

# 硅基 BIC 超表面中强耦合诱导的高 $Q$ 本征圆二色\*

朱乐意<sup>1)2)</sup> 桑田<sup>1)2)†</sup> 杨冠华<sup>1)2)</sup> 王晨阳<sup>1)2)</sup>

1) (江南大学光电信息与物理科学学院, 无锡 214122)

2) (江南大学, 江苏省轻工光电工程技术研究中心, 无锡 214122)

## 摘要

连续谱束缚态 (bound state in the continuum, BIC) 可以显著增强自旋选择的光与物质相互作用. 然而, 当前 BIC 超表面普遍依赖单个或多个手性 BIC 模式增强圆二色 (circular dichroism, CD), 因而限制了其在功能化集成器件中的应用. 本文提出了一种利用 BIC 超表面中强耦合效应, 实现兼具高品质因子 (quality factor,  $Q$  因子) 和高效率本征 CD 的方法. 该超表面采用硅基十字形纳米孔阵列设计, 可在通信波段同时支持类 TM 的 BIC 与类 TE 的导模共振 (guided-mode resonance, GMR) 模式. 通过欠刻蚀打破结构的面外对称性并协同面内不对称参数调控, 可诱导准 BIC (quasi-BIC, QBIC) 与 GMR 模式产生强耦合, 进而实现近完美的高  $Q$  本征 CD. 强耦合区域附近, QBIC#1 模式和 GMR 模式共振波长反交叉, 本征频率虚部交叉, 对应拉比分裂 (Rabi splitting) 能量的谷值为 3.16 meV, 本征手性的  $Q$  因子和 CD 最大值分别为 1083 和 0.995. 远场偏振奇点演化表明, 强耦合条件下  $\Gamma$  点对应左旋圆偏振奇点 (circular polarization singularity, C 点). 此外, 强耦合诱导的 CD 具有良好鲁棒性, 即使结构参数发生显著变化, 仍能保持其高  $Q$  高效率 CD 响应. 该方法为集成化手性光子器件提供了一种新的设计思路, 并有望应用于手性传感、手性激光及非线性手性光学等领域.

**关键词:** 本征手性, 连续谱束缚态, 圆二色, 强耦合

\* **基金:** 国家自然科学基金 (批准号: 62375113) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sangt@jiangnan.edu.cn

## 1 引言

光学手性是指纳米结构对左旋圆偏振 (left-handed circular polarization, LCP) 与右旋圆偏振 (right-handed circular polarization, RCP) 光的差异化响应<sup>[1,2]</sup>. 作为现代纳米光子学中的核心物理机制之一, 其响应强度通常采用圆二色 (circular dichroism, CD) 进行量化表征<sup>[3-5]</sup>. 然而, 天然材料与传统纳米结构的手性光学响应普遍较弱, 受结构尺寸与激发波长之间的失谐的影响, 其 CD 信号十分有限<sup>[6,7]</sup>. 尽管通过打破面内对称性, 如引入结构各向异性或采用倾斜入射等方式, 能在平面系统中实现较强的 CD, 但此类手性源于特殊的照射与探测几何配置, 属于外在手性 (假手性)<sup>[8-10]</sup>, 而非结构的本征属性, 因而其手性发光、手性传感和偏振光电探测等实际应用中受到诸多限制.

为实现与激发条件无关的本征手性 (真手性), 早期工作主要依托复杂的三维手性超构材料, 如螺旋结构<sup>[11-13]</sup>、“L”型立体单元<sup>[14]</sup>或球冠状结构<sup>[15]</sup>等. 这类结构虽能产生强手性响应, 但其制备工艺繁琐, 难以与标准平面工艺兼容以及实现大规模应用. 近年来, 连续谱束缚态 (bound state in the continuum, BIC) 作为一种存在于辐射连续谱中的理想局域态, 因其理论上无限大的品质因子 (quality factor,  $Q$  因子) 与无限长的光子寿命<sup>[16-20]</sup>, 在纳米光子学领域展现出重要研究价值与应用潜力. 通过引入可控的对称性破缺, BIC 可转化为具有有限辐射损耗的准 BIC (quasi-BIC, QBIC), QBIC 继承了 BIC 的高  $Q$  特性, 能够将光场强烈局域于亚波长尺度, 从而显著增强光与物质的相互作用<sup>[21-23]</sup>. 基于 QBIC 实现强本征手性光学响应, 已成为当前纳米光子学领域的重要研究方向. 目前主流实现方案主要依赖于对称性破缺的几何设计, 例如采用具有倾斜侧壁的“等高”超表面单元<sup>[24-26]</sup>, 或构筑“不等高”的超表面结构同时破缺面内与面外对称性<sup>[27-29]</sup>, 从而在

动量空间  $\Gamma$  点激发高  $Q$  的手性 QBIC 模式. 另一方面, 近期研究表明, 基于 BIC 超表面的模式耦合体系可以催生一系列新颖光学现象与应用. 例如, 借助硅基二聚体中两个相邻 QBIC 明模之间的强耦合, 可以实现波长稳定且带宽可调的电磁诱导透明<sup>[30]</sup>; 利用硅基纳米孔中环形偶极明模与两种 BIC 暗模之间的耦合, 可以实现双通道高  $Q$  电磁诱导透明<sup>[31]</sup>. 此外, 超表面中共振模式的强耦合效应还可用于实现高纯度手性激光发射<sup>[32]</sup>. 然而, 尽管强耦合体系在光场调控方面展现出了巨大潜力, 但如何利用该机制在 BIC 超表面中实现兼具高  $Q$  因子与高效率的本征 CD, 仍是一个有待深入探索的重要方向.

基于此, 本文提出一种借助 BIC 超表面强耦合效应实现兼具高  $Q$  因子与高效率本征 CD 的创新方案. 该方案中所提出的超表面采用具有  $C_4$  对称性的硅基十字形纳米孔结构设计, 可在通信波段同时支持类 TM 的 BIC 模式与类 TE 的 GMR (guided-mode resonance, GMR) 模式. 通过欠刻蚀打破结构面外对称性, 并精准调控面内不对称参数, 构建起 QBIC 与 GMR 模式的强耦合体系, 最终实现近完美的高  $Q$  本征 CD 响应. 研究表明, 在强耦合区域内, QBIC#1 与 GMR 模式的共振波长呈现显著反交叉特征, 本征频率虚部发生交叉重合, 对应的拉比分裂 (Rabi splitting) 能量谷值为 3.16 meV. 在此条件下, QBIC#1 模式在 1653.9 nm 波长处实现 CD 高达 0.995 的近完美本征手性, 同时保持 1083 的高  $Q$  因子. 远场偏振奇点演化特性显示, 强耦合效应可驱动左旋圆偏振奇点 (circular polarization singularities, C 点) 精准定位至动量空间  $\Gamma$  点. 此外, 该强耦合诱导的本征 CD 具有优异的结构鲁棒性, 即使核心结构参数发生较大偏差, 该 CD 响应仍能稳定维持高  $Q$  与高效率.

## 2 结构设计与模型

### 2.1 超表面结构

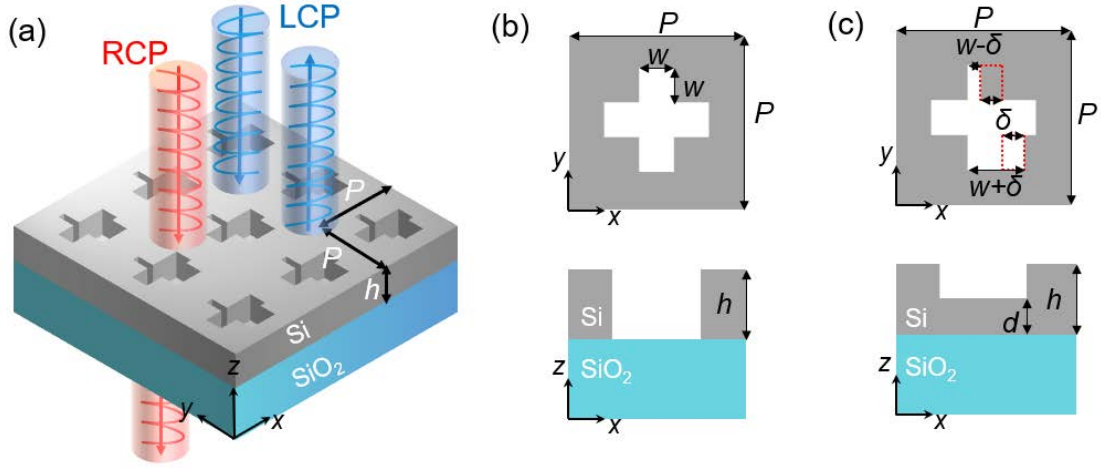


图 1 (a) 硅基超表面结构示意图; (b) 非手性和 (c) 手性超表面元胞的俯视图 ( $x$ - $y$  面) 和侧视图 ( $x$ - $z$  面)

Fig. 1. (a) Schematic of the Si metasurface;  $x$ - $y$  plane (top-view) and  $x$ - $z$  plane (side-view) of the unit cell for the (b) achiral and (c) chiral Si metasurface.

图 1(a)为基于强耦合效应实现高  $Q$  本征 CD 的硅基 BIC 超表面结构示意图. 该结构由周期为  $P$ 、厚度为  $h$  的硅纳米孔阵列构成, 置于熔融态二氧化硅 (silica,  $\text{SiO}_2$ ) 衬底上. 针对本文研究的通信波段,  $\text{Si}$  和  $\text{SiO}_2$  的折射率分别取 3.48 和 1.47. 图 1(b)为非手性硅超表面单个元胞示意图, 在未引入扰动时, 该十字形结构可视为由 5 个尺寸完全一致的边长为  $w$  的正方形纳米孔单元构成. 具体结构参数为: 周期  $P = 800 \text{ nm}$ 、厚度  $h = 470 \text{ nm}$ 、边长  $w = 160 \text{ nm}$ . 图 1(c)为手性硅超表面单个元胞示意图, 在  $x$ - $y$  平面内, 沿  $x$  方向将位于上方的正方形孔长度缩短为  $w - \delta$ , 下方的正方形孔长度延长为  $w + \delta$ , 从而打破结构的面内镜像与  $C_4$  对称性, 面内非对称参数定义为  $\alpha = \delta/w$ ; 厚度为  $d$  的欠刻蚀用于破缺面外镜像对称性, 面外非对称参数定义为  $\beta = d/h$ . 因此, 当  $\alpha$  和  $\beta$  均不为零时, 结构的面

内和面外镜像对称性同时被打破. 所有数值模拟均采用基于有限元方法 (finite element method, FEM) 的商用软件 COMSOL Multiphysics 完成. 仿真计算区域限定于单个元胞, 沿  $x$  和  $y$  方向施加周期性边界条件. 在 Si 纳米结构上方空气侧与下方 SiO<sub>2</sub> 衬底侧的  $z$  方向均设置完美匹配层 (perfectly matched layers, PML) 以模拟无反射的无限扩展区域.

## 2.2 能带结构与模式特性

为了探究超表面的模式特征, 首先计算了未引入扰动即  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$  时的能带结构,  $Q$  因子及模场分布. 图 2(a) 为该对称条件下 Si 超表面的能带结构, 在本文所研究的频域范围内, 超表面支持表示为 TM<sub>1</sub>, TM<sub>2</sub> 和 TE 能带的布洛赫模式. 图 2(b) 为动量空间内模式的  $Q$  因子分布, 可以看出, TM<sub>1</sub> 和 TM<sub>2</sub> 能带在  $\Gamma$  点与两个对称保护的 BIC 模式相关联, 其  $Q$  因子理论上趋向于无穷<sup>[33-35]</sup>, 随着波矢偏离  $\Gamma$  点,  $Q$  因子迅速下降; 而 TE 能带则与 GMR 模式相关联, 其  $Q$  因子在整个波矢范围内均呈现有限值. 图 2(c) 展示了超表面在  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$  时不同能带在  $\Gamma$  点的  $x$ - $y$  平面模式电磁场分布. 其中 TM<sub>1</sub> 与 TM<sub>2</sub> 模式的主要特征均表现为面内磁场与  $E_z$  分量占主导, 而  $E_x$ 、 $E_y$  和  $H_z$  分量可忽略, 证明二者均为类 TM 模, 且其电场分布均具有  $C_4$  对称性; TE 模式则主要表现为面内电场与  $H_z$  分量占主导, 而  $H_x$ 、 $H_y$  和  $E_z$  分量均可忽略, 这是类 TE 模的典型特征<sup>[36]</sup>. 上述结果证实, 该结构可同时支持类 TM 的 BIC 与类 TE 的 GMR 模式.

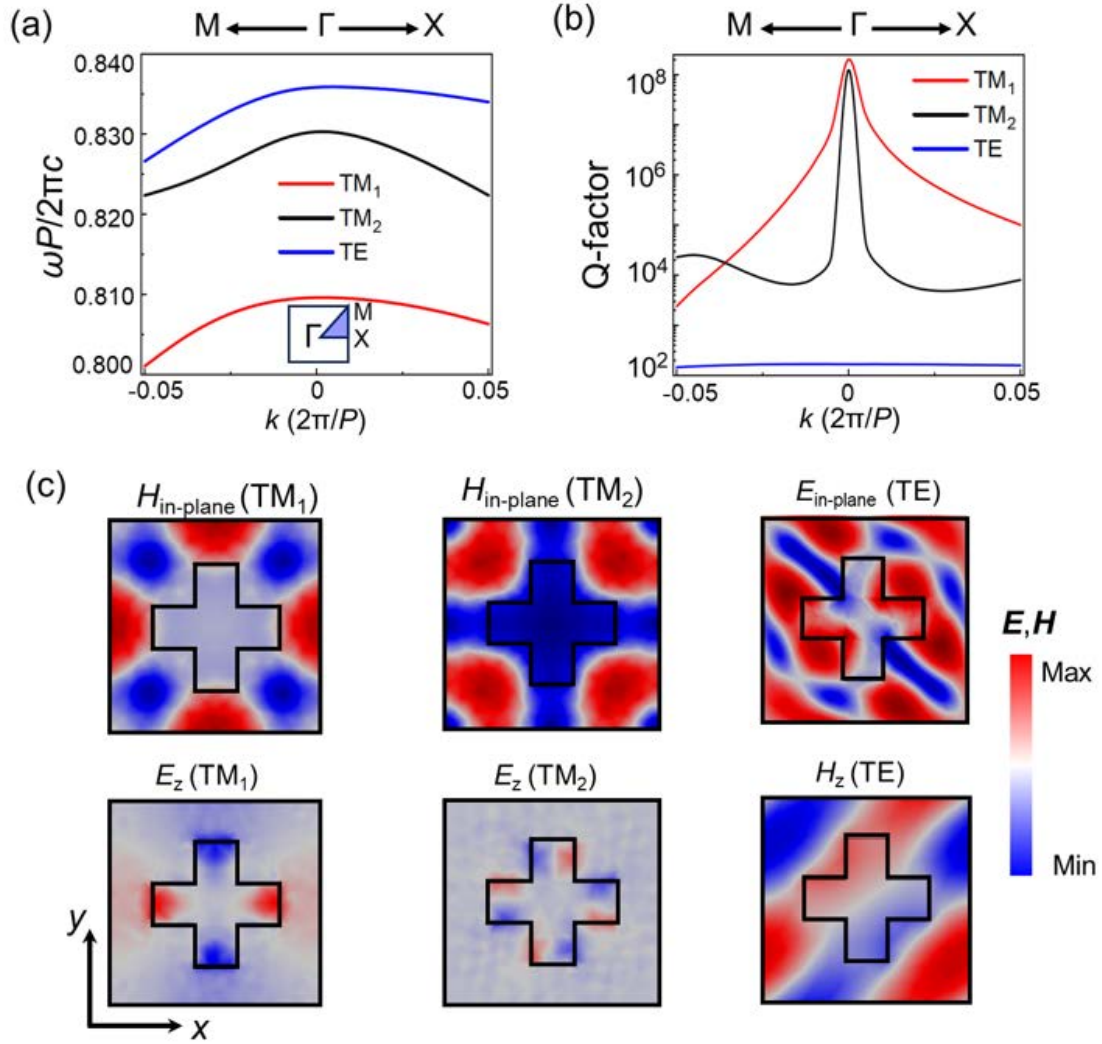


图 2 硅基超表面在  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$  时的 (a) 能带结构, (b)  $Q$  因子和 (c) 模式在  $x$ - $y$  平面的场分布

Fig. 2 (a) Band structure, (b)  $Q$ -factor, and (c) mode field distribution in the  $x$ - $y$  plane of the Si metasurface for  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ .

### 3 数值仿真结果与分析

#### 3.1 透射 CD 响应分析

图 3 展示了超表面在透射条件下的光学响应, 其结构参数与图 1 保持一致.

此处 CD 定义为正入射条件下, RCP 与 LCP 光在透射率上的相对差异:

$$CD = \frac{T_{RCP} - T_{LCP}}{T_{RCP} + T_{LCP}} \quad (1)$$

其中  $T$  表示透射率, 且  $T_{\text{RCP}} = T_{\text{RR}} + T_{\text{LR}}$ ,  $T_{\text{LCP}} = T_{\text{LL}} + T_{\text{RL}}$  ( $T_{ij}$  表示输出偏振  $i$  由输入偏振  $j$  转换得到;  $i = R, L; j = R, L; R$  代表 RCP,  $L$  代表 LCP). 图 3(a)-(c) 为固定  $\beta = 0.28$  时, 各透射分量随  $\alpha$  变化的二维光谱. 在  $\text{TM}_1$ ,  $\text{TM}_2$  和  $\text{TE}$  能带分别对应的 QBIC#1, QBIC#2 与 GMR 模式的共振波长处, 共偏振分量  $T_{\text{RR}}$  与  $T_{\text{LL}}$  表现出显著差异, 而交叉偏振分量  $T_{\text{RL}}$  与  $T_{\text{LR}}$  则完全一致, 即 CD 来源于共偏振的差异, 表明该结构的手性属于本征手性<sup>[37,38]</sup>. 并且随着  $\alpha$  的增加, GMR 与 QBIC#1 共振位置会逐渐靠近, 在  $\alpha = 0.75$  附近出现明显反交叉特征, 表明二者存在相互作用; 而 QBIC#2 模式虽也具备手性, 但其在整个研究参数范围内 CD 响应始终较弱 ( $|\text{CD}| < 0.7$ ), 未出现符号反转或显著增强, 表明该模式未与 GMR 模式产生有效的耦合作用, 即在此参数范围内始终保持相对独立的演化, 因此本文后续将重点研究 QBIC#1 与 GMR 模式所构成的作用体系及其手性调控特性. 图 3(d) 为 CD 响应随  $\alpha$  的变化关系, 可见随着  $\alpha$  的增加, 在反交叉区域附近 QBIC#1 的共振位置处本征 CD 显著增强, 当  $\alpha = 0.91$  时在 1653.9 nm 处达到近完美 CD; 当  $\alpha = 0.81$  时在 GMR 的共振位置处出现 CD 符号反转. 值得指出的是, QBIC#1 与 GMR 共振的演化趋势及其 CD 响应的显著差异, 预示了二者之间存在强耦合作用. 关于该耦合的明确证据及其演化规律, 将在下一节展开详细分析.

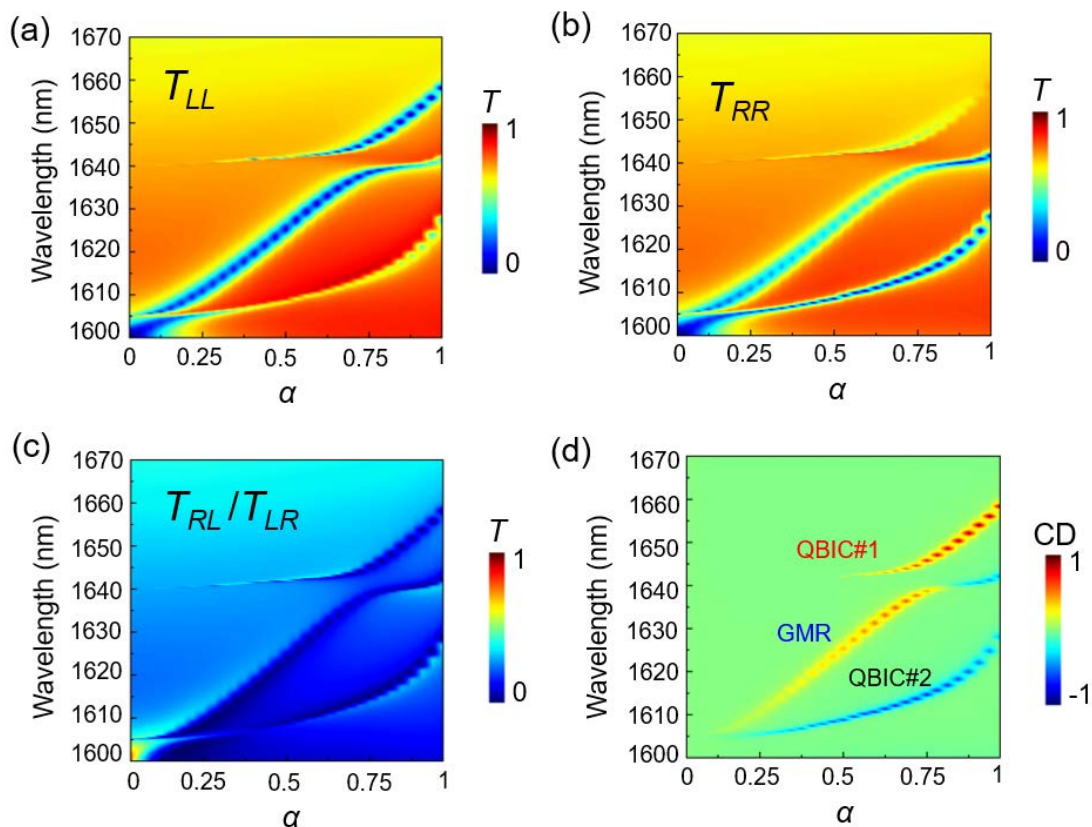


图 3 (a) 透射 LCP 光的共偏振分量  $T_{LL}$  与 (b) 透射 RCP 光的共偏振分量  $T_{RR}$  随  $\alpha$  的变化关系 ( $\beta = 0.28$ ); (c) 透射 LCP 光的交叉偏振分量  $T_{RL}$  与透射 RCP 光的交叉偏振分量  $T_{LR}$  随  $\alpha$  的变化关系 ( $\beta = 0.28$ ); (d) CD 响应随  $\alpha$  的变化关系 ( $\beta = 0.28$ )

Fig. 3. (a) Co-polarized  $T_{LL}$  of transmitted LCP light and (b) co-polarized  $T_{RR}$  of transmitted RCP light as functions of  $\alpha$  with  $\beta = 0.28$ ; (c) Cross-polarized  $T_{RL}$  of transmitted LCP light and cross-polarized  $T_{LR}$  of transmitted RCP light as functions of  $\alpha$  with  $\beta = 0.28$ ; (d) CD responses as functions of  $\alpha$  with  $\beta = 0.28$ .

### 3.2 模式耦合特性

为了揭示强耦合对超表面手性响应的调控机制，系统研究了类 TM 的 QBIC#1 与类 TE 的 GMR 模式的耦合特性。在周期性超表面中，TE 与 TM 模式具有正交偏振本征属性，当二者共振频率高度趋近 ( $\omega_{TE} \approx \omega_{TM}$ ) 且辐射损耗近似匹配 ( $\gamma_{TE} \approx \gamma_{TM}$ ) 时，模场交叠将诱发耦合，这是实现模式间最优能量交换与干

涉效应的前提<sup>[39]</sup>. 图4展示了在固定参数 $\beta = 0.28$ 时, GMR(TM<sub>1</sub>) 与 QBIC#1 (TE) 的模式演化特征随参数 $\alpha$ 的变化. 可以看出, 在 $\alpha = 0.75$ 附近, 两模式发生显著耦合: 在图4(a)中, 模式共振波长随 $\alpha$ 变化呈现典型的反交叉特征, 并且两个模式的共振波长在此处趋于交汇 ( $\lambda_{\text{GMR}} \approx \lambda_{\text{QBIC\#1}}$ ); 图4(b)中模式本征频率的虚部(对应辐射损耗 $\gamma$ )出现交叉, 即 $\gamma_{\text{GMR}} = \gamma_{\text{QBIC\#1}}$ , 这两个特征均为模式发生强耦合的关键标志<sup>[32]</sup>. 进一步, 图4(c)展示了 QBIC#1 与 GMR 模式在耦合过程中 CD 的演化规律. 随着 $\alpha$ 增加, 两模式的 CD 响应发生显著不同的变化: 在远离强耦合的区域 ( $\alpha < 0.5$ ) 时, QBIC#1 模式的 CD 值极低, 近乎为 0, 而 GMR 模式已呈现正的 CD; 当 $\alpha$ 增大至 0.75 附近时, 两模式演化至强耦合区域, CD 开始剧烈演化: 在 $\alpha = 0.81$ 附近, GMR 模式的 CD 发生符号反转, 由正值变为负值; 而 QBIC#1 模式的 CD 则持续增强, 最终在 $\alpha = 0.91$ 时达到 0.995 的近完美 CD. 这一演化过程表明, 强耦合不仅能显著增强模式的手性响应, 还能诱导手性模式的反转重构. 与此同时, 图4(d)中两个模式的 $Q$ 因子也随 $\alpha$ 表现出明显不同的演化趋势: 源自对称保护型 BIC 的 QBIC#1 模式, 其 $Q$ 因子呈现出随着 $\alpha$ 增大而逐渐减小的变化规律, 并且当 $\alpha = 0.91$ 时, 模式的 CD 值仍保持 1083 的高 $Q$ 因子; 而 GMR 模式的 $Q$ 因子始终为有限值. 值得注意的是, 在强耦合特征点 $\alpha = 0.75$ 处, 两个模式的 $Q$ 因子相等, 这与图4(b)中模式辐射损耗的匹配完全对应.

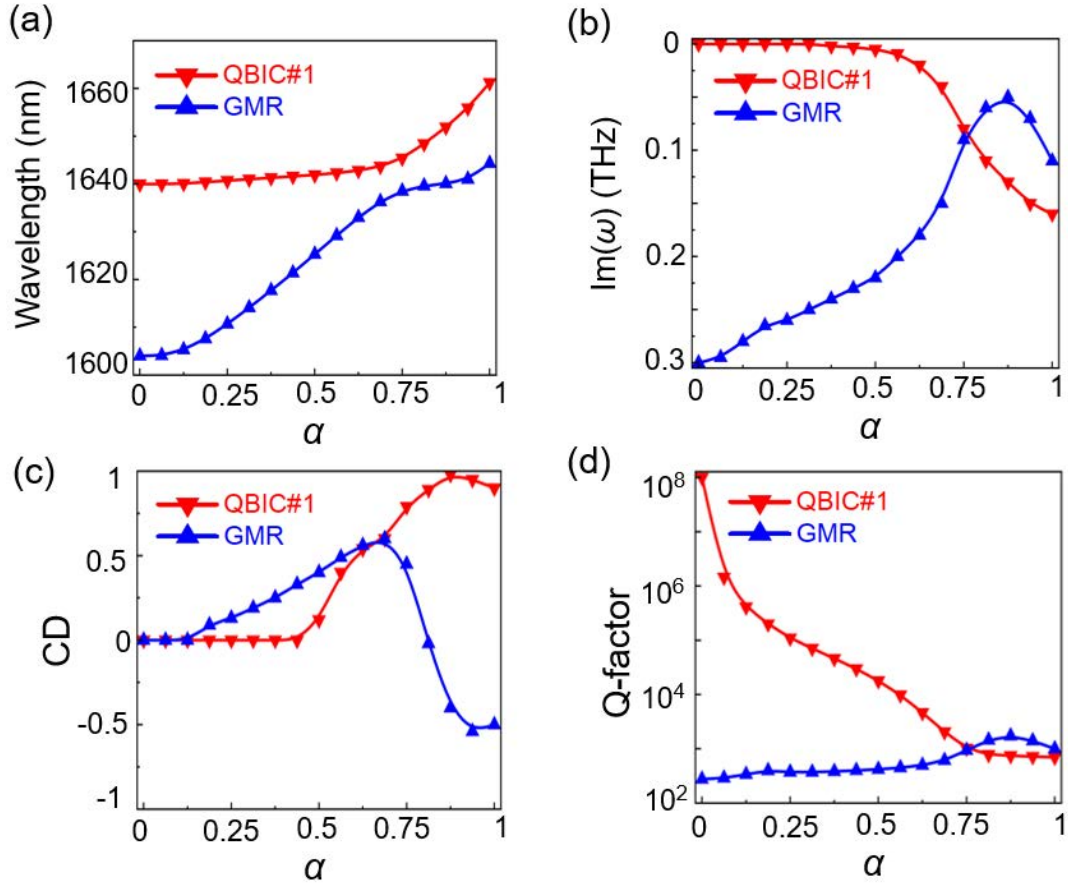


图 4 固定  $\beta=0.28$  下, QBIC#1 与 GMR 模式的 (a) 共振波长、(b) 本征频率虚部、(c) CD 和 (d)  $Q$  因子随  $\alpha$  的变化关系

Fig. 4. Variation of (a) resonant wavelength, (b) imaginary part of eigenfrequency, (c) CD, and (d)  $Q$ -factor with  $\alpha$  for QBIC#1 and GMR modes with  $\beta = 0.28$ .

拉比分裂 (Rabi splitting), 即零失谐条件下高频与低频杂化模式的频率差, 是强耦合体系的标志性现象. 其源于两共振模式间的能量交换与相干干涉, 核心特征为光谱中的反交叉行为与能量分裂<sup>[40,41]</sup>. 因此, 对于 QBIC#1 与 GMR 构成的耦合体系, 其能量本征值可通过耦合态方程求解<sup>[42]</sup>, 考虑模式间的能量交换与损耗, 本征方程表达式为:

$$\begin{pmatrix} E_{\text{QBIC\#1}} + i\Gamma_{\text{QBIC\#1}} & g \\ g & E_{\text{GMR}} + i\Gamma_{\text{GMR}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\text{QBIC\#1}} \\ \alpha_{\text{GMR}} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha_{\text{QBIC\#1}} \\ \alpha_{\text{GMR}} \end{pmatrix} \quad (2)$$

其中,  $E_{\text{QBIC}\#1}$  和  $E_{\text{GMR}}$  分别为 QBIC#1 与 GMR 模式在未耦合时的共振能量;  $\Gamma_{\text{QBIC}\#1}$  和  $\Gamma_{\text{GMR}}$  为对应模式的辐射损耗能量;  $g$  为两模式间的耦合强度; 系统的本征矢量由系数  $\alpha_{\text{QBIC}\#1}$  和  $\alpha_{\text{GMR}}$  表示, 二者确定了两个模式的杂化权重, 并满足归一化条件  $|\alpha_{\text{QBIC}\#1}|^2 + |\alpha_{\text{GMR}}|^2 = 1$ ;  $E$  为杂化模式的本征能量, 能量计算公式由  $E = \hbar\Omega$  给出,  $\hbar$  为约化普朗克常量,  $\Omega$  表示共振频率. 对等式 (2) 进行求解, 可得耦合后上和下两支杂化模式的能量:

$$E_{\pm} = \frac{E_{\text{GMR}} + E_{\text{QBIC}\#1}}{2} - i \frac{\Gamma_{\text{GMR}} + \Gamma_{\text{QBIC}\#1}}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{E_{\text{GMR}} - E_{\text{QBIC}\#1} + i(\Gamma_{\text{GMR}} - \Gamma_{\text{QBIC}\#1})}{2} \right)^2 + g^2} \quad (3)$$

拉比分裂能定义为上下两支杂化模式共振能量的差值, 是表征强耦合强度的核心物理量, 其表达式为:

$$\Delta E = \hbar\Omega_R = E_+ - E_- = \sqrt{4g^2 + (E_{\text{GMR}} - E_{\text{QBIC}\#1})^2 + i(\Gamma_{\text{GMR}} - \Gamma_{\text{QBIC}\#1})^2} \quad (4)$$

其中  $\Omega_R$  表示拉比频率. 当两模式满足共振能量简并 ( $E_{\text{QBIC}\#1} = E_{\text{GMR}}$ ) 且辐射损耗能量匹配 ( $\Gamma_{\text{QBIC}\#1} = \Gamma_{\text{GMR}}$ ) 时, 公式简化为  $\Delta E = 2g$ , 此时分裂能仅由耦合强度  $g$  决定, 对应最佳强耦合状态.

图 5 (a) 为固定  $\beta = 0.28$  时不同  $\alpha$  值下的 CD 光谱堆积图. 可见在 QBIC#1 与 GMR 的共振位置处, 二者的 CD 响应随  $\alpha$  的变化呈现显著差异:  $\alpha = 0.63$  时两模式 CD 信号较弱且无符号差异;  $\alpha = 0.75$  时, QBIC#1 的 CD 值已显著提升至上;  $\alpha = 0.81$  时 GMR 的 CD 响应开始出现符号变化;  $\alpha = 0.91$  时, QBIC#1 在 1653.9 nm 处达到 0.995 的近完美 CD, 而 GMR 模式的 CD 已完全反转至负值区间, 该现象直观反映了强耦合对不同模式手性响应的差异化调控. 图 5(b) 为二维 CD 光

谱及拉比分裂分析结果. 二维光谱清晰呈现了 QBIC#1 与 GMR 模式共振波长在  $\alpha = 0.75$  附近呈现明显反交叉, 与拉比分裂特征演化曲线完全吻合. 拉比分裂演化规律与 CD 响应定量关联的一致性表明, QBIC#1 与 GMR 模式之间的强耦合是实现高  $Q$  高效率本征 CD 的关键机制. 如图 5(b)所示, 在  $\alpha = 0.75$  时, 强耦合的中心波长位于 1642.5 nm, 对应 3.16 meV 的拉比分裂能谷值. 当  $\alpha$  偏离 0.75 时, 模式失谐度  $|E_{\text{GMR}} - E_{\text{QBIC\#1}}|$  与  $|\Gamma_{\text{GMR}} - \Gamma_{\text{QBIC\#1}}|$  增加, 分裂能略有上升, 与拉比分裂能公式推导的物理规律一致. 计算结果表明, 在不同  $\alpha$  取值下, 该体系最大拉比分裂能接近 7 meV.

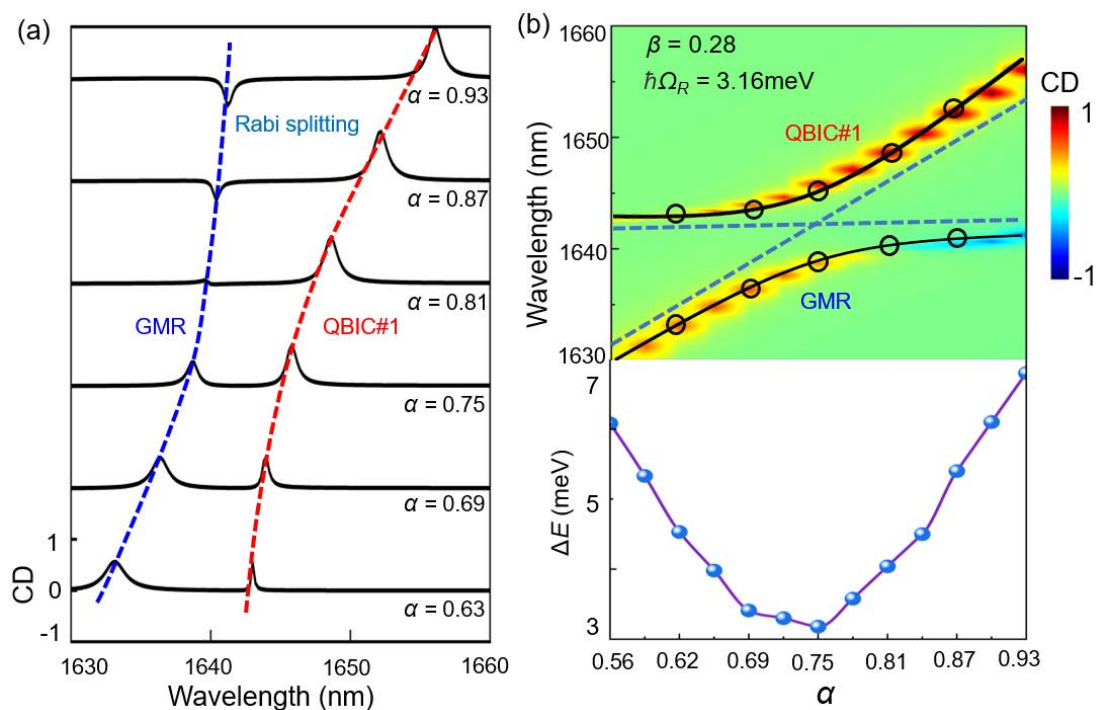


图 5 固定  $\beta = 0.28$  下的 (a) 不同  $\alpha$  值下的 CD 光谱堆积图; (b) CD 光谱及拉比分裂拟合结果 (上) 与拉比分裂能量随  $\alpha$  的变化曲线 (下)

Fig. 5. Under  $\beta = 0.28$ : (a) Stacked CD spectra at different  $\alpha$  values; (b) CD spectra and Rabi splitting fitting results (top) and variation of Rabi splitting energy with  $\alpha$  (bottom).

### 3.3 偏振奇点的拓扑演化

为了阐明强耦合机制下超表面偏振奇点在动量空间中的拓扑演化，引入了  $x$ - $y$  平面上的远场偏振矢量  $\mathbf{d}(\mathbf{k}_{\parallel}) = d_x(\mathbf{k}_{\parallel})\hat{x} + d_y(\mathbf{k}_{\parallel})\hat{y}$ ，涡旋偏振奇点 (vortex polarization singularity, V 点) 或 C 点携带的拓扑电荷  $q$  定义为<sup>[43,44]</sup>:

$$q = \frac{1}{2\pi} \oint_L d\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_{\parallel}} \phi(\mathbf{k}_{\parallel}) \quad (5)$$

其中,  $L$  是  $\mathbf{k}_{\parallel}$  空间中环绕 BIC 的一条逆时针闭合回路,  $\phi(\mathbf{k}_{\parallel})$  是偏振矢量的角度, 且  $\phi(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{2} \arg[S_1(\mathbf{k}_{\parallel}) + iS_2(\mathbf{k}_{\parallel})]$ , 其中  $S_1(\mathbf{k}_{\parallel})$  是  $\mathbf{d}(\mathbf{k}_{\parallel})$  的斯托克斯参数.

图 6(a)-(c) 展示了通过调控参数  $\alpha$  和  $\beta$ ,  $\text{TM}_1$  能带的 C 点在动量空间中的演化过程. 如图 6(a) 所示, 对于未加扰动的超表面即  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$  时, BIC 在  $\Gamma$  点表现为一个拓扑电荷  $q = +1$  的 V 点. 引入面内扰动  $\alpha$  后, 该 V 点分裂为一对拓扑电荷均为  $+1/2$  的右旋 (right-handed, RH) 与左旋 (left-handed, LH) C 点, 满足整体拓扑电荷守恒定律, 如图 6(b) 所示. 此外, 通过欠刻蚀引入的面外扰动  $\beta$  为调控该 C 点对提供了额外自由度. 通过同时调节  $\alpha$  与  $\beta$ , 可以精确调控它们在动量空间中的位置. 值得注意的是, 如图 6(c) 所示, 当  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0.28)$  时, LH C 点被精准调控至  $\Gamma$  点, 这标志着本征手性 QBIC 的实现. 强耦合的介入从根本上改变了偏振拓扑的演化轨迹. 当 QBIC#1 与 GMR 模式满足强耦合条件时, 两模式的模场发生深度叠加, 偏振矢量的空间分布被重构, 拉比分裂引发的能量简并推动 LH C 点逐步迁移至动量空间中心  $\Gamma$  点. 为了直观展示偏振态的变化, 图 6(d)-(f) 进一步给出了不同  $(\alpha, \beta)$  条件下超表面的椭圆率角  $\chi$  分布. 椭圆率角  $\chi$  定义为  $\chi = \arctan(n/m)$ , 其中  $m$  和  $n$  分别为偏振椭圆半长轴与半短轴的长度<sup>[45]</sup>. 椭圆率角  $\chi$  的取值范围为  $-45^\circ$  至  $+45^\circ$ :  $\chi = 0^\circ$  对应线偏振态,  $\chi = +45^\circ$  ( $-45^\circ$ ) 对应 RH (LH) 圆偏振态, 其余  $\chi$  值则代表 RH 或 LH 椭圆偏振态. 如图 6(d) 所示, 在

$(\alpha, \beta) = (0, 0)$  时, 远场辐射在动量空间中呈现  $\chi = 0^\circ$  的线偏振态. 引入面内不对称性 ( $\alpha = 0.91$ ) 后, 该偏振态受到扰动, 产生了 RH 与 LH 圆偏振及椭圆偏振态, 如图 6(e) 所示. 最后, 由图 6(f) 可见, 进一步引入面外不对称性 ( $\beta = 0.28$ ) 后, 在  $\Gamma$  点处形成了 LH 圆偏振态 ( $\chi = -45^\circ$ ). 上述结果表明, 借助强耦合可将 LH C 点精准调控至  $\Gamma$  点, 进而实现兼具高  $Q$  因子与高效率本征 CD.

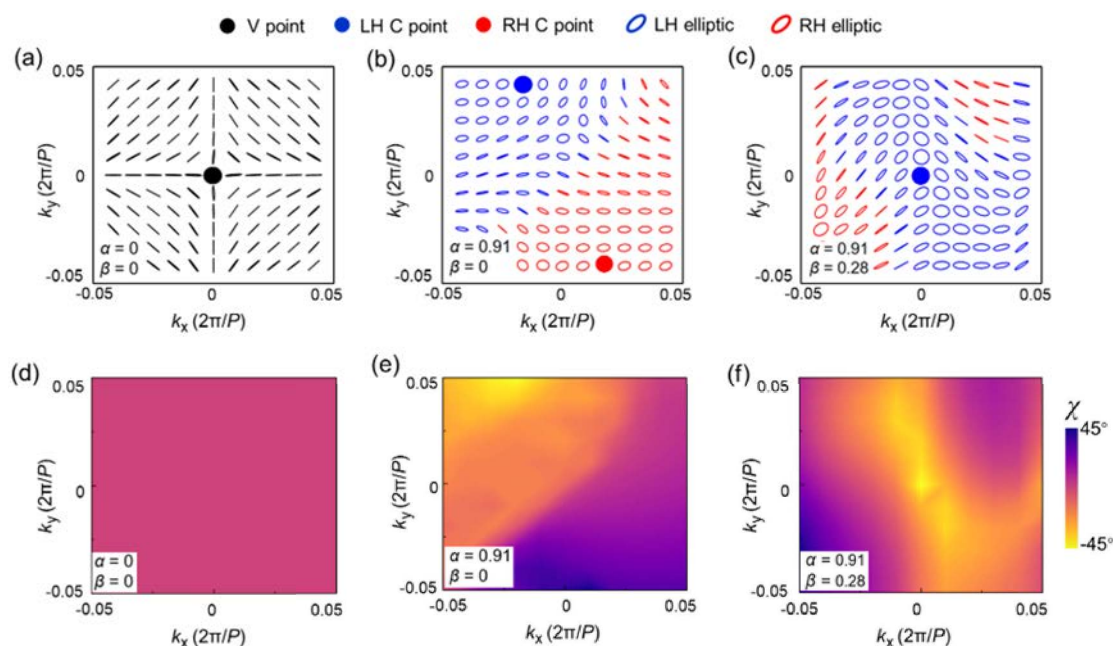


图 6 (a)  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ , (b)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0)$  与 (c)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0.28)$  时  $TM_1$  能带 C 点在动量空间中的分布图; (d)  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ , (e)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0)$  与 (f)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0.28)$  时超表面椭圆率角  $\chi$  的分布图

Fig. 6. Evolution of C points and ellipticity angle distribution of the  $TM_1$  band. Distribution maps of C points of the  $TM_1$  band in momentum space for (a)  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ , (b)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0)$  and (c)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0.28)$ ; Distribution maps of the ellipticity angle  $\chi$  of the metasurface for (d)  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ , (e)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0)$  and (f)  $(\alpha, \beta) = (0.91, 0.28)$ .

### 3.4 结构参数对 CD 响应的影响

图 7 展示了核心结构参数元胞周期  $P$ 、硅层厚度  $h$ 、欠刻蚀深度  $d$ 、刻槽宽

度  $w$  的变化对超表面透射 CD 谱的影响. 结果表明, 即使这些参数在较宽范围内发生改变, 超表面仍能稳定保持高  $Q$  高效率 CD 响应, 表明基于强耦合机制的本征手性态具有良好的参数鲁棒性. 同时从图 7(a)-(c)中可以看出, 随着  $P$ 、 $h$  和  $d$  的增大, 手性 QBIC 共振峰发生明显的红移, 这是由于结构尺寸的增加使得超表面整体有效折射率上升, 进而导致了共振频率的降低. 相反, 当  $w$  增大时, 共振峰呈现蓝移趋势, 这主要归因于单元胞内高折射率硅介质占比减小, 整体有效折射率随之下降, 如图 7(d)所示. 此外, 在整个参数变化过程中, CD 峰值始终维持在高水平 ( $CD > 0.92$ ) 且共振线宽未出现明显展宽 ( $Q > 1000$ ). 这表明该手性超表面的性能对制备工艺中常见的尺寸波动具有较强适应性, 为其实际制备与工程化应用提供了重要前提.

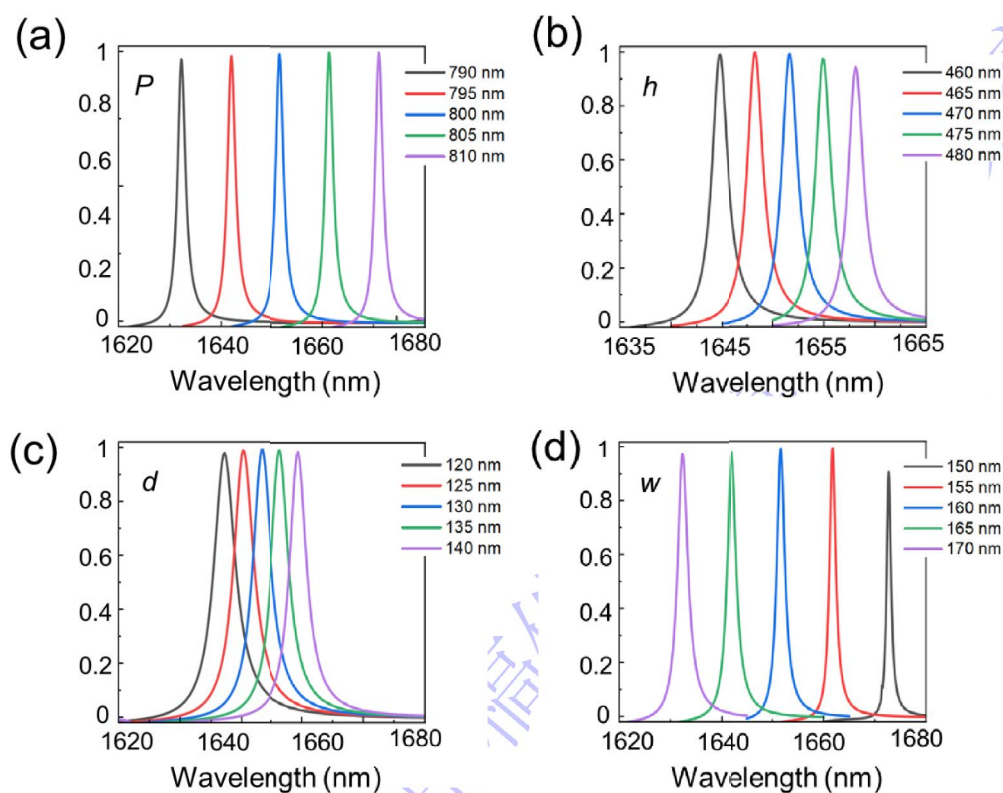


图 7 结构参数 (a)  $P$ 、(b)  $h$ 、(c)  $d$  和 (d)  $w$  对 CD 响应的影响

Fig. 7. Influences of structural parameters of (a)  $P$ , (b)  $h$ , (c)  $d$  and (d)  $w$  on CD responses.

## 4 结论

本研究围绕 BIC 超表面的手性调控, 构建了基于模式强耦合效应的本征 CD 增强体系. 设计了具有  $C_4$  对称性的硅基十字形纳米孔阵列结构, 该结构同时支持通信波段范围内的类 TM 的 BIC 模式与类 TE 的 GMR 模式. 利用欠刻蚀打破结构面外对称性, 并结合面内不对称参数的系统调控, 成功诱导两模式实现强耦合作用. 仿真结果证实, 在强耦合区域附近, QBIC#1 与 GMR 模式呈现共振波长反交叉、本征频率虚部交叉的标志性特征, 对应的拉比分裂能量谷值为 3.16 meV. 其中 QBIC#1 模式在 1653.9 nm 处实现  $Q$  因子高达 1083 的近完美本征 CD ( $CD = 0.995$ ), 而 GMR 模式在强耦合区间发生明显的 CD 符号反转, 验证了强耦合机制对模式手性的差异化调控作用. 偏振奇点拓扑演化表明, 强耦合效应可驱动 LH C 点精准定位于动量空间  $\Gamma$  点, 形成  $\chi = -45^\circ$  的左旋圆偏振态. 结构参数鲁棒性分析显示, 超表面对元胞周期  $P$ 、硅层厚度  $h$ 、欠刻蚀深度  $d$  及刻槽宽度  $w$  的显著变化具有良好适应性, CD 峰值始终维持在 0.92 以上,  $Q$  因子保持在 1000 以上, 展现出优异的制备工艺兼容性. 本研究不仅深化了对 BIC 超表面模式耦合机制与手性调控的认识, 同时也为高精度手性光学检测、高性能手性光源等手性器件的应用提供了可行的设计思路与理论支撑.

## 参考文献

- [1] Mun J, Kim M, Yang Y, Badloe T, Ni J, Chen Y, Qiu C W, Rho J 2020 *Light: Sci. Appl.* **9** 139
- [2] Lininger A, Palermo G, Guglielmelli A, Nicoletta G, Goel M, Hinczewski M,

- Strangi G 2023 *Adv. Mater.* **35** 2107325
- [3] Shi T, Deng Z L, Geng G, Overvig A, Li J, Qiu C W, Zeng X, Zeng Y, Hu G, Alù A, Kivshar Y S, Li X 2022 *Nat. Commun.* **13** 4111
- [4] Ouyang S, Sang T, Jing Z, Lu J 2024 *Opt. Lett.* **49** 5703
- [5] Jia T, Jeon Y, Feng L, Kim H, Li B, Rui G, Rho J 2025 *Opto-Electron. Adv.* **8** 250079
- [6] Hentschel M, Schäferling M, Duan X, Giessen H, Liu N 2017 *Sci. Adv.* **3** e1602735
- [7] Chen S, Liu Z, Du H, Tang C, Ji C Y, Quan B, Pan R, Yang L, Li X, Gu C, Zhang X, Yao Y, Li J, Fang N X, Li J 2021 *Nat. Commun.* **12** 1299
- [8] Oshikiri T, Sun Q, Yamada H, Zu S, Sasaki K, Misawa H 2021 *ACS Nano* **15** 16802
- [9] Petronijevic E, Cesca T, Scian C, Mattei G, Voti R L, Sibilia C, Belardini A 2024 *Nanoscale* **16** 16477
- [10] Xia Z S, Liu Y H, Bao Z, Wang L H, Wu B, Wang G, Wang H, Ren X G, Huang Z X 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 178102 (in Chinese) [夏兆生, 刘宇行, 包正, 王丽华, 吴博, 王刚, 王辉, 任信钢, 黄志祥 2024 物理学报 **73** 178102]
- [11] Gansel J K, Thiel M, Rill M S, Decker M, Bade K, Saile V, von Freymann G, Linden S, Wegener M 2009 *Science* **325** 1513
- [12] Lin Z, Mikhael C, Dai C, Cho J H 2024 *Adv. Mater.* **36** 2401451
- [13] Choi W, Moestopo W P, Gu S, Lee T, Yoo J H, Xia X, Armstrong M R 2025 *Adv. Sci.* **12** e07931
- [14] Dietrich K, Lehr D, Helgert C, Tünnermann A, Kley E B 2012 *Adv. Mater.* **24**

OP321

- [15] Chen Q, Wu Y, She Y, Zhao Y, Yang J, Chen L, Liu P, Wu M, Zeng C, Qi Z, Hu C, Liu H, Xiong Y, Tian Y, Chen Y, Cai H, Pan N, Wang X 2024 *Adv. Opt. Mater.* **12** 2400593
- [16] Hsu C W, Zhen B, Stone A D, Joannopoulos J D, Soljačić M 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16048
- [17] Azzam S I, Kildishev A V 2021 *Adv. Opt. Mater.* **9** 2001469
- [18] Kang M, Liu T, Chan C T, Xiao M 2023 *Nat. Rev. Phys.* **5** 659
- [19] Long X, Yang W, Chen Z, Xu H, Hou H, Zhang X, Dong Y, He L 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 197801 (in Chinese) [龙鑫琳, 杨惟智, 陈智全, 许辉, 侯海良, 张小姣, 董玉兰, 贺龙辉 2025 物理学报 **74** 197801]
- [20] Fang Y, Xia L, Zhang G 2026 *Acta Phys. Sin.* **75** 030406 (in Chinese) [方云团, 夏露, 章国安 2026 物理学报 **75** 030406]
- [21] Han S, Pitchappa P, Wang W, Srivastava Y K, Rybin M V, Singh R 2021 *Adv. Opt. Mater.* **9** 2002001
- [22] Sang T, Dereshgi S A, Hadibrata W, Tanriover I, Aydin K 2021 *Nanomaterials* **11** 484
- [23] Jin R, Zhang X, Huo P, Cai Z, Lu Y, Xu T, Liu Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 086901
- [24] Zhang X, Liu Y, Han J, Kivshar Y, Song Q 2022 *Science* **377** 1215
- [25] Chen Y, Deng H, Sha X, Chen W, Wang R, Chen Y H, Wu D, Chu J, Kivshar Y S, Xiao S, Qiu C W 2023 *Nature* **613** 474
- [26] Sha X, Du K, Zeng Y, Lai F, Yin J, Zhang H, Song B, Han J, Xiao S, Kivshar Y,

- Song Q 2024 *Sci. Adv.* **10** eadn901
- [27] Lim Y, Seo I C, An S C, Kim Y, Park C, Woo B H, Kim S, Park H R, Jun Y C 2023 *Laser Photonics Rev.* **17** 2200611
- [28] Kühner L, Wendisch F J, Antonov A A, Bürger J, Hüttenhofer L, Menezes L S, Maier S A, Gorkunov M V, Kivshar Y, Tittel A 2023 *Light: Sci. Appl.* **12** 250
- [29] Li S, Sang T, Yang C, Lu J, Wang Y 2023 *Opt. Lett.* **48** 6488
- [30] Zhang B, Dong A, Wang J, Qin M, Liu J Q, Huang W, Li H 2025 *Nano Lett.* **25** 4568
- [31] You S, Wang L, He H, Zhou C, Huang L 2025 *Laser Photonics Rev.* **19** e00677
- [32] Deng H, Jiang X, Zhang Y, Zeng Y, Barkaoui H, Xiao S, Yu S, Kivshar Y, Song Q 2025 *Sci. Adv.* **11** eads9562
- [33] Koshelev K, Lepeshov S, Liu M, Bogdanov A, Kivshar Y 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 193903
- [34] Zhou C, Huang L, Jin R, Xu L, Li G, Rahmani M, Chen X, Lu W, Miroshnichenko A E 2023 *Laser Photonics Rev.* **17** 2200564
- [35] He H, Lai F, Zhang Y, Zhang X, Tian C, Li X, Wang Y, Xiao S, Huang L 2025 *Opto-Electron. Adv.* **8** 250015
- [36] Sang T, Mi Q, Yang C, Zhang X, Wang Y, Ren Y, Xu T 2024 *Nanophotonics* **13** 1369
- [37] Overvig A, Yu N, Alù A 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 073001
- [38] Lu J, Sang T, Pian C, Ouyang S, Jing Z 2024 *APL Photonics* **9** 046112
- [39] Kodigala A, Lepetit T, Gu Q, Bahari B, Fainman Y, Kanté B 2017 *Nature* **541** 196

- [40] Wang S Y, Li W Y, Kang H F, Zhao W K, Jing Y H, Li X, Ge H, Wang Q, Jia B W, Xu N 2024 *Opt. Lett.* **49** 4154
- [41] Dai P, Chen H, Wang W 2025 *Opto-Electron. Plus* **1** 250005
- [42] Liu X, Galfsky T, Sun Z, Xia F, Lin E C, Lee Y H, Menon V M 2015 *Nat. Photonics* **9** 30
- [43] Wang B, Liu W Z, Zhao M X, Wang J J, Zhang Y W, Chen A, Guan F, Liu X H, Shi L, Zi J 2020 *Nat. Photonics* **14** 623
- [44] Jing Z, Li S, Ouyang S, Lu J, Wang Y, Huang L, Li L, Sang T 2025 *Nano Lett.* **25** 522
- [45] Qin H, Su Z, Liu M, Zeng Y, Tang M C, Li M, Shi Y, Huang W, Qiu C W, Song Q 2023 *Light: Sci. Appl.* **12** 66

录用稿件，非最终出版稿

# High-quality intrinsic circular dichroism in silicon-based BIC metasurfaces via strong coupling\*

ZHU Leyi<sup>1)2)</sup> SANG Tian<sup>1)2)†</sup> YANG Guanhua<sup>1)2)</sup> WANG Chenyang<sup>1)2)</sup>

- 1) (School of Optoelectronic Information and Physical Science, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)
- 2) (Jiangsu Provincial Research Center of Light Industrial Optoelectronic Engineering and Technology, Wuxi 214122, China)

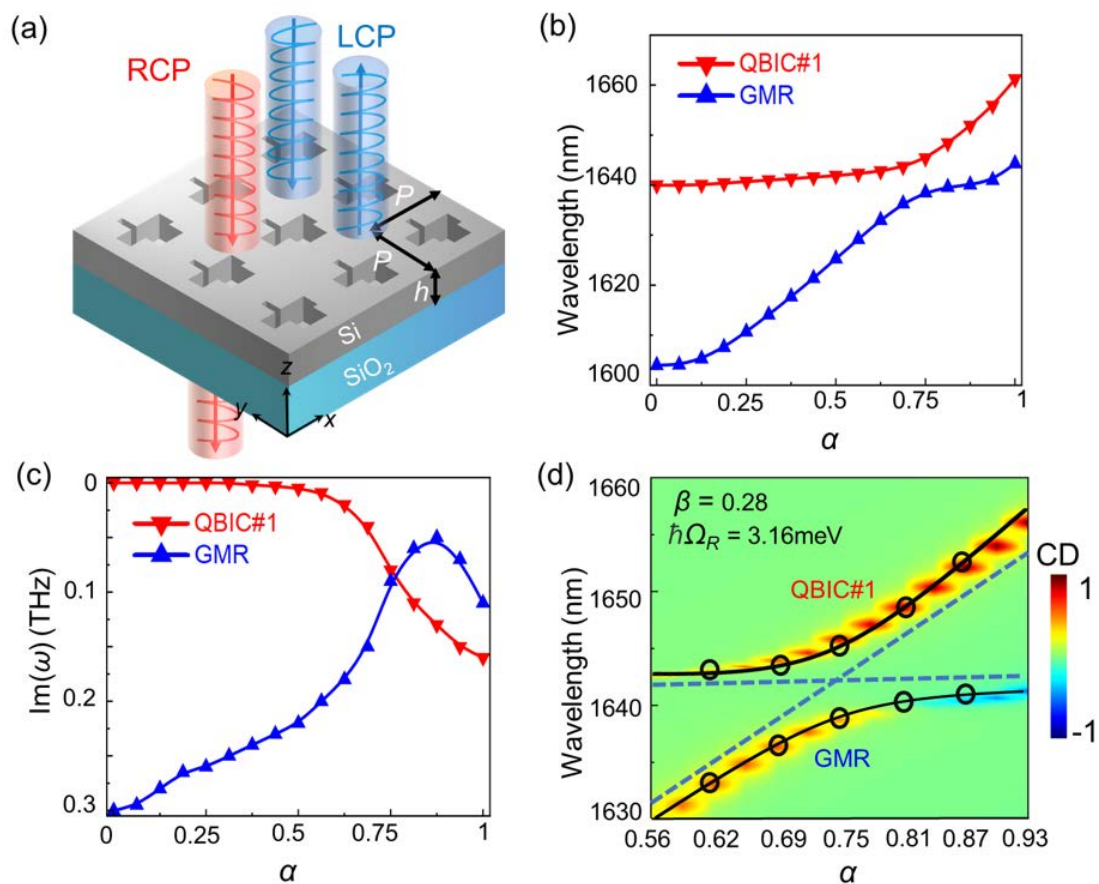
## Abstract

Bound states in the continuum (BICs) can significantly enhance spin-selective light-matter interactions. However, current BIC metasurfaces generally rely on single or multiple chiral BIC modes to enhance circular dichroism (CD), which limits their application in functional integrated devices. This paper proposes a method that utilizes the strong coupling effect in BIC metasurfaces to achieve intrinsic CD with both high quality factor (Q-factor) and high efficiency. The metasurface is designed with a silicon-based cross-shaped nanohole array, which can simultaneously support a TM-like BIC mode and a TE-like guided-mode resonance (GMR) mode. By introducing under-etching to break the out-of-plane symmetry and tuning in-plane asymmetry parameter, strong coupling between the quasi-BIC (QBIC) mode and the GMR mode can be induced, thereby realizing near-perfect intrinsic CD with high Q-factor. In the strong-coupling region, the resonant wavelengths of the QBIC and GMR modes exhibit an anti-crossing behavior, while their imaginary parts of the eigenfrequency cross; the corresponding Rabi splitting energy reaches a minimum of 3.16 meV, and the induced intrinsic CD achieves a maximum of 0.995 at the wavelength of 1653.9 nm with a high Q-factor of 1083. Evolution of far-field polarization singularities shows that under strong coupling, the  $\Gamma$  point corresponds to a left-handed circular polarization singularity (C-point). Furthermore, the strong-coupling-induced CD exhibits good robustness—even under considerable variations in structural parameters, the high-Q and high-efficiency CD response is maintained. This method offers a novel design

strategy for integrated chiral photonic devices and holds promise for applications in areas such as chiral sensing, chiral lasers, and nonlinear chiral optics.

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62375113).

† Corresponding author. E-mail: sangt@jiangnan.edu.cn



**Keywords:** intrinsic chirality, bound states in the continuum, circular dichroism, strong coupling

非晶  
录用稿件