

硅纳米颗粒阵列中准连续域束缚态诱导三次谐波增强效应

杜芊 陈溢杭

Enhancing third-harmonic generation by quasi bound states in continuum in silicon nanoparticle arrays

Du Qian Chen Yi-Hang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 154206 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210332

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210332>

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

硅超构表面上强烈增强的三次谐波

Enhanced third-harmonic generation in silicon metasurface

物理学报. 2019, 68(21): 214207 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190789>

高非线性光子晶体光纤中优化产生宽带紫外三次谐波

Optimization of broadband third-harmonic UV generation in highly nonlinear photonic crystal fiber

物理学报. 2017, 66(4): 044205 <https://doi.org/10.7498/aps.66.044205>

拓扑超导Majorana束缚态的探索

Exploration of Majorana bound states in topological superconductors

物理学报. 2020, 69(11): 117102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20190959>

基于固体薄片超连续飞秒光源驱动的高次谐波产生实验

High harmonic generation experiments based on solid-state supercontinuum

物理学报. 2017, 66(13): 134207 <https://doi.org/10.7498/aps.66.134207>

基于高次谐波产生的极紫外偏振涡旋光

Extreme ultraviolet polarization vortex beam based on high harmonic generation

物理学报. 2020, 69(4): 044203 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20190834>

竞争非局域三次五次非线性介质中孤子的传输特性

Propagating properties of spatial solitons in the competing nonlocal cubic-quintic nonlinear media

物理学报. 2017, 66(5): 054208 <https://doi.org/10.7498/aps.66.054208>

硅纳米颗粒阵列中准连续域束缚态 诱导三次谐波增强效应*

杜芊 陈溢杭†

(华南师范大学物理与电信工程学院, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

(2021 年 2 月 18 日收到; 2021 年 3 月 25 日收到修改稿)

由高折射率介质材料制备的亚波长人工结构, 通过电磁谐振效应为在纳米尺度操控光提供了一种有效方法. 这类结构的吸收损耗通常较低, 然而辐射损耗降低了其非线性响应的效率. 通过连续域束缚态 (bound states in the continuum, BICs) 可望解决这个问题. BICs 是一种处于连续域内而保持局域的非常规光学态, 存在于光锥线以内并且具有无限大的 Q 值. 本文提出通过破坏硅纳米颗粒阵列原胞的对称性将 BIC 转变成准 BIC, 使得结构的透射谱中出现高 Q 的窄共振谷, 当调节泵浦波长至共振波长时, 非线性响应显著增强, 三次谐波激发的强度提高了 6 个数量级, 转化效率可提升至约 2.6×10^{-6} , 该结果有望应用于硅基光学非线性器件的设计.

关键词: 高折射率介质材料, 准连续域束缚态, 三次谐波

PACS: 42.65.-k, 42.65.Ky, 42.70.Nq

DOI: 10.7498/aps.70.20210332

1 引言

全介质纳米光子学是一个快速发展的研究领域, 有望在低损耗集成光子器件设计中获得重要的应用^[1]. 高折射率介质纳米共振结构在可见光和近红外光谱范围内可同时支持电和磁 Mie 共振, 且其共振特征可通过改变纳米结构的几何形状进行调整. Mie 共振可导致电磁场的局域及特殊的空间分布, 可用于实现有效的波前控制^[2], 已在线性和非线性光学领域带来一系列新颖的效应^[3,4]. 虽然高折射率介质纳米共振结构具有低损耗、光学磁性和多极响应等优点, 但其品质因数 (Q 值) 通常比较低, 这会降低光与物质相互作用以及非线性响应的效率. 而连续域束缚态 (bound states in the continuum, BICs) 可望使得在高折射率介质纳米共振结构实现高 Q 共振成为可能^[5,6].

BICs 是一种存在于连续谱中的局域态, 处于光锥线以内却能够实现完美局域. 理想情况下, BICs 的 Q 值为无穷大且共振线宽为零^[7]. BICs 一般可分为两种: 对称保护型 BICs 和偶然型 BICs. 若共振模式与辐射模式因模式对称性的差异而无法耦合, 所形成的束缚态称为对称保护型 BICs^[8]; 若通过调节结构参数使得共振模式不再与辐射模式耦合, 所形成的束缚态则为偶然型 BICs^[5]. 实际上, 材料损耗、制造缺陷等因素会使得 BICs 的 Q 值和共振线宽变得有限, 此时 BICs 转变为准 BICs, 即超腔模式^[9]. 最近有研究表明, 通过打破平面内反演对称性, 介质超表面原本支持的对称保护型 BICs 会转变为准 BICs, 并且诱使反射谱中出现尖锐的高 Q 共振峰^[10].

硅在红外波段具有高折射率、低损耗和大的非线性极化系数^[11], 因此可作为一种理想的非线性光学材料, 用于研究增强红外波段的非线性效

* 广东省自然科学基金 (批准号: 2015A030311018, 2017A030313035) 和广州市科技计划 (批准号: 2019050001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yhchen@scnu.edu.cn

应[12–15]. 已经有报道用于增强非线性的硅基结构, 例如光子晶体[16,17]、光栅[18,19]、超表面[20–22]等. 本文提出了一种基于硅纳米颗粒阵列的周期结构, 通过打破结构原胞对称性, 使得对称保护型 BIC 转变为准 BIC, 并发现透射谱中出现高 Q 的共振谷, 利用其可实现高效率的三次谐波激发 (third-harmonic generation, THG), 以上结果可望在硅基光学非线性器件领域获得应用.

2 对称保护型 BICs 及群论

硅纳米颗粒阵列如图 1(a) 所示, 当共振模式与连续谱的对称性不相同, 共振模式无法与连续谱耦合, 所以该结构存在对称保护型 BICs. 下面通过群论来解释结构中的对称保护型 BICs. 结构原胞的二维对称示意图如图 1(b) 所示, 它同时具有镜像对称和旋转对称, 其点群可写为 $D_{2h} = C_{2v} \times C_{1h}$, 因此可以利用两点群 C_{2v} , C_{1h} 的不可约对其模式进行分类.

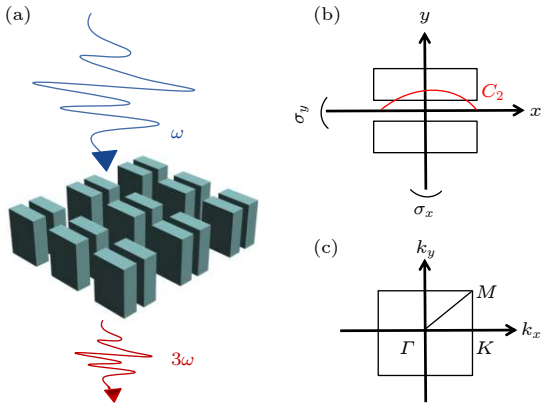


图 1 (a) 硅纳米颗粒阵列示意图; (b) 周期结构原胞的二维对称示意图; (c) 正方晶格结构的第一布里渊区

Fig. 1. (a) Schematic diagram of silicon nanoparticle array; (b) two-dimensional symmetry operations for the structure; (c) the first Brillouin zone of the two-dimensional square lattice.

D_{2h} 具有 8 种不同的模式: (B, A_1) , (B, A_2) , (B, B_1) , (B, B_2) , (A, A_1) , (A, A_2) , (A, B_1) , (A, B_2) . 如图 1(b) 所示, 一般的正方晶格结构具有 C_{4v} 点群[23], 而文中结构不具有 C_4 旋转对称和 σ_d 镜像对称, 所以本文结构的点群为 C_{2v} . C_{4v} 点群具有 4 个不可约模式 A_1, A_2, B_1, B_2 . 从表 1 可以看出, C_{2v} 中的 A_1, A_2 模式对应于 C_{4v} 中的 A_1, A_2, B_1, B_2 模式, 而 C_{2v} 中的 B_1, B_2 模式对应于 C_{4v} 中的 E 模式. 由文献[6]可知, 除了 C_{4v} 中的 E 模式, 其他的模式由于对称性不同而无法与自由空间模式耦合, 在 Γ 点形成对称保护型 BICs. 对应到本文, C_{2v} 中只有 B_1, B_2 模式可以耦合到外辐射场, 所以 (B, A_1) , (B, A_2) , (A, A_1) , (A, A_2) 模式可以在高对称点上形成对称保护型 BICs, 具有无限的 Q 值.

3 结果与讨论

3.1 对称保护型 BIC

首先研究硅纳米颗粒的周期结构的 BICs, 结构原胞示意图如图 2(a) 所示. 其中硅纳米颗粒的长轴为 $L = 500$ nm, 短轴为 $d = 200$ nm, 两个纳米颗粒中心之间的距离 $D = 320$ nm, 高 $H = 650$ nm, 周期 $Z = 660$ nm. 硅的折射率为 3.5, 非线性极化系数 $\chi^{(3)} = 2.79 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-2}$ [11]. 周期结构的原胞具有旋转对称和镜像对称, 结构的点群是 D_{2h} , 所以在高对称点 Γ 存在对称保护型 BICs. 使用时域有限差分法对结构进行了数值模拟, 认为结构在 xy 平面无限大且具有完美周期性, 图 2(b) 所示结构在 1329 nm 处存在一个对称保护型 BIC, 它的 Q 值为无穷大 (可以达到 10^9). xy 平面和 yz 平面的电场和磁场图如图 2(c) 所示, 可以看到电场和磁场都是局域的状态. 对于本文对称的纳米颗粒结构, 当用电场沿结构短轴方向 (y 轴偏振) 的

表 1 点群 C_{4v} 和点群 C_{2v} 的对称特征表
Table 1. Character of the C_{4v} point group and C_{2v} point group.

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

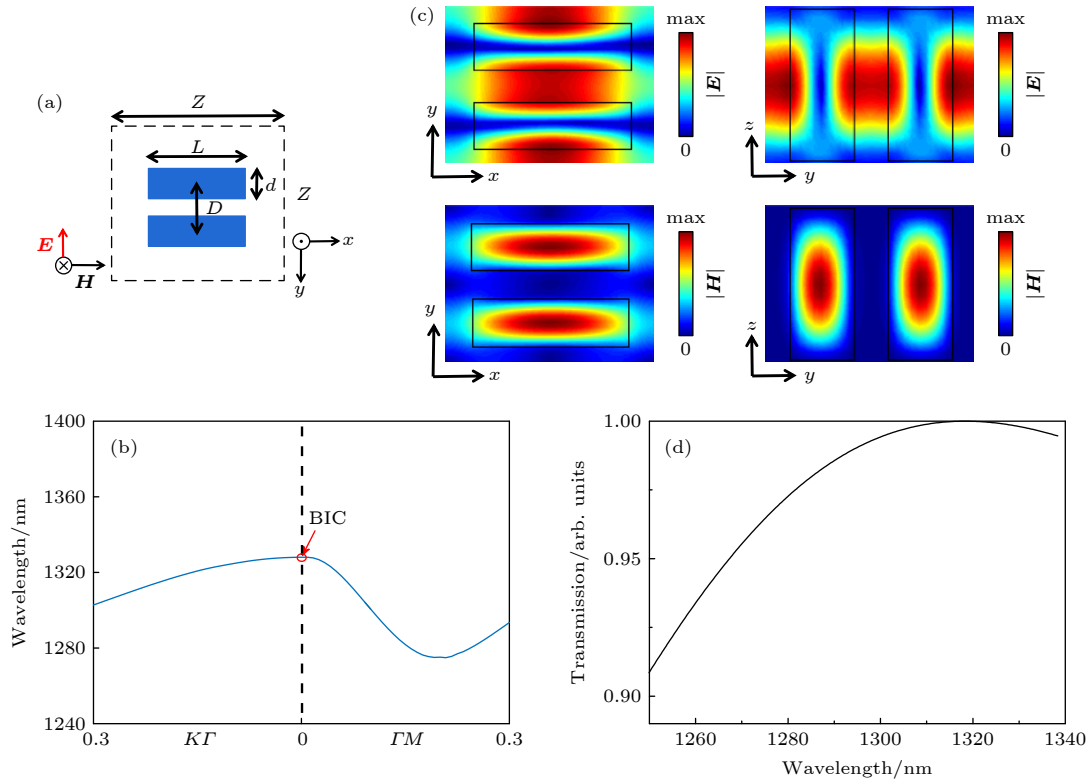


图 2 (a) 结构原胞示意图; (b) TM 偏振的能带图; (c) 对称保护型 BIC 在 xy 平面和 yz 平面的电场分布和磁场分布图, 黑色框为结构轮廓; (d) 光垂直入射结构的透射谱

Fig. 2. (a) Schematic diagram of a primitive cell; (b) band diagram of TM polarization; (c) electric field and magnetic field distribution of the symmetry-protected BIC in xy plane and yz plane, and the black frame is the structure outline; (d) transmission spectrum of the structure with normal incidence of light.

入射光垂直照射时, 会形成一个沿 y 方向的电偶极子振荡, 这种电偶极子振荡会产生较强的辐射与非辐射损耗, 当纳米颗粒阵列集体振荡时, 会形成一个很宽的透射谱线——一个辐射明模, 如图 2(d) 所示. 同时 BIC 未在透射光谱中显示出来, 这是因为共振模式与自由空间模式的对称性不一致, 无法辐射到外场, 是一个暗模.

3.2 准 BIC

改变硅纳米颗粒阵列的原胞中其中一个纳米颗粒的长度, 进而打破结构的 C_2 , σ_y 对称性, 如图 3(a) 所示. 纳米颗粒的长度分别为 L 和 $L - 2\Delta L$. 通过颗粒长轴长度的差距 $2\Delta L$ 来控制原胞的不对称性, 定义原胞的不对称性参数为 $\alpha = \Delta L/L$. 控制其中一个颗粒的长轴长度不变, 改变另一个颗粒长轴长度为 450, 425, 400, 375, 350, 325 和 300 nm, 这分别对应于不对称参数 α 为 0.05, 0.075, 0.1, 0.125, 0.15, 0.175 和 0.2. 此时由于打破了结构的对称性, BIC 转变为一个具有有限 Q 值的准 BIC. 以不对称参数 α 为 0.1 的硅纳米颗粒为例, 图 3(b)

给出了准 BIC 的 xy 平面和 yz 平面的电磁场. 可以看到准 BIC 和 BIC 具有相似的电场、磁场分布. 并且由图 3(c) 可知, 随着对称性的打破, 明模与暗模相耦合, 透射谱出现一个狭窄的谷, 共振波长和线宽对不对称参数 α 具有强烈的依赖性: 共振谷的位置随着不对称参数 α 的增加而蓝移, 谷的宽度也逐渐增加. 打破结构的对称性后, 以不对称参数 α 为 0.125 是为例 (图 3(d)), 观察透射谱可以发现, 只有入射光的电场沿结构短轴方向 (y 轴) 时, 有共振谷, 当入射光的电场沿结构长轴方向 (x 轴) 时, 没有共振谷, 说明产生的共振具有偏振依赖性.

如图 4 所示, Q 值也随着不对称参数 α 的增加而逐渐减小. 对于 α 值较小的情况 ($\alpha \leq 0.1$)^[10], 准 BIC 的 Q 值遵循反二次定律, 关系如下:

$$Q_{\text{rad}} = A\alpha^{-2}, \quad (1)$$

其中 Q_{rad} 是辐射 Q 值; A 是一个常数, 由结构决定, 与不对称参数 α 无关. 可以看到, 当 $\alpha = 0.2$ 时, Q 值明显偏离拟合红线, 因为此时不对称性已经不能被视为一个弱扰动.

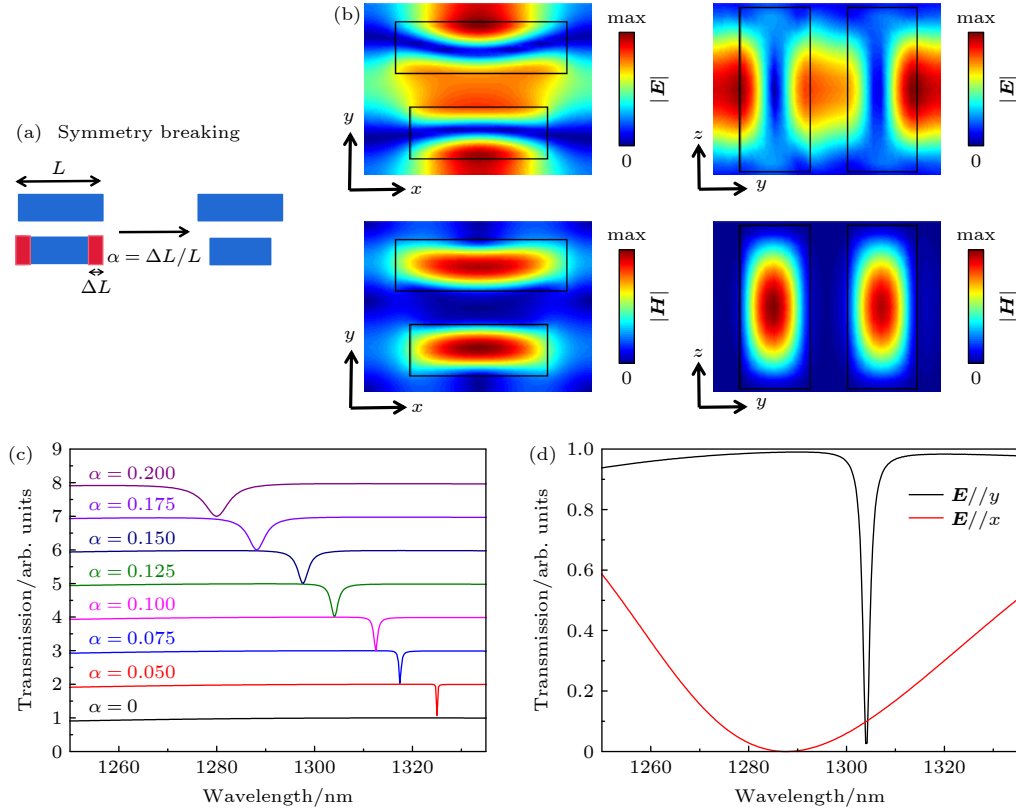


图 3 (a) 打破结构对称性示意图; (b) 准 BIC 的 xy 平面和 yz 平面的电场和磁场图, 黑色框为结构轮廓; (c) 改变不对称性参数 α 透射光谱的变化; (d) 不对称参数 α 为 0.125 时, 不同的入射光电场偏振方向条件下的透射谱

Fig. 3. (a) Schematic diagram of breaking structural symmetry; (b) electric and magnetic fields in xy plane and yz plane of the quasi BIC, and the black frame is the structure outline; (c) transmission spectra under different asymmetry parameters α ; (d) transmission spectra under different electric field polarization directions of incident light with asymmetry parameter $\alpha = 0.125$.

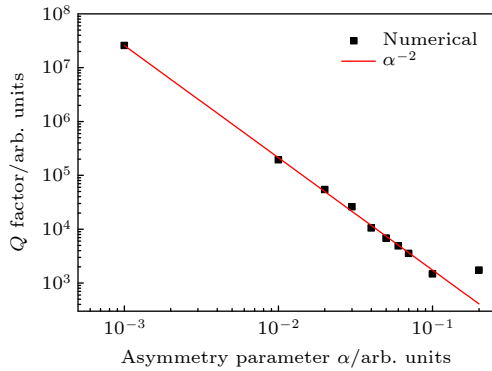


图 4 Q 值和不对称参数 α 的关系, 红线表示反二次拟合
Fig. 4. Relationship between Q factor and asymmetry parameter α , and the red line represents the inverse quadratic fitting.

3.3 THG 增强

接下来, 研究破坏结构对称性产生的高 Q 共振对 THG 的影响. 本文模拟的泵浦光脉冲的功率维持在 129.1 mW, 脉冲宽度为 400 fs, 重复频率为 80 MHz, 光源电场振幅为 1.5×10^7 V/m, 峰值泵浦光强为 29.63 MW/cm², 探测 THG 透射信号.

图 5(a) 所示为 THG 强度和不对称参数 α 之间的关系, 可以看到随着 α 的增加, THG 强度的峰值逐渐蓝移, 当不对称参数为 0.125 时, THG 强度最高, 此时模式的 Q 值约为 765, 所以下文研究不对称参数为 0.125 时, THG 强度与其他参数的关系. 结构不仅具有辐射损耗, 还具有材料吸收损耗以及表面粗糙度等非辐射损耗, 所以模式的总 Q 值为

$$\frac{1}{Q_{\text{total}}} = \frac{1}{Q_{\text{rad}}} + \frac{1}{Q_{\text{nonrad}}}, \quad (2)$$

其中 Q_{rad} 为辐射 Q 值, Q_{nonrad} 为非辐射 Q 值. 将 (2) 式与 (1) 式联立得

$$Q_{\text{total}} = \frac{Q_{\text{nonrad}}}{\alpha^2/\alpha_{\text{cr}}^2 + 1},$$

$$\alpha_{\text{cr}} = \left(\frac{A}{Q_{\text{nonrad}}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3)$$

准 BIC 在共振波长处的振幅 A_{ω} 满足^[24]

$$|A_{\omega}|^2 \propto (\alpha Q_{\text{total}})^2 P_{\omega}, \quad (4)$$

其中 P_{ω} 为泵浦功率. 同时 $P_{3\omega} \propto |A_{\omega}|^6$, 所以 THG

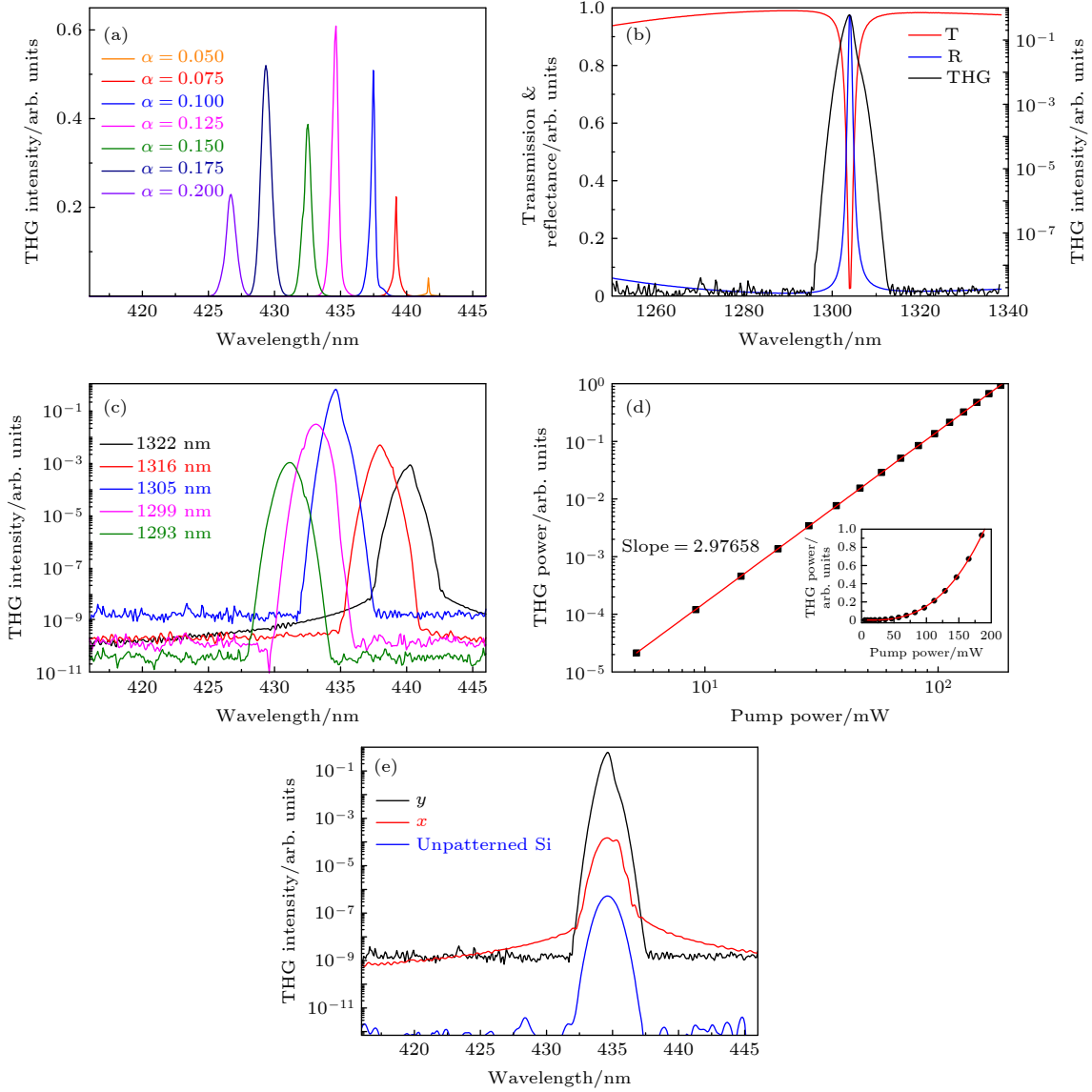


图 5 (a) THG 强度与不对称参数 α 的关系; (b) 透射反射谱与 THG 的关系; (c) 泵浦波长与 THG 强度的关系; (d) 泵浦功率与 THG 功率的关系; (e) 电场偏振方向与 THG 强度的关系

Fig. 5. (a) Relationship between THG intensity and asymmetry parameters α ; (b) relationship between transmission and reflectance spectra and THG; (c) relationship between pump wavelength and THG intensity; (d) relationship between pump power and THG power; (e) relationship between polarization direction of electric field and THG intensity.

功率 $P_{3\omega}$ 可以表示为^[25]

$$P_{3\omega} \propto Q_{\text{nonrad}}^3 \left(\frac{\alpha/\alpha_{\text{cr}}}{\alpha^2/\alpha_{\text{cr}}^2 + 1} \right)^6 P_{\omega}^3. \quad (5)$$

由 (5) 式可知, 当 $\alpha = \alpha_{\text{cr}}$, $Q_{\text{rad}} = Q_{\text{nonrad}}$, 也就是非辐射损耗与辐射损耗相等时, 即满足临界耦合条件时, THG 转换效率最高. 当偏离临界耦合条件时, 转换效率会下降. 所以 THG 信号对非对称性的变化具有很高的灵敏度, 仅 75 nm 的变化会导致 THG 强度降低至少一个数量级. 图 5(b) 所示为透射反射谱与 THG 的关系, 可以看到, THG 的

峰值正好与透射谱共振谷对应, 表明由 BIC 转变为准 BIC 引起的共振可以增强 THG. 图 5(c) 所示为 THG 强度与泵浦波长之间的关系, 随着泵浦波长的改变, THG 强度先增强后逐渐降低, 泵浦波长变化几纳米可以使 THG 强度改变至少一个数量级, 并且当泵浦波长在共振波长位置时, THG 强度达到最大, 这同样表明由 BIC 转变为准 BIC 引起的共振可以增强 THG. THG 强度与场局域有关, 局域场越大, THG 强度越大, 当泵浦波长位于共振谷值时, 对称保护型 BIC 转化为准 BIC, 激发

出一个高 Q 共振, 并通过其强烈的局域场对结构中的 THG 进行增强, THG 达到最大值. 图 5(d) 所示为泵浦功率和 THG 功率之间的关系, 随着泵浦功率的增加, THG 功率逐渐增加, 并且增加的速度逐渐加快. THG 的转换效率 η 的计算公式为^[26]

$$\eta = \frac{P_{3\omega}}{P_{\omega}} = \frac{9\omega^2 L^2}{\varepsilon_0^2 c^4 n_{\omega}^3 n_{3\omega}} |\chi_{\text{eff}}^{(3)}|^2 \left(\frac{P_{\omega}}{S}\right)^2, \quad (6)$$

其中 L 为光在介质中的传播距离, n_{ω} 和 $n_{3\omega}$ 是泵浦光和 THG 的折射率, S 是光束面积, $\chi_{\text{eff}}^{(3)}$ 是材料的三阶非线性极化率, c 是真空中光速, ε_0 是真空介电常数, ω 是泵浦光的频率. 由此可以得到 $P_{3\omega} \propto P_{\omega}^3$, 所以泵浦功率与 THG 功率为三阶关系. 在模拟中

$$P_{\omega} = I_{\omega} S_{\text{unit}}, \quad (7)$$

$$I = \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*/2), \quad (8)$$

其中 I_{ω} 是峰值泵浦光强, S_{unit} 是结构原胞的面积, \mathbf{E} 是泵浦光电场, \mathbf{H} 是泵浦光磁场. 模拟时通过改变泵浦光电场振幅调节泵浦功率, 结果如图 5(d) 所示, 黑色的圆点表示模拟得到的数据, 红色曲线为计算拟合得到的, 图中插图表明泵浦功率与 THG 功率为三阶关系, 当 x 轴和 y 轴同时取对数坐标时, 可以发现泵浦功率的对数与 THG 功率的对数呈线性关系, 斜率为 2.97658, 接近理论值 3. 图 5(e) 所示为电场的偏振方向与 THG 强度的关系, 可以看到, 当泵浦光的电场方向沿结构短轴方向时, THG 的强度最强, 与泵浦到相同厚度的 Si 膜相比, THG 强度增强了 6 个数量级. 通过图 3(d) 可知, 打破结构对称性产生的共振具有偏振依赖性, 由于共振的强局域场, 所以与泵浦光的电场方向沿结构长轴方向相比, THG 强度增强了 3 个数量级. 这同样证明了准 BIC 引起的共振可以增强 THG 强度. 综上所述, 对于本文提出的结构, 影响 THG 转换效率的因素有泵浦功率、泵浦波长、泵浦光的偏振角度、结构不对称参数 α . 当电场偏振方向沿结构短轴方向, 泵浦波长位于共振波长位置的泵浦光垂直入射到不对称参数为 0.125 的结构上时, THG 的转换效率可达约 2.6×10^{-6} .

4 结 论

本文提出将 BICs 与非线性响应相结合, 通过破坏结构原胞的对称性产生的高 Q 共振来增强

结构的三阶非线性效应. 数值模拟证明了打破硅纳米颗粒阵列的原胞对称性时, BIC 转变为准 BIC, 透射谱会产生一个窄共振谷, 共振波长及线宽对不对称参数 α 具有强烈的依赖性, Q 值与不对称参数 α 的平方遵循反比的关系, 并且当泵浦波长位于高 Q 共振波长的位置时, 由于光场的局域增强, 使得结构的三阶非线性效应得到提高. 当不对称参数为 0.125 时, THG 强度最强, 与相同厚度的 Si 膜相比, THG 强度增强了 6 个数量级, 改变泵浦光的电场偏振方向可使得 THG 强度改变 3 个数量级. 同时结构的 THG 转换效率可以达到约 2.6×10^{-6} . 这种将 BICs 与非线性相结合的方法为硅基非线性光学器件设计提供了新的途径.

参考文献

- [1] Staude I, Pertsch T, Kivshar Y S 2019 *ACS Photonics* **6** 802
- [2] Geffrin J M, García-Cámara B, Gómez-Medina R, Albella P, Froufe-Pérez L S, Eyraud C, Litman A, Vaillon R, González F, Nieto-Vesperinas M 2012 *Nat. Commun.* **3** 1171
- [3] Kuznetsov A I, Miroshnichenko A M, Brongersma M L, Kivshar Y S, Lukyanchuk B 2016 *Science* **354** aag2472
- [4] Kruk S, Kivshar Y S 2017 *ACS Photonics* **4** 2638
- [5] Rybin M V, Koshelev K L, Sadrieva Z F, Samusev K B, Bogdanov A A, Limonov M F, Kivshar Y S 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 243901
- [6] Kodigala A, Lepetit T, Gu Q, Bahari B, Fainman Y, Kante B 2017 *Nature* **541** 196
- [7] Hsu C W, Zhen B, Stone A D, Joannopoulos J D, Soljacic M 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16048
- [8] Plotnik Y, Peleg O, Dreisow F, Heinrich M, Segev M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 183901
- [9] Rybin M, Kivshar Y 2017 *Nature* **541** 164
- [10] Koshelev K, Lepeshov S, Liu M, Bogdanov A, Kivshar Y 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 193903
- [11] Boyd R, Fischer G L 2001 *Encyclopedia of Materials: Science and Technology* (Oxford: Elsevier) p6237
- [12] Doeleman H M, Francesco M, Wouter D H, Andrea A, Femius K A 2018 *Nat. Photonics* **12** 397
- [13] Shorokhov A S, Melik-Gaykazyan E V, Smirnova D A, Hopkins B, Chong K E, Choi D Y, Shcherbakov M R, Miroshnichenko A E, Neshev D N, Fedyanin A A 2016 *Nano Lett.* **16** 4857
- [14] Rutckaia V, Heyroth F, Novikov A, Shaleev M, Petrov M I, Schilling J 2017 *Nano Lett.* **17** 6886
- [15] Gao Y, Fan Y, Wang Y, Yang W, Song Q, Xiao S 2018 *Nano Lett.* **18** 8054
- [16] Barclay P E, Srinivasan K, Painter O 2005 *Opt. Express* **13** 801
- [17] Qin F, Liu Y, Meng Z M, Li Z Y 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 053108
- [18] Kim H, Yu M 2017 *Opt. Lett.* **42** 1305
- [19] Li H, Stellingma D P, Qiu Y, Sun Q, Li J 2019 *Opt. Express* **27** 30931
- [20] Yang Y, Wang W, Boulesbaa A, Kravchenko I I, Briggs D P, Poretzky A, Geohegan D, Valentine J 2015 *Nano Lett.* **15**

7388

- [21] Chen S, Rahmani M, Li K F, Miroshnichenko A E, Shuang Z 2018 *ACS Photonics* **5** 1671
- [22] Reineke B, Sain B, Zhao R, Carletti L, Liu B, Huang L, Angelis C D, Zentgraf T 2019 *Nano Lett.* **19** 6585
- [23] Sakoda K 2005 *Optical Properties of Photonic Crystals* (Berlin: Springer) p44
- [24] Maier S A 2006 *Opt. Express* **14** 1957
- [25] Koshelev K, Tang Y, Li K, Li K, Choi D Y, Li G, Kivshar Y 2019 *ACS Photonics* **6** 1639
- [26] Shi S X, Chen G F, Zhao W 2012 *Nonlinear Optics* (Xi'an: Xi'an University of Electronic Science and Technology Press) p194 (in Chinese) [石顺祥, 陈国夫, 赵卫 2012 非线性光学 (西安: 西安电子科技大学出版社) 第194页]

Enhancing third-harmonic generation by quasi bound states in continuum in silicon nanoparticle arrays^{*}

Du Qian Chen Yi-Hang[†]

(Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, School of Physics and Telecommunication Engineering, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 18 February 2021; revised manuscript received 25 March 2021)

Abstract

Subwavelength artificial structures of high refractive index dielectrics provide an effective way to control and manipulate light on a nanoscale by enhancing electric and magnetic fields. This kind of structure usually has low absorption loss, but its performance is also limited by radiation loss, which will reduce the efficiency of its nonlinear response. This problem can be solved by using bound states in the continuum (BICs). The BICs are a kind of unconventional state which is in continuous domain but remains localized. They exist within a light cone and have an infinite quality factor. By combining BICs with nonlinear optics, high- Q resonances from quasi-BICs are used to excite and enhance the nonlinear response. The simulation shows that when the symmetry of the unit cell of the silicon nanoparticle arrays is broken, the BIC become the quasi-BIC, and the transmission spectrum will produce a high- Q narrow resonance valley. The resonance has polarization dependence of electric field. With the change of pump wavelength, the third-harmonic generation (THG) intensity first increases and then decreases gradually. The pump wavelength changed by several nanometers can change THG intensity by at least one order of magnitude. When the pump wavelength is adjusted to the resonance wavelength, the nonlinearity is significantly enhanced as a result of the strong field localization. The THG intensity is highly sensitive to the variation of asymmetric parameters. Only a change of 75 nm will result in a decrease of THG intensity by at least one order of magnitude. There is a third-order relationship between pump power and THG power. For the proposed structure, the factors affecting the conversion efficiency of THG include pump power, pump wavelength, polarization angle of pump light, and asymmetry parameter. When the polarization direction of electric field is along the short axis of the structure and the pump light at resonance wavelength is vertically incident to the structure with an asymmetric parameter of 0.125, the conversion efficiency of THG can be increased to $\sim 2.6 \times 10^{-6}$ and the intensity of THG is increased by six orders of magnitude. The results are expected to be applied to designing the silicon-based optical nonlinear devices.

Keywords: high refractive index dielectric materials, quasi bound states in the continuum, third-harmonic generation

PACS: 42.65.-k, 42.65.Ky, 42.70.Nq

DOI: 10.7498/aps.70.20210332

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2015A030311018, 2017A030313035) and the Science and Technology Program of Guangzhou, China (Grant No. 2019050001).

[†] Corresponding author. E-mail: yhchen@scnu.edu.cn