2025年2月

Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology

#### 文章编号: 2095-4980(2025)02-0096-06

# 基于BIC的太赫兹全介质单向导模谐振超表面

吴佳奕<sup>a,b</sup>,欧阳春梅<sup>a,b</sup>

(天津大学 a. 精密仪器与光电子工程学院; b. 太赫兹研究中心, 天津 300072)

摘 要:提出一种具有高Q值的全硅结构超表面,由上下两层硅方柱构成,可通过调节上下 两层结构的x方向错位距离,打破面外σ<sub>2</sub>对称性,在不同晶格矢量 k<sub>x</sub>处实现完美连续域束缚(BIC) 态、偏振敏感的准BIC 态和单向导模谐振(UGR)态的自由调控。值得注意的是,由于所提出的超表 面工作在动量空间,结构对于实空间入射光的空间位置没有严格的限制。仿真结果表明,在分别 打破结构几何对称性和外界入射角度对称性后,准BIC可获得10<sup>3</sup>~10<sup>4</sup>量级的Q值,产生的准BIC 能量泄露可通过磁偶极子的不完全相消干涉解释。通过改变上下两层横向间距,可在偏离Γ点的 位置实现最大单向辐射度为97.5%的单向辐射。该工作在生物化学传感、高性能通信、高效光栅 耦合等领域展现出重要的应用潜力。

关键词:大赫兹;超表面;全介质;连续域束缚态(BIC);单向导模谐振(UGR)
 中图分类号:O441.4
 文献标志码:A
 doi: 10.11805/TKYDA2024545

# Terahertz all-dielectric unidirectional guided resonance metasurface based on BIC

# WU Jiayi<sup>a,b</sup>, OUYANG Chunmei<sup>a,b</sup>

(a.College of Precision Instrument and Optoelectronic Engineering; b.Center for Terahertz, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

**Abstract:** A high-Q all-silicon structured metasurface is proposed, consisting of two layers of silicon square pillars. By adjusting the lateral offset distance between the upper and lower layers in the x-direction, the out-of plane  $\sigma_z$  symmetry is broken, allowing for the free control of perfect Bound states. In the Continuum(BIC) states, polarization-sensitive quasi-BIC states, and Unidirectional Guided Resonance(UGR) states at different lattice vectors  $k_x$ . Notably, since the proposed metasurface operates in momentum space, there are no strict spatial position restrictions for the incident light in real space. Simulation results indicate that after breaking the structural geometric symmetry and the symmetry of the external incident angle, quasi-BIC can achieve a Q value of the order from  $10^3$  to  $10^4$ . The energy leakage of the generated quasi-BIC can be explained by the incomplete destructive interference of magnetic dipoles. By changing the lateral spacing between the upper and lower layers, unidirectional radiation with a maximum unidirectional radiation potential in the fields of biochemical sensing, high-performance communication, and efficient grating coupling.

**Keywords:** terahertz; metasurface; all-dielectric; Bound states In the Continuum(BIC); Unidirectional Guided Resonances(UGR)

太赫兹波(THz)是介于微波和红外波段之间的电磁波,频率在0.1~10 THz范围内<sup>[1-2]</sup>。由于其高安全性、高穿透性和宽带性等独特的性质,在生物监测、安全检查、医学成像等领域引起越来越多的关注<sup>[3-4]</sup>。其中,具有高 *Q*值和高灵敏度的太赫兹功能器件至关重要。目前大多数的太赫兹谐振器件都受材料损耗的影响,因而其*Q*值较低。连续域束缚态(BIC)是一种完全被局域在连续域中的本征模式,不向外辐射<sup>[5]</sup>。超表面是由人工微结构组成 的新型人工材料<sup>[6-7]</sup>,通过设计单元结构的参数,可实现在亚波长尺度范围对BIC谐振频率与*Q*值的自由操控。 此外,缺乏高效的集成化器件也是限制太赫兹波广泛应用的一大因素。目前用于实现单向辐射的金属反射镜在 集成化时会出现体积大,结构复杂,引入额外损耗等问题。平面光子晶格中的单向导模谐振(UGR)是只向一个方 向辐射的特定的光学本征态,其独特的定向辐射源于结构本身的拓扑特征。与传统方法不同,UGR不需要额外的光学反射器件,为单向辐射提供了一种精简的方法。2020年,YIN等<sup>[8]</sup>通过改变一维周期性光子晶体板的截面 方向倾斜角,打破面内镜面对称性和面外σ<sub>z</sub>方向对称性,使上下辐射通道的拓扑奇点(V点)分裂为2个C点,再 通过继续增加结构的倾斜角度,在其中一个辐射通道上2个C点再次合并为一个V点,形成了一个拓扑保护的 UGR通道。2021年,ZENG等<sup>[9]</sup>通过堆叠2个一维周期性光子晶体板并错位的方式,打破了σ<sub>z</sub>方向对称性,通过 不对称度调节上下辐射通道,同样实现了UGR。

上述方式需要倾斜刻蚀工艺或是悬空的周期性结构,是目前太赫兹波段加工工艺难以实现的。对此,本文 提出一种太赫兹全介质URG超表面,其结构由一个中间硅衬底和上下两层二维周期性全硅介质柱构成,无需采 用倾斜刻蚀工艺或悬空结构,仅通过调节上下两层结构的相对位置控制结构本征偏振的变化,实现BIC态、准 BIC态、泄露模态和UGR态的切换。所提出的结构在高性能低损耗通信<sup>101</sup>、时空光调制<sup>111</sup>、激光<sup>112-141</sup>和高性能 光学天线等领域中展现出重要的应用潜力。

### 1 结构设计

金属结构超表面由于其辐射损耗较高,产生的准 BIC 谐振 Q 值较低<sup>[15-18]</sup>。因此,本文提出一种双层硅柱全介质超表面,通过超表面上下两层结构之间、结构和衬底之间的互作用实现不同模态的激发,避免采用复杂的倾斜刻蚀工艺。组成超表面的上下两层单元结构均为高度  $t = 120 \,\mu\text{m}$ ,边长  $a = 150 \,\mu\text{m}$  的具有 C4v 对称性的方形硅柱,硅的折射率为 3.4,电阻率为 10 kΩ/cm,单元结构周期  $p = 300 \,\mu\text{m}$ ,中间衬底厚度  $h = 200 \,\mu\text{m}$ ,超表面上下两层分别距离晶格中心位置向  $x \pi - x$  方向错位  $d_x$ ,共在 x 轴方向错位  $2d_x$ ,如图 1 所示。通过调节几何参数  $d_x$ ,可在动量空间中实现 BIC 态、准 BIC 态和 UGR 态的自由切换。



图1 双层超表面及其单元结构示意图

## 2 结果与讨论

本文首先使用 COMSOL 仿真软件的有限元方法(Finite Element Method, FEM)计算结构初始状态  $d_x = 0$ 、具有 面外  $\sigma_z$ 方向对称性的能带,如图 2(a)所示,能带的颜色表示结构在该 k 矢量处的 Q 因子。BIC 态具有无穷的 Q 因 子,表明在结构内部能量完全局域化;当改变  $d_x$ 的值时,面外  $\sigma_z$ 方向对称性被打破,BIC 态转变为有能量泄露的 准 BIC 态。图 2(b)为不对称度  $d_x=36$  µm 时的能带图。注意到,相对  $d_x=0$  时,其面外  $\sigma_z$ 方向对称性被打破,元胞 中心  $\Gamma$ 点处的 Q 值快速降低,形成了 BIC 态到准 BIC 态的变化。

结构在 *d<sub>x</sub>*=0 和 *d<sub>x</sub>*=36 µm时,对*x* 和*y*偏振的频谱响应如图 3 所示。采用频域有限元方法求解,其中*x* 和*y*方向 分别设置 unit cell 单元周期边界条件,*z*方向设置 open 开放边界条件。在*x*偏振和*y*偏振入射下,*x* 和*y*方向的透 射率分别如图 3(a)和图 3(b)所示。注意到,面外 *σ<sub>x</sub>*方向对称性被打破,*y*偏振入射下会产生 2 个准 BIC 谐振峰,而 *x*偏振入射下则只会轻微改变原有谐振峰的线宽,并不会出现新的谐振峰。这是由于 *d<sub>x</sub>*的改变使 *x*=0 方向的平面内镜面对称性依旧得到保留。*x* 和*y*方向上的平面内镜面对称性不同,结构可产生 2 个偏振敏感的准 BIC 谐振峰 *Q*-BIC1 和 *Q*-BIC2,分别为0.413 THz 处的 BIC1 和 0.423 THz 处的 BIC2。如图 3(b)所示。图 3(c)和图 3(d)给出了透射率和 *d<sub>x</sub>*值、频率的变化关系,白色圆圈表示完全对称情况下,谐振线

宽达到无穷窄, *Q*值无穷大的 BIC 位置。图 3(e)和图 3(f)则为结构在  $d_x$ =0 没有打破面内  $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$ 和面外  $\sigma_z$ 对称性的 情况下,在 x和 y 偏振入射下透射率随着入射角度  $\theta$  的变化。维持结构的几何对称性,打破入射光的入射角度,同样可在微扰角度为0 时观察到 BIC 点。频谱计算出的 BIC 位置与图 2(a)中的 2 条高 *Q* 的模式 TE<sub>0</sub>和 TE<sub>1</sub>在  $\Gamma$  点的 结果吻合。研究结果表明,对称保护准 BIC 的 *Q* 值和不对称度参数的负二次方成正比<sup>[19]</sup>,这与本文的仿真结果 相符。*Q* 值计算结果可由  $Q = f_0 f_{FHWM}$ 给出,其中  $f_0$  为谐振峰中心频率, $f_{FHWM}$ 为半高全宽。本文仿真结果表明,在 y 偏振正入射下,不对称度  $d_x$ =36 µm处,模式 TE<sub>0</sub>产生的准 BIC 的 *Q* 值可达到 714,线宽为 0.578 GHz;模式 TE<sub>1</sub>产生的准 BIC 的 *Q* 值可达到 199,线宽为 2.124 GHz。固定  $d_x$ =0 µm,入射角  $\theta$ = 5°下,模式 TE<sub>0</sub>产生的准 BIC 的 *Q* 值可达到 4 636,线宽为 0.088 GHz。结果表明,与金属结构相比,全硅结构的准 BIC 的 *Q* 值提高了 1~2 个数量级<sup>[15-18]</sup>。



 Fig.2 Band curves of the metasurface in the x-direction asymmetry

 图2 超表面在x方向的能带曲线

为进一步探究准 BIC 峰的产生,本文研究了 BIC1 处的磁场分布,如图 4 所示。图 4(a)、图 4(b)和图 4(c)分别为 $d_x=0$ 、 $\theta=0^\circ$ ;  $d_x\neq0$ 、 $\theta=0^\circ$ 和 $d_x=0$ 、 $\theta\neq0^\circ$ 时的磁场分布,其中背景颜色表示磁场*z*分量的大小,白色箭头代表磁场分量的方向。在图 4(a)所示的 $d_x=0$ 、 $\theta=0^\circ$ 的情况下,面内和面外对称性均没有被打破,因此表现出完美束缚的 BIC 模式。保持 $\theta=0^\circ$ ,随着 $d_x$ 的增大,面内 $\sigma_y$ 对称性和面外 $\sigma_z$ 对称性被打破,在*y*偏振入射下,上下磁偶极子不能完全干涉相消,形成辐射泄露的准 BIC 态,如图 4(b)所示。同样,保持 $d_x=0$ ,在入射角 $\theta\neq0^\circ$ 的情况下,虽然结构的几何参数是维持面内和面外对称性的,但由于外界入射的扰动,上下表面磁偶极子不完全干涉相消,由 BIC 态转变为准 BIC 态(见图 4(c))。

除了 BIC 和准 BIC 态的切换,在偏离单元结构中心  $\Gamma$  点处,通过精细调节结构的几何参数,可得到 UGR 辐射。首先从能带角度对 UGR 的产生进行分析:在 $d_x=0$ 时,带 TE<sub>1</sub>和带 TE<sub>2</sub>由于对称保护,分别具有完美的偶电场和奇电场分布,且彼此正交,如图 5(a)所示。在图 2(a)中允许它们的能带在结构的 k 空间矢量位于  $k_x/K=0.12$  处产生能带的交叉而互不干扰。通过调谐 x 方向间距参数  $d_x$ ,在 $d_x=36$  µm 时,由于面外  $\sigma_z$  对称性被打破,导致其能带的交叉在  $k_x/K=0.12$  处被禁止,TE<sub>0</sub>和 TE<sub>1</sub>模式产生互作用,能带由交叉互不干扰变为相互作用的劈裂状态,如图 2(b)所示。TE<sub>1</sub>和 TE<sub>2</sub>模式的复本征频率分别为  $\Omega_1 = \omega_1 - i\gamma_1$ 和  $\Omega_2 = \omega_2 - i\gamma_2$ ,其中  $\omega_i$ 和  $\gamma_i$ (i=1,2)分别表示实本征频率和虚部衰减部分。根据耦合模理论,结构的哈密顿量可表示为<sup>[20]</sup>:

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Omega_1 & \alpha \\ \alpha & \Omega_2 \end{bmatrix} - \mathbf{i} \begin{bmatrix} 0 & \beta \\ \beta & 0 \end{bmatrix}$$
(1)

式中α和β分别为模式的近场和远场耦合。本征态可表示为:

$$\Psi^{+,-}(k_x) = c_1^{+,-} \psi_1(k_x) + c_2^{+,-} \psi_2(k_x)$$
(2)

式中: $\psi_1(k_x)$ 和 $\psi_2(k_x)$ 为2个模式没有耦合时的本征态; $c_1^{+-}$ 和 $c_2^{+-}$ 为哈密顿量 $\mathcal{H}$ 的特征向量。特征值可表示为:

$$\Omega^{+,-} = \frac{\Omega_1 + \Omega_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\Omega_1 - \Omega_2)^2}{4} + (\alpha - i\beta)^2}$$
(3)



Fig.3 Transmission spectrum of metasurface under different polarizations 图 3 超表面在不同偏振下的透射谱



Fig.4 Intensity distribution of *z*-component of magnetic field 图 4 磁场*z*分量强度分布

特征值的实部  $x = (\Delta \omega)^2 - (\Delta y)^2 + 4(\alpha^2 - \beta^2)$ ,虚部  $y = -2(\Delta \omega \Delta y + 4\alpha\beta)$ 。对于 TE<sub>1</sub>和 TE<sub>2</sub>模式,当没有打破面外对称 性时,式(3)的特征值的根号项的实部和虚部分别为  $x = (\Delta \omega)^2 - (\Delta y)^2 + 4(\alpha^2 - \beta^2)$ 和  $y = -2(\Delta \omega \Delta y + 4\alpha\beta)$ 。2个具有不同 电场奇偶性分布的模式 TE<sub>1</sub>和 TE<sub>2</sub>互作用,在没有打破面外不对称度时,没有模式间互作用,近场耦合系数  $\alpha = 0$ ,当  $\Delta \omega = 0$ 时,满足 x < 0, y = 0,此时本征模式简并,能带交叉。当打破面外不对称度时,近场耦合系数  $\alpha \neq 0$ ,远场耦合系数  $\beta = \pm (\sqrt{\gamma_{11}\gamma_{21}} - \sqrt{\gamma_{12}\gamma_{22}})$ ,其中  $\gamma_{mn}(m, n = 1, 2)$ 表示模式 TE<sub>m</sub>和上下辐射端口(分别为1号和2号 端口)的衰减因子。此时不能同时满足条件 x < 0, y = 0,本征模式不再简并,出现能带劈裂,这与 FEM 分析结果 吻合。

通过调谐x方向间距参数 $d_x$ ,可以影响上下两层结构之间的近场和远场耦合,从而可以在能带劈裂的互作用 区域观察到UGR等现象。2个模式的相互作用会产生一个非对称保护的高Q值FW(Friedrich-Wintgen)-BIC模式和 一个低Q值的UGR辐射模式,其Q值如图5(b)所示,这与图2(b)的能带结果体现的Q值相吻合。为更好地描述 UGR现象,本文引入辐射不对称度 $\eta = |E_{up} - E_{down}|/|E_{up} + E_{down}|$ ,其中 $E_{up}$ 和 $E_{down}$ 分别表示结构向上和向下辐射远场 辐射的电场模。

调谐结构的 k 空间矢量 k<sub>x</sub>和 x 方向间距参数 d<sub>x</sub>,当 d<sub>x</sub>=36 µm、k<sub>x</sub>/K=0.12 时,结构产生最大的辐射不对称度  $\eta$ =0.975 6,意味着 97.56% 的光子可通过器件耦合后单向传输。BIC 模式、辐射模式和 UGR 模式的电场 E<sub>y</sub>分量如 图 5(c)~图 5(e)所示。由于结构的面内存在 C2 对称性,当结构位于 k<sub>x</sub>/K=-0.12 时,可以观察到和图 5(e)对偶的向 下单向辐射的 UGR 态。值得注意的是,这里的 UGR 可以解释为 TE<sub>1</sub>和 TE<sub>2</sub>两个模式相互作用以后,由于其场分 布的 z 方向奇偶对称性不同,导致其在一个辐射方向干涉相消,能量无法向外辐射形成 BIC 态,而另一个辐射方 向上则不能够完全干涉相消,形成辐射态。



 Fig.5 Electric field distribution and Q value of the metasurface interaction modes

 图 5 超表面互作用模式的电场分布和Q值

## 3 结论

本文提出了一种新型全硅结构超表面,该结构采用双层硅方柱设计,通过调整两层间的水平间距 $d_x$ ,有效破坏了面外的 $\sigma_x$ 对称性,在不同的晶格矢量 $k_x$ 下,能够精确调控完美束缚的BIC态、偏振敏感的准BIC态以及UGR态。与金属结构相比,全硅结构的准BIC态展现出更高的Q值和更窄的线宽。仿真分析进一步证实,在破坏结构的几何对称性和改变入射角度的对称性后,准BIC态的Q值可达 $10^3 \sim 10^4$ 量级。此外,通过磁偶极子的不完全相消干涉机制,可解释准BIC态的能量泄露现象。研究还发现,通过调整 $d_x$ ,可在非 $\Gamma$ 点位置产生定向辐射。从能带理论角度分析,具有不同奇偶对称性的TE模式可通过带间耦合相互作用,导致能带劈裂,并在能带交界处形成准BIC态和UGR态。本研究提出的结构设计简化了制造过程,仅需调整x方向间距 $d_x$ 即可实现准BIC态和UGR态的调控,无需复杂的倾斜刻蚀步骤。该工作在生物化学传感、高性能通信和高效光栅耦合等领域展现出巨大的应用潜力。

#### 参考文献:

- CHEN H T, TAYLOR A J, YU N F. A review of metasurfaces: physics and applications[J]. Reports on Progress in Physics, 2016, 79(7):076401. doi:10.1088/0034-4885/79/7/076401.
- [2] ZANG Xiaofei, YAO Bingshuang, CHEN Lin, et al. Metasurfaces for manipulating terahertz waves[J]. Light Advanced Manufacturing, 2021,2(1):1-25. doi:10.37188/lam.2021.010.
- [3] MARKELZ A G, MITTLEMAN D M. Perspective on terahertz applications in bioscience and biotechnology[J]. ACS Photonics, 2022,9(4):1117-1126. doi:10.1021/acsphotonics.2c00228.
- [4] YAN Zhiyao, ZHU Liguo, MENG Kun, et al. THz medical imaging: from in vitro to in vivo[J]. Trends in Biotechnology, 2022, 40(7): 816-830. doi:10.1016/j.tibtech.2021.12.002.
- [5] XU Guizhen, XING Hongyang, XUE Zhangqiang, et al. Recent advances and perspective of photonic bound states in the continuum[J]. Ultrafast Science, 2023(3):0033. doi:10.34133/ultrafastscience.0033.
- [6] KILDISHEV A V,BOLTASSEVA A,SHALAEV V M. Planar photonics with metasurfaces[J]. Science, 2013,339(6125):1232009. doi:10.1126/science.1232009.
- [7] VESELAGO V G. The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ε and μ[J]. Soviet Physics-Uspekhi, 1968,10(4):509.
- [8] YIN X F,JIN J C,SOLJAČIĆ M,et al. Observation of topologically enabled unidirectional guided resonances[J]. Nature, 2020,580 (7804):467-471. doi:10.1038/s41586-020-2181-4.
- [9] ZENG Yixuan, HU Guangwei, LIU Kaipeng, et al. Dynamics of topological polarization singularity in momentum space[J]. Physical Review Letters, 2021,127(17):176101. doi:10.1103/PhysRevLett.127.176101.
- [10] TANG H N, DEVAULT C, CAMAYD-MUÑOZ S A, et al. Low-loss zero-index materials[J]. Nano Letters, 2021,21(2):914-920. doi:10.1021/acs.nanolett.0c03575.
- [11] WANG Haiwen, GUO Cheng, JIN Weiliang, et al. Engineering arbitrarily oriented spatiotemporal optical vortices using transmission nodal lines[J]. Optica, 2021,8(7):966.
- [12] YANG Zhenqian, SHAO Zengkai, CHEN Huazhou, et al. Spin-momentum-locked edge mode for topological vortex lasing[J]. Physical Review Letters, 2020,125(1):013903. doi:10.1103/PhysRevLett.125.013903.
- [13] QIAO Zhen, YUAN Zhiyi, ZHU Song, et al. High orbital angular momentum lasing with tunable degree of chirality in a symmetrybroken microcavity[J]. Optica, 2023,10(7):846-853. doi:10.1364/OPTICA.486582.
- [14] SROOR H, HUANG Y W, SEPHTON B, et al. High-purity orbital angular momentum states from a visible metasurface laser[J]. Nature Photonics, 2020(14):498-503. doi:10.1038/s41566-020-0623-z.
- [15] GUPTA M,SAVINOV V,XU N N,et al. Sharp toroidal resonances in planar terahertz metasurfaces[J]. Advanced Materials, 2016, 28(37):8206-8211. doi:10.1002/adma.201601611.
- [16] LIU Dejun, YU Xi, WU Feng, et al. Terahertz high-Q quasi-bound states in the continuum in laser-fabricated metallic doubleslit arrays[J]. Optics Express, 2021,29(16):24779-24791. doi:10.1364/OE.432108.
- [17] NIU Jiaqi,ZHAI Yueqi,HAN Qingqing, et al. Resonance-trapped bound states in the continuum in metallic THz metasurfaces[J]. Optics Letters, 2021,46(2):162–165. doi:10.1364/OL.410791.
- [18] 赵正韬,张亚倩,肖中银,等.太赫兹全金属超构表面的极化无关准BICs研究[J].太赫兹科学与电子信息学报, 2024,22(7): 689-694, 702. (ZHAO Zhengtao, ZHANG Yaqian, XIAO Zhongyin, et al. Polarization-independent quasi-bound states in the continuum based on terahertz all metal metasurfaces[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2024,22(7):689-694, 702.) doi:10.11805/TKYDA2024096.
- [19] KOSHELEV K,LEPESHOV S,LIU M K,et al. Asymmetric metasurfaces with high-Q resonances governed by bound states in the continuum[J]. Physical Review Letters, 2018,121(19):193903. doi:10.1103/PhysRevLett.121.193903.
- [20] SUH W, WANG Z, FAN S H. Temporal coupled-mode theory and the presence of non-orthogonal modes in lossless multimode cavities[J]. IEEE Journal of Quantum Electronics, 2004,40(10):1511-1518. doi:10.1109/JQE.2004.834773.

#### 作者简介:

**吴佳奕**(2000-),男,在读博士研究生,主要研究方 向为全介质太赫兹 BIC 超表面.email:beyondw@outlook. com. **欧阳春梅**(1980-),女,博士,副教授,主要研究方 向为太赫兹光子学及其应用技术.