

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

# 基于准正则模式的全电介质超材料 宽带反射器机理\*

蒋乐昕# 谢振龙# 郭泽虹 丘伊宁 陈溢杭†

(华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广东省高等学校  
物质结构与相互作用基础研究卓越中心, 广州 510006)

(2023 年 6 月 1 日收到; 2023 年 7 月 15 日收到修改稿)

全电介质超材料宽带反射器具备损耗低、反射效率高、结构紧凑等优点, 深入理解其反射带的形成机理对超材料结构和性能的优化、以及进一步设计新型光子器件均具有重要意义. 本文利用离散的硅纳米柱阵列和硅膜底层连接的硅纳米柱阵列分别构造了两个全电介质超材料宽带反射器, 通过求解其准正则模式, 结合散射矩阵理论拟合出了超材料的反射谱. 发现零频准正则模式对拟合准确性有重要影响, 并提出了用色散关系分析法准确求解零频准正则模式. 进一步用高  $Q$  值和低  $Q$  值准正则模式分别拟合出共振反射谱和背景反射谱. 结果表明, 超材料反射器的宽带反射源于低  $Q$  值的准正则模式造成的背景反射. 本文提出的研究方法可进一步拓展, 用于分析 Mie 共振、准连续域束缚态等共振现象, 为超材料光谱特性的解释提供新的思路.

**关键词:** 全电介质超材料, 宽带反射, 准正则模式, 散射矩阵**PACS:** 78.20.Bh, 42.79.Fm, 77.84.-s**DOI:** 10.7498/aps.72.20230915

## 1 引言

超材料宽带反射器在许多领域有重要的应用, 包括激光反射镜、热光伏器件、表面增强拉曼散射等<sup>[1-3]</sup>. 研究人员致力于设计反射率高、工作带宽大、结构紧凑的近红外反射器, 以提高器件的工作效率. 基于表面等离子激元效应的金属结构可实现宽带的电磁波反射, 然而金属结构在可见及近红外波段的欧姆损耗较大, 反射效率较低<sup>[4,5]</sup>, 难以满足实际应用的需求. 尽管有研究提出用金属和电介质的复合谐振结构可降低损耗<sup>[6]</sup>, 但仍无法实现宽带近完美反射. 由高、低折射率电介质薄膜交替堆叠形成的布拉格反射器, 具有损耗低、反射带较宽的优点, 然而工作在可见及近红外波段的布拉格反射器需要

层数较多 (通常是几十层) 的薄膜堆叠才能获得理想的反射性能<sup>[7,8]</sup>, 其结构厚度远超工作波长, 在实际应用中受到了限制. 由高折射率电介质微结构组成的超材料可在亚波长的厚度实现宽带近完美反射, 因此受到了广泛的关注<sup>[9-11]</sup>. 以往研究大多采用导模共振 (guide mode resonance, GMR)<sup>[9-14]</sup> 来解释这类反射器的工作机理. 为方便理解 GMR, 假设超材料反射器为一维光栅结构, 如图 1(a) 所示, 它沿  $x$  方向呈周期性, 沿  $y$  方向无限长, 由高折射率 ( $n_H$ ) 电介质单元在基底 (折射率为  $n_S$ ) 上排列构成, 厚度为  $d$ , 背景介质折射率为  $n_L$ , I, R 和 T 分别表示入射光、反射光和透射光, 在正入射情况下, 反射率随角频率  $\omega$  的变化如图 1(b) 所示, 从图中可看出存在共振线型, GMR 理论对此的解释是: 入射光能激发出光栅中的泄露模式 (leaky

\* 广东省自然科学基金 (批准号: 2017A030313036) 和广州市科技计划 (批准号: 2019050001) 资助的课题.

# 同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: yhchen@scnu.edu.cn

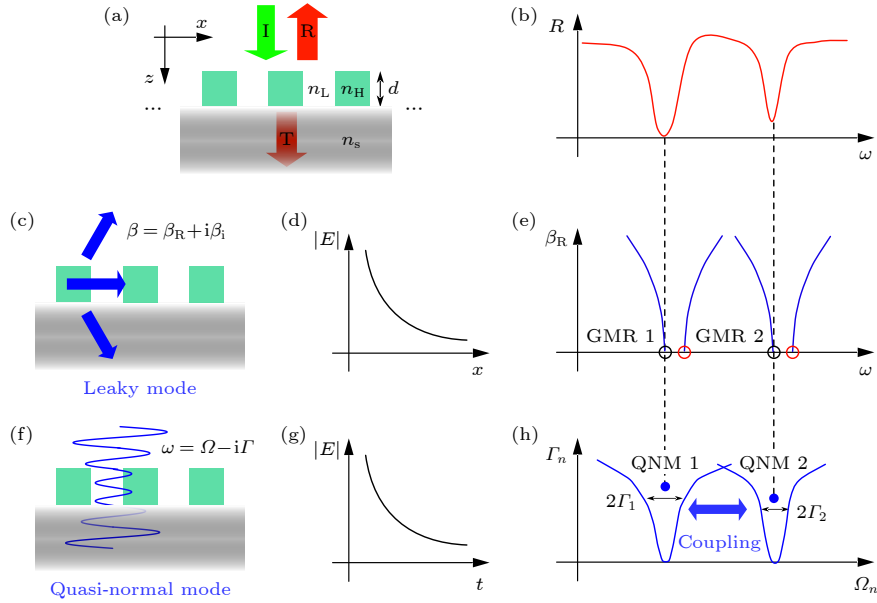


图 1 全电介质超材料反射器的结构示意图 (a) 与其反射谱 (b), 及两种物理机制描述: 导模共振 (c)—(e) 与准正则模式 (f)—(h). (a) 光栅结构超材料反射器示意图; (b) 正入射时的反射谱; (c) 泄露模式的示意图, 模式沿  $x$  轴传播, 同时向光栅上下两侧泄露; (d) 泄露模式随传播距离指数衰减; (e) 泄露模式的色散关系, 其中 GMR1 和 GMR2 分别对应图 (b) 中两处反射谷的共振; (f) 准正则模式的示意图, 模式随  $|z|$  指数发散, 代表能量泄露到外界; (g) 准正则模式随时间指数衰减; (h) 准正则模式的本征频率及它们单独形成的反射谱线型, 由于模式之间的耦合最终会形成图 (b) 所示的反射谱

Fig. 1. Schematic diagram (a) and reflection spectrum (b) of the all-dielectric metamaterial reflector, and two physical mechanisms are described: guided mode resonance (c)—(e) and quasi-normal mode (f)—(h). (a) The schematic diagram of the metamaterial reflector with grating structure; (b) the reflection spectrum at normal incidence; (c) the schematic diagram of the leaky mode, propagating along the  $x$ -axis and simultaneously leaking to the upper and lower sides of the grating; (d) the leaky mode decays exponentially with the propagation distance; (e) the dispersion relation of the leaky mode, where GMR1 and GMR2 correspond to the resonances of the two reflection dips in Figure (b), respectively; (f) the schematic diagram of the quasi-normal mode, the diverge of the mode with increasing  $|z|$  represents the leakage of energy; (g) the quasi-normal mode decays exponentially with time; (h) the eigenfrequencies of the quasi-normal modes and the reflection spectra formed by them alone will eventually form the reflection spectra shown in Fig. (b) due to the coupling between the modes.

modes)<sup>[9]</sup>, 从而产生窄带或宽带共振线型, 这种模式是在光栅内沿  $x$  方向传播的布洛赫模, 由于该模式能与外界耦合, 其能量会在传播过程中向光栅上下两侧泄露, 如图 1(c) 所示, 其传播常数  $\beta$  为复数  $\beta_R + i\beta_i$ , 虚部  $\beta_i$  代表模式会随传播距离指数衰减, 如图 1(d) 所示. 该模式的色散关系  $\beta_R - \omega$  如图 1(e) 所示, 在正入射情况下 ( $\beta_R = 0$ ), 当满足位相匹配条件 (如对应图 1(c) 中 GMR1 和 GMR2) 时能激发出泄露模, 并在反射谱相应的频率位置附近形成共振线型, 如图 1(b) 所示, 此外, 图 1(e) 中两处红色标记处同样满足位相匹配, 但相应模式的对称性与自由空间中模式不匹配, 导致这类模式在正入射下无法被激发<sup>[9]</sup>. GMR 理论能较好解释弱对比结构 ( $n_H$  和  $n_L$  数值接近) 的共振现象, 但无法准确描述强对比结构 ( $n_H$  和  $n_L$  差异较大) 中宽带共振现象的物理来源<sup>[11]</sup>.

最近, 准正则模式 (quasi-normal modes, QNMs)

的概念被拓展到了光子学领域<sup>[15–17]</sup>, 它是指满足无源麦克斯韦方程组且本征频率为复数  $\Omega - i\Gamma$  的本征态, 这些模式随时间呈指数衰减, 如图 1(g) 所示, 虚部  $\Gamma$  代表衰减速率, 且由于 QNMs 在自由空间中的辐射具有  $e^{\pm i\omega z/c}$  ( $c$  为光速) 的形式 ( $\pm$  代表沿  $z$  轴正方向或负方向辐射), 其振幅随着远场传播距离  $|z|$  增大而指数发散, 同时也意味着模式的能量会随时间推移而泄露到外界, 如图 1(f) 所示. QNMs 与散射过程密切相关, 结合时域耦合模方程 (temporal coupled-mode theory, TCMT)<sup>[18–20]</sup> 能拟合出散射矩阵及相应的反射谱或透射谱. 图 1(h) 展示了两个 QNMs 的复本征频率及它们分别独立形成的反射谱线型, 在仅考虑单个 QNM 的情况下, 其谱线为洛伦兹线型, 共振频率为  $\Omega_n$  ( $n = \dots, -1, 0, 1, \dots$ ), 半高宽为  $2\Gamma_n$ . 但 TCMT 会考虑到 QNMs 之间的耦合作用, 从而拟合出如图 1(b) 中的谱线, 其共振频率相比于  $\Omega_n$  略有偏移, 共振带

宽接近  $2\Gamma_n$ . 相比 GMR 理论, QNMs 的优势在于不仅能预测共振频率和共振带宽, 且能进一步拟合出反射谱. 文献 [18–23] 报道的拟合结果均与数值仿真结果吻合, 但它们讨论的范围仅限于单个或少量的 QNMs, 一般只用于解释窄带共振现象. 最近, Alpegiani 等 [24] 对基于 TCMT 的散射矩阵理论 (scattering matrix theory, SMT) 进行拓展, 使其能够同时考虑多个 QNMs, 揭示出复杂散射是由若干 QNMs 之间相互耦合形成的. 但 Benzaouia 等 [25] 指出以上 SMT 的拟合结果违背了能量守恒 (即在无源结构中出现了反射率大于 1 的情况), 并对其进行修正, 进一步应用于微波段超表面结构的优化设计 [26]. 然而当前仍缺乏运用 QNMs 对宽带共振现象的分析研究.

本文运用 QNMs 对超材料宽带反射的形成机理进行研究. 首先利用硅纳米柱阵列构造了超材料反射器, 在近红外波段实现了宽带近完美反射. 接着, 运用基于 QNMs 的 SMT 对结构的反射谱进行了拟合, 发现零频 QNM (频率实部为 0, 虚部不为 0) 对反射谱拟合的准确度影响较大, 进一步用色散关系分析法准确求解零频 QNM. 接着, 利用低  $Q$  值和高  $Q$  值的 QNMs 分别拟合出背景反射谱和共振反射谱, 揭示了宽带反射主要源于低  $Q$  值 QNMs 提供的背景反射. 最后讨论了引入硅薄膜底层对超材料反射性能的影响.

## 2 基于准正则模式的散射矩阵理论

### 2.1 准正则模式

QNMs 与正则模式 (normal modes, NMs) 类似, 它们都是所研究结构在外界无激励情况下支持的本征模式  $[\mathbf{E}_n(\mathbf{r}) \mathbf{H}_n(\mathbf{r})]^T e^{-i\omega_n t}$ , 满足无源麦克斯韦本征方程 [15]:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} i(\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega_n))^{-1} \nabla \times \\ -i\mu_0^{-1} \nabla \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_n(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}_n(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \\ & = \omega_n \begin{bmatrix} \mathbf{E}_n(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}_n(\mathbf{r}) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (1)$$

当所研究结构具有损耗或处于开放的空间时, 方程 (1) 描述的将是一个非厄密系统, 其本征频率用复数  $\omega_n = \Omega_n - i\Gamma_n$  表示, 虚部  $\Gamma_n$  是模式的衰减速率,  $Q_n = \Omega_n/2\Gamma_n$  是模式的品质因子, 根据  $\Gamma_n$  是否为零, 本征模式可划分为 NMs 和 QNMs.  $\Gamma_n = 0$

对应 NMs, 其振幅不随时间衰减, 共振线宽为 0, 在光谱中无法形成共振线型, 但实际结构均有损耗且处于开放的空间中, 因此 NMs 仅存在于理想情况. 在无损结构中的波导导模和连续域束缚态均属于 NMs. 而  $\Gamma_n \neq 0$  对应 QNMs, 其振幅随时间指数衰减, 具有共振线宽, 能在光谱上形成相应的共振线型. 法布里-珀罗共振模式、泄露模式、准连续域束缚态和 Mie 共振模式等均属于 QNMs. 通常采用有限元 (finite element method, FEM) 法求解 QNMs, 通过引入完美匹配层 (perfect matching layers, PMLs) 来截断仿真区域并将空间离散化, 方程 (1) 将由微分方程变为有限维矩阵的特征方程, 通过数值方法即可对 QNMs 进行求解.

### 2.2 散射矩阵理论

根据 Benzaouia 等 [26] 所提出的 SMT, 若只考虑包含两个端口的线性光学系统, 则分别在两端口入射光振幅  $\mathbf{s}_+ = [s_{+1} \ s_{+2}]^T$  和散射光振幅  $\mathbf{s}_- = [s_{-1} \ s_{-2}]^T$  满足线性变换关系  $\mathbf{s}_- = \mathbf{S}(\omega) \mathbf{s}_+$ , 其中  $\mathbf{S}(\omega)$  为与入射光角频率相关的散射矩阵. 假设光在端口 1 入射, 即  $\mathbf{s}_+ = [1 \ 0]^T$ , 则反射率和透射率分别为  $|S_{11}|^2$  和  $|S_{12}|^2$ .  $\mathbf{S}$  可做进一步的矩阵分解:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}'\mathbf{C}, \quad (2)$$

其中  $\mathbf{S}'$  和  $\mathbf{C}$  分别是由较高和较低  $Q$  值的 QNMs 所构成的共振散射矩阵和背景散射矩阵, 在光谱中分别产生较窄或较宽的共振线型, 它们的表达式分别为

$$\mathbf{S}' = \bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n^H, \sigma_n^H\}}(\omega), \quad (3)$$

$$\mathbf{C} = -\bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n^L, \sigma_n^L\}}(\omega), \quad (4)$$

$$\bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n, \sigma_n\}}(\omega) = \mathbf{I} + \mathbf{D}(i\omega\mathbf{I} - i\Omega)^{-1}\mathbf{K}^T, \quad (5)$$

其中,  $\omega_n$  是 QNMs 的复本征频率,  $\sigma_n$  是 QNMs 在两端口处的远场复振幅比, 即  $E_{2n}/E_{1n}$ , 上标 H 或 L 代表 QNMs 是高  $Q$  值或低  $Q$  值 (若将所有 QNMs 都界定为高  $Q$  或低  $Q$ , 则  $\mathbf{S} = -\bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n, \sigma_n\}}(\omega)$ , 相当于不对  $\mathbf{S}$  进行分解, 此时拟合最准确 [26], 但无法提取出背景反射谱和共振反射谱),  $\mathbf{I}$  为单位矩阵,  $\Omega$  是由 QNMs 的复频率  $\{\omega_n\}$  构成的对角矩阵, 对无损系统有  $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \cdots & 1 & \cdots \\ \cdots & \sigma_n & \cdots \end{bmatrix}$ ,  $\mathbf{K}^T = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{D}^\dagger$ ,  $\mathbf{M}$  的矩阵元为  $M_{nm} = \frac{1 + \sigma_m \sigma_n^*}{i(\omega_m - \omega_n^*)}$ . 需要注意的是, 若存在一组解为  $\{\omega_n, \sigma_n\}$ , 那么

$\{-\omega_n^*, \sigma_n^*\}$  也是一组有效的解, 这在拟合散射矩阵的过程中是需要的<sup>[25]</sup>.

### 3 超材料宽带反射器的理论解释

#### 3.1 基于硅纳米柱阵列的超材料反射器

如图 2(a) 所示, 超材料宽带反射器由硅柱阵列构成, 晶格常数  $\Lambda = 0.65 \mu\text{m}$ , 硅柱直径为  $D$ , 高度为  $H$ . 硅折射率  $n_{\text{H}} = 3.464$ , 背景介质折射率  $n_{\text{L}} = 1$ . 采用有限时域差分法 (finite-difference time-domain, FDTD) 对硅柱的高度、直径做多次扫描得到反射谱的变化规律, 以优化超材料的结构参数, 最终确定圆柱的参数为  $H = 0.41 \mu\text{m}$ ,  $D = 0.48 \mu\text{m}$ . 数值仿真中光源设置为平面波, 沿  $z$  轴入射, 电场偏振方向沿  $x$  轴. 图 2(b) 显示了当硅柱直

径固定为  $D = 0.48 \mu\text{m}$  时, 反射谱随硅柱高度的变化规律. 定义近完美反射带需满足反射率  $R > 0.95$ , 从图 2(b) 可见,  $H = 0.41 \mu\text{m}$  对应的近完美反射带宽达到极大. 随后固定  $H = 0.41 \mu\text{m}$ , 数值仿真了超材料的反射谱随硅柱直径的变化关系, 如图 2(c) 所示. 从图中可见, 当  $D = 0.48 \mu\text{m}$  时, 近完美反射带宽达到极大. 结构参数优化后的超材料反射谱如图 2(d) 所示 (对应图 2(b), (c) 中的白色虚线), 阴影区域表示近完美反射波段 ( $1.35\text{--}1.59 \mu\text{m}$ ).

接着对优化后超材料结构的 QNMs 的  $\{\omega_n, \sigma_n\}$  进行求解. 因 QNMs 具有一定带宽, 处在拟合频段外的 QNMs 也会影响拟合频段内的反射谱, 在拟合过程中需考虑该影响以确保拟合结果的准确性<sup>[24]</sup>. 这里设置拟合频率  $\omega$  为  $0\text{--}1.8 \times 10^{15}$  Hz, 覆盖了图 2(d) 中近完美反射带频段, 同时计算了频率在

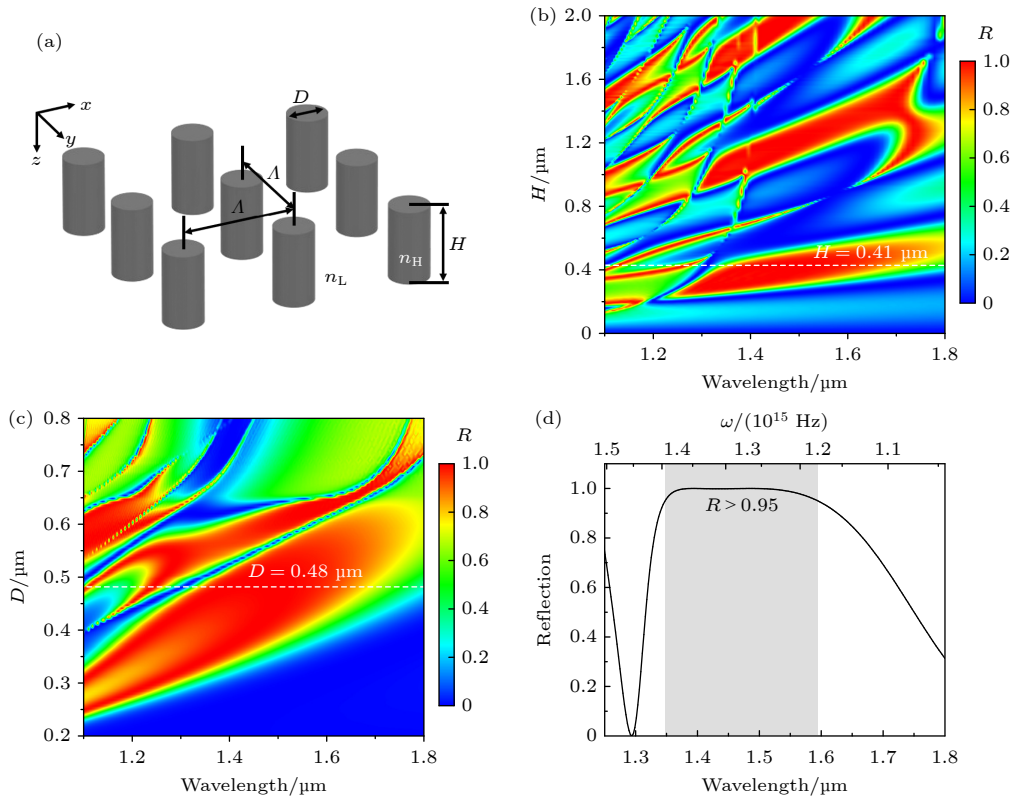


图 2 (a) 离散硅纳米柱阵列构造的超材料反射器示意图; (b) 固定硅柱直径  $D = 0.48 \mu\text{m}$ , 对应的反射谱随硅柱高度  $H$  的变化, 当  $H = 0.41 \mu\text{m}$  时, 近完美反射带宽达到极大; (c) 固定硅柱高度  $H = 0.41 \mu\text{m}$ , 对应的反射谱随硅柱直径  $D$  的变化, 当  $D = 0.48 \mu\text{m}$  时, 近完美反射带宽达到极大; (d) 优化后结构 ( $H = 0.41 \mu\text{m}$ ,  $D = 0.48 \mu\text{m}$ ) 的反射谱 (对应图 (b), (c) 的白色虚线), 阴影部分为近完美反射波段 ( $1.35\text{--}1.59 \mu\text{m}$ )

Fig. 2. (a) Schematic of the metamaterial reflector composed of discrete silicon (Si) cylinders with the lattice constant  $\Lambda = 0.65 \mu\text{m}$ ; (b) simulated reflection spectrum as a function of the cylinder height  $H$  when the cylinder diameter is fixed as  $D = 0.48 \mu\text{m}$ , a widest near-perfect reflection band is observed when  $H = 0.41 \mu\text{m}$ ; (c) simulated reflection spectrum as a function of the cylinder diameter  $D$  when the cylinder height is fixed as  $H = 0.41 \mu\text{m}$ , it can be seen that the near-perfect reflection band reaches a maximum bandwidth when  $D = 0.48 \mu\text{m}$ ; (d) the reflection spectrum of the optimized structure with  $H = 0.41 \mu\text{m}$  and  $D = 0.48 \mu\text{m}$ , corresponding to the white dashed lines in Figs. (b), (c), and the shadow region corresponds to the near-perfect reflection band where  $R > 0.95$ .

0— $2.3 \times 10^{15}$  Hz 内的 QNMs (见附录 A). 值得注意的是, 在 FEM 求解过程中使用了离散化的网格, 并采用 PMLs 对仿真区域进行截断, 这使得零频 QNM 难以求解<sup>[24,25]</sup>, 然而零频 QNM 具有较大的线宽, 对散射谱拟合的影响较大, 因此需对其精确求解. 在低频情况下, 可将单层超材料等效为均匀薄膜, 根据单层薄膜的本征方程可得到零频解<sup>[25]</sup>:

$$\left\{ \omega_0 = -i \frac{2c}{n_{\text{eff}} d} \operatorname{atanh} \left( \frac{1}{n_{\text{eff}}} \right), \sigma_0 = 1 \right\}, \quad (6)$$

其中  $n_{\text{eff}}$  为有效折射率,  $d$  为薄膜厚度. 文献<sup>[25]</sup>通过平均折射率法近似得到结构的有效折射率, 进而获得零频 QNM 解, 并采用 FEM 对求解结果作高精度优化, 然而该方法求解时间长且结果误差较大.

为准确得到超材料的有效折射率, 使用严格耦合波分析 (rigorous coupled wave analysis, RCWA) 计算了参数优化后的超材料反射器的色散关系, 如图 3(a) 所示 ( $G$  为倒格矢  $2\pi/\Lambda$ ), 当  $k_0$  趋于 0 时  $n_{\text{eff}} = k/k_0 = 1.58$ . 将硅柱层厚度  $d = 0.41 \mu\text{m}$  和  $n_{\text{eff}}$  代入 (6) 式即可求得  $\omega_0 = -i \cdot 6.91 \times 10^{14}$  Hz. 而平均折射率法的计算结果为  $n'_{\text{eff}} = 2.39$ , 对应  $\omega'_0 = -i \cdot 2.54 \times 10^{14}$  Hz. 为了对比两种方法的计算误差, 将色散关系分析法计算得到的零频 QNM 以及所有非零频 QNMs 代入 (2) 式—(5) 式, 得到拟合的反射谱  $|S_{11}|^2$  (这里不对  $S$  进行分解以确保拟合准确), 如图 3(b) 中绿色虚线所示, 该拟合结果与 FDTD 的仿真结果 (黑色实线) 完美吻合. 而采用平均折射率法得到的拟合反射谱如红色虚线所示, 相比 FDTD 仿真结果的误差较大. 若忽略零频 QNM, 所得到的拟合反射谱如蓝色虚线所示, 与 FDTD 仿真结果同样存在较大误差.

为分析硅柱阵列超材料的宽带反射形成机制, 将  $S$  分解为  $S'C$  做进一步探究. 图 4(a) 展示了 QNMs 的复本征频率, 其数字编号代表相应的 QNMs 序号  $n$ . 图 4(b) 中黑色实线为超材料反射谱的数值仿真结果, 可以初步判定, 在  $1.45 \times 10^{15}$  Hz 和  $1.73 \times 10^{15}$  Hz 附近存在明显的窄带共振, 分别对应图 4(a) 中的  $n = 2$  和  $n = 4$  的 QNMs 位置, 如图中双向箭头所示, 这些模式的半高宽  $2\Gamma_n$  较小, 可形成清晰的窄带共振线型, 因此将它们界定为高  $Q$  值 QNMs. 同理, 在拟合频段外 ( $1.8 \times 10^{15}$ — $2.3 \times 10^{15}$  Hz), 除了  $n = 7$  的 QNM, 其余均为高  $Q$  值 QNMs. 因此, 将  $n = 0, 1, 3, 5, 7$  界定为低  $Q$  值 QNMs, 其余为

高  $Q$  值 QNMs, 将它们代入 (3) 式—(5) 式可得到背景反射率  $|C_{11}|^2$  和共振反射率  $|S'_{11}|^2$ , 如图 4(b) 中绿色、红色虚线所示, 阴影部分表示近完美反射频段. 当入射光频率为 0— $1.3 \times 10^{15}$  Hz 时, 由于远离高  $Q$  值 QNMs 的共振频率, 即  $|\omega - \Omega_n^{\text{H}}| \gg 2\Gamma_n^{\text{H}}$ , 根据 (3) 式和 (5) 式可得  $S' \approx I$ , 因此共振反射率  $|S'_{11}|^2 \approx 1$ , 即不存在变化剧烈的共振线型, 高  $Q$  值 QNMs 对散射过程的贡献可忽略, 此时  $S \approx C$ , 总反射近似等于背景反射. 当入射光频率接近高  $Q$  值 QNMs 的频率时, 会使得总反射形成窄带线型, 而低  $Q$  值 QNMs 形成的背景反射随频率变化平缓, 是造成宽带反射的主要原因.

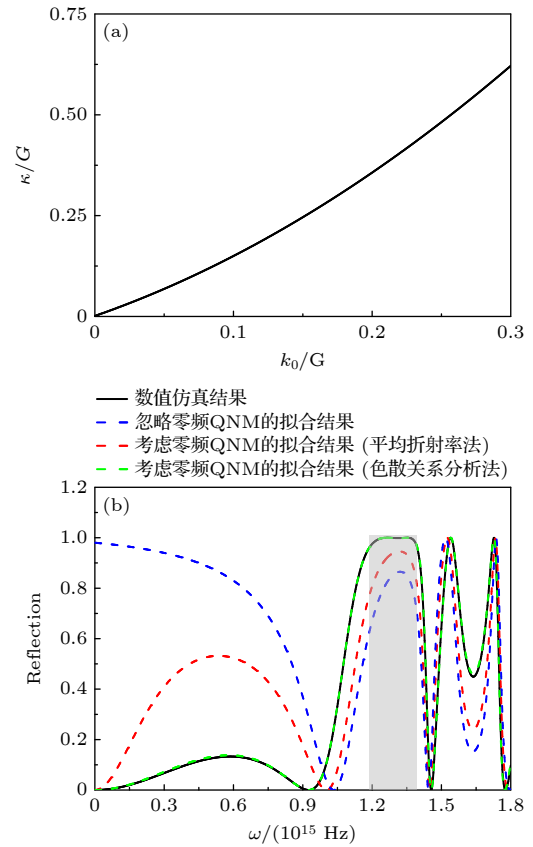


图 3 (a) 结构参数优化后的超材料反射器的色散关系, 其中  $k$  为  $z$  方向的波矢分量,  $k_0 = \omega/c$ ,  $G = 2\pi/\Lambda$ ; (b) 数值仿真得到的反射谱, 忽略零频 QNM 拟合得到的反射谱, 分别用色散关系分析法和平均折射率法得到的零频 QNM 代入 SMT 进行拟合所得到的反射谱

Fig. 3. (a) Dispersion relationship of the metamaterial reflector with optimized structural parameters, where  $k$  is the wave vector component along  $z$  direction,  $k_0 = \omega/c$ ,  $G = 2\pi/\Lambda$ ; (b) the reflection spectrum obtained by FDTD simulation, the fitting spectrum when the zero-frequency QNM is ignored, and the fitting spectrum when the zero-frequency QNM is obtained by dispersion relation analysis method and average refractive index method, respectively.

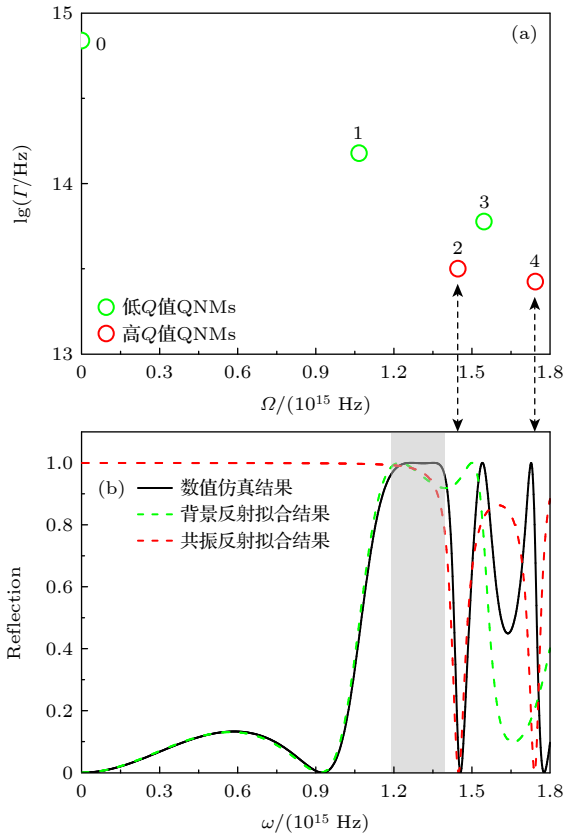


图 4 (a) 硅柱阵列超材料反射器的 QNMs 复本征频率; (b) 分别用低  $Q$ 、高  $Q$  值 QNMs 进行拟合得到的背景反射谱和共振反射谱, 以及数值仿真得到的反射谱

Fig. 4. (a) Complex frequencies of the QNMs for the meta-material reflector composed of Si cylinder array; (b) the background reflection spectra and resonance reflection spectra fitted by low- $Q$  and high- $Q$  QNMs, respectively, and the reflection spectrum obtained by FDTD simulation.

为分析低  $Q$  值 QNMs 形成背景反射的过程, 首先根据 SMT 拟合出了部分低  $Q$  值 QNM 独立形成的反射谱, 如图 5(a) 所示. 图中红色、绿色和蓝色实线分别代表  $n = 0$ ,  $n = 1$  和  $n = 3$  的 QNM 拟合结果, 随后考虑低  $Q$  值 QNMs 之间的耦合作用, 分别将  $n = 0, 1$ ;  $n = 0, 1, 3$  和  $n = 0, 1, 3, 5$  的 QNMs 代入 SMT 进行拟合, 得到如图 5(b) 中绿色、蓝色和紫色实线所示的反射谱, 对比图 5(a) 和图 5(b) 可见, QNMs 在发生耦合之后所形成谱线保留了单个 QNM 的谱线特征. 例如图 5(b) 中任一耦合反射谱在  $n = 1$  的 QNM 本征频率附近均存在共振线型, 随着参与拟合的 QNMs 数目增多, 拟合结果会逐渐接近背景反射谱. 综上所述, 超材料的宽带反射来源于若干低  $Q$  值 QNMs 之间相互耦合形成的背景反射, 单个 QNM 的谱线能反映背景反射谱的部分特征.

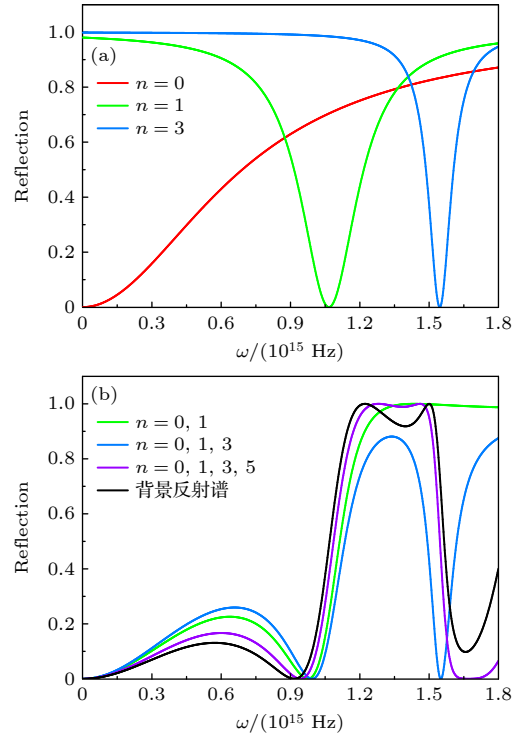


图 5 (a) 单个低  $Q$  值 QNM 形成的反射谱, 红色、绿色和蓝色实线分别为  $n = 0$ ,  $n = 1$  和  $n = 3$  的 QNM 代入 SMT 拟合得到的反射谱; (b) 多个低  $Q$  值 QNMs 耦合形成背景反射的过程, 绿色、蓝色和紫色实线分别对应将  $n = 0, 1$ ;  $n = 0, 1, 3$  和  $n = 0, 1, 3, 5$  的 QNMs 代入 SMT 拟合得到的反射谱, 随着参与拟合的 QNMs 数目增加, 拟合反射谱逐渐贴近背景反射谱 (黑色实线)

Fig. 5. (a) The reflection spectra formed by individual low- $Q$  QNM. The red, green, and blue solid lines represent the fitted spectra obtained by substituting QNMs with  $n = 0$ ,  $n = 1$ , and  $n = 3$  into SMT, respectively; (b) the process of multiple low- $Q$  QNMs forming the background reflection. The green, blue, and purple solid lines represent the fitted reflection spectra obtained by substituting QNMs with  $n = 0, 1$ ;  $n = 0, 1, 3$ ; and  $n = 0, 1, 3, 5$  into SMT, respectively. As the increase of the QNMs involved in the fitting process, the fitted reflection spectrum approaches the background reflection spectrum (black solid line).

### 3.2 含硅膜底层的超材料反射器

进一步考虑将厚度为  $d_s$  的硅薄膜沉积在结构参数优化后的硅柱阵列下方, 实现近完美反射带的拓宽, 如图 6(a) 所示. 对不同硅膜底层厚度  $d_s$  的超材料进行数值仿真, 得到反射谱的变化规律, 如图 6(b) 所示. 当  $d_s = 0.24 \mu\text{m}$  时, 近完美反射带宽达到极大, 相应的反射谱如图 6(c) 黑色实线所示, 阴影部分为近完美反射波段 ( $1.33 - 1.65 \mu\text{m}$ ). 对比无硅膜底层结构的反射谱 (蓝色实线) 可发现, 硅膜底层的引入拓宽了超材料的近完美反射带.

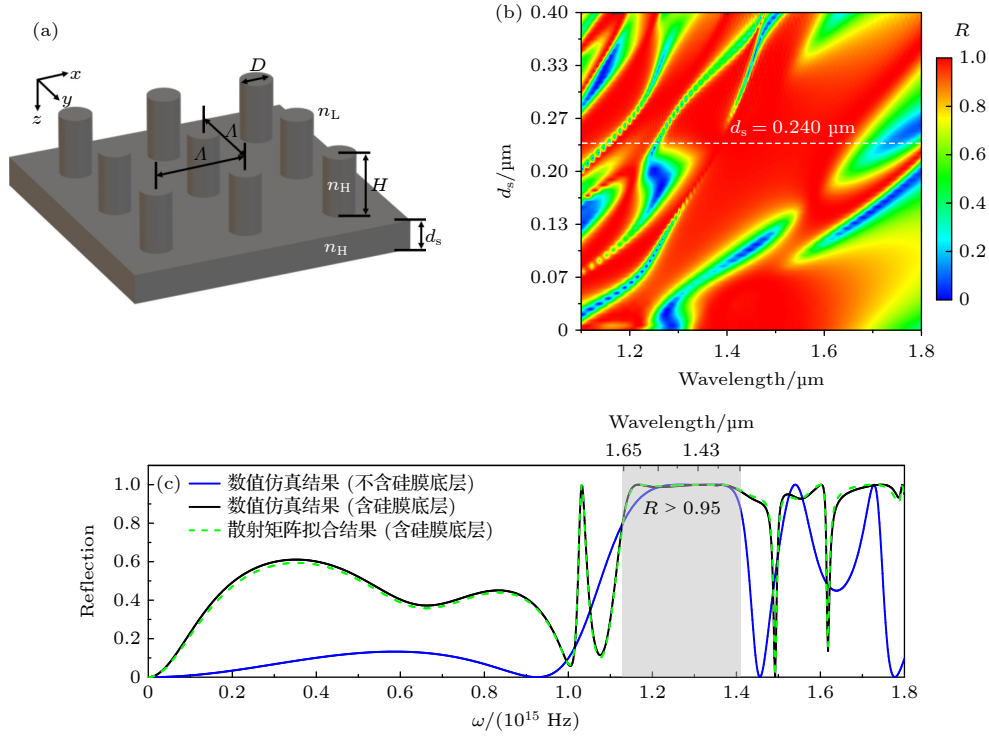


图 6 (a) 含硅膜底层的超材料结构示意图; (b) 固定硅柱高度  $H = 0.41 \mu\text{m}$  和直径  $D = 0.48 \mu\text{m}$ , 反射谱随硅膜厚度  $d_s$  的变化规律, 当  $d_s = 0.24 \mu\text{m}$  时, 近完美反射带宽达到极大; (c) 无硅膜底层的超材料结构反射谱 (蓝色实线), 硅膜底层  $d_s = 0.24 \mu\text{m}$  的超材料结构反射谱 (黑色实线, 对应图 (b) 中白色虚线) 及其拟合反射谱 (绿色虚线)

Fig. 6. (a) Schematic of the Si-cylinders-based metamaterial reflector with a Si sublayer; (b) simulated reflection spectrum as a function of the thickness of the Si sublayer  $d_s$  when fixing  $H = 0.41 \mu\text{m}$  and  $D = 0.48 \mu\text{m}$ . When  $d_s = 0.24 \mu\text{m}$ , the bandwidth of the near-perfect reflection band ( $R > 0.95$ ) reaches a maximum; (c) the simulated reflection spectrum of the metamaterial reflector without Si sublayer (blue solid line), the simulated reflection spectrum of the metamaterial reflector with a  $0.24 \mu\text{m}$ -thick Si sublayer (black solid line, corresponding to the white dashed line in figure (b)) and its fitting result (green dashed line).

为分析含硅膜底层结构反射带的形成机理, 对其 QNMs 进行了求解 (结果见附录 B). 由于此时超材料可视为双层结构 (硅柱层和硅膜层), (6) 式不再适用求解其零频 QNM, 这里采用搜寻散射矩阵极点的方法<sup>[27]</sup> 得到零频 QNM:  $\{\omega_0 = -i \cdot 1.68 \times 10^{14} \text{ Hz}, \sigma = 0.86\}$ . 将所有的 QNMs 代入 (2) 式—(5) 式进行拟合得到了结构的反射谱, 如图 6(c) 中绿色虚线所示, 与其数值仿真结果高度吻合.

图 7(a) 展示了含硅膜底层超材料的 QNMs 的复本征频率, 对比图 4(a) 可发现, 硅底层薄膜的引入会使得结构的 QNMs 数量变多, 图 7(b) 中黑色实线为数值仿真结果, 在频率为  $1.03 \times 10^{15} \text{ Hz}$ ,  $1.49 \times 10^{15} \text{ Hz}$ ,  $1.62 \times 10^{15} \text{ Hz}$ ,  $1.79 \times 10^{15} \text{ Hz}$  附近处均存在明显的窄带共振线型, 分别对应图 7(a) 中  $n = 2, 8, 10, 11$  的 QNMs (如双向箭头所示), 因此将其界定为高  $Q$  值 QNMs, 其余为低  $Q$  值 QNMs. 将它们代入 (3) 式—(5) 式可得到背景反射谱和共振反射谱, 如图 7(b) 中绿色、红色虚线所示, 阴影

部分表示近完美反射频段. 从图中可见背景反射谱与数值仿真结果在阴影部分内高度重合, 这同样说明了超材料的宽带近完美反射主要来源于背景反射, 在硅柱阵列的基础上引入底层薄膜会使得低  $Q$  值 QNMs 数目增多, 从而拓宽近完美反射带.

## 4 结论

本文运用基于 QNMs 的 SMT 分析了基于硅纳米柱阵列的超材料的宽带反射形成机理, 指出宽带反射来源于若干低  $Q$  值 QNMs 提供的背景反射, 单独 QNM 的谱线能反映出背景反射谱的部分特征. 硅膜底层的引入使得低  $Q$  值 QNMs 数目增大, 从而拓宽了反射带. 运用色散关系获得了超材料的有效折射率, 进而精确求出零频 QNM, 使得 SMT 拟合出的反射谱线完美贴合 FDTD 仿真结果. 本文提出的研究方法能拓展至其他宽带共振现象的分析, 为理解超材料的光谱特性提供了新的思路.

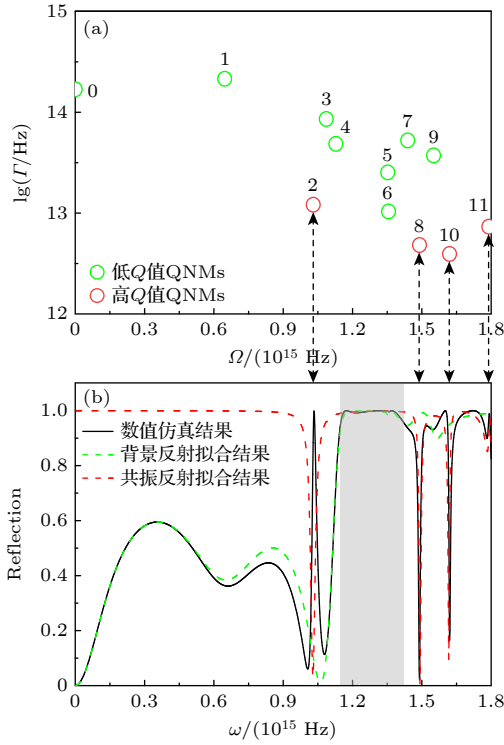


图 7 (a) 含硅膜底层的超材料的 QNMs 复本征频率; (b) 分别用低  $Q$ 、高  $Q$  值 QNMs 进行拟合得到的背景反射谱 (绿色虚线) 和共振反射谱 (红色虚线) 及数值仿真得到的反射谱 (黑色实线)

Fig. 7. (a) Complex frequencies of QNMs for the metamaterial with a Si sublayer; (b) the background reflection spectra (green dashed line) and resonance reflection spectra (red dashed line) fitted by low- $Q$  and high- $Q$  QNMs, respectively, and the reflection spectrum obtained by FDTD simulation (black solid line).

## 附录 A 硅柱阵列结构的 QNMs 求解结果

对图 2(a) 所示的超材料结构的 QNMs 进行求解, 得到的复本征频率  $\omega_n$ 、品质因子  $Q_n$ 、远场复振幅比  $\sigma_n$  如表 A1 所示, 其中加粗字体表示低  $Q$  值 QNMs. 因结构在  $z$  方向上具有镜像对称性, QNMs 可以被分为关于  $z$  方向的奇模式或偶模式, 对应  $\sigma_n$  为  $-1$  或  $1$ .

## 附录 B 含硅膜底层的硅柱阵列结构的 QNMs 求解结果

对图 6(a) 所示的含硅膜底层结构的 QNMs 进行求解, 得到的复本征频率  $\omega_n$ 、品质因子  $Q_n$ 、远场复振幅比  $\sigma_n$  如表 B1 所示 (加粗字体表示低  $Q$  值 QNMs). 因硅膜底层的引入导致结构在  $z$  方向的镜像对称性打破, QNMs 在  $z$  方向上的分布不再是对称的, 此时  $\sigma_n \neq \pm 1$ .

表 A1 图 2(a) 所示结构的 QNMs 的复本征频率  $\omega_n$ 、品质因子  $Q_n$  和远场复振幅比  $\sigma_n$   
Table A1. The complex eigen-frequencies  $\omega_n$ , quality factor  $Q_n$ , and ratio of far-field complex amplitude  $\sigma_n$  of QNMs.

序号 $n$	复本征频率 $\omega_n/\text{Hz}$	品质因子 $Q_n$	远场复振幅比 $\sigma_n$
<b>0</b>	<b><math>0 - 6.91 \times 10^{14}i</math></b>	<b>0</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b><math>1.07 \times 10^{15} - 1.51 \times 10^{14}i</math></b>	<b>3.53</b>	<b>-1</b>
2	$1.45 \times 10^{15} - 3.17 \times 10^{13}i$	22.8	1
<b>3</b>	<b><math>1.55 \times 10^{15} - 5.98 \times 10^{13}i</math></b>	<b>12.9</b>	<b>1</b>
4	$1.74 \times 10^{15} - 2.66 \times 10^{13}i$	32.8	-1
<b>5</b>	<b><math>1.81 \times 10^{15} - 2.67 \times 10^{14}i</math></b>	<b>3.38</b>	<b>-1</b>
6	$1.92 \times 10^{15} - 2.13 \times 10^{11}i$	4510.0	-1
<b>7</b>	<b><math>2.17 \times 10^{15} - 1.88 \times 10^{14}i</math></b>	<b>5.75</b>	<b>-1</b>
8	$2.17 \times 10^{15} - 3.39 \times 10^{13}i$	32.1	-1
9	$2.18 \times 10^{15} - 4.21 \times 10^{11}i$	2580.0	1
10	$2.19 \times 10^{15} - 1.17 \times 10^{12}i$	932.0	1
11	$2.3 \times 10^{15} - 4.11 \times 10^{13}i$	28.0	1

表 B1 图 6(a) 所示结构的 QNMs 的复本征频率  $\omega_n$ 、品质因子  $Q_n$  和远场复振幅比  $\sigma_n$   
Table B1. The complex eigen-frequencies  $\omega_n$ , quality factor  $Q_n$ , and ratio of far-field complex amplitude  $\sigma_n$  of QNMs.

序号 $n$	复本征频率 $\omega_n/\text{Hz}$	品质因子 $Q_n$	远场复振幅比 $\sigma_n$
<b>0</b>	<b><math>0 - 1.68 \times 10^{14}i</math></b>	<b>0</b>	<b>0.857</b>
<b>1</b>	<b><math>6.46 \times 10^{14} - 2.14 \times 10^{14}i</math></b>	<b>1.51</b>	<b><math>-0.38 + 0.0356i</math></b>
2	$1.03 \times 10^{15} - 1.2 \times 10^{13}i$	42.9	$0.754 + 0.377i$
<b>3</b>	<b><math>1.09 \times 10^{15} - 8.53 \times 10^{13}i</math></b>	<b>6.36</b>	<b><math>0.601 - 0.108i</math></b>
<b>4</b>	<b><math>1.13 \times 10^{15} - 4.84 \times 10^{13}i</math></b>	<b>11.7</b>	<b><math>0.12 - 0.421i</math></b>
<b>5</b>	<b><math>1.35 \times 10^{15} - 2.52 \times 10^{13}i</math></b>	<b>26.8</b>	<b><math>3.79 - 30.3i</math></b>
<b>6</b>	<b><math>1.36 \times 10^{15} - 1.03 \times 10^{13}i</math></b>	<b>65.6</b>	<b><math>-11.8 - 26.7i</math></b>
<b>7</b>	<b><math>1.44 \times 10^{15} - 5.23 \times 10^{13}i</math></b>	<b>13.8</b>	<b><math>0.128 - 0.072i</math></b>
8	$1.49 \times 10^{15} - 4.83 \times 10^{12}i$	155.0	$-0.96 - 0.188i$
<b>9</b>	<b><math>1.55 \times 10^{15} - 3.72 \times 10^{13}i</math></b>	<b>20.9</b>	<b><math>0.133 + 0.0279i</math></b>
10	$1.62 \times 10^{15} - 3.9 \times 10^{12}i$	207.0	$0.963 + 1.04i$
11	$1.79 \times 10^{15} - 7.3 \times 10^{12}i$	123.0	$0.0814 + 0.18i$
12	$1.82 \times 10^{15} - 2.02 \times 10^{13}i$	45.2	$0.909 + 0.429i$
13	$1.85 \times 10^{15} - 3.78 \times 10^{12}i$	245.0	$0.911 + 0.725i$
14	$1.87 \times 10^{15} - 3.9 \times 10^{12}i$	239.0	$-0.536 + 1.57i$
15	$1.92 \times 10^{15} - 4.41 \times 10^{11}i$	2180.0	$-0.425 - 0.198i$
16	$1.97 \times 10^{15} - 6.83 \times 10^{12}i$	144.0	$-0.182 - 0.306i$
17	$2.02 \times 10^{15} - 4.37 \times 10^{11}i$	2310.0	$-0.494 - 0.302i$
18	$2.03 \times 10^{15} - 5.79 \times 10^{11}i$	1750.0	$-0.617 - 0.195i$
19	$2.04 \times 10^{15} - 8.33 \times 10^{11}i$	1220.0	$-0.38 - 0.415i$
20	$2.07 \times 10^{15} - 2.8 \times 10^{11}i$	36.9	$-0.634 - 0.121i$

参考文献

- [1] Ren R, Guo Y, Zhu R 2012 *Opt. Lett.* **37** 4245
- [2] Mbakop F K, Tom A, Dadjé A, Vidal A K C, Djongyang N 2020 *Chin. J. Phys.* **67** 124
- [3] Kim J, Baek S, Park J Y, Kim K H, Lee J L 2021 *Small* **17** 2100654
- [4] Sun S, Yang K-Y, Wang C-M, Juan T-K, Chen W T, Liao C Y, He Q, Xiao S, Kung W-T, Guo G-Y, Zhou L, Tsai D P 2012 *Nano Lett.* **12** 6223
- [5] Pors A, Nielsen M G, Eriksen R L, Bozhevolnyi S I 2013 *Nano Lett.* **13** 829
- [6] Li Z, Palacios E, Butun S, Aydin K 2015 *Nano Lett.* **15** 1615
- [7] Tripathi D K, Silva K K M B D, Bungarner J W, et al. 2015 *J. Microelectromechanical S.* **24** 1245
- [8] Wu F, Chen M, Liu D, Chen Y, Long Y 2020 *Appl. Opt.* **59** 9621
- [9] Magnusson R, Shokooh-Saremi M 2008 *Opt. Express* **16** 3456
- [10] Ko Y H, Shokooh-Saremi M, Magnusson R 2015 *IEEE Photonics J.* **7** 1
- [11] Ko Y H, Magnusson R 2018 *Optica* **5** 289
- [12] Quaranta G, Basset G, Martin O J F, Gallinet B 2018 *Laser Photonics Rev.* **12** 1800017
- [13] Zhou J, Sang T, Li J, Wang L, Wang R, Wang Y, Wang J 2019 *Optik* **181** 231
- [14] Ko Y H, Razmjooei N, Hemmati H, Magnusson R 2021 *Opt. Express* **29** 26971
- [15] Lalanne P, Yan W, Vynck K, Sauvan C, Hugonin J P 2018 *Laser Photonics Rev.* **12** 1700113
- [16] Kristensen P T, Herrmann K, Intravaia F, Busch K 2020 *Adv. Opt. Photon.* **12** 612
- [17] Both S, Weiss T 2022 *Semicond. Sci. Tech.* **37** 013002
- [18] Fan S, Joannopoulos J D 2002 *Phys. Rev. B* **65** 235112
- [19] Fan S, Suh W, Joannopoulos J D 2003 *J. Opt. Soc. Am. A* **20** 569
- [20] Wonjoo S, Zheng W, Shanhui F 2004 *IEEE J. Quantum Elect.* **40** 1511
- [21] Lepetit T, Akmansoy E, Ganne J P, Lourtioz J M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 195307
- [22] Wang K X, Yu Z, Sandhu S, Fan S 2013 *Opt. Lett.* **38** 100
- [23] Heo H, Lee S, Kim S 2019 *J. Lightwave Technol.* **37** 4244
- [24] Alpeggiani F, Parappurath N, Verhagen E, Kuipers L 2017 *Phys. Rev. X* **7** 021035
- [25] Benzaouia M, Joannopoulos J D, Johnson S G, Karalis A 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 033228
- [26] Benzaouia M, Joannopoulos J D, Johnson S G, Karalis A 2022 *Phys. Rev. Appl.* **17** 034018
- [27] Song A Y, Kalapala A R K, Zhou W, Fan S 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 041106

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

# Mechanism study of all-dielectric metamaterial wideband reflector based on quasi-canonical mode\*

Jiang Le-Xin<sup>#</sup> Xie Zhen-Long<sup>#</sup> Guo Ze-Hong  
Qiu Yi-Ning Chen Yi-Hang<sup>†</sup>

(Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

( Received 1 June 2023; revised manuscript received 15 July 2023 )

## Abstract

All-dielectric metamaterial broadband reflectors have the advantages of low loss, high reflection efficiency, and compact structure. An in-depth understanding of the formation mechanism of their reflection bands is of great significance in optimizing metamaterial structure and performance, and in further designing novel photonic devices as well. In this work, two all-dielectric metamaterial broadband reflectors are constructed by using discrete silicon nanopillar array and silicon nanopillar array connected with a silicon sublayer. The quasi-normal modes of the metamaterial reflectors are solved. Combining the quasi-normal modes with the scattering matrix theory, we obtain the fitted reflection spectra of the metamaterial, and then reveal that the zero-frequency quasi-normal mode has a substantial influence on the accuracy of the fitting results. A dispersion relation analysis method is proposed to accurately solve the zero-frequency quasi-normal mode. Furthermore, the fitted resonance reflection spectrum and background reflection spectrum are obtained by using high- $Q$ -value quasi-normal mode and low- $Q$ -value quasi-normal mode, respectively. Our results show that the broadband reflection of the considered metamaterial reflectors should be attributed to the background reflection induced by the low- $Q$  quasi-normal modes. The research method proposed in this paper can also be used for discussing quasi bound states in the continuum, Mie resonances, and other resonance phenomena, which provides a new way for interpreting the spectral characteristics of metamaterials.

**Keywords:** all-dielectric metamaterials, wide-band reflection, quasi-normal mode, scattering matrix

**PACS:** 78.20.Bh, 42.79.Fm, 77.84.-s

**DOI:** [10.7498/aps.72.20230915](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230915)

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2017A030313036) and the Science and Technology Program of Guangzhou, China (Grant No. 2019050001).

<sup>#</sup> These authors contributed equally.

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



## 基于准正则模式的全电介质超材料宽带反射器机理

蒋乐昕 谢振龙 郭泽虹 丘伊宁 陈溢杭

## Mechanism study of all-dielectric metamaterial wideband reflector based on quasi-canonical mode

Jiang Le-Xin Xie Zhen-Long Guo Ze-Hong Qiu Yi-Ning Chen Yi-Hang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204205 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230915

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230915>

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

#### 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>

#### 涂覆石墨烯的椭圆形电介质纳米线光波导的模式特性分析

Mode characteristic analysis of optical waveguides based on graphene-coated elliptical dielectric nanowire  
物理学报. 2019, 68(5): 058101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182090>

#### 基于涂覆石墨烯的三根电介质纳米线的THz波导的模式特性分析

Modes characteristics analysis of THz waveguides based on three graphene-coated dielectric nanowires  
物理学报. 2018, 67(10): 108101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180036>

#### 涂覆石墨烯的非对称并行电介质纳米线波导的模式特性分析

Mode properties analysis of graphene-coated asymmetric parallel dielectric nanowire waveguides  
物理学报. 2018, 67(3): 038102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172016>

#### 涂覆石墨烯的非对称椭圆电介质纳米并行线的模式分析

Mode characteristics of asymmetric graphene-coated elliptical dielectric nano-parallel wires waveguide  
物理学报. 2020, 69(23): 238102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201041>

#### 一种准零刚度声学超材料板的低频宽频带隔声行为

Broadband low-frequency sound insulation performance of quasi-zero stiffness local resonant acoustic metamaterial plate  
物理学报. 2021, 70(24): 244302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211203>