

# 探究四聚体超表面中多极准连续域 束缚态的调控机制\*

孟祥裕<sup>1)2)3)</sup> 李涛<sup>2)3)</sup> 余彬彬<sup>2)3)†</sup> 邵永航<sup>1)‡</sup>

1) (云南师范大学, 云南省光电信息技术重点实验室, 昆明 650500)

2) (国科温州研究院(温州生物材料与工程研究所), 温州市生物物理重点实验室, 温州 325000)

3) (瓯江实验室(再生调控与眼脑健康浙江省实验室), 温州 325000)

(2024年2月18日收到; 2024年3月5日收到修改稿)

本文设计了由四聚长方体组成的全介质超表面, 其中每个长方体刻蚀两个椭圆柱并填充空气. 当分别为超表面单独引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动时, 可在近红外波段产生稳健的准连续域束缚态模式(quasi-bound states in the continuum). 通过测量准 BIC (quasi-BIC) 模式的谐振波长, 计算准 BIC 模式的  $Q$  因子 (quality factor) 与不对称参数的关系, 可进一步证实不对称参数对准 BIC 共振频率和  $Q$  因子的可调节性. 在此基础上, 当同时引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动时, 可获得 5 个高  $Q$  因子的准 BIC 模式. 共振峰的数量、位置以及  $Q$  因子都可通过调整面内破缺、位移扰动和周期扰动的程度进行调控. 该超表面的设计可为传感器的多参数传感以及灵敏度等性能的提升提供一种全新思路.

**关键词:** 超表面, 准连续域束缚态, 对称破缺

**PACS:** 78.67.Pt, 78.20.Bh

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240272

## 1 引言

经典力学认为, 当电子具有足够的动能, 会逃离其所在的原子系统. 然而, 冯诺依曼和尤金维格纳于 1929 年在量子力学领域提出<sup>[1]</sup>, 有些具有足够能量的电子仍被束缚于系统之中, 其所处的状态被称为“连续域束缚态”(bound states in the continuum, BIC). 这一概念后来被发现存在于电磁波<sup>[2-4]</sup>、声波<sup>[5-7]</sup>、水波<sup>[8-10]</sup>、以及固体中的弹性波中<sup>[11]</sup>, 是一类频率位于辐射连续域但却并不具有辐射的电磁本征态.

理想 BIC 的  $Q$  因子 (quality factor) 是无限

大的, 存在于无损和无限大的结构中, 在电磁频谱上是一种无法直接观测的零带宽谐振. 但是, 受制于加工精度、材料损耗、有限尺寸器件以及制造缺陷等问题, 在实际测试中只能观测到具有有限  $Q$  因子的准 BIC (quasi-BIC) 谐振模式.

BIC 虽然位于辐射连续域内, 但与远场辐射连续域完全解耦, 按照解耦方式可以分为对称保护型 BIC (symmetry protected BIC, SP-BIC) 以及偶发型 BIC (accidental BIC) 两种类型. 对称保护型 BIC 是基于  $C_2$  对称即中心对称的微结构, 可约束辐射连续域中电磁场具有偶对称的共振模, 使其与奇对称的辐射模完全正交, 导致谐振模式与辐射模式之间存在差异从而与远场辐射去耦形成 BIC;

\* 国家自然科学基金 (批准号: 62365017)、浙江省自然科学基金 (批准号: LZ23A040004) 和云南省优秀青年基金 (批准号: 202301AW070001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: pai3\_14@ucas.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: taiyonghang@ynnu.edu.cn

如果破坏结构的  $C_2$  对称, BIC 的共振模会和辐射模发生耦合产生辐射泄漏, 形成准 BIC, 此时可以用不对称参数来衡量结构  $C_2$  对称的破坏程度, 不对称参数越大, 结构  $C_2$  对称的破坏程度也越大. 而偶发型 BIC 是结构中多种电磁模式互相干涉相消, 或者一种电磁模式的不同波互相干涉相消, 从而无法与远场辐射耦合. 通过调节结构参数可以控制干涉相消的程度, 当辐射不能完全相消而发生泄漏时, 即形成准 BIC.

超表面 (metasurface) 作为一种人工设计的亚波长尺寸的二维平面材料, 可灵活调控入射电磁波的振幅、相位、偏振, 具有强大的电磁调控能力<sup>[12]</sup>, 被广泛应用于滤波<sup>[13]</sup>、吸收<sup>[14]</sup>和传感<sup>[15-18]</sup>等各个领域. 全介质材料在光学波段具有极低的吸收损耗, 具有较高的热损伤阈值和稳定性, 且容易激发高  $Q$  值共振, 并且电共振模式和磁共振模式可同时在结构单元内部产生, 有助于增强光和物质的相互作用. 介质材料的制备可以与 CMOS 工艺兼容, 显著降低全介质超表面的制造成本. 通过改进微纳加工技术以及调整辐射场分布可以抑制辐射损耗, 其中 BIC 是减弱全介质超构表面的辐射损耗从而获取高  $Q$  因子共振的有效手段, 并且已经应用在纳米激光器、生物传感器和增强非线性谐波产生等方面<sup>[19]</sup>. 这些优势使得全介质超表面在光学应用和光学器件方面已经取得丰硕成果.

2018 年, Koshele 等<sup>[20]</sup>通过打破全介质超表面的不同面内对称结构进行研究, 借助并矢格林函数推导出准 BIC 的  $Q$  因子与不对称参数的二次方成反比. 同年, Tittl 等<sup>[12]</sup>通过改变双椭圆柱结构的椭圆旋转角, 激发出一个高  $Q$  因子共振, 并通过同时调控两个椭圆柱长轴与短轴的大小, 实现对共振峰位置的连续可调谐. 2019 年, Mikheeva 等<sup>[21]</sup>制作出由两个不同大小的矩形棒阵列组成的超表面, 将两个矩形棒的“长度差”转化为不对称参数  $\alpha$  并模拟透射率对波长和  $\alpha$  的依赖关系. 2020 年, Chen 和 Fan<sup>[22]</sup>提出一种太赫兹超构表面是由单层石墨烯、LiTaO<sub>3</sub> 裂隙双矩形条阵列、铁电相变材料钛酸锶薄膜构成, 通过改变矩形条长度的差值来打破面内对称性, 从而激发尖锐的准 BIC 共振峰. 2021 年, Cai 等<sup>[23]</sup>提出由非晶硅组成的四聚长方体超构表面, 通过移动四聚体元胞使其偏离结构单元的对称中心, 产生两个准 BIC 共振峰. 2022 年, Yang 等<sup>[24]</sup>提出对长方体超表面结构中挖去 4 个长方体,

挖去的部分填充空气, 其中挖空的 4 个长方体分为两组, 每组的两个长方体的大小相同, 并与另外一组长方体的大小不同. 此结构激发出 4 个 Fano 共振峰, 并通过验证  $Q$  因子与不对称参数的依赖关系, 证实其中两个 Fano 共振峰为准 BIC 共振峰.

虽然准 BIC 具有极窄的带宽且非常适合设计高  $Q$  因子的超表面, 但现有的大多数研究仅能产生单个准 BIC, 且大多只采用一种破缺形式. 若能产生多个且可调控的准 BIC, 有望提升准 BIC 在传感器等其他领域的应用价值. 例如在光谱学领域中, 如果借助超表面可以实现对多个光谱共振峰的信号增强, 则可以极大提高光谱的识别能力, 并减少后期光谱数据的处理分析步骤. 本文首先通过对四聚长方体超表面结构分别引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动, 分别计算这 3 种情况下  $Q$  因子与不对称参数的关系, 并对产生的准 BIC 模式进行多极分解计算, 阐明准 BIC 模式形成的物理机制, 分析不同种类的破缺对产生的准 BIC 模式的影响. 在此基础上, 为超表面结构同时引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动后获得 5 个准 BIC 模式, 通过多极计算分析了 5 个准 BIC 形成的物理机制. 该超表面产生准 BIC 模式的共振峰的数量、位置以及  $Q$  因子都可通过调整面内破缺、位移扰动和周期扰动的程度进行调控为多带 BIC 超表面和高灵敏度传感器的设计提供了参考依据.

## 2 结构设计

本文所设计超表面是由 4 个几何参数相同的非单晶硅长方体组成, 每个长方体内刻蚀两个椭圆柱后填充空气, 排列成一个  $2 \times 2$  的超表面结构, 超表面单元的中心为  $O$ , 沿  $x$  方向的周期长度为  $P_x$ , 沿  $y$  方向的周期长度为  $P_y$ . 非单晶硅长方体的宽度  $w$ , 厚度  $h$ , 相邻长方体之间分别的间隔为  $g$ , 椭圆柱的长短轴分别为  $a$  和  $b$ , 其沿顺时针的旋转角  $\theta$ . 另外, 长方体的中心与单元格的中心重叠分别位于  $O_1, O_2, O_3$  和  $O_4$ . 如图 1(a) 所示, 4 个纳米柱的俯视图均为正方形, 其中两个椭圆的中心分别位于将正方形对半等分后的两个矩形的中心.

本文模拟采用 COMSOL Multiphysics 6.0 软件, 在超表面结构的  $x$  方向和  $y$  方向上施加周期性边界条件进行数值计算, 在超表面结构的最上层和最下层添加完美匹配层.

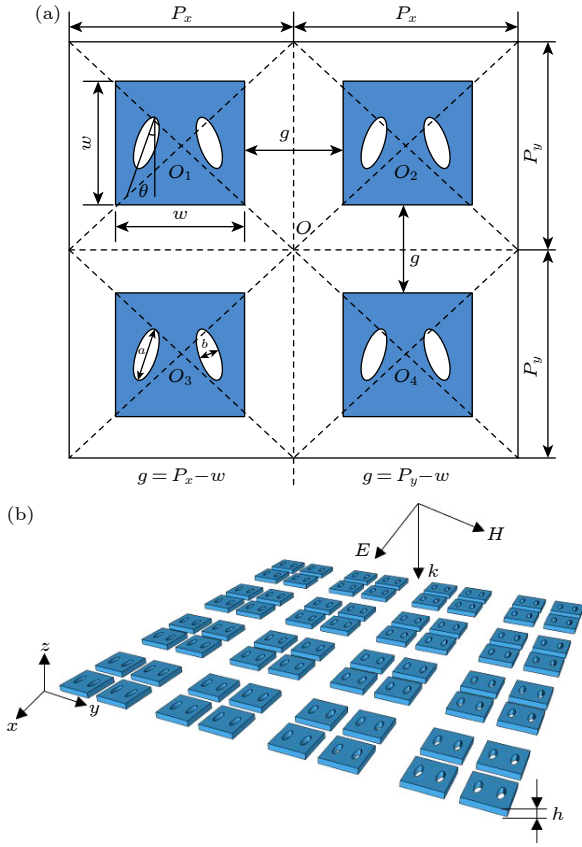


图 1 (a) 超表面单元平面俯视图; (b)  $x$  偏振光正入射超表面示意图

Fig. 1. (a) Top view of metasurface unit; (b) schematic of the metasurface with  $x$ -polarized normal incidence light.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 面内对称破缺超表面透射率曲线分析

当旋转角  $\theta = 0^\circ$  时, 超表面单元的物理结构具有  $C_2$  对称. 而在  $C_2$  对称性保护下, 某些特定对称类型的束缚模与其他对称类型的连续模之间无法发生耦合. 只有破坏结构  $C_2$  对称, 打破结构的面内对称, 才会导致 BIC 与辐射连续体发生耦合, 泄漏成准 BIC. 本文通过给空气椭圆柱引入不为 0 的旋转角  $\theta$ , 来实现超表面结构的面内破缺. 为同时得到高  $Q$  值的准 BIC 共振, 结合非单晶硅在 1000—2000 nm 波段的大致折射率为 3.42, 本工作所设计的结构各参数为:  $P_x = 660$  nm,  $P_y = 660$  nm,  $w = 400$  nm,  $h = 200$  nm,  $g = 260$  nm,  $a = 160$  nm,  $b = 60$  nm,  $\theta = 30^\circ$ .

此时的不对称参数  $\alpha = \sin\theta$ , 当  $\theta$  不同时, 仿真得到超表面的透射谱如图 2(b) 所示. 当椭圆柱的旋转角  $\theta = 10^\circ$  时, 产生的共振峰位于 1282 nm 处, 随着椭圆柱的旋转角  $\theta$  逐渐增大到  $45^\circ$  时, 共

振峰的波长蓝移 29 nm, 椭圆柱的旋转角  $\theta = 45^\circ$  时, 产生的共振峰位于 1253 nm 处.

本文采用经典 Fano 公式, 对不同角度下的准 BIC 的透射率曲线进行拟合:

$$T(\omega) = T_0 + A_0 \frac{[q + 2(\omega - \omega_0)/\tau]^2}{1 + [2(\omega - \omega_0)/\tau]^2}, \quad (1)$$

其中  $T_0$  为传输偏置,  $A_0$  为连续-离散耦合常数,  $q$  代表 Breit-Wigner-Fano 参数,  $\omega_0$  是共振波长,  $\tau$  是共振线宽. 准 BIC 的  $Q$  因子为  $Q = \omega_0/\tau$ .  $Q$  因子的计算结果与其对应的不对称参数  $\alpha$  的依赖关系如图 2(c) 所示,  $Q$  因子与  $\alpha$  成二次方反比关系, 这证实了对超表面进行面内破缺产生的 Fano 共振峰为准 BIC 模式. 当椭圆柱的旋转角  $\theta = 10^\circ$  时, 所产生准 BIC 的  $Q$  因子高达 16940. 当椭圆柱的旋转角逐渐增大, 准 BIC 的  $Q$  因子开始下降. 当椭圆柱的旋转角  $\theta = 45^\circ$  时, 产生的准 BIC 的  $Q$  因子为 1454. 这表明可以通过调节不对称参数  $\alpha$ , 来对准 BIC 的  $Q$  因子进行调控. 反之当椭圆柱的旋转角  $\theta$  减小, 准 BIC 的共振峰逐渐变窄,  $Q$  因子上升. 当  $\theta = 0^\circ$  时, 该共振峰会消失, 此时有限  $Q$  因子的准 BIC 转换成无限  $Q$  因子的 BIC.

由于超表面的厚度  $h$  不影响结构的对称性, 因此可通过调节  $h$  来独立调谐准 BIC 的谐振频率. 首先将超表面的结构参数设定为:  $P_x = 660$  nm,  $P_y = 660$  nm,  $w = 400$  nm,  $h = 200$  nm,  $g = 260$  nm,  $a = 160$  nm,  $b = 60$  nm,  $\theta = 30^\circ$ . 当  $h$  从 180 nm 增大到 220 nm 时, 仿真得到超表面的透射谱如图 2(d) 所示, 准 BIC 的共振峰波长发生红移, 而线宽几乎保持不变.

为了定量分析准 BIC 模式谐振形成的物理机制, 本文计算了电偶极子 (electric dipole, ED)、磁偶极子 (magnetic dipole, MD)、电四极子 (electric quadrupole, EQ)、磁四极子 (magnetic quadrupole, MQ) 和环形偶极子 (toroidal dipole, TD) 等在笛卡尔坐标系中不同多极矩的散射功率 ( $I$ ). 计算公式如下<sup>[25]</sup>:

$$\text{ED} : p = (1/i\omega) \iiint J dv, \quad (2)$$

$$I_p = (2\omega^4/3c^3) |p|^2, \quad (3)$$

$$\text{MD} : m = (1/2c) \iiint (r \times J) dv, \quad (4)$$

$$I_m = (2\omega^4/3c^3) |m|^2, \quad (5)$$

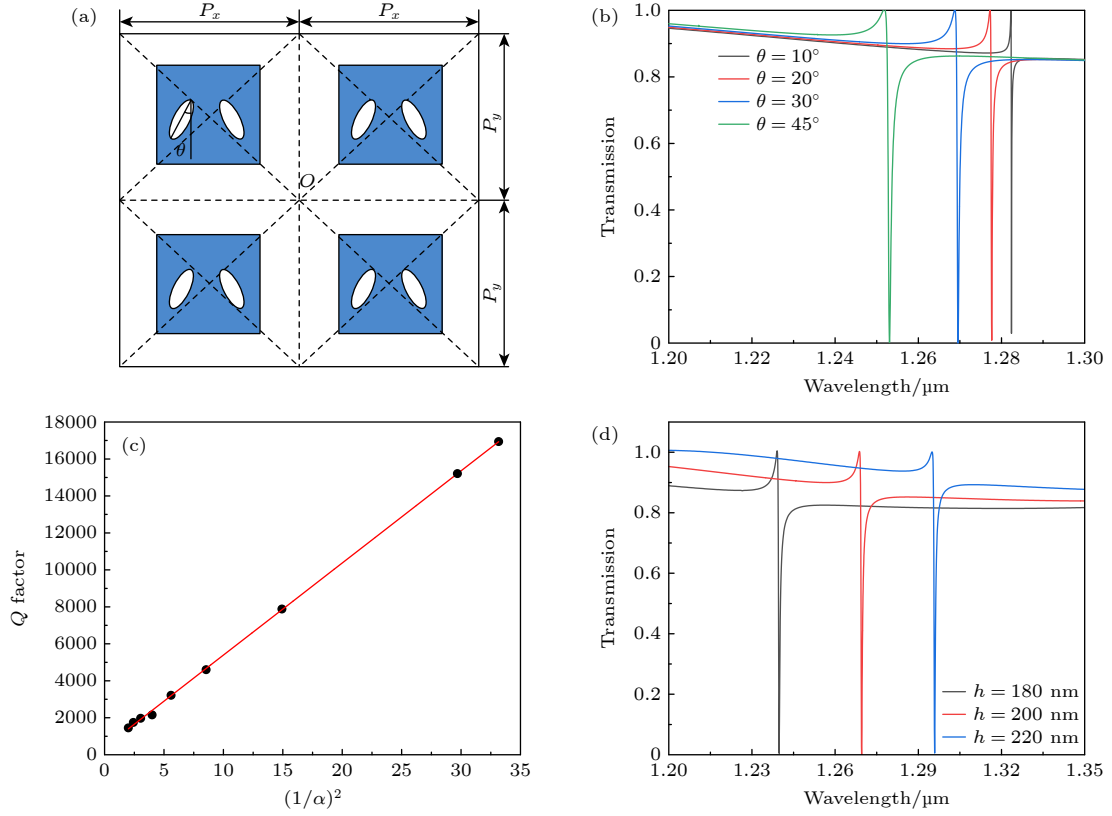


图 2 (a) 面内破缺后超表面单元平面俯视图; (b) 旋转角  $\theta$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线; (c) 准 BIC 的  $Q$  因子随  $1/\alpha^2$  的变化曲线; (d) 厚度  $h$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线

Fig. 2. (a) Top view of the metasurface unit after in-plane symmetry perturbation; (b) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different rotation angle  $\theta$ ; (c)  $Q$ -factors of QBIC plotted as functions of  $1/\alpha^2$ ; (d) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different thickness  $h$ .

$$\text{TD} : T = (1/10c) \iiint [(r \cdot J) r - 2r^2 J] dv, \quad (6)$$

$$I_T = (2\omega^6/3c^5) |T|^2, \quad (7)$$

$$\text{EQ} : \text{EQ}_{\alpha\beta} = (1/2i\omega) \iiint [(r_\alpha J_\beta + r_\beta J_\alpha) - 2(r \cdot J) \delta_{\alpha\beta}/3] dv, \quad (8)$$

$$I_{\text{EQ}} = (\omega^6/5c^5) \sum |\text{EQ}_{\alpha\beta}|^2, \quad (9)$$

$$\text{MQ} : \text{MQ}_{\alpha\beta} = (1/3c) \iiint [(r \times J)_\alpha r_\beta + (r \times J)_\beta r_\alpha] dv \quad (10)$$

$$I_{\text{MQ}} = (\omega^6/40c^5) \sum |\text{MQ}_{\alpha\beta}|^2, \quad (11)$$

式中,  $\mathbf{r}$  为位置矢量,  $\mathbf{J}$  为体积电流密度,  $\omega$  是入射光频率,  $c$  为真空中的光速,  $i$  为单位虚数,  $dv$  是对一个超表面单元整体进行的体积分,  $\delta_{\alpha\beta}$  是  $\delta$  函数,  $\alpha, \beta = x, y, z$ . 对多极分解进行计算得到的各个多极矩的散射功率可以体现不同多极矩, 以及各个多

极矩在  $x, y, z$  方向上对该谐振的贡献.

当椭圆旋转角  $\theta = 30^\circ$ , 对准 BIC 模式进行多极分解的计算结果如图 3(a) 所示, 可以看出该准 BIC 模式是由磁偶极子诱导产生. 其他角度下的多极分解计算结果, 总体上与  $30^\circ$  时一致, 都是由磁偶极子主导. 通过对磁偶极子的散射功率的  $x, y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 3(b) 所示, 磁偶极子的散射功率的  $z$  分量占主导地位, 且在数值上接近磁偶极子的散射功率. 准 BIC 模式的电磁场分布图如图 3(c), (d) 所示, 黑色锥体表示位移电流密度, 白色箭头表示磁场矢量. 准 BIC 模式在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 3(c) 所示, 在  $x$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向相同, 在  $y$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向也相同, 位移电流以头尾的方式分布, 这是磁偶极子共振的特征. 这表明每个长方体都产生了沿  $z$  方向且方向相同的磁偶极子, 这与多极分解计算的结果以及图 3(d) 中绘制的  $y$ - $z$  平面的磁场矢量的方向一致.

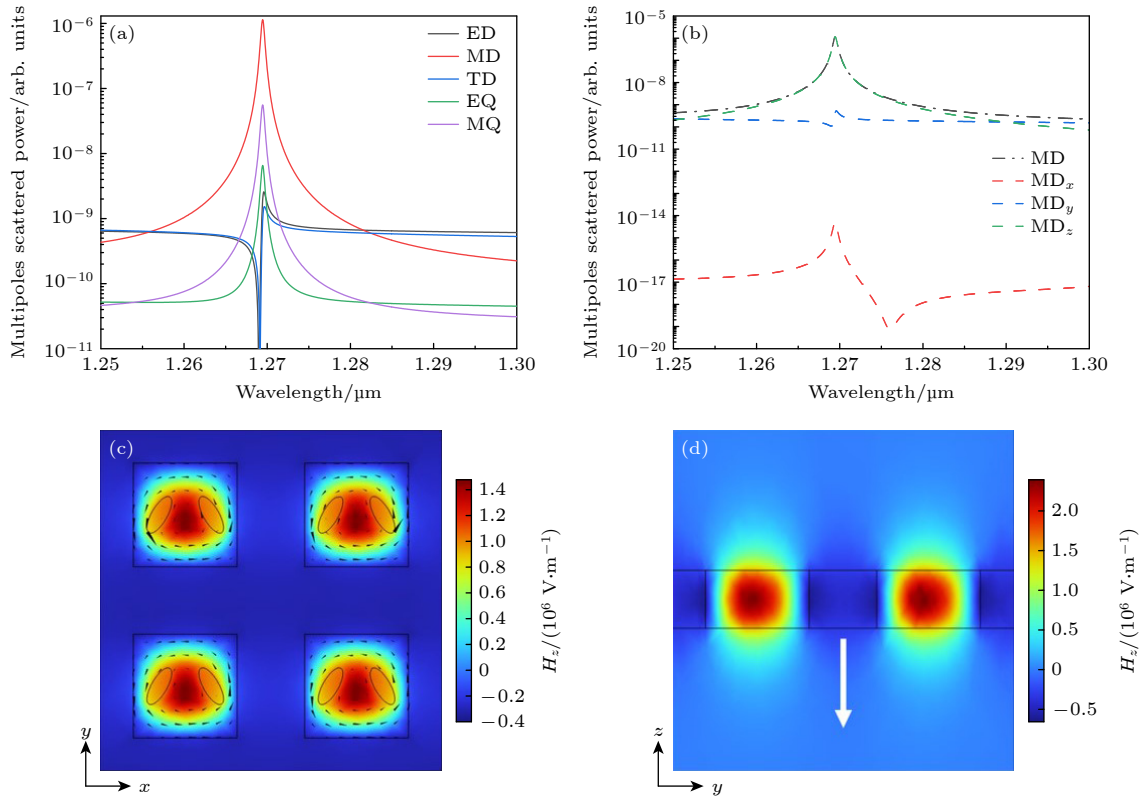


图 3 (a)  $x$  偏振光入射时的多极分解结果, ED, MD, TD, EQ, MQ 分别表示电偶极子、磁偶极子、环偶极子、电四极子、磁四极子; (b) 磁偶极子的散射功率在  $x, y, z$  方向上的分量; (c)  $x$ - $y$  平面的电磁场分布; (d)  $y$ - $z$  平面的电磁场分布

Fig. 3. (a) Multipole decomposition results during  $x$ -polarized normal incidence light, ED, MD, TD, EQ, MQ represent electric dipole, magnetic dipole, toroidal dipole electric, quadrupole and magnetic quadrupole, respectively; (b)  $x, y$  and  $z$  components of the MD; (c) electromagnetic field distribution in the  $x$ - $y$  plane; (d) electromagnetic field distribution in the  $y$ - $z$  plane.

### 3.2 引入位移扰动后超表面透射率曲线分析

除了给椭圆引入不为 0 的旋转角  $\theta$  打破面内对称以外, 还可以通过为超表面引入位移扰动来获得具有高  $Q$  因子的准 BIC 共振<sup>[23,26]</sup>. 引入位移扰动不是直接破坏每个超表面结构的  $C_2$  对称, 而是通过改变四聚体在各个单元中的相对位置来对整个超表面阵列的排布产生扰动. 此时四聚体之间的间距由  $g$  变为  $g'$ , 四聚体间距的变化为  $\Delta g$ , 即  $\Delta g = g - g'$ . 为同时得到高  $Q$  值的准 BIC 共振, 结合非单晶硅在 1000—2000 nm 波段的大致折射率为 3.42, 本工作所设计的结构各参数为:  $P_x = 660 \text{ nm}$ ,  $P_y = 660 \text{ nm}$ ,  $w = 400 \text{ nm}$ ,  $h = 200 \text{ nm}$ ,  $g' = 220 \text{ nm}$ ,  $\Delta g = 40 \text{ nm}$ ,  $g = 260 \text{ nm}$ ,  $a = 160 \text{ nm}$ ,  $b = 60 \text{ nm}$ ,  $\theta = 0^\circ$ .

此时的不对称参数  $\beta = \Delta g/g$ , 当  $\Delta g$  不同时, 仿真得到超表面的透射谱如图 4(b) 所示. 由图可知, 本文通过改变四聚体在各单元中的相对位置, 产生了两个准 BIC 模式. 当  $\Delta g$  发生变化时, 准 BIC 模式 1 的共振波长几乎没有发生改变仍位于

1411 nm 附近, 准 BIC 模式 2 的共振波长发生红移, 红移 31 nm 较为明显.

本文计算出不同  $\Delta g$  下产生的两个准 BIC 模式的  $Q$  因子与其对应的不对称参数  $\beta$  的依赖关系如图 4(c), (d) 所示. 两个准 BIC 模式的  $Q$  因子与  $\beta$  皆成二次方反比关系, 这证实了为超表面引入位移扰动后产生的两个 Fano 共振峰全都是准 BIC 模式. 当  $\Delta g = 40 \text{ nm}$  时, 产生的准 BIC 模式 1 的  $Q$  因子为 13715, 产生的准 BIC 模式 2 的  $Q$  因子为 1947. 当  $\Delta g$  逐渐增大, 产生的两个准 BIC 模式的  $Q$  因子都会开始下降, 这表明可以通过调节不对称参数  $\beta$ , 来实现对两个准 BIC 模式的  $Q$  因子同时调控.

由于超表面的厚度  $h$  不影响结构的对称性, 因此可通过调节  $h$  来独立调谐准 BIC 的谐振频率. 首先将超表面的结构参数设定为:  $P_x = 660 \text{ nm}$ ,  $P_y = 660 \text{ nm}$ ,  $w = 400 \text{ nm}$ ,  $h = 200 \text{ nm}$ ,  $g' = 180 \text{ nm}$ ,  $\Delta g = 80 \text{ nm}$ ,  $g = 260 \text{ nm}$ ,  $a = 160 \text{ nm}$ ,  $b = 60 \text{ nm}$ ,  $\theta = 0^\circ$ . 当  $h$  从 180 nm 增大到 220 nm 时, 仿真得到

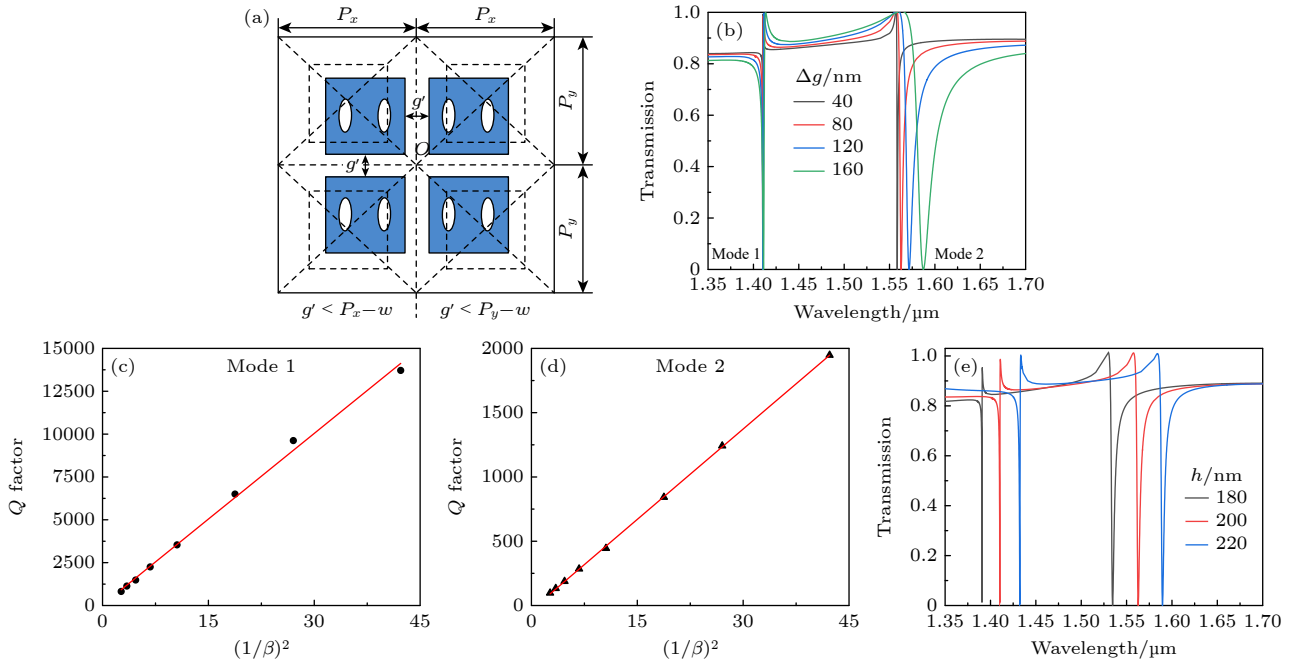


图 4 (a) 位移扰动后超表面单元平面俯视图; (b) 参数  $\Delta g$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线; (c) 准 BIC 模式 1 的  $Q$  因子随  $1/\beta^2$  的变化曲线; (d) 准 BIC 模式 2 的  $Q$  因子随  $1/\beta^2$  的变化曲线; (e) 厚度  $h$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线

Fig. 4. (a) Top view of the metasurface unit after displacement perturbation; (b) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different parameters  $\Delta g$ ; (c)  $Q$ -factors of QBIC mode 1 plotted as functions of  $1/\beta^2$ ; (d)  $Q$ -factors of QBIC mode 2 plotted as functions of  $1/\beta^2$ ; (e) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different thickness  $h$ .

超表面的透射谱如图 4(e) 所示, 两个准 BIC 的共振峰波长均发生红移, 而它们的线宽几乎保持不变。

当  $\Delta g = 40$  nm 时, 本文对准 BIC 模式 1 进行多极分解计算, 结果如图 5(a) 所示. 由图可知, 准 BIC 模式 1 主要是由电四极子和磁偶极子共同主导引起, 通过对准 BIC 模式 1 的磁偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 5(b) 所示, 可以看出磁偶极子的散射功率的  $y$  分量占主导地位, 且在数值上接近磁偶极子的散射功率. 准 BIC 模式在  $x$ - $z$  平面的电磁场分布如图 5(c) 所示, 位移电流在四聚体簇内  $x$  方向上相邻的长方体之间逆时针循环, 在四聚体簇间  $x$  方向相邻长方体之间顺时针循环, 位移电流以头尾的方式分布, 这是磁偶极子共振的特征, 并且磁偶极子共振的方向根据右手螺旋定则沿  $y$  方向, 这与多极分解计算的结果以及图 5(d) 中绘制的  $y$ - $z$  平面的磁矢量方向一致。

当  $\Delta g = 40$  nm 时, 本文对准 BIC 模式 2 进行多极分解计算, 结果如图 5(e) 所示, 可知准 BIC 模式 2 是由环偶极子主导引起. 通过对准 BIC 模式 2 的环偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 5(f) 所示, 环偶极子的散射功率的  $x$  分量占主导地位, 且在数值上接近环偶极子的散射功

率. 准 BIC 模式在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 5(g) 所示, 在  $x$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向相同, 而在  $y$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向不同. 这表明在  $y$  方向上的每对长方体产生了沿  $z$  方向且方向相反的磁偶极子. 准 BIC 模式在  $y$ - $z$  平面的电磁场分布如图 5(h) 所示, 可知方向相反的磁偶极子在  $y$ - $z$  平面上形成一个封闭的磁涡. 磁场矢量在四聚体簇内  $y$  方向上相邻长方体之间逆时针循环, 在四聚体簇间  $y$  方向上相邻长方体之间顺时针循环, 且磁场矢量以头尾的方式分布, 这是环形偶极子共振的特征, 并且根据右手螺旋定则环形偶极子的方向沿  $x$  方向, 这与多极分解计算的结果一致。

### 3.3 引入周期扰动后超表面透射率曲线分析

除了上文改变四聚体在各单元中的相对位置以外, 还可以通过为超表面引入周期扰动来获得具有高  $Q$  因子的准 BIC 共振 [27,28]. 本文首先改变了超表面在  $x$  方向上的周期长度, 此时四聚体在  $x$  方向上的间距由  $g$  变为  $g'_1$ , 四聚体在  $x$  方向上间距的变化为  $\Delta g'_1$ , 即  $\Delta g'_1 = g - g'_1$ . 此时组成超表面的 4 个长方体纳米柱的中心仍然与单元格的中心

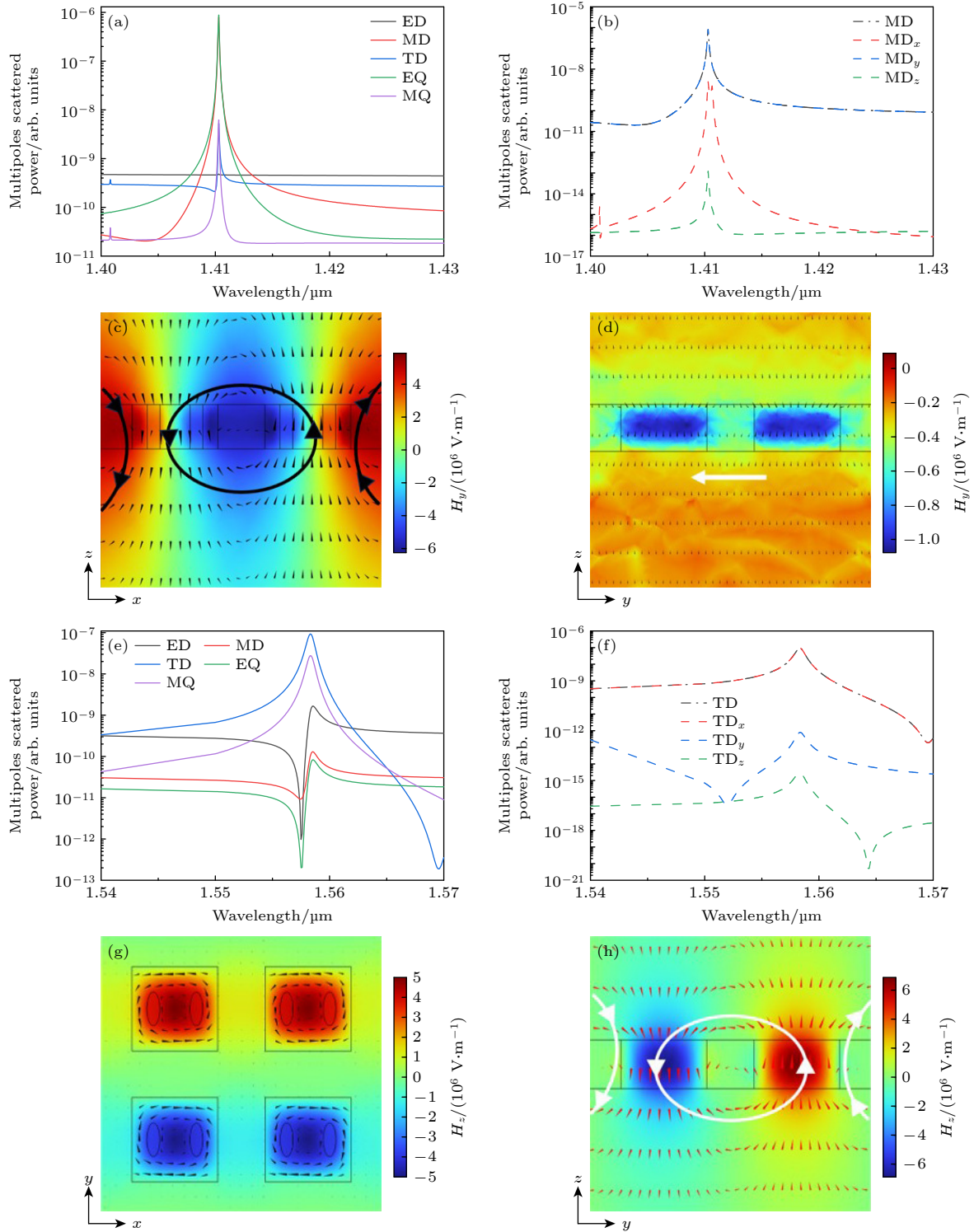


图 5 (a)  $x$  偏振光入射时产生的准 BIC 模式 1 的多极分解结果; (b) 准 BIC 模式 1 的磁偶极子的散射功率在  $x$ ,  $y$ ,  $z$  方向上的分量; (c) 准 BIC 模式 1 在  $x$ - $z$  平面的电磁场分布; (d) 准 BIC 模式 1 在  $y$ - $z$  平面的电磁场分布; (e)  $x$  偏振光入射时产生的准 BIC 模式 2 的多极分解结果; (f) 准 BIC 模式 2 的环偶极子的散射功率在  $x$ ,  $y$ ,  $z$  方向上的分量; (g) 准 BIC 模式 2 在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布; (h) 准 BIC 模式 2 在  $y$ - $z$  平面的电磁场分布

Fig. 5. (a) Multipole decomposition results of QBIC mode 1 during  $x$ -polarized normal incidence light; (b) components of the MD in the  $x$ ,  $y$ ,  $z$  directions of QBIC mode 1; (c) electromagnetic field distribution in the  $x$ - $z$  plane of QBIC mode 1; (d) electromagnetic field distribution in the  $y$ - $z$  plane of QBIC mode 1; (e) multipole decomposition results of QBIC mode 2 during  $x$ -polarized normal incidence light; (f) components of the TD in the  $x$ ,  $y$ ,  $z$  directions of QBIC mode 2; (g) electromagnetic field distribution in the  $x$ - $y$  plane of QBIC mode 2; (h) electromagnetic field distribution in the  $y$ - $z$  plane of QBIC mode 2.

重叠. 为同时得到高  $Q$  值的准 BIC 共振, 结合非单晶硅在 1000—2000 nm 波段的大致折射率为 3.42, 本工作所设计的结构各参数为:  $P_x = 700$  nm,  $P_y = 660$  nm,  $w = 400$  nm,  $h = 200$  nm,  $g'_1 = 300$  nm,  $\Delta g'_1 = 40$  nm,  $g = 260$  nm,  $a = 160$  nm,  $b = 60$  nm,  $\theta = 0^\circ$ .

此时的不对称参数  $\gamma_1 = \Delta g'_1/g$ , 当  $P_x$  的取值不同时, 仿真得到超表面的透射谱如图 6(b) 所示. 当  $P_x = 680$  nm 时, 产生的共振峰位于 1553 nm 处, 随着  $P_x$  继续增大, 共振峰的波长发生蓝移. 当  $P_x = 720$  nm 时, 产生的共振峰位于 1546 nm 处, 蓝移 7 nm.

本文计算了不同  $P_x$  下产生的准 BIC 模式的  $Q$  因子与其对应的不对称参数  $\gamma_1$  的依赖关系如图 6(c) 所示. 该准 BIC 模式的  $Q$  因子与  $\gamma_1$  皆成二次方反比关系, 这证实了改变超表面在  $x$  方向上的周期长度后产生的 Fano 共振峰是准 BIC 模式. 当  $P_x = 680$  nm 时, 产生的准 BIC 模式的  $Q$  因子为 7482.  $P_x = 750$  nm 时, 产生的准 BIC 模式的  $Q$  因

子为 470. 随着  $P_x$  逐渐增大, 产生的准 BIC 模式的  $Q$  因子开始下降, 这表明可以通过调节不对称参数  $\gamma_1$ , 来实现对准 BIC 模式的  $Q$  因子进行调控. 当  $P_x = 660$  nm 时, 该 Fano 共振峰消失, 即有限  $Q$  的准 BIC 转化为 BIC.

由于超表面的厚度  $h$  不影响结构的对称性, 因此可通过调节  $h$  来独立调谐准 BIC 的谐振频率. 首先将超表面的结构参数设定为:  $P_x = 700$  nm,  $P_y = 660$  nm,  $w = 400$  nm,  $h = 200$  nm,  $g'_1 = 300$  nm,  $\Delta g'_1 = 40$  nm,  $g = 260$  nm,  $a = 160$  nm,  $b = 60$  nm,  $\theta = 0^\circ$ . 当  $h$  从 180 nm 增大到 220 nm 时, 仿真得到超表面的透射谱如图 6(d) 所示, 准 BIC 的共振峰波长发生红移, 而线宽几乎保持不变.

当  $P_x = 700$  nm 时, 对准 BIC 模式进行多极分解的计算结果如图 7(a) 所示. 由图可知, 该准 BIC 模式是由环偶极子诱导产生. 通过对准 BIC 模式的环偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 7(b) 所示, 可以看出环偶极子的散射功率的  $x$  分量占主导地位, 且在数值上接近环偶极子的

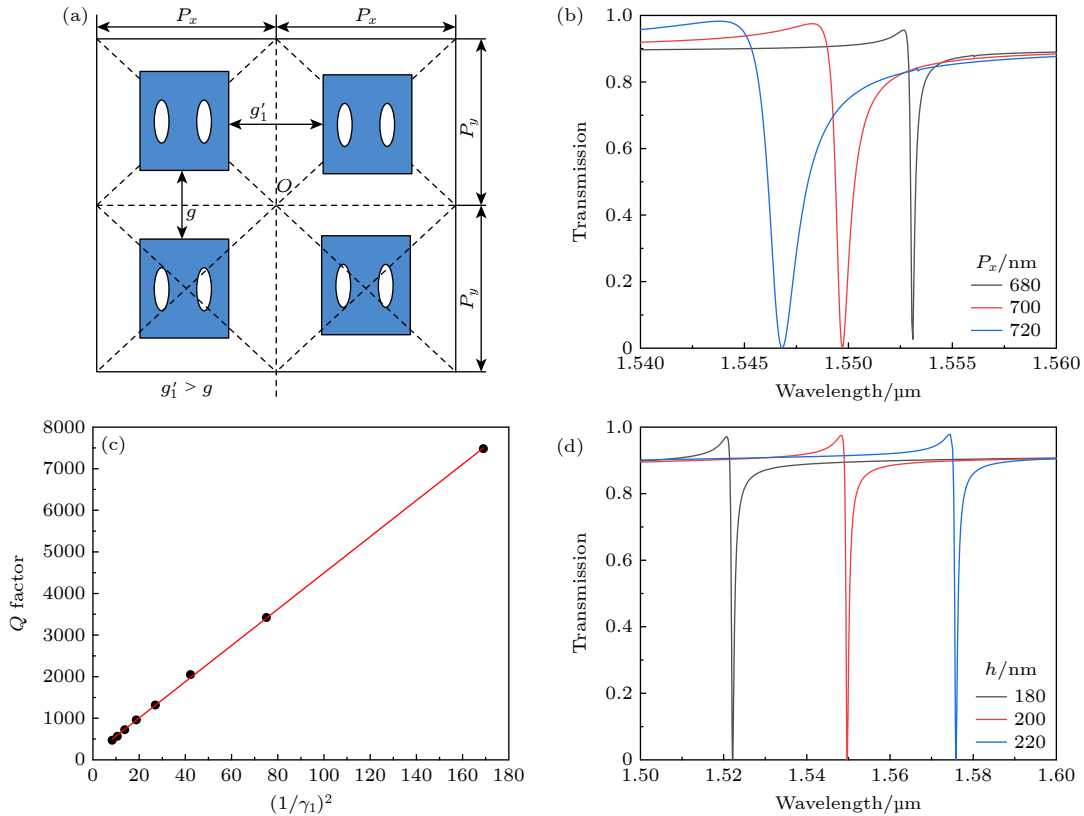


图 6 (a) 当  $P_x > P_y$  时, 超表面单元平面俯视图; (b)  $P_x$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线; (c) 准 BIC 模式的  $Q$  因子随  $1/\gamma_1^2$  的变化曲线; (d) 厚度  $h$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线

Fig. 6. (a) When  $P_x > P_y$ , the top view of the metasurface unit; (b) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different  $P_x$ ; (c)  $Q$ -factors of QBIC plotted as functions of  $1/\gamma_1^2$ ; (d) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different thickness  $h$ .



散射功率. 准 BIC 模式在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 7(c) 所示, 在  $x$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向相同, 而在  $y$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向不同. 这表明在  $y$  方向上的每对长方体产生了沿  $z$  方向且方向相反的磁偶极子. 准 BIC 模式在  $y$ - $z$  平面的电磁场分布如图 7(d) 所示, 方向相反的磁偶极子在  $y$ - $z$  平面上形成一个封闭的磁涡. 磁场矢量在四聚体簇内  $y$  方向上相邻长方体之间顺时针循环, 在四聚体簇间  $y$  方向上相邻长方体之间逆时针循环, 且磁场矢量以头尾的方式分布, 这是环形偶极子共振的特征, 并且根据右手螺旋定则环形偶极子的方向沿  $x$  方向, 这与多极分解计算的结果一致.

接下来本文改变了超表面在  $y$  方向上的周期长度来为超表面引入周期扰动, 此时四聚体之间在  $y$  方向上的间距由  $g$  变为了  $g'_2$ , 四聚体在  $y$  方向上间距的变化为  $\Delta g'_2$ , 即  $\Delta g'_2 = g - g'_2$ . 此时组成超表面的 4 个长方体纳米柱的中心仍然与单元格的中心重叠. 为同时得到高  $Q$  值的准 BIC 共振, 结合非单晶硅在 1000—2000 nm 波段的大致折射

率为 3.42, 本工作所设计的结构各参数为:  $P_x = 660$  nm,  $P_y = 700$  nm,  $w = 400$  nm,  $h = 200$  nm,  $g'_2 = 300$  nm,  $\Delta g'_2 = 40$  nm,  $g = 260$  nm,  $a = 160$  nm,  $b = 60$  nm,  $\theta = 0^\circ$ .

此时的不对称参数  $\gamma_2 = \Delta g'_2/g$ , 当  $P_y$  的取值不同时, 仿真得到超表面的透射谱如图 8(b) 所示. 由图可知, 当  $P_y = 680$  nm 时, 产生的共振峰位于 1608 nm 处, 随着  $P_y$  继续增大, 共振峰的波长发生蓝移. 当  $P_x = 720$  nm 时, 产生的共振峰位于 1572 nm 处, 蓝移 36 nm, 与改变超表面在  $x$  方向上的周期长度相比, 蓝移更多.

本文计算了不同  $P_y$  下产生的准 BIC 模式的  $Q$  因子与其对应的不对称参数  $\gamma_2$  的依赖关系如图 8(c) 所示. 该准 BIC 模式的  $Q$  因子与  $\gamma_2$  皆成二次方反比关系, 这证实了改变超表面在  $y$  方向上的周期长度后产生的 Fano 共振峰是准 BIC 模式. 当  $P_y = 680$  nm 时, 产生的准 BIC 模式的  $Q$  因子为 8289. 当  $P_y = 750$  nm 时, 产生的准 BIC 模式的  $Q$  因子为 464. 随着  $P_y$  逐渐增大, 产生的准 BIC 模式的  $Q$  因子开始下降, 这表明可以通过调节不

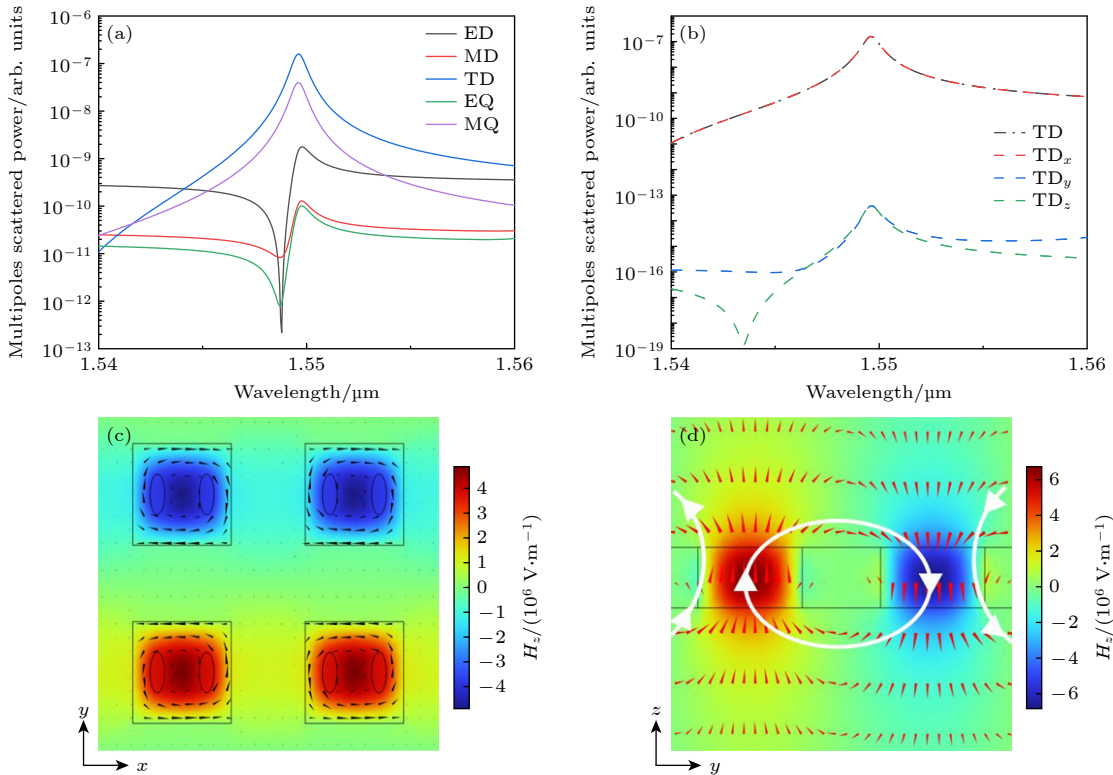


图 7 (a)  $x$  偏振光入射时的多极分解结果; (b) 环偶极子的散射功率在  $x$ ,  $y$ ,  $z$  方向上的分量; (c)  $x$ - $y$  平面的电磁场分布; (d)  $y$ - $z$  平面的电磁场分布

Fig. 7. (a) Multipole decomposition results during  $x$ -polarized normal incidence light; (b)  $x$ ,  $y$  and  $z$  components of the TD; (c) electromagnetic field distribution in the  $x$ - $y$  plane; (d) electromagnetic field distribution in the  $y$ - $z$  plane.

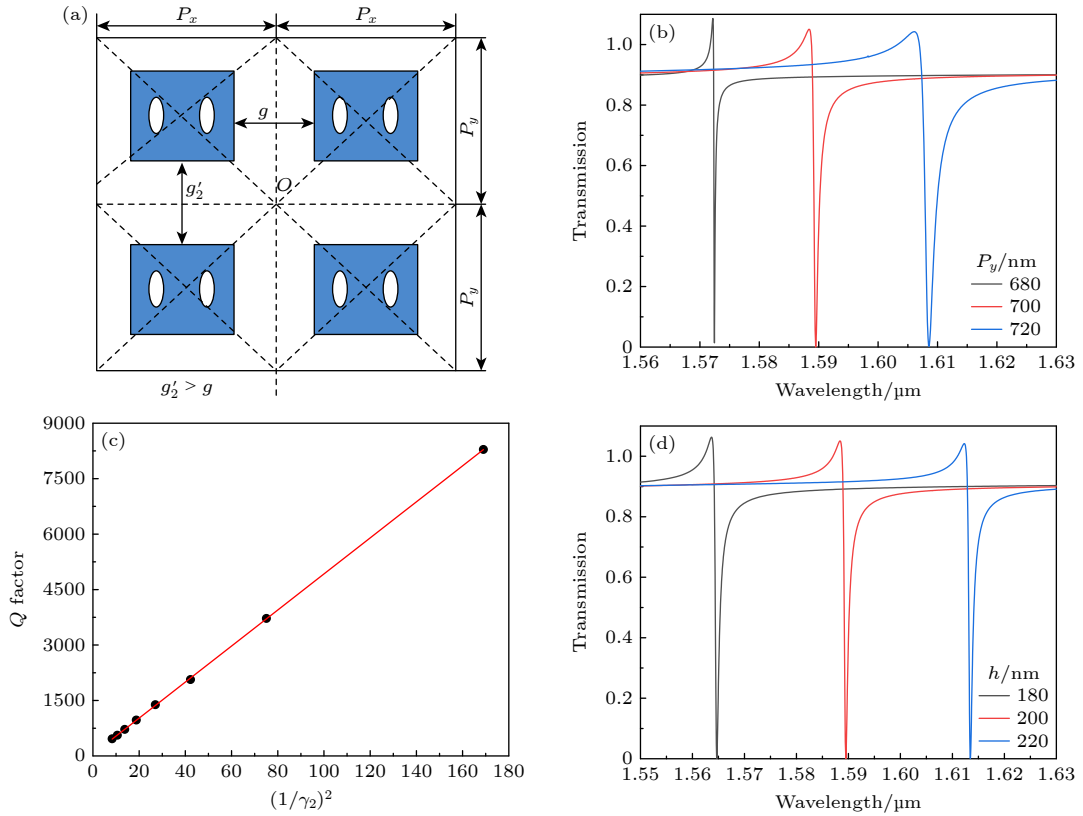


图 8 (a) 当  $P_y > P_x$  时, 超表面单元平面俯视图; (b)  $P_y$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线; (c) 准 BIC 模式的  $Q$  因子随  $1/\gamma_2^2$  的变化曲线; (d) 厚度  $h$  不同时,  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线

Fig. 8. (a) When  $P_y > P_x$ , the top view of the metasurface unit; (b) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different  $P_y$ ; (c)  $Q$ -factors of Q-BIC plotted as functions of  $1/\gamma_2^2$ ; (d) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light and different thickness  $h$ .

对称参数  $\gamma_2$ , 来实现对准 BIC 模式的  $Q$  因子进行调控. 当  $P_y = 660$  nm 时, 该 Fano 共振消失, 即有限  $Q$  的准 BIC 转化为 BIC.

由于超表面的厚度  $h$  不影响结构的对称性, 因此可通过调节  $h$  来独立调谐准 BIC 的谐振频率. 将超表面的结构参数设定为:  $P_x = 660$  nm,  $P_y = 700$  nm,  $w = 400$  nm,  $h = 200$  nm,  $g'_2 = 300$  nm,  $\Delta g'_2 = 40$  nm,  $g = 260$  nm,  $a = 160$  nm,  $b = 60$  nm,  $\theta = 0^\circ$ . 当  $h$  从 180 nm 增大到 220 nm 时, 仿真得到超表面的透射谱如图 8(d) 所示, 准 BIC 的共振峰波长发生红移, 而线宽几乎保持不变.

当  $P_y = 700$  nm 时, 对准 BIC 模式进行多极分解的计算结果如图 9(a) 所示. 由图可知, 该准 BIC 模式是由环偶极子诱导产生. 通过对准 BIC 模式的环偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 9(b) 所示, 可以看出环偶极子的散射功率的  $x$  分量占主导地位, 且在数值上接近环偶极子的散射功率. 准 BIC 模式在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 9(c) 所示, 在  $x$  方向上相邻长方体的位移电流

的环流方向相同, 而在  $y$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向不同. 这表明在  $y$  方向上的每对长方体产生了沿  $z$  方向且方向相反的磁偶极子. 准 BIC 模式在  $y$ - $z$  平面的电磁场分布如图 9(d) 所示, 方向相反的磁偶极子在  $y$ - $z$  平面上形成一个封闭的磁涡. 磁场矢量在四聚体簇内  $y$  方向上相邻长方体之间逆时针循环, 在四聚体簇间  $y$  方向上相邻长方体之间顺时针循环, 且磁场矢量以头尾的方式分布, 这是环形偶极子共振的特征, 并且根据右手螺旋定则环形偶极子的方向沿  $x$  方向, 这与多极分解计算的结果一致.

### 3.4 同时引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动时超表面透射率曲线分析

本文提出的超表面结构还支持同时引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动, 即同时对超表面结构的  $C_2$  对称性和超表面阵列的整体排布进行扰动. 在给椭圆柱引入不为 0 的旋转角  $\theta$  来实现面内破缺后, 将超表面在  $y$  方向的周期  $P_y$  增大来引入

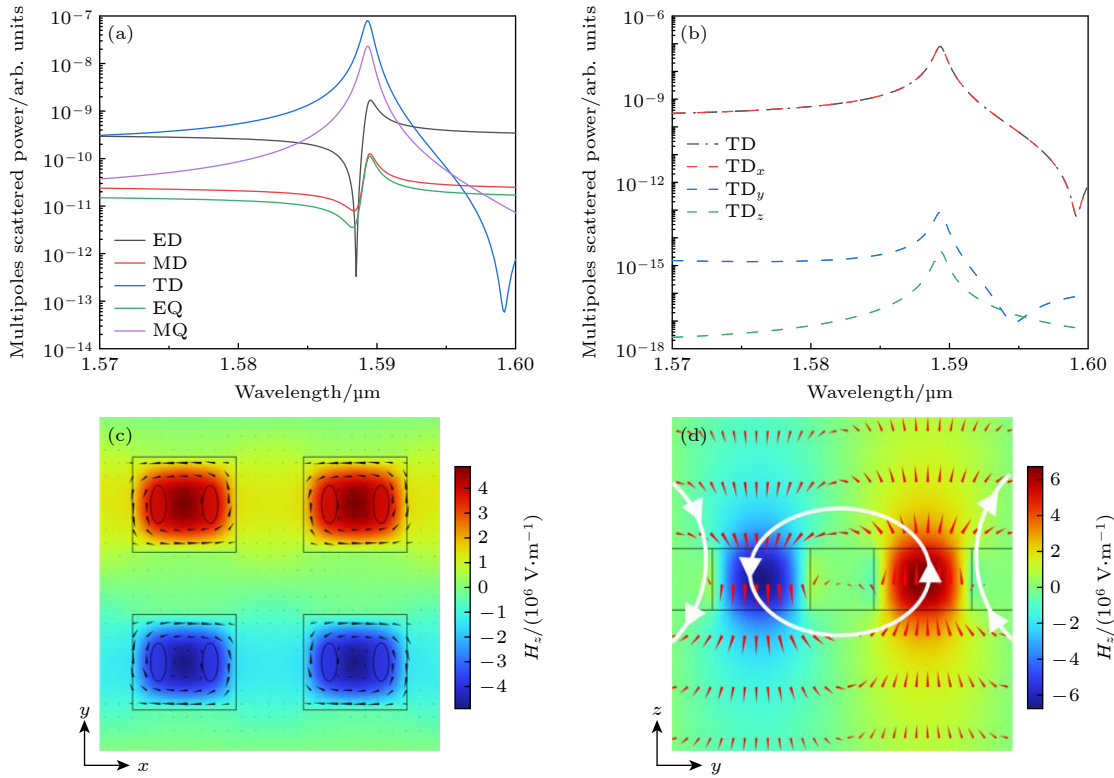


图 9 (a)  $x$  偏振光入射时的多极分解结果; (b) 环偶极子的散射功率在  $x, y, z$  方向上的分量; (c)  $x-y$  平面的电磁场分布; (d)  $y-z$  平面的电磁场分布

Fig. 9. (a) Multipole decomposition results during  $x$ -polarized normal incidence light; (b)  $x, y$  and  $z$  components of the TD; (c) electromagnetic field distribution in the  $x-y$  plane; (d) electromagnetic field distribution in the  $y-z$  plane.

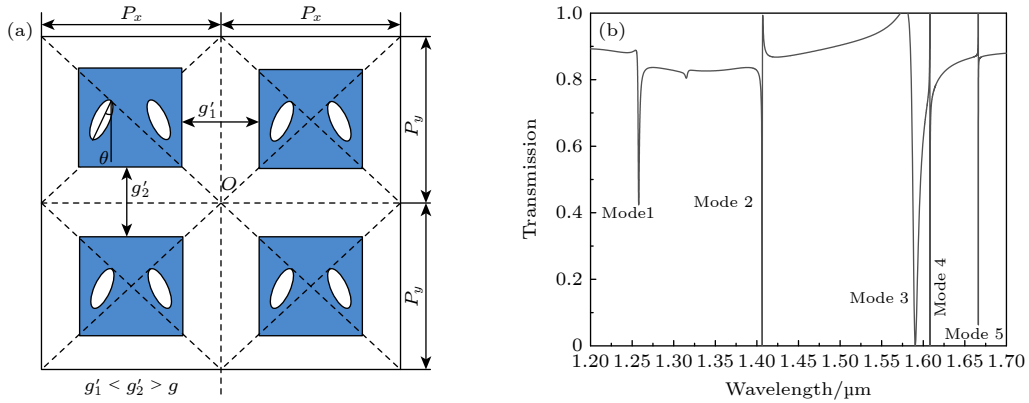


图 10 (a) 超表面单元平面俯视图; (b)  $x$  偏振光入射对应的透射率曲线

Fig. 10. (a) Top view of the metasurface unit; (b) transmittance spectra for  $x$ -polarized incident light.

周期扰动, 此时四聚体仍位于各个单元格的中心位置, 接着改变四聚体在单元格的相对位置使其脱离中心, 为超表面的引入位移扰动. 为同时得到高  $Q$  值的准 BIC 共振, 结合非单晶硅在 1000—2000 nm 波段的大致折射率为 3.42, 本工作所设计的结构各参数为:  $P_x = 660$  nm,  $P_y = 700$  nm,  $w = 400$  nm,  $h = 200$  nm,  $g'_1 = 180$  nm,  $g'_2 = 220$  nm,  $a = 160$  nm,  $b = 60$  nm,  $\theta = 30^\circ$ .

对超表面同时引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动后的透射率曲线如图 10(b) 所示, 一共产生了 5 个准 BIC 模式, 准 BIC 模式 1 的共振波长位于 1257 nm 处, 这与上文之前只打破面内对称时产生的准 BIC 模式的共振波长相近. 准 BIC 模式 2 的共振波长位于 1406 nm 处, 准 BIC 模式 3 的共振波长位于 1590 nm 处, 它们的共振波长分别与通过改变四聚体在各个单元中的相对位置来

实现位移扰动后产生的两个准 BIC 模式的共振波长相近. 准 BIC 模式 4 的共振波长位于 1608 nm 处, 准 BIC 模式 5 的共振波长位于 1666 nm 处.

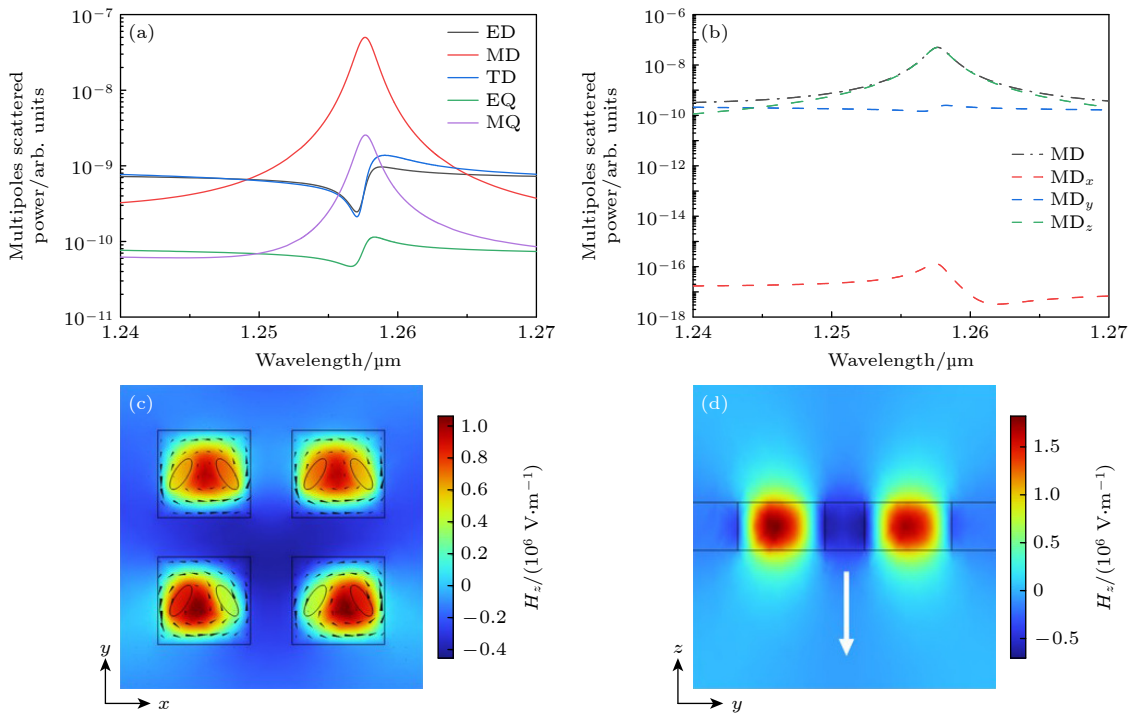
本文计算了产生的 5 个准 BIC 模式的  $Q$  因子, 产生的准 BIC 模式 1 的  $Q$  因子为 738, 产生的准 BIC 模式 2 的  $Q$  因子为 3494, 产生的准 BIC 模式 3 的  $Q$  因子为 216, 产生的准 BIC 模式 4 的  $Q$  因子为 14565, 产生的准 BIC 模式 5 的  $Q$  因子为 58039.

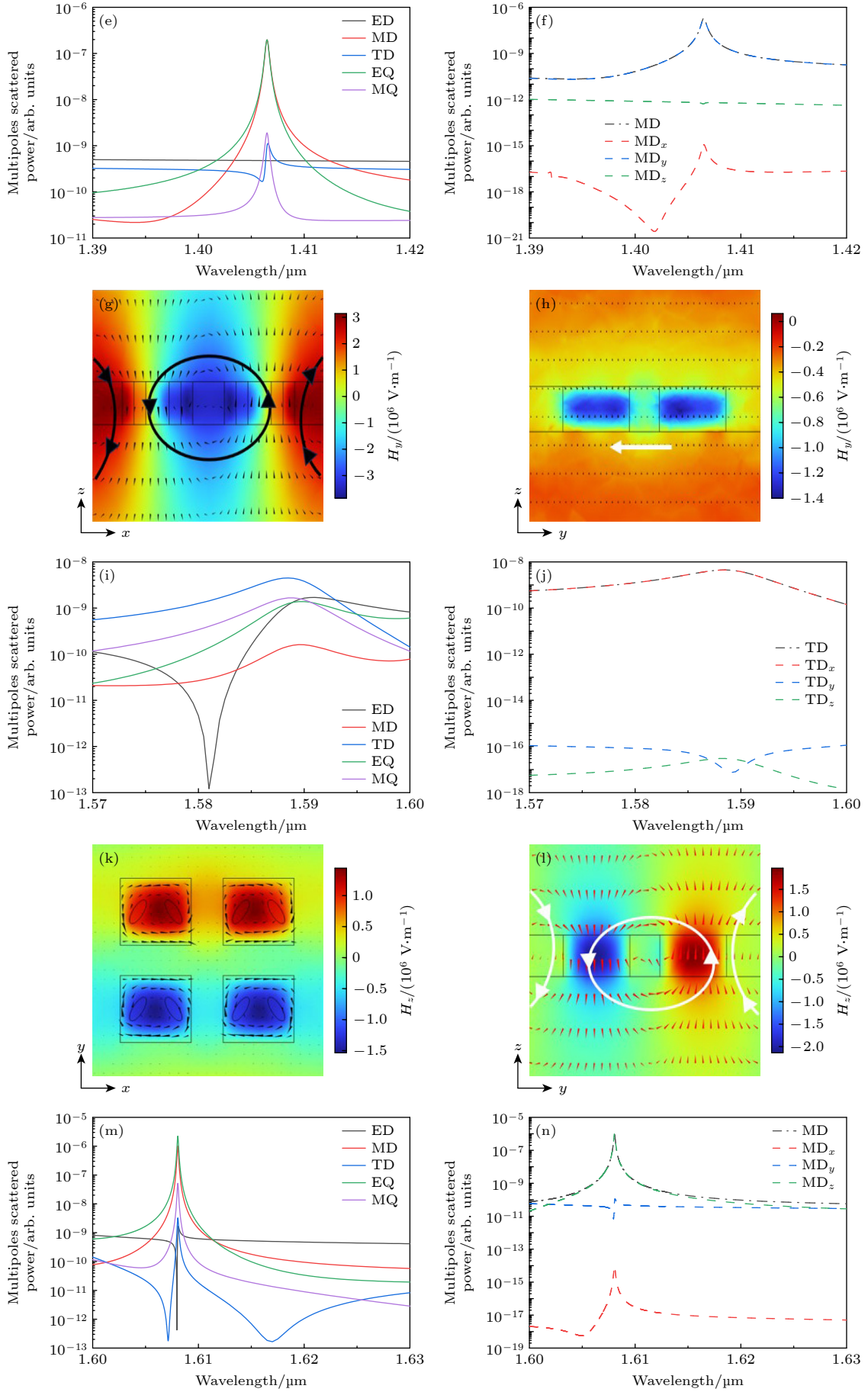
本文对同时引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动后的超表面产生的 5 个准 BIC 模式的多极分解计算结果和电磁场分布如图 11 所示. 由图 11(a) 可知, 准 BIC 模式 1 是由磁偶极子主导产生的, 通过对磁偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 11(b) 所示, 可以看出磁偶极子的散射功率的  $z$  分量占主导地位, 且在数值上接近磁偶极子的散射功率. 准 BIC 模式 1 在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 11(c) 所示, 在  $x$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向相同, 在  $y$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向也相同, 位移电流以头尾的方式分布, 这是磁偶极子共振的特征. 这表明每个长方体都产生了沿  $z$  方向且方向相同的磁偶极子, 这与多极分解计算的结果以及图 11(d) 中绘制的  $y$ - $z$  平面的磁场矢量的方向一致. 这与上文只打破面内对称时产生的准 BIC 的多极分解计算结果一致, 且电磁场分布相似以及它们的共振波长相

近, 因此准 BIC 模式 1 是打破超表面结构的面内对称引起的. 这也意味着, 对超表面是否引入面内破缺, 将会决定准 BIC 模式 1 的存在与否, 从而调控准 BIC 模式的谐振数量.

由图 11(e) 可知, 准 BIC 模式 2 是由电四极子与磁偶极子共同作用产生, 通过对准 BIC 模式 2 的磁偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 11(f) 所示, 可以看出磁偶极子的散射功率的  $y$  分量占主导地位, 且在数值上接近磁偶极子的散射功率. 准 BIC 模式 2 在  $x$ - $z$  平面的电磁场分布如图 11(g) 所示, 位移电流在四聚体簇内  $x$  方向上相邻的长方体之间逆时针循环, 在四聚体簇间  $x$  方向相邻长方体之间顺时针循环, 位移电流以头尾的方式分布, 这是磁偶极子共振的特征, 并且磁偶极子共振的方向根据右手螺旋定则沿  $y$  方向, 这与多极分解计算的结果以及图 11(h) 中绘制的  $y$ - $z$  平面的磁矢量方向一致.

由图 11(i) 可知, 准 BIC 模式 3 是由环偶极子主导产生, 通过对准 BIC 模式 3 的环偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 11(j) 所示, 可以看出环偶极子的散射功率的  $x$  分量占主导地位, 且在数值上接近环偶极子的散射功率. 准 BIC 模式 3 在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 11(k) 所示, 可知在  $x$  方向上相邻长方体的位移电流的环流方向相同, 而在  $y$  方向上相邻长方体的位移电流的





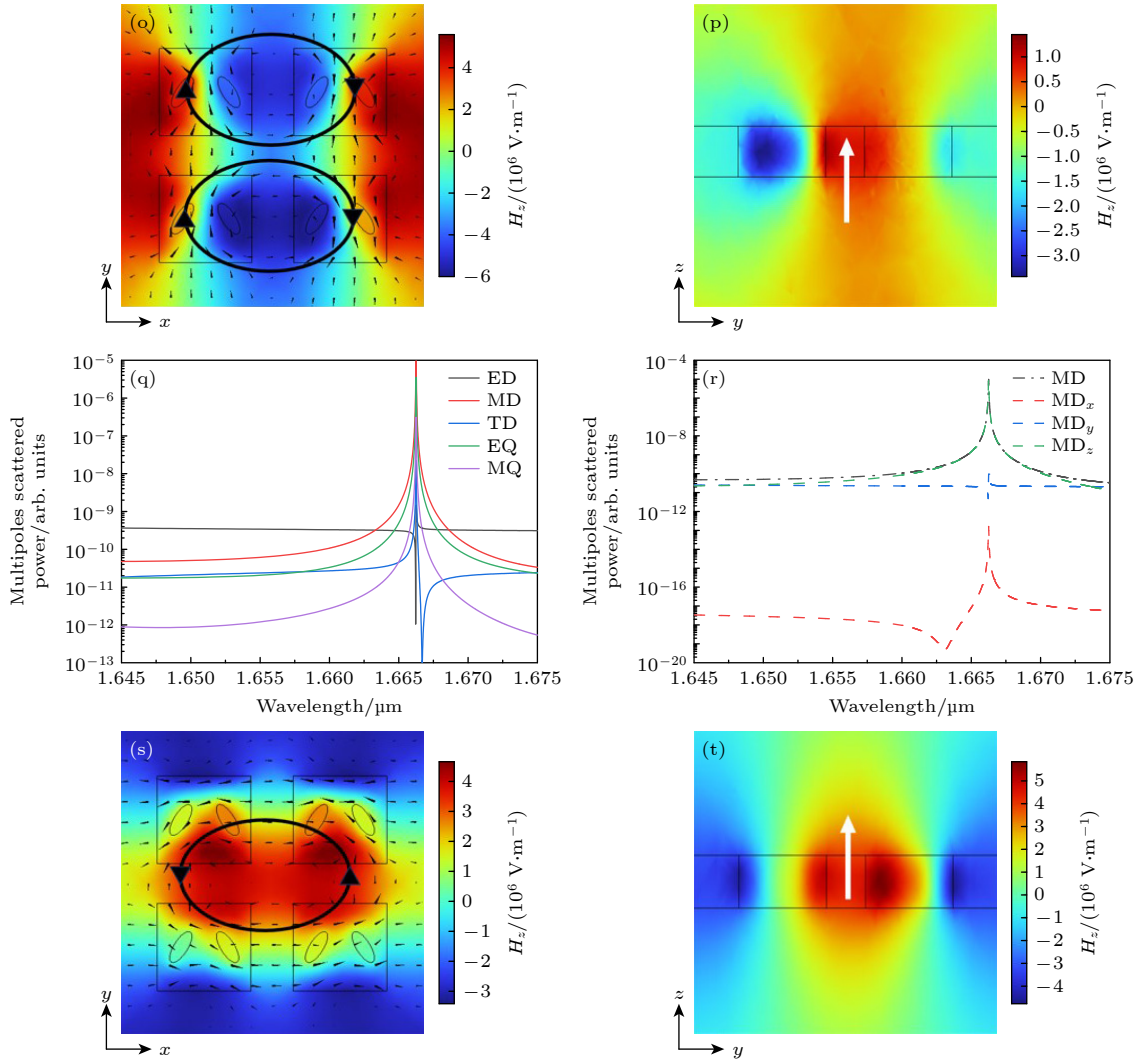


图 11 (a)  $x$  偏振光入射时产生的准 BIC 模式 1 的多极分解结果; (b) 准 BIC 模式 1 的磁偶极子的散射功率在  $x, y, z$  方向上的分量; (c) 准 BIC 模式 1 在  $x-y$  平面的电磁场分布; (d) 准 BIC 模式 1 在  $y-z$  平面的电磁场分布; (e)  $x$  偏振光入射时产生的准 BIC 模式 2 的多极分解结果; (f) 准 BIC 模式 2 的磁偶极子的散射功率在  $x, y, z$  方向上的分量; (g) 准 BIC 模式 2 在  $x-z$  平面的电磁场分布; (h) 准 BIC 模式 2 在  $y-z$  平面的电磁场分布; (i)  $x$  偏振光入射时产生的准 BIC 模式 3 的多极分解结果; (j) 准 BIC 模式 3 的环偶极子的散射功率在  $x, y, z$  方向上的分量; (k) 准 BIC 模式 3 在  $x-y$  平面的电磁场分布; (l) 准 BIC 模式 3 在  $y-z$  平面的电磁场分布; (m)  $x$  偏振光入射时产生的准 BIC 模式 4 的多极分解结果; (n) 准 BIC 模式 4 的磁偶极子的散射功率在  $x, y, z$  方向上的分量; (o) 准 BIC 模式 4 在  $x-y$  平面的电磁场分布; (p) 准 BIC 模式 4 在  $y-z$  平面的电磁场分布; (q)  $x$  偏振光入射时产生的准 BIC 模式 5 的多极分解结果; (r) 准 BIC 模式 5 的磁偶极子的散射功率在  $x, y, z$  方向上的分量; (s) 准 BIC 模式 5 在  $x-y$  平面的电磁场分布; (t) 准 BIC 模式 5 在  $y-z$  平面的电磁场分布

Fig. 11. (a) Multipole decomposition results of QBIC mode 1 during  $x$ -polarized normal incidence light; (b) Components of the MD in the  $x, y, z$  directions of QBIC mode 1; (c) electromagnetic field distribution in the  $x-y$  plane of QBIC mode 1; (d) electromagnetic field distribution in the  $y-z$  plane of QBIC mode 1; (e) multipole decomposition results of QBIC mode 2 during  $x$ -polarized normal incidence light; (f) components of the MD in the  $x, y, z$  directions of QBIC mode 2; (g) electromagnetic field distribution in the  $x-z$  plane of QBIC mode 2; (h) electromagnetic field distribution in the  $y-z$  plane of QBIC mode 2; (i) multipole decomposition results of QBIC mode 3 during  $x$ -polarized normal incidence light; (j) components of the TD in the  $x, y, z$  directions of QBIC mode 3; (k) electromagnetic field distribution in the  $x-y$  plane of QBIC mode 3; (l) Electromagnetic field distribution in the  $y-z$  plane of QBIC mode 3; (m) multipole decomposition results of QBIC mode 4 during  $x$ -polarized normal incidence light; (n) components of the MD in the  $x, y, z$  directions of QBIC mode 4; (o) electromagnetic field distribution in the  $x-y$  plane of QBIC mode 4; (p) electromagnetic field distribution in the  $y-z$  plane of QBIC mode 4; (q) Multipole decomposition results of QBIC mode 5 during  $x$ -polarized normal incidence light; (r) components of the MD in the  $x, y, z$  directions of QBIC mode 5; (s) electromagnetic field distribution in the  $x-y$  plane of QBIC mode 5; (t) electromagnetic field distribution in the  $y-z$  plane of QBIC mode 5.

环流方向不同. 这表明在  $y$  方向上的每对长方体产生了沿  $z$  方向且方向相反的磁偶极子. 准 BIC 模式 3 在  $y$ - $z$  平面的电磁场分布如图 11(l) 所示, 由图可知方向相反的磁偶极子在  $y$ - $z$  平面上形成一个封闭的磁涡. 磁场矢量在四聚体簇内  $y$  方向上相邻长方体之间逆时针循环, 在四聚体簇间  $y$  方向上相邻长方体之间顺时针循环, 且磁场矢量以头尾的方式分布, 这是环形偶极子共振的特征, 并且根据右手螺旋定则环形偶极子的方向沿  $x$  方向, 这与多极分解计算的结果一致.

准 BIC 模式 2 和准 BIC 模式 3 与上文通过改变四聚体在各个单元中的相对位置来实现位移扰动后产生的两个准 BIC 模式的诱因相同, 且电磁场分布相似, 准 BIC 模式 2 和准 BIC 模式 3 的共振波长也与它们的共振波长相近, 因此准 BIC 模式 2 和准 BIC 模式 3 是由于超表面引入位移扰动引起的. 这也意味着, 对超表面是否引入位移扰动, 将会决定准 BIC 模式 2 和准 BIC 模式 3 的存在与否, 从而调控准 BIC 模式的谐振数量.

由图 11(m) 可知, 准 BIC 模式 4 是由磁偶极子和电四极子主导产生, 通过对准 BIC 模式 4 的磁偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 11(n) 所示, 可以看出磁偶极子的散射功率的  $z$  分量占主导地位, 且在数值上接近磁偶极子的散射功率. 准 BIC 模式 4 在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 11(o) 所示, 位移电流在四聚体簇内  $x$  方向上相邻的长方体之间顺时针循环, 位移电流以头尾的方式分布, 这是磁偶极子共振的特征, 并且磁偶极子共振的方向根据右手螺旋定则沿  $y$  方向, 这与多极分解计算的结果以及图 11(p) 中绘制的  $y$ - $z$  平面的磁矢量方向一致.

由图 11(q) 可知, 准 BIC 模式 5 是由磁偶极子主导产生, 通过对准 BIC 模式 5 的磁偶极子的散射功率的  $x$ ,  $y$  和  $z$  分量进行分解, 如图 11(r) 所示, 可以看出磁偶极子的散射功率的  $z$  分量占主导地位, 且在数值上接近磁偶极子的散射功率. 准 BIC 模式 5 在  $x$ - $y$  平面的电磁场分布如图 11(s) 所示, 位移电流在四聚体簇内逆时针循环, 位移电流以头尾的方式分布, 这是磁偶极子共振的特征, 并且磁偶极子共振的方向根据右手螺旋定则沿  $y$  方向, 这与多极分解计算的结果以及图 11(t) 中绘制的  $y$ - $z$  平面的磁矢量方向一致.

准 BIC 模式 4 和准 BIC 模式 5 是同时引入面

内对称破缺、位移扰动和周期扰动后产生的两个准 BIC 模式.

## 4 结 论

本文提出了由四聚长方体组成的全介质超表面, 其中每个长方体刻蚀两个椭圆柱并填充空气. 首先通过使椭圆柱的旋转角  $\theta$  不为 0, 来实现超表面的面内破缺, 运用多极分解计算分析了面内破缺后准 BIC 模式形成的物理机制. 之后通过让四聚体脱离各单元的中心位置来为超表面引入位移扰动以及改变超表面在  $x$  方向或  $y$  方向上的周期长度来为超表面引入周期扰动, 运用多极分解计算分析了在这两种不同的扰动方式下准 BIC 模式形成的物理机制. 最后本文为超表面同时引入面内对称破缺、位移扰动和周期扰动后, 产生了 5 个准 BIC, 并运用多极分解计算分析了这 5 个准 BIC 模式形成的物理机制. 本文提出的超表面结构不但支持面内对称破缺和两种不同的结构扰动方式, 而且更容易产生数量更多、 $Q$  因子更高的准 BIC 模式. 通过调节不对称参数, 可以对这些准 BIC 模式的共振峰的数量、位置以及  $Q$  因子进行调控并拥有更大的自由度, 获得更丰富和优异的性能, 在传感器等其他光学领域的应用上有着巨大的潜力.

## 参考文献

- [1] von Neumann J, Wigner E P 1929 *Phys. Z.* **30** 467
- [2] Kaelberer T, Fedotov V A, Papasimakis N, Tsai D P, Zheludev N I 2010 *Science* **330** 1510
- [3] Plotnik Y, Peleg O, Dreisow F, Heinrich M, Nolte S, Szameit A, Segev M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 183901
- [4] Hsu C W, Zhen B, Lee J, Chua S L, Johnson S G, Joannopoulos J D, Soljacic M 2013 *Nature* **499** 188
- [5] Urseel F 1997 *Phys. Eng. Sci.* **435** 575
- [6] Porter R, Evans D V 2005 *Wave Motion* **43** 29
- [7] Xiao Y X, Ma G, Zhang Z Q, Chan C T 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 166803
- [8] Retzler C H 2001 *Appl. Ocean Res.* **23** 249
- [9] Cobelli P J, Pagneux V, Maurel A, Petitjeans P 2009 *Europhys. Lett.* **88** 20006
- [10] Cobelli P J, Pagneux V, Maurel A, Petitjeans P 2011 *J. Fluid Mech.* **666** 445
- [11] EVERY A G 2008 *Phys. Rev. B* **78** 174104.
- [12] Tittl A, Leitis A, Liu M, Yesilkoy F, Choi D Y, Neshev D N, Kivshar Y S, Altug H 2018 *Science* **360** 1105
- [13] Foley J M, Young S M, Phillips J D 2014 *Phys. Rev. B* **89** 165111
- [14] Chen S S, Zhang W X, Yang B, Wu T, Zhang X D 2019 *Sci. Rep.* **9** 5551
- [15] Zhang Y B, Liu W W, Li Z C, Li Z, Cheng H, Chen S, Tian J G 2018 *Opt. Lett.* **43** 1842

- [16] Huo Y Y, Zhang X, Yan M, Sun K, Jiang S Z, Ning T Y, Zhao L N 2022 *Opt. Express* **30** 19030
- [17] Yu J B, Ma B Z, OuYang A, Ghosh P, Luo H, Pattanayak A, Kaur S, Qiu M, Belov P, Li Q 2021 *Optica* **8** 1290
- [18] Huang L J, Jin R, Zhou C B, et al. 2023 *Nat. Commun.* **14** 3433
- [19] Zhou C B, Huang L J, Jin R, et al. 2023 *Laser Photonics Rev.* **17** 2200564
- [20] Koshelev K, Lepeshov S, Liu M K, Bogdanov A, Kivshar Y 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 193903
- [21] Mikheeva E, Koshelev K, Choi D Y, Kruk S, Lumeau J, Abdeddaim R, Voznyuk I, Enoch S, Kivshar Y 2019 *Opt. Express* **27** 33847
- [22] Chen X, Fan W H 2020 *Nanomaterials* **10** 623
- [23] Cai Y P, Huang Y, Zhu K Y, Wu H H 2021 *Opt. Lett.* **46** 4049
- [24] Yang L 2022 *M. S. Thesis* (Beijing: Beijing University of Posts and Telecommunications) (in Chinese) [杨磊 2022 硕士学位论文 (北京: 北京邮电大学)]
- [25] Tang C J, Yan B, Wang Q G, Chen J, Yan Z D, Liu F X, Chen N B, Sui C H 2017 *Sci. Rep.* **7** 582
- [26] Jin R, Huang L J, Zhou C B, et al. 2023 *Nano Lett.* **23** 9105
- [27] Yu J B, Qin R, Ying Y B, Qiu M, Li Q 2023 *Adv. Mat.* **35** 2302478
- [28] Chai R H, Liu W W, Li Z C, Cheng H, Tian J G, Chen S Q 2021 *Phys. Rev. B* **104** 075149

## Exploring the tuning mechanism of multipolar quasi-continuous domain bound states in tetramer metasurface<sup>\*</sup>

Meng Xiang-Yu<sup>1)2)3)</sup> Li Tao<sup>2)3)</sup> Yu Bin-Bin<sup>2)3)†</sup> Tai Yong-Hang<sup>1)‡</sup>

1) (Yunnan Key Laboratory of Optoelectronic Information Technology, Yunnan Normal University, Kunming 650500, China)

2) (Wenzhou Key Laboratory of Biophysics, Wenzhou Institute, University of Chinese Academy of Sciences, Wenzhou 325000, China)

3) (Oujian Laboratory (Zhejiang Lab for Regenerative Medicine, Vision and Brain Health), Wenzhou 325000, China)

( Received 18 February 2024; revised manuscript received 5 March 2024 )

### Abstract

High-quality factor (high- $Q$ ) resonance has broad prospects in applications such as in narrow-band filtering, slow-light devices, and nonlinear optics interaction enhanced to highly sensitive sensing. Previous methods of designing high- $Q$  resonance suffered intrinsic drawbacks such as high-volume cavities or large-scale bending radii. However, recently, a new approach to designing high- $Q$  resonances has begun to attract public attention on the basis of asymmetric metasurfaces that are related to the bound states in the continuum (BIC) phenomenon. Constructing BIC resonance in electromagnetic metasurface can generate sharp resonant transmission peak. Therefore, there is growing interest in utilizing BIC to achieve metasurface with high- $Q$ . However, most of existing studies are based on single BIC, and few studies focusing on multiband BICs and multiple forms of symmetry breaking. In this work, we propose an all-dielectric metasurface composed of tetrameric cuboids. By etching two elliptical cylinders in each cuboid, the metasurface can simultaneously support in-plane symmetry breaking, displacement perturbations and periodic perturbations. We first use multipole calculations to analyze the physical mechanism by which the metasurface generates quasi-BIC under these three conditions. It is confirmed that the  $Q$  factor and resonant peak position of quasi-BIC can be controlled by adjusting the asymmetry parameters. Subsequently, we introduce the in-plane symmetry breaking, displacement perturbations and periodic perturbations into the metasurface simultaneously and generate five quasi-BIC modes, whose numbers and positions can be flexibly adjusted, and the largest  $Q$  factor is 58039. In summary, this work provides a new practical design concept for realizing high- $Q$  all-dielectric metasurfaces, which can be used to improve the sensitivity of multi-parameter sensors.

**Keywords:** metasurface, quasi-bound states in the continuum, symmetry breaking

**PACS:** 78.67.Pt, 78.20.Bh

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240272

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62365017), the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. LZ23A040004), and the Foundation for Excellent Young Scientists of Yunnan Province, China (Grant No. 202301AW070001).

† Corresponding author. E-mail: [pai3\\_14@ucas.ac.cn](mailto:pai3_14@ucas.ac.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [taiyonghang@ynnu.edu.cn](mailto:taiyonghang@ynnu.edu.cn)



## 探究四聚体超表面中多极准连续域束缚态的调控机制

孟祥裕 李涛 余彬彬 邵永航

### Exploring the tuning mechanism of multipolar quasi-continuous domain bound states in tetramer metasurface

Meng Xiang-Yu Li Tao Yu Bin-Bin Tai Yong-Hang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 107801 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240272

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240272>

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

#### 硅纳米颗粒阵列中准连续域束缚态诱导三次谐波增强效应

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

物理学报. 2021, 70(15): 154206 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210332>

#### 一种宽角域散射增强超表面的研究

Research of a wide-angle backscattering enhancement metasurface

物理学报. 2018, 67(19): 198101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181053>

#### 简单结构超表面实现波长和偏振态同时复用全息显示新方法

A new method of implementing simultaneous multiplexing holographic display of wavelength and polarization state with simple structure metasurface

物理学报. 2021, 70(8): 084201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201047>

#### 动态可调谐的频域多功能可重构极化转换超表面

Dynamically tunable frequency-domain multifunctional reconfigurable polarization conversion metasurface

物理学报. 2022, 71(22): 224102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221256>

#### 基于反射超表面产生太赫兹涡旋波束

Terahertz vortex beam generation based on reflective metasurface

物理学报. 2019, 68(23): 238101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191055>

#### 基于超表面的Tamm等离子激元与激子的强耦合作用

Strong coupling between metasurface based Tamm plasmon microcavity and exciton

物理学报. 2020, 69(1): 010201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191225>