

基于群论的晶格扰动介质纳米孔阵列多重Fano共振机理及演变

陈颖 李美洁 赵蒙 王建坤

**Group theory based formation mechanism and evolution of multiple Fano resonances in dielectric nanohole arrays with lattice-perturbed**

Chen Ying Li Mei-Jie Zhao Meng Wang Jian-Kun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 107801 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212375

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212375>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

亚波长介质光栅/MDM波导/周期性光子晶体中双重Fano共振的形成及演变规律分析

Analysis of formation and evolution of double Fano resonances in sub-wavelength dielectric grating/MDM waveguide/periodic photonic crystal

物理学报. 2022, 71(3): 034202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211491>

劈裂环-盘二聚体结构的多重Fano共振

Multiple Fano resonances in gold split ring disk dimers

物理学报. 2022, 71(2): 027802 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210855>

含双挡板金属-电介质-金属波导耦合方形腔的独立调谐双重Fano共振特性

Resonance characteristics of independently tuned dual Fano of metal-dielectric-metal waveguide coupling square cavity with double baffles

物理学报. 2019, 68(10): 107302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181985>

基于非对称结构全介质超材料的类电磁诱导透明效应研究

Research on analogue of electromagnetically induced transparency effect based on asymmetric structure all-dielectric metamaterial

物理学报. 2021, 70(19): 194201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210070>

基于硅基光子器件的Fano共振研究进展

Progress of silicon photonic devices-based Fano resonance

物理学报. 2021, 70(3): 034204 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20200550>

对称纳米棒三聚体结构的Fano共振特性研究

Fano resonances in symmetric gold nanorod trimers

物理学报. 2019, 68(19): 197801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190978>

# 基于群论的晶格扰动介质纳米孔阵列多重 Fano 共振机理及演变\*

陈颖<sup>†</sup> 李美洁 赵蒙 王建坤

(燕山大学电气工程学院, 测试计量技术与仪器河北省重点实验室, 秦皇岛 066004)

(2021 年 12 月 23 日收到; 2022 年 1 月 27 日收到修改稿)

基于全介质超构材料独特的电磁属性, 提出了一种晶格扰动介质纳米孔阵列超构表面来激发近红外区域的多重 Fano 共振. 结合群论深入探究了该超构表面在其原胞为方形晶格构型与方形晶格对称性被破坏两种情况下多重 Fano 共振的形成机理及演变规律. 研究表明, 在方形晶格超构表面中, 外部辐射连续体分别与由正入射平面波直接激发的双重简并模式共振干涉形成双重 Fano 共振, 且该共振与原胞中是否含孔及孔的形状无关, 在晶格扰动超构表面中, 原本不耦合的非简并模式由正入射平面波激发出来并与外部辐射连续体干涉形成  $Q$  值更高的三重 Fano 共振. 进一步探讨了正入射平面波的  $xy$  极化方向对上述五重 Fano 共振的影响, 结果表明, 双重简并模式 Fano 共振偏振无关, 三重非简并模式 Fano 共振偏振依赖. 本文将为利用方形晶格构型的超构表面实现多重 Fano 共振的激发及演变提供有效的理论参考.

**关键词:** 全介质超构材料, 群论, 多重 Fano 共振, 晶格扰动

**PACS:** 78.67.Pt, 02.20.-a, 42.60.Da

**DOI:** 10.7498/aps.71.20212375

## 1 引言

Fano 共振效应<sup>[1]</sup>源于原子系统中离散局域态与连续背景散射态之间的相消干涉, 可在特定频段处产生陡峭的非对称光学响应谱线, 导致入射电磁能量紧密束缚在光学结构周围, 如 0 维电介质球和棒<sup>[2,3]</sup>、一维无序结构<sup>[4]</sup>、波导中的二维腔<sup>[5]</sup>、三维光子结构<sup>[6]</sup>、晶格团簇<sup>[7]</sup>及超构材料等<sup>[8]</sup>, 从而实现极大地电磁局域增强. 超构材料因具备普通光学材料难以取得的超常光学性能而在超光学领域具有极大的应用潜力, 传统三维阵列超构材料的发展受制于集成难度大、工艺复杂等问题, 而将超构材料的三维结构转为二维阵列平面结构则能突破其

局限性, 并将入射电磁能量限制在亚波长尺度内, 因此由厚度远小于工作波长的原胞周期性排列而成的超构表面<sup>[9]</sup>得以研究和发展.

目前, 国内外研究者们已经设计了大量形式新颖的 Fano 共振超构表面, 按组成材料可将其划分为等离子体型和全介质型, 如 Kong 等<sup>[10]</sup>提出了一种等离子体超构表面与光学微腔相结合的复合结构, 由微腔激发的多个窄带共振峰与超构表面提供的连续背景散射态干涉形成多重 Fano 共振. Zhang 等<sup>[11]</sup>提出了一种非对称的纳米圆环与交叉纳米棒多聚体全介质超构表面, 交叉纳米棒集体振荡产生的电偶极米氏共振与纳米圆环提供的磁偶极米氏共振耦合形成单重 Fano 共振. 当光学研究波段推进到近红外及可见光范围时, 金属材料的欧

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61201112)、河北省重点研发计划 (批准号: 19273901D, 20373301D)、河北省自然科学基金 (批准号: F2020203066)、中国博士后基金 (批准号: 2018M630279)、河北省博士后择优资助项目 (批准号: D2018003028) 和河北省高等学校科学技术研究项目 (批准号: ZD2018243) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: [Chenyingsu@ysu.edu.cn](mailto:Chenyingsu@ysu.edu.cn)

姆损耗及伴随其产生的热效应严重劣化了光学器件的效率, 而全介质材料共振是由位移电流而不是传导电流驱动, 在该波段下几乎对光透明, 这使得 Fano 共振超构表面研究聚焦于全介质材料. 面对形式各异的全介质超结构群体, 深入探究其中单重、双重乃至多重 Fano 共振的激发机理及演变规律显得尤其重要.

分子光谱中构建的群论为超分子系统中 Fano 共振现象的产生提供了一种有效的解释. 对于等离子超分子来说, 各个微纳颗粒间的表面等离子激元 (SPP) 杂化共振对应由原子轨道建立分子轨道的过程, Brandl 等<sup>[12]</sup>从原子轨道建立分子轨道的机理出发, 基于群论详细论述了如何由单个微纳颗粒的 SPP 模式建立对称多微纳颗粒的 SPP 模式, Hopkins 等<sup>[13]</sup>基于群论证明了等离子体对称低聚物中存在共同的 Fano 共振激发机制, 低聚物本征模的非正交使得本征模间可以相互干涉, 从而导致 Fano 共振的产生. Forestiere 等<sup>[14]</sup>利用群论证明在等离子体对称多聚体中, 无需激发暗模式就可以实现 Fano 共振. Gomez 等<sup>[15]</sup>结合分子点群的特征标详细阐述了如何利用单个纳米柱体 SPP 模式建立柱体阵列 SPP 模式. 全介质超分子系统由高折射率低损耗材料制成的介电粒子或介电粒子团簇组成, 而基于群论结合近场分布详细阐述全介质超构表面因介电粒子团簇空间对称性改变引起的多重 Fano 共振激发及演变等研究工作尚较少见.

本文提出了一种晶格扰动介质纳米孔阵列超构表面. 基于群论结合反射光谱及近场分布对双重宽频带及三重窄带 Fano 共振的形成机理进行详细

分析, 阐述了外部辐射连续体分别与方形晶格超构表面中由正入射波直接激发的双重简并模共振、经晶格对称性扰动激发的三重非简并模共振发生干涉而形成多重 Fano 共振的物理机制及演变规律. 应用 Fano 模型定性分析各共振模式强弱, 并利用数值模拟探究正入射波的  $xy$  极化方向对各共振模式的影响.

## 2 结构模型建立与理论分析

### 2.1 结构模型建立

图 1 为本文提出的晶格扰动介质纳米孔阵列超构表面模型表征, 其原胞为置于二氧化硅 ( $\text{SiO}_2$ ) 衬底上围绕中心  $O$  点对称地刻蚀 4 个空心孔的方形截面硅 (Si) 纳米立方体. 图 1(a) 和 (b) 分别表示实空间中方形晶格与晶格扰动原胞的俯视图, 其中晶格常数为  $P = 800 \text{ nm}$ , 硅体的方形截面边长  $c = 680 \text{ nm}$ , 方孔的边长  $a = 110 \text{ nm}$ , 两相邻方孔的中心间距  $b = 290 \text{ nm}$ , 上层硅体和方孔的厚度  $h = 130 \text{ nm}$ . 晶格扰动是指通过引入晶格扰动参数  $r$  打破方形晶格原胞沿  $y$  轴的对称性, 导致  $y$  轴负向两方孔的横截面积较  $y$  轴正向减少  $\Delta S = 2 \times 1/4\pi r^2$ ,  $r$  具体表示为与硅体等厚的四分之一硅 (Si) 圆柱体的底面半径, 虚线框表征方孔减少的横截面积, 当原胞为方形晶格时  $r = 0 \text{ nm}$ , 对应硅体的横截面积为  $S = c^2 - 4a^2$ . 当  $r$  设置为  $80 \text{ nm}$  时的超构表面示意图如图 1(c) 所示. 应用 Lumerical FDTD 仿真软件分析该超构表面的反射光谱与近场分布, 数值模拟时, 将该超构表面完全浸入折射

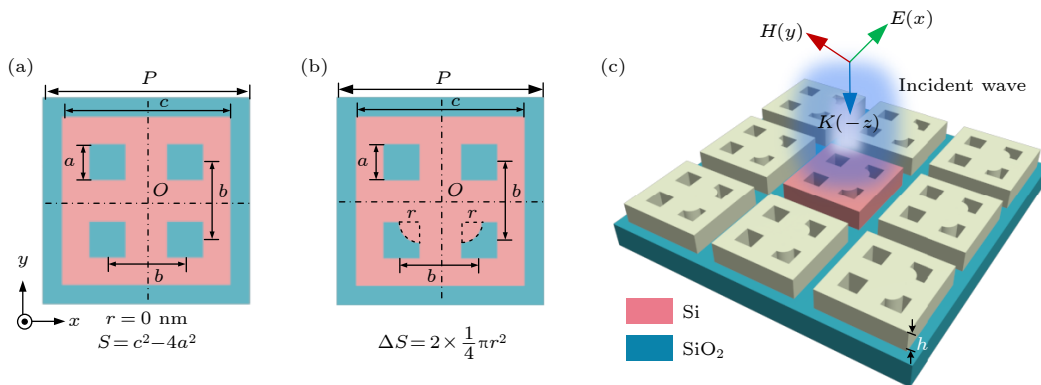


图 1 晶格扰动介质纳米孔阵列超构表面模型表征 (a) 方形晶格原胞俯视图; (b) 晶格扰动原胞俯视图; (c)  $r = 80 \text{ nm}$  时晶格扰动超构表面示意图

Fig. 1. Schematic diagram of dielectric nanohole arrays metasurface with lattice-perturbed: (a) Top view of unit cell with square lattice; (b) top view of unit cell with lattice-perturbed; (c) schematic diagram of metasurface with lattice-perturbed of  $r = 80 \text{ nm}$ .

率为 1.33 的液体中, 一束电场与磁场偏振分量相互正交且波矢量沿  $-z$  方向的平面波由该超构表面上表面入射,  $x$  和  $y$  方向均设置为周期性边界条件,  $z$  方向设置为完美匹配层 (PML) 边界条件, 材料参数均采用 Palik 折射率数据库数值<sup>[16]</sup>.

## 2.2 理论分析

超构表面的整体电磁响应主要取决于原胞的性质, 因此有必要首先揭示原胞的模态组成, 该过程需结合原胞的空间面对称性来展开, 超构表面的全局对称性由原胞的点对称性来定义, 故本文基于群论<sup>[17]</sup> 研究该超构表面的电磁特性. 当  $r = 0$  nm 时, 该超构表面的原胞由二维方形晶格排列的纳米方孔组成, 方形晶格原胞的二维对称示意图如图 2(a) 所示, 它同时具有旋转对称  $C_4$ ,  $C_4^{-1}$ ,  $C_2$  与镜面对称  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma'_d$  及  $\sigma''_d$ , 因此该方形晶格超构表面的对称性可由  $C_{4v}$  点群<sup>[18]</sup> 描述. 由表 1 可知, 该群在第一布里渊区中高度对称的波矢点  $\Gamma$  ( $k_x = 0$ ,  $k_y = 0$ ) 有 4 个一维不可约表示  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$  与  $B_2$  和 1 个二维可约表示  $E$ , 这里的一维和二维分别指本征模是非简并与双重简并的, 每种不可约表示都有其自身的空间对称性, 当平面波正入射时, 该方形晶格超构表面存在 6 个本征模式, 包括 2 个简并模式与 4 个非简并模式, 其中 2 个简并模式互为  $90^\circ$  旋转重合版本, 形成双重简并对, 如图 2(d) 所示. 用矢量  $\mathbf{E}$  沿着  $x$  轴 ( $e_x$ ) 或者沿着  $y$  轴 ( $e_y$ ) 来

区分正入射平面波的极化方向.

只有当本征模式的对称性与正入射平面波的对称性相匹配时, 共振模式才能够被激发. 简并模式存在与正入射平面波对称性相匹配的成分因而能够发生耦合而被直接激发<sup>[19]</sup>, 包括  $E^{(1)}$  模式与  $e_y$  的  $E_y$  偏振分量及  $e_x$  的  $H_y$  偏振分量,  $E^{(2)}$  模式与  $e_x$  的  $E_x$  偏振分量及  $e_y$  的  $H_x$  偏振分量. 但 4 种非简并模式却不存在与正入射平面波对称性相匹配的成分, 总体耦合强度为零, 导致无法被激发而成为零共振线宽的非耦合暗模态. 具体而言, 非简并模式与  $e_x$ ,  $e_y$  的耦合作用表达如下<sup>[20]</sup>:

$$\begin{cases} \langle e_x | M \rangle = \langle e_x | \sigma_x^* \sigma_x | M \rangle = (-\langle e_x |)(+ | M \rangle) \\ \quad = -\langle e_x | M \rangle \Rightarrow \langle e_x | M \rangle = 0, \\ \langle e_y | M \rangle = \langle e_y | \sigma_y^* \sigma_y | M \rangle = (-\langle e_y |)(+ | M \rangle) \\ \quad = -\langle e_y | M \rangle \Rightarrow \langle e_y | M \rangle = 0, \end{cases} \quad (1)$$

式中:  $M$  代表  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$  与  $B_2$ ;  $\sigma_x^*$  与  $\sigma_y^*$  分别对应  $\sigma_x$  与  $\sigma_y$  的逆变换.

表 1  $C_{4v}$  点群的不可约表示的特征标表  
Table 1. Character table of irreducible representations of  $C_{4v}$  point group.

$C_{4v}$	E	$2C_4$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$B_1$	1	-1	1	1	-1
$B_2$	1	-1	1	-1	1
$E$	2	0	-2	0	0

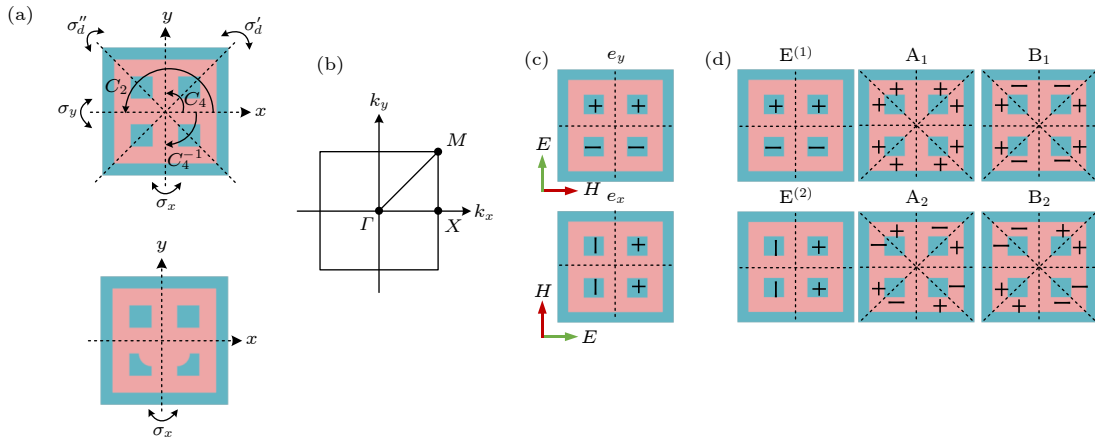


图 2 原胞与模场对称性 (a) 方形晶格 (上) 与晶格扰动 (下) 原胞的二维对称示意图; (b) 方形晶格超构表面的第一布里渊区; (c)  $y$  极化平面波 ( $e_y$ ) 与  $x$  极化平面波 ( $e_x$ ) 的模场对称性; (d) 方形晶格超构表面中 6 种本征模的对称性 (同号区域对称, 异号区域反对称)

Fig. 2. Symmetry of unit cell and mode field: (a) Two-dimensional symmetry operation for unit cell with square lattice (above) and lattice-perturbed (below); (b) the first Brillouin zone of square lattice metasurface; (c) symmetry of resonant mode field of  $e_y$  and  $e_x$ ; (d) symmetry of six eigenmodes in lattice metasurface (areas with the same sign are symmetrical and areas with different signs are antisymmetric).

由 (1) 式可知, 正是非简并模式的镜像对称性阻止模式本身与外部辐射的耦合, 故扰动模式的镜面对称性, 则能够扰动模式与外部辐射的耦合, 使两者间的对称性失配得到补偿. 在方形晶格原胞中引入  $r = 80 \text{ nm}$  的扰动后, 晶格扰动原胞的对称性中仅  $\sigma_x$  得以保留, 非简并模式沿  $x$  轴的对称性也随之未受到扰动, 然而  $\sigma_y$  的打破导致非简并模式沿  $y$  轴的对称性受到破坏, 非对称的非简并模式可被分成对称 (s) 模与反对称 (as) 模两部分<sup>[21]</sup>, 这两部分都具有  $\sigma_y$  对称性, 对于  $A_1$  与  $B_1$  模式, 对称模对应非简并模对称性, 反对称模对应简并模对称性, 对于  $A_2$  与  $B_2$  模式, 对称模对应简并模对称性, 反对称模对应非简并模对称性, 故原始的非对称非简并模可被视作非简并模与简并模的加和, 其中的简并模分量能够与正入射平面波耦合并辐射输

出<sup>[22]</sup>, 导致  $A_1, A_2, B_1$  与  $B_2$  模式被激发而表现为可见线宽的亚辐射共振态.

$$\begin{aligned} |M'\rangle &= \frac{1}{2} (|M'\rangle + \sigma_y |M'\rangle) + \frac{1}{2} (|M'\rangle - \sigma_y |M'\rangle) \\ &= |M'\rangle_s + |M'\rangle_{as}, \end{aligned} \quad (2)$$

式中,  $M'$  代表非对称的  $A_1, A_2, B_1$  与  $B_2$ .

### 3 Fano 共振形成及演变

#### 3.1 方形晶格超构表面

首先研究方形晶格超构表面的 Fano 共振响应特性. 如图 3(a) 中带三角的蓝色曲线所示, 反射谱线在  $\lambda_1 = 1203.85 \text{ nm}$  与  $\lambda_2 = 1499.06 \text{ nm}$  处出现 2 个宽频带 Fano 共振, 将其简记为 FR1 与 FR2. 方形晶格超构表面的 6 种本征模式处于辐射连续

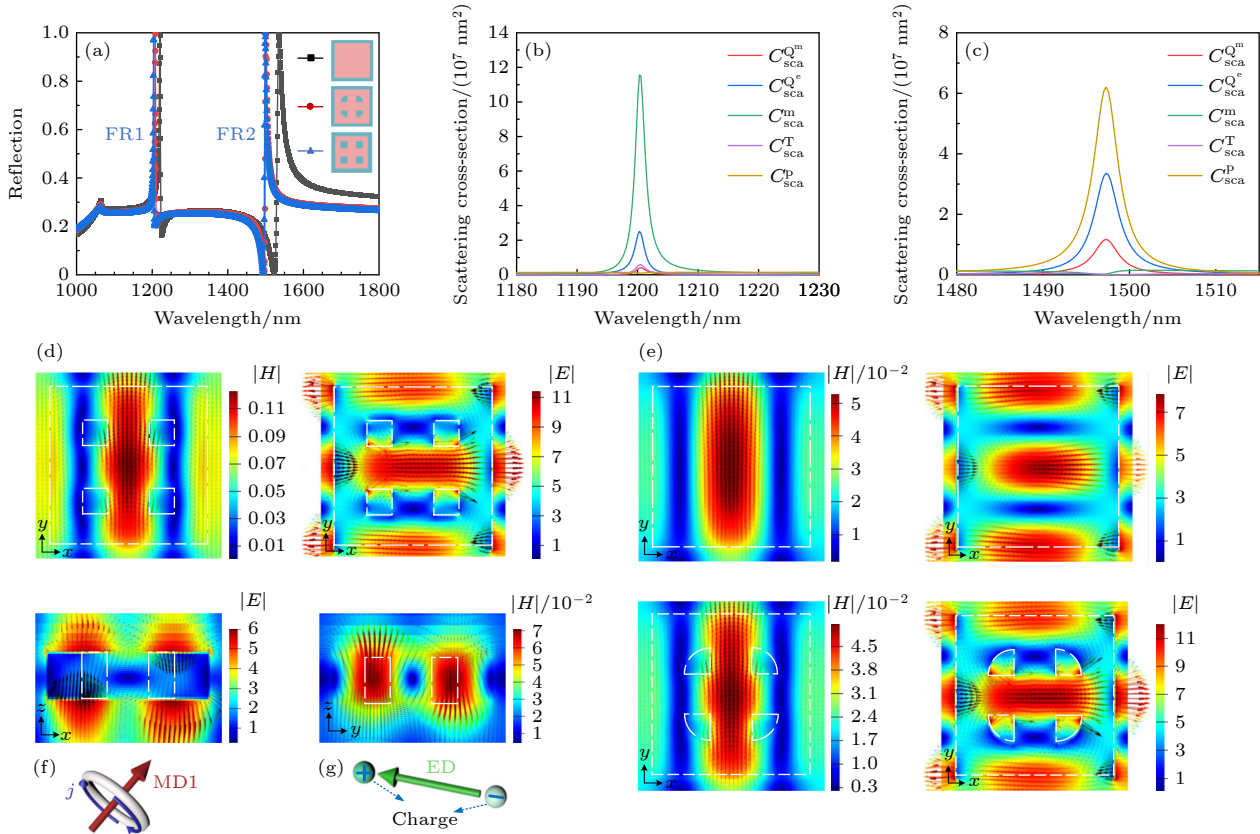


图 3 方形晶格超构表面在  $e_x$  正入射条件下的数值模拟结果 (a) 完整硅板、扇形孔与方孔超构表面的反射光谱对比图; (b), (c) FR1 与 FR2 处的笛卡尔多极分解; (d) FR1 (FR2) 在  $xoy$  截面的归一化磁场 (电场) 分布  $|H|$  ( $|E|$ ) 及  $xoz$  ( $yoz$ ) 截面的归一化电场 (磁场) 分布  $|E|$  ( $|H|$ ); (e) 完整硅板与扇形孔超构表面在  $xoy$  截面的归一化电磁场分布 (以下场图中的白线框均表征结构轮廓); (f), (g) MD1 与 ED 的概念描述图

Fig. 3. Numerical simulation of square lattice metasurface under  $e_x$ : (a) Reflectance spectrum comparison of metasurfaces with complete silicon block, scalloped holes and square holes; (b), (c) cartesian multipole decomposition of FR1, FR2 and FR3; (d) normalized magnetic (electric) field distribution in  $|H|$  ( $|E|$ ) in  $xoy$  section and normalized electric (magnetic) field distribution  $|E|$  ( $|H|$ ) in  $xoz$  ( $yoz$ ) section of FR1 (FR2); (e) normalized electromagnetic field distribution in  $xoy$  section of metasurface with complete silicon block, scalloped holes (white boxes in the following field diagrams is structural outline drawing); (f), (g) conceptual description of MD1 and ED.

域内, 而其中 4 种非简并模式为辐射连续域内的束缚态, 因此, 入射到方形晶格超构表面的电磁能量只能耦合到 2 种简并模式并将其激发, 同时与垂直的自由空间辐射连续体相互干涉形成 Fano 共振<sup>[23]</sup>. 为更深入地了解 FR1 与 FR2 的物理性质, 分析了其共振波长处的归一化电磁场分布并进行了硅体内部电流分布的笛卡尔多极矩展开. 由图 3(d) 中 FR1 处的归一化电磁场及其矢量分布可知, 方孔间隙的位移电流在  $xoz$  截面内被激励成环形分布, 导致其法向上的磁场得到增强, 激发  $xoy$  截面内沿  $y$  方向的磁偶极共振 MD1, 如图 3(f) MD1 的概念描述图所示, 带箭头的蓝线圆圈表征位移电流, 红线箭头表征激发的磁偶极矩. MD1 在  $xoy$  截面内的磁场分布沿  $x$  轴对称, 沿  $y$  轴反对称, 故其共振模式属于  $E^{(1)}$ , 该模式由  $e_x$  的  $H_y$  分量直接激发后与外部辐射连续体干涉形成 FR1. 由图 3(d) 中的归一化电磁场及其矢量分布可知, 在  $xoy$  截面内, 感应场位移电流在方孔间隙沿  $x$  方向逐渐增强, 导致其切面  $yo z$  截面内形成强大的环形磁场, 激发  $xoy$  截面内沿  $x$  方向的电偶极共振 ED, 如图 3(g) ED 的概念描述图所示, 绿线箭表征激发的电偶极矩. ED 在  $xoy$  截面内的电场分布沿  $x$  轴反对称, 沿  $y$  轴对称, 故其共振模式属于  $E^{(2)}$ , 该模式由  $e_x$  的  $E_x$  分量直接激发后与外部辐射连续体干涉形成 FR2. 图 3(b) 与图 3(c) 笛卡尔多极矩展开结果表明, 磁偶极矩和电偶极矩分别对 FR1 与 FR2 共振模式的远场辐射贡献最大.

为进一步分析双重简并模式 Fano 共振的激发特性, 将单元胞同为方形晶格的完整硅板结构、

90°扇形孔结构 (孔半径与方孔边长相等) 在  $e_x$  正入射条件下的 Fano 共振响应特性与该方孔结构进行对比. 如图 3(a) 三结构的反射光谱对比图所示, 完整硅板结构由于空间体积增大引起上层硅体等效折射率增加而产生 2 个共振波长红移的 Fano 共振, 90°扇形孔结构则因空间体积与该方孔结构相差不大而出现 2 个共振波长几乎与 FR1、FR2 相同的 Fano 共振. 通过观察图 3(e) 完整硅板与 90°扇形孔结构共振处的近场分布可知, 两结构的局域电磁场及其矢量分布与该方孔结构大体保持一致, 故两结构中的共振模式与该方孔结构相同. 上述研究表明, 方形晶格超构表面仅支持双重简并模式 Fano 共振, 且该共振与超构表面原胞中是否含孔及孔的形状无关.

### 3.2 晶格扰动超构表面

当该超构表面的  $r = 80$  nm 时, 方形晶格的面内对称性被破坏, 4 种非简并模式与外辐射波的耦合强度不再为零, 入射电磁能量耦合到 4 种非简并模式后与外部辐射连续体相互干涉形成 Fano 共振<sup>[24]</sup>. 如图 4(a) 中带圆圈的红色曲线所示时, 该结构在  $e_x$  正入射条件下产生了除之前讨论的 FR1 与 FR2 以外的 3 个带宽极窄的 Fano 共振, 其共振波长分别对应  $\lambda_3 = 1074.8$  nm,  $\lambda_4 = 1093.35$  nm,  $\lambda_5 = 1577.74$  nm, 依次简记为 FR3, FR4 与 FR5. 同时  $r$  的增加引起空间体积增大进而导致上层硅体的等效折射率增加, FR1 与 FR2 对应的共振波长发生红移, 现分别为  $\lambda_1 = 1207.13$  nm 与  $\lambda_2 = 1504.39$  nm, 但共振模式未发生改变. 应用 Fano

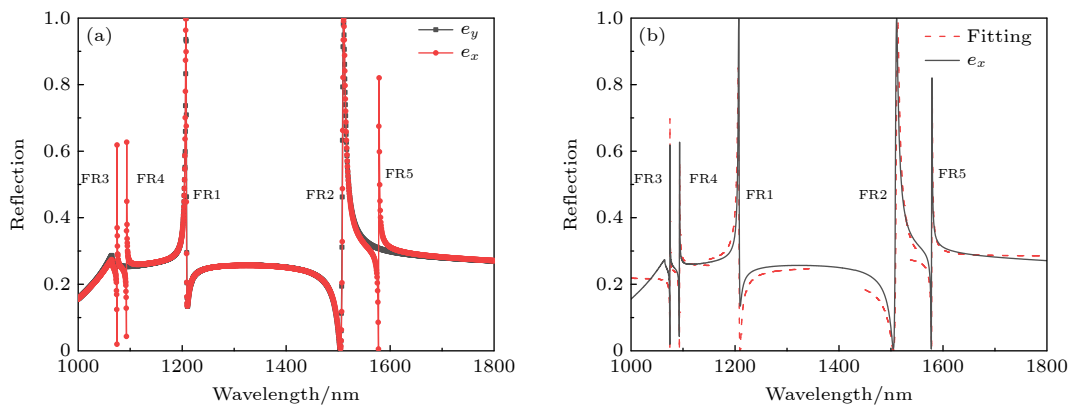


图 4 晶格扰动超构表面的反射光谱图与拟合曲线模型 (a)  $e_x$  与  $e_y$  正入射条件下的反射光谱对比图; (b)  $e_x$  正入射条件下 FR1-FR5 的拟合曲线

Fig. 4. Reflection spectra and fitting curve model of lattice perturbed metasurface: (a) Comparison of reflectance spectrum under  $e_x$  and  $e_y$ ; (b) fitting curve of FR1-FR5 under  $e_x$ .

模型定性地分析 FR1-FR5 的模式特性及共振强弱, 其表达式如下<sup>[25]</sup>:

$$R(\omega) = F \frac{(\varepsilon + q)^2}{1 + \varepsilon^2}, \quad (3)$$

式中:  $\varepsilon = 2(\omega - \omega_0)/\Gamma$ ,  $\omega_0$  和  $F$  分别代表 Fano 共振频率与线宽;  $F$  为连续态与离散态的耦合系数;  $q$  为 Breit-Wigner 参数, 表征 Fano 共振轮廓的非对称性. 选取 FR1-FR5 的光谱特征利用该模型进行拟合, 表 2 展示了该模型中表征 Fano 共振特性的主要参数值, 可以看出解析推导与数值模拟呈现较好地吻合, 拟合曲线如图 4(b) 所示. 通过表 2 参数比值  $\omega_0/\Gamma$  求取 FR1-FR5 的共振  $Q$  值, 显然 FR3、FR4 与 FR5 远大于 FR1 与 FR2, 故经晶格扰动激发的 Fano 共振强度更高.

表 2 表征 Fano 共振特性的主要参数值

Table 2. Main parameters that characterize the resonant properties of Fano.

Parameter	$\omega_0/\text{eV}$	$\Gamma/\text{nm}$	$F$	$q$	$Q$
$\lambda_1 = 1207.13 \text{ nm}$	1.027	2.92	0.257	-1.550	413
$\lambda_2 = 1504.39 \text{ nm}$	0.824	6.57	0.234	1.910	229
$\lambda_3 = 1074.80 \text{ nm}$	1.154	0.26	0.221	1.536	4134
$\lambda_4 = 1093.35 \text{ nm}$	1.134	0.54	0.256	1.145	2025
$\lambda_5 = 1577.74 \text{ nm}$	0.786	1.11	0.285	1.413	1421

由于具有特定对称类型的非简并模式只能耦合到具有相同对称类型的正入射平面波中, 因此这里通过共振模式在  $xoy$  截面的电场矢量分布的对称性来对非简并模式的激发进行解释<sup>[26]</sup>. 由图 5(a) 与图 5(d) 可知, FR3 处的局域电场聚集在硅体边

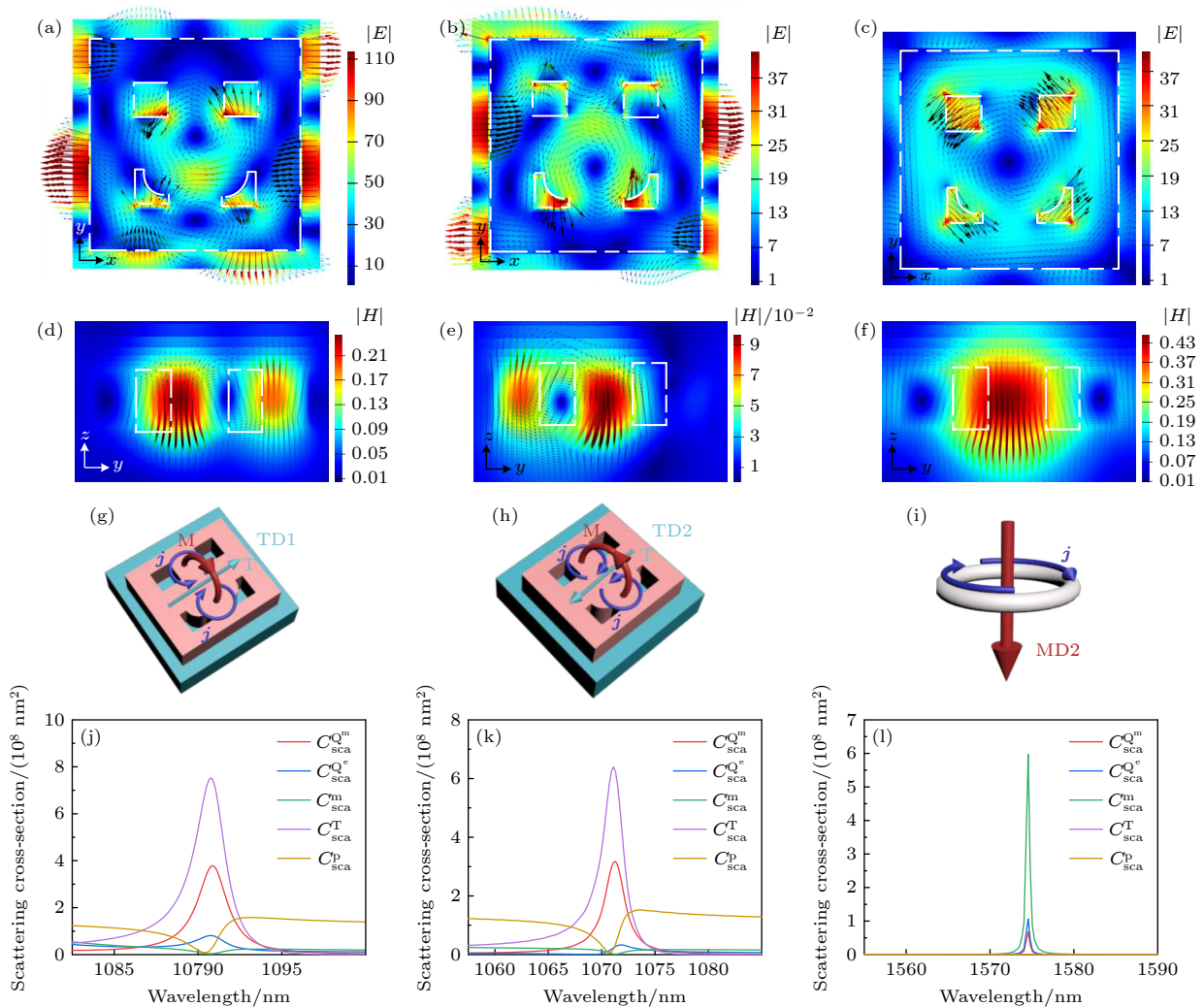


图 5 晶格扰动超构表面在  $e_x$  正入射条件下的近场分析与笛卡尔多极分解 (a)–(i) FR3, FR4 与 FR5 在  $xoy$  截面的归一化电场分布  $|E|$ 、 $yoz$  截面的归一化磁场分布  $|H|$  及 TD1, TD2 与 MD2 的概念描述图; (j)–(l) FR3, FR4 与 FR5 处的笛卡尔多极分解

Fig. 5. Near-field analysis of lattice-perturbed metasurface under  $e_x$  and cartesian multipole decomposition: (a)–(i) Normalized electric field distribution  $|E|$  in  $xoy$  section and normalized magnetic field distribution  $|H|$  in  $yoz$  section of FR3, FR4 and FR5, and conceptual description of TD1, TD2 and MD2; (j)–(l) cartesian multipole decomposition of FR3, FR4 and FR5.

缘与内部. 硅体边缘的电场矢量分布属于  $A_2$  模式, 硅体内部的位移电流在  $xoy$  截面内呈现一逆一顺 2 个反向闭环分布, 导致  $yoz$  截面内的磁场在 2 个闭环的中心部分得到增强, 激发 2 个沿  $+z, -z$  方向的磁偶极矩, 其与  $e_x$  的  $H_y$  分量构成  $yoz$  截面的流动环形磁场, 诱导  $xoy$  截面内沿  $x$  方向的电环偶极矩共振 TD1, 如图 5(g)TD1 的概念描述图所示, 带箭头的蓝线圆圈表征位移电流, 带箭头的红线圆圈表征激发的磁偶极矩  $M$ , 蓝线箭头表示诱导的电环偶极矩  $T$ . TD1 模式与  $A_2$  模式的杂化电场在  $xoy$  截面内整体沿  $x$  轴对称, 沿  $y$  轴反对称, 故该杂化共振仅能由正入射的  $e_x$  激发, 后与外部辐射连续体干涉形成电环偶响应 FR3. 由图 5(b) 与图 5(e) 可知, FR4 处的局域电场仍聚集在硅体边缘与内部, 并显现向内部转移的趋势. 硅体边缘的电场矢量分布同样属于  $A_2$  模式, 而硅体内部上下两侧的反相圆形位移电流的流向与 FR1 相反, 从而激发垂直于硅体表面的反相圆形磁矩分布, 诱导一个与硅体表面平行的反相强环向力矩 TD2, 如图 5(h) TD2 的概念描述图所示. 综合来看, FR2 处的杂化电场分布整体与 FR1 反相, 但对称性未发生改变, 故该杂化共振仅能由正入射的  $e_x$  激发, 后与外部辐

射连续体干涉形成电环偶响应 FR4. 由图 5(c) 与图 5(f) 可知, FR5 处的局域电场已经大部分集中在小孔内部,  $e_x$  的  $E_x$  分量导致上下两对小孔在其左右两侧产生反相极化异号电荷, 将该电荷形成的位移电流矢量沿  $x$  方向的分量相互抵消后发现诱导产生了 2 个沿  $y$  方向反相平行的电偶极子, 光场在此处散射并进入硅体内部呈现  $xoy$  截面的环形电场分布, 激发沿  $z$  方向的磁偶极共振 MD2, 如图 5(i)MD2 的概念描述图所示. 其电场矢量分布属于  $B_2$  模式, 该模式主导的杂化电场整体关于  $x$  轴对称, 故仅能由正入射的  $e_x$  激发, 后与外部辐射连续体干涉形成 FR5. 图 5(j)—(l) 笛卡尔多极矩展开结果表明, 电环偶极矩对 FR3 与 FR4 共振模式的远场辐射贡献最大, 磁偶极矩对 FR5 共振模式的远场辐射贡献最大.

为证明非简并模式 Fano 共振只出现在  $e_x$  正入射条件下, 将晶格扰动超构表面在  $e_y$  正入射条件下的反射光谱及近场分布与前文进行对比. 如图 3(a) 中带方块的黑色曲线所示: FR3, FR4 与 FR5 在反射光谱中完全消失, 同时反射谱线中又出现 2 个分别与 FR1, FR2 基本重合的 Fano 共振, 记为共振 1 与共振 2. 根据图 6(a) 两共振处的归一化电磁场

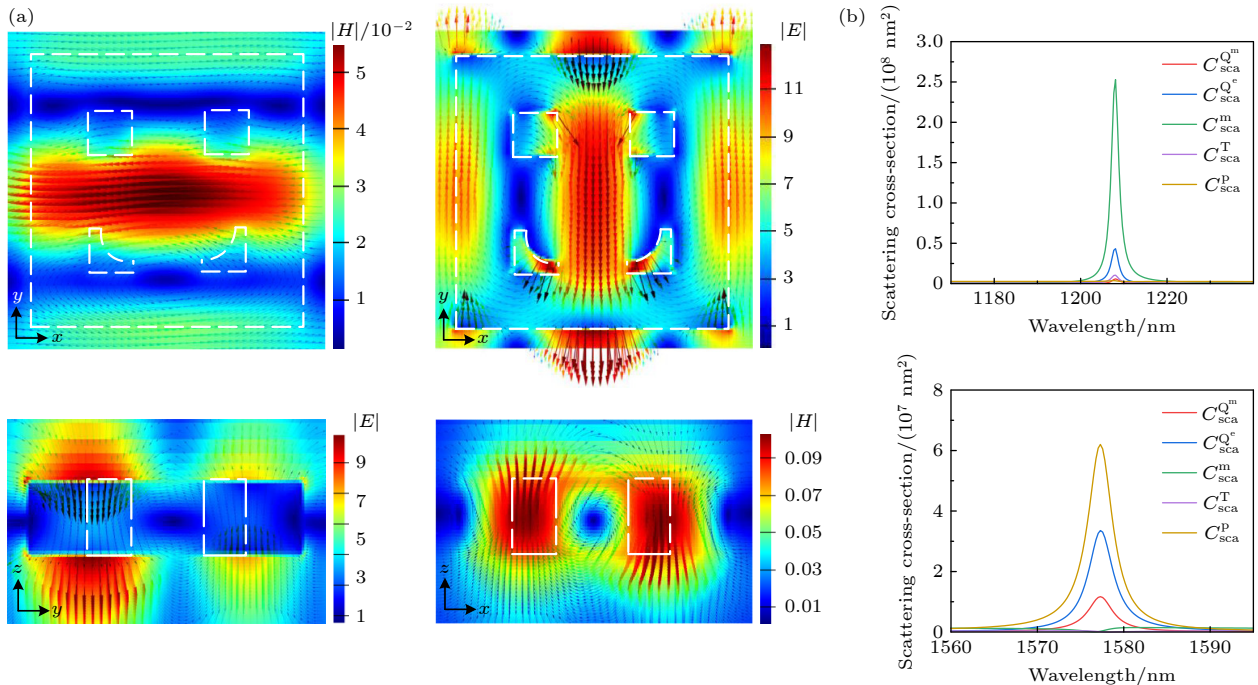


图 6 晶格扰动超构表面在  $e_y$  正入射条件下的近场分布 (a) 共振 1(共振 2) 在  $xoy$  截面的归一化磁场 (电场) 分布  $|H|$  ( $|E|$ ) 及  $yoz(xoz)$  截面的归一化电场 (磁场) 分布  $|E|$  ( $|H|$ ); (b) 共振 1 与共振 2 处的笛卡尔多极分解

Fig. 6. Near-field distribution of lattice-perturbed metasurface under  $e_y$ : (a) Normalized magnetic(electric) field distribution in  $|H|$  ( $|E|$ ) in  $xoy$  section and normalized electric(magnetic) field distribution  $|E|$  ( $|H|$ ) in  $yoz(xoz)$  section of resonance 1(resonance 2); (b) cartesian multipole decomposition of resonance 1 and resonance 2.

及其矢量分布可知, 两共振仍分别为磁偶极模式与电偶极模式, 其与图 3 中 MD1 与 ED 的区别在于  $xoy$  截面内磁偶极矩与电偶极矩的方向发生了  $90^\circ$  旋转, 故共振波长处的电场矢量分布的对称性也发生了改变, 改变后其共振模式分别对应  $E^{(2)}$  与  $E^{(1)}$  模式, 而双重简并模式本身互为  $90^\circ$  旋转重合版本, 因此同一 Fano 共振处的共振模式在本质上未发生改变, 图 6(b) 笛卡尔多极矩展开结果表明, 磁偶极矩与电偶极矩分别对共振模式 1 与共振模式 2 的远场辐射贡献最大. 综上所述, 双重简并模式共振可以同时出现  $e_x$  与  $e_y$  正入射条件下, 且两情况下各共振处对应的共振模式相同, 而非简并模式共振只出现在对称类型与之相同的单一极化条件下, 这验证了文献 [27] 中指出的非简并模式的非简并性质将导致当结构的对称性被破坏时, 这些模式只能耦合到正入射波的单个极化方向, 同时也证明了  $e_x$  正入射下非简并模式 Fano 共振的激发主要是因为晶格对称性破缺.

## 4 结 论

基于全介质材料的电磁特性, 提出了一种晶格扰动介质纳米孔阵列超构表面. 通过打破方形晶格原胞的镜面对称性, 非简并模式发生退化, 退化后的简并模式分量与外辐射波的耦合导致原本不耦合的非简并模式被激发出来, 使得该结构在所选近红外波段内实现了五重 Fano 共振, 包括双重简并模式共振与外部辐射连续体干涉形成的磁偶响应 FR1 与电偶响应 FR2, 非简并模式主导的杂化共振与外部辐射连续体干涉形成的电环偶响应 FR3, FR4 及磁偶响应 FR5. 应用 Fano 模型定性分析了五重 Fano 共振的强弱, 结果表明, 非简并模式 Fano 共振的  $Q$  值远高于简并模式 Fano 共振. 另外探究了正入射平面波的  $xy$  极化方向对五重 Fano 共振的影响, 发现简并模式 Fano 共振偏振无关, 非简并模式 Fano 共振偏振依赖. 本文的研究结果将对利用方形晶格超构表面操控多重 Fano 共振的激发

及演变具有一定的理论指导意义.

## 参考文献

- [1] Lu L D, Zhu L Q, Zeng Z M, Cui Y P, Zhang D L, Yuan P 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 034204 (in Chinese) [鹿利单, 祝连庆, 曾周末, 崔一平, 张东亮, 袁配 2021 物理学报 **70** 034204]
- [2] Tribelsky M I, Miroshnichenko A E 2016 *Phys. Rev. A* **93** 053837
- [3] Kong X H, Xiao G B 2016 *J. Opt. Soc. Am. A* **33** 707
- [4] Poddubny A N, Rybin M V, Limonov M F, Kivshar Y S 2012 *Nat. Commun.* **3** 914
- [5] Rybin M V, Mingaleev S F, Limonov M F, Kivshar Y S 2016 *Sci. Rep.* **6** 20599
- [6] Rybin M V, Khanikaev A B, Inoue M, Samusev K B, Steel M J, Yushin G, Limonov M F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 023901
- [7] Sharac, N, Sharma H, Veysi M, Sanderson R N, Khine M, Capolino F, Ragan R 2016 *Nanotechnology* **27** 105302
- [8] Guo M, Huang L R, Liu W B, Ding J F 2021 *Opt. Mater.* **112** 110802
- [9] Wang W D, Zheng L, Wang Y L 2020 *Opt. Commun.* **454** 124516
- [10] Kong Y, Cao J J, Qian W C, Liu C, Wang S Y 2018 *IEEE Photon. J.* **10** 1943
- [11] Zhang Y H, Liang Z Z, Meng D J, Qin Z, Fan Y D, Shi X Y, Smith D R, Hou E Z 2021 *Results Phys.* **24** 104129
- [12] Brandl D W, Mirin N A, Nordlander P 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 12302
- [13] Hopkins B, Poddubny A N, Miroshnichenko A E, Kivshar Y S 2013 *Phys. Rev. A (Coll Park)* **88** 053819
- [14] Forestiere C, Negro L D, Miano G 2013 *Phys. Rev. B* **88** 155411
- [15] Gomez D E, Vernon K C, Davis T J 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075414
- [16] Johnson P B, Christy R W 1972 *Phys. Rev. B* **6** 4370
- [17] Chen Q, Wang D, Gao F 2021 *Opt. Lett.* **46** 1209
- [18] Ito T, Sakoda K 2001 *Phys. Rev. B* **64** 045117
- [19] Crozier K B, Lousse V, Kilic O, Kim S, Fan S, Solgaard O 2006 *Phys. Rev. B* **73** 115126
- [20] Cui C C 2020 *Ph. D. Dissertation* (Wuhan: Huazhong University of Science and Technology) (in Chinese) [崔成聪 2020 博士学位论文 (武汉: 华中科技大学)]
- [21] Kilic O, Dignonnet M, Kino G, Solgaard O 2008 *Opt. Express* **16** 13090
- [22] Nicolaou C, Lau W T, Gad R, Akhavan H, Schilling R, Levi O 2013 *Opt. Express* **21** 31698
- [23] Fan S H 2002 *Phys. Rev. B* **65** 235112
- [24] Liu S D, Yang Z, Liu R P, Li X Y 2012 *ACS Nano* **6** 6260
- [25] Rajratan B, Atwood L J 2019 *Opt. Express* **27** 282
- [26] Lee J, Zhen B, Chua S L, Qiu W J, Joannopoulos J D, Soljacic M, Shapira O 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 067401
- [27] Staude I, Schilling J 2017 *Nat. Photonics* **11** 274

# Group theory based formation mechanism and evolution of multiple Fano resonances in dielectric nanohole arrays with lattice-perturbed\*

Chen Ying<sup>†</sup> Li Mei-Jie Zhao Meng Wang Jian-Kun

(Hebei Province Key Laboratory of Test/Measurement Technology and Instrument, School of Electrical Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China)

( Received 23 December 2021; revised manuscript received 27 January 2022 )

## Abstract

Based on the electromagnetic properties of all-dielectric optical metamaterial, an all-dielectric metasurface of lattice-perturbed nanohole array is proposed to excite a multiple Fano resonance in the near-infrared region. Combined with the group theory, the formation mechanism and evolution law of multiple Fano resonances in this structure when its unit cell is a square lattice configuration and the square lattice symmetry is broken are explored in depth. The results show that double degenerate mode directly excited by the normal incident plane wave is coupled to vertical free-space radiation continuum to form double Fano resonance when unit cell is symmetrical, while the uncoupled non-degenerate modes excited by the normal incident plane wave is coupled to vertical free-space radiation continuum to form triple Fano resonance with higher  $Q$  factor when the symmetry is broken. Numerical simulation is used to explore the influences of  $x$ -polarized and  $y$ -polarized plane wave on the above Fano resonances, and the results show that the Fano resonance of double degenerate resonance is polarization independent, while the non-degenerate resonance is polarization dependent. The findings in this work can provide an effective theoretical reference for designing other square lattice metasurface to realize the excitation and evolution of multiple Fano resonances.

**Keywords:** all-dielectric metamaterial, group theory, multiple Fano resonance, lattice perturbation

**PACS:** 78.67.Pt, 02.20.-a, 42.60.Da

**DOI:** 10.7498/aps.71.20212375

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61201112), the Key Research and Development Project of Hebei Province, China (Grant Nos. 19273901D, 20373301D), the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. F2020203066), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2018M630279), the Post-Doctoral Research Projects in Hebei Province, China (Grant No. D2018003028), the Scientific Research Foundation of the Higher Education Institutions of Hebei Province, China (Grant No. ZD2018243).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [Chenyong@ysu.edu.cn](mailto:Chenyong@ysu.edu.cn)