

基于金属基底非对称介质超光栅的太赫兹 宽带吸收谱增强

王子靖¹, 李向军^{1,2*}, 严德贤^{1,2}

(1. 中国计量大学 信息工程学院, 浙江 杭州 310018;

(2. 中国计量大学 太赫兹研究所, 浙江 杭州 310018)

*xiangjun_li@cjlu.edu.cn

摘要: 太赫兹分子指纹谱是一种非常有潜力的无标记检测方法, 在实际应用往往需要对微量甚至痕量样品检测。然而太赫兹波的波长远远大于待测分子的尺寸, 导致波与痕量物质之间的相互作用较为微弱, 需要额外结构来增强样品对电磁波的吸收。本文在金属基底上构造了倒置的非对称介质光栅结构, 该结构利用导模共振(Guided-mode resonance, GMR)和连续域束缚态(Bound state In Continuum, BIC)显著提升了薄膜样品的太赫兹吸收谱。同时仅需测量反射吸收信号就可以得到薄膜增强吸收谱, 而且样品涂覆于倒置的介质光栅平坦的背面, 易于制备。当该结构用于 0.2 μm 厚的 α -乳糖薄膜时, 吸收谱幅度增强达到 236 倍。该结构为太赫兹波段痕量分析物的检测提供了一种新的方法。

关键词: 太赫兹; 指纹谱; 吸收增强; 超光栅; 金属基底

中图分类号: TN214 **文献标志码:** A

Terahertz broadband absorption spectrum enhancement based on asymmetric dielectric metagrating on a metal substrate

WANG Zi-jing¹, LI Xiang-jun^{1,2*}, YAN De-xian^{1,2}

(1. College Of Information Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China;

(2. Centre for THz Research, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China;)

*xiangjun_li@cjlu.edu.cn

Abstract: Terahertz molecular fingerprinting is a promising method for label-free detection, and it is necessary to detect micro or trace mount samples in practical applications. However, the wavelength of terahertz waves is much larger than the size of the molecules to be tested, resulting in a weak interaction between the waves and the matter, so additional structures are needed to enhance the absorption of electromagnetic waves by the trace-mount sample. In this paper, an inverted asymmetric dielectric grating structure is constructed on a metal substrate, and the terahertz¹ absorption spectrum of thin film samples is significantly enhanced by utilizing Guided-

收稿日期: xxxx-xx-xx; **修订日期:** xxxx-xx-xx

基金项目: 浙江省公益技术研究工业项目 (LTGN23C180003); 国家重点研发计划

(2021YFF0600300); 国家自然科学基金(62175223)

Basic Public Welfare Research Project of Zhejiang Province (LTGN23C180003); National Key R&D Program of China (2021YFF0600300); National Natural Science Foundation of China(62175223).

mode resonance(GMR) and a bound state in the continuum (BIC) effect. The boosted absorption spectra of thin films can be obtained by simply measuring the reflected absorption signal, and the samples are coated on the flat backside of the inverted dielectric grating, which is easy to prepare. When the thickness of the α -lactose film as an example is 0.2 μm , the absorption enhancement factor in amplitude reaches 236. This study provides a new method for trace analytes detecting in the terahertz band.

Key words: terahertz; fingerprint spectrum; absorption enhancement; metagrating; metal substrate

1 引言

在太赫兹波段(0.1~10 THz),许多分子尤其是有机及蛋白质等大分子具有其独特的分子内和分子间动力学振动或旋转模式,并体现在其太赫兹指纹吸收谱的特征吸收峰形状和频率上,因此太赫兹光谱技术提供了一种无标记且非破坏性的特异性分析检测方法^[1-6]。然而,由于大分子的尺寸远小于太赫兹波长,导致太赫兹波与物质之间的相互作用较弱^[7-9]。尤其在对微量和痕量分析物进行检测时,需要额外结构增强太赫兹波与物质的相互作用^[10]。其中许多研究者利用超光栅结构来增强局部太赫兹电场,从而增强分析物的太赫兹指纹谱。然而,其中的金属超光栅增强结构存在较大的欧姆损耗,导致增强效果不佳^[11-13]。与之相比,全电介质超光栅增强结构由于其非常低的损耗和更强的电场局域能力而具有显著优势。其中基于参数复用的介质超光栅能够通过多个不同尺寸的单元结构或多个入射波角度来产生一系列谐振峰^[14]。这些谐振峰能够显著增强波与物质的相互作用。特别地,当分析物的吸收谱发生变化时,这些谐振峰的峰值也会相应变化,其包络线与分析物的特征吸收谱形状一致,但其幅度远高于未增强的吸收谱。这种复用机制能够显著增强微量分析物的太赫兹指纹吸收谱,因此拥有巨大的应用价值。

2018年,Andreas Tittl^[15]等人基于几何复用的方式,通过具有对称性双椭圆柱单元结构的介质超光栅实现了蛋白质在中红外波段吸收谱增强。2019年A. Leitis^[16]等人结合以前的工作并利用了支持连续域束缚态(BIC)的双椭圆单元结构的介质超光栅进行角度复用增强蛋白质、核酸适配体和聚赖氨

酸在红外波段的吸收谱。2024年,J Lin^[17]等人提出了一种基于全硅介质超光栅利用角度复用在太赫兹和中红外区域实现对微量爆炸物分子2,4-DNT的高灵敏度检测。2023年,本课题组提出了一维塑性光子晶体缺陷腔结构的太赫兹吸收谱增强方法,通过调整缺陷腔的宽度增强微量样品的太赫兹吸收谱^[18]。2024年,本课题组设计了一种基于可拉伸基底的介质超光栅增强太赫兹吸收谱^[19]。

从以上研究可知,导模共振(GMR)和BIC是介质超光栅复用增强技术的主要增强机制。GMR的产生机理是当入射光波与介质光栅结构所支持的导模发生耦合时,由于满足相位匹配条件,导致光波能量在特定频率处重新分布,形成高 Q 谐振峰。BIC是一种频率位于辐射连续域内但又被完全束缚、无任何能量泄漏的特殊共振模。根据BIC与远场辐射耦合的方式可以将其分为两类:第一类是对称保护型BIC,这类BIC的形成源于结构对称性的破坏。当系统原有的对称性因为某些原因(如缺陷或非对称设计)被打破时,可以形成BIC。第二类是偶然BIC,这类BIC通常是通过精细调节系统参数而获得的。与对称保护型BIC不同,偶然BIC并不是由对称性破坏直接引起的,而是在特定参数条件下自然形成的一种非泄漏模式^[20]。BIC具有激发超高品质(Quality, Q)因子的谐振模式的能力,能够极大地增强光与物质的相互作用^[21-23],是实现吸收谱增强效果的基础。虽然理论上BIC可具有无穷大的 Q 因子,然而实际中由于结构缺陷、材料吸收和其他外部因素的扰动使其转变为具有有限 Q 值的准BIC模式^[24]。

另一方面,常见的介质超光栅太赫兹吸收谱增强方案通常需要在超光栅单元上覆盖分析物层,由于单元结构具有较大的特征

尺寸,通常是约几十微米至数百微米的凹凸结果的不稳定。已有研究已经尝试将分析物涂在介质超光栅衬底的平坦背面^[25],在保持较好增强效果的同时,便于样品制备和保持一致性,使得测试结果稳定可重复。然而其同时需要测量透射和反射信号,实验过程繁琐复杂。

本文设计了一种基于金属基底的全电介质超光栅结构用于薄膜分析物的宽带太赫兹吸收谱增强。在该设计中,将超薄痕量分析物均匀涂覆在介质超光栅平坦的背面,光栅倒置在金属基底上。由于金属基底的反射,太赫兹波与分析物之间的相互作用得到了进一步增强^[26]。此外,只需要通过检测一系列反射谱得到增强吸收谱,有效简化了实验操作,避免了噪声影响。本文利用数值模拟方法研究得到对于 0.2 μm 厚的乳糖薄膜待测物,在 0.48–0.58 THz 的频率范围内吸收增强因子达到了 236 倍。该结构为太赫兹波段痕量分析物的检测提供了一种新的思路。

2 结构设计与工作原理

本文提出的全介质超光栅由聚乙烯(PE)光栅阵列和金属 Au 基底组成,其中金属基底置于 PE 超光栅列下(图 1),其尺寸参数如

结构,会造成分析物分布的不均匀性和测试下:单元周期 $p=380\ \mu\text{m}$,光栅高度和 PE 衬底厚度为 $h_1=h_2=140\ \mu\text{m}$,光栅宽度 $w_1=w_3=150\ \mu\text{m}$,光栅间隔为 $w_2=60\ \mu\text{m},w_4=20\ \mu\text{m}$ 。在太赫兹波段,PE 的折射率为 1.54,损耗可以忽略^[27]。在实验中,使用太赫兹时域光谱技术(THz-TDS)来测量宽谱信号,通过改变发射天线和接收天线之间的角度实现不同入射角度的反射谱测量^[1]。微注塑成型技术可以用于加工该 PE 一维光栅阵列,首先制作高精度模具,然后用注塑工艺制作 PE 一维光栅结构,脱模后倒置粘合在金属基底上。将来我们将在此基础上展开相关实验,验证本文仿真结果的可靠性。介质超光栅的吸收谱增强机理通过电磁场的有限元方法进行数值模拟研究,并根据模拟结果对结构参数进行优化。在数值计算中,沿 z 方向在光栅顶部设置了入射端口, x 和 y 方向设置为周期性边界条件。根据 PE 和 Au 在太赫兹波段的材料特性,假设 PE 是无损的,并且使用完美电导体(PEC)替代了 Au 金属基底以简化计算^[28]。采用可调谐横向电偏振的太赫兹波(TE)入射以保持电场平行于分析物平面,从而确保太赫兹波与痕量样品之间的强相互作用^[29]。通过改变入射角度,反射光谱的谐振峰发生平移,其谐振峰最终形成宽频带的反射包络曲线。

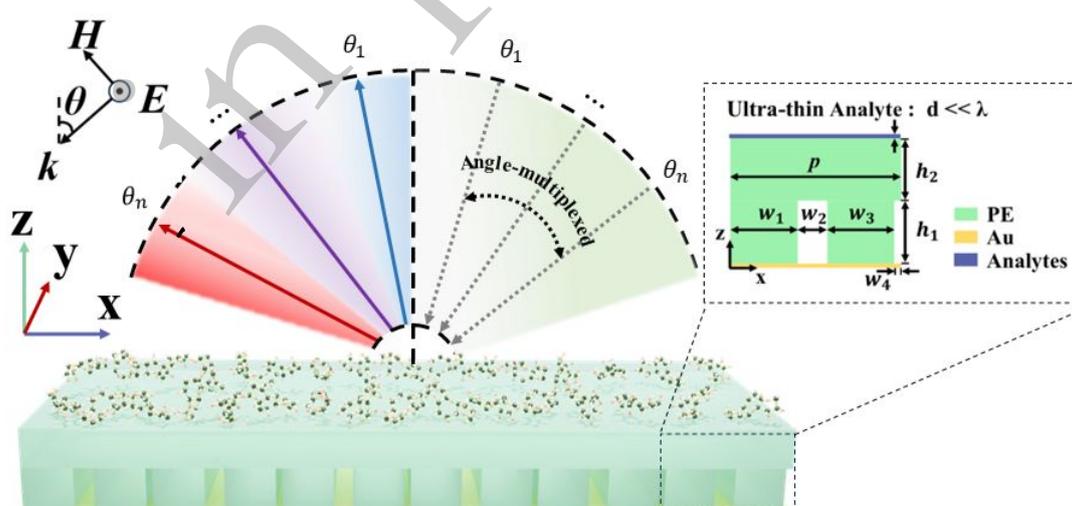


图 1 金属基底上倒置全介质超光栅角度复用增强薄膜太赫兹吸收谱结构示意图。符号 w_1 , w_2 , w_3 和 w_4 分别表示四个光栅元件的宽度, p , h_1 , h_2 和 d 分别表示单元结构周期、光栅高度、波导层厚度和分析

物厚度

Fig.1 Schematic diagram of the inverted metagrating on the metal substrate for THz absorption enhancing of a film analyte. The symbols $w_1, w_2, w_3,$ and w_4 denote the widths of the four grating elements, while $p, h_1, h_2,$ and d represent the unit cell period, grating layer height, WG layer height, and analyte thickness, respectively

设计的全介质超光栅结构使用角度复用的方式, 首先能够激发出一系列导模共振 (GMR) 模式, 这些模式的谐振峰可以覆盖较宽 THz 频率范围, 用于薄膜分析物的吸收增强。GMR 的产生机理是当入射光波与介质光栅结构所支持的导模发生耦合时, 由于满足相位匹配条件, 导致光波能量在特定频率处重新分布, 形成高 Q 谐振峰。其具体耦合过程可以用光栅波矢和导模的传播系数表达式具体说明。这里当太赫兹波以一定角度 θ 入射到介质光栅时, 光栅产生的 m 阶衍射波的波矢分量可以表示为

$$k_x = k_0 \cdot \sin \theta - m \cdot \frac{2\pi}{p} (m = \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (1)$$

其中 p 是光栅周期, m 是衍射级次。TE 波入射到超光栅上时, 产生 m 阶衍射 GMR 的传播系数 β 表示如下^[25]:

$$\beta = k_0 \cdot \sin \theta - k_0 \cdot \frac{mc}{pf_{GMR}}, \quad (2)$$

其中 f_{GMR} 为共振峰频率, 每个太赫兹波的入射角 θ 都有一个相应的 GMR 模式的特征频率, 传播系数 β 可以通过下列特征方程进行求解^[25]:

$$h_2 \sqrt{k_0 n_2^2 - \beta^2} = 2 \arctan \left(\frac{n_2^2 \sqrt{\beta^2 - k_0^2 n_1^2}}{n_1^2 \sqrt{k_0^2 n_2^2 - \beta^2}} \right), \quad (3)$$

其中 h_2 是波导层厚度, n_1 和 n_2 分别为空气和 PE 光栅的折射率。

在特定的入射条件下, 当入射波与光栅支持的导模满足相位匹配条件, 即波矢匹配和能量守恒条件, 将激发 GMR 谐振^[30], 在特定频率处形成尖锐的反射峰或透射峰, 这一特性可以被用于增强太赫兹波段薄膜待测物的指纹吸收谱。如图 2(a)所示, 由于 PE 在太赫兹波段通常被认为是无损材料, 同时金属 Au 基底对太赫兹波的反射率接近 100%, 因此在没有涂覆乳糖的情况下不同入射角度太赫兹波的反射系数都非常接近 1, 介质超光栅中 GMR 模式吸波强度几乎为零。图 2(b)是涂覆厚度为 $d=0.5 \mu\text{m}$ 乳糖时的反射曲线, 反射谐振峰随着入射角度从 3 度增加 20 度, 而从 0.57THz 减小到 0.47THz。反射系数在 0.47-0.53THz 范围内逐渐增大, 在 0.53-0.57THz 范围内逐渐减小。而 0.53THz 为乳糖薄膜的特征吸收峰。接下来我们将把反射系数转换为吸收率, 进一步得到乳糖薄膜的增强吸收谱。

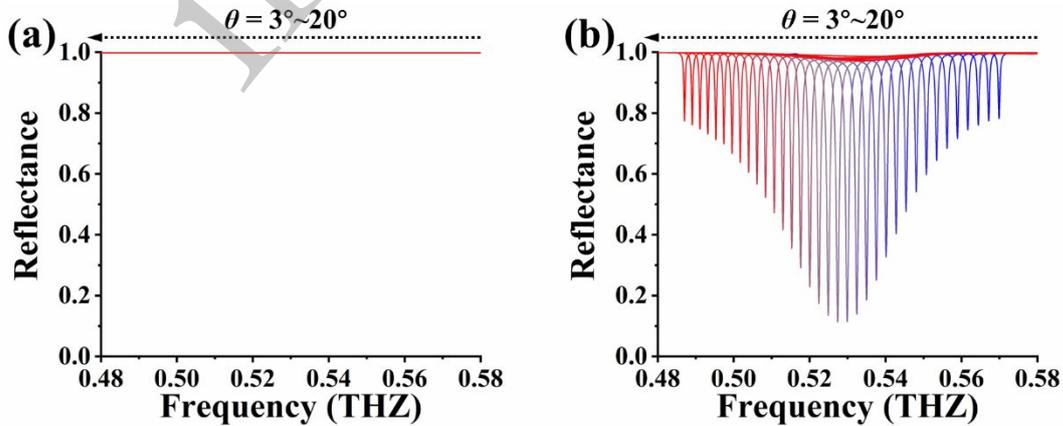


图 2 当入射角从 3° 增加到 20° 时超光栅结构的反射谱。(a)未涂覆 α -乳糖的反射曲线; (b)涂覆 $0.5 \mu\text{m}$ α -乳糖的反射曲线

Fig.2 Reflectance of the structure with angle of incidence increased from 3° to 20° . (a) Reflection curves for

uncoated α -lactose; (b) Reflection curves for coated 0.5 μm α -lactose

3 结果和讨论

为了说明吸收谱增强结构的电磁场局域机制, 本文给出该结构的色散关系, 如图 3(a)所示。在图 3(b)中, 给出了介质超光栅吸收率曲线与入射角 θ 的关系(乳糖薄膜厚度 $d=1 \mu\text{m}$)。图中清晰显示了不通入射角度下窄吸收峰的位置, 与 3(a)色散曲线对应。

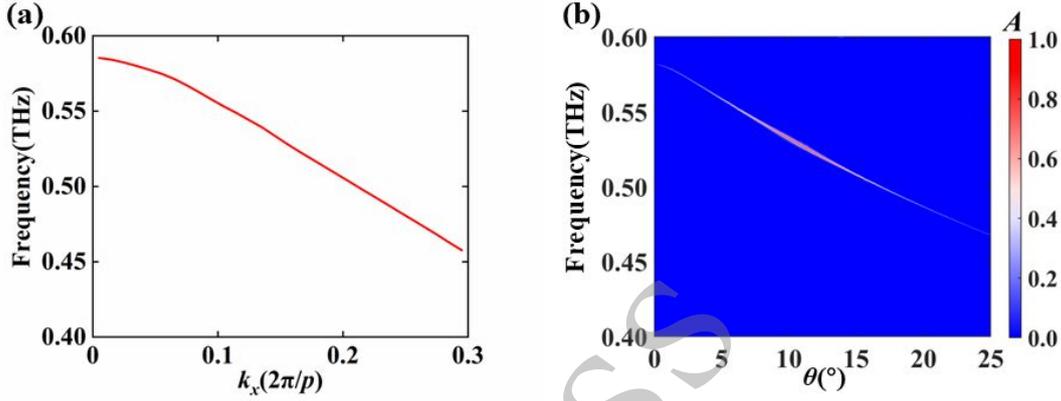


图 3 (a)超光栅中 TE 波基模的色散关系; (b)覆盖有 1 μm α -乳糖的结构吸收率(A)与频率和入射角度的关系
Fig.3 (a) Dispersion relation of the TE wave fundamental mode in the superlattice; (b) Absorbance (A) of the structure covered with 1 μm α -lactose as a function of the frequency and incident angle(θ)

本文所设计的结构对 α -乳糖薄膜宽带特征吸收谱的增强能力与其在一定太赫兹波入射角度 θ 所产生谐振峰的 Q 因子密切相关。这是由于谐振峰的 Q 因子高低与电磁波在超光栅结构中产生的局域场强度对应, 高 Q 因子意味着局域场强度大, 可以有效增强了电磁波与超光栅上薄膜待测物之间的相互作用, 这是吸收光谱增强的重要物理机制。其中 Q 因子可以表示为^[32]:

$$Q = \frac{f}{\Delta f}, \quad (4)$$

其中 f 表示谐振峰频率, Δf 表示谐振峰的最大半宽(FWHM)。通过改变光栅宽度、光栅高度以及波导层厚度, 可以得到一系列不同的 Q 因子。尽管 Q 值越高, 增强效果越好, 但需要考虑测量系统的最高分辨率来选取合适的 Q 值。在本文中, 优化的几何尺寸参数($p=380 \mu\text{m}$, $h_1=h_2=140\mu\text{m}$, $w_1=w_3=150\mu\text{m}$, $w_2=60\mu\text{m}$, $w_4=20 \mu\text{m}$, $d=0.2 \mu\text{m}$)所对应的最大 Q 因子约为 756。

入射角从 0° 增加到 25° , 吸收谐振峰带宽达到 0.13 THz 左右, 并且不存在其它谐振模式对其产生影响, 出现谐振峰重叠的情况, 这有助于确保所增强吸收谱的准确性。同时, 图 3 说明在入射角接近 0° 有对称保护 BIC 模式被 GMR 谐振激发, 而 GMR 谐振是由于衬底的波导模式(Guided Mode, GM)被超布里渊区折叠而形成^[31]。

本研究涉及的待测物 α -乳糖介电常数可用 Drude-Lorentz 模型描述^[25, 33]:

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \frac{\Delta\varepsilon_p \omega_p^2}{\omega_p^2 - \omega^2 - j\gamma_p \omega}, \quad (5)$$

式中, ε_{∞} 表示高频介电常数, ω_p 和 γ_p 分别表示谐振角频率和阻尼率, $\Delta\varepsilon_p$ 是振荡强度因子, 这里 $\varepsilon_{\infty}=3.145$, $\omega_p=0.529 \times 2\pi \times 10^{11} \text{ rad}\cdot\text{s}^{-1}$, $\gamma_p=1.59 \times 10^{11} \text{ rad}\cdot\text{s}^{-1}$ 和 $\Delta\varepsilon_p=0.052$ 。在 0.48 THz ~ 0.58 THz 范围内, 对应的介电常数实部和虚部如图 4(b)所示。

通过改变太赫兹波入射角度 θ , 可以得到涂覆 α -乳糖薄膜的超光栅的一组反射光谱, 相应的吸收率 A 可以表示为:

$$A = 1 - T - R, \quad (6)$$

其中 T 和 R 分别表示为透射率和反射率, 由于结构中设有金属基底, 因此太赫兹波的透过率接近于零, 故取 $T=0$ 。如图 4(a)所示, 当入射角度从 3° 增加到 20° (步长为 0.5°)时, 涂覆 $0.2 \mu\text{m}$ α -乳糖超光栅上的吸收峰(灰色实线)从 0.570 THz 减小到 0.487

THz。红色虚线为超光栅吸收峰的包络线，与未经增强的 $0.2 \mu\text{m}$ α -乳糖薄膜吸收曲线放大 236 倍(蓝色实线)相当，因此该结构结构对 $0.2 \mu\text{m}$ α -乳糖吸收光谱增强因子约为 236 倍。为了进一步探究该超光栅的太赫兹吸收谱增强机理，图 4(c)中给出了没有待测物以及涂覆 $0.2 \mu\text{m}$ α -乳糖时谐振频率 $0.559\text{THz}(\theta=5^\circ)$ 、 $0.543\text{THz}(\theta=8^\circ)$ 、 $0.529\text{THz}(\theta=11^\circ)$ 、 $0.513\text{THz}(\theta=14^\circ)$ 和 $0.5\text{THz}(\theta=17^\circ)$ 处的电场分布对比图。在谐振峰处，电场(x-z 平面)显著地局域在波导层中，

该特点有助于增强光栅背面待测物薄膜对太赫兹波的吸收。与未涂覆 α -乳糖的电场分布图相比，涂覆有 α -乳糖的超光栅结构电场强度明显降低。这是因为谐振峰接近 α -乳糖的特征吸收峰 0.529 THz 的时候，增强的电场使 α -乳糖可以吸收更多的太赫兹波能量，超光栅的电场强度最低，分析物吸收率最高。如图 5(a)所示当结构表面没有乳糖时接近 0.53THz 的各频点电场比较接近，当加载乳糖时， 0.53THz 附近电场显著降低，达 9.2% 。

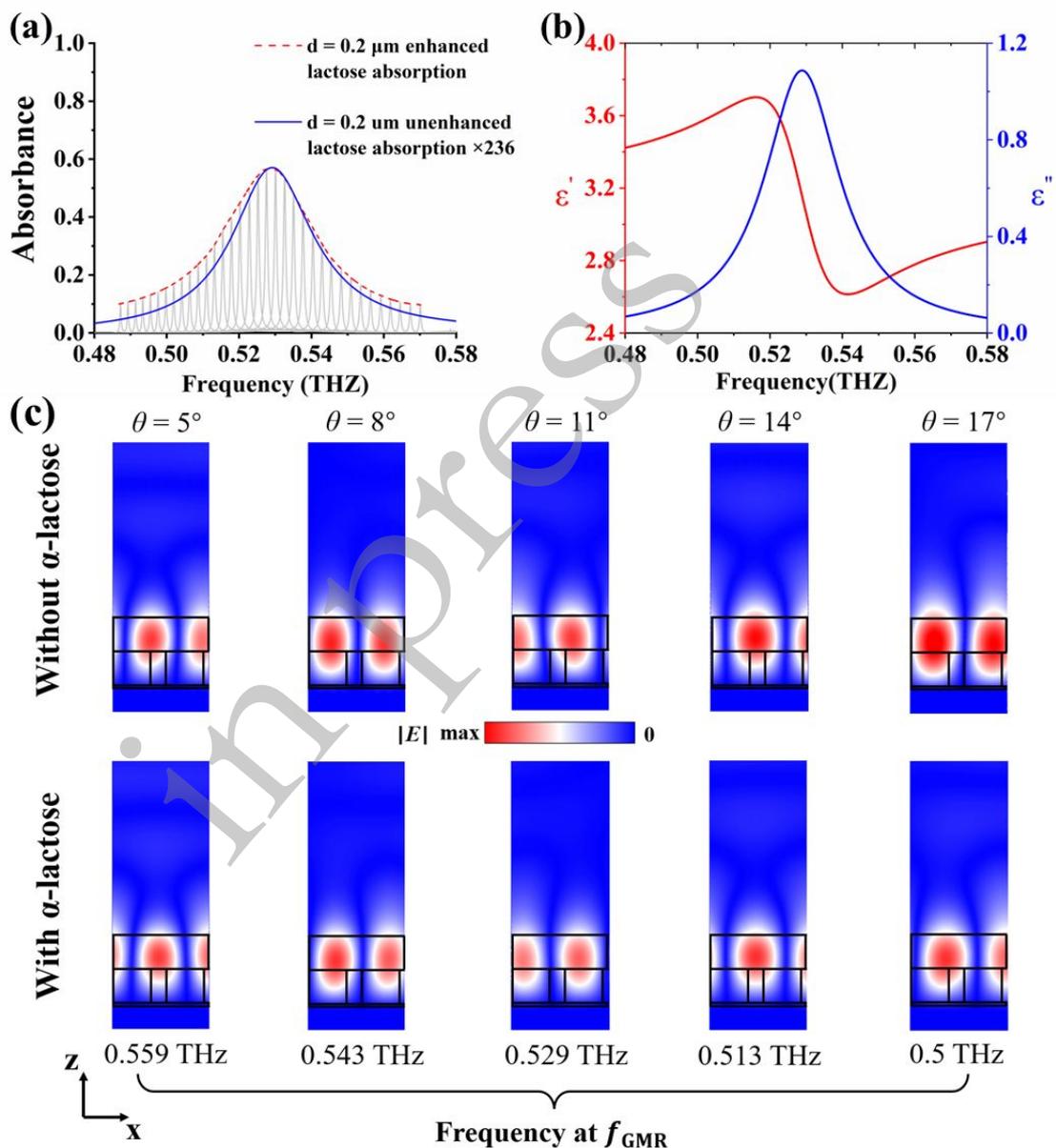


图 4 本文超光栅结构增强乳糖薄膜的太赫兹吸收谱。(a) $0.2 \mu\text{m}$ 纯 α -乳糖薄膜吸收光谱 (蓝色实线)，涂覆有 $0.2 \mu\text{m}$ α -乳糖的吸收光谱(灰色实线)，涂覆有 $0.2 \mu\text{m}$ α -乳糖吸收光谱包络线(红色虚线)；(b)0.48 THz-0.58 THz 波段内 α -乳糖介电常数的实部和虚部；(c)在不同的入射角 θ 下，涂覆有 α -乳糖($d=0.2$

μm)和未涂覆 α -乳糖对应共振频率下的 x - z 平面归一化电场分布

Fig.4 Terahertz absorption spectra of lactose thin films enhanced by the structure in this paper. (a) Absorption spectrum of $0.2 \mu\text{m}$ pure α -lactose film (blue solid line), absorption spectrum coated with $0.2 \mu\text{m}$ α -lactose (gray solid line), and the envelope of the absorption spectrum coated with $0.2 \mu\text{m}$ α -lactose (red dashed line); (b) the real and imaginary parts of the α -lactose dielectric constants in the band of $0.48 \text{ THz} \sim 0.58 \text{ THz}$; (c) the absorption spectra of the thin-film coating of α -lactose ($d=0.2 \mu\text{m}$) and uncoated α -lactose ($d=0.2 \mu\text{m}$) under different incidence angles θ at corresponding resonant frequencies. lactose ($d=0.2 \mu\text{m}$) and uncoated α -lactose at different incidence angles θ . The x - z plane normalized electric field distributions at the corresponding resonance frequencies are shown below.

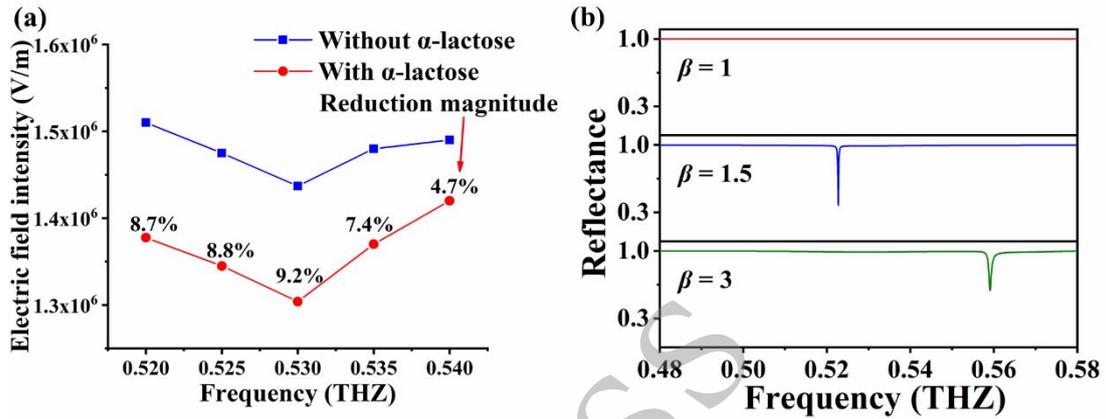


图5 (a)不同入射角(θ)和频率下有无涂覆 α -乳糖电场强度的变化情况。红色点上方标注的数字表示涂覆 α -乳糖后结构中最大电场强度相较于无涂覆乳糖的降低百分比。(b)太赫兹波入射角度 $\theta=5^\circ$ 时不同 γ 值的超表面反射谱。

Fig.5 (a) Changes in electric field intensity with and without α -lactose coating under different incident angles (θ) and frequencies. The numbers above the red dots represent the percentage reduction in the maximum electric field intensity of the structure with α -lactose coating compared to that without the coating.(b) Reflectance spectra of the metasurface at different γ values with a terahertz wave incident angle of $\theta = 5^\circ$.

接下来, 将讨论 α -乳糖薄膜厚度对吸收谱增强效果的影响。图 6(a)给出太赫兹波入射角度以 0.5° 的步长从 3° 增加到 20° 时, 光栅增强 $0.1 \sim 0.5 \mu\text{m}$ 乳糖的增强吸收谱, 增强因子分别为 373、236、197、170 和 148。增强因子随厚度增加而减小。这是由于超光栅局域的电磁场强度一定, 随着薄膜厚度增加, 电磁场被吸收的比例无法线性增加。

光栅单元各个几何参数对吸收谱增强效果有重要影响, 接下来分别研究了光栅高度 h_1 和波导层厚度 h_2 对吸收光谱增强效果的影响, 如图 6(b)和(c)所示。当 $h_2=140 \mu\text{m}$, h_1 从 $120 \mu\text{m}$ 增加到 $160 \mu\text{m}$ 时, 吸收谱包络线峰值逐渐减小最终趋近稳定, 对

应的吸收增强因子分别为 349、288、236、205、193。这是由于光栅中约束电磁场中心位置远离分析物, 从而减弱了太赫兹波与分析物间的相互作用, 导致吸收光谱包络线峰值减小。当 $h_1=140 \mu\text{m}$, h_2 从 $100 \mu\text{m}$ 增加到 $140 \mu\text{m}$ 时, 对应的吸收增强因子分别为 325、307、273、252、236, 包络线峰值在 $h_2=100 \mu\text{m}$ 时达到最大。这也可归因于衬底中电磁场约束中心远离分析物, 减弱了太赫兹波与分析物间的相互作用。

其次, 由于超单元里两个光栅结构间隔不同, 可对应 QBIC 模式。为了讨论单元结构不对称产生 QBIC, 定义了不对称参数 β

$= \frac{w_2}{w_4}$, 如图 5(b)所示, 当太赫兹波以 5° 入射,

随着 β 的增加单元结构从完全对称转变为非对称, BIC 也随之转变为 QBIC。 $\beta=1$ 时, 共振峰消失, 随着 β 从 1 增加到 3, 共振峰出现并逐渐变宽, Q 因子降低。为了展现同一单元里第一元件和第二元件之间的尺寸

差异对吸收谱增强效果的影响, 定义了一个参数 $\gamma = \frac{w_1}{w_2}(w_1 + w_2 = 210 \mu\text{m})$, 其中 w_1, w_2 分别为同一单元里第一元件的宽度。图 6(d)

给出当 $h_1=h_2=140 \mu\text{m}, d=0.2 \mu\text{m}$ 时不同 γ 值的吸收谱增强对比情况。随着 γ 从 0.25 增加到 2, 第一元件与第二元件之间的宽度差先减小后增大, 引起吸收谱谐振峰包络线变化。这种现象是由于结构横向变化引起的局部场强改变, 进而影响了薄膜样品的吸收率特性。结果显示当 $\gamma=2$ 时, 吸收增强倍数达到最大值。这是由于随着 γ 不断增加, w_2 逐渐减小并趋近于 w_4 的值, 导致单元结构中的对称性增强, 使 QBIC 向 BIC 转变, 因此吸收增强倍数增大。

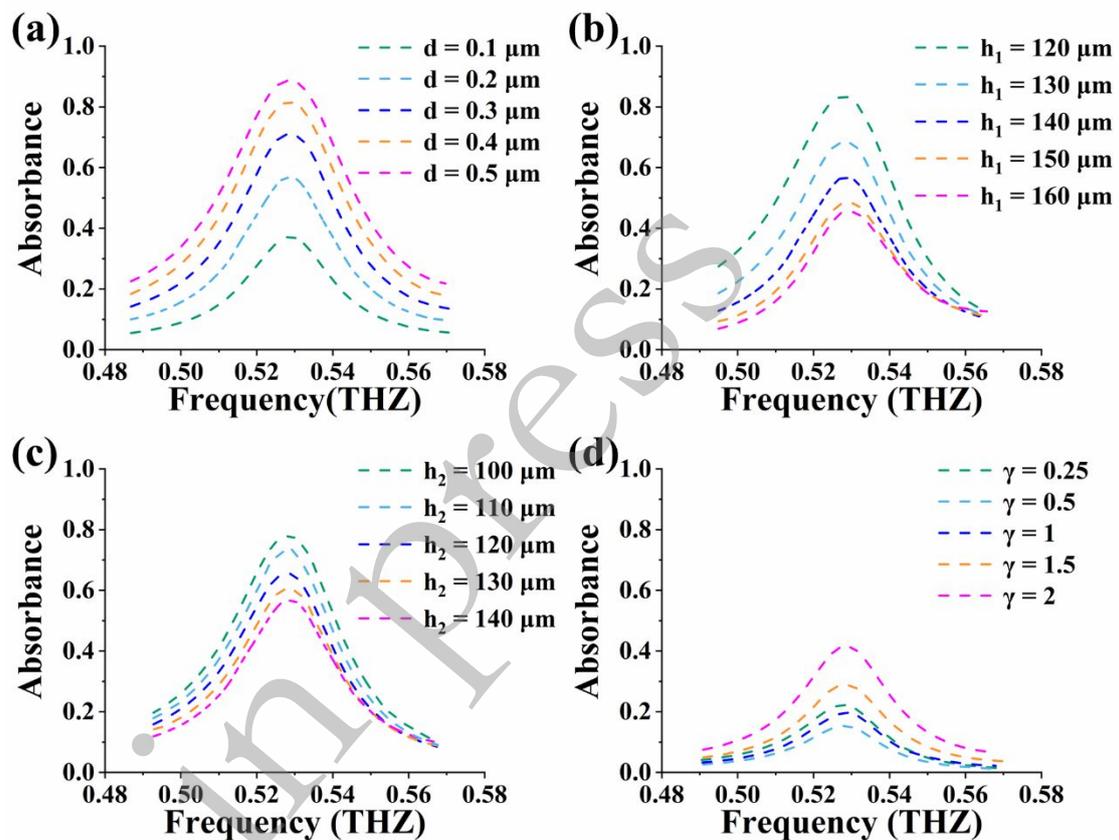


图 6 吸收增强光谱与薄膜厚度及光栅参数的关系($h_1=h_2=140 \mu\text{m}, w_1=w_3=150 \mu\text{m}, w_2=60 \mu\text{m}, w_4=20 \mu\text{m}$)。 (a) 超光栅上不同厚度的 α -乳糖的吸收包络曲线。 (b) 不同 h_1 下的吸收率包络曲线。 (c) 不同 h_2 下的吸收率包络曲线。 (d) 不同 γ 的吸收率包络曲线。

Fig.6 Absorption enhancement spectra versus film thickness and metagrating parameters ($h_1=h_2=140 \mu\text{m}, w_1=w_3=150 \mu\text{m}, w_2=60 \mu\text{m}, w_4=20 \mu\text{m}$). (a) Absorbance envelope curves for different thicknesses of α -lactose on the metasurface. (b). Absorbance envelope curves at different h_1 . (c) Absorbance envelope curves at different h_2 . (d) Absorbance envelope curves for different γ .

为了进一步说明本研究提出光栅结构良好的增强性能, 表 1 列出了其与其他介质超表面增强效果的对比情况。本研究中提出

的带有金属衬底的倒置介质结构实现了超过 236 倍的增强效果, 有显著提高。同时, 待测物为均匀薄膜, 非常方便制备。

表 1. 我们设计的结构与目前基于不同复用方法的元表面或光栅的吸收增强性能比较

Tab. 1 Comparison of absorption enhancement performances of our designed structure and present metasurfaces or gratings based on different multiplexing method

文献	单元结构	分析物	复用模式	工作波段	增强倍数
[34]	介质柱	PMMA	入射角	中红外	~50 倍
[10]	介质柱	PMMA	单元几何尺寸	中红外	~60 倍
[15]	介质光栅	hBN	入射角	中红外	~30 倍
[16]	介质光栅	α -lactose	入射角	太赫兹	~20 倍
[19]	介质光栅	α -lactose	单元几何尺寸	太赫兹	~101 倍
本文	介质光栅(金属基底)	α -lactose	入射角	太赫兹	~236 倍

4 结 论

综上所述, 本文提出了一种基于金属基底非对称介质超光栅增强太赫兹吸收谱的方法, 通过角度复用增强薄膜分析物的太赫兹吸收谱。当太赫兹波在一定角度范围内入射到背面涂覆分析物薄膜的介质超光栅时, 能产生一系列高 Q 值的吸收谐振峰, 这些峰的包络线构成了太赫兹增强吸收谱。当 $0.2 \mu\text{m}$ α -乳糖作为分析物时, 吸收增强因子可

达 236 倍。同时利用色散关系和谐振峰电场分布阐明了其增强机理。此外, 本文对 α -乳糖的厚度, 以及超光栅单元结构参数对增强效果的影响也进行了深入分析。改结构具有测量方便、结构简单、所需待测物薄膜制备方便等优点, 为提高微量分析物的太赫兹吸收谱检测效率提供了一种有效的方法。

参考文献:

[1] Koch M, Mittleman DM, Ornik J, *et al.* Terahertz time-domain spectroscopy[J]. Nature Reviews Methods Primers, 2023, 3(1):48.

[2] Damari R, Weinberg O, Krotkov D, *et al.* Strong coupling of collective intermolecular vibrations in organic materials at terahertz frequencies[J]. Nature Communications, 2019, 10(1):3248.

[3] Wang P, Lou J, Fang G, *et al.* Progress on cutting-edge infrared-terahertz biophysics[J]. IEEE

Transactions on Microwave Theory,2022, 70(11):5117-5140.

[4]Zhang F, Wang HW, Tominaga K,*et al.* Mixing of intermolecular and intramolecular vibrations in optical phonon modes: terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory[J].

Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science,2016, 6(4):386-409.

[5]Peng Y, Shi C, Zhu Y,*et al.* Terahertz spectroscopy in biomedical field: a review on signal-to-noise ratio improvement[J]. Photonix,2020, 1:1-18.

[6]Yang L, Guo T, Zhang X,*et al.* Toxic chemical compound detection by terahertz spectroscopy: a review[J]. Reviews in Analytical Chemistry,2018, 37(3):20170021.

[7]Liu X, Chen W, Ma Y,*et al.* Enhancing THz fingerprint detection on the planar surface of an inverted dielectric metagrating: publisher's note[J]. Photonics Research,2023, 11(4):581-581.

[8]Quaranta G, Basset G, Martin OJ,*et al.* Recent advances in resonant waveguide gratings[J]. Laser,2018, 12(9):1800017.

[9]Sun L, Xu L, Wang J,*et al.* A pixelated frequency-agile metasurface for broadband terahertz molecular fingerprint sensing[J]. Nanoscale,2022, 14(27):9681-9685.

[10]李向军, 候小梅, 程钢,等. (2021) 基于柔性基底动态调焦石墨烯超表面聚焦反射镜的仿真研究. L XJ, X HOU and G CHENG (eds), pp. 1019-1028, Chinese Optics, Simulation on tunable graphene metasurface focusing mirror based on flexible substrate.

[11]Seo M, Park HR. Terahertz biochemical molecule-specific sensors[J]. Advanced Optical Materials,2020, 8(3):1900662.

[12]Li X-J, Yang J, Yan D-X,*et al.* Highly enhanced trace amount terahertz fingerprint spectroscopy by multiplexing surface spoof plasmon metasurfaces in a single layer[J]. Optics Communications,2022, 525:128777.

- [13]Silalahi HM, Chen Y-P, Shih Y-H,*et al.* Floating terahertz metamaterials with extremely large refractive index sensitivities[J]. *Photonics Research*,2021, 9(10):1970-1978.
- [14]李向军, 马婵, 严德贤,等. (2022) 基于介质超表面角度复用的太赫兹增强吸收谱. M LI XJ and D YAN (eds), pp. 731-739, *Chinese Optics*, Enhancement of terahertz absorption spectrum based on the angle multiplexing of the dielectric metasurface.
- [15]Tittl A, Leitis A, Liu M,*et al.* Imaging-based molecular barcoding with pixelated dielectric metasurfaces[J]. *Science*,2018, 360(6393):1105-1109.
- [16]Leitis A, Tittl A, Liu M,*et al.* Angle-multiplexed all-dielectric metasurfaces for broadband molecular fingerprint retrieval[J]. *Science advances*,2019, 5(5):eaaw2871.
- [17]Lin J, Xue Y, Wang W,*et al.* Enhancing Multi-Spectral Fingerprint Sensing for Trace Explosive Molecules with All-Silicon Metasurfaces[J]. *Nanomaterials*,2024, 14(9):738.
- [18]Yan D-X, Wang Z-H, Li X-J,*et al.* Highly boosted trace-amount terahertz vibrational absorption spectroscopy based on defect one-dimensional photonic crystal[J]. *Optics Letters*,2023, 48(7):1654-1657.
- [19]Li X, Wu H, Yan D,*et al.* Enhancement of the terahertz absorption spectroscopy based on the stretchable dielectric metasurface[J]. *Applied Physics A*,2024, 130(1):50.
- [20]Koshelev K, Kivshar Y, Bogdanov A,*et al.* Engineering with bound states in the continuum[J]. *Optics Communications*,2020, 31(1):38-45.
- [21]Gao X, Hsu CW, Zhen B,*et al.* Formation mechanism of guided resonances and bound states in the continuum in photonic crystal slabs[J]. *Scientific reports*,2016, 6(1):31908.
- [22]Bykov DA, Bezus EA, Doskolovich LL. Coupled-wave formalism for bound states in the continuum in guided-mode resonant gratings[J]. *Physical Review A*,2019, 99(6):063805.

- [23] Han S, Rybin MV, Pitchappa P, *et al.* Guided-Mode Resonances in All-Dielectric Terahertz Metasurfaces[J]. *Advanced Optical Materials*, 2020, 8(3):1900959.
- [24] Hu H, Pal AK, Berestennikov A, *et al.* Surface-Enhanced Raman Scattering in BIC-Driven Semiconductor Metasurfaces[J]. *Advanced Optical Materials*, 2024:2302812.
- [25] Shi X, Han Z. Enhanced terahertz fingerprint detection with ultrahigh sensitivity using the cavity defect modes[J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1):13147.
- [26] Xie Y, Liu X, Zhou J, *et al.* Enhancing trace terahertz fingerprint sensing by the lossy silicon metagrating with a gold mirror[J]. *IEEE Transactions on Microwave Theory*, 2023,
- [27] Fedulova E, Nazarov MM, Angeluts A, *et al.* Studying of dielectric properties of polymers in the terahertz frequency range[C]. *Saratov Fall Meeting 2011: Optical Technologies in Biophysics and Medicine XIII*, 2012:144-152.
- [28] Li Z, Cui TJ, Zhong XJ, *et al.* Electromagnetic scattering characteristics of PEC targets in the terahertz regime[J]. *IEEE Antennas Propagation Magazine*, 2009, 51(1):39-50.
- [29] Xie Y, Liu X, Li F, *et al.* Ultra-wideband enhancement on mid-infrared fingerprint sensing for 2D materials and analytes of monolayers by a metagrating[J]. *Nanophotonics*, 2020, 9(9):2927-2935.
- [30] Shen S, Liu X, Shen Y, *et al.* Recent advances in the development of materials for terahertz metamaterial sensing[J]. *Advanced Optical Materials*, 2022, 10(1):2101008.
- [31] Sun K, Wang W, Han Z. High-Q resonances in periodic photonic structures[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(8):085426.
- [32] Yan D, Feng Q, Yang J, *et al.* Boosting the terahertz absorption spectroscopy based on the stretchable metasurface[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, 25(1):612-616.

[33]Roggenbuck A, Schmitz H, Deninger A,*et al.* Coherent broadband continuous-wave terahertz spectroscopy on solid-state samples[J]. *New Journal of Physics*,2010, 12(4):043017.

[34]Liang Y, Cui W, Li L,*et al.* Large-scale plasmonic nanodisk structures for a high sensitivity biosensing platform fabricated by transfer nanoprinting[J]. *Advanced Optical Materials*,2019, 7(7):1801269.

作者简介:



王子靖 (2001—), 男, 浙江衢州人, 硕士研究生, 主要从事太赫兹器件研究。
E-mail: 654131832@qq.com



李向军 (1976—), 男, 山西长治人, 博士, 副教授, 2011年于浙江大学获得博士学位, 主要从事太赫兹器件研究。
E-mail: xiangjun_li@cjlu.edu.cn

in press