

基于裂环谐振器的高 Q 值太赫兹连续域束缚态全介质超材料

岳帅¹, 王豆豆^{1*}, 马天², 田江锟¹

¹西安科技大学理学院, 陕西 西安 710054;

²西安科技大学安全工程与科学学院, 陕西 西安 710054

摘要 连续域束缚态(BIC)已被广泛用于设计具有高品质因数(Q 值)谐振的超材料中。通过在一个周期单元中设置两对高折射率裂环谐振器(SRR),设计了一种太赫兹全介质超材料。基于超晶格模式的对称性保护原理,通过改变其中两个SRR之间的距离,获得了可观测的准BIC(QBIC)模式。通过调节不对称度可以调制 Q 值,并且QBIC的 Q 值与结构的不对称度之间呈现出二次反比的关系。感应电场和磁场的空间分布以及感应电流的多极展开都表明了谐振是由电四极子的激发引起的。所提出的超材料具有较窄的谐振线宽,其灵敏度和FOM(figure of merit)分别为254.8 GHz/RIU和509.6,可以作为高灵敏度的折射率传感器。

关键词 材料; 连续域束缚态; 太赫兹; 全介质超材料; 电四极子; 折射率传感

中图分类号 O436 文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS231075

1 引言

超材料是一种由亚波长范围内周期性排列的谐振器组成的人工介质,因具有奇特的电磁特性和天然材料不存在的功能而备受关注^[1]。近年来,设计具有高品质因数(Q 值)的光学超材料器件对于各种实际应用至关重要,尤其是生物和化学传感^[2-6]。一直以来,人工设计的超材料通过在有限区域内对电磁辐射进行增强来实现高 Q 值^[7-8]。最近的研究倾向于在基于连续域束缚态(BIC)的微米结构中实现极高的 Q 值^[9]。BIC的概念最初在量子物理学^[10]中提出,然后在不同的领域中被发现并被运用,其中包括声学^[11]、光波导^[12]、光子学晶体^[13]和拓扑物体^[14]。BIC是指在连续域中仍然能保持局域性的状态,可以用相消干涉来解释。当连续调整系统参数时,BIC共振模式与所有辐射波的耦合消失,从而具有无限长的寿命,这使得 Q 因子无限高。如果耦合常数的消失是由对称性导致的,则这种BIC也被称为对称保护BIC。理想BIC只存在于无损且无限大的结构中,表现出无限的 Q 因子和消失的共振线宽,即透射光谱为零线宽。实际中可通过破坏对称性产生泄漏共振,进而使BIC变为准BIC,尽管此时的 Q 因子和谐振线宽都会受到限制,但超材料仍然能具有超高的 Q 因子^[15]。在超材料和超表面的研

究中,通过在周期性单元中引入不对称性,可以很容易地实现高 Q 值谐振^[16-17]。高 Q 值谐振已在不同几何结构中实现,如不对称裂环谐振器(a-SRR)^[18]、不对称矩形棒^[19],以及不对称的圆盘^[20],已被应用于具有高 Q 值的准BIC驱动的超材料。然而,较高的欧姆损耗和辐射损耗限制了大多数金属超材料的 Q 值,与金属材料相比,全介质超材料在追求高 Q 值方面更有效,这是由于多极子的激发对电磁波的有效耦合^[21-25]。

针对上述问题,本文设计了一种由两对裂环谐振器(SRR)构成最小周期单元的太赫兹全介质超材料,通过破坏结构对称性在0.6467 THz附近激发谐振。通过数值仿真和计算证明该传感器具备254.8 GHz/RIU的折射率灵敏度和509.6的FOM值。

2 结构设计与仿真

图1(a)展示了所提出的全介质超材料结构,由排列在正方形单元结构中的SRR周期性阵列组成。图1(b)展示了周期性单元结构,这些SRR具有相同的外半径($R_1 = 80 \mu\text{m}$)和内半径($R_2 = 40 \mu\text{m}$)以及相同的高度($H = 100 \mu\text{m}$)。SRR由硅制成,并贴在二氧化硅衬底上,衬底的厚度 $T = 30 \mu\text{m}$ 。该超材料可以通过深硅刻蚀的方法进行制备^[26]。图1(c)展示了单元结构在 x - y 平面上的俯视图,沿 x 和 y 方向的单元周期分

收稿日期: 2023-05-31; 修回日期: 2023-07-22; 录用日期: 2023-09-06; 网络首发日期: 2023-09-22

基金项目: 国家自然科学基金(11604260, 12074309, 52104218)、国家重点研发计划(2021YFE0105000)

通信作者: *wangdoudou@xust.edu.cn

别固定为 $P_x = P_y = P = 400 \mu\text{m}$ 。其中短弧对应的弧长 $\alpha = 120^\circ$, 长弧对应的弧长 $\beta = 150^\circ$, 使用软件进行了数值模拟, 忽略了它们的材料吸收。在 x 和 y 方向上应用周期性边界, 而在 z 方向上使用完美匹配层。太赫兹波垂直入射到全介质超材料的表面, 其电场分量平行于 y 轴。

为了激发高 Q 值谐振, 本文通过破坏对称性实现了连续域束缚态 (BIC) 和准连续域束缚态 (QBIC) 之间的转换。对于全介质 SRR 超材料, 弧长保持不变 ($\alpha = 120^\circ, \beta = 150^\circ$), 并且 BIC 和准 BIC 状态之间的

转换是通过使右侧两个 SRR 相对于其中心轴沿 y 方向移动来实现的。如图 1(c) 所示, 不对称度 a 表示右侧两个 SRR 沿 y 轴在相反方向上移动的距离。 $a = 0 \mu\text{m}$ 表示两个 SRR 没有运动, 并且单元结构在 x - y 平面上是对称的。在这种情况下, 4 个 SRR 的中心排列成一个长度 $L = 200 \mu\text{m}$ 的正方形 (白色虚线)。 $a \neq 0$ 意味着引入对称性破坏, 即右侧两个 SRR 沿着 y 轴在相反的方向上移动距离 a , 而其他两个 SRR 固定在它们的原始位置。

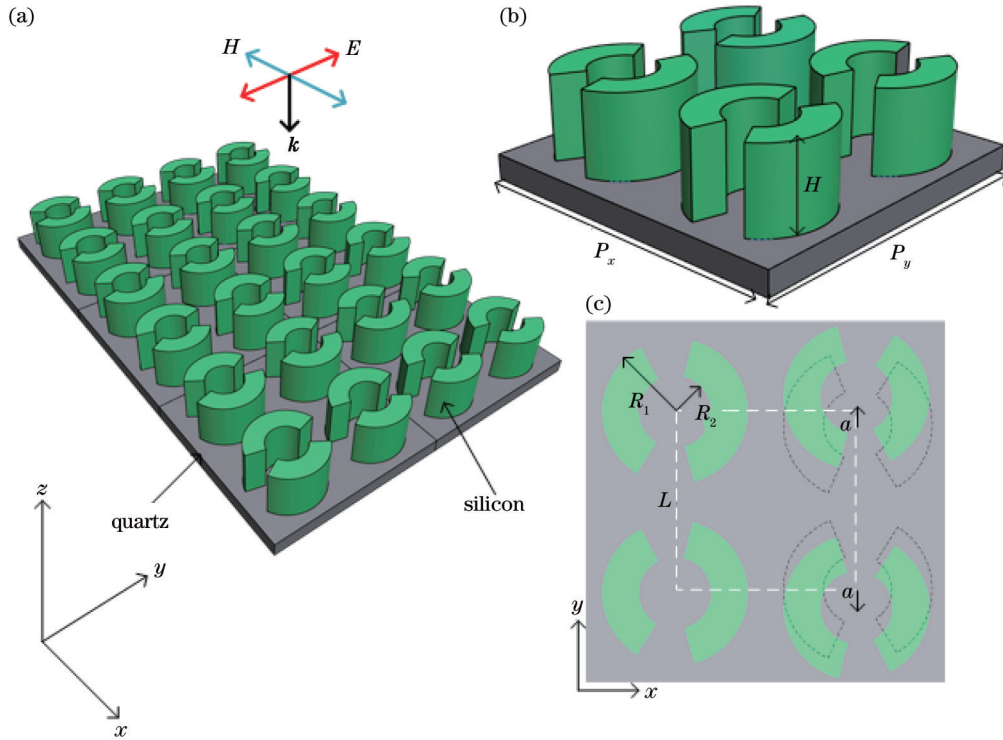


图 1 SRR 全介质超材料的示意图。(a) 所提结构示意图; (b) 周期性单元结构; (c) 单元结构俯视图 (x - y 平面)

Fig. 1 Schematic diagram of SRR all-dielectric metamaterial structure. (a) Schematic of proposed structure; (b) periodic unit cell; (c) top view (x - y plane) of unit cell

图 2 模拟了该全介质 SRR 结构在不同不对称参数下的透射谱线。当 $a = 0 \mu\text{m}$ 时, 该谐振没有谐振线宽, Q 值趋于无穷大, 这证明了 BIC 态被激发。透射光谱还表明 a 逐渐增大时 BIC 态转换为具有 Fano 谐振的 QBIC 模式, 其中 QBIC 态的谐振频率和线宽都与不对称度有关。

为了提取观察到的谐振频率和线宽, 使用公式 $T = \left| \frac{a + ib + c}{\omega - \omega_0 + i\gamma} \right|^2$ (其中 a, b, c 都是常数, 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) 将模拟结果拟合到典型的 Fano 模型^[27]。根据 $Q = \omega_0 / 2\gamma$ 可以获得不同不对称度下 Fano 谐振的 Q 值。如图 3 所示, 当不对称参数增大时, QBIC 的 Q 值显著降低。 Q 值和不对称参数之间遵循逆二次反比的关系^[28], 当不对称度

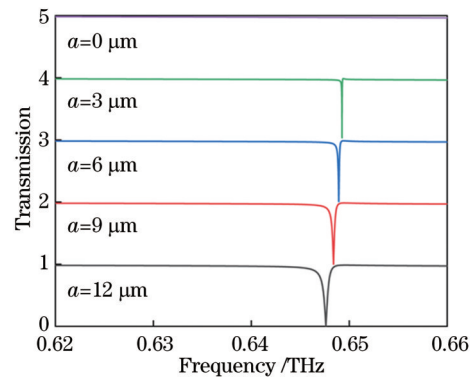


图 2 SRR 超材料的透射谱线

Fig. 2 Transmission spectra of SRR metamaterial structure

$a = 12 \mu\text{m}$ 时, 该谐振 Q 值约为 2420。

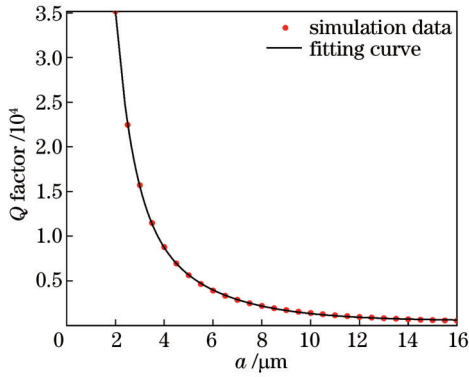


图 3 不同不对称度下的 Q 值

Fig. 3 Relationship between Q and asymmetric degree

3 分析与讨论

通过上文分析可知,当全介质 SRR 超材料的结构对称性被打破时,不对称度 a 是 BIC 态到 QBIC 态转换的关键。为了进一步分析多极子在形成谐振时的特

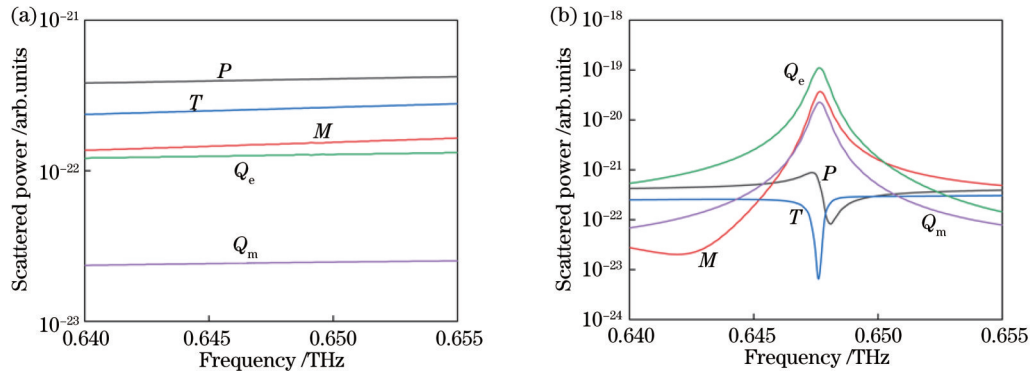


图 4 多极子的散射能量分布。(a)初始超材料;(b)对称破坏超材料

Fig. 4 Scattered power of multipole components. (a) Original metamaterial; (b) symmetry-broken metamaterial

图 5 中展示了 BIC ($a=0 \mu\text{m}$) 和 QBIC ($a=12 \mu\text{m}$) 的电场和磁场 z 分量的空间分布。在 BIC 态下,感应电场集中在圆弧上,并形成在 $y-z$ 平面逆时针循环的位移电流环,这表明位移电流在圆弧内形成了闭环。而在 QBIC 态下,位移电流在圆弧内不具有闭环布置,而是表现为分布在两个相邻圆弧之间的模式。更重要的是,感应电场集中在圆弧之间(即空气区域)。在这种情况下,更多的分析物将被 QBIC 模式的电场覆盖,可以实现更强的太赫兹波-物质相互作用。

本文研究了所提超材料的结构参数对其透射光谱的影响。图 6 计算了所提出的具有不同结构参数的超材料的透射光谱,除了每个图中设置的可变参数外,其他几何参数都为固定值,其中 $\alpha=120^\circ$, $\beta=150^\circ$, $a=12 \mu\text{m}$, $T=30 \mu\text{m}$ 。在图 6(a)中,随着谐振器高度 H 的增大,谐振明显向低频移动,它们的带宽没有明显的变化。在图 6(b)中,随着周期 P 的增大,谐振稍微向低频移动,它们的带宽变窄, Q 值逐渐变大。这是由于多

极子的谐振频率随着结构尺寸的增大而降低,谐振频率发生红移。图 6(c)中随着 R_1 的增大,谐振明显向低频处移动。在图 6(d)中,随着 R_2 的减小,谐振向低频处移动,它们的带宽逐渐变窄, Q 值逐渐变大。 R_1 的增大和 R_2 的减小都使得 SRR 的表面电流分布宽度增大,导致传感器的等效电感增大,谐振频率发生红移。在图 6(e)中,随着短弧 α 的减小,谐振向高频移动。图 6(f)中,随着长弧 β 的减小,谐振向高频移动, Q 没有明显的变化。如上所述,可通过改变所提出超材料的结构参数来精确优化 Q 值,使其更适合传感应用。

本文选择激发谐振的谐振频移作为指标,并通过模拟不同背景折射率的透射光谱来评估所提出的超材料的传感性能,不同背景折射率下超材料的透射谱线如图 7(a)所示,在 1.00~1.04 的背景折射率(n_{RI})下谐振向低频移动。从图 7(b)中的拟合结果可以看出,谐振频率随背景折射率的变化而变化,圆点是指从模拟透射光谱中提取的谐振频率,实线是线性拟合结果。

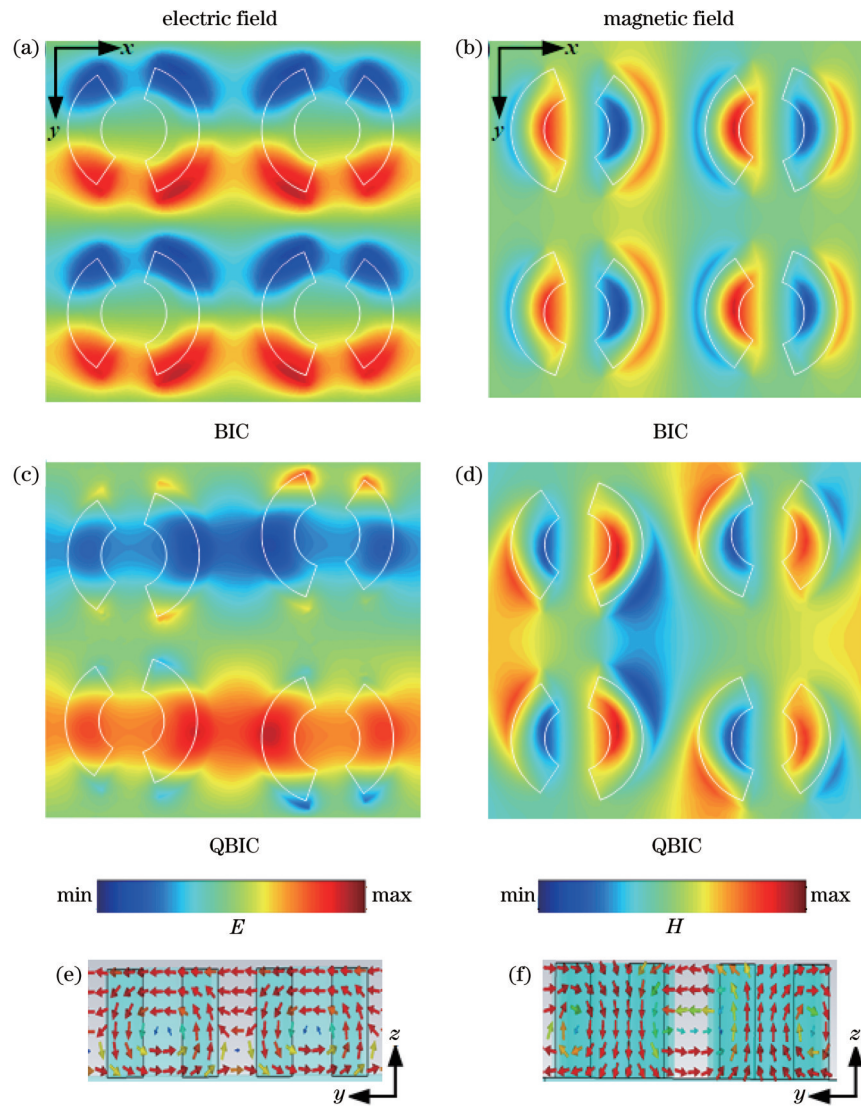


图 5 BIC 模式和 QBIC 模式下模拟电场和磁场分布以及电场的横截面分布。BIC 模式下 (a) 电场和 (b) 磁场分布; QBIC 模式下 (c) 电场和 (d) 磁场分布; (e) BIC 模式下的电场横截面分布; (f) QBIC 模式下的电场横截面分布

Fig. 5 Electric and magnetic field distributions and cross sectional distribution of electric field in BIC and QBIC modes. (a) Electric field and (b) magnetic field distributions in BIC mode; (c) electric field and (d) magnetic field distributions in QBIC mode; (e) cross-sectional distribution of electric field in BIC mode; (f) cross-sectional distribution of electric field in QBIC mode

通过计算得到该谐振对背景折射率的灵敏度为 254.8 GHz/RIU。本文还计算了 FOM (用变量 F_{OM} 表示), 可以定义为 $F_{OM} = S/\Delta\omega$, 其中 S 是灵敏度, $\Delta\omega$ 是

谐振线宽。经过计算可得所提出的超材料的 FOM 约为 509.6。本文提出的全介质超材料传感器与现有的太赫兹超材料传感器的性能比较如表 1 所示, 与以往

表 1 基于不同超材料的太赫兹传感器的灵敏度和 FOM
Table 1 Sensitivity and FOM of THz sensors based on different metamaterials

Reference	Type of metamaterial	Material of structured layer	Sensitivity / (GHz•RIU ⁻¹)	FOM
Ref. [2]	Time domain resonance	Aluminum	27.3	—
Ref. [30]	Fano resonance-BIC	Silicon	77	11.1
Ref. [31]	Fano resonance	Gold	105	7.51
Ref. [32]	Perfect absorber	Aluminum	139.2	—
Ref. [33]	Electromagnetically induced transparency (EIT) resonance	Graphene	177.7	59.3
Ref. [22]	EIT resonance	Silicon	231	64.7
This work	Fano resonance-BIC	Silicon	254.8	509.6

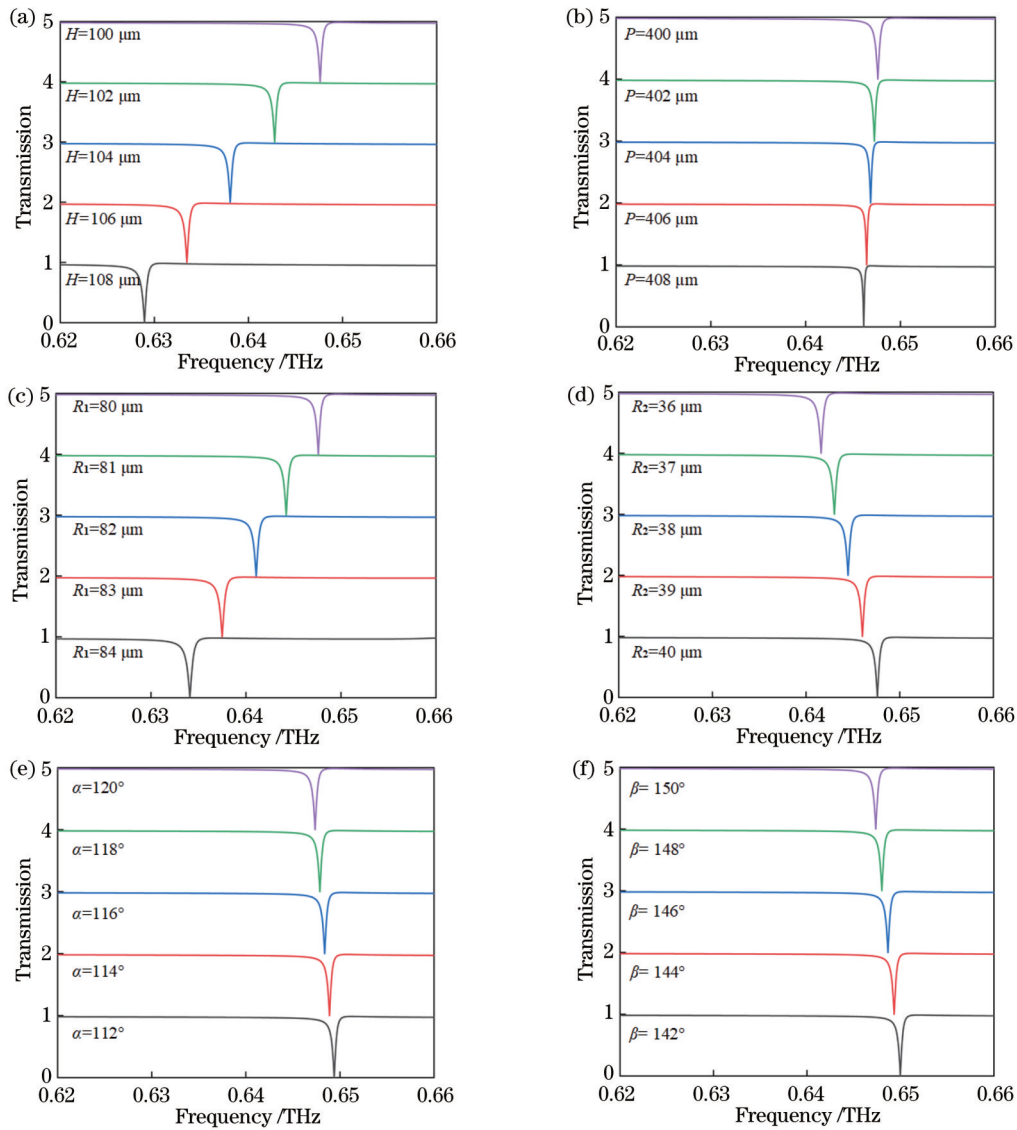


图 6 透射光谱随结构参数的变化。(a)高度 H ; (b)周期 P ; (c)外半径 R_1 ; (d)内半径 R_2 ; (e)短弧 α ; (f)长弧 β

Fig. 6 Variations of transmission spectra with structural parameters. (a) Height H ; (b) period P ; (c) outer radius R_1 ; (d) inner radius R_2 ; (e) short arc α ; (f) long arc β

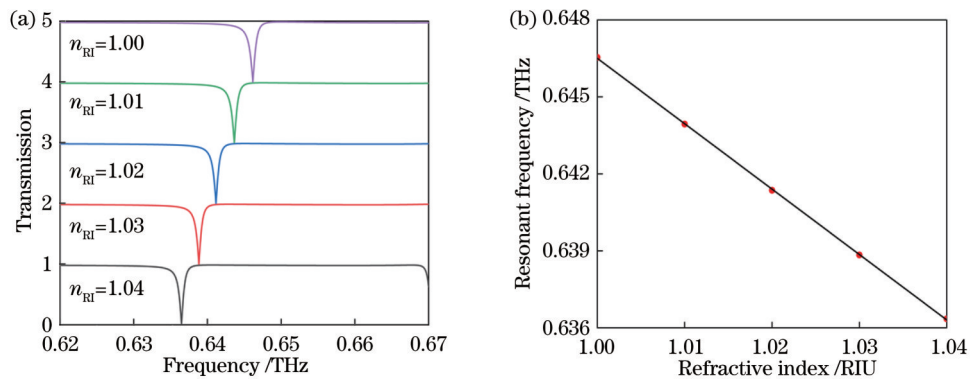


图 7 不同折射率下的透射光谱以及其灵敏度。(a)不同待测物折射率 (n_{ri}) 下的透射谱线; (b)谐振频率与折射率的关系

Fig. 7 Transmission spectra and sensitivity under different refractive indices. (a) Transmission spectra under different refractive indices of tested object; (b) relationship between resonant frequency and refractive index

的研究相比,本文结构具有高灵敏度和高FOM,显示出其在传感应用方面的巨大优势。FOM对于评估传

感器的性能更有意义,因为它不仅关注灵敏度,还关注Q因子。对于传感应用,通常需要高Q因子特征来检

测由于分析物的小体积或微弱的环境变化而产生的小频移。因此,所提出的非对称超材料结构有着高灵敏度和超高 FOM,在太赫兹频率下具有突出的优越性和超灵敏传感应用潜力。

4 结 论

设计了一种基于全介质超材料结构的太赫兹传感器,该传感器的 Q 值高达 2420。通过模拟和分析所设计超材料的传感性能发现:当待测物折射率在 1.00 至 1.04 变化时,该传感器的灵敏度和 FOM 分别达到 254.8 GHz/RIU 和 509.6,并且可以通过优化结构来进一步提升传感器的性能。该传感器结构简单、制作成本低,且具有高灵敏度和 FOM,可用于生物传感和化学检测等重要领域。

参 考 文 献

- [1] Zheludev N I, Kivshar Y S. From metamaterials to metadevices [J]. *Nature Materials*, 2012, 11(11): 917-924.
- [2] Gupta M, Srivastava Y K, Manjappa M, et al. Sensing with toroidal metamaterial[J]. *Applied Physics Letters*, 2017, 110(12): 121108.
- [3] Xu W D, Xie L J, Ying Y B. Mechanisms and applications of terahertz metamaterial sensing: a review[J]. *Nanoscale*, 2017, 9(37): 13864-13878.
- [4] Salim A, Lim S. Recent advances in the metamaterial-inspired biosensors[J]. *Biosensors and Bioelectronics*, 2018, 117: 398-402.
- [5] Xu W D, Xie L J, Zhu J F, et al. Terahertz biosensing with a graphene-metamaterial heterostructure platform[J]. *Carbon*, 2019, 141: 247-252.
- [6] Wang Z Y, Geng Z X, Fang W H. Exploring performance of THz metamaterial biosensor based on flexible thin-film[J]. *Optics Express*, 2020, 28(18): 26370-26384.
- [7] Jeong J, Goldflam M D, Campione S, et al. High quality factor toroidal resonances in dielectric metasurfaces[J]. *ACS Photonics*, 2020, 7(7): 1699-1707.
- [8] Liu L, Li Z, Cai C Y, et al. High-Q hybridized resonance in a plasmonic metasurface of asymmetric aligned magnetic dipoles [J]. *Applied Physics Letters*, 2020, 117(8): 081108.
- [9] Kodigala A, Lepetit T, Gu Q, et al. Lasing action from photonic bound states in continuum[J]. *Nature*, 2017, 541(7636): 196-199.
- [10] Lyapina A A, Maksimov D N, Pilipchuk A S, et al. Bound states in the continuum in open acoustic resonators[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2015, 780: 370-387.
- [11] Chen Z G, Xu C Q, Al Jahdali R, et al. Corner states in a second-order acoustic topological insulator as bound states in the continuum[J]. *Physical Review B*, 2019, 100(7): 075120.
- [12] Plotnik Y, Peleg O, Dreisow F, et al. Experimental observation of optical bound states in the continuum[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(18): 183901.
- [13] Liu W Z, Wang B, Zhang Y W, et al. Circularly polarized states spawning from bound states in the continuum[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123(11): 116104.
- [14] Cerjan A, Jürgensen M, Benalcazar W A, et al. Observation of a higher-order topological bound state in the continuum[J]. *Physical Review Letters*, 2020, 125(21): 213901.
- [15] 赵静,王加贤,赖丽萍,等.基于全介质超表面高 Q 的双带太赫兹传感器[J]. *激光与光电子学进展*, 2022, 59(13): 1304004. Zhao J, Wang J X, Lai L P, et al. High- Q dual-band terahertz sensor based on all-dielectric metasurface[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2022, 59(13): 1304004.
- [16] Cong L Q, Singh R. Symmetry-protected dual bound states in the continuum in metamaterials[J]. *Advanced Optical Materials*, 2019, 7(13): 1900383.
- [17] Melik-Gaykazyan E, Koshelev K, Choi J H, et al. From Fano to quasi-BIC resonances in individual dielectric nanoantennas[J]. *Nano Letters*, 2021, 21(4): 1765-1771.
- [18] Forouzmand A, Mosallaei H. All-dielectric C-shaped nanoantennas for light manipulation: tailoring both magnetic and electric resonances to the desire[J]. *Advanced Optical Materials*, 2017, 5(14): 1700147.
- [19] Liu M K, Powell D A, Guo R, et al. Polarization-induced chirality in metamaterials via optomechanical interaction[J]. *Advanced Optical Materials*, 2017, 5(16): 1600760.
- [20] Wang Y L, Han Z H, Du Y, et al. Ultrasensitive terahertz sensing with high- Q toroidal dipole resonance governed by bound states in the continuum in all-dielectric metasurface[J]. *Nanophotonics*, 2021, 10(4): 1295-1307.
- [21] Jahani S, Jacob Z. All-dielectric metamaterials[J]. *Nature Nanotechnology*, 2016, 11(1): 23-36.
- [22] Ma T, Huang Q P, He H C, et al. All-dielectric metamaterial analogue of electromagnetically induced transparency and its sensing application in terahertz range[J]. *Optics Express*, 2019, 27(12): 16624-16634.
- [23] Fu X J, Cui T J. Recent progress on metamaterials: from effective medium model to real-time information processing system[J]. *Progress in Quantum Electronics*, 2019, 67: 100223.
- [24] Bi K, Wang Q M, Xu J C, et al. All-dielectric metamaterial fabrication techniques[J]. *Advanced Optical Materials*, 2021, 9(1): 2001474.
- [25] Bi K, Yang D Q, Chen J, et al. Experimental demonstration of ultra-large-scale terahertz all-dielectric metamaterials[J]. *Photonics Research*, 2019, 7(4): 457-463.
- [26] 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.
- [27] Yang Y M, Kravchenko I I, Briggs D P, et al. All-dielectric metasurface analogue of electromagnetically induced transparency[J]. *Nature Communications*, 2014, 5: 5753.
- [28] 张星源,谷建强,师文桥.基于金属裂环谐振器的太赫兹连续域束缚态超表面[J]. *中国激光*, 2023, 50(2): 0214001. Zhang X Y, Gu J Q, Shi W Q. Terahertz continuum bound supersurface based on metal split-ring resonator[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2023, 50(2): 0214001.
- [29] Wu P C, Liao C Y, Savinov V, et al. Optical anapole metamaterial[J]. *ACS Nano*, 2018, 12(2): 1920-1927.
- [30] Zhong Y J, Du L H, Liu Q, et al. Ultrasensitive specific sensor based on all-dielectric metasurfaces in the terahertz range[J]. *RSC Advances*, 2020, 10(55): 33018-33025.
- [31] Xie Q, Dong G X, Wang B X, et al. High- Q Fano resonance in terahertz frequency based on an asymmetric metamaterial resonator[J]. *Nanoscale Research Letters*, 2018, 13(1): 294.
- [32] Yahiaoui R, Tan S Y, Cong L Q, et al. Multispectral terahertz sensing with highly flexible ultrathin metamaterial absorber[J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 118(8): 083103.
- [33] He X J, Zhang Q F, Lu G J, et al. Tunable ultrasensitive terahertz sensor based on complementary graphene metamaterials [J]. *RSC Advances*, 2016, 6(57): 52212-52218.

High Q -Factor Terahertz All-Dielectric Metamaterial with Bound States in Continuum Based on Split Ring Resonator

Yue Shuai¹, Wang Doudou^{1*}, Ma Tian², Tian Jiangkun¹

¹College of Sciences, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, Shaanxi, China;

²College of Safety Science and Engineering, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, Shaanxi, China

Abstract

Objective Bound state in the continuum (BIC) has been widely employed in designing metamaterials with high quality factor (Q -factor) resonances. BIC is a state that can still maintain localization in the continuum and can be explained by phase-canceling interference. When the system parameters are continuously adjusted, the coupling of the BIC resonance mode to all radiated waves disappears, which leads to an infinitely long lifetime and an infinitely high Q -factor. If the vanishing of the coupling constants is due to symmetry, the BIC is also called symmetry-protected BIC. Ideal BICs exist only in lossless and infinite structures, exhibiting infinite Q -factors and vanishing resonance linewidths, or transmission spectra with zero linewidths. In practice, the BIC can be changed to quasi-BIC by breaking the symmetry and generating a leakage resonance. Although the Q -factor and resonance linewidth will be limited at this point, the metamaterial can still have an ultra-high Q -factor with promising applications in sensors.

Methods By setting up two pairs of split ring resonators (SRRs) with high refractive index in a periodic cell, we design a terahertz all-dielectric metamaterial (Fig. 1). Based on the symmetry-preserving principle of superlattice modes, we obtain observable quasi-BIC (QBIC) modes by varying the distance between the two SRRs. Meanwhile, the variation rule of the Q -factor is obtained by calculating the energy distribution of the multipole to determine its resonance mode as shown in Fig. 4 and by changing the different structural parameters as shown in Fig. 6. Additionally, the transmission spectra with different background refractive indices are simulated to evaluate the sensing performance of the proposed metamaterial.

Results and Discussions We simulate the transmission spectra of this all-dielectric SRR structure with different asymmetry parameters, and the Q -factor of QBIC decreases significantly under the increasing asymmetry parameter. The relationship between the Q -factor and the asymmetry parameter follows an inverse quadratic ratio. Fig. 4(a) shows the multipole scattering energy distribution at $a=0 \mu\text{m}$ (BIC) and Fig. 4(b) shows the multipole scattering energy distribution at $a=12 \mu\text{m}$ (QBIC). Near the resonant frequency of 0.6467 THz, the electric quadrupole increases significantly and dominates the far-field scattering energy distribution.

Conclusions We design a terahertz sensor based on an all-dielectric metamaterial structure, with the Q -factor of the sensor as high as 2420. By simulating and analyzing the sensing performance of the designed metamaterial, the sensor achieves a sensitivity and an FOM of 254.8 GHz/RIU and 509.6 when the refractive index of the material to be measured varies from 1.00 to 1.04 respectively, and the sensor performance can be further improved by optimizing the structure. The sensor features a simple structure, low fabrication cost, and high sensitivity and FOM, and can be adopted as one with a high-sensitivity refractive index.

Key words materials; bound states in continuum; terahertz; all-dielectric metamaterial; electric quadrupole; refractive index sensing