了所用金属 SRR 的形状和尺寸, 其中金属环宽度 $s=8\ \mu\text{m}$, 开口宽度 $g=12\ \mu\text{m}$, 边长 $n=48\ \mu\text{m}$ 。本文所有 SRR 超晶格均由此周期为 $68\ \mu\text{m}$ 的 SRR 单元组成, 仅开口宽度 g 在讨论中会发生变化, SRR 超晶格以微扰对称形式形成 QBIC。将两个 SRR 以不同方式排列, 形成图 1(b)、(c) 所示的两种超晶格 ① 和 ②, 由超晶格 ① 或 ② 构成的太赫兹 BIC 超表面的概念图如图 1(e) 所示, 箭头代表入射波。以往研究均表明, SRR 中存在与偏振相关的多阶等离激元模

式^[39-40]。当电场平行于 SRR 开口时, 基模为最常提及的电感电容 (LC) 谐振模式。当坐标轴如图 1(a) 所示时, 沿 x 方向的电场矢量将会激发出 LC 谐振。为了弄清楚不同排布的 SRR 阵列中是否存在 BIC 模式, 运用 CST Microwave Studio 软件中的本征模求解器计算超晶格 ① 和 ② 的前 30 阶本征模式, 计算过程中 x 和 y 向的相位变化设为 0° , 对应于计算能带中 Γ 点的模式。计算中以理想导体 (PEC) 构建金属材料以消除欧姆损耗的影响, 介质衬底为无损耗的高阻硅, 折射率设为 3.4 ^[41]; 在 z 方向上, 结构前后增加空气层并设置边界条件为电壁。本征模的仿真结果如图 1(b)、(c) 所示, 超晶格 ① 和 ② 分别在 $0.400\ \text{THz}$ 和 $0.450\ \text{THz}$ 处形成各自的束缚态, 其电磁场在 z 方向被束缚, 不向远场辐射, 如图 1(d) 所示。因为 Γ 点对应垂直入射, 处于连续域中, 因此这两个束缚态即为 BIC, 记为 BIC I 与 BIC II。图 1(b)、(c) 所示的电场振幅分布和 SRR 上的电流分布说明: 1) BIC I 与 BIC II 均基于 SRR 的 LC 谐振, SRR 中的电流分布属于经典的 LC 环流; 2) 超晶格内两个 SRR 的电场呈反对称分布, 因此反向排布的 SRR 的远场辐射干涉相消, 电磁场束缚在近场区。这与 SRR 阵列的 LC 谐振有明显不同, 后者的所有 SRR 相位相同。

BIC 具有无限窄的线宽, 所有现有系统的频域分辨率均无法满足要求, 其无法在光谱上被直接观测到, 因此大多数已报道的工作均通过引入微扰来观察 BIC 转换为 QBIC 的过程以间接验证 BIC 的存在。如图 2(a)、(b) 所示, 本文通过修改超晶格中一个 SRR 的

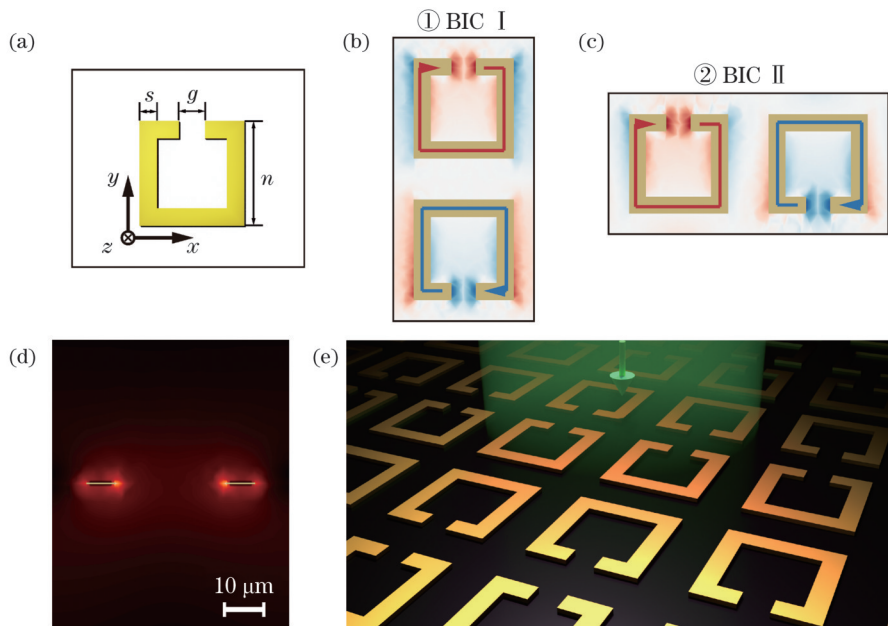


图 1 SRR 的结构及 BIC 场分布示意图。(a) SRR 尺寸示意图。(b) 超晶格 ① 中 BIC 电场的 x 分量分布; (c) 超晶格 ② 中 BIC 电场的 x 分量分布; (d) BIC 中 SRR 附近的场模式分布; (e) 所设计的结构示意图

Fig. 1 Diagrams of SRR structure and BIC field distribution. (a) Diagram of SRR dimension; (b) Distribution of x component of BIC electric field in superlattice ①; (c) distribution of x component of BIC electric field distribution in superlattice ②; (d) field mode distribution near SRR in BIC; (e) diagram of designed structure

开口宽度(在超晶格①中修改上方 SRR 的开口宽度,在超晶格②中修改左侧 SRR 的开口宽度)来引入结构微扰,破坏超晶格的对称性。而微扰引起的 BIC 泄漏则用 CST Microwave Studio 软件中的频域求解器进行仿真,其中材料的物构模型与本征模计算模型保持一致, x 和 y 向应用 unit cell 条件, z 向应用 open add space 条件,以 x 偏振的正入射平面波作为入射源,利用频域求解器测量光谱响应。模拟的带宽为 0.300~0.600 THz。时域仿真结果如图 2(c)、(d)所示,令结构的不对称度为 $\delta_g = g - 12$ 。可以看出,当 $\delta_g = 0$ 时,在本征模计算得到的 0.400 THz 和 0.450 THz 处,超晶格①和②构成的超表面的透射光谱上没有窄线宽的谐振,取而代之的是较宽的 SRR 的 LC 谐振。而当 $\delta_g \neq 0$ 时,0.400 THz 和 0.450 THz 附近则会出现不对称的 Fano 线性谐振,对于超晶格①其由 QBIC 谐振和 LC 谐振耦合而成,对于超晶格②其由 QBIC 谐振和 SRR 的非谐振连续域透射耦合而成。 δ_g 的正或负决定 Fano 谐振的频率高于或低于 BIC 频率。 $|\delta_g|$ 则决定

Fano 谐振线型的宽窄。伪彩图如图 2(e)、(f)所示,其中纵轴是 SRR 结构的不对称度 δ_g ,横轴为频率,垂直方向的虚线指示出了仿真计算出的 BIC 的频率值,小圈指示了 BIC 的位置,水平方向的虚线指示了图 2(c)、(d)中的透射谱所对应的截面位置,伪彩图亮度表示各 δ_g 下的透射谱振幅。随着 δ_g 从负向正变化,Fano 谐振线宽先从宽变窄再到消失($\delta_g = 0$),又从窄变宽,其频率则从低频向高频移动,Fano 谐振消失处的频率正好为 0.400 THz 和 0.450 THz。这种 BIC 与 QBIC 耦合出的 Fano 谐振随结构微扰的演化与已报道工作中的 BIC 验证方法完全吻合,从而证明了 BIC I 和 BIC II 的存在。根据 Koshelev 等^[27]的观点, $\delta_g \neq 0$ 时出现的 QBIC 谐振是由于结构的对称性被破坏后,相邻 SRR 的反相谐振不能完全干涉相消,从而形成远场泄漏。以超晶格①中 $\delta_g = 4 \mu\text{m}$ 时的 Fano 谐振为例,图 3(b)所示的透射谱中出现两个谐振谷,低频且线宽较窄的谐振谷来源于 QBIC 谐振。可见其电场分布[图 3(a)]与图 1(b)中 BIC I 的反对称电场分布类似,但由于两

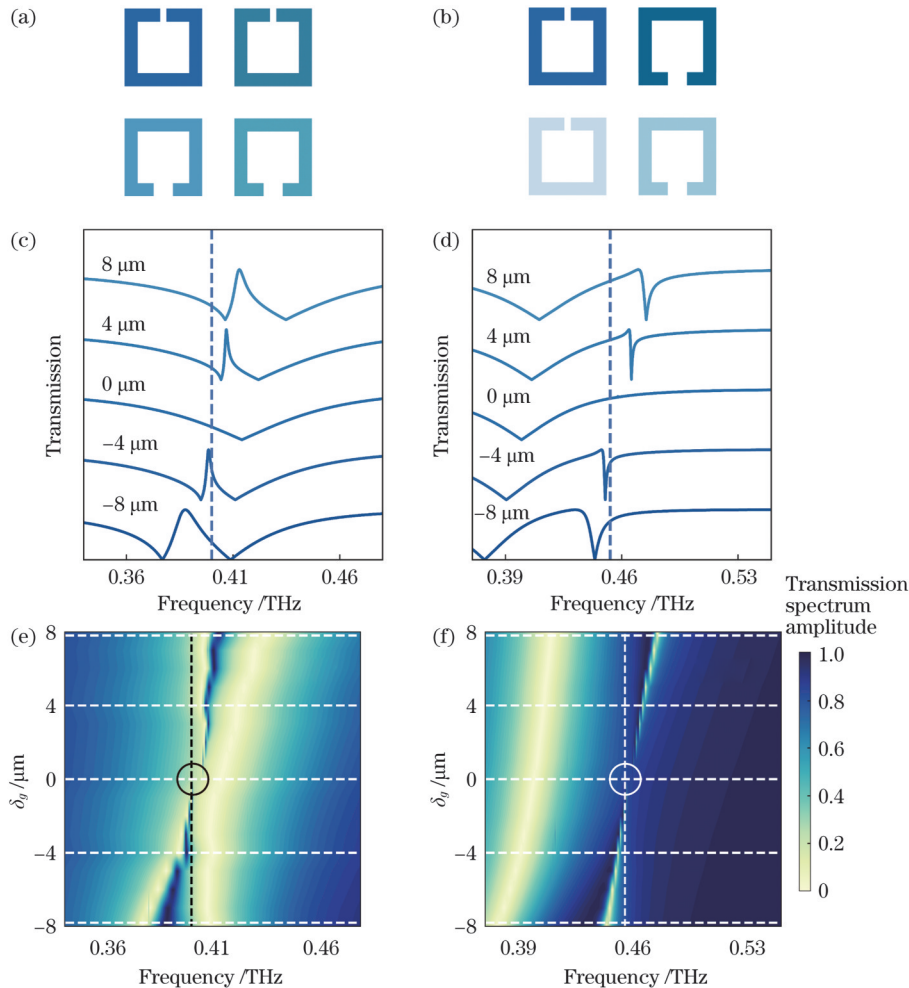


图 2 不同结构不对称度下的 QBIC 示意图。(b)破坏结构对称性后超晶格(a)①和(b)②的示意图;不同 δ_g 下超晶格(c)①和(d)②的透射谱;(e)BIC I与(f)BIC II在不同不对称度下的透射谱伪彩图

Fig. 2 Diagrams of QBIC under different structural asymmetric degrees. Schematics of superlattices (a) ① and (b) ② after breaking structural symmetry; transmission spectra for superlattices (c) ① and (d) ② under different δ_g ; color maps of transmission spectra corresponding to (e) BIC I and (f) BIC II under different asymmetric degrees

个 SRR 的谐振频率与辐射损耗不再相同,因此远场辐射不再完全相消。从图 2(c)、(d)中还可以看出,相邻 SRR 的开口相差越大,辐射泄漏越多, QBIC 模式及其耦合形成的 Fano 谐振的 Q 值越低。Koshelev 等^[27]的工作中提出, QBIC 的 Q 值与结构的不对称度之间呈现出二次反比的关系。我们可以利用 Fano 公式^[34,42]

$$T = t_0 \cdot \left| a_1 + ia_2 + \frac{b}{\omega - \omega_0 + i\gamma} \right|^2$$

对仿真结果进行拟

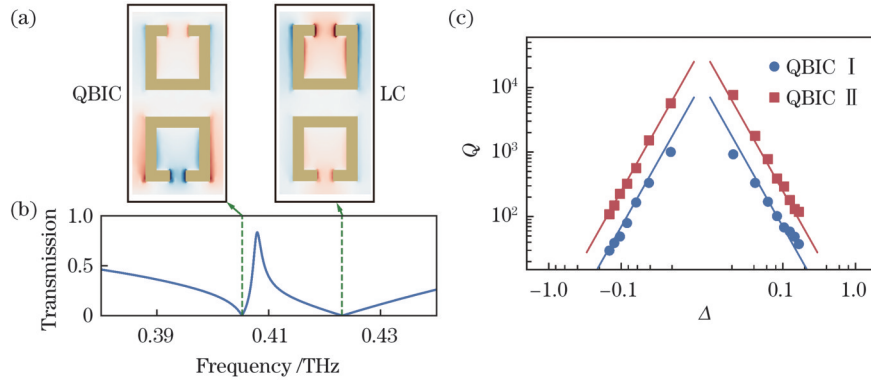


图 3 不对称结构中的谐振场模式及 Q 值随不对称度变化的示意图。(a)不同谐振的电场 x 分量的分布;(b) $\delta_g = 4 \mu\text{m}$ 时超晶格①的透射谱;(c) Q 值随不对称度的变化

Fig. 3 Diagrams of resonance field distributions in asymmetric structures and relationship between Q and asymmetric degree. (a) Distributions of x components of electric fields for different resonances; (b) transmission spectrum of superlattice ① when $\delta_g = 4 \mu\text{m}$; (c) relationship between Q and asymmetric degree

显然,引入更多 SRR 后,允许的排布形式也增多,因此本文提出的通过排布 SRR 形成超晶格的方法为基于 SRR 的 BIC、QBIC 超表面的设计提供了一种通用性极强的设计思路。此处以四个 SRR 组合为例展示此种方法的拓展能力。图 4(a)所示的超晶格③是由四个开口方向呈顺时针方向旋转的 SRR 组成。运用 CST Microwave Studio 软件中的本征模式求解器,计算得到在垂直入射下 (Γ 点),该超晶格存在两类由不同 SRR 的 LC 谐振干涉相消而形成的 BIC,频率分别为 0.380 THz 和 0.425 THz,记为 BIC III 和 BIC IV,如图 4(a)、(b)所示。有趣的是,因为更多 SRR 的加入, SRR 间 LC 谐振相互抵消的方式变多了。BIC III 和 BIC IV 虽然电场分布不同,但都基于 SRR 的 LC 谐振,且都形成了反对称的电场分布。与前两个超晶格一样,此处仍运用 CST Microwave Studio 软件中的频域求解器数值验证这两种 BIC 的存在。改变超晶格内左上角 SRR 的开口宽度,如图 4(c)所示。破坏结构的对称性使 BIC 转化为 QBIC 模式并与其他谐振或透射背景耦合形成 Fano 谐振,如图 4(d)所示,在透射谱上将会出现两个不同的 Fano 谐振,其来源于两个 QBIC 谐振。不同开口宽度下形成的透射谱伪彩图如图 4(e)所示,可以清楚地观测出典型 BIC 到 QBIC 的演化过程,验证了 BIC III 和 BIC IV 的存在。而超晶格③中两种 QBIC 的 Q 值情

合,其中 a_1, a_2 为实数,表征背景辐射, b 表示 Fano 谐振的强度, ω_0 表示 Fano 谐振的频率, γ 表示 Fano 谐振的总损耗,包含了辐射损耗与欧姆损耗两部分。根据 $Q = \frac{\omega_0}{2\gamma}$ 可以获得不同不对称度下 Fano 谐振的 Q 值,并将其绘制到双对数坐标轴中[图 3(c)],横坐标为 $\Delta = \delta_g/12$ 。可见对于超晶格①和②形成的 QBIC 谐振,其 Q 值和不对称度的关系与二次反比函数吻合良好。

况更为复杂,这一问题超出了本文的研究范畴,是后续研究的方向。

在以上讨论中,均忽略了金属和衬底材料的固有损耗。实际上,大量太赫兹波段超表面研究显示,电阻率高于 $20 \text{ k}\Omega \cdot \text{cm}$ 的高阻硅在太赫兹波段的吸收损耗确实非常低,且具有近于零的色散。而金属的欧姆损耗在大多数情况下也可以忽略,但具有超高 Q 值的 BIC 超表面是否仍可如此处理,在此之前未得到研究。我们以 $\delta_g = -8 \mu\text{m}$ 的超晶格①为例,数值讨论了几种不同金属材料对 QBIC 谐振的影响。研究方法是使用 Drude 模型取代 PEC 模型来计算金属材料的电导率,公式为

$$\sigma = \frac{\omega_p^2 \epsilon_0}{\omega_\tau}, \quad (1)$$

式中: ϵ_0 表示真空介电常数; ω_p 表示材料的等离子体频率; ω_τ 表示材料的电子碰撞频率。这种方法在以往的大量工作中被用于估计欧姆损耗对太赫兹超表面的影响,从而具有极高的可信性^[43]。之后以 Drude 模型描述金属物构参数,开展基于 CST Microwave Studio 软件中的频域模拟器的数值研究,结果如图 5(a)所示,金属的 Drude 模型的参数来自参考文献^[44]。值得注意的是,与 PEC 的计算结果相比, Drude 模型计算得到的 QBIC 的谐振强度明显较弱,以电导率最高的铜为例,其 Fano 谐振强度也仅为 PEC 的一半。通过计算

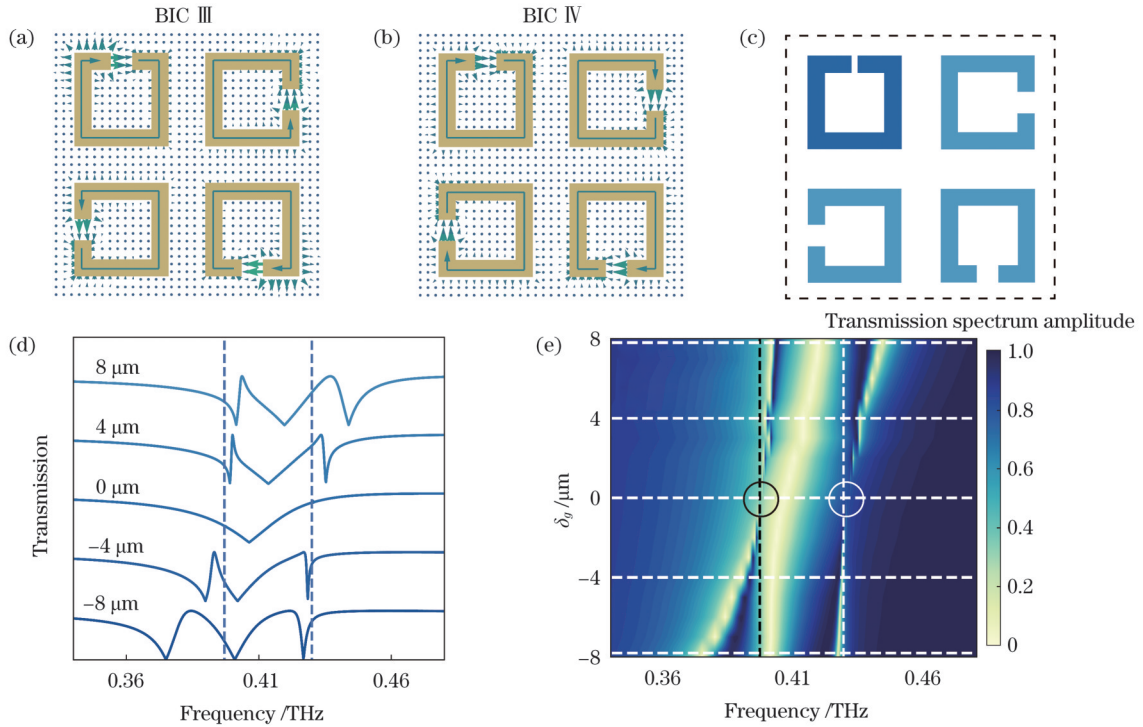


图 4 超晶格③中的 BIC 电场分布以及不对称结构中的透射谱。(a) 0.380 THz 处 BIC 的电场分布；(b) 0.425 THz 处 BIC 的电场分布；(c) 结构对称性破坏后的超晶格③示意图；(d) 结构对称性破坏后的透射谱；(e) 透射谱伪彩图

Fig. 4 Electric field distributions of BICs in superlattice ③ and transmission spectra in asymmetric structure. (a) Electric field distribution of BIC at 0.380 THz; (b) electric field distribution of BIC at 0.425 THz; (c) diagram of superlattice ③ after breaking structural symmetry; (d) transmission spectra after breaking structural symmetry; (e) color map of transmission spectra

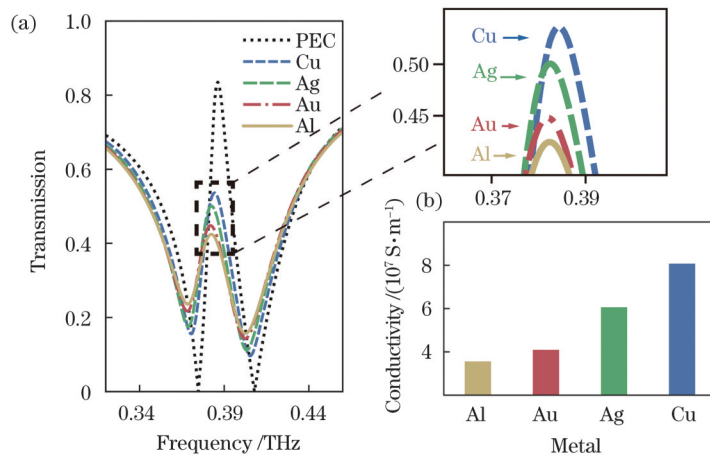


图 5 QBIC 与金属材料欧姆损耗之间的关系。(a) 不同金属构成的超晶格①的透射谱；(b) Drude 模型计算得到的金属材料的电导率
Fig. 5 Relationship between QBIC and ohmic loss of metal materials. (a) Transmission spectra of superlattices ① composed of different metals; (b) conductivity of metal materials calculated by Drude model

可知, Drude 模型下 QBIC 谐振的 Q 值普遍较低。根据我们的计算, PEC 材料的谐振 Q 值可以达到 30, 而在 Drude 模型下, Cu、Ag、Au、Al 四种金属材料的 Q 值分别为 19、16、14、13。图 5(b) 比较了太赫兹波段 Drude 模型下不同金属的电导率。结合图 5(b) 可知, 金属电导率越大, QBIC 的谐振强度越大, Q 值越高, 但各种金属之间的谐振差异并不明显。上述讨论表明, 虽然欧姆损耗在太赫兹超表面的研究中经常被忽略, 但在 BIC 超表面的研究中则必须加以考虑。Drude 模型能

够在数值研究中显著展示欧姆损耗对高 Q 值金属超表面的影响。

除材料的损耗外, 另一个影响 BIC 超表面响应的重要因素是入射角。在多个光波段 BIC 超表面研究中, 改变入射角也是一种引入结构外部不对称度的手段^[22,29,45]。而 BIC 或 QBIC 超表面对入射角的依赖性也关系到其在不同应用场景中的运用, 所以我们对由 SRR 组成的超晶格中的 BIC 和 QBIC 谐振开展了入射角依赖性的研究。方法是运用 CST Microwave Studio

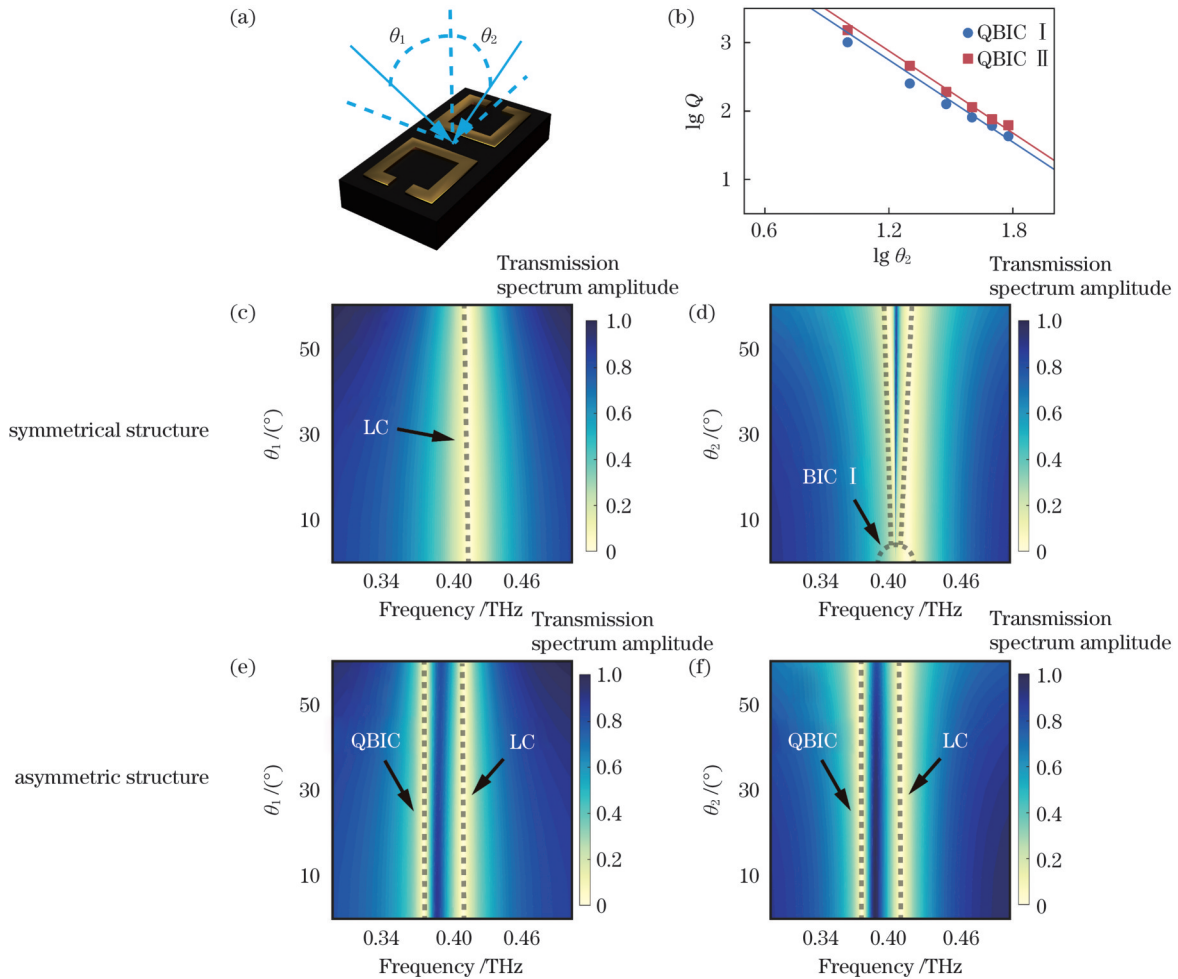


图 6 BIC/QBIC 随入射角的变化示意图。(a)入射角示意图;(b)QBIC 的 Q 值随入射角的变化;(c)~(f)超晶格①的透射谱随入射角的变化

Fig. 6 Relationship between BIC / QBIC and incident angle. (a) Diagram of incident angle; (b) Q of QBIC versus incident angle; (c)~(f)variation of transmission spectrum of superlattice ① with incident angle

软件中的频域求解器,设置结构入射波端口的角度,数值模拟各入射角下的透射谱。如图 6(a)所示,以超晶格①为例,研究其在 0.400 THz 处的 BIC 和 $\delta_g = -8 \mu\text{m}$ 时的由结构不对称性导致的 QBIC 模式,其中 θ_1 表示 x 偏振入射波为横磁(TM)波时的入射角度, θ_2 表示 x 偏振入射波为横电(TE)波时的入射角度。各倾斜入射角下的透射谱如图 6(c)~(f)所示。在超晶格为完全对称结构即处于 BIC 的条件下,当入射波为 TM 波时,改变 θ_1 ,透射谱上仍仅有较宽的 LC 谐振,且频率不变,入射角仅会影响 LC 谐振的线宽,角度越大,线宽越窄。而当入射波为 TE 波时,改变 θ_2 ,在 0.400 THz 附近,斜入射导致 Fano 谐振的出现,此谐振的线宽与入射角呈正相关。由图 2 的分析可知, Fano 谐振由 QBIC 与 LC 谐振的耦合形成,而根据场监视器的检查,由斜入射引起的 Fano 谐振具有与 BIC 类似的场分布。经计算,斜入射引起的 Fano 谐振的 Q 值同样与不对称度呈二次反比的关系,如图 6(b)所

示。而当 $\delta_g = -8 \mu\text{m}$ 时,即超晶格为不对称结构时,透射谱上出现了由结构不对称性导致的 QBIC 的 Fano 谐振的特征谱线。有趣的是,无论是 θ_1 还是 θ_2 发生变化,原本由超晶格结构不对称性导致的 QBIC 的谐振频率几乎均不发生变化。而当 θ_2 增加时, Fano 谐振的线宽有展宽的趋势,但未产生新的谐振。这是由于我们所设计的 BIC 是基于 SRR 的 LC 谐振,而 LC 谐振的频率与结构的参数密切相关,当系统的结构参数不改变时,斜入射角只会影响 QBIC 对外泄漏的辐射强度,而不会影响谐振的频率。因此,当结构的对称性被破坏时, θ_2 的增加只会导致 Fano 谐振出现一定的展宽趋势,而不会影响 QBIC 的谐振频率。超晶格②中的 BIC 和 $\delta_g = -8 \mu\text{m}$ 时 QBIC 的角度响应如图 7 所示,其显示出与超晶格①类似的谐振特性。以上系统研究说明, BIC 超表面的角度依赖性由超表面的具体结构决定,具体问题需要具体分析。

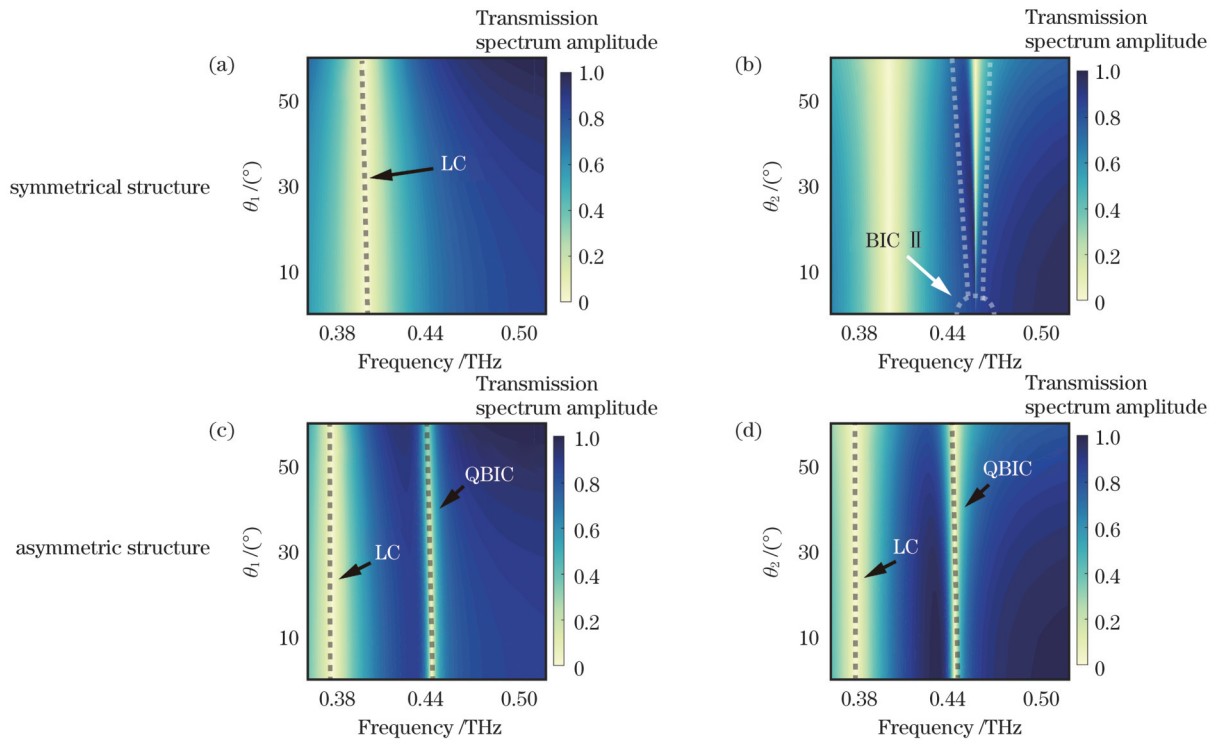


图 7 超晶格②的透射谱随入射角的变化

Fig. 7 Variation of transmission spectrum of superlattice ② with incident angle

3 结 论

利用对称保护性构造了以 SRR 为基础的超表面中的 BICs, 通过仿真获得了不同结构中的连续域束缚态。在破坏这些超表面结构的对称性时, BIC 将会转换为 QBIC, QBIC 的 Q 值随着结构不对称度的增大而减小。QBIC 的 Q 值与结构的不对称度以及金属材料的欧姆损耗有着较大的关系, 在 PEC 情况下 Q 值可以达到近 30, 而 Drude 模型中的 Q 值下降到 20 以下。此外, 所设计的结构具有一定的入射角依赖性, 在结构完全对称的条件下, 电矢量平行于狭缝的横电入射波斜入射时将会导致 BIC 的泄漏, 产生 QBIC 的线型, QBIC 的 Q 值随着入射角的增大而减小, 而横磁波则不会产生类似效应。在结构对称性遭到破坏时, 对于此时的 QBIC, 斜入射不会造成明显的影响。所设计的超表面具有结构简单、加工方便的特点, 为高 Q 值太赫兹器件的设计提供一定的参考。

参 考 文 献

- [1] Tonouchi M. Cutting-edge terahertz technology[J]. *Nature Photonics*, 2007, 1(2): 97-105.
- [2] Pawar A Y, Sonawane D D, Erande K B, et al. Terahertz technology and its applications[J]. *Drug Invention Today*, 2013, 5(2): 157-163.
- [3] Hangyo M. Development and future prospects of terahertz technology[J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2015, 54(12): 120101.
- [4] Singh R, Cao W, Al-Naib I, et al. Ultrasensitive terahertz sensing with high- Q Fano resonances in metasurfaces[J]. *Applied Physics Letters*, 2014, 105(17): 171101.
- [5] 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.
- [6] 王庆芳, 王泽云, 韩超, 等. 基于太赫兹超材料芯片的生物混合物定量检测研究[J]. *中国激光*, 2021, 48(23): 2314001.
- [7] Wang Q F, Wang Z Y, Han C, et al. Quantitative detection of biological mixtures based on terahertz metamaterial chip[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2021, 48(23): 2314001.
- [8] Reinhard B, Paul O, Rahm M. Metamaterial-based photonic devices for terahertz technology[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2013, 19(1): 8500912.
- [9] Schaafsma M C, Bhattacharya A, Rivas J G. Diffraction enhanced transparency and slow THz light in periodic arrays of detuned and displaced dipoles[J]. *ACS Photonics*, 2016, 3(9): 1596-1603.
- [10] Williams B S. Terahertz quantum-cascade lasers[J]. *Nature Photonics*, 2007, 1(9): 517-525.
- [11] Mittleman D M. Perspective: terahertz science and technology[J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 122(23): 230901.
- [12] Jansen C, Al-Naib I A I, Born N, et al. Terahertz metasurfaces with high Q -factors[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 98(5): 051109.
- [13] Ferraro A, Zografopoulos D C, Caputo R, et al. Guided-mode resonant narrowband terahertz filtering by periodic metallic stripe and patch arrays on cyclo-olefin substrates[J]. *Scientific Reports*, 2018, 8: 17272.
- [14] Singh R, Al-Naib I A I, Koch M, et al. Sharp Fano resonances in THz metamaterials[J]. *Optics Express*, 2011, 19(7): 6312-6319.
- [15] Fedotov V A, Rose M, Prosvirnin S L, et al. Sharp trapped-mode resonances in planar metamaterials with a broken structural symmetry[J]. *Physical Review Letters*, 2007, 99(14): 147401.
- [16] Neumann J, Wigner E P. Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen[M]//Wightman A S. *The collected works of Eugene Paul Wigner*. Heidelberg: Springer, 1993, 2875: 294-

- 297.
- [16] Linton C M, McIver M, McIver P, et al. Trapped modes for off-centre structures in guides[J]. *Wave Motion*, 2002, 36(1): 67-85.
- [17] Koch W. Acoustic resonances in rectangular open cavities[J]. *AIAA Journal*, 2005, 43(11): 2342-2349.
- [18] Evans D V, Porter R. Trapped modes embedded in the continuous spectrum[J]. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 1998, 51(2): 263-274.
- [19] Chen Y, Shen Z, Xiong X, et al. Mechanical bound state in the continuum for optomechanical microresonators[J]. *New Journal of Physics*, 2016, 18(6): 063031.
- [20] Cattapan G, Lotti P. Fano resonances in stubbed quantum waveguides with impurities[J]. *The European Physical Journal B*, 2007, 60(1): 51-60.
- [21] Tittel A, Leitis A, Liu M K, et al. Imaging-based molecular barcoding with pixelated dielectric metasurfaces[J]. *Science*, 2018, 360(6393): 1105-1109.
- [22] Kodigala A, Lepetit T, Gu Q, et al. Lasing action from photonic bound states in continuum[J]. *Nature*, 2017, 541(7636): 196-199.
- [23] Carletti L, Koshelev K, de Angelis C, et al. Giant nonlinear response at the nanoscale driven by bound states in the continuum [J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121(3): 033903.
- [24] 曾庆鹏, 胡放荣, 周远, 等. 基于双椭圆结构的高 Q 值太赫兹超材料传感器[J]. *光学学报*, 2021, 41(14): 1428001.
- Zeng Q P, Hu F R, Zhou Y, et al. High Q-value terahertz metamaterial sensor based on double ellipse structure[J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(14): 1428001.
- [25] Hsu C W, Zhen B, Stone A D, et al. Bound states in the continuum[J]. *Nature Reviews Materials*, 2016, 1: 16048.
- [26] Azzam S I, Kildishev A V. Photonic bound states in the continuum: from basics to applications[J]. *Advanced Optical Materials*, 2021, 9(1): 2001469.
- [27] Koshelev K, Lepeshov S, Liu M K, et al. Asymmetric metasurfaces with high-Q resonances governed by bound states in the continuum[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121(19): 193903.
- [28] Abujetas D R, van Hoof N, ter Huurne S, et al. Spectral and temporal evidence of robust photonic bound states in the continuum on terahertz metasurfaces[J]. *Optica*, 2019, 6(8): 996-1001.
- [29] Cong L Q, Singh R. Symmetry-protected dual bound states in the continuum in metamaterials[J]. *Advanced Optical Materials*, 2019, 7(13): 1900383.
- [30] Campione S, Liu S, Basilio L I, et al. Broken symmetry dielectric resonators for high quality factor Fano metasurfaces[J]. *ACS Photonics*, 2016, 3(12): 2362-2367.
- [31] Tuz V R, Khardikov V V, Kupriianov A S, et al. High-quality trapped modes in all-dielectric metamaterials[J]. *Optics Express*, 2018, 26(3): 2905-2916.
- [32] Fan K B, Shadrivov I V, Padilla W J. Dynamic bound states in the continuum[J]. *Optica*, 2019, 6(2): 169-173.
- [33] Gu J Q, Singh R, Liu X J, et al. Active control of electromagnetically induced transparency analogue in terahertz metamaterials[J]. *Nature Communications*, 2012, 3: 1151.
- [34] Srivastava Y K, Manjappa M, Cong L Q, et al. Ultrahigh-Q Fano resonances in terahertz metasurfaces: strong influence of metallic conductivity at extremely low asymmetry[J]. *Advanced Optical Materials*, 2016, 4(3): 457-463.
- [35] Xu N N, Singh R, Zhang W L. High-Q lattice mode matched structural resonances in terahertz metasurfaces[J]. *Applied Physics Letters*, 2016, 109(2): 021108.
- [36] Aydin K, Cakmak A O, Sahin L, et al. Split-ring-resonator-coupled enhanced transmission through a single subwavelength aperture[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(1): 013904.
- [37] Zhao X G, Chen C X, Kaj K, et al. Terahertz investigation of bound states in the continuum of metallic metasurfaces[J]. *Optica*, 2020, 7(11): 1548-1554.
- [38] Niu J Q, Zhai Y Q, Han Q Q, et al. Resonance-trapped bound states in the continuum in metallic THz metasurfaces[J]. *Optics Letters*, 2021, 46(2): 162-165.
- [39] Cong L Q, Srivastava Y K, Singh R. Tailoring the multipoles in THz toroidal metamaterials[J]. *Applied Physics Letters*, 2017, 111(8): 081108.
- [40] Al-Naib I, Yang Y P, Dignam M M, et al. Ultra-high Q even eigenmode resonance in terahertz metamaterials[J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 106(1): 011102.
- [41] Grischkowsky D, Keiding S, van Exter M, et al. Far-infrared time-domain spectroscopy with terahertz beams of dielectrics and semiconductors[J]. *Journal of the Optical Society of America B*, 1990, 7(10): 2006-2015.
- [42] Han S, Cong L Q, Srivastava Y K, et al. All-dielectric active terahertz photonics driven by bound states in the continuum[J]. *Advanced Materials*, 2019, 31(37): 1901921.
- [43] Azad A K, Zhao Y G, Zhang W L, et al. Effect of dielectric properties of metals on terahertz transmission subwavelength hole arrays[J]. *Optics Letters*, 2006, 31(17): 2637-2639.
- [44] Ordal M A, Bell R J, Alexander R W, Jr, et al. Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared: Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W[J]. *Applied Optics*, 1985, 24(24): 4493-4499.
- [45] Hsu C W, Zhen B, Lee J, et al. Observation of trapped light within the radiation continuum[J]. *Nature*, 2013, 499(7457): 188-191.

Terahertz Metasurface with Bound States in Continuum Based on Metal Split Ring Resonator

Zhang Xingyuan, Gu Jianqiang*, Shi Wenqiao

Key Laboratory of Optoelectronic Information Technology, Ministry of Education, School of Precision Instrument and Opto-Electronics Engineering, Center for Terahertz Waves, Tianjin University, Tianjin 300072, China

Abstract

Objective Bound states in the continuum (BIC) refers to the non-radiative state located in the radiative continuum. BIC provides a novel method for the research and development of functional devices with ultra-high quality factor (Q) in the terahertz band. It has the potential to be used in several applications, including narrow linewidth filtering, terahertz slow

light devices, and the enhanced interaction between terahertz waves and matter. In this study, terahertz BIC metasurfaces composed of classical metallic split ring resonators (SRRs) are proposed and numerically studied based on the symmetry protection principle of the structure. The leakage of BIC to the far field can be observed in the spectrum by changing the gap width of SRR to form an observable quasi BIC (QBIC) mode. Moreover, the influence of ohmic loss on the Q of QBIC is systematically studied by applying the Drude model. The proposed BIC and QBIC also have unique responses to the incident angle. The BIC based on SRR metasurface proposed in this study not only provides a new framework with clear mechanism and easy implementation for the development of high- Q terahertz functional devices, but also provides research ideas for subsequent studies on the terahertz BIC metasurface from the aspects of loss and tilted incidence.

Methods The metasurfaces are composed of different superlattices based on classical metallic SRRs. A single unit cell is composed of either 2 or 4 SRRs. For the superlattices with two SRRs in the lattice, two adjacent SRRs with different orientations are arranged vertically [superlattice ① in Fig. 1(b)] or horizontally [superlattice ② in Fig. 1(c)] to form two types of superlattices. For the superlattices composed of four lattices, each SRR orients in a clockwise direction (superlattice ③ in Fig. 4). All metasurfaces have 2- μm -thick high resistivity silicon wafer as substrate. The refractive index of silicon is set as 3.4 and the SRR is set as perfect electric conductor (PEC). The structure is simulated in CST microwave Studio.

First, the BICs in superlattices ①, ②, and ③ are numerically investigated using the eigen-mode solver. Subsequently, the frequency solver is applied to calculate the transmission of the corresponding QBIC metasurfaces by breaking the structural symmetry of the BICs. The field monitor is used to observe the field distribution to clarify the relationship between a BIC and its derivative QBIC. The evolution from BIC to QBIC is effectively presented by changing the gap widths of the SRRs, and the Fano coupling mode is used to calculate the Q of the QBICs. The influence of ohmic loss on the QBICs is investigated by applying the Drude model to the SRRs. Tilted incidence is realized by changing the input and output directions of the ports in the frequency solver, and the unique dependence of the QBICs in superlattices ① and ② is obtained.

Results and Discussions Only one BIC exists in superlattices ① and ②. For superlattice ③, which is composed of 4 SRRs, there are two different BICs existing in the metasurface. QBICs with Fano line shape appear in the transmission spectra when the symmetry of the superlattices is broken. The Q of QBIC exhibits an inverse quadratic correlation with the asymmetric parameter. The residual ohmic loss in the SRRs deteriorates the Q of the QBICs, in which the Q of the metasurface calculated using the Drude model drops to half compared to the result with PEC. Regarding the incidence dependence, a tilted incidence with transverse electric (TE) polarization induces a leakage of the BICs in superlattices ① and ②, in which the linewidth of the derivative QBICs is proportional to the oblique angle. However, the tilted incidence with transverse magnetic (TM) polarization will not perturb the BICs in the superlattices.

Conclusion In this study, we construct symmetry-protected BICs in three superlattices based on SRRs. Subsequently, the bound states at Γ point in these superlattices are investigated via numerical simulation. When the structural symmetry is broken, BICs are converted to the corresponding QBICs, and the Q of the QBICs decreases with the increase in structural asymmetry. The Q of the QBIC is also strongly correlated to the ohmic loss in the SRRs, which was generally neglected in previous studies related to terahertz metasurfaces developed by SRRs. In addition, the superlattices ① and ② have a certain pitch angle dependence. Oblique incidence of TE polarization with an electric vector parallel to the gap can lead to the leakage of BIC. The Q of the formed QBIC decreases with the increase in incident angle, while the TM wave does not have a similar effect. The metasurface designed in this study has a clear mechanism and is conveniently fabricated, which provides a novel direction for the design of high- Q terahertz devices.

Key words materials; bound states in continuous domain; terahertz technology; meta-surface; plasmon