2024 年 7 月

Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology

文章编号: 2095-4980(2024)07-0689-06

太赫兹全金属超构表面的极化无关准 BICs 研究

赵正韬1,张亚倩2,肖中银*1,刘德君*2

(1.上海大学 通信与信息工程学院, 上海 200444; 2.上海师范大学 数理学院, 上海 200234)

摘 要:提出一种具有高Q值的太赫兹全金属超构表面。该超构表面由4个菱形孔组成,改 变相邻菱形孔的尺寸,可以打破结构的对称性,产生准连续域束缚态(BICs);改变入射波的极化 角度,激发的准BICs频率保持不变,超构表面具有极化不相关特性。优化结构参数,仿真结果表 明,当尺寸偏差为3µm时,产生的准BICs实现了小于1GHz的超窄带宽,对应Q值大于1300。 实验测试结果显示,加工的样品(偏差30µm)测试Q值为40。相比于圆孔结构,菱形孔结构由于尖 锐的转角可以实现较强的束缚场。本文提出的具有极化无关准BICs的超构表面在实时化学和生物 分子传感中具有巨大的实际应用潜力。

关键词: 太赫兹; 超构表面; 全金属; 极化无关; 连续域束缚态 **中图分类号:** O441.4 **文献标志码:** A **doi:** 10.11805/TKYDA2024096

Polarization-independent quasi-Bound states In the Continuum based on terahertz all metal metasurfaces

ZHAO Zhengtao¹, ZHANG Yaqian², XIAO Zhongyin^{*1}, LIU Dejun^{*2}

(1.School of Communication and Information Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China;
 2.Mathematics and Science College, Shanghai Normal University, Shanghai 200234, China)

Abstract: A terahertz(THz) all-metal metasurface with a high Q-factor has been proposed, consisting of four diamond-shaped holes. By altering the size of adjacent diamond-shaped holes, the symmetry of the structure can be broken, resulting in quasi-Bound states In the Continuum(BICs). By changing the polarization angle of the incident wave, the frequency of the excited quasi-BICs remains unchanged, exhibiting polarization-independent characteristics. Simulation results show that, by optimizing structural parameters, when the size deviation is 3 μ m, the quasi-BICs achieved an ultranarrow bandwidth of less than 1 GHz, corresponding to a Q-factor greater than 1 300. Experimental test results show that the fabricated sample(with a deviation of 30 μ m) had a measured Q-factor of 40. Compared to circular hole structures, the diamond-shaped hole structure can achieve stronger bound fields due to its sharp corners. The proposed metasurface with polarization-independent quasi-BICs has enormous practical application potential in real-time chemical and biomolecular sensing.

Keywords: terahertz; metasurfaces; all-metal; polarization-independent; Bound states In the Continuum

太赫兹波(THz)是介于微波和红外波段之间的电磁波,频率位于0.1~10 THz之间。太赫兹波具有非电离和低 光子能量等特性,广泛用于成像、传感和光谱学等领域^[1-2]。许多大分子的振动和转动能级都落在太赫兹频段范 围,使太赫兹技术成为生物传感的理想工具,但大多数太赫兹系统基于体积庞大的自由空间光学系统,需要精 确控制。此外,在传感应用中,太赫兹波长与被测目标之间存在尺寸不匹配^[2-3]。因此,需要一种能够灵活操纵 的太赫兹器件用于太赫兹的相关应用。在太赫兹波段,基于二维超构表面的谐振器件在理论与实验方面有着大 量研究,但大多数超构表面受辐射损耗和材料损耗的影响,其谐振 Q 因子较低,限制了其在超窄带宽、高 Q 值

收稿日期: 2024-02-19; 修回日期: 2024-03-26

基金项目:国家自然科学基金资助项目(62205211);上海浦江人才资助项目(20PJ1412200)

*通信作者:肖中银 email:zhyxiao@staff.shu.edu.cn;刘德君 email:dejunliu1990@shnu.edu.cn

传感等太赫兹领域的应用。谐振 O 值与光-物质相互作用时间及电场增强有关,因此通常需要提高 O 值⁴⁴。连续 域束缚态(BICs)正是一种能够实现零线宽和无穷大O值的共振模式[5-7]。BICs这一概念最早是在量子力学领域提 出的,后来在更多不同类型的材料中对BICs进行了研究,如压电材料、电介质光子晶体、光波导和纤维、量子 点、石墨烯和拓扑绝缘体。近年来, BICs不仅出现在量子力学领域,还出现在其他的物理领域,如微波和纳米 光子学等。超构表面是由亚波长大小的人工微观结构组成的新型人工材料,可以实现对BICs谐振频率与O值的 自由操控。通过对单元结构的精心设计,超构表面可以在亚波长尺度上实现光-物质的强相互作用。现有的BICs 超构表面大多由金属-介质或全介质等构成^{18]},金属-介质超构表面由光刻技术加工,加工程序较为复杂,耗时 长; 全介质结构损耗较低,可以利用 Mie 散射或 Fabry-Pérot 谐振等在近场产生强的电磁谐振,具有较高的调制 效率。2019年,YK Srivastava等提出了基于开口环谐振器组成的超构表面。实验结果表明,该超构表面能够探 测最小厚度为7 nm的分析物¹⁹。2021年, HAN等在石英衬底上制作了一种十字形结构的低损耗全硅(p> 10 000 Ω·cm)太赫兹超构表面^[10]。通过连续改变十字形结构的长度,打破结构平面内C4旋转对称和反转对称性, 同时激发出对称保护和偶发BICs。理论结果发现,这种全硅结构的O值大于104。实验中,由于加工损耗,在入 射角为6.84°时,测试得到的最高O值为69.7。全介质超构表面的辐射损耗难以抑制,会降低谐振O值,减弱光-物质相互作用的效率。此外,全介质或金属-介质超构表面的大部分场束缚在介质内部,无法与其他物质实现充 分的相互作用。自支撑式全金属结构不需要额外的衬底,在太赫兹方面有着广泛的应用前景。全金属超构表面 支持表面等离子激元(Surface Plasmon Polaritons, SPPs),其源于光与金属-空气界面上电子等离子体的电磁振 荡^[11]。在太赫兹波垂直入射情况下,金属孔结构获得的谐振Q值较低。斜波入射下,金属孔结构能够实现尖锐 的类Fano共振。这种自支撑金属孔阵列可用于DNA分子的高灵敏检测^[12],但入射波角度需精细调节,在实际应 用中不太方便。双层金属孔阵列可以增强 SPPs 场,增强的局域化 SPPs 场被限制在两层金属片之间的间隙内^[13], 这种增强场难以控制且损耗大。鉴于此,2021年,LIU等提出了一种基于双缝隙结构的全金属太赫兹超构表 面^[14]。该超构表面由厚度为50 μm的铜片构成,无需介质支撑,具有很好的柔韧性。由于激光加工系统的误差, 实验得到准BICs的Q值为44。同年,通过优化结构和加工方法,利用基于互补十字形结构的全金属超构表面获 得了实验Q值为102的准BICs,理论计算结果表明,通过减小非对称参数,铜材料超构表面的Q值约为600,而 完美导体超构表面的Q值可达1200^[15]。因此,全金属超构表面准BICs的Q值还有很大的提升空间。此外,已报 道的超构表面对入射波的极化特性敏感,限制了它们的实际应用潜力。如,实验样本需要旋转才能获得清晰的 准BICs。因此,急需开发具有与极化无关准BICs的超构表面谐振器。

本文提出一种极化无关准 BICs 的太赫兹全金属超构表面,超构表面由4个金属菱形孔组成,在垂直和水平 方向上呈现出非对称性效应。通过调节相邻菱形孔大小,可以实现高Q值准 BICs。准 BIC 在优化结构参数后获 得了大于1 300 的高Q值。此外,实验测试发现,改变入射波的极化角度,激发的准 BICs 频率保持不变,具有极 化不相关特性。模拟电场表明,相比于圆孔结构,菱形孔结构由于尖锐的转角可以实现较强的束缚场。具有极 化无关准 BICs 的全金属超构表面在化学和生物分子传感中具有巨大的应用潜力。

1 结构设计

具有金属圆孔的超构表面支持 SPPs,并对极化不敏感,是 极化无关结构设计的最佳选择^[16-17]。但金属圆孔结构受宽谐振 线宽的限制,Q值低。此外,金属圆孔边缘光滑,无直角结 构,产生的表面场较弱。因此,本文提出一种菱形孔结构的超 构表面。菱形孔结构具有4个尖锐的角,有期望实现较强的表 面场^[18]。图1为圆形孔结构与菱形孔结构的仿真传输曲线与谐 振场分布图,其中圆形孔与菱形孔周期都为260 μm,孔径大 小均为190 μm。如图所示,菱形孔结构在 0.1~1.0 THz 范围内 传输率较低,且谐振带宽较窄;同时菱形孔结构的 SPPs 场 更强。



图 2(a)为设计的由 4 个菱形孔组成的全金属超构表面,该 超构表面厚度为 50 μm,材料为铜,电导率为 5.96×10⁷ S/m。 circular and diamond-shaped hole structures 图1 圆形孔与菱形孔结构的传输曲线与场分布

为实现高Q值模式,可以改变对角线方向上菱形孔的尺寸,打破结构的对称性,实现BICs到准BICs的转变。 输入横电波(Transverse Electric, TE)和横磁波(Transverse Magnetic, TM)的方向分别平行于Y轴和X轴。Z方向为 太赫兹波入射方向,与金属超构表面垂直。图 2(b)为 超构表面的单元图,对角线方向上的孔具有相同的尺 寸,结构参数 L_1 =220 µm、 L_2 =190 µm。全金属超构表 面可以通过飞秒激光在铜箔上烧蚀而成,加工的实验 样品显微镜图如图 2(c)所示。采用商用激光加工系统, 精确度为2 µm左右;采用基于时域有限元差分算法的 全波仿真软件 CST 微波工作室 (Computer Simulation Technology Microwave Studio, CST-MW)进行仿真,边 界X和Y方向设置为周期性边界,Z方向为 Open边界。 样品平面尺寸大小为15 mm×15 mm,足够覆盖测试系 统的太赫兹光斑大小。与在介质上镀金属结构相比, 全金属结构在传感等应用中的性能更加稳定,可以重 复利用。



 Fig.2 Configuration of THz all-metal metasurfaces based on diamond-shaped hole arrays

 图 2 基于菱形孔阵列的太赫兹全金属超构表面结构示意图

2 数据与讨论

第7期

本实验采用太赫兹时域系统(menlo K15)进行测试,激光光源波长为1050 nm。太赫兹波的产生与探测都由 光导天线完成,光斑大小为4~6 mm,探测频率范围为0.2~1.5 THz。该菱形孔结构超构表面可以通过更改相邻孔 的尺寸打破结构的对称性,实现具有较高*Q*值的准BICs。为更好地研究金属损耗对准BICs的影响,图3显示了 完美导体(Perfect Electrical Conductor, PEC)和金属铜(copper)结构的仿真传输曲线。



Fig.3 Transmission spectra and electric vector distributions of THz metasurfaces 图 3 超构表面的太赫兹仿真测试传输曲线和电场矢量图

PEC与铜材料的菱形孔结构在相同的工作频率范围具有相似的传输曲线,但在准BICs谐振峰上,铜材料结构(绿色曲线)的传输率较低,如图3(a)所示。主要是由于金属的欧姆损耗,随着谐振Q越大,金属欧姆损耗对谐振影响越大^[19]。图3(b)为实验样品测试图,太赫兹波通过2个透镜进行聚焦,样品置于中间的支架上。测量结果与仿真结构较为一致,仿真曲线的谐振谷为0.776 THz,测量值为0.767 THz,偏差为9 GHz。这种谐振偏差来源于加工中的误差,样品尺寸相对于设计尺寸偏大。仿真结果显示,该超构表面实现了具有较高Q值的准BICs,

Q值为98;实际测量中,Q值为40,实测结果小于仿真结果。一方面是由于分辨力差别,太赫兹时域系统的分辨力为9.6 GHz,而仿真分辨力为1 GHz;另一方面,该超构表面由激光刻蚀而成,在孔边缘处会出现铜的氧化,进一步降低了谐振Q值。由于准 BICs 的谱线类似于 Fano 线形^[15],因此可使用 Fano 线形拟合这种共振光谱:

$$T = \left| a_1 + ja_2 + \frac{b}{\omega - \omega_0 + j\gamma} \right|^2 \tag{1}$$

式中: a_1 、 a_2 和b为常实数; ω_0 为中心谐振频率; γ 为共振总阻尼率。

由图 3(a)中蓝色点线可以看出,这个方程很好地拟合了仿真结果。图 3(b)~(c)为菱形孔结构的场矢量分布图, 当L₂=190 μm时,菱形孔结构的对称性没有被打破,因此在 0.776 THz 表现为完美的对称保护 BICs 模式;随着 L₂ 的增大,结构的对称性被打破,此时完美 BICs 转变成为准 BICs,传输谱显示为有限的 Q 值模式。当L₂=220 μm 时,准 BICs 出现在 0.776 THz。由矢量图可以看出,在 0.776 THz,对称破缺超构表面的相邻孔之间的电场矢量 呈反相位(out-phase)模式,而对称保护 BICs 表现为同相位(in-phase)模式。由于对称破坏效应,在水平和垂直方 向上都发生了强耦合,表明对称性破坏的结构导致了反相位的场分布,入射波与准 BICs 产生了耦合。

研究表明,尖锐准 BICs 共振峰的出现取决于 L_2 的长度, 通过改变 L_2 的长度,可以破坏菱形孔超构表面的结构对称性, 产生准 BICs 共振。因此,本文通过改变 L_2 的长度,进一步研 究菱形孔超构表面的光谱响应,如图 4 的伪彩色图所示。纵 轴表示 L_2 的长度变化,从 220 µm 到 190 µm,随着 L_2 的逐渐减 小,共振峰向高频率移动,共振峰的带宽也相应减小。当 L_2 = 190 µm 时,共振峰消失。这种消失的共振称为具有无限 Q 值 的对称保护型 BICs。虽然太赫兹波处于连续谱内,但由于 BICs 与辐射波完全解耦,没有泄漏能量,不能激发 BICs,而 一旦结构的对称性被破坏,对称性保护的 BICs 变成有限 Q 值 的准 BICs,表示一个束缚态耦合到扩展波,最终泄漏出去。随 着 L_2 的进一步减小(<190 µm),由于结构对称性被再次破坏, 共振峰会再次被激发出来,并向更高的频率移动。因此, BICs 的出现与 L_2 ,的值紧密相关。



various L_2 图4 超构表面的仿真传输曲线与L,的伪彩色图

图 5(a)为L₂从 220 μm 减小到 190 μm 的传输曲线图。很明显,准 BICs的带宽和频率都随着L₂的减小发生变化。准 BICs

的谐振谷向更高频率偏移,而谐振带宽逐步减小直至为0。当 L_2 =190 µm时,尖锐谐振消失,准BICs彻底转变为 完美的BICs。图 5(b)为 L_2 和准BICs的Q值与带宽的关系。随着 L_2 的逐渐减小,谐振Q值均呈指数增大。当 L_2 接近190 µm时,Q值趋于无穷大,这意味着理想状态BICs的实现;当 L_2 =193 µm时,该超构表面实现了大于1 300的理论Q值;随着 L_2 的增加,谐振Q值逐渐减小,当 L_2 增大到220 µm时,Q值为98。前述理论表明,在不考虑 金属的欧姆损耗时,准BICs的Q值与不对称参数 δ 有关,满足反二次方定律(Q∝1/ δ^2)^[20],无限小的不对称参数对 应着极大的Q值。因此,可以通过控制不对称参数,得到具有高Q值的准BICs。



Fig.5 Transmission spectra and resonant *Q*-factor, and bandwidth of metasurfaces as a function of L_2 图 5 超构表面的传输谱、谐振*Q*值、带宽与*L*,的关系

本文通过模拟具有不同入射极化角的传输曲线证实该超构表面的极化无关特性。模拟中,与实验样品不同的是,仿真模型孔的尺寸是一致的。图 6(a)伪彩图中,尖锐的准 BICs 出现在 0.776 THz。随着极化角(Φ)从 0°增大到 360°,准 BICs 的谐振特性依然保持不变,其频率呈一条直线,实验结果如图 6(b)所示。实验中,为测试不同极化角,需将样品旋转相应的角度。随着极化角的变化,测试的准 BICs 频率保持在 0.767 THz 不变,证明了本文提出的菱形孔超构表面具有极化无关特性。



 Fig.6 Simulated and measured transmission spectra of metasurfaces with different polarization angles

 图 6 不同极化角的超构表面的仿真和实验传输曲线

为进一步研究极化角度对准 BICs 的影响,本文仿真了不同角度下准 BICs 的电场分布,如图 7 所示。当极化 角为 0°时,在菱形孔的边缘都能发现聚集的 SPPs 场。但很明显,更强 SPPs 场聚集在尺寸较小的菱形孔中,且这 种场呈对角线分布。这种场的不对称分布来源于诱导的准 BICs,不对称模式允许耦合到太赫兹波。与单孔结构 相比,菱形孔超构表面具有明显的场增强^[17]。这种近场增强可以提高与分析物的相互作用,提升检测灵敏 度^[21-23]。当极化角变为 45°时,增强场分布模式以 45°旋转。虽然准 BICs 的谐振频率不变,但其诱发的场已经改 变。随着极化角的逐渐增大,强聚集场也随着旋转。如图 7 所示,当极化角为 90°和 135°时,相应的场分布也随 着旋转 90°和 135°。



Fig.7 The electric field distributions of metasurfaces with different polarization angles 图 7 不同极化角度下超构表面的电场分布图

3 结论

本文提出了一种具有高Q值的太赫兹全金属超构表面,该超构表面由4个不同尺寸的菱形孔组成,其在垂直和水平方向上呈现出非对称性效应。模拟电场表明,相比于圆孔结构,菱形孔结构由于尖锐的转角可以实现较强的束缚场。通过调节相邻孔尺寸大小,可以实现完美对称保护BICs转变为具有高Q值的准BICs。仿真结果表明,优化结构参数后,当尺寸偏差为3µm时,准BICs可以获得高于1300的Q值,对应带宽小于1GHz。由于加工和实验测试精确度限制,加工样品的菱形孔尺寸偏差为30µm,实验测试Q值为40。电场矢量分布数据显示,准BICs在纵向和横向产生了强耦合模式。这种高Q值的准BICs模式产生了反向的电场分布模式,而对称保护BICs则表现为同相位模式。此外,实验测试发现,改变入射波的极化角,激发的准BICs频率保持不变,因此,该超构表面具有极化不相关特性。虽然准BICs的谐振频率不变,但其诱发的场已经改变,随着极化角的逐渐增大,强聚集场也随着旋转。以上结果表明,具有极化无关准BICs的全金属超构表面,在化学和生物分子传感领域具有巨大的应用潜力。

参考文献:

- [1] ZHANG Xueqian, QUAN Xu, XIA Lingbo, et al. Terahertz surface plasmonic waves: a review [J]. Advanced Photonics, 2020, 2(1): 5-23. doi:10.1117/1.AP.2.1.014001.
- [2] CHEN Lin,LIAO Denggao,GUO Xuguang, et al. Terahertz time-domain spectroscopy and micro-cavity components for probing samples: a review[J]. Frontiers of Information Technology & Electronic Engineering, 2019,20(5):591-607. doi:10.1631/FITEE. 1800633.
- [3] 张腾,王丽艳,王新源,等. 基于非均匀硅基光栅的太赫兹选频反射器[J]. 红外与毫米波学报, 2019,38(6):733-738. (ZHANG Teng, WANG Liyan, WANG Xinyuan, et al. Frequency-selective THz reflectors based on nonuniform silicon gratings[J]. Journal of Infrared and Millimeter Waves, 2019, 38(6): 733-738. doi: 10.11972/j.issn.1001-9014.2019.06.009.
- [4] 孙青云,朱亦鸣,陈麟. 高Q值表面等离子体传感器研究[J]. 光学仪器, 2017,39(6):51-55. SUN Qingyun,ZHU Yiming,CHEN Lin. Study on high Q surface plasmon sensor[J]. Optical Instruments, 2017,39(6):51-55.
- [5] HSU C W, ZHEN B, STONE A D, et al. Bound states in the continuum[J]. Nature Reviews Materials, 2016, 1(9): 16048. doi: 0.1038/natrevmats.2016.48.
- [6] 柴若衡,刘文玮,程化,等.人工光学微纳结构中的连续体束缚态:原理、发展及应用[J].光学学报, 2021,41(1):302-316.
 (CHAI Ruoheng, LIU Wenwei, CHENG Hua, et al. Bound states of continuum in optical artificial micro-nanostructures: fundamentals,developments and applications[J]. Acta Optica Sinica, 2021,41(1):302-316.) doi:10.3788/AOS202141.0123001.
- [7] 史金辉,李伟妍,万顺,等. 太赫兹超表面中的连续域束缚态[J]. 激光与光电子学进展, 2023,60(18):126-138. (SHI Jinhui,LI Weiyan,WAN Shun,et al. Bound states in continuum in terahertz metasurface[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2023,60(18): 126-138.
- [8] BERUETE M, JÁUREGUI-LÓPEZ I. Terahertz sensing based on metasurfaces[J]. Advanced Optical Materials, 2020, 8(3): 1900721. doi:10.1002/adom.201900721.
- [9] SRIVASTAVA Y K, AKO R T, GUPTA M, et al. Terahertz sensing of 7 nm dielectric film with bound states in the continuum metasurfaces[J]. Applied Physics Letters, 2019,115(15):151105. doi:10.1063/1.5110383.
- [10] HAN S, PITCHAPPA P, WANG W, et al. Extended bound states in the continuum with symmetry-broken terahertz dielectric metasurfaces[J]. Advanced Optical Materials, 2021,9(7):2002001. doi:10.1002/adom.202002001.
- [11] WILLIAMS C R, ANDREWS S R, MAIER S A, et al. Highly confined guiding of terahertz surface plasmon polaritons on structured metal surfaces[J]. Nature Photonics, 2008,2(3):175-179. doi:10.1038/nphoton.2007.301.
- [12] YOSHIDA H,OGAWA Y,KAWAI Y,et al. Terahertz sensing method for protein detection using a thin metallic mesh[J]. Applied Physics Letters, 2007,91(25):253901. doi:10.1063/1.2825411.
- [13] MIYAMARU F, HANGYO M. Anomalous terahertz transmission through double-layer metal hole arrays by coupling of surface plasmon polaritons[J]. Physical Review B, 2005,71(16):165408. doi:10.1103/PHYSREVB.71.165408.
- [14] LIU Dejun, YU Xi, WU Feng, et al. Terahertz high-Q quasi-bound states in the continuum in laser-fabricated metallic doubleslit arrays[J]. Optics Express, 2021,29(16):24779-24791. doi:10.1364/OE.432108.
- [15] LIU Dejun, WU Feng, YANG Rui, et al. Quasi-bound states in the continuum in metal complementary periodic cross-shaped resonators at terahertz frequencies[J]. Optics Letters, 2021,46(17):4370-4373. doi:10.1364/OL.422771.