

# 《空间与时空涡旋光独立调控的太赫兹超表面》的补充材料

李禹希<sup>1)</sup> 张会云<sup>1)</sup> 陈炯煦<sup>1)</sup> 王嘉诚<sup>1)</sup> 张敏<sup>1)</sup> 蒋庆友<sup>2)</sup>

刘蒙<sup>1†)</sup> 张玉萍<sup>1‡)</sup>

## 附录 A 利用时间耦合模理论推导拓扑奇点存在条件

采用时间耦合模理论(TCMT)，通过推导系统模态耦合关系，分析系统反射生成横向 OAM 的产生机制。首先，当 VO<sub>2</sub> 处于绝缘态下，由于结构近似具有反射对称性，器件中引导共振模  $\pm k_{\parallel}$  方向的动力学行为满足一阶耦合方程<sup>[1]</sup>：

$$\frac{dA}{dt} = (j\omega_0 - \gamma)A + \mathbf{K}^T S_+, \quad (S1)$$

$$S_- = S S_+ = \mathbf{C} S_+ + \mathbf{D} A, \quad (S2)$$

其中，

$$A = \begin{pmatrix} A_k \\ A_{-k} \end{pmatrix}, \quad S_+ = \begin{pmatrix} S_{1+} \\ S_{2+} \\ S_{3+} \\ S_{4+} \end{pmatrix}, \quad S_- = \begin{pmatrix} S_{1-} \\ S_{2-} \\ S_{3-} \\ S_{4-} \end{pmatrix}, \quad (S3)$$

式中， $A$  是  $+k_{\parallel}$  和  $-k_{\parallel}$  处两个共振模式的复振幅， $\omega_0$  是共振频率， $\gamma$  为辐射衰变率， $S_+$  和  $S_-$  代表入射波和出射波的振幅。 $\mathbf{K}$  是从激发态到共振模式的耦合矩阵， $\mathbf{D}$  是从共振态到发射波的耦合矩阵，两者均为  $4 \times 2$  矩阵。 $\mathbf{C}$  是一个描述无共振的直接散射矩阵，其受到能量守恒和互易性条件限制：

$$\mathbf{K}^T = \begin{pmatrix} k_p^- & 0 & k_s^- & 0 \\ 0 & k_p^+ & 0 & k_s^+ \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 & d_p^- \\ d_p^+ & 0 \\ 0 & d_s^- \\ d_s^+ & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = e^{j\phi} \begin{pmatrix} 0 & r & 0 & jt \\ r & 0 & jt & 0 \\ 0 & jt & 0 & r \\ jt & 0 & r & 0 \end{pmatrix}. \quad (S4)$$

在该背景下，令  $r$  和  $t$  表示反射系数于透射系数。这些系数满足  $r^2 + t^2 = 1$ 。上标<sup>+</sup>(<sup>-</sup>)代表进(出)方向。下标“s, p”表示该系数对应于 s 偏振和 p 偏振。当共振模式被频率为  $\omega$  的入射波激发，散射矩阵  $\mathbf{S}$  被定义为<sup>[2]</sup>

$$\mathbf{S} = \left[ \mathbf{C} + \frac{\mathbf{D}\mathbf{K}^T}{j(\omega - \omega_0) + \gamma} \right]. \quad (S5)$$

由于能量守恒和时间反演对称条件的约束, 矩阵  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{D}$  和  $\mathbf{C}$  满足以下条件:

$$\mathbf{D}\mathbf{D}^\dagger = 2\gamma, \mathbf{C}\mathbf{D}^* = -\mathbf{K}, \mathbf{K} = \mathbf{D} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (S6)$$

通过耦合方程 (A6) 和 (A4), 散射矩阵  $\mathbf{S}$  可表示为

$$\mathbf{S} = e^{j\phi} \begin{pmatrix} 0 & r & 0 & jt \\ r & 0 & jt & 0 \\ 0 & jt & 0 & r \\ jt & 0 & r & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{j(\omega - \omega_0) + \gamma} \begin{pmatrix} 0 & d_p^- d_p^+ & 0 & d_p^- d_s^+ \\ d_p^+ d_p^- & 0 & d_p^+ d_s^- & 0 \\ 0 & d_s^- d_p^+ & 0 & d_s^- d_s^+ \\ d_s^+ d_p^- & 0 & d_s^+ d_s^- & 0 \end{pmatrix}. \quad (S7)$$

并且有

$$\gamma_1 + \gamma_3 = \gamma_2 + \gamma_4 = \gamma. \quad (S8)$$

当入射光束呈圆偏振状态时, 结构中的反射对称性对于促进偏振转化和生成拓扑奇点至关重要。这一理解有助于确定生成拓扑黑暗点所需的条件<sup>[3]</sup>:

$$\left\{ \begin{array}{l} r_r = \frac{i(\omega_0 - \omega) - \gamma_0}{i(\omega_0 - \omega) + \gamma_0} \cdot r, \quad r_n = r, \\ |r_r| = |r_n| = |r| = 1, \\ \arg\left(\frac{r_r}{r_n}\right) = \begin{cases} 0, & (\omega \rightarrow -\infty) \\ \pi, & (\omega = \omega_0) \\ 2\pi, & (\omega \rightarrow +\infty) \end{cases} \end{array} \right. \quad (S9)$$

在圆偏振光入射条件下, 共振反射系数  $r_r$  和背景反射系数  $r_n$  分别表征不同极化通道的响应特性。当频率满足  $\omega = \omega_0$  时, 谐振通道引入的  $p$  相位延迟使超表面呈现半波片特性, 实现正交圆偏振态的转换。

## 附录 B 器械制造、参数优化和技术容差

我们的设备可以通过以下工艺进行制造: 首先, 在高阻硅衬底上通过高功率脉冲磁控溅射技术制备 30  $\mu\text{m}$  厚银基底, 接着通过等离子体增强化学气相沉积在银基底上生长 20  $\mu\text{m}$  厚  $\text{SiO}_2$  介质层, 再通过晶圆键合与减薄技术获得 30  $\mu\text{m}$

厚银基层。在硅层加工中, 先采用深反应离子刻蚀技术制备中心三角形空气孔, 再通过第 2 轮光刻与深反应离子刻蚀在三角形外围区域制备破缺圆环孔结构。随后, 通过原子层沉积技术在圆环孔内保形沉积 30  $\mu\text{m}$  厚  $\text{VO}_2$  薄膜, 最后通过化学机械抛光去除表面多余  $\text{VO}_2$  材料, 形成精确的破缺圆环结构。在调控方面,  $\text{VO}_2$  的相变可通过集成微型加热器或使用配备温控台的太赫兹时域系统进行精确的热激活, 能够适用于我们所提出的器件, 实现 OV 与 STOV 两种状态的可逆切换。整个工艺流程如图 S1 所示。

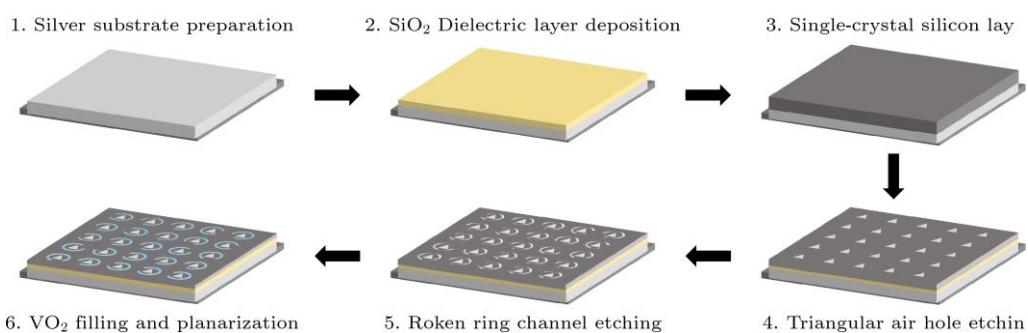


图 S1 制造工艺的分步流程图

Fig. S1. Step-by-step flowchart of the manufacturing process.

对于参数优化方法, 主要通过基于有限元法的参数扫描来确定最终的结构参数。首先, 超表面周期和厚度的选取主要根据目标频段的半波长原则和有效介质理论进行估算, 已确保单元能提供足够的相位调控能力并抑制高阶衍射。接下来, 我们优化三角形空气孔的尺寸, 在  $\text{VO}_2$  绝缘态下确保 STOV 的生成。随后, 固定三角孔形状, 优化  $\text{VO}_2$  破缺圆环的宽度, 在  $\text{VO}_2$  金属态下为 OV 生成提供高效率和高精度的 PB 相位覆盖。

为了确定所设计器件的工艺容差范围, 我们系统分析了关键几何参数对器件性能的影响, 重点考察了空气孔宽度与破缺圆环内半径两个核心参数。仿真结果表明, 在保持目标功能的前提下, 上述参数可允许的工艺偏差约为  $\pm 5 \mu\text{m}$ 。空气孔宽度的敏感性主要源于其对圆偏振光与结构耦合效率及系统反射对称性的显著影响。当左右两侧空气孔宽度差异超出容差范围时, 将破坏结构对称性, 进而导致传输通道中拓扑奇点相位的退化甚至消失, 如图 S2(a), (b) 所示。破缺圆环内半径的容差要求则与其对 PB 相位调控单元响应一致性的直接影响有关。内半径的偏移不仅会引起反射振幅的整体性衰减, 更会导致各编码单元之间的响应出现

显著差异, 破坏原本高度一致的振幅分布。同时, 这种不均匀的振幅响应会进一步引起各单元间相对相位关系偏离设计值, 最终影响涡旋光束的生成质量与模式纯度, 如图 S2(c), (d)所示。本文提出的容差要求鉴于当前的加工工艺并不严格, 具有相对广泛的适用性。

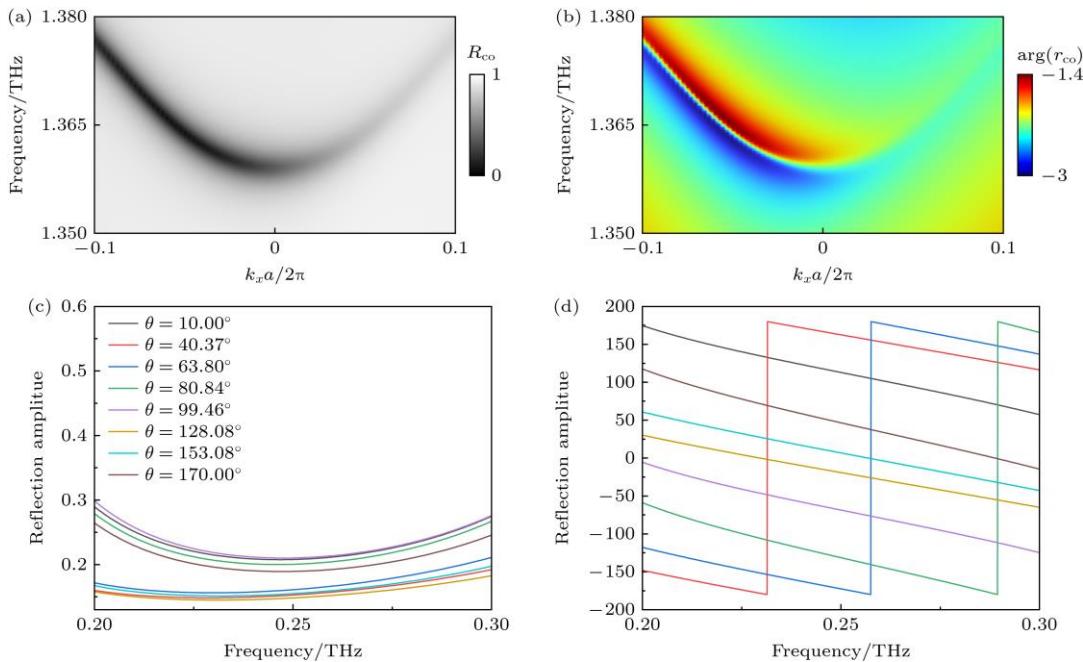


图 S2 超过技术容差范围后对生成 STOV 和 OV 的影响 (a), (b)空气孔左右宽度差为 5  $\mu\text{m}$  后, 在 RCP 入射下传输散射方程在  $\omega$ - $k_x$  域中的幅度和相位图; (c), (d)圆环内半径大于标准参数 10  $\mu\text{m}$  后, 8 个超表面编码单元在 RCP 入射时的振幅和相位分布

Fig. S2. The influence on the generation of STOV and OV after exceeding the technical tolerance range: (a), (b) When the difference in width of the air holes on the left and right is 5  $\mu\text{m}$ , the amplitude and phase diagrams of the transmission scattering equation in the  $\omega$ - $k_x$  domain under RCP incidence; (c), (d) when the inner radius of the ring is greater than the standard parameter by 10  $\mu\text{m}$ , the amplitude and phase distributions of the eight metamaterial encoding units under RCP incidence.

### 附录 C 仿真模拟补充

本研究采用 COMSOL Multiphysics 软件的波动光学模块对 STOV 的生成进行数值模拟。具体而言, 建立了包含一个完整超表面单元的三维模型。在  $x, y$  方向施加周期性边界条件, 为计算本征模态, 在  $z$  方向设置完美匹配层以吸收辐射。通过设置周期性端口入射右旋圆偏振平面波, 并系统地扫描频率与面内波矢, 我

们计算并提取了反射场的散射矩阵, 获得了用于定位拓扑黑暗点与暗线的同极化反射系数。

针对 OV 的生成与调控, 本研究则采用 CST Studio Suite 软件进行仿真分析。该仿真基于有限积分技术, 计算超表面在  $\text{VO}_2$  金属态下的远场特性, 我们同样构建了相应的周期性单元模型, 通过设置平面波激励与周期性边界条件, 模拟了右旋圆偏振光的入射。通过提取单元在不同旋转角度下的反射相位与幅度, 我们构建了多位编码矩阵, 并进一步计算了完整超表面的远场分布, 从而验证了不同拓扑荷轨道角动量光束的生成与偏转。

## 附录 D 涡旋光场能量效率

由于 STOV 和 OV 生成原理及仿真模拟方法的不同, 我们将从不同的角度分析系统在涡旋光场调控过程中的能量效率问题。首先, 能量效率与输出振幅的平方成正比。为了评估当前超表面在  $\text{VO}_2$  处于绝缘态下生成 STOV 的效率, 我们针对光谱内每个波矢方向范围内的输出, 计算其标准化振幅平方的平均值。同时, 为了对比分析, 我们将  $\text{VO}_2$  破缺圆环的材料替换为超表面上层的 Si 材料, 以模拟无损耗理想情况下的性能表现。计算结果显示, 在使用电导率为  $20 \text{ S/m}$  的  $\text{VO}_2$  情况下, 理论效率为  $0.822254$ ; 而在使用 Si 材料的情况下, 理论效率为  $0.869628$ 。上述对比分析表明, 由于  $\text{VO}_2$  在绝缘态下存在不可忽略的电导率损耗, 其 STOV 生成效率相较于理想的 Si 结构确实有所下降, 效率相对降低了约  $5.4\%$ , 但其理论效率依然较高, 这符合我们的预期要求。

针对  $\text{VO}_2$  在金属态下生成 OV 的情况, 从多个角度对能量效率进行分析。在综合考虑了  $\text{VO}_2$  金属态的欧姆损耗、结构散射损耗等能量损失因素后, 通过积分上半球面的雷达散射截面 (RCS) 计算了绝对能量效率, 得到了超表面在  $\text{VO}_2$  金属态下的总反射效率达到  $46.13\%$ 。接下来, 为了评估能量在目标轨道角动量模式上的集中程度, 采用了 OAM 模态纯度分析。为分析所生成 OV 的质量, 采用 OAM 模态纯度分析: 首先, 使用角向傅里叶分解, 计算各阶 OAM 模式的权重系数:

$$A_l = \frac{1}{2\pi} \int E(\phi) e^{-il\phi} d\phi, \quad (\text{S10})$$

其中,  $A_l$  表示具有拓扑电荷的谱模权重,  $E(\phi)$  表示方位角方向的复电场分布。在

得到 CST 远场模拟结果后, 可以计算出具有特定阶数的 OAM 光束的模纯度。

模纯度是主导模式功率于分布在所有模式中的总功率之比, 其表达式为

$$\text{Purity} = \frac{|A_l|^2}{\sum_l |A_l|^2}. \quad (\text{S11})$$

在不同的相变状态中, 反射场会被采样并分解。令采样点到超表面中心的距离为 1 mm, 得到了  $\text{VO}_2$  在金属态下超表面生成 OV 的模式纯度和相位, 如图 S3 所示。分析结果表明, 生成的涡旋光束在目标 OAM 模式上表现出高度集中的能量分布, 模拟理论纯度达到了 73.17%, 目标 OAM 模式 ( $l = 1$ ) 的绝对效率达到 33.74%。

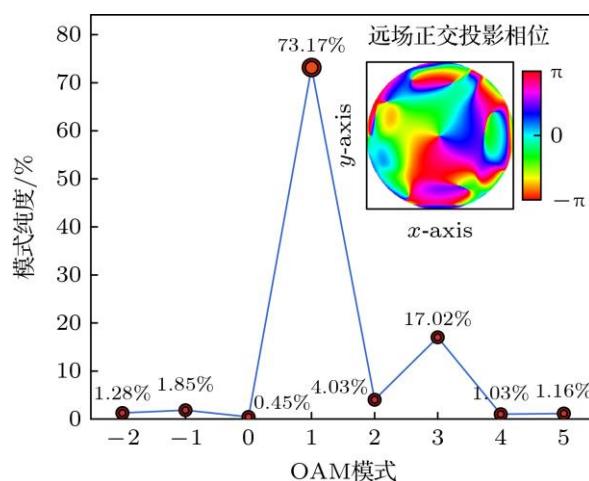


图 S3 反射型涡旋光束的模式纯度和相位。

Fig. S3. The mode purity and phase of the reflective vortex beam.

## 参考文献

- [1] Fan S H, Suh W, Joannopoulos J D 2003 *J. Opt. Soc. Am. A* **20** 569
- [2] Suh W, Wang Z, Fan S H 2004 *IEEE J. Quantum Electron.* **40** 1511
- [3] Liu W Z, Wang J J, Tang Y, Wang X H, Zhao X Q, Shi L, Zi J, Chan C T 2024 *Nano Lett.* **24** 943