

基于导波驱动相变材料超构表面的基波及二次谐波聚焦*

覃赵福 陈浩 胡涛政 陈卓[†] 王振林

(南京大学物理学院, 南京 210093)

摘 要

利用超构表面优异的波前调控能力将片上光子集成电路对光场的操控拓展至自由空间是当前一项重要课题. 本文采用传输相位方法设计了一种基于波导模式激发的内嵌式超构表面, 其相位分布同时满足导模的基频以及二倍频的聚焦. 在此基础上, 将内嵌式材料限定为相变材料, 结合其不同相态时的折射率差异, 通过仿真手段实现了两种相态下分别针对于基波和二次谐波的聚焦. 在基波(或二次谐波)实现高质量聚焦时, 焦点处二次谐波(或基波)的成分得到了很大程度上的抑制, 更有利于后续完全滤波. 进一步地, 通过在波导层底面嵌入与顶面完全相同的超构表面, 并横向错开半个周期, 最终将关于基波聚焦和二次谐波聚焦的器件效率提升为原先单阵列情形的 2.2 倍和 3.7 倍. 本文的研究为导波驱动(或激发)超构表面的线性及非线性多功能复合调控提供了一种新的可能途径.

关键词: 波导, 聚焦, 二次谐波, 超构表面

PACS: 42.79.Gn, 42.65.Jx, 42.65.Ky, 78.67.Pt

基金: 国家自然科学基金(批准号: 11774162, 11834007, 11621091)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: zchen@nju.edu.cn

第一作者. E-mail: DZ1722026@smail.nju.edu.cn

1 引言

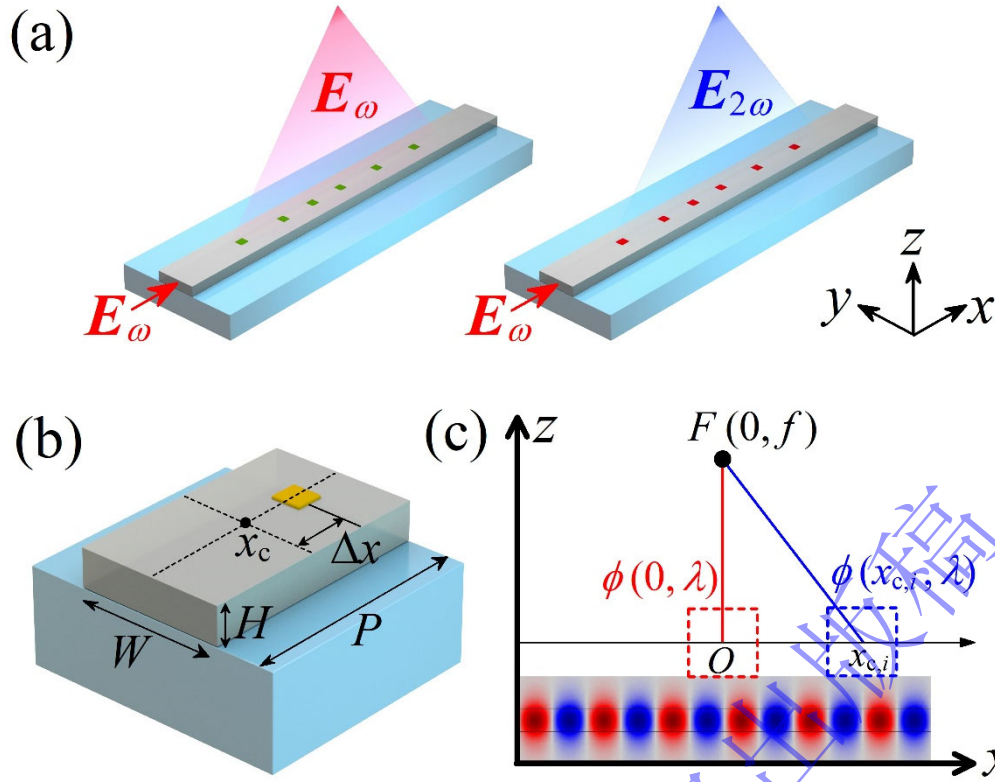
超构表面的出现为人们设计和制备新颖的光学器件提供了极大的机遇^[1]. 所谓超构表面是指亚波长厚度的人工结构化表面. 结合金属或高介电介质材料微纳结构的电磁共振, 人们设计了种类繁多的超构表面以满足电磁波的偏振、振幅和相位调控的要求^[3-7]. 例如在相位调控方面, 实现了诸如异常反射与折射^[8-10]、平面透镜聚焦^[11-14]、贝塞尔光束产生等特殊现象^[15-18]. 在大数据迅猛发展

的当下，光子集成电路（photonic integrated circuit, PIC）技术必将成为光器件的主流发展趋势^[19, 20]。类比于电子集成电路，PIC 将各种不同光电元器件（如激光器、光电探测器等）集成于单片上，与传统分立的光-电-光处理方式相比降低了复杂度，提升了可靠性，能以更低成本构建一个具有更多节点的全新网络结构。然而，PIC 正处于发展初期，其功能及应用仍需更加广泛而深入的研究，从而加以完善。超构表面得益于其亚波长厚度，更容易与 PIC 技术进行集成，因而被视为拓展 PIC 光场操控能力的一种创新解决方案。

近年来，波导结合超构表面的光场传输现象得到了一定程度的研究。例如，Yu 等在波导上构建相位梯度超构表面，实现了模式转换与偏振旋转等多种功能^[21]。Ni 等提出在波导上引入一种金属-介质-金属混合结构，通过改变结构参数，其共振相位可提供 $0 \sim 2\pi$ 的相位调制，从而在理论和实验上成功实现了导模能量辐射到自由空间中的光束偏折或聚焦^[22]。而后，关于导波驱动超构表面的一些复用器件也被提出^[23, 24]。作者注意到目前此类方向的研究多关注于线性光学范畴，而非线性光学效应在频率转换、光信息处理、物质特性表征等领域有着重要应用，且非线性超构表面的光学特性正为人们所广泛关注^[25-31]，因此研究基于导波驱动超构表面的非线性光场调控同样具有重要意义。

在本文中，我们设计并通过仿真手段展示了基于波导模式激发的相变材料超构表面所实现的线性及非线性多功能聚焦现象。首先，通过简单的推导说明基于导波驱动超构表面的聚焦原理，并验证同一超构表面设计对基波与二次谐波的聚焦效果。然后，在三维情形与二维情形讨论了相变材料超构表面的多功能聚焦现象。最后，在波导层底面再引入一层全同于上表面的超构阵列，并与其错开一定距离，分析对聚焦能力的影响。

2 导波驱动超构表面的线性及非线性聚焦



(彩色印刷) 图 1 (a) 导波驱动相变材料超构表面的线性与非线性多功能聚焦示意图; (b) 单个周期块结构的示意图, 图中标注了波导及超构基元 (金色方块) 的相关参数; (c) 波导驱动超构表面的聚焦原理, 其中伪彩图展示了未嵌入相变材料时硅波导 xz 截面的电场 y 分量分布, 符合 TE 基模的特性.

Fig.1. Schematic of the fundamental wave and second-harmonic focusing based on guided mode-driven phase-change materials metasurfaces. (a) Schematic of a single periodic block structure, in which the parameters of the waveguide and the metasurface element (golden square) are annotated. (c) Focusing principle of guided wave-driven metasurfaces, in which the pseudo-color diagram shows the distribution of the y component of the electric field on the xz cross-section of silicon waveguide without embedded phase-change materials, which conforms to the characteristics of TE fundamental mode.

如图1(a)所示, 器件是位于无限大石英衬底上的硅矩形波导, 波长为1550 nm 的近红外光以TE基模在波导中传播. 在波导表面沿轴线 (x 轴) 依据一定的排布嵌入了若干形状为长方体的相变材料, 并通过精心设计使其能够提供基波以及谐波聚焦所需的相位分布, 从而波导模式辐射到上方自由空间的一部分电磁场能量将实现聚焦. 需要说明的是, 由于嵌入的相变材料相对硅波导来说体积很小, 故其存在仅对原本传输的TE基模造成微扰. 也就是说, TE基模的传播常数 β_ω 始终为一定值, 其中 ω 为基频. 由于谐波光子由两个基波光子作用产生, 故满足基波

聚焦的同一超构表面设计同样满足对二次谐波的聚焦（详见下文推导）。选取某一特定的相变材料，使其折射率满足：当相变材料处于相态A时（图1(a)左图的绿色方块），其折射率与波导的折射率相差较大，波导中传输的TE基模通过超构表面辐射到上方自由空间中并主要呈现基波的聚焦，如图1(a)左图所示；而当相变材料处于相态B时（图1(a)右图的红色方块），其折射率与波导折射率相近，故此时基波与超构材料的相互作用弱到可忽略，自由空间中二次谐波的聚焦得以凸显，如图1(a)右图所示。因此，通过外界手段（如激光照射，热诱导等）调控相变材料使其在相态A与相态B之间切换，则可实现线性（基波）与非线性（二次谐波）的多功能聚焦。值得一提的是，尽管焦点处的波长成分并非严格单一，但通过这一方式有效降低了杂质波长与目标波长的成分比例，有利于后续使用滤波器件实现完全滤波。

2.1 基波的聚焦

下面阐述基于导波驱动超表面的聚焦原理。将波导沿能量传输的轴向划分成若干长度为 $P = 2\pi/\beta_\omega$ 的周期块，其中 β_ω 为TE基模在波导中的传播常数。对于光波导模式的求解通常借助于有效折射率法，而传播常数 β_ω 等于波导的有效折射率 n_{eff} 乘以自由空间光波矢 k ，即 $\beta_\omega = n_{\text{eff}}k = n_{\text{eff}} \cdot (\omega/c)$ ，反映了单位长度内光相位的变化量。将周期块的中心位置记为 $x_{c,i}$ ，其中下标 $i = 0, \pm 1, \pm 2$ 代表周期块的编号，如图1(b)所示。相邻 $x_{c,i}$ 间的相位差为 $\beta_\omega P = 2\pi$ ，即每个周期块的中心位置相位等价。为了方便讨论，将周期块的中心位置定义为零相位点，并且嵌入波导的超构基元采用相同形状，以消除共振相位的影响，也就是说，波导传输方向上不同位置的周期块与原点周期块的相位差仅与传播相位相关。对于焦点与波导表面的距离远大于波长的情形，可将周期块视为一单像素点，其所提供的相位来自于相变材料与周期块中心位置的偏移，即 $\Delta\phi = \beta_\omega \Delta x_i$ 。

具体地说, 根据图1(c), 容易写出实现聚焦所需的公式为

$$\phi(x_{c,i}, \lambda) - \phi(0, \lambda) = -\frac{2\pi}{\lambda} \left(\sqrt{x_{c,i}^2 + f^2} - f \right). \quad (1)$$

其中 λ 表示电磁波在真空中的波长, f 表示焦点到波导表面的距离. $\phi(0, \lambda)$ 为原点处周期块所对应的相位. 对于编号为 i 的周期块, 其中心位置为 $x_{c,i}$, 所对应的相位为 $\phi(x_{c,i}, \lambda)$. 需要说明, $\phi(x_{c,i}, \lambda)$ 包含了电磁波在波导中传播所累积的相位影响, 以及周期块中超构基元所提供的相位影响. 由于我们采用全同超构基元, 故超构基元所引入的相位差可以忽略, 再者可令原点处周期块中的超构基元与原点 O 重合, 则等式 (1) 左侧表示的相位差只剩下编号为 i 的周期块中源于超构基元偏离周期块中心所引入的传播相位影响. 将 $\phi(x_{c,i}, \lambda) - \phi(0, \lambda) = \Delta\phi(x_{c,i}, \lambda) = \beta_\omega \Delta x_i$ 代入 (1) 式即

$$\beta_\omega \Delta x_i = -\frac{2\pi}{\lambda} \left(\sqrt{x_{c,i}^2 + f^2} - f \right), \quad (2)$$

其中 $x_{c,i} = iP$. 上式给定了实现基波聚焦所需的, 第 i 个周期块中相变材料偏离周期块中心的位置.

2.2 二次谐波的聚焦

假设所采用的相变材料具有可观的体二阶非线性极化率, 则在TE模式基波的传输过程中将同时激发并产生一系列除相位以外性质完全相同的二阶非线性源. 根据二阶非线性极化强度式 $P_{2\omega} = \epsilon_0 \chi^{(2)} E_\omega^2$ 可知, 相位差为 $\Delta\phi(x_{c,i}, \lambda)$ 的基波所激发的非线性源之间的相位差应为 $\Delta\phi(x_{c,i}, \lambda/2) = 2 \cdot \Delta\phi(x_{c,i}, \lambda) = 2\beta_\omega \Delta x_i$, 代入 (1) 式并考虑到式中 $\lambda \rightarrow \lambda/2$, 得到

$$2\beta_\omega \Delta x_i = -2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \left(\sqrt{x_{c,i}^2 + f^2} - f \right), \quad (3)$$

其中 $x_{c,i} = iP$. 上式给定了实现二次波聚焦所需的, 第 i 个周期块中相变材料偏离周期块中心的位置. 事实上, 此公式与基波聚焦的公式完全一致. 也就是说, 满足基波聚焦的一套 Δx_i 同样能够满足二次谐波的聚焦. 容易证明, 类似结论同样

适用于三次谐波等.

值得注意的是, 对于波长为 $\lambda/2$ 的TE模式基波, 其相应的聚焦公式为

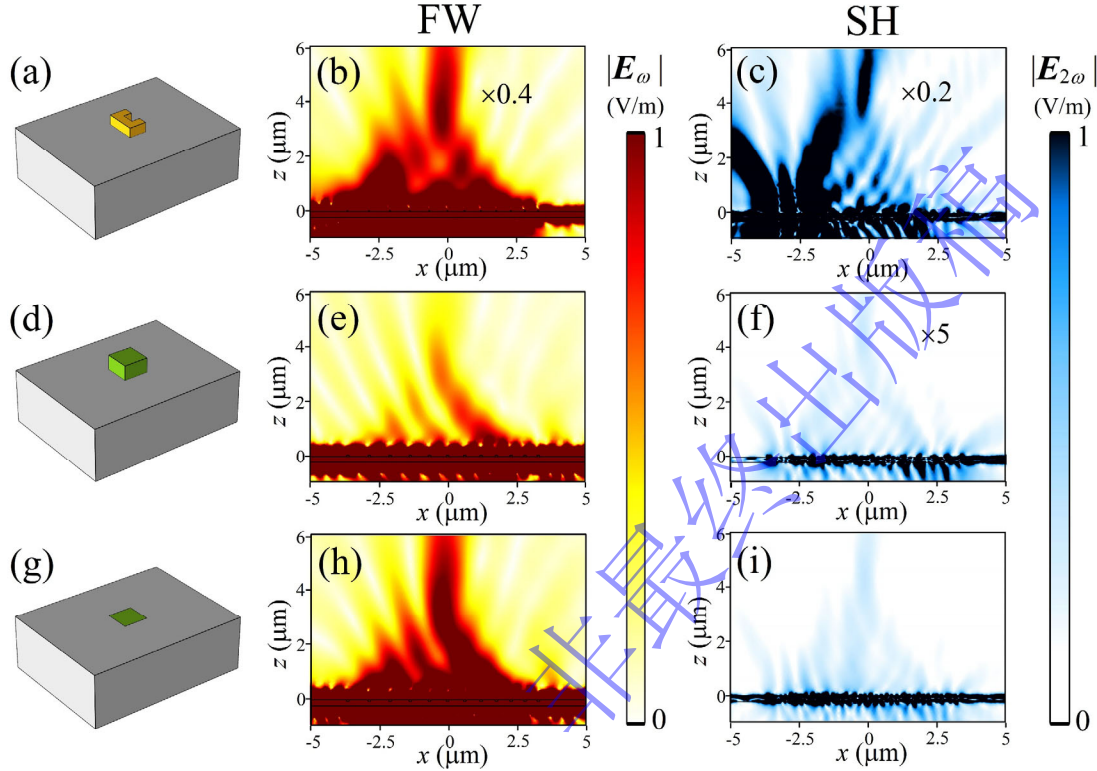
$$\beta_{2\omega}\Delta x_i = -2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \left(\sqrt{x_{c,i}^2 + f^2} - f \right), \quad (4)$$

而一般情况下 $\beta_{2\omega} \neq 2\beta_{\omega}$ (对于本文传输着 1550 nm 基波的矩形硅波导, 其基频和二倍频的传播常数分别为 $\beta_{\omega} = 9.6 \times 10^6$ rad/m 和 $\beta_{2\omega} = 2.52 \times 10^7$ rad/m), 因此(3)式和(4)式存在本质区别. (3)式表示相变材料受到导模激发后作为二阶非线性源, 向上方自由空间辐射二次谐波并产生聚焦; 而(4)式表示波长等于谐波波长的 TE 导模通过与相变材料发生相互作用而辐射到上方自由空间并产生聚焦. 对比(3)和(4)式容易看出, 这两种情形下的聚焦所需的是两套不同的 Δx_i 设计.

2.3 基波与谐波聚焦的验证

为了验证上述结论, 即(2)式和(3)式, 我们采用COMSOL多物理场有限元软件仿真了基于波导的线性与非线性聚焦. 光源为放置于半无限大石英衬底上的硅矩形波导中传输的TE基模, 波长为1550 nm. 激发源的输入借助了数值端口边界条件与边界模式分析步骤, 模型的四周包裹了完美匹配层(PML)并在波导模式的出射端面上采用了散射边界条件, 以避免仿真区域外部界面反射造成的影响. 如图1(b)所示, 硅波导的厚度 $H = 220$ nm, $W = 500$ nm, 周期块的长度 $P = 657$ nm. 硅的折射率取为3.45, 石英衬底的折射率取为1.5, 上半空间为空气(折射率为1). 对于超构基元材料, 我们在仿真中考虑了其在基波与二次谐波波长处的折射率差异; 而对于熔融石英衬底, 由于其在775 nm与1550 nm处的折射率相差不大, 故在基波和二次谐波波长处采用相同折射率进行仿真(硅波导同理). 事实上, 若考虑材料在二次谐波波长处的折射率不同于基波波长处, 则与原先情形相比, 相当于非线性源所处环境的折射率发生了改变. 这一改变使得不

同位置处的非线性源其相位都附加上一个相同的相位增量（因为采用了全同的超构基元），故非线性源间的相位差不发生改变，即二次谐波的聚焦同样能够实现。图1(c)中的伪彩图表示未嵌入相变材料时波导 xz 截面的电场 y 分量分布，模式分布符合TE基模的特性。



（彩色印刷）图 2 对于不同的超构基元，通过仿真得到的 xz 截面上的基波（第二列）和二次谐波（第三列）聚焦效应。聚焦现象的展示采用归一化的电场强度模值表示，下同。（a-c）金开口环谐振器，（d-f）长方体块状介质（g-i）嵌入式长方体块状介质。图中 FW 表示基波，SH 表示二次谐波，下同。

Fig. 2. Simulated focusing of the fundamental wave (second column) and second-harmonic (third column) on xz cross-section for different metasurface element. The pseudo-color diagram shows the distribution of the normalized electric field intensity modulus values (the same below). (a-c) gold split-ring resonator, (d-f) cuboid block dielectric. (g-i) embedded cuboid block dielectric. FW: fundamental wave, SH: second-harmonics, the same below.

对于谐波的仿真，我们考虑基波未耗尽的情形，即由于非线性转换效率远小于 1 而导致谐波信号强度远小于基波信号，从而谐波的产生对基波场不存在影响。在 COMSOL 中具体是将线性仿真步骤解得的电磁场量导入非线性步骤的非线性源表达式中，通过求解非线性亥姆霍兹方程则可得到由非线性源辐射至远场

的谐波场量.

我们尝试了不同结构来检验基于波导的线性与非线性聚焦现象. 根据 (2) 式, 聚焦条件只与全同超构基元的位置相关, 与其具体形状以及材料性质并无关联. 因此, 我们首先采用全同的金开口环谐振器 (split-ring resonators, SRRs), 该典型的非线性等离激元结构在其磁偶极共振与基波重合时能提供显著的二次谐波增强^[32-34]. 金的相对介电常数采用 Drude 模型: $\varepsilon_{\text{Au}} = 1 - \left[\omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega\gamma) \right]$, 其中 $\omega_p = 1.380 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ 为金的等离子体频率, $\gamma = 1.075 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ 为金的衰减速率. 根据流体动力学模型, SRR 的二次谐波来自于二阶非线性表面电流^[35, 36], 表示为

$$\mathbf{J}_{2\omega}^s = \frac{i\omega}{n_0 e} \left[(P_\omega^\perp P_\omega^\parallel) \mathbf{e}_t + \frac{1}{2} \frac{3\omega + i\gamma}{2\omega + i\gamma} (P_\omega^\perp P_\omega^\perp) \mathbf{e}_n \right], \quad (5)$$

其中 \mathbf{e}_t 和 \mathbf{e}_n 分别为平行和垂直于金属界面的单位矢量, $P_\omega^\parallel = \mathbf{e}_t \cdot \mathbf{P}_\omega$ 和 $P_\omega^\perp = \mathbf{e}_n \cdot \mathbf{P}_\omega$ 分别表示基频极化强度在金属界面的平行和垂直投影分量. 相关的参数为: 金的电子数密度 $n_0 = 5.98 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 电子的电荷量 $e = 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$. 虽然 (5) 式不同于二阶非线性体极化源的情形, 但根据其形式仍能推断非线性源之间的相位差等于激发该非线性源的基波之间的相位差的二倍, 因此 (3) 显然成立.

受限于仿真计算资源, 在三维仿真中我们尽量限制了模型的尺寸, 将焦距设定为 $4 \text{ }\mu\text{m}$, SRR 超构表面跨度约为 $10 \text{ }\mu\text{m}$. 虽然不是完美符合焦点与波导表面的距离远大于波长的要求, 但仿真结果具有一定参考意义. 我们调整 SRR 的参数, 使其磁偶极共振刚好位于 1550 nm 处, 基波的仿真结果如图 2(b)所示, 能明显分辨出波导上方约 $4 \text{ }\mu\text{m}$ 处存在一聚焦斑. 谐波的仿真结果如图 2(c)所示, 在波导上方同样位置处也实现了聚焦. 图 2(c)中左下位置处存在额外的光波分布, 降低了聚焦效果. 这是因为此处 SRR 之间的距离略大于谐波波长, 从而引起了高阶衍射, 同时还包含了等离激元共振增强了电磁场能量散射的影响. 不过需要说明

的是，绝大多数 SRR 的间距都满足高阶衍射的抑制条件，若将焦距设定为数十微米量级，并且将周期块的个数加大，则仿真得到的聚焦效果将大大改善。总而言之，这些结果证明了上述线性与非线性聚焦设计思想的普适性，即适用于各种材料以及各种形状的超构基元，此外，全同结构的设计也降低了整体结构的复杂性和加工难度。

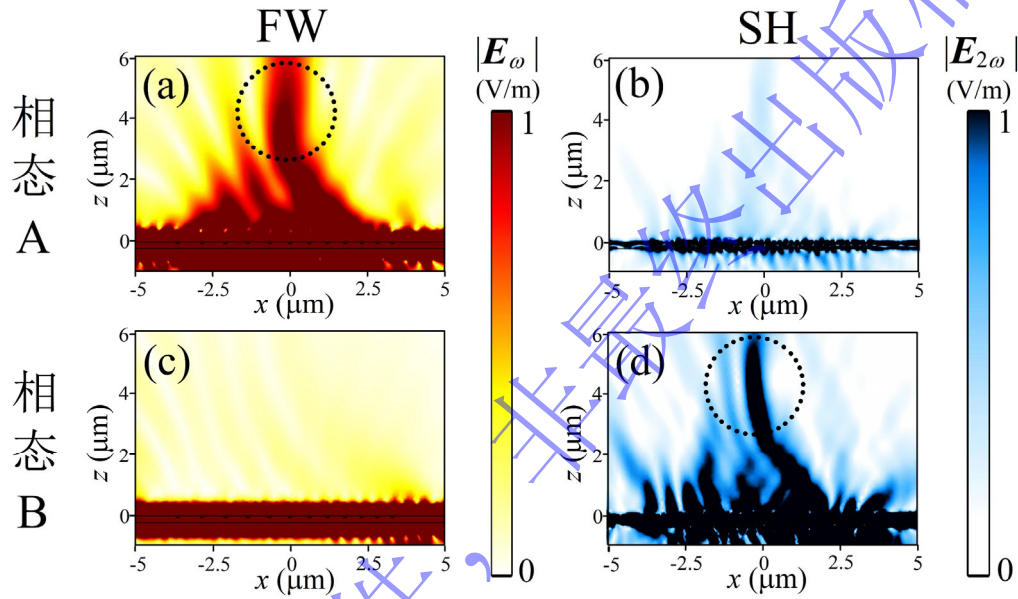
接着将超构基元换成长方体形状的介质材料（长、宽、高分别为 100 nm，100 nm 和 60 nm）并设定其折射率为 $n(1550\text{ nm}) = 5.6 + 1.1i$ ， $n(775\text{ nm}) = 4.1 + 2.8i$ 。超构基元的二阶非线性极化率设为 $\chi^{(2)} = 1 \times 10^{-13}\text{ m/V}$ 。由于周期块的尺寸固定，故长方体块状介质的尺寸不能太大，以避免相邻周期块中的超构基元发生耦合或重合。虽然尺寸的限制导致长方体超构基元的共振无法红移到基波波长附近，这在一定程度上降低了导模能量辐射到上方自由空间中的效率，但是可以通过采用嵌入式超构基元来改善非共振情形下的辐射效率。图 2(d)-(f)和图 2(g)-(i)分别表示同一非共振超构表面置于波导上方和嵌入波导表面的仿真结果，可见基波和二次谐波都满足了聚焦的要求，而嵌入式超构表面的基波及二次谐波聚焦能量均是非嵌入式超构表面的 5 倍左右，这归因于嵌入波导内部的超构基元和导模发生了更充分的耦合作用。

3 引入相变材料实现导波驱动的线性及非线性多功能聚焦

3.1 导波驱动相变材料超表面的聚焦

进一步，我们设想了一种结合相变材料所实现的线性及非线性多功能聚焦方案。在外部激励下，相变材料的晶格结构将发生改变，从而支持其在不同的相态下呈现出不同的光学性质^[37, 38]。近期，相变材料也被尝试应用于波导输出信号的光致调控^[39, 40]。上文已经提到，我们所希望选取的相变材料，其折射率满足相态 A 的折射率与波导的折射率相差较大，而相态 B 的折射率与波导材料的折射率接

近. 例如典型的相变材料 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (简称 GST) 便符合这一要求, GST 在 1550 nm 波长处的折射率分别为 $5.6+1.1i$ (晶态) 与 $3.45+0.1i$ (非晶状态) [37, 41]. 然而, 关于 GST 非线性性质的研究目前还相对较少. 故我们暂时假定存在某一相变材料, 其折射率色散曲线与 GST 一致, 并且其体二阶非线性极化率为一较大值. 在仿真中, 该相变材料在相态 A 时的折射率取为 $n_A(1550 \text{ nm}) = 5.6+1.1i$, $n_A(775 \text{ nm}) = 4.1+2.8i$; 在相态 B 时的折射率取为 $n_B(1550 \text{ nm}) = 3.45+0.1i$, $n_B(775 \text{ nm}) = 3.9+1.15i$.



(彩色印刷) 图 3 相变材料处于相态 A (第一行) 与相态 B (第二行) 时, 通过仿真得到的 xz 截面上的基波 (第一列) 和二次谐波 (第二列) 聚焦效应. 不同相态下基波 (二次谐波) 的聚焦使用了相同标度. 黑色点线圆圈出了目标聚焦斑所在的位置.

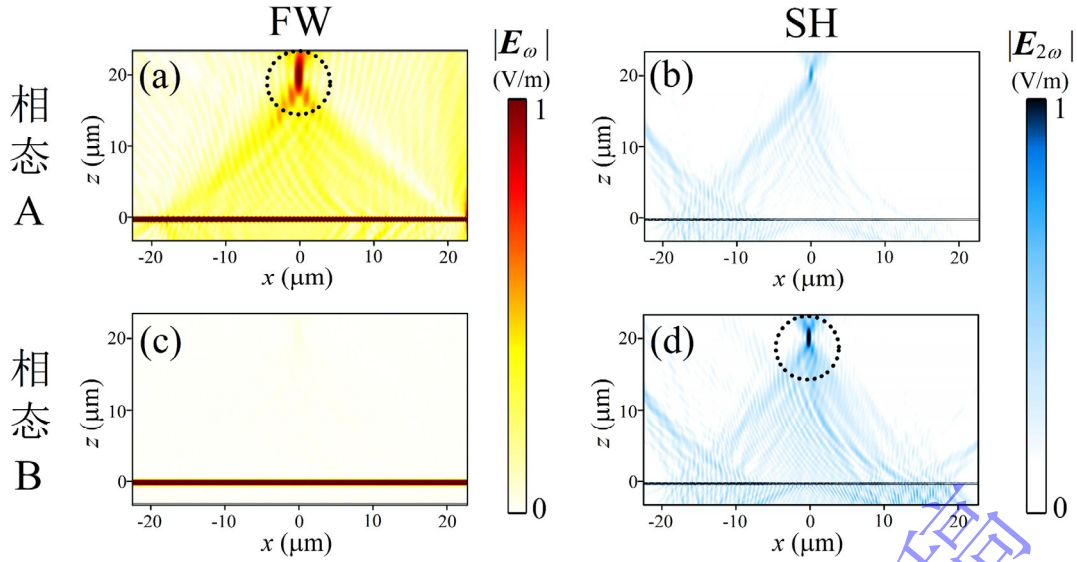
Fig. 3. Simulated focusing of the fundamental wave (first column) and second-harmonic (second column) on xz cross-section when phase-change material is in phase state A (first row) and state B (second row). Focusing of the fundamental wave (second-harmonic) in different phase states are on the same scale is used to. The black dotted circles mark the locations of the target focal spot.

仿真结果如图 3 所示. 当相变材料处于相态 A 时, 其折射率与硅波导的折射率有较大差异, 因而 TE 导模基波的一部分能量被相变材料超构基元散射或辐射到波导上方的自由空间中形成聚焦, 如图 3(a)所示, 聚焦斑同样清晰可辨. 如图 3(b)所示, 此时二次谐波虽然也能实现聚焦, 但其微弱的强度并不会对基波聚焦

的观测产生影响，故此时主要体现的是基波的聚焦。

当相变材料处于相态 B 时，其折射率的实部与硅波导的折射率相同。折射率的虚部虽不为零，但其值较小，且虚部的大小主要体现了对电磁场能量的吸收损耗。因此在此情形，相变材料的嵌入对波导中的 TE 基模几乎不产生影响。如图 3(c)所示，泄漏到波导上方自由空间中的基波能量相较于相态 A 情形（图 3(a)）微乎其微。图 3(d)展示了相态 B 下二次谐波的聚焦，图中的聚焦斑清晰可辨。故此时主要体现的是二次谐波的聚焦。需要说明的是，由于材料的二阶非线性极化率往往很小，故谐波的强度一般会与基波相差十几个量级。因此，即使图 3(d)所示的二次谐波聚焦效应得以凸显，但这里主要是指基波聚焦能量得到了很大程度的抑制，而并非认为谐波的强度可与基波比拟。非线性测量中通常使用飞秒激光来提供足以激发谐波的高激发功率，而如此高的功率有时又会给基波的滤除带来困难。因而在焦点处降低基波成分的比例将在一定程度上有利于基波的完全过滤，从而获得纯净的二次谐波。

对比图(b)和(d)可见，相态 A 下的二次谐波辐射到自由空间中的能量明显小于相态 B 情形，我们将其归因于相态 A 的折射率虚部较大，因此对谐波能量的吸收损耗也较多。有必要再次说明，对于图中不规则的聚焦光斑，可以通过增大仿真区域和设置更远的焦距来改善，因此这并不影响上述关于基波和二次谐波聚焦的讨论结果。



（彩色印刷）图 4 对于二维平板波导模型，相变材料处于相态 A（第一行）与相态 B（第二行）时，通过仿真得到的 xz 截面上的基波（第一列）和二次谐波（第二列）聚焦效应。不同相态下基波（二次谐波）的聚焦使用了相同标度。黑色点线圆圈出了目标聚焦斑所在的位置。

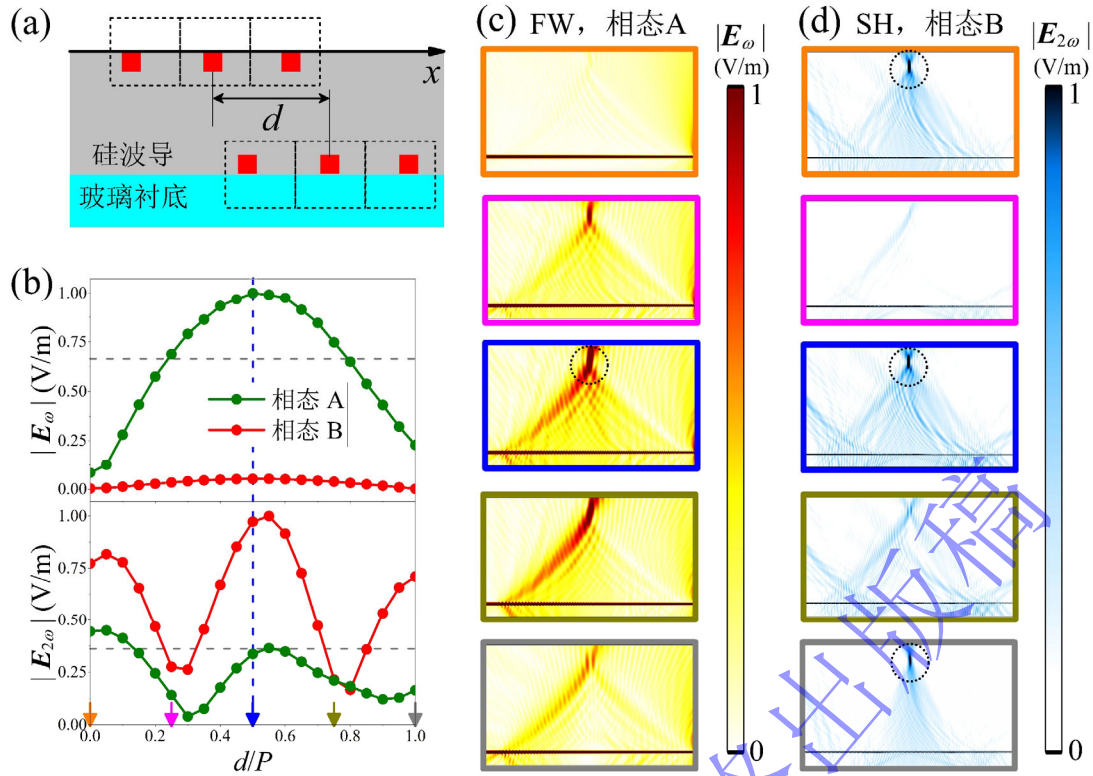
Fig. 4. For the 2D flat waveguide model, simulated focusing of the fundamental wave (first column) and second-harmonic (second column) on xz cross-section when phase-change material is in phase state A (first row) and state B (second row). Focusing of the fundamental wave (second-harmonic) in different phase states are on the same scale is used to. The black dotted circles mark the locations of the target focal spot.

为了更好地展示基于相变材料超构表面实现的导模线性与非线性聚焦，我们还将仿真拓展到二维情形。此时的矩形波导变化为 xy 面上的平板波导，硅波导层的厚度仍为 $H = 220 \text{ nm}$ 。不同的是由于相变材料变化为 y 方向上无限长的矩形条棒，故为了减弱其对 TE 基模的影响，将相变材料的嵌入深度以及沿 x 方向的长度都缩短为 20 nm 。

仿真结果如图 4 所示，图 4 展示了和图 3 相似的结果。黑色点线圆圈出了相变材料处于相态 A 时的基波聚焦斑和处于相态 B 时的二次谐波聚焦斑，可见聚焦的质量非常高，且焦点均处于前期设计的 $20 \mu\text{m}$ 处。观察图 4(b)和(d)，会发现有小部分的谐波电磁场能量偏离了焦点，这可能来源于两方面原因：一是有小部分相变材料超构基元的间距略大于谐波波长，因而引入了高阶衍射的效应；二是

非线性源辐射产生的部分二次谐波能量也会进一步以各阶次导模的形式在波导中传播，这些模式一般并不满足聚焦条件，因而导致了自由空间中不规则的能量分布。通过对 z 方向的能流密度进行积分可得：对于相态 A，向波导上方空间辐射的基波能量中有 69% 的能量实现了聚焦；对于相态 B，则有 76% 的二次谐波能量实现了聚焦。可见聚焦的效果良好。另一方面，本文所提出的超构器件效率可定义为 $\eta = P_f/P_0$ ，其中 P_f 为焦点附近能流密度矢量的积分值，而 $P_0 = 1 \text{ W}$ 为仿真中采用的入射功率。对于图 4 所示的结果，相变材料处于相态 A 时关于基波聚焦的器件效率为 0.9%，相态 B 时关于二次谐波聚焦的器件效率为 $4.3 \times 10^{-12} \%$ （超构基元的二阶非线性极化率设为 $\chi^{(2)} = 1 \times 10^{-13} \text{ m/V}$ ）。效率数值不高的原因是考虑了超构表面对导模的微扰作用，即绝大部分的导模能量不受超构表面的影响，继续沿波导传播而不是辐射到自由空间。此外，我们认为以下两方面原因会进一步导致效率的下降：超构基元折射率虚部非零所带来的吸收损耗，以及超构基元处于非共振状态。接下来将探讨如何通过其他方式来实现器件效率的提升。

3.2 导波驱动的双层相变材料超构表面



(彩色印刷) 图 5 (a) 导波驱动的双层相变材料超构表面示意图. (b) 不同相态下焦点处归一化的基波和二次谐波电场模值随偏移距离 d 变化的曲线. 上、下图中的灰色水平虚线分别标记出单层相变材料超构表面在相态 A 下焦点处的基波电场模值以及相态 B 下焦点处的二次谐波电场模值. 蓝色虚线标记了偏移量为半个周期的情形. (c) 相变材料处于相态 A 时, 不同偏移量 d 所对应的基波聚焦结果. (d) 相变材料处于相态 B 时, 不同偏移量 d 所对应的二次谐波聚焦结果. (c)和(d)中图片外框的颜色与(b)中箭头颜色一致, 分别代表 d 的不同的取值. 黑色点线圆圈出了高质量聚焦斑所在的位置.

Fig. 5. (a) Schematic of the bi-layer phase-change material metasurface driven by guide mode. (b) The normalized amplitude of the electric field of the fundamental wave and second-harmonic at the focal point versus the offset distance d under different phase states. The gray horizontal dashed lines mark the value of the electric field amplitude of the fundamental wave under phase state A, and the electric field amplitude of the second-harmonic under phase state B, respectively, for the monolayer phase-change material metasurface. The dotted blue line marks the case where the offset is equal to half of the period. (c) Focusing of the fundamental wave with respect to different offsets when phase-change material is in phase state A. (d) Focusing of the second-harmonic with respect to different offsets when phase-change material is in phase state B. Colors of the outer frame of the pictures in (c) and (d) are consistent with the colors of the arrows in (b), which correspond to different values of d . The black dotted circles mark the location of the high quality focal spot.

为了提升 TE 导模相变材料超构基元辐射到自由空间的能量总量, 其中一种方法是增大超构基元在垂直于导模传播方向上的尺寸, 通过增加导模与超构基元

的相互作用区域来增加泄漏到自由空间中的电磁场能量。除此之外，我们接下来将讨论通过增加超构基元数量的方式来提升焦点能量。如图 5(a)所示，可在波导层底面构建与顶面完全相同的相变材料超构基元阵列，充分利用波导的上下界面，以此寻求辐射到自由空间能量的提升。考虑到上下界面的超构基元阵列仅相距 220 nm，其相互作用不可忽略，故将二者沿导模传播方向(x 轴)错开一定距离 d ，并讨论改变 d 对焦点能量的影响。相关的仿真基于图 4 所示的二维平板波导模型。

图 5(b)展示了不同相态下焦点处的基波和二次谐波电场模值随 d 变化的曲线。首先从图中可见，当相变材料处于相态 A 时，焦点处的谐波能量基本上都小于相态 B 时的值；当相变材料处于相态 B 时，焦点处的基波能量与相态 A 相比受到了很大程度的抑制。即相态 A 主要呈现基波的聚焦，相态 B 主要呈现二次谐波的聚焦，这与前面的讨论结果是一致的。其次，根据图 5(b)上图可知，当波导上下表面的两个相变材料超构基元阵列错开半个周期时，基波的焦点能量达到极大。这可以从 TE 导模的波动性质加以理解，平板波导的上下表面作为电磁场的边界，恰好对应着 TE 基模的相邻波节，相位相差 π ，因此当 d 的值等于周期 P 的整数倍时，位于波导上下表面的超构基元所散射或辐射的电磁波相位也近似于相差 π ，从而发生相消干涉，能量无法传播到远场。同理，当 d 的值等于半周期的奇数倍时，由于在导模传播方向上又引入了 π 的相位差，因此波导上下界面超构基元散射或辐射的电磁场发生相长干涉，进而增加了焦点处的能量。正因如此，焦点处基波的电场能量才会随着 d 的改变呈现出正弦式的振荡变化。由于二次谐波的相位与激发此谐波源所对应基波的相位密切相关，故依据相似的解释可知焦点处二次谐波的能量同样随着 d 的改变呈现出三角函数式的振荡变化，如图 5(b)所示，不过由于频率加倍，故振荡周期相较于基波情形减半。需要说明指出，图 (b)中的曲线呈现了不同程度的不对称性，而并非严格的三角函数，这是因为在我

们的设计方案中将周期块与嵌入其中的相变材料视为一超构基元像素点，再加上波导上下表面超构基元阵列相距较近，故在 d 的值变化的过程中发生的并不是严格的相消和相长干涉。

图 5(c)和(d)分别展示了不同 d 值情况下关于相态 A 基波的聚焦，以及关于相态 B 二次谐波的聚焦结果。例如图 5(c)的最下面一张图，由于波导上下表面的超构阵列错开了一个周期，故图中未实现基波的聚焦。超构阵列两侧出现了延伸向焦点的能量分布，这是因为阵列的错开导致上、下阵列的左、右端各多出一个周期块，其垂直方向上没有超构基元对应，故能量可以传播至远场。高质量的聚焦斑均用黑色点线圆圈出，分别对应于焦点处基波和二次谐波的电场能量分别达到极值的情形（图 5(b)）。根据图 5(c)和(d)并结合图 5(b)的蓝色虚线可知，当 d 值等于半周期的时候，相态 A 基波和相态 B 谐波的聚焦能量都实现极大。相变材料处于相态 A 时关于基波聚焦的器件效率为 2%，是单阵列情形的 2.2 倍；相态 B 时关于二次谐波聚焦的器件效率为 $1.6 \times 10^{-11}\%$ ，是单阵列情形的 3.7 倍。这证明双层超构表面的设计方案可实现器件效率的进一步提升。

4 结 论

本文通过推导并利用仿真手段证实了同一超构表面设计对基波与二次谐波能同时实现聚焦的效果。然后采用传输相位方法设计了一种基于波导模式驱动的内嵌式相变材料超构表面。相变材料处于相态 A 时的折射率与波导的折射率相差较大，此时主要体现基波的聚焦；相变材料处于相态 B 时的折射率与波导材料的折射率接近，此时基波的聚焦受抑制，主要体现二次谐波的聚焦。进一步地，通过在波导层底面嵌入与上表面完全相同的超构表面，并横向错开半周期，使波导上下界面超构基元散射或辐射的电磁场发生相长干涉，最终将关于基波聚焦和二次谐波聚焦的器件效率提升为原先单阵列情形的 2.2 倍和 3.7 倍。这一线性与非

线性聚焦设计思想不仅适用于各种形状的超构基元，而且全同结构的设计也降低了整体结构的复杂性和加工难度。基于导波驱动的超构表面在光子集成电路中的导波与自由空间电磁波之间架起一道桥梁。相变材料的引入为动态调控超构表面的线性及非线性提供了一种新方案。进一步地，将超构基元排布为二维阵列，则可将自由空间光场的调控拓展到更高维度。因此，本文基于导波驱动相变材料超构表面的设计有机会在光通信、遥感测量、全息成像以及光热显示中得到实际应用。

参考文献

- [1] Pendry J B, Schurig D, Smith D R 2006 *Science* **312** 1780
- [2] Yu N, Capasso F 2014 *Nat. Mater.* **13** 139
- [3] Meinzer N, Barnes W L, Hooper I R 2014 *Nat. Photonics* **8** 889
- [4] Jahani S, Jacob Z 2016 *Nat. Nanotechnol.* **11** 23
- [5] Kuznetsov A I, Miroshnichenko A E, Brongersma M L, Kivshar Y S, Luk'yanchuk B 2016 *Science* **354** aag2472
- [6] Genevet P, Capasso F, Aieta F, Khorasaninejad M, Devlin R 2017 *Optica* **4** 139
- [7] Kamali S M, Arbabi E, Arbabi A, Faraon A 2018 *Nanophotonics-berlin* **7** 1041
- [8] Schurig D, Mock J J, Justice B J, Cummer S A, Pendry J B, Starr A F, Smith D R 2006 *Science* **314** 977
- [9] Shalaev V M 2007 *Nat. Photonics* **1** 41
- [10] Yu N, Genevet P, Kats M A, Aieta F, Tetienne J P, Capasso F, Gaburro Z 2011 *Science* **334** 333
- [11] Chen X, Huang L, Muhlenbernd H, Li G, Bai B, Tan Q, Jin G, Qiu C W, Zhang

- S, Zentgraf T 2012 *Nat. Commun.* **3** 1198
- [12] Khorasaninejad M, Chen W T, Oh J, Capasso F 2016 *Nano Lett.* **16** 3732
- [13] Khorasaninejad M, Zhu A Y, Roques-Carmes C, Chen W T, Oh J, Mishra I, Devlin R C, Capasso F 2016 *Nano Lett.* **16** 7229
- [14] Wang S, Wu P C, Su V C, Lai Y C, Chen M K, Kuo H Y, Chen B H, Chen Y H, Huang T T, Wang J H, Lin R M, Kuan C H, Li T, Wang Z, Zhu S, Tsai D P 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 227
- [15] Chen W T, Khorasaninejad M, Zhu A Y, Oh J, Devlin R C, Zaidi A, Capasso F 2017 *Light Sci. Appl.* **6** e16259
- [16] Wang Z, Dong S H, Luo W J, Jia M, Liang Z Z, He Q, Sun S L, Zhou L 2018 *Appl. Phys. Lett.* **112** 191901
- [17] Akram M R, Mehmood M Q, Tauqeer T, Rana A S, Rukhlenko I D, Zhu W 2019 *Opt. Express* **27** 9467
- [18] Li T Y, Li X Y, Yan S H, Xu X H, Wang S M, Yao B L, Wang Z L, Zhu S N 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 014059
- [19] Sun C, Wade M T, Lee Y, Orcutt J S, Alloatti L, Georgas M S, Waterman A S, Shainline J M, Avizienis R R, Lin S, Moss B R, Kumar R, Pavanello F, Atabaki A H, Cook H M, Ou A J, Leu J C, Chen Y H, Asanovic K, Ram R J, Popovic M A, Stojanovic V M 2015 *Nature* **528** 534
- [20] Atabaki A H, Moazeni S, Pavanello F, Gevorgyan H, Notaros J, Alloatti L, Wade M T, Sun C, Kruger S A, Meng H, Al Qubaisi K, Wang I, Zhang B, Khilo A, Baiocco C V, Popovic M A, Stojanovic V M, Ram R J 2018 *Nature* **556** 349

- [21] Li Z, Kim M H, Wang C, Han Z, Shrestha S, Overvig A C, Lu M, Stein A, Agarwal A M, Loncar M, Yu N 2017 *Nat. Nanotechnol.* **12** 675
- [22] Guo X, Ding Y, Chen X, Duan Y, Ni X 2020 *Sci. Adv.* **6** eabb4142
- [23] Ha Y, Guo Y, Pu M, Zhang F, Li X, Ma X, Xu M, Luo X 2020 *Opt. Express* **28** 7943
- [24] Ha Y L, Guo Y H, Pu M B, Li X, Ma X L, Zhang Z J, Luo X G 2021 *Adv. Theory Simul.* **4** 2000239
- [25] Kauranen M, Zayats A V 2012 *Nat. Photonics* **6** 737
- [26] Butet J, Brevet P F, Martin O J 2015 *ACS Nano* **9** 10545
- [27] Deng J H, Li G X 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 147803 (in Chinese) [邓俊鸿, 李贵新 2017 物理学报 **66** 147803]
- [28] Krasnok A, Tymchenko M, Alu A 2018 *Mater. Today* **21** 8
- [29] Li G, Chen S, Pholchai N, Reineke B, Wong P W, Pun E Y, Cheah K W, Zentgraf T, Zhang S 2015 *Nat. Mater.* **14** 607
- [30] Kivshar Y 2018 *Natl. Sci. Rev.* **5** 144
- [31] Kang L, Cui Y, Lan S, Rodrigues S P, Brongersma M L, Cai W 2014 *Nat. Commun.* **5** 4680
- [32] Klein M W, Enkrich C, Wegener M, Linden S 2006 *Science* **313** 502
- [33] Linden S, Enkrich C, Wegener M, Zhou J, Koschny T, Soukoulis C M 2004 *Science* **306** 1351
- [34] Tsai W Y, Chung T L, Hsiao H H, Chen J W, Lin R J, Wu P C, Sun G, Wang C M, Misawa H, Tsai D P 2019 *Adv. Mater.* **31** e1806479
- [35] Ciraci C, Poutina E, Scalora M, Smith D R 2012 *Phys. Rev. B* **86** 115451

- [36] Ciraci C, Poutina E, Scalora M, Smith D R 2012 *Phys. Rev. B* **85** 201403
- [37] Ruiz de Galarreta C, Sinev I, Alexeev A M, Trofimov P, Ladutenko K, Garcia-Cuevas Carrillo S, Gemo E, Baldycheva A, Bertolotti J, David Wright C 2020 *Optica* **7** 476
- [38] Yan W, Wang J Y, Qu Y R, Li Q, Qiu M 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 154202 (in Chinese) [严巍, 王纪永, 曲俞睿, 李强, 仇旻 2020 物理学报 **69** 154202]
- [39] Feldmann J, Stegmaier M, Gruhler N, Rios C, Bhaskaran H, Wright C D, Pernice W H P 2017 *Nat. Commun.* **8** 1256
- [40] Ríos C, Stegmaier M, Hosseini P, Wang D, Scherer T, Wright C D, Bhaskaran H, Pernice W H P 2015 *Nat. Photonics* **9** 725
- [41] de Galarreta C R, Alexeev A M, Au Y Y, Lopez-Garcia M, Klemm M, Cryan M, Bertolotti J, Wright C D 2018 *Adv. Funct. Mater.* **28** 1704993

Fundamental wave and second-harmonic focusing based on guided wave-driven phase-change materials metasurfaces*

Qin Zhao-Fu Chen Hao Hu Tao-Zheng Chen Zhuo[†] Wang Zhen-Lin

(Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

Abstract

It is an important project to use metasurfaces to extend the manipulation of light field by on-chip photonic integrated circuits to the free-space. In this paper, an waveguide mode-driven embedded metasurface is designed by using the propagation phase method. The phase distribution of the

metasurface satisfies both the focusing of the fundamental wave and second-harmonic. On this basis, a phase-change material is chosen to be embedded in waveguide. Combined with its refractive index difference in different phase states, focusing of the fundamental wave and second-harmonic is achieved in two phase states, respectively, through the simulation method. When the fundamental wave (or second-harmonic) achieves high quality focusing, the components of the second-harmonic (or fundamental wave) at the focus are suppressed to a large extent, which is more conducive to the subsequent complete filtering. Furthermore, the efficiencies at the fundamental wave and second-harmonic are increased by 2.2 and 3.7 times by embedding another metasurface at the bottom of the waveguide layer which is exactly the same as that at the top and shift it laterally by half a period. This study provides a new alternative approach for the linear and nonlinear multifunctional control of guided mode-driven metasurfaces.

Keywords: Waveguide, Focus, Second-harmonics, Metasurfaces

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11774162, 11834007, 11621091).