

# 基于硅基圆孔阵列超表面的非线性增强与传感研究

吕淑媛<sup>†</sup> 安岚 罗文峰 张璐璐 苏子雯

(西安邮电大学电子工程学院, 西安 710121)

(2026年1月13日收到; 2026年3月14日收到修改稿)

本文提出并研究了一种基于硅基圆孔阵列的连续域束缚态超表面基于硅基圆孔阵列超表面的非线性增强与传感研究, 通过引入面内不对称参数  $d$  将对称性保护的 BIC 转化为具有高  $Q$  因子的 q-BIC, 多极子分解分析显示, 该 q-BIC 模式以沿  $z$  方向极化的磁偶极辐射为主导, 在 1090 nm 附近产生显著的电磁场局域增强, 为非线性光学过程提供了理想的物理平台. 在此基础上, 本文系统地研究了该结构的三次谐波产生性能: 在谐振波长处, 三次谐波转换效率达到 0.511%, 且谐波功率与泵浦功率呈严格的三次方关系, 验证了其高效的三阶非线性转换能力. 进一步地在传感应用方面该结构对环境折射率变化展现出高灵敏度, 基于三次谐波的非线性灵敏度达到 255 nm/RIU, 相对基于透射的线性灵敏度提升约 296%. 本研究通过对 q-BIC 模式磁偶极主导机制的揭示、THG 转换效率的量化分析以及非线性传感性能的对比验证, 为协同实现高效非线性转换与高灵敏度传感提供了可行的技术路径, 对发展多功能集成光子器件具有参考价值.

**关键词:** 连续域束缚态, 超表面, 非线性光学, 三次谐波, 折射率传感

**DOI:** 10.7498/aps.75.20260056

**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260056

## 1 引言

非线性光学是现代光子学与光电子技术的核心基石, 它研究的是强光场与物质相互作用下, 光波频率、相位、振幅等物理特性发生转换的物理现象<sup>[1]</sup>. 在众多非线性光学过程中, 三次谐波产生 (third harmonic generation, THG) 作为三阶非线性效应的典型代表, 能够将三个入射泵浦光子合并为一个能量三倍、频率三倍的高频光子, 在相干紫外光源产生、超快光学信号处理、生物成像以及量子信息科学等领域具有广阔的应用前景<sup>[2,3]</sup>. 然而, 传统块体非线性晶体通常依赖于长相互作用距离来累积非线性效应, 这与集成光子学的小型化、片上化发展方向相悖. 同时, THG 过程固有的弱相互作用要求强度极高的泵浦功率, 这严重限制了其

在低功耗纳米光子器件中的应用.

近年来, 超表面的出现为突破这一瓶颈提供了革命性的解决方案. 超表面是一种由亚波长尺度人工原子按特定序构排列而成的二维平面光学材料, 实现对电磁波振幅、相位、偏振等自由度的灵活且精确的调控<sup>[4,5]</sup>. 其中, 基于高折射率介电材料 (如硅、氮化镓) 的超表面, 因其在光学波段具有低吸收损耗和可支持强电磁米氏共振的特性, 受到了研究者的广泛青睐<sup>[6]</sup>. 通过设计介电纳米结构的几何参数, 可以激发诸如磁偶极共振、电四极共振等高阶模式, 产生极强的电磁场局域与增强, 为增强光与物质的非线性相互作用提供了理想平台<sup>[7,8]</sup>.

然而, 在基于该平台追求更大的非线性转换效率的过程中, 仍面临着一个关键挑战, 即共振模式的品质因子 ( $Q$  因子) 与辐射效率之间存在着权衡. 一方面, 高的  $Q$  因子意味着光子在被吸收或散射

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: 1159955131@qq.com

前能在谐振腔内停留更长时间,从而极大地增强腔内光强,这对于非线性效应至关重要;但另一方面,极高的  $Q$  因子也意味着谐振腔与外部世界的耦合很弱,这既不利于泵浦光的有效注入,也不利于产生的谐波光向远场的高效辐射<sup>[9,10]</sup>.连续域束缚态 (bound states in the continuum, BIC) 概念的引入,为解决这一矛盾提供了理论基础<sup>[11,12]</sup>.国内学者对 BIC 物理机制的研究也日趋深入, Yao 等<sup>[13]</sup>对周期光学系统中的 BIC 进行了系统梳理,从产生条件、物理机制到非线性光学和激光器等应用前景进行了全面阐述,为本研究提供了重要的理论支撑. BIC 是一种理论上存在于辐射连续谱中却又完全无辐射损耗的特殊电磁态,其  $Q$  因子趋于无穷大.在实际的纳米光子结构中,通过引入可控的对称性破缺,可以将理想的 BIC 转化为具有极高但有限  $Q$  因子的准连续域束缚态 (quasi-bound states in the continuum, q-BIC)<sup>[14]</sup>. q-BIC 因而兼具了极高的场增强能力和必要的辐射通道,使其成为实现高效非线性光学过程的共振模式.研究表明,基于硅超表面中的 q-BIC,可以在低泵浦功率下实现显著增强的二阶和三次谐波产生<sup>[15,16]</sup>.最近, Qin 等<sup>[17]</sup>进一步在菱形非晶硅超表面中实现了双波段三次谐波产生,展示了极化可控与极化不敏感的特性.然而,对 q-BIC 增强非线性效应的物理理解仍可继续深入,一方面需明确其多极子特征如何具体影响非线性极化过程;另一方面需探索如何通过结构参数的精确调控,在优化高  $Q$  因子的同时,实现基频与三次谐波模式的有效空间匹配,从而协同提升非线性转换与辐射效率.

近年来, BIC 的物理机制与应用研究已从最初的光子晶体扩展至等离激元<sup>[18]</sup>和全介质超表面<sup>[19]</sup>等多个领域.在应用层面, BIC 及其衍生的 q-BIC 模式展现出巨大的潜力.例如,通过能带折叠策略在金属超表面中实现的准导模,能够产生尖锐的类电磁诱导透明谱线,为设计高性能的太赫兹柔性光子器件提供了新思路<sup>[20]</sup>.此外,在基于石墨烯的可调谐等离激元系统中,研究人员成功实现了动态可调的 q-BIC,其共振波长和品质因子展现出极高的稳定性,在折射率传感和双频段完美吸收器等方向具有重要应用价值<sup>[18]</sup>.这些研究共同表明,通过精确的结构设计, BIC 相关共振不仅能实现极强的光场局域以增强光与物质的相互作用,还能灵活调控辐射损耗,从而为低阈值激光、高灵敏度传

感、高效非线性频率转换以及窄带完美吸收等光子学功能提供统一的物理平台.特别值得关注的是,在太赫兹波段,基于 q-BIC 的超表面展现出独特的传感优势.研究表明,通过设计手性 q-BIC 超表面,可在太赫兹波段实现超窄带的圆二色性响应,为手性分子检测提供了新途径<sup>[21]</sup>;将 q-BIC 结构与柔性基底结合,还可实现对物体曲率变化的高灵敏度测量<sup>[22]</sup>,甚至用于生物样本的无标记检测<sup>[23]</sup>.这些前沿进展进一步拓展了 q-BIC 的应用场景,也为本文所提出的传感方案提供了重要的研究背景.

基于此,本文研究了一种基于硅基圆孔阵列的 q-BIC 超表面,旨在实现高效的三次谐波产生并探究其在非线性传感中的应用.首先通过打破面内结构的对称性,成功激发并调控了 q-BIC,获得了高达  $10^4$  量级的  $Q$  因子.随后,我们通过多极子分解揭示了磁偶极子的主导 q-BIC 共振中的关键作用.进而,针对三次谐波产生过程,我们建立了一个耦合模型,用以定量表征由 q-BIC 模式局域增强所驱动的非线性能量转换.最后,我们探究了该结构在折射率传感中的应用,并证明了基于 THG 的非线性传感方案相较于线性传感在灵敏度上的显著优势.本研究深化了对 q-BIC 介电超表面中非线性产生与传感机制的认识,为后续开发高性能非线性集成光子器件及传感器奠定了理论基础.

## 2 结构设计

### 2.1 结构设计

超表面的示意图如图 1(a) 所示,由带有蚀刻圆孔的方形硅纳米盘周期性阵列组成,该结构的一个单元胞俯视图如图 1(b) 所示,图 1(c) 展示了单元胞在  $xz$  平面上的截面结构.超表面呈正方晶格排列,其晶格周期用  $p$  表示,  $H$  表示硅超表面厚度,方形纳米盘的边长为  $w$ ,圆形孔的半径为  $r$ ,刻蚀高度为  $h$ .本研究利用 COMSOL Multiphysics 软件,基于有限元方法对超表面结构的电磁响应开展数值模拟.模型中,硅结构的折射率设为常数 3.48,在整个光谱范围内保持不变.采用  $x$  偏振的 TE 模式平面波作为泵浦光源,沿  $-z$  方向垂直入射至超表面.为计算透射光谱,我们对阵列中的单元胞进行建模,在  $x$  和  $y$  轴方向施加周期性边界条件,在  $z$  轴方向设置完美匹配层 (perfect matching layer, PML),以吸收向外传播的波,避免边界反射,确保

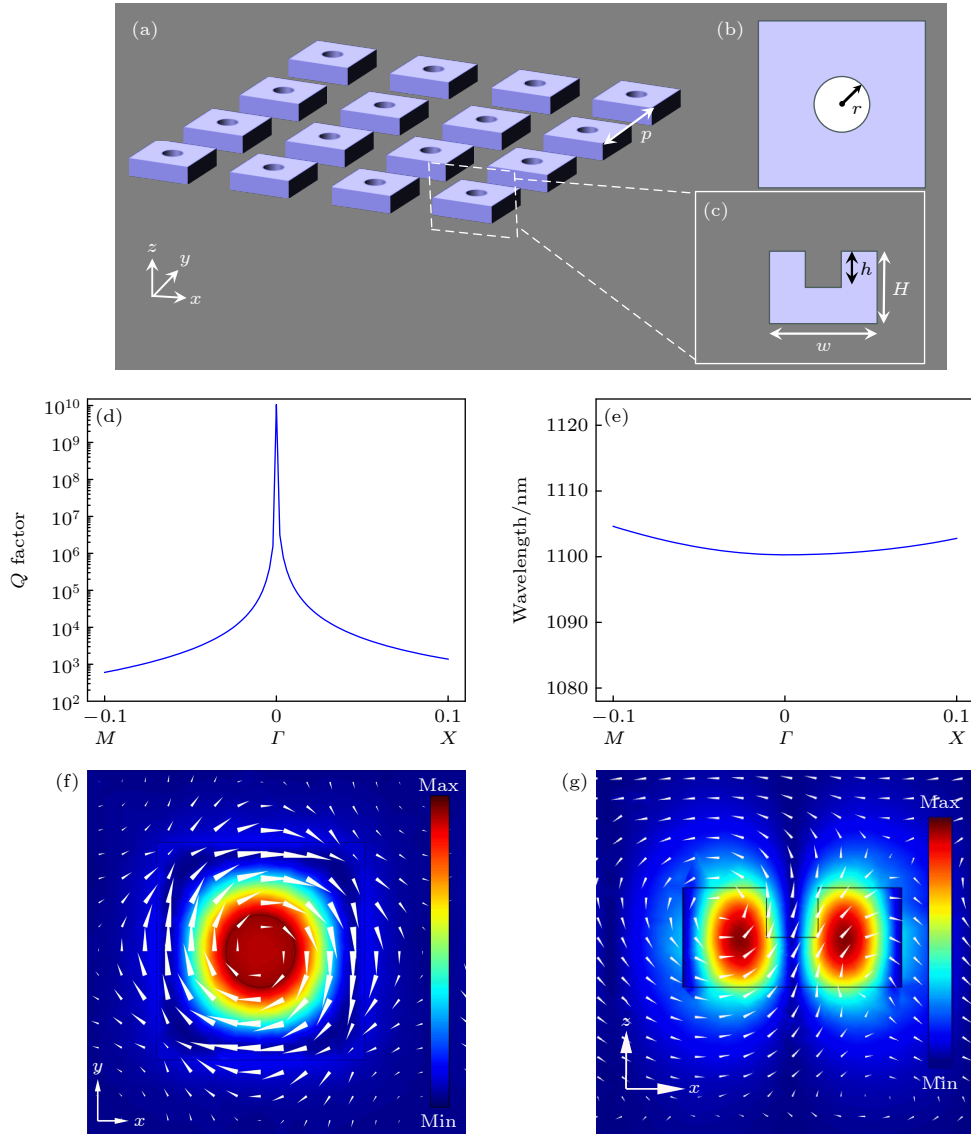


图 1 超表面示意图、能带分析以及电磁场分析 (a) 硅基超表面结构示意图; (b) 单元胞在  $z = 150 \text{ nm}$  处的截面图; (c) 该结构单元胞在  $x-z$  平面上的截面图. 其中结构参数设置为  $p = 500 \text{ nm}$ ,  $w = 300 \text{ nm}$ ,  $r = 50 \text{ nm}$ ,  $H = 200 \text{ nm}$ ,  $h = 100 \text{ nm}$ ; (d), (e)  $\Gamma$  点附近无损耗硅超表面的  $Q$  因子和能带结构; (f) 单元胞在  $z = 150 \text{ nm}$  截面磁场图 (面上箭头表示电场); (g) 单元胞在  $x-z$  截面的电场图 (面上箭头表示磁场)

Fig. 1. Metasurface schematic, band structure analysis, and electromagnetic field analysis: (a) Schematic diagram of the silicon-based metasurface structure; (b) the cross-sectional view of the unit cell at  $z = 150 \text{ nm}$ ; (c) cross-sectional view of the unit cell in the  $x-z$  plane. The structural parameters are set as  $p = 500 \text{ nm}$ ,  $w = 300 \text{ nm}$ ,  $r = 50 \text{ nm}$ ,  $H = 200 \text{ nm}$ ,  $h = 100 \text{ nm}$ ; (d), (e)  $Q$ -factor and band structure of the lossless silicon metasurface near the  $\Gamma$  point; (f) magnetic field map of the unit cell at the  $z = 150 \text{ nm}$  section (the arrows on the surface indicate the electric field); (g) electric field map of the unit cell in the  $x-z$  section (the arrows on the surface indicate the magnetic field).

仿真结果的准确性与可靠性. 在 PML 的内边界处设置了端口边界条件, 该端口既用于定义入射平面波源, 也可通过散射  $S$  参数提取透射特性.

针对 TE 模式研究了 BIC 的物理特征, 无损硅超表面的  $Q$  因子分布和能带结构, 分别如图 1(d) 和图 1(e) 所示. 可以看出, 在  $\Gamma$  点  $Q$  因子趋于无穷大, 表现出理想对称性保护 BIC 的特性. 图 1(f) 和图 1(g) 分别表示  $x-y$  截面磁场图 (面上箭头表示

电场) 和  $x-z$  截面的电场图 (面上箭头表示磁场). 红色区域对应场强极大值所在位置, 即电磁能量高度局域的“热点”. 这些热点主要集中于硅纳米盘圆孔界面附近, 其强烈的场增强效应是驱动非线性光学过程的关键物理基础. 完整、直观地呈现模式在空间中的幅值分布与矢量结构, 不仅确认了模式的高局域特性, 也为后续分析其多极子成分及解释非线性响应增强机制提供了重要的场分布依据.

为实现 BIC 向 q-BIC 的可控转化, 需通过几何参数调控打破超表面的面内对称性, 本文在一个  $2 \times 2$  超胞结构中引入不对称参数  $d$ , 该参数同时控制两个几何扰动: 包括超胞内四个单元胞的圆孔均沿图 2(a) 中红色箭头方向移动相同的距离  $d$  以及右下角单元胞的圆孔直径增加  $d$  (即半径增加  $d/2$ ). 因此, 引入  $d$  后, 右下角单元胞的圆孔半径为  $r+d/2$ , 其余三个单元胞的圆孔半径保持为  $r$  (仅位置发生移动). 图 2(a) 呈现了引入面内不对称参数  $d$  后的超表面单元胞结构示意图. 随着  $d$  的增大, 对称性破缺程度逐步增强, 可将理想 BIC 转化为具有有限辐射损耗的 q-BIC, 既保留强场局域能力以增强非线性相互作用, 又为泵浦光的有效注入与谐波光的远场辐射构建必要通道. 从图 2(b) 的透射光谱演化特征可见,  $d = 0$  nm 时透射率在 1065—1100 nm 范围内均表现出接近 1. 随着  $d$  从 15 nm 逐步增至 60 nm, 透射谷的带宽持续拓宽, 且谐振波长发生蓝移, 这一现象本质是  $d$  增大导致 q-BIC 的辐射损耗增强, 光场局域能力减弱, 使得更多光能量能够透过结构导致的. 当  $d = 30$  nm 时, 透射光谱仍维持相对狭窄的带宽, 表明此时结构在辐射效率与场局域能力间达成初步平衡, 避免了过度对称性破缺导致的场增强效应弱化. 图 2(c) 的  $Q$  因子变化曲线进一步量化了这一调控机制,  $d = 0$  nm 时  $Q$  因子高达  $10^{10}$  量级, 随  $d$  的增大  $Q$  因子呈指数级下降,  $d = 60$  nm 时已降至  $10^3$  量级, 而  $d = 30$  nm 时仍保持  $10^3$  量级以上的高  $Q$  因子, 既能通过光场的局域增强非线性极化效应, 又可通

过适度的辐射损耗确保 THG 信号的有效输出. 综合分析表明,  $d = 30$  nm 对应的  $Q$  因子仍维持在  $10^3$  量级, 且透射谐振峰未显著展宽, 证明该参数在确保强场局域的同时, 已为泵浦耦合与谐波辐射打开了有效通道. 这一优化平衡是后续实现高效三次谐波产生的基础. 需要说明的是, 图 1(d) 和图 2(c) 中的  $Q$  因子通过 COMSOL Multiphysics 软件的本征频率分析获得. 软件求解结构的复本征值  $\lambda = -\delta + j\omega$ , 其中: 虚部  $\omega$  对应本征角频率, 实部  $\delta$  对应阻尼系数.  $Q$  因子由公式  $Q = \omega/(2\delta)$  计算得出. 这一方法能够准确表征本征模式的辐射损耗特性, 在  $\Gamma$  点处  $Q$  因子趋于无穷大, 完美体现了对称性保护 BIC 的物理本质.

值得注意的是, 引入面内不对称参数  $d$  后, 结构的晶格周期由单胞周期  $p$  扩展为  $2p$ , 形成  $2 \times 2$  超胞结构. 这一周期加倍必然引发布里渊区折叠, 将原本位于单胞能带边界的模式折叠至  $\Gamma$  点, 为其进入辐射连续域提供了能带基础. 然而, 布里渊区折叠本身并不足以产生有限  $Q$  的 q-BIC. 若仅周期加倍而未引入对称性破缺, 超胞仍保持  $C_4$  对称性,  $\Gamma$  点仍为理想的对称性保护 BIC ( $Q$  趋于无穷), 且透射谱通常呈现双谷结构, 这是布里渊区折叠的典型特征<sup>[20,24]</sup>. 而在本研究中, 当  $d \neq 0$  时, 透射谱始终保持单一共振谷 (图 2(b)), 且  $Q$  因子随  $d$  增大从  $10^{10}$  量级连续下降至  $10^3$  量级 (图 2(c)), 透射谷亦连续展宽并蓝移. 这一连续、平滑的调控行为无法由固定的布里渊区折叠效应解释, 而恰恰体现了对称性破缺程度随  $d$  增大而逐步增强的物

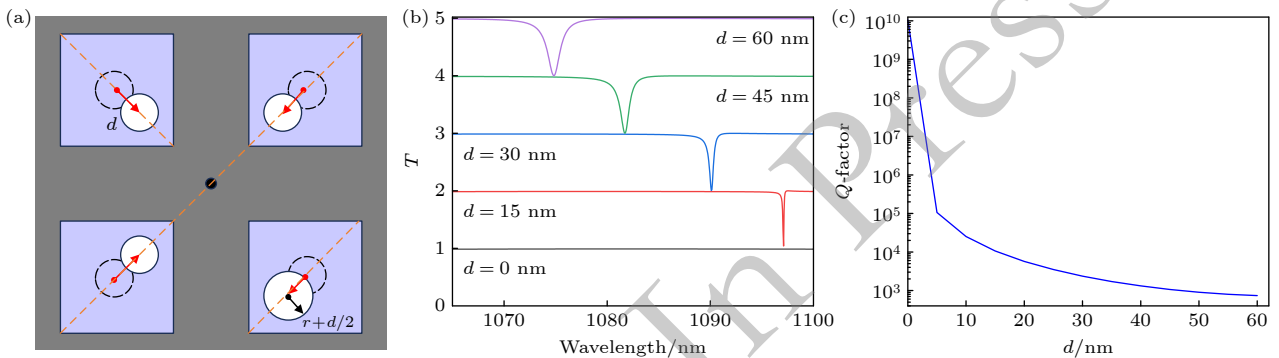


图 2 结构引入面内不对称参数  $d$  后超表面分析 (a) 引入面内不对称参数  $d$  后的超表面示意图, 移动前位置用黑色虚线圆环表示, 红色箭头表示移动方向; (b) 透射率随面内不对称参数  $d$  的变化趋势; (c)  $Q$  因子随面内不对称参数  $d$  的变化趋势

Fig. 2. Analysis of the metasurface after introducing the in-plane asymmetric parameter  $d$ . (a) Schematic diagram of the metamaterial surface after introducing the in-plane asymmetric parameter  $d$ . The original position before movement is represented by a black dotted circular line, and the red arrow indicates the direction of movement; (b) variation trend of transmittance with respect to the in-plane asymmetric parameter  $d$ ; (c) variation trend of the  $Q$ -factor with respect to the in-plane asymmetric parameter  $d$ .

理本质. 因此, 本工作中 q-BIC 的形成是布里渊区折叠与对称性破缺共同作用的结果: 折叠提供了模式进入辐射连续域的可能, 而对称性破缺则决定了该模式的辐射损耗特性及其连续可调性. 理解这一机制, 有助于更准确地把握 q-BIC 的激发条件与调控途径.

## 2.2 多极子主导机制

为了进一步探索 q-BIC 的机理, 对笛卡尔坐标系中不同多极子的散射功率进行了分析并将结果展示于图 3(a) 和图 3(b) 中, 这些多极子包括电偶极子 (electric dipole, ED)、磁偶极子 (magnetic dipole, MD)、环偶极子 (toroidal dipole, TD)、电四极子 (electric quadrupole, EQ) 以及磁四极子 (magnetic quadrupole, MQ). 相应的米氏共振公式如下<sup>[25,26]</sup>:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{i\omega} \int \mathbf{j} d^3r, \quad (1)$$

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2c} \int (\mathbf{r} \times \mathbf{j}) d^3r, \quad (2)$$

$$\mathbf{T} = \frac{1}{10c} \int [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}) \mathbf{r} - 2r^2 \mathbf{j}] d^3r, \quad (3)$$

$$Q_{\alpha,\beta}^{(e)} = \frac{1}{2i\omega} \int \left[ r_{\alpha} j_{\beta} + r_{\beta} j_{\alpha} - \frac{2}{3} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}) \delta_{\alpha,\beta} \right] d^3r, \quad (4)$$

$$Q_{\alpha,\beta}^{(m)} = \frac{1}{3c} \int [(\mathbf{r} \times \mathbf{j})_{\alpha} r_{\beta} + (\mathbf{r} \times \mathbf{j})_{\beta} r_{\alpha}] d^3r, \quad (5)$$

式中,  $c$  是真空中光速;  $\omega$  是入射光的角频率.  $\mathbf{r}$  是笛卡尔坐标系中从原点到点  $(x, y, z)$  的距离矢量,  $\alpha, \beta$  是  $x, y, z$  三个坐标轴的方向.  $\mathbf{j}$  是硅超表面单位晶胞内的位移电流密度. 由多极子激发产生的远场散射能量分别通过以下方式进行计算:

$$I_{\text{total}} = \frac{2\omega^4}{3c^3} |\mathbf{P}|^2 + \frac{2\omega^4}{3c^3} |\mathbf{M}|^2 + \frac{2\omega^6}{3c^5} |\mathbf{T}|^2 + \frac{\omega^6}{5c^5} \sum |Q_{\alpha,\beta}^{(e)}|^2 + \frac{\omega^6}{20c^5} \sum |Q_{\alpha,\beta}^{(m)}|^2. \quad (6)$$

图 3(a) 展示了  $d = 30 \text{ nm}$  时 q-BIC 散射功率

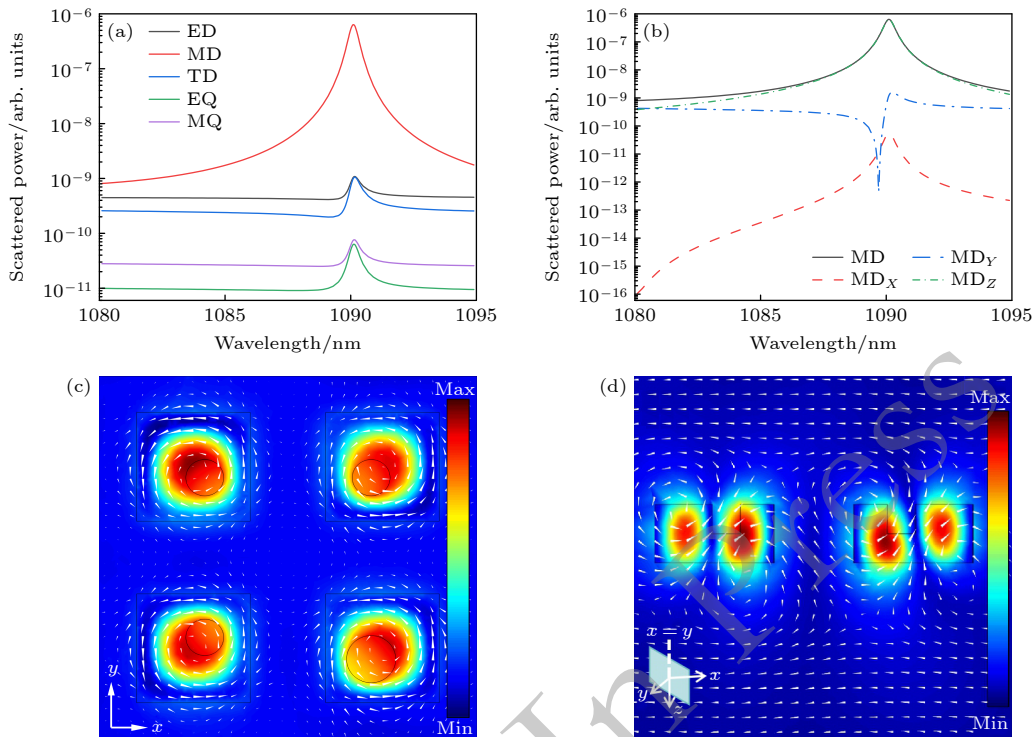


图 3  $d = 30 \text{ nm}$  时 q-BIC 的散射功率分析 (a) q-BIC 散射截面的笛卡尔多极展开; (b) MD 在  $x, y$  和  $z$  三个方向上的散射功率; (c)  $z = 150 \text{ nm}$  下的 q-BIC 的电场分布, 其中白色箭头代表磁场矢量; (d)  $x = y$  截面下 q-BIC 的磁场分布, 白色箭头表示位移电流密度

Fig. 3. Analysis of the scattering power of the q-BIC at  $d = 30 \text{ nm}$ : (a) Cartesian multipole expansion of the q-BIC scattering cross-section; (b) scattering power of the MD components along the  $x, y$ , and  $z$  directions; (c) electric field distribution of the q-BIC at  $z = 150 \text{ nm}$ , where white arrows represent the magnetic field vectors; (d) magnetic field distribution of the q-BIC in the  $x = y$  cross-section, where white arrows indicate the displacement current density.

的多极分解结果, 其中 ED, MD, EQ, MQ, TD 分量的散射功率在 1090 nm 附近呈现显著的谐振增强, 且 MD 分量的散射功率远高于其他分量, 表明该 q-BIC 以磁偶极辐射为主导. 图 3(b) 进一步将 MD 分解为  $x, y, z$  三个方向的分量, 其中  $z$  分量的散射功率占主导, 且其谐振峰与总 MD 分量的峰位高度重合, 说明该 q-BIC 的磁偶极辐射主要沿  $z$  方向极化, 这一极化特性由面内不对称参数  $d$  引入的结构各向异性所决定.

图 3(c) 为  $z = 150$  nm 截面处的电磁场分布, 面上白色箭头表示磁场能量, 可以看出其在圆孔区域形成强局域. 图 3(d) 为  $x = y$  截面处的电磁场分布, 可以看出电场在孔内呈现闭合的环形分布, 对应磁偶极子的场分布特征. 这一电磁场分布特征进一步证实了,  $d = 30$  nm 时超表面通过 q-BIC 实现了光场的强局域与定向磁偶极辐射, 既保证了非线性相互作用所需的高场增强, 又通过定向辐射提升了信号的收集效率, 为后续 THG 的高效转换提供了物理基础.

### 3 非线性增强

#### 3.1 THG 耦合模型分析

为定量研究 MD 共振对 THG 的调控机理, 本研究构建了一个基频与倍频耦合的双频场电磁模型. 该模型基于有限元方法, 通过顺序求解相互耦合的电磁场方程, 定量模拟 THG 产生的全过程.

首先, 在基频  $\omega$  下, 计算 TE 偏振泵浦光在硅超表面结构中的线性散射场, 精确获取纳米盘内部的局域电场分布  $E(\omega)$ . 在此基础上, 可根据硅的三阶非线性极化率  $\chi^{(3)}$  计算其诱导产生的非线性极化强度  $P(3\omega)$ , 其表达式为<sup>[27]</sup>

$$P(3\omega) = 3\varepsilon_0\chi^{(3)}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})\mathbf{E},$$

其中  $\varepsilon_0 = 8.8542 \times 10^{-12}$  F/m 为真空介电常数, 硅在近红外波段的  $\chi^{(3)}$  取为  $2.8 \times 10^{-18} \text{m}^2/\text{V}^2$ <sup>[28]</sup>. 该非线性极化强度  $P(3\omega)$  即为激发三次谐波频率  $3\omega$  电磁场的等效辐射源.

随后, 以前一步计算得到的  $P(3\omega)$  作为源项, 代入到频率为  $3\omega$  的电磁场控制方程中进行求解, 得到三次谐波频段下的电磁场分布  $E(3\omega)$  与  $H(3\omega)$ . 通过此耦合建模流程, 可自洽地获得由基频共振模式激发、并经非线性转换后辐射至远场的三次谐波场.

基于上述模拟结果, THG 转换效率定义为三次谐波功率  $P_{\text{THG}}$  与入射到单个单元胞的基频光功率  $P_{\text{in}}$  之比, 即  $\eta = P_{\text{THG}}/P_{\text{in}}$ , 其中  $P_{\text{in}}$  由入射光功率密度  $I_1$  与晶胞面积  $A$  的乘积确定  $P_{\text{in}} = I_1 \times A$ ,  $I_1$  为入射基频光的功率密度, 单元胞面积  $A = p^2 = (500 \text{ nm})^2$ .  $P_{\text{THG}}$  可以定义为  $P_{\text{THG}} = \int_A \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA$ , 其中  $\mathbf{S}$  是单个晶胞内三次谐波的能量密度矢量,  $A$  是晶胞的积分平面,  $\hat{\mathbf{n}}$  是垂直于平面  $A$  的法向矢量. 该参数从能量守恒角度定量表征了超表面将基频光转换为三次谐波光的整体效率.

图 4(a) 展示了在面内不对称参数  $d = 30$  nm

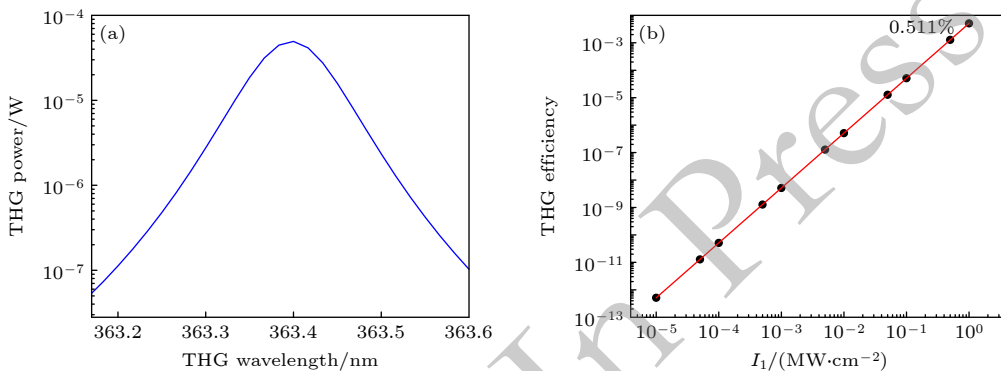


图 4 引入面内不对称参数  $d = 30$  nm 结构的三次谐波生成分析 (a) TE 偏振光入射下的硅表面的 THG 强度谱; (b) 最大 THG 功率与基频入射光功率的对数关系. 散点为仿真数据, 红线为拟合曲线. 拟合斜率为 2.98, 0.511% 为  $I_1 = 1 \text{ MW}/\text{cm}^2$  对应的 THG 转换效率

Fig. 4. Analysis of third-harmonic generation in the structure with in-plane asymmetry parameter  $d = 30$  nm: (a) THG intensity spectrum of the silicon surface under TE-polarized light incidence; (b) logarithmic relationship between the maximum THG power and the base frequency incident light power. The scattered points represent the simulation data, and the red line is the fitting curve. The fitting slope is 2.98, and 0.511% corresponds to the THG conversion efficiency when  $I_1 = 1 \text{ MW}/\text{cm}^2$ .

条件下, 三次谐波产生功率随泵浦波长的变化关系. 图中观察到一个显著的谐振峰, 其峰值对应的波长对应图 2(b)  $d = 30$  nm 处 q-BIC 的基频谐振波长的  $1/3$  处. 这一现象直接印证了非线性耦合理论的核心, 即非线性转换效率在泵浦频率与共振模式频率匹配时达到极大值. 此时, 泵浦光场在超表面结构中被 q-BIC 强烈局域和增强, 有效非线性极化强度  $P(3\omega)$  达到最大, 产生最强的三次谐波辐射. 图 4(b) 在对数坐标系中展示了在谐振波长 1090.1 nm 处, THG 功率与平均入射泵浦功率之间的依赖关系. 对仿真数据采用最小二乘法进行线性拟合, 拟合在对数坐标系中进行, 拟合函数形式为  $\lg(P_{\text{THG}}) = k\lg(I_1) + b$ , 其中斜率  $k$  预期为 3, 得到拟合函数为:  $\lg(P_{\text{THG}}) = 2.98 \lg(I_1) - 3.21$ , 拟合斜率 2.98 与三次谐波过程的理论值 3 高度吻合, 拟合优度  $R^2 = 0.999$ , 定量验证了产生的谐波功率与入射泵浦功率的三次方成正比关系. 当  $I_1 = 1$  MW/cm<sup>2</sup> 时, 对应的 THG 转换效率为 0.511%. 综合可知, 通过引入面内不对称参数  $d = 30$  nm, 我们在激发高  $Q$  值 q-BIC 的同时, 实现了高效且

可控的三次谐波产生. 该结果从数字仿真上完美体现了“共振增强”与“三阶非线性过程”两个核心物理概念的结合<sup>[29]</sup>, 共振提供了必需的场增强, 而功率三次方依赖关系则明确了其非线性阶次. 这为后续基于此类结构设计高效非线性光子器件提供了关键的理论依据.

### 3.2 非线性折射率传感分析

为了评估所设计的硅基超表面在折射率传感方面的性能, 我们研究了环境折射率  $n$  变化对透射光谱和三次谐波产生 THG 信号的影响. 如图 5(a) 所示, 随着环境折射率从 1.00 增加到 1.08, 透射光谱中的谐振峰发生明显的红移, 表明结构对周围介质折射率的变化具有高度敏感性. 进一步地, 图 5(b) 展示了 THG 信号随折射率变化的响应行为, 其谐振波长同样发生偏移.

为了定量表征传感性能, 我们定义灵敏度为折射率变量 ( $\Delta n$ ) 与波长共振峰位移 ( $\Delta \lambda$ ) 之间的比率<sup>[30]</sup>, 即:

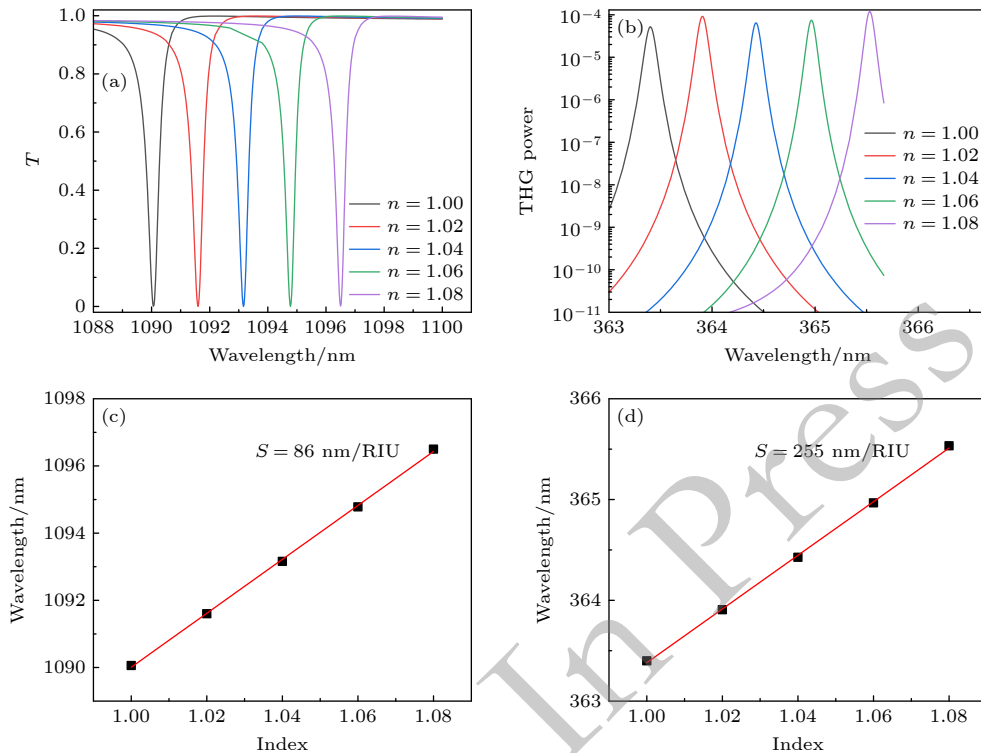


图 5 折射率传感器性能分析 (a) 不同环境折射率条件下透射光谱; (b) 不同环境折射率条件下 THG 光谱; (c), (d) 不同折射率下透射和 THG 的灵敏度分析

Fig. 5. Performance analysis of refractive index sensor: (a) Transmission spectra under different environmental refractive index conditions; (b) THG spectra under different environmental refractive index conditions; (c), (d) sensitivity analysis of transmission and THG under different refractive indices.

$$S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n}.$$

图 5(c) 和图 5(d) 分别对透射谐振波长与三次谐波谐振波长随折射率的变化进行了线性拟合. 基于透射光谱的线性灵敏度  $S_T$  为 86 nm/RIU, 表明该结构本身已具备良好的折射率响应特性. 而基于三次谐波信号的非线性灵敏度  $S_{THG}$  则达到 255 nm/RIU, 较线性灵敏度提升约 296%. 这一显著的增强源于三次谐波产生过程对局域电场的高阶依赖关系. 理论上, 三次谐波功率  $P_{THG}$  正比于基频电场强度的六次方, 即  $P_{THG} \propto |E(\omega)|^6$ . 当环境折射率发生变化时, 谐振波长的微小偏移会引起共振场内电场强度的急剧变化.

此外, 三次谐波信号位于泵浦波长的三倍频处, 易于通过光谱分离手段抑制背景噪声, 从而在复杂介质环境中仍可实现高信噪比的检测. 本研究结果证实, 利用 q-BIC 增强的非线性光学响应, 能够有效地提升光学折射率传感器的灵敏度, 为发展基于非线性超表面的高精度生化传感技术提供了重要的理论依据.

需要指出的是, 本文主要聚焦于非线性传感机制相对于线性传感的灵敏度提升, 以验证 q-BIC 增强的非线性响应在传感应用中的优势. 对于更全面的传感性能评价指标, 如品质因数 (FOM), 其计算需要准确定义非线性信号的线宽并引入系统噪声模型, 这超出了本文的研究范围, 将在后续工作中进一步探索.

## 4 结 论

本文提出一种基于硅基圆孔阵列的准连续束缚态超表面, 通过引入面内不对称参数  $d$  实现对称性保护 BIC 向高  $Q$  因子 q-BIC 的转化. 多极子分析表明该模式以磁偶极子为主导, 在  $d = 30$  nm 时  $Q$  因子仍达  $10^3$  以上, 兼顾了强场局域与辐射效率. 谐振波长处三次谐波转换效率达 0.511% (泵浦功率为 1 MW/cm<sup>2</sup>), 且谐波功率与泵浦功率呈三次关系, 验证了高效三阶非线性增强. 在传感方面, 该结构对环境折射率变化高度敏感. 基于透射谱的线性灵敏度为 86 nm/RIU, 而基于三次谐波的非线性灵敏度提升至 255 nm/RIU, 相对提高约 296%. 这一显著增益源于三次谐波对局域电场的高阶依赖, 体现了非线性机制在提升传感性能方面

的独特优势. 本研究通过结构调控与物理机制分析, 证实了硅基 q-BIC 超表面在非线性光子器件与高灵敏度传感器中的应用潜力.

## 参考文献

- [1] Boyd R W, Gaeta A L, Giese E 2008 *iSpringer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics* (Cham: Springer) p1097
- [2] Hong S Y, Dadap J I, Petrone N, Yeh P C, Hone J, Osgood R M 2013 *Phys. Rev. X* **3** 021014
- [3] Mikhailov S A 2014 *Phys. Rev. B* **90** 241301
- [4] Zheng Z, Xu L, Huang L J, Smirnova D, Kamali K Z, Yousefi A, Deng F, Camacho-Morales R, Ying C F, Miroshnichenko A E, Neshev D N, Rahmani M 2023 *Opto-Electron. Adv.* **6** 220174
- [5] Bijloo F, Murzyn K, van Emmerik F, den Boef A J, Kraus P M, Koenderink A F 2024 *Nano Lett.* **24** 12942
- [6] Hähnel D, Golla C, Albert M, Zentgraf T, Myroshnichenko V, Förstner J, Meier C 2023 *Light Sci. Appl.* **12** 97
- [7] Chen S, Rahmani M, Li K F, Miroshnichenko A E, Zentgraf T, Li G, Neshev D, Zhang S 2018 *ACS Photonics* **5** 1671
- [8] Evlyukhin A B, Tuz V R 2023 *Phys. Rev. B* **107** 155425
- [9] Gao Y X, Xu L, Shen X 2022 *Opt. Express* **30** 46680
- [10] He X, Lin F 2024 *Proc. Int. Conf. Infrared Millim. Terahertz Waves* (Piscataway, NJ: IEEE) p1
- [11] Kühne J, Wang J, Weber T, Kühner L, Maier S A, Tittl A 2021 *Nanophotonics* **10** 4305
- [12] Kupriianov A S, Xu Y, Sayanskiy A, Dmitriev V, Kivshar Y S, Tuz V R 2019 *Phys. Rev. Appl.* **12** 014024
- [13] Yao J Q, Li J T, Zhang Y T, Li J, Yue Z, Xu H, Yang F 2023 *Chin. Opt.* **16** 1 (in Chinese) [姚建铨, 李继涛, 张雅婷, 李杰, 岳震, 徐航, 杨帆 2023 中国光学 **16** 1]
- [14] Sun Y J, He C J, Deng Z L, Li X, Li X Z, Zhang Z B, Sui X, Li N, He W J, Chen F G 2025 *Nanophotonics* **14** 559
- [15] Xie Y N, Chen Q T, Yao J, Liu X Y, Dong Z G, Zhu J F 2024 *Photonics Res.* **12** 784
- [16] Jia Y, Zhang X, Chen J X, Meng H Y, Wu H B 2025 *Phys. Scr.* **100** 105515
- [17] Qin M, Wei G G, Xu H S, Ma R Z, Li H J, Gao W Q, Liu J Q, Wu F 2024 *Appl. Phys. Lett.* **124** 051703
- [18] Huang J L, Qing G Z, Zhang D, Zhai X, Peng J, Xia S X 2025 *Phys. Rev. B* **112** 205421
- [19] Koshelev K, Kruk S S, Miroshnichenko A E, Kivshar Y S 2024 *Appl. Phys. Lett.* **124** 121101
- [20] Yang F, Wang Z Y, Li J T, Yue Z, Zhang Q Y, Li H, Song C Y, Liu Y Y, Ding X, Wu L, Zhang Y T, Yao J Q 2024 *Adv. Opt. Mater.* **12** 2400136
- [21] Li J T, Yue Z, Li J, Zheng C L, Zhang Y T, Yao J Q 2023 *Opt. Laser Technol.* **161** 109173
- [22] Dai Z J, Yan C, Ye Y, Chen M, Liang Y, Li J T 2024 *Opt. Express* **32** 35030
- [23] Zhong H, Li J L, Jiang J H, Xu X P, Zhang D D, Song L W, Gao R, Tian Y 2025 *Biomed. Opt. Express* **16** 2210
- [24] Zhou M M, You S J, Xu L, Fan M H, Huang J, Ma W B, Hu M Z, Luo S Y, Rahmani M, Cheng Y, Li L, Zhou C B, Huang L J, Miroshnichenko A E 2023 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **66** 124212
- [25] Savinov V, Fedotov V A, Zheludev N I 2014 *Phys. Rev. B* **89** 205112
- [26] Kaelberer T, Fedotov V A, Papasimakis N, Tsai D P,

- Zheludev N I 2010 *Science* **330** 1510
- [27] Yang C, Cai S J, Li J J, Gong H Y, Liu Z Q 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 181702
- [28] Boyd R W, Fischer G L 2001 *Nonlinear Optical Materials* (Oxford: Elsevier) p6237
- [29] Sun G C, Wang Y, Xie R B, Zhao X G 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 081702
- [30] Lv S Y, Zhang L L, Luo W F, An L 2026 *Acta Phys. Sin.* **75** 090404 (in Chinese) [吕淑媛, 张璐璐, 罗文峰, 安岚 2026 物理学报 **75** 090404]

# Research on nonlinear enhancement and sensing based on silicon-based circular hole array superstructure

LV Shuyuan<sup>†</sup> AN Lan LUO Wenfeng ZHANG Lulu SU Ziwen

(School of Electronic Engineering, Xi'an University of Posts and Telecommunications, Xi'an, Shaanxi 710121, China)

( Received 13 January 2026; revised manuscript received 14 March 2026 )

## Abstract

Nonlinear optical processes such as third-harmonic generation (THG) are fundamental to modern photonics but typically require high pump powers and long interaction lengths in bulk materials, posing challenges to the trend toward miniaturization and integration. Metasurfaces offer a promising platform for enhancing nonlinear interactions through strong electromagnetic field localization. However, achieving a high quality factor ( $Q$ -factor) alongside efficient radiative coupling remains a critical challenge. In this work, we propose and numerically investigate a silicon-based metasurface composed of a circular-hole array that supports quasi-bound states in the continuum (q-BIC) to address this challenge. By introducing an in-plane asymmetry parameter  $d$ , symmetry-protected BICs are transformed into high- $Q$  q-BICs with tunable radiative losses.

At  $d = 30$  nm, the  $Q$ -factor remains above  $10^3$  while maintaining a narrow resonant linewidth, indicating an optimal balance between field confinement and radiation efficiency. Multipole decomposition reveals that the q-BIC mode is predominantly characterized by a magnetic dipole polarized along the  $z$ -direction, leading to strong field enhancement around 1090 nm.

We systematically analyze the THG performance of the designed structure. At the resonant wavelength, the THG conversion efficiency reaches 0.511% under a pump intensity of 1 MW/cm<sup>2</sup>. The generated harmonic power exhibits a cubic dependence on the pump power, confirming the third-order nonlinear nature of the process. These results demonstrate efficient nonlinear frequency conversion driven by the q-BIC-enhanced local fields.

Furthermore, we explore the sensing capabilities of the metasurface by monitoring its response to variations in the ambient refractive index. The structure exhibits high sensitivity in both the linear and nonlinear regimes. The linear sensitivity, derived from transmission spectra, is 86 nm/RIU, while the nonlinear sensitivity, based on the THG signal, reaches 255 nm/RIU, representing an improvement of approximately 296%. This enhancement is attributed to the high-order dependence of THG on the localized electric field, as well as the resonant wavelength shift induced by refractive index changes.

In conclusion, this study reveals the magnetic-dipole-dominated mechanism of the q-BIC mode, quantitatively analyzes the THG conversion efficiency, and comparatively validates the nonlinear sensing performance. It provides a practical pathway for achieving both efficient nonlinear conversion and high-sensitivity sensing, offering valuable insights for the development of multifunctional integrated photonic devices.

**Keywords:** bound states in the continuum, metasurfaces, nonlinear optics, third harmonic generation, refractive index sensing

DOI: 10.7498/aps.75.20260056

CSTR: 32037.14.aps.75.20260056

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: 1159955131@qq.com