激光写光电子学进展

杂化连续域内束缚态中的环形偶极子

丛龙庆**,许桂珍*

南方科技大学工学院电子与电气工程系,广东 深圳 518055

摘要 基于连续域内束缚态(BIC)的超表面具备在时间和空间上实现高效光场调控的能力。在时间维度上,BIC理论上 可实现无穷长的辐射光子寿命,因此在激光谐振腔、非线性光学、传感等领域展现了极好的应用价值。为深入理解BIC 及衍生谐振特性,基于双开口金属谐振器构成的杂化BIC超表面,探讨由于能带折叠引起的折叠谐振与准BIC谐振之间 的特性。利用数值模拟、多极子分析和太赫兹光谱实验验证环形偶极子在这两类谐振辐射特性中的重要作用。此外,通 过对比两种不同能带折叠方式的超晶格,进一步确认环形偶极子对折叠谐振品质因数的调制特性。深入理解谐振中多 极子的散射特性对获取高品质因数谐振腔具有重要作用,为切实推动超表面在太赫兹传感、调制器和非线性相互作用等 领域的应用奠定理论基础。

关键词 连续域束缚态;环形偶极子;超表面;多极子分析;太赫兹 中图分类号 O436 文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP231429

Toroidal Dipole in Hybrid Bound States in the Continuum

Cong Longqing^{*†}, Xu Guizhen[†]

Department of Electrical and Electronic Engineering, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, Guangdong, China

Abstract Metasurfaces based on bound states in the continuum (BIC) are capable of manipulating light in both temporal and spatial dimensions. In the temporal dimension, BIC possesses an infinite photon lifetime and is widely used in the laser cavity, nonlinear optics, and sensing. In this study, we investigate the properties of band-folded resonances and quasi-BIC based on a hybrid BIC metasurface. The key role of a toroidal dipole in distinguishing the two-type resonances is investigated via multipolar analysis, and numerical simulations, and verified by terahertz experiments. Moreover, hybrid BIC metasurfaces with supercells of different band folding features are compared, further demonstrating the essential role of the toroidal dipole in determining quality factors of these resonances. A deep understanding of the scattering properties of multipolar in resonance plays an important role in obtaining high-quality factor resonant cavities, laying a theoretical foundation for promoting the application of metasurfaces in terahertz sensing, modulators, and nonlinear interactions. **Key words** bound states in the continuum; toroidal dipole; metasurfaces; multipolar analysis; terahertz

1引言

超材料(metamaterials)具备卓越的亚波长局域场 增强和调控能力,可以大大增强光与物质相互作用强 度^[13]。利用超表面原理对空间光波前的任意调控可 以进一步提升超材料对电磁波调制的功能性和多样 性^[4]。这种超表面通过控制结构单元的空间分布,一 方面可以实现对电磁波偏振、幅度、相位、频率、波前等 特性的调控,另一方面可以大大提升局域场强度,从而 减小器件厚度,满足器件小型化和集成化的需求^[5-6]。 在提升超表面局域场强度方面,探索新颖物理机制增 强局域场一直是研究的热点方向^[7]。在时间维度上, 局域场的增强体现为更长的光子寿命,这在光谱上体 现为极高品质因数(Q)的谐振。利用超材料提升品质 因数方面的主要思路包括采用法诺(Fano)谐振或者 通过多极子分析(multipolar analysis)方法进一步降低

先进成像

收稿日期: 2023-06-01; 修回日期: 2023-06-21; 录用日期: 2023-08-01; 网络首发日期: 2023-08-11

基金项目:国家自然科学基金(62175099)、广东省基础与应用基础研究基金(2023A1515011085)、深圳市高等院校稳定支持计划(20220815151149004)、南方科技大学科研启动基金

通信作者: *conglq@sustech.edu.cn

特邀研究论文

辐射损耗^[80]。其中,环形偶极子(toroidal dipole)作为 一个非标准的多极子展开分量,在利用超材料抑制辐 射损耗方面展现了重要作用^[10-11]。近年来,连续域内 束缚态(BIC)理论被重点研究,理论上可以实现无穷 大的辐射品质因数^[12-16]。BIC作为无穷周期结构的本 征模式(束缚态),即使在能带结构的光锥以上(即连续 域)仍可以被完美束缚在二维平面内而不与自由空间 耦合,从而可以得到无穷大的光子寿命,成为一种广泛 使用的、提升光与物质相互作用的机制。

虽然BIC具备理想的辐射品质因数,但普通对称 保护型BIC的Q与波矢大小k之间具有负二次方的定 量关系[17-18],通常波矢上极小微扰会引起Q值的迅速 恶化。加工中不可避免会引入缺陷、失序等问题,从而 大大降低实际样品可获得的谐振品质因数。融合BIC 的思路从调制Q与k之间的指数系数上入手(从-2次 方到-6次方),很大程度上缓解了Q值的恶化速度, 是一种非常有效的机制^[14]。但该思路需精确控制微结 构单元几何尺寸并只适用于同时具备对称保护型和偶 发型BIC的能带,要求较苛刻。近期,Fan等^[19]提出一种 更广泛适用的杂化BIC方法,该方法可以有效提高对称 保护型BIC的整体品质因数和对外界缺陷的鲁棒性。 这种杂化BIC的特点可以通过倒易空间布里渊区(BZ) 的能带分析来理解,微结构单元杂化的过程导致晶格 周期加倍,相应的布里渊区收缩,从而提升Q与k之间 的比例系数,达到提升BIC品质因数鲁棒性的目的。 与此同时,周期结构阵列单元的周期变化还导致布里 渊区能带折叠,从而将光锥以下高对称点的所谓导模 (guided modes)折叠到 Γ 点。因此,在远场的光谱上 还可以观察到由于能带折叠带来的更多谐振。虽然, 前期工作已经详细分析了原始 BIC 在能带折叠前后 其Q与k之间的定性、定量关系,提出一种面向对称 保护型BIC的、提升品质因数数值和鲁棒性的通用方 法,但没有深入理解由于能带折叠而引入的折叠谐振 特性。

本文以双开口环谐振器(DSRR)为基础,具体讨 论在杂化BIC超材料中由于能带折叠产生的折叠谐振 与原始BIC由于对称破缺形成的准BIC谐振之间的特 性与差异。实验、模拟和多极子展开分析表明,环形偶 极子在区分这两类谐振特征上扮演了非常重要的角 色。根据局域场分布特性,折叠谐振面内振荡的环形 偶极子被激发,从而导致远场辐射无法被完全抑制,因 此折叠谐振并非对称保护型BIC。进一步通过对比两 种不同类型的能带折叠方式,确认环形偶极子在折叠 谐振中对其品质因数的调制特性。

2 结构设计和理论模型

以典型的双开口环谐振器为基础,具体讨论杂化 BIC在能带折叠过程产生的有趣物理现象。以DSRR

第 60 卷第 18 期/2023 年 9 月/激光与光电子学进展

所在的正方形结构作为周期单元(unit cells)所构成的 均匀超表面支持对称保护型BIC^[17]。这种BIC可以通 过移动开口位置打破DSRR的C。对称性,转变为辐射 的准BIC谐振(U-BIC),从而在远场的透射光谱上观 察到法诺谐振。如图1所示,如果选择*x*轴方向相邻 的两个DSRR形成一个矩形结构作为周期单元(x-杂 化BIC,H,-BIC),其对应的布里渊区则相应收缩为正方 形结构单元的一半,而且正方形布里渊区对应的高对 称点相应折叠到矩形布里渊区对应的位置,如图1(c) 所示。伴随这个折叠过程,原始在正方形布里渊区光 锥以下X点的导模谐振(GR)会被折叠到 Γ 点,成为辐 射模式,如图1(d)所示。通过选择性打破双原子结构 单元中一个 DSRR 结构对称性($d=15 \mu m$,即 $\alpha =$ 0.128)的方式实现结构单元从正方形向矩形转变,采 用成熟的光刻、蒸镀工艺加工样品并利用太赫兹时域 光谱系统测试这两种晶格类型的DSRR超表面在远场 的光谱性质。通过对比这两种晶格的光谱,可以清晰 地观察到正方形晶格的1个法诺谐振分裂为矩形晶格 的3个法诺谐振,如图2(b)所示。对比这两类透射光 谱并配合能带折叠分析,可以确定谐振II继承了正方 形晶格的原始BIC谐振,而谐振I、III则是X点折叠而 来的导模。另一方面,在同一对称破缺度下,这3个谐 振表现出不同的品质因数,下面分析其原因。

2 器件制备和测试

2.1 器件制备

杂化 BIC 超表面样品采用传统的光刻工艺进行加 工,基片为尺寸为 15 mm×15 mm的、厚度为 500 μm 的高阻硅片(电阻率>10000 Ω·cm)。首先,在清洗干 净的上下表面抛光的高阻硅上以 5000 r/s的速度旋涂 2 μm的光刻胶(RZJ 304.50),旋涂时间为 30 s,然后在 100 ℃的温度下烘烤 180 s。接下来,使用传统的紫外 光刻技术(SUSS-MA6)将掩膜版上的 DSRR 图案转 移到光刻胶上,然后用 RZX 3038 显影剂显影 30 s,去除 DSRR 结构的光刻胶,随后以 120 ℃的温度将图案化 的样品烘烤 90 s 固化。最后,使用电子束蒸发 (TF500)的方式在硅表面沉积厚度为 200 nm 的金属 铝层,将样品在丙酮溶液中以 60 ℃的温度浸泡 30 min 去除剩余的光刻胶。得到的*x*-杂化 BIC 超表面样品显 微镜图像如图 2(a)所示。

2.2 实验测试

本实验采用太赫兹时域光谱系统对样品进行测试。通过对测试样品获得的时域谱进行傅里叶变换获得样品的透射谱。同时,以相同厚度的高阻硅裸片的透射谱作为参考,最终得到归一化的透射谱,如图2(b)中的橙色点线所示。样品 DSRR 结构参数如下: $p=73 \mu m_s d=60 \mu m_s w=8 \mu m_s g=3 \mu m_s d=15 \mu m_s$

利用 Fano 线型公式对实验测试和仿真获得的透射谱进行 拟合^[19], 分别获得谐振的 Q值, 如图 2(b)所



图1 x-杂化 BIC 的双开口环谐振器及其能带折叠示意图。(a)周期 p=73 μm、长 l=60 μm 的 DSRR 构成的单原子正方形晶格; (b)两个 DSRR 构成的 x 轴方向的周期为 2p 的双原子矩形超晶格,其中,α=|l₁-l₂|/(l₁+l₂),为对称破缺度,l₁和 l₂分别为 DSRR 左右金属条的长度;(c)基于布里渊区的能带折叠示意图,其中,单原子晶格的 X 点折叠到双原子超晶格 BZ 中 Γ 点; (d)单原子晶格(蓝色圆圈)和超晶格(橙色圆点)的能带结构图及其折叠对应关系,其中,灰色虚线表示光锥。仿真中采取完 美电导体层和无硅衬底结构模拟获得特征频率

Fig. 1 Schematic diagrams of H_x -BIC metasurfaces and band folding. (a) One unit cell of U-BIC lattice composed of DSRRs, where period $p=73 \ \mu\text{m}$ and length $l=60 \ \mu\text{m}$; (b) one unit cell of H_x -BIC lattice composed of dual DSRRs along x axis in a supercell, $\alpha = |l_1 - l_2|/(l_1 + l_2)$, represents asymmetry parameter, where l_1 and l_2 denote the total lengths of left and right metallic branches of DSRRs; (c)band folding of Brillouin zone, where the X-point of a single atomic lattice is folded into a diatomic superlattice BZ Γ point; (d) band structure diagrams and their folding relationships of U-BIC lattice (blue circles) and H_x -BIC lattice (orange dots), where gray dotted line represents light line. Perfect electric conductor and structures without substrate were used for DSRRs in simulations to calculate eigenvalues

示。需要注意的是,仿真中DSRR周期单元采用完美 电导体层代替金属铝层,从而获得谐振的本征辐射Q 值。样品的铝金属层引入了材料的欧姆损耗,导致实 际的Q值小于仿真获得的Q值,但各谐振的Q值趋势 仍保持一致。

3 结果分析和讨论

采用电磁模拟软件(COMSOL Multiphysics 和 CST Studio Suite)分析这3个谐振的表面电流,如 图2(c)所示。谐振I和谐振II在每个DSRR上形成首 尾相接的环形电流,支持磁偶极子(m_z)振荡,但区别在 于谐振I的相邻磁偶极子反相而谐振II同相。z向磁 偶极子本身不会向面外辐射,但对称破缺后,DSRR各 个分支上反相的表面电流由于幅度差异将无法完美抵 消,从而产生等效的净电偶极子(p_y),打开与自由空间 耦合的通道,在远场光谱上可观察到法诺谐振。这是 谐振I和谐振II在对称破缺的情况下可以在远场观测 到法诺谐振的主要原因。谐振III的表面电流则形成

四偶极子(quadrupole)。由于谐振 I 和谐振 II 的相似 性,重点分析这两个谐振。谐振I和谐振II虽然表面 电流的分布相似,但对应的多极子展开性质不同,从而 导致二者品质因数上的差异。谐振II继承了原始正方 形晶格的多极子散射特性,仍然保持对称保护型BIC 的属性,即在对称情况下没有与自由空间耦合的通道, 而对称破缺时产生等效的p。向自由空间辐射。与原始 BIC唯一区别在于该折叠BIC的Q与k之间的比例系 数相比原始BIC提升了4倍^[19]。谐振I是由正方形晶 格X点的导模谐振折叠而来的,其表面电流在一个长 方形结构单元内产生了相邻的反相磁偶极子对,这种 首尾相连的反相磁偶极子会激发y方向振荡的环形偶 极子(T_x),从而打开与自由空间耦合的通道。T_x的产 生不受对称破缺的束缚,即使在对称结构下仍然存在, 意味着谐振I并非对称保护型BIC。但相较于具有较 大对称破缺度DSRR中电偶极子较大的辐射强度,T, 强度较弱,因此在对称情况下,谐振I仍具有非常高的 品质因数(非无穷大);而随着对称破缺程度增加,p,成



图 2 *x*-杂化 BIC 超表面的实验和仿真结果。(a) *x*-杂化 BIC 超表面的显微镜图像;(b) 实验(橙色点线)和数值仿真(灰色实线)获得 的幅度透射谱以及归一化的多极子展开散射强度;(c) γ偏振激发的3个谐振模式的表面电流分布

Fig. 2 Experimental and simulated results of H_x -BIC metasurface. (a) Microscopic images of H_x -BIC metasurfaces; (b) amplitude transmission spectra of experimental (orange dotted line) and numerical simulations (gray solid line), and normalized scattering power of multipoles from simulations; (c) surface current distributions of three resonances with *y*-polarized incidence

分逐渐主导了谐振 I 的辐射强度,因此谐振 I 的特性将随着对称破缺度增加而最终与谐振 II 逐渐趋近。

谐振 I 和谐振 II 的 Q 与对称破缺度(α)曲线可以 清晰反映二者的辐射特性,如图 3 所示。对谐振 I 来 说,T,将与对称破缺诱导的 p,辐射之间产生耦合,因此 其辐射品质因数相对于α的变化趋势与谐振 II 典型的 负二次关系不同,尤其是在波矢幅值较小或者对称破 缺度较小的范围内。从图 3(b)可以看出:当α较小时, T,贡献的散射幅度占主导;随着α增加,电偶极子 p,的 幅度增强并逐渐占主导,因此环形偶极子的影响在α 较小的时候较为明显。从二者的相对相位来看,根据 多极子展开的分析[或者从图 2(b)~(I)的表面电流分 布也可定性分析二者相位关系],二者的相位相反。因 此二者耦合的相消干涉作用导致谐振 I 的散射相较于 谐振 II 更小,具体体现在α较小时,谐振 I 的品质因数 下降更为缓慢,如图 3(a)插图所示。但随着α继续增 加,p,的幅度逐渐增强并大于 T_y, T_y带来的辐射影响可 以忽略,此时谐振 I 的 Q 与α关系逐渐与谐振 II 趋近。



图 3 数值分析结果。(a)电磁仿真获得的谐振 I(蓝色)和谐振 II(橙色)对应的 Q 与 α 关系曲线;(b)谐振 I(蓝色)和谐振 II(红色)本 征频率处的 p_v和 T_v分量与 α 关系曲线

Fig. 3 Numerical simulation results. (a) Relationship curve between the Q corresponding to resonance I (blue) and resonance II (orange) obtained from electromagnetic simulation and α ; (b) relationship curve between the p_y and T_y components at the intrinsic frequencies of resonance I (blue) and resonance II (red) and α

DSRR形成一个矩形结构单元,即*y*-杂化BIC[H_y-BIC, 图 4(a)]。与之前的讨论类似,这一类杂化BIC的布 里渊区仍然由原始正方形的布里渊区对应折叠形成,

为进一步验证环形偶极子对能带折叠过程谐振性 质的影响,设计了另一类杂化BIC超表面进行仿真模 拟、实验测试以及数值分析:选择 y轴相邻的两个



Fig. 4 Simulation and experimental results of H_y -BIC metasurfaces. (a) H_y -BIC lattice composed of dual DSRRs along y axis, where period $p=73 \ \mu\text{m}$, length $l=60 \ \mu\text{m}$, and $d=15 \ \mu\text{m}$ ($\alpha=0.128$), the inset depicts the band folding of H_y -BIC lattice from U-BIC lattice; (b) surface current distributions of three resonances in H_y -BIC metasurfaces with y-polarized incidence; (c) amplitude transmission spectra of experimental (orange dotted line) and numerical simulations (gray solid line) and the normalized scattering power of multipoles from simulations; (d) relationship curve between the Q corresponding to resonance I (blue) and resonance II (orange) and α ; (e) relationship curve between the scattering intensity of p_y and T_x components at the intrinsic frequencies of resonance I (blue) and resonance II (red) and α

原始在 Y 点的导模被折叠到 Γ 点,从而可以与自由空 间耦合。根据能带折叠、远场光谱测试结果可知,原始 的准 BIC 谐振仍然分裂为 3 个法诺谐振,如图 4(c)所 示。通过表面电流、多极子展开分析可知,这 3 个谐 振的性质与 x-杂化 BIC 一致。但由于 y-杂化 BIC 与 x-杂化 BIC 中 DSRR 不同的空间拓扑分布和 DSRR 的 各向异性,谐振 I 激发的环形偶极子沿 x 轴振荡(T_x),与 对称破缺诱导的电偶极子正交(p_y),如图 4(b)、(c)所 示,因此理想情况下二者不会发生耦合,而 T_x将一直作 为辐射通道 向自由空间泄漏能量。基于此,由于额外 辐射通道 T_x的存在,谐振 I 的 Q 与 α 关系曲线将一直小 于谐振 II,二者不会有交点。图 4(d)、(e)中的数值模拟 和多极子分析的结果证实了这一点。因此,可以进一 步确认环形偶极子在谐振 I 和谐振 II 中扮演的角色。

4 结 论

总的来说,本文通过电磁模拟、多极子分析和太赫 兹光谱实验,验证了通过能带折叠将原始的导模折叠到 Γ点之后形成的谐振与原始的BIC之间的性质差异: 环形偶极子扮演了很重要的角色。通过对比*x*-杂化和 *y*-杂化两种类型晶格的能带折叠结果,验证了环形偶 极子对谐振特性的调制效应。由于环形偶极子的存

特邀研究论文

第 60 卷第 18 期/2023 年 9 月/激光与光电子学进展

在,无论是*x*-杂化还是*y*-杂化晶格,折叠谐振 I并非对称保护型 BIC。但由于*x*-杂化晶格的环形偶极子与 电偶极子平行,通过精确匹配二者的幅度和相位,有 可能在 off-*Γ*点形成无辐射的偶然型 BIC,但*y*-杂化 晶格则不存在偶然型 BIC。这项工作从环形偶极子 的角度理解能带折叠诱导的谐振性质,对设计高品质 因数谐振腔、提升谐振稳定性具有很好的指导意义, 也为基于超表面的太赫兹传感、调制器应用奠定 基础。

参考文献

- Luk'yanchuk B, Zheludev N I, Maier S A, et al. The fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials[J]. Nature Materials, 2010, 9(9): 707-715.
- [2] Chen H T, Taylor A J, Yu N F. A review of metasurfaces: physics and applications[J]. Reports on Progress in Physics, 2016, 79(7): 076401.
- [3] Kuznetsov A I, Miroshnichenko A E, Brongersma M L, et al. Optically resonant dielectric nanostructures[J]. Science, 2016, 354(6314): aag2472.
- [4] Genevet P, Capasso F, Aieta F, et al. Recent advances in planar optics: from plasmonic to dielectric metasurfaces
 [J]. Optica, 2017, 4(1): 139-152.
- [5] 丛龙庆.主动式太赫兹超材料器件综述[J].中国激光, 2021,48(19):1914003.
 Cong L Q. Active terahertz metadevices[J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(19):1914003.
- [6] Xing H Y, Fan J X, Lu D, et al. Terahertz metamaterials for free-space and on-chip applications: from active metadevices to topological photonic crystals [J]. Advanced Devices & Instrumentation, 2022, 2022: 9852503.
- [7] Xu G Z, Xing H Y, Xue Z Q, et al. Recent advances and perspective of photonic bound states in the continuum[J]. Ultrafast Science, 2023, 3: 0033.

- [8] Fano U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts[J]. Physical Review, 1961, 124(6): 1866-1878.
- [9] Limonov M F, Rybin M V, Poddubny A N, et al. Fano resonances in photonics[J]. Nature Photonics, 2017, 11 (9): 543-554.
- [10] Kaelberer T, Fedotov V A, Papasimakis N, et al. Toroidal dipolar response in a metamaterial[J]. Science, 2010, 330(6010): 1510-1512.
- [11] Cong L Q, Srivastava Y K, Singh R. Tailoring the multipoles in THz toroidal metamaterials[J]. Applied Physics Letters, 2017, 111(8): 081108.
- [12] Hsu C W, Zhen B, Lee J, et al. Observation of trapped light within the radiation continuum[J]. Nature, 2013, 499(7457): 188-191.
- [13] Hsu C W, Zhen B, Stone A D, et al. Bound states in the continuum[J]. Nature Reviews Materials, 2016, 1: 16048.
- [14] Jin J C, Yin X F, Ni L F, et al. Topologically enabled ultrahigh-Q guided resonances robust to out-of-plane scattering[J]. Nature, 2019, 574(7779): 501-504.
- [15] Kühner L, Sortino L, Berté R, et al. Radial bound states in the continuum for polarization-invariant nanophotonics[J]. Nature Communications, 2022, 13: 4992.
- [16] Zhang X D, Liu Y L, Han J C, et al. Chiral emission from resonant metasurfaces[J]. Science, 2022, 377 (6611): 1215-1218.
- [17] Cong L Q, Singh R. Symmetry-protected dual bound states in the continuum in metamaterials[J]. Advanced Optical Materials, 2019, 7(13): 1900383.
- [18] 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.
- [19] Fan J X, Li Z L, Xue Z Q, et al. Hybrid bound states in the continuum in terahertz metasurfaces[J]. Opto-Electronic Science, 2023, 2(4): 230006.