

## 栅格超构表面与微缺陷耦合光散射特性分析

巩蕾<sup>1</sup>, 吴振森<sup>2</sup>, 于洁<sup>1</sup>, 王海斌<sup>1</sup>, 王利国<sup>1</sup>, 杨利红<sup>1</sup>, 阳志强<sup>1\*</sup><sup>1</sup>西安工业大学光电工程学院, 陕西 西安 710021;<sup>2</sup>西安电子科技大学物理与光电工程学院, 陕西 西安 710071

**摘要** 为精准高效调校并检测微纳超构表面, 基于时域多分辨率分析(MRTD)方法研究了栅格微纳超构表面与掩埋微缺陷的耦合散射问题。从 Maxwell 方程出发, 引入多分辨率概念, 建立耦合散射模型, 推导出散射场, 并与时域有限差分(FDTD)方法的计算结果进行对比, 以验证 MRTD 方法的正确性并分析其优点。结合含微缺陷的栅格超构表面场分布, 给出研究缺陷各参数对超构光学系统影响的必要性。通过数值计算分析缺陷尺寸、掩埋深度及相对方位等因素对耦合光散射特性的影响。上述结果为功能性表面设计、超灵敏检测、散射峰值方向及频率选择等领域和方向提供技术支持。

**关键词** 散射; 栅格超构表面; 微缺陷; 场分布; 耦合

中图分类号 O436

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.1629001

## Light Scattering Characteristic Analysis of Grid Metasurfaces Coupled with Microdefects

Gong Lei<sup>1</sup>, Wu Zhensen<sup>2</sup>, Yu Jie<sup>1</sup>, Wang Haibin<sup>1</sup>, Wang Liguang<sup>1</sup>, Yang Lihong<sup>1</sup>,  
Yang Zhiqiang<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>School of Photoelectric Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an 710021, Shaanxi, China;

<sup>2</sup>School of Physics and Optoelectronic Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, Shaanxi, China

**Abstract** In order to adjust and detect micro-nano metasurfaces accurately and efficiently, the problem of coupling scattering between a grid micro-nano metasurface and buried micro-defects is studied based on the multi-resolution time domain (MRTD) method. The concept of multi-resolution is introduced, and the coupling scattering model is established from the Maxwell equation. The scattering field is derived and compared with the finite difference time domain (FDTD) method. The correctness of MRTD is verified and its advantages are analyzed. According to the field distribution of the grid metasurface containing micro-defects, the necessity of studying the influence of various parameters of defects on the optical system of metamaterials is given. Then, the effects of the parameters such as defect size, buried depth, and relative orientation on the coupling scattering characteristics are analyzed numerically. The results provide technical supports for the fields and directions of functional surface design, ultrasensitive detection, scattering peak orientation, and frequency selection.

**Key words** scattering; grid metasurfaces; microdefects; field distribution; coupling

## 1 引言

微纳米光学周期超构表面在各类功能性超表面设计、光场调控和目标光学特性控制等领域具有重要学术意义和广泛应用价值<sup>[1-4]</sup>。光学超构表面的快速发展提升了对基底和膜系纯净度及高精密切超构光学系统可靠性的要求。

随着周期结构尺度逐渐达到纳米量级, 在加工过程中不慎引入的微纳米级微小缺陷将与微纳周期结构单元相互作用, 使得传输的光波严重损耗, 进而带来散射角谱展宽、离激元近场散射等负面效应, 严重影响整个光学系统性能<sup>[5-6]</sup>。在微纳米周期超构表面光学特性研究中, 需要考虑制造过程中引入的缺陷对周期超表面多维度光学特性的影响, 然而目前研究很少涉及

收稿日期: 2022-01-28; 修回日期: 2022-02-22; 录用日期: 2022-03-07

基金项目: 国家自然科学基金(62071359, 61905187)、陕西省教育厅重点科研计划(20JS059)、西安工业大学校长基金面上培育项目(XGPY200206)

通信作者: \*yangzhiqiang@xatu.edu.cn

此方面。

近些年国内外学者采用不同方法、基于不同单元结构的超构表面所具备的独特光学性能从理论和实验方面展开大量研究工作。Chen 等<sup>[7]</sup>采用严格耦合波理论方法,数值研究了 5 种纳米尺度狭缝剖面在横向磁波入射时的光学响应(吸收率、反射率和透射率)。Ray 等<sup>[8]</sup>通过镀制一种去湿金属薄膜形成干蚀刻掩模,并肯定了超构表面对光线传播控制的完美性。Gallant 等<sup>[9]</sup>通过控制晶体几何形状的生长,研制了纳米尺度各向异性螺旋结构超构表面。Lussange 等<sup>[10]</sup>研究了介质光栅微尺度散射,重点讨论了光栅间距等多个因素对超表面吸收率的影响。Chen 等<sup>[11]</sup>研究了纳米压印技术并制备了具有高反射特性的圆柱结构微纳结构膜系。Kim 等<sup>[12]</sup>研制出极高透射率的新型砷化镓(GaAs)亚波长结构。东南大学王继成团队<sup>[13-15]</sup>在金属-电介质结构的基础上提出基于金属狭缝阵列的各向异性偏振分束器以及可变包层等离子体传感器。浙江大学沙威及安徽大学黄志祥团队<sup>[16-17]</sup>提出金属-绝缘体-金属波导与等离子体在金属-绝缘体界面上的并联耦合等多种新结构。除此之外,国内亦有很多团队开展大量工作,如复旦大学周磊教授团队,南京大学、东南大学、苏州大学等多个单位的多位学者针对亚波长二维表面浮雕结构、蛾眼抗反射微结构、新型人工电磁超材料、电子斗篷、亚波长波纹金属结构表面等进行了系统研究,并取得了阶段性丰硕成果,在此不一一详述。此前有关超材料及超表面的研究多从工程角度出发,学者们重点关注性能实现及设计制造,对超表面及材料深层的物理机理及特性考虑比较少并且没有考虑到实际制造过程中不慎引入的和周期单元数量级相当的缺陷,本文的重点之一将讨论分析缺陷各物性参

数对超表面耦合光场的影响。

由于要在纳米尺度上精准操纵材料的微结构,所以超构表面制作过程通常耗时冗长且价格昂贵。为了提高超构表面的性能并降低成本,国内外众多学者首先从理论研究入手展开研究,如平面波展开法<sup>[18]</sup>、严格耦合波分析法<sup>[19-20]</sup>、有限元法<sup>[21-22]</sup>、时域有限差分(FDTD)方法<sup>[23-25]</sup>、时域多分辨分析(MRTD)方法等<sup>[26]</sup>。相比而言,本文将 MRTD 方法有效应用在微纳米超构表面研究中,从 Maxwell 方程出发,发挥 MRTD 方法具有良好色散特性的优势,通过对尺度函数和小波函数进行有效选择及展开,降低空间网格的抽样率,大大节约计算机内存,从而解决了 FDTD 方法中计算量和计算精度之间的矛盾问题。

本文结合微纳周期超构表面无损检测工艺实际情况,基于时域多分辨分析方法研究了栅格微纳超构表面与体缺陷的耦合散射问题。从 Maxwell 方程出发,引入多分辨概念,建立微纳周期超结构与掩埋缺陷-粒子缺陷复合散射模型,给出含微缺陷的栅格超构表面场分布,并通过数值计算分析缺陷个数、尺寸及相对方位等因素对复合光散射特性的影响。

## 2 散射建模及 MRTD 方法关键技术

### 2.1 栅格超构表面与微缺陷复合散射模型

微纳超构表面制备经历清洗、涂胶、匀胶、曝光、刻蚀等一系列工序,难免会掩埋夹杂有气泡、针孔、氧化物、灰尘颗粒等的体缺陷<sup>[27]</sup>。面向典型周期超构表面,本文选择掺杂有因制造过程中不慎随机产生的氧化物缺陷的单晶硅栅格微纳超构表面作为研究对象,图 1(a)为微纳超构表面的三维结构,图 1(b)为切面结构,图 1(c)为俯视面结构。

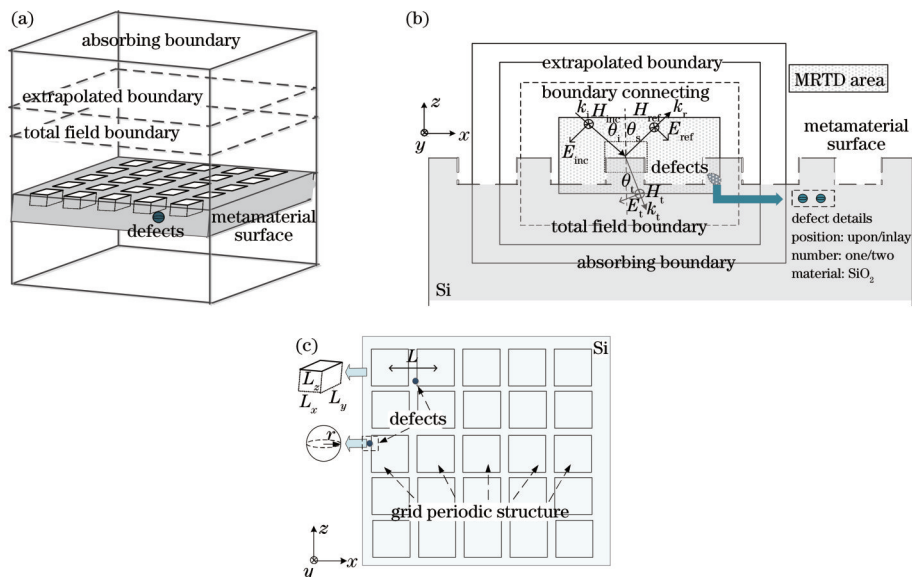


图 1 栅格超构表面与微缺陷耦合散射模型示意图。(a)三维结构;(b)切面结构;(c)俯视面结构

Fig. 1 Schematic diagrams of coupled scattering model between grid metasurface and microdefects. (a) 3D structure; (b) section structure; (c) top view structure

栅格单元周期结构的长、宽及深度分别为  $L_x, L_y, L_z$ , 缺陷半径为  $r$ , 掩埋深度为  $D$ , 相邻栅格中心之间的距离为  $L$ 。入射波波长为  $\lambda$ , 自由空间波数  $k=2\pi/\lambda$ , 入射高斯光束通过焦平面的功率  $P=200\text{ mW}$ 。入射波的入射角为  $\theta_i$ , 散射角为  $\theta_s$ 。MRTD 计算区域划分如图

1(a)、(b)所示。本文基础理论框架基于 C++ 所编译。

### 2.2 基于 MRTD 的耦合散射场推导

基于 Maxwell 旋度方程的展开, 以  $x$  方向上电场为例, 电磁场分量分别用 Daubechies 尺度函数、时间上用矩形脉冲函数进行展开, 得到

$$E_x(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{\infty} E_{i+0.5,j,k}^{\phi,n} \phi_{i+0.5}(x) \phi_j(y) \phi_k(z) h_n(t), \quad (1)$$

$$H_y(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{\infty} H_{i+0.5,j,k+0.5}^{\phi,n+0.5} \phi_{i+0.5}(x) \phi_j(y) \phi_{k+0.5}(z) h_{n+0.5}(t), \quad (2)$$

$$H_z(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{\infty} H_{i+0.5,j+0.5,k}^{\phi,n+0.5} \phi_{i+0.5}(x) \phi_{j+0.5}(y) \phi_k(z) h_{n+0.5}(t), \quad (3)$$

式中:  $i \in [I_{t,\min}, I_{t,\max} - 1]$ ,  $I_{t,\min}$  为网格中  $t$  时刻电流强度最小值,  $I_{t,\max}$  为网格中  $t$  时刻电流强度最大值;  $j \in [J_{t,\min}, J_{t,\max}]$ ,  $J_{t,\min}$  为网格中  $t$  时刻电流密度最小值,  $J_{t,\max}$  为网格中  $t$  时刻电流密度最大值;  $k \in [K_{t,\min} - L_s + 1, K_{t,\max} - 1]$ ,  $K_{t,\min}$  为网格中  $t$  时刻磁场强度最小值,  $K_{t,\max}$  为网格中  $t$  时刻磁场强度最大值,  $L_s = 2N - 1$ ,  $N$  为 Daubechies 小波函数的阶数;  $E_{i+0.5,j,k}^{\phi,n}$ 、 $H_{i+0.5,j,k+0.5}^{\phi,n+0.5}$ 、 $H_{i+0.5,j+0.5,k}^{\phi,n+0.5}$  为场展开系数;  $i, j, k, n$  分别为三维空间坐标与时间尺度, 对应的离散公式为  $x = i\Delta x, y = j\Delta y, z = k\Delta z, t = n\Delta t$ ,  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  为空间与时间的离散间隔;  $h_n(t)$  为矩形脉冲函数。

而言, 它的紧支撑域为  $[0, 3]$ , 即  $L_s = 3$ 。当  $\nu > 2$  时, 由紧支撑域的概念可知  $a(\nu) = 0$ ; 且当  $l < 0$  时,  $a(\nu)$  具有对称关系  $a(-1 - \nu) = a(-\nu)$ , 于是只需获得  $0 \leq l \leq 2$  区间内  $a(l)$  的值即可进行计算。表 1 给出 Daubechies 尺度函数不同阶数的连接系数, 其中  $M_1$  为一阶矩(期望)。

表 1 Daubechies 尺度函数不同阶数的连接系数  
Table 1 Connection coefficients of different orders of Daubechies scale function

$\nu$	$D_1$	$D_2$	$D_3$	$D_4$
0	1	1.2291666667	1.2918129281	1.3110340773
1	—	-0.0937500000	-0.1371343456	-0.1560100710
2	—	0.0104166667	0.0287617723	0.0419957460
3	—	—	-0.0034701413	-0.0086543236
4	—	—	0.0000080265	0.0008308695
5	—	—	—	0.0000108999
6	—	—	—	-0.0000000041
$M_1$	—	0.6339743121	—	1.0053923835

为了便于 Galerkin 检验,  $h_n(t)$  和  $\phi_i(\nu)$  的定义如下:

$$h_n(t) = h(t/\Delta t - n), \quad (4)$$

$$\phi_i(\nu) = \phi(\nu/\Delta \nu - i), \quad \nu = x, y, z, \quad (5)$$

式中:  $\phi_i(\nu)$  为具有紧支撑域的 Daubechies 小波函数。对于  $N$  阶 Daubechies 小波函数  $D_N$  而言, 紧支撑域为  $[0, 2N - 1]$ , 表明连接系数  $a(\nu)$  仅在有限区域内有值, 而在该区域外值全为 0, 该支撑区域为  $[-(2N - 1), (2N - 1) - 1]$ , 用  $L_s$  表示  $2N - 1$ , 并将其称为小波基函数的有效支撑尺寸。

选取  $\phi_{i+0.5}(x) \phi_j(y) \phi_k(z) h_{n+0.5}(t)$  作为测试函数, 进行标准 Galerkin 检验<sup>[28]</sup>, 并与场进行内积运算可得

当  $N=1$  时, Daubechies 尺度函数退化为 Haar 尺度函数, 假设当  $N=2$  时, 对于 Daubechies-2 小波函数

$$\begin{aligned} & \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{\infty} \epsilon E_{i'+0.5,j',k'}^{\phi,n'} \langle \phi_{i'+0.5}(x), \phi_{i+0.5}(x) \rangle \langle \phi_{j'}(y), \phi_j(y) \rangle \langle \phi_{k'}(z), \phi_k(z) \rangle \left\langle \frac{\partial h_{n'}(t)}{\partial t}, h_{n+0.5}(t) \right\rangle + \\ & \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{\infty} \sigma E_{i'+0.5,j',k'}^{\phi,n'} \langle \phi_{i'+0.5}(x), \phi_{i+0.5}(x) \rangle \langle \phi_{j'}(y), \phi_j(y) \rangle \langle \phi_{k'}(z), \phi_k(z) \rangle \langle h_{n'}(t), h_{n+0.5}(t) \rangle = \\ & \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{\infty} H_{i'+0.5,j'+0.5,k'}^{\phi,n'+0.5} \langle \phi_{i'+0.5}(x), \phi_{i+0.5}(x) \rangle \left\langle \frac{\partial \phi_{j'+0.5}(y)}{\partial y}, \phi_j(y) \right\rangle \langle \phi_{k'}(z), \phi_k(z) \rangle \langle h_{n'+0.5}(t), h_{n+0.5}(t) \rangle - \\ & \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{\infty} H_{i'+0.5,j',k'+0.5}^{\phi,n'+0.5} \langle \phi_{i'+0.5}(x), \phi_{i+0.5}(x) \rangle \langle \phi_{j'}(y), \phi_j(y) \rangle \left\langle \frac{\partial \phi_{k'+0.5}(z)}{\partial z}, \phi_k(z) \right\rangle \langle h_{n'+0.5}(t), h_{n+0.5}(t) \rangle, \quad (6) \end{aligned}$$

式中:  $\epsilon$  为介质的介电系数;  $\sigma$  为介质的电导率。

经过计算与化简, 可得到适用于程序中电场在  $x$  方向上分量的场展开系数:

$$E_{i+0.5,j,k}^{\phi,n+1} = \frac{2\epsilon - \sigma\Delta t}{2\epsilon + \sigma\Delta t} E_{i+0.5,j,k}^{\phi,n} + \frac{2}{2\epsilon + \sigma\Delta t} \sum_{\nu=-L_s}^{L_s-1} a(\nu) \left( H_{i+0.5,j+\nu+0.5,k}^{\phi,n+0.5} \frac{\Delta t}{\Delta y} - H_{i+0.5,j,k+\nu+0.5}^{\phi,n+0.5} \frac{\Delta t}{\Delta z} \right), \quad (7)$$

最后对场分别在各方向区域进行修正,以  $E_x$  为例,  $E_x$  修正迭代公式如下(其他区域均可参考此方向进行修正):

$$\left( E_{i+0.5,j,k}^{\phi,n+1} \right)^{(\text{scat})} = \left( E_{i+0.5,j,k}^{\phi,n} \right)^{(\text{scat})} + \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta y} \sum_{\nu=-L_x}^{L_x-1} a(\nu) \left( H_{i+0.5,j+\nu+0.5,k}^{\phi,n+0.5} \right)^{(\text{scat})} - \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta z} \left\{ \sum_{\nu=-L_x}^{K_{i,\min}-k-1} a(\nu) \left( H_{i+0.5,j,k+\nu+0.5}^{\phi,n+0.5} \right)^{(\text{scat})} + \sum_{\nu=K_{i,\min}-k}^{L_x-1} a(\nu) \left[ \left( H_{i+0.5,j,k+\nu+0.5}^{\phi,n+0.5} \right)^{(\text{tot})} - \left( H_{i+0.5,j,k+\nu+0.5}^{\phi,n+0.5} \right)^{(\text{inc})} \right] \right\}, \quad (8)$$

式中:上标(scats)、(tot)和(int)分别代表散射场、总场和入射场。

### 3 数值计算及讨论分析

#### 3.1 方法有效性对比

图 2 为  $5 \times 5$  阵列排布的单晶硅栅格超构表面的计算结果,其中入射光为 P 偏振,入射波长为  $0.633 \mu\text{m}$ ,入射角为  $\theta_i = 0^\circ$ ,单元栅格尺寸为  $2.5\lambda \times 2.5\lambda \times 4.0\lambda$ 。相邻栅格中心之间的距离为  $L = 3.2\lambda$ 。分别采用基于 Daubechies-2~Daubechies-4 小波函数的 MRTD 方法进行计算并与 FDTD 方法作比较,FDTD 方法是本团队早期工作的手写代码<sup>[29]</sup>,已利用 CST 等软件对其进行校正和核对,以证明其有效性。

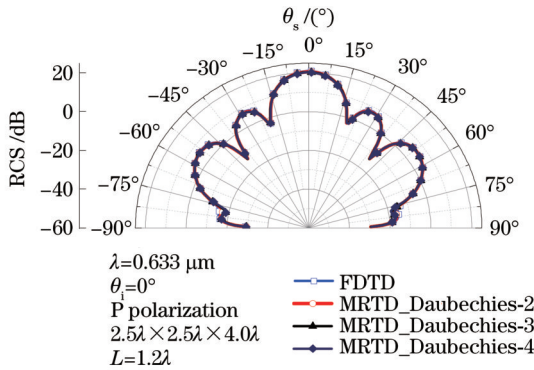


图 2 MRTD 与 FDTD 结果对比

Fig. 2 Comparison of MRTD and FDTD results

由图 2 可以看出,基于 MRTD 方法的 3 阶消失矩 Daubechies 小波函数结果与 FDTD 方法结果均较好地吻合。由于交叉偏振散射截面值非常小,对于散射场特性的分析意义不大,从课题组前期工作得知在光学周期超表面质量及特性检测中建议采用 P 偏振光<sup>[30]</sup>,P 偏振光更有利于缺陷散射场的获取和特性分析<sup>[31]</sup>,因此文中数值算法只讨论同偏振条件下的散射场。从 2~4 阶消失矩 Daubechies 小波函数的计算结果来看,尽管随着消失矩的增大,计算精度有所提升,但是这会以牺牲计算效率作为代价。2 阶消失矩 Daubechies 小波函数能够满足此计算精度。

#### 3.2 含微缺陷的栅格超构表面场分布

图 3 为基于 MRTD 方法给出的含缺陷粒子的单晶硅栅格超构表面  $H_x$  和  $H_y$  磁场分布情况。其中缺陷粒子半径  $r = 0.5\lambda = 0.3 \mu\text{m}$ ,掩埋深度  $D = 0.5\lambda = 0.3 \mu\text{m}$ ,其他参量同图 2,其中,图 3(a)中 6 个小图分别反映了单晶硅栅格超构表面磁场分量  $H_x$  从局部栅格到整体的场分布变化。图 3(b)分别给出了缺陷深

度  $D = 0.5\lambda$  和  $D = 0.8\lambda$  时,单晶硅栅格超构表面磁场分量  $H_x$  的分布情况。

从图 3(a)中可以看出,尽管缺陷粒子的尺寸极小,但在缺陷出现的地方,从数值上反映为场值增大。由图 3(b)可以看出,随着缺陷深度的增加,其散射电磁场值在不断增加,但这对超构表面其他单元的耦合散射场影响不大,仅严重影响本单元的场。此处,仅考虑了单一缺陷的简单情况,缺陷彼此之间亦会有彼此影响,第 3.3 节中会对双缺陷间相互耦合作用进行详细讨论。从物理意义上讲,缺陷的存在破坏了微纳超结构中的对称性,极大影响了超构表面的场分布,进而对光学系统整体性能产生巨大影响。由此可见,缺陷的存在不容忽视。相反,可以利用缺陷实现局部光场增强、聚焦调整光场方向等有意义的工作。因此,第 3.3 节中将进一步采用 MRTD 方法给出缺陷与单晶硅栅格耦合场计算,分析缺陷自身物性参数对光场分布的影响并提炼出影响规律。

#### 3.3 缺陷特征参数对单晶硅栅格超构表面散射场的影响

耦合散射模型中与缺陷直接相关的参数为:缺陷半径  $r$ ,掩埋深度  $D$  和缺陷粒子之间的间距  $l$ 。鉴于缺陷密度不会太大,因此文中只考虑双缺陷粒子之间的相互作用,如图 4 所示。参数如下:入射波长为  $0.633 \mu\text{m}$ ,入射角为  $\theta_i = 0^\circ$ ;单晶硅栅格超构表面为  $5 \times 5$  栅格阵列结构,基底单晶硅折射率为  $3.880 + 0.020i$ ,栅格单元尺寸为  $2.5\lambda \times 2.5\lambda \times 4.0\lambda$ 。缺陷粒子材质为  $\text{SiO}_2$  氧化物,折射率为 1.457。

##### 3.3.1 缺陷尺寸对单晶硅栅格超构表面耦合散射场的影响

图 5 给出了单晶硅栅格超构表面中不同尺寸  $\text{SiO}_2$  缺陷粒子的双站雷达散射截面(RCS)角分布结果,缺陷粒子掩埋深度  $D = 0.8\lambda = 0.5 \mu\text{m}$ ,缺陷尺寸分别为  $r = 0.6\lambda, 0.8\lambda, \lambda, 1.2\lambda, 1.4\lambda$ 。由图 5 可以得出:随着粒子半径增大,散射场总体在增大;当粒子半径  $r$  与掩埋深度  $D$  相当时,在  $(-15^\circ, 15^\circ)$  探测角度范围之间,耦合散射场角分布出现双峰值,见空心圆圈线和五角星线。随着粒子尺寸  $r > D$  时,在探测角敏感区域  $(-15^\circ, 15^\circ)$  之间,缺陷从掩埋状态变为半镶嵌状态。因此探测光场的表面散射场整体增大同时峰值明显。缺陷在掩埋状态时,通过与耦合场相互作用消耗光场能量。在探测角度为  $10^\circ$  左右时,RCS 角分布差异最大,此处产生的差值场贡献主要来自于缺陷状态从掩埋到镶嵌的改变,即缺陷粒子的贡献场。由此可见,在实际工程中,探测角度可以稳定在  $10^\circ$  左右,同时依据耦合散射场峰值个数及 RCS 数值来初步判定粒子的

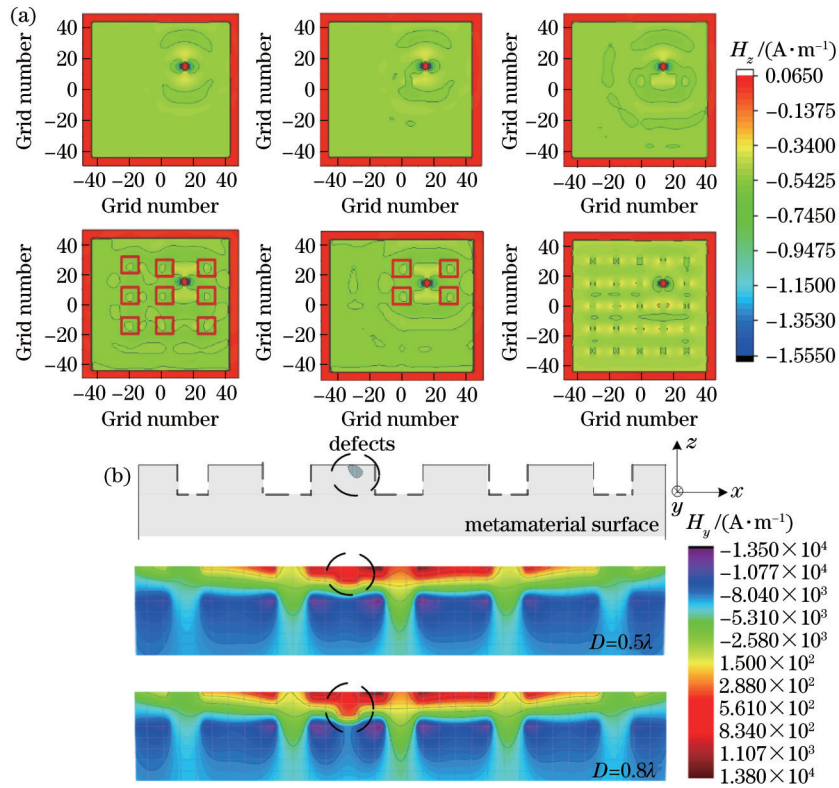


图 3 含缺陷粒子的单晶硅栅格超构表面  $H_z$  和  $H_y$  磁场分布。(a) 单晶硅栅格超构表面由局部到整体的  $H_z$  磁场分量; (b) 缺陷深度不同时单晶硅栅格超构切面磁场  $H_y$  分布图

Fig. 3  $H_z$  and  $H_y$  magnetic field distributions on a single crystal silicon grid metasurface containing defective particles. (a) Local to global component of  $H_z$  magnetic field on a single crystal silicon grid metasurface; (b) magnetic field  $H_y$  distribution of single crystal silicon grid meta-section with different defect depths

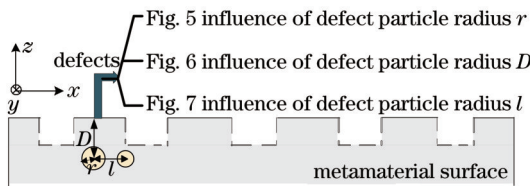


图 4 缺陷特征物性参数示意图

Fig. 4 Schematic diagram of physical parameters of defect characteristics

形态尺寸。

### 3.3.2 缺陷掩埋深度对单晶硅栅格超构表面耦合散射场的影响

图 6 给出了单晶硅栅格超构表面中不同掩埋深度的  $\text{SiO}_2$  缺陷粒子双站 RCS 角分布, 缺陷粒子尺寸为  $r=0.8\lambda=0.5\ \mu\text{m}$ , 掩埋深度分别为  $D=1.3\lambda, 2.0\lambda, 2.6\lambda, 3.3\lambda$ 。由图 6 可以看出: 缺陷掩埋越深, 总场强越小。这是因为: 掩埋深度  $D$  越大, 缺陷与超构表面的相互作用光程越长, 因此被消耗掉的光能量也越多。当掩埋深度  $D < 2.0\lambda$  时, 在垂直入射方向出现极大值点, 且极值相当, 即掩埋深度对耦合散射光场影响不大。当掩埋深度  $D > 2.0\lambda$  时, 随着掩埋深度  $D$  的增加, 场强在探测区域  $0^\circ$  左右减小。在工程中, 依据散射场峰值的极值趋势初步判断缺陷所在的掩埋深度与  $\lambda$  之

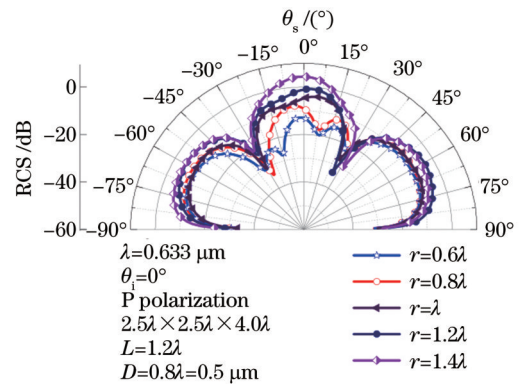


图 5 单晶硅栅格超构表面掩埋不同尺寸缺陷粒子双站 RCS 角分布

Fig. 5 Angular distribution of RCS of silicon grid metasurface buried with defect particles with different radius

间的关系, 进而可依据峰值位置对缺陷状态进行进一步精确诊断。

### 3.3.3 多缺陷间距对单晶硅栅格超构表面耦合散射场的影响

图 7 给出了单晶硅栅格超构表面中双  $\text{SiO}_2$  缺陷粒子不同间距  $l$  的双站 RCS 角分布结果, 缺陷粒子尺寸为  $r=0.8\lambda=0.5\ \mu\text{m}$ , 掩埋深度为  $D=5.8\lambda=3.5\ \mu\text{m}$ , 缺陷距离分别为  $l=1.3\lambda, 2.0\lambda, 2.6\lambda, 3.3\lambda$ 。从图 7 中

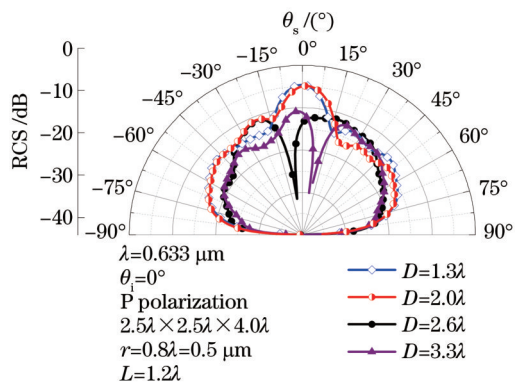


图 6 含不同掩埋深度缺陷的单晶硅栅格超构表面双站 RCS 角分布

Fig. 6 Angular distribution of RCS of silicon grid with defects of different buried depths

可以得出:随着缺陷间距  $l$  的增大,最小峰值随角度右移;当粒子间距超过  $2.0\lambda$  时散射场峰值个数增加。在工程中,可以根据峰值个数及最小值大小对粒子间距进行初步判定。

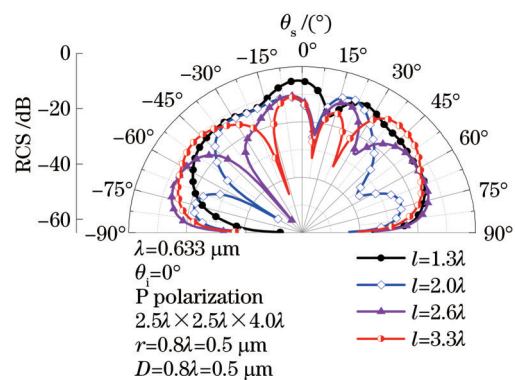


图 7 单晶硅栅格超构表面不同间距缺陷双站 RCS 角分布

Fig. 7 Angular distribution of RCS of single crystal silicon grid with defects of different spacings

## 4 结 论

基于时域多分辨分析方法研究了栅格微纳超构表面与氧化物缺陷的耦合散射问题。缺陷的存在破坏了超构表面对称性,极大影响超构表面场分布,提炼缺陷特征参数对单晶硅栅格超构表面散射场影响规律极具意义。从 Maxwell 方程出发,引入多分辨概念,建立微纳周期超结构与掩埋缺陷粒子体缺陷间耦合散射模型,推导出耦合散射场,并与 FDTD 方法进行比较。通过数值计算分析缺陷尺寸、掩埋深度及缺陷间距等因素对耦合光散射特性的影响,得出如下结论:缺陷的存在对耦合散射场的对称性和散射场值均有极大影响。探测角为  $10^\circ$  左右时,缺陷对耦合散射场的影响极大,因此,  $10^\circ$  可作为较优探测角度。对于缺陷掩埋深度  $D$ ,  $2.0\lambda$  是一个很重要的分界线。当掩埋深度  $D < 2.0\lambda$  时,掩埋深度的变化对耦合散射光场影响不大。当掩埋深度  $D > 2.0\lambda$  时,随着掩埋深度  $D$  的增加,散射

场强度在探测区域为  $0^\circ$  左右急剧减小。随着缺陷间距  $l$  的增大且超过  $2.0\lambda$  时,散射场振动加剧,峰值个数增加。将以上规律和结论应用于工程问题中,对周期超构表面进行精准调控,对质量进行严格把控,并调整系统在光谱、空间维度上的光学特性,以为实现超灵敏检测、功能性表面设计和散射峰值方向选择等提供理论支撑和技术支持。

针对近些年超表面光场调控的热点问题,本文目前仅依托数值计算方法初步针对缺陷对简单结构的超表面光学系统的影响规律进行探索工作,接下来还将从结构、材料、空间等多维度进行拓展,针对镀有微粗糙膜系的超构表面中粗糙度对耦合光场的影响等问题进一步结合实验展开系列工作。

## 参 考 文 献

- [1] Wang L, Cao X W, Lü C, et al. Formation of deep-subwavelength structures on organic materials by femtosecond laser ablation[J]. IEEE Journal of Quantum Electronics, 2018, 54(1): 17478376.
- [2] Zhu Q H, Shi S Y, Wang J J, et al. Linear optical switch metasurface composed of cross-shaped nano-block and  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  film[J]. Optics Communications, 2021, 498: 127222.
- [3] 杨渤,程化,陈树琪,等.基于傅里叶分析的超表面多维光场调控[J].光学学报,2019,39(1):0126005.  
Yang B, Cheng H, Chen S Q, et al. Multi-dimensional manipulation of optical field by metasurfaces based on Fourier analysis[J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(1): 0126005.
- [4] 张梦蝶,王文涛,孙朋,等.一种基于纳米环-柱结构的高效非线性超表面[J].光学学报,2021,41(12):1219002.  
Zhang M D, Wang W T, Sun P, et al. A highly efficient nonlinear metasurface based on nanoring-rod structures [J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(12): 1219002.
- [5] 陆敏,王治乐,张树青,等.表面缺陷的偏振散射表征方法及区分原理[J].光学学报,2021,41(12):1229001.  
Lu M, Wang Z L, Zhang S Q, et al. Polarization scattering characterization and discrimination principle of surface defects[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(12): 1229001.
- [6] Ge D H, Li J P, Ma C, et al. Effect of windmill-like-shaped defect on TM photonic band gaps of two-dimensional square-lattice photonic crystals[J]. Results in Physics, 2020, 16: 102879.
- [7] Chen Y B, Chen J S, Hsu P F. Impacts of geometric modifications on infrared optical responses of metallic slit arrays[J]. Optics Express, 2009, 17(12): 9789-9803.
- [8] Ray N J, Yoo J H, Nguyen H T, et al. Large aperture and durable glass-engraved optical metasurfaces using nanoparticle etching masks: prospects and future directions[J]. Journal of Physics: Photonics, 2021, 3(3): 032004.
- [9] Gallant G J, Bisson J F, Bulmer K, et al. Observation of exceptional points in helically structured thin films[J].

- Optics Letters, 2021, 46(13): 3135-3138.
- [10] Lussange J, Guérout R, Rosa F S S, et al. Radiative heat transfer between two dielectric nanogratings in the scattering approach[J]. Physical Review B, 2012, 86(8): 085432.
- [11] Chen Q, Hubbard G, Shields P A, et al. Broadband moth-eye antireflection coatings fabricated by low-cost nanoimprinting[J]. Applied Physics Letters, 2009, 94(26): 263118.
- [12] Kim B J, Kim J. Fabrication of GaAs subwavelength structure (SWS) for solar cell applications[J]. Optics Express, 2011, 19(3): A326-A330.
- [13] Cheng K X, Li Z X, Wu J J, et al. Super-resolution imaging based on radially polarized beam induced superoscillation using an all-dielectric metasurface[J]. Optics Express, 2022, 30(2): 2780-2791.
- [14] 马婧, 刘冬冬, 王继成, 等. 基于金属狭缝阵列的各向异性偏振分束器[J]. 物理学报, 2018, 67(9): 094102.  
Ma J, Liu D D, Wang J C, et al. Anisotropic polarization beam splitter based on metal slit array[J]. Acta Physica Sinica, 2018, 67(9): 094102.
- [15] Ma J, Liu D D, Wang J C, et al. Plasmonic sensor with variable claddings based on metallic slit arrays[J]. Chinese Optics Letters, 2018, 16(3): 032301.
- [16] Huang Z X, Xu K, Pan D. High efficient unidirectional surface plasmon excitation utilizing coupling between metal-insulator-metal waveguide and metal-insulator interface[J]. Optics Communications, 2017, 389: 128-132.
- [17] 谢国大, 黄志祥, 王丽华, 等. 基于时域有限差分算法改进卷积完全匹配层的稳定性[J]. 光子学报, 2017, 46(8): 0826001.  
Xie G D, Huang Z X, Wang L H, et al. Improvement of the stability of convolutional perfect matched layer based on finite difference time-domain algorithm[J]. Acta Photonica Sinica, 2017, 46(8): 0826001.
- [18] Omi S, Uno T, Arima T. Single-cut near-field far-field transformation technique employing two-dimensional plane-wave expansion[J]. IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters, 2018, 17(8): 1538-1541.
- [19] Lyaschuk Y M, Kukhtaruk S M, Janonis V, et al. Modified rigorous coupled-wave analysis for grating-based plasmonic structures with a delta-thin conductive channel: far- and near-field study[J]. Journal of the Optical Society of America. A, Optics, Image Science, and Vision, 2021, 38(2): 157-167.
- [20] Gong B W, Wen H Y. Enhanced polarization-independent two-layer five-port grating with covering layer[J]. Modern Physics Letters B, 2021, 35(25): 2150348.
- [21] 于慧波, 姜越, 沈雄, 等. 基于有限元法的激光等离子体诱导玻璃损伤特性研究[J]. 光子学报, 2019, 48(10): 1030003.  
Yu H B, Jiang Y, Shen X, et al. Research on laser damage induced by laser plasma based on finite element method[J]. Acta Photonica Sinica, 2019, 48(10): 1030003.
- [22] Jacobs E W, Yang C, Demir K G, et al. Vibrational detection of delamination in composites using a combined finite element analysis and machine learning approach[J]. Journal of Applied Physics, 2020, 128(12): 125104.
- [23] Gong L, Wu Z S, Gao M, et al. Analysis of composite/difference field scattering properties between a slightly rough optical surface and multi-body defects[J]. Applied Optics, 2018, 57(9): 2165-2171.
- [24] 刘亚楠. 光学超构表面结构的多波长色散特性研究[D]. 济南: 山东大学, 2019: 20-22.  
Liu Y N. Research on multiwavelength dispersion characteristics of optical metasurfaces[D]. Jinan: Shandong University, 2019: 20-22.
- [25] 张伟, 王智勇, 王文超, 等. 基于光子晶体耦合波导的宽带慢光研究[J]. 光学学报, 2012, 32(2): 0213001.  
Zhang W, Wang Z Y, Wang W C, et al. Investigation on wideband slow light based on photonic-crystal coupled waveguides[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(2): 0213001.
- [26] Krumpholz M, Katehi L P B. MRTD: new time-domain schemes based on multiresolution analysis[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1996, 44(4): 555-571.
- [27] 夏雨淳. 微结构表面热致变色薄膜的制备与辐射特性研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2015: 24-25.  
Xia Y C. Prepared method and radiative properties of the microstructure surface thermochromic thin film[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2015: 24-25.
- [28] Schmehl R, Nebeker B M, Hirleman E D. Discrete-dipole approximation for scattering by features on surfaces by means of a two-dimensional fast Fourier transform technique[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1997, 14(11): 3026-3036.
- [29] Gong L, Wu Z S, Li Z J, et al. An improved analysis of the scattering properties of half-space problem with multiple defect particles for an optical surface[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2015, 162: 184-189.
- [30] 巩蕾, 刘阳林, 于洁, 等. 三维微纳米半球周期结构光学表面场分布及复合散射特性[J]. 光子学报, 2021, 50(7): 0729001.  
Gong L, Liu Y L, Yu J, et al. Surface field distribution and composite scattering characteristics of three-dimensional micro-nano hemispherical periodic structure optical surface[J]. Acta Photonica Sinica, 2021, 50(7): 0729001.
- [31] 巩蕾, 吴振森, 高明. 基片与不同方位多形态缺陷粒子的复合光散射特性分析[J]. 光学学报, 2012, 32(6): 0629003.  
Gong L, Wu Z S, Gao M. Analysis of composite light scattering properties between wafers and many shapes of particles with different positions[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(6): 0629003.