

THz 非线性 LN 超表面 可行性分析

首先 什么是 非线性 超表面。

A. 倾斜波前 + 体块 LN 超表面，不能称为 非线性超表面

如果 在切角的 LN 表面刻蚀出 LN 柱子阵列，也就是“体块 + 超表面”的几何，则这个 不能称为 非线性超表面：

晶体内部产生的所有 THz，它们受到的所有 波前调制 作用中，起主导调制作用的是，因通过 表面的 n 调制区域 并折射出去，而受到调制，而不是因为 χ_2 分布 而 受到调制：

大部分 THz 在晶体内部产生，而产生的同时，由于内部 χ_2 没有调制，所以在晶体内部，没有经过 非线性调制；只有在 接近表面时 1515^1 的 折射率起伏，顺带有 0101 的非线性起伏²，所以 非线性调制 只在表面有，而在内部没有；但大部分 THz 是在内部产生的，而这些 THz 所受到的 主要调制，来自于 表面的 1515 折射率起伏。

因此 兼顾效率 与 调制效果 的 切角 LN 表面刻蚀 超表面，只是个 线性超表面。该几何，等价于 把 THz 高阻硅 线性超表面，贴到 切角 LN 的 出射表面上。并且，由于 THz 经 $\text{LN} \rightarrow \text{Si} \rightarrow \text{air}$ ，这个 5:3:1 的梯度下降的 纵向 n 分布，比 5:1 的 $\text{LN} \rightarrow \text{air}$ 的 切角 LN 表面刻蚀 超表面 方案，更容易 折射出晶体，减少 全反射

¹ THz 波段，空气 $n = 1$ ，铌酸锂 $n = 5 \sim 6$ 。

² THz 波段，空气 $\chi = 0$ ，铌酸锂 $\chi_{33} = 320 \text{ pm/V}$ 。

损耗，参考 硅棱镜 耦合出射。

B. 薄 LN，刻蚀出的 超表面，才能称为 非线性超表面

对于 刻蚀 工艺，既会带来 n 分布，也会带来 χ_2 分布。

那么 要想 χ_2 分布 对 波前的调制作用占主，则 刻蚀剩下的 LN 厚度，要 远远小于 刻蚀深度。也就是 柱子高度，要占 LN 总厚度很大比例。现在 刻蚀深度 为 几十 μm ，则 柱子高度 几十 μm ，则 LN 只能是薄膜，以使 柱子高度 占 绝大比例。

当然，若因失配，而只在前后表面产生 THz，则用体块也行。

C. 柱子高度

由于必须要使用 薄膜，则 便不能使用 倾斜波前；又因无法引入 纵向 χ_2 分布，因此 通光方向 有失配。因此 只在 柱子表面一个相干长度³ 以内，产生 THz；对于几十微米的深度，我们 刻蚀工艺 刚好可以做，基本到极限。

由于 1:5 的 纵向 n 对比度，THz 不一定能 辐射出 LN 非线性超表面；另要想 精确调制 THz 振幅相位，每个柱子里 最好能 约束住 THz 场，以使得 调单个 柱子参数，只影响 该地点处 的 THz 相位，而不会影响 周围像素的 THz 场分布。

基于以上两点，THz 场在柱子中的 能量占比，要远远高于 其在柱子外的 倏逝场 能量占比。—— 换句话说，THz 场 需要是 单个

³ 对于 200 μm ，即 1.5 THz， l_c 约 33 μm

柱子的 导模, 或 某种 共振模式。

对于 200 μm 的 THz, 其在 LN 内的 波长约为 $200 \mu\text{m} / 5 = 40 \mu\text{m}$, 稍大于 一个 相干长度, 略小于 一个 柱子高度, 因此 共振模型 应使用 米氏散射 FP 谐振器 模型:

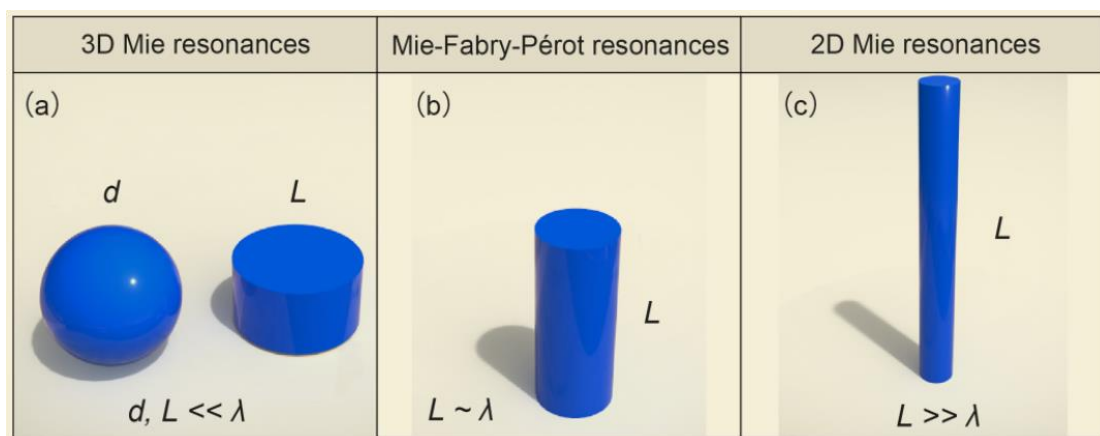
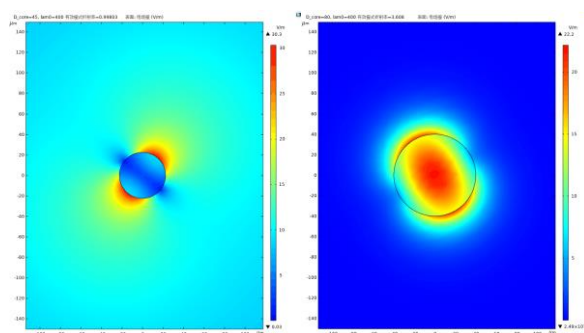


图 1 由于 $L \sim \lambda$, 所以 应使用 (b) 模型⁴

模型较复杂, 涉及磁偶、电四等极子, 不如直接 COMSOL 模拟。

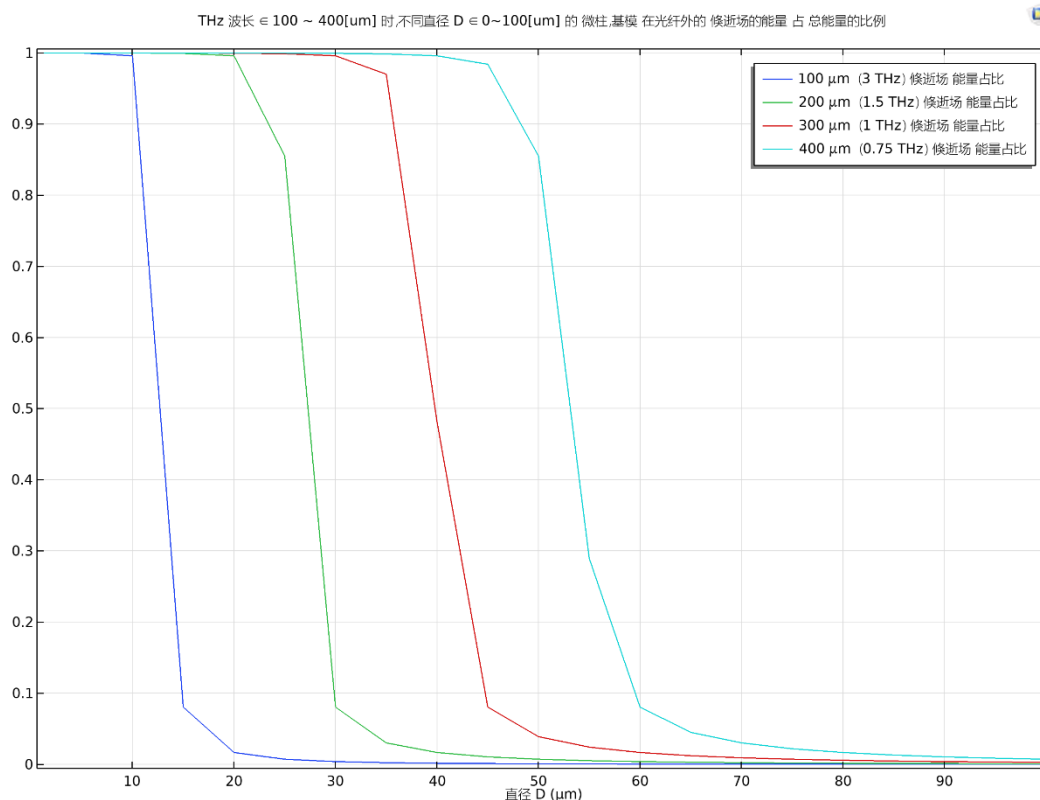
D. 柱子宽度

由于 C 中要求, 每个柱子 必须能 约束住 THz 场, 因此 这对 柱子横向尺寸 也有要求: 直径不能太小。否则 哪怕 1 : 5 的 高折射率 对比度, 泄漏 的能量 也会 大于 柱子内的 能量。



⁴ 2017 - Multimode directionality in all-dielectric metasurfaces - Physical Review B - Yang et al

对此，在 COMSOL 中，用 二维 THz 微纳光纤 模型，参数化扫描 芯层直径 即可模拟 并查看 能量占比：



归功于 1 : 5 的 高 折射率 对比度，直径为 $D \mu\text{m}$ 的 圆柱状 阶跃 微光纤 (芯层 LN, 包层 air), 存在 波长为 $\lambda \mu\text{m}$ 的 基模 的 最小临界直径 $D \approx \lambda / 10 + 10 (\mu\text{m})$, 比如 对于 $200 \mu\text{m}$ (1.5 THz), 要想 芯层能量 占比超过 90%, 对应的 $D \geq 30 \mu\text{m}$ 。

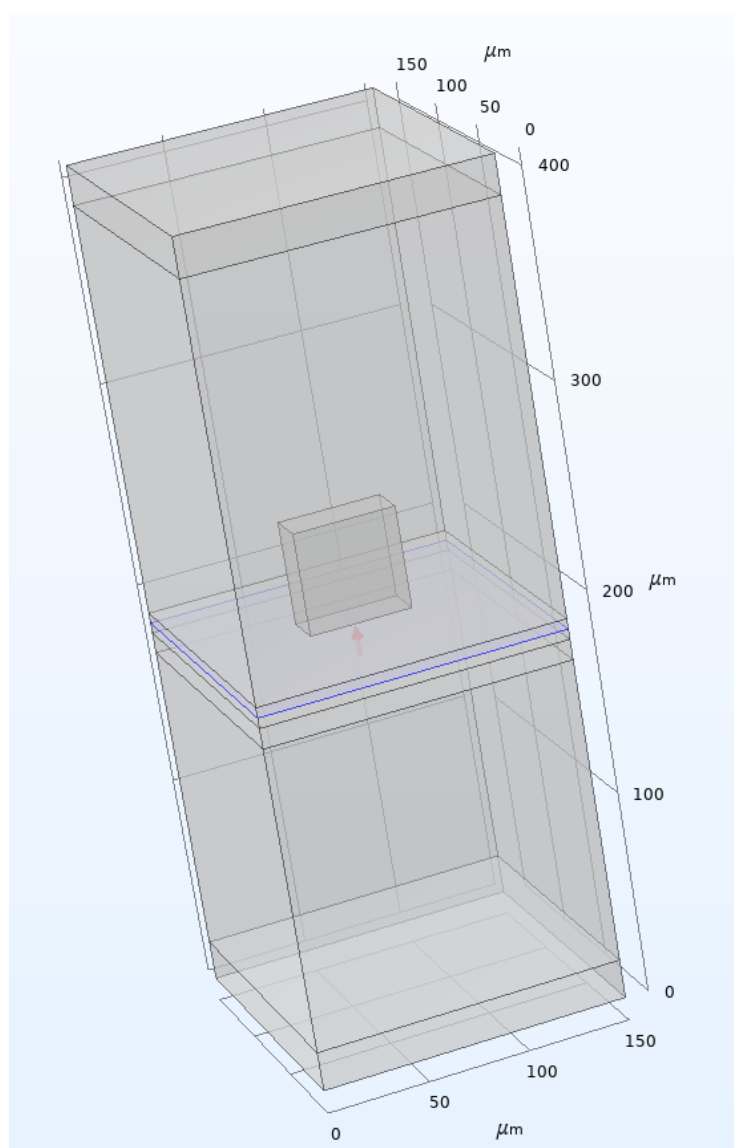
D 的 最小尺寸, 可作为 THz 非线性 超表面 柱子的 最小尺寸 的 参考值, 但 柱子的 实际尺寸, 可比这个稍小。

给出了 柱子 w, l 的最小值后, 柱子 w, l 值, 应在满足此条件的 基础上, 尽可能 地小: 设 100 像素, 每个像素 1 个单胞 (甚至不考虑超胞), 单胞尺寸 (加上空程) 约 $60 \mu\text{m}$ 的话, 超表面 一共就

6 mm × 6 mm。

而 光斑尺寸 必须覆盖，也就是 大于 超表面 尺寸，以完全利用到每一个像素的调制作用，那么一个 6 mm × 6 mm 的 泵浦光斑，能量密度很低，效率十分低下 (再加上很薄、还失配，就更低了)。

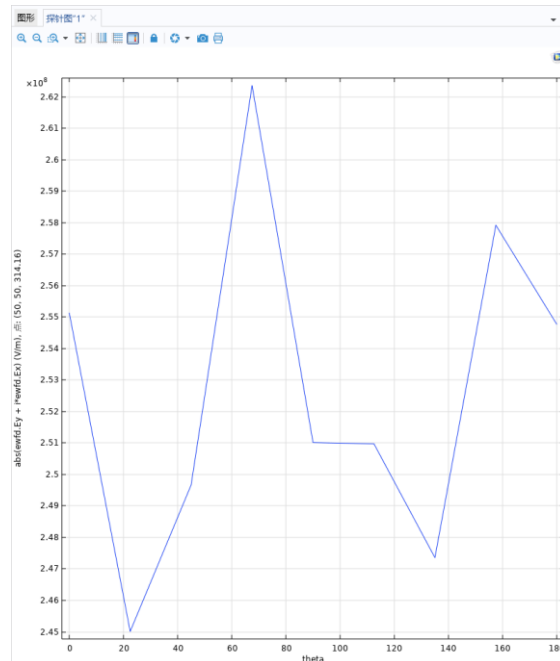
E. 验证：C2 对称性 单胞，THz 线性 超表面 – PB 相位



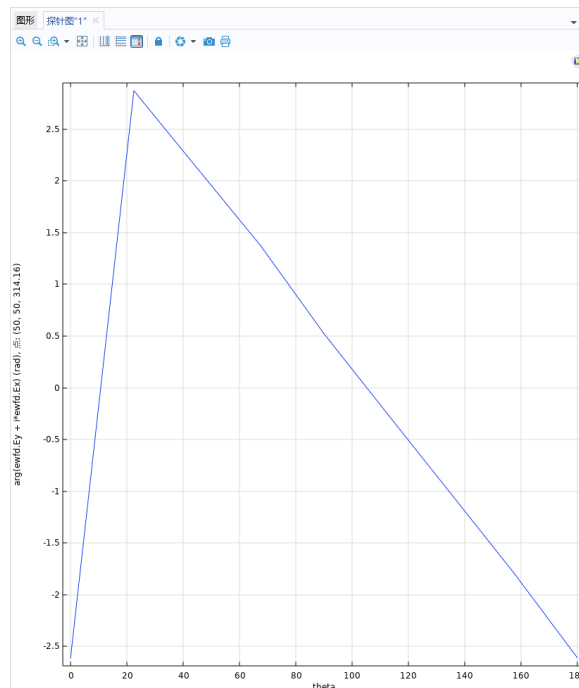
从上往下：PML 层、Air 上层、LN 矩形柱、LN 未刻蚀部分

(其中有 输入 圆偏光 $E_y + iE_x$ 的 泵浦端口)、Si 衬底、Air 下层、PML 层

a) 扫 矩形 LN 柱子 转角 θ



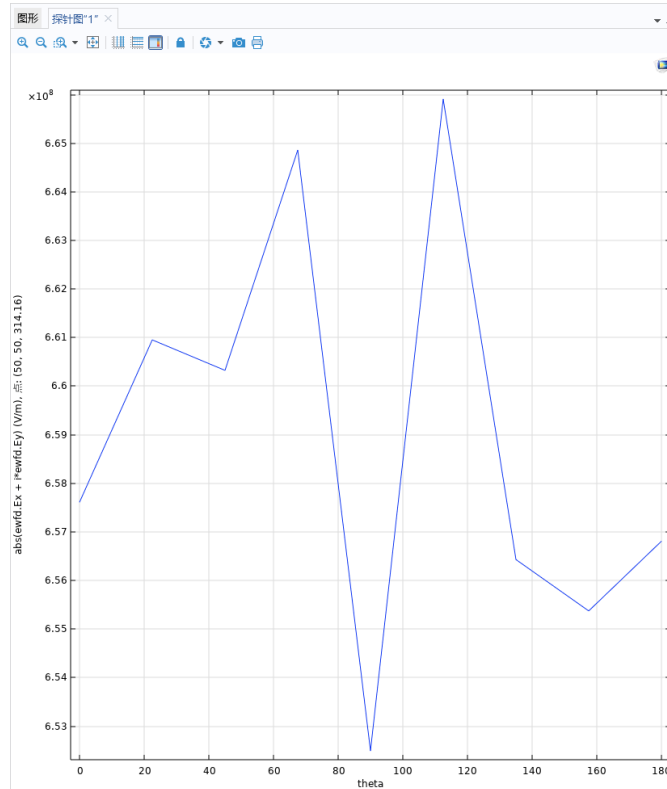
输出 圆偏光 $E_y + iE_x$ 的 振幅, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 偏离 平均值 2.54×10^8 不大



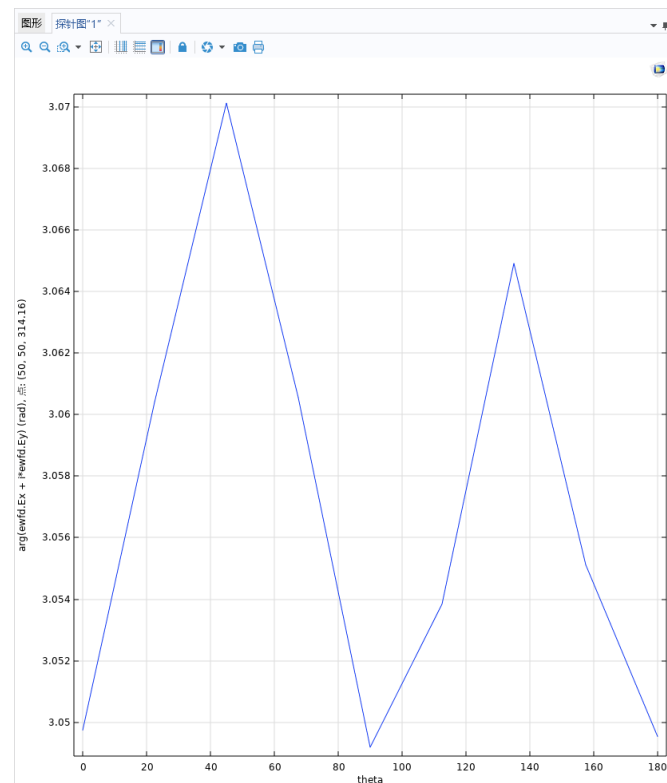
输出 圆偏光 $E_y + iE_x$ 的 相位, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 平滑覆盖 $[-2.5, 2.8] \text{ rad}^5$

结论: 随 结构转角 线性变化 的 纯相位调制, 也即 线性几何相位。

⁵ COMSOL 模拟下, 到不了 π , 不知道 为什么



输出 圆偏光 $Ex + iEy$ 的 振幅, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 几乎不变

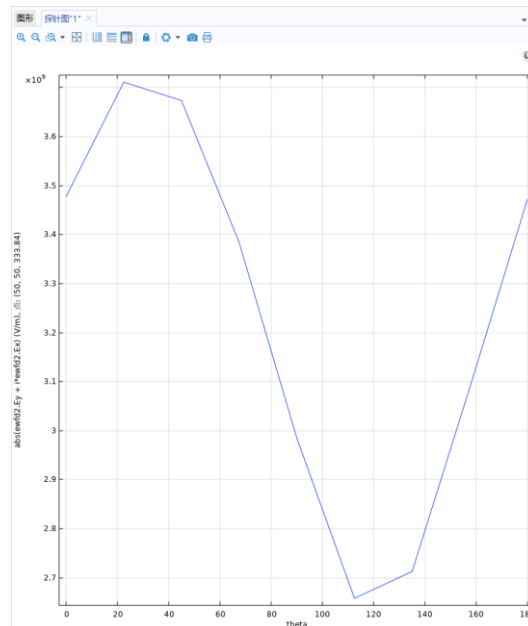


输出 圆偏光 $Ex + iEy$ 的 相位, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 几乎不变

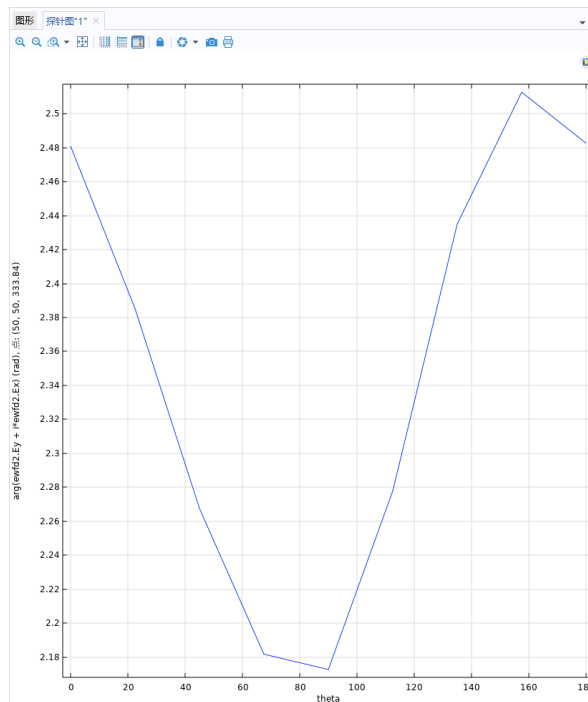
结论: 对另一手性的旋向, 几乎不引入 线性几何相位。

F. 验证：C2 对称性 单胞，THz 倍频 超表面 – PB 相位

a) 扫 矩形 LN 柱子 转角 θ



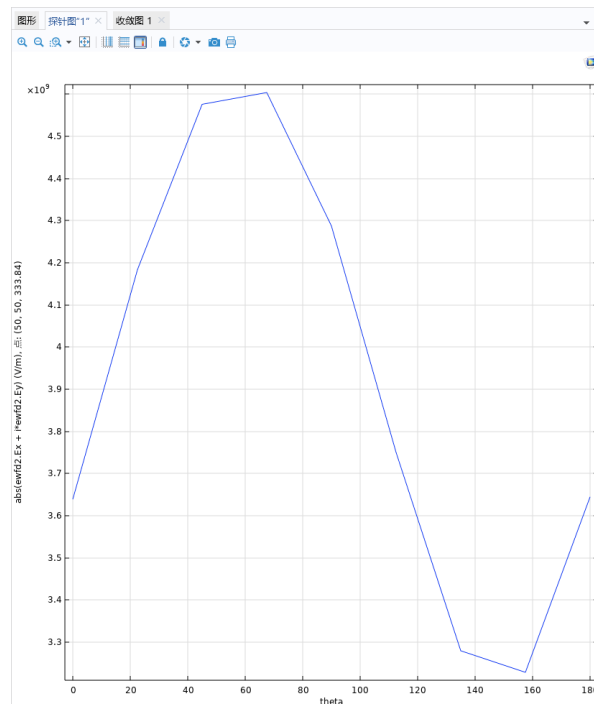
输出 倍频 圆偏光 $E_y + iE_x$ 的 振幅，随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$ ，偏离 平均值 3.2×10^9 不大



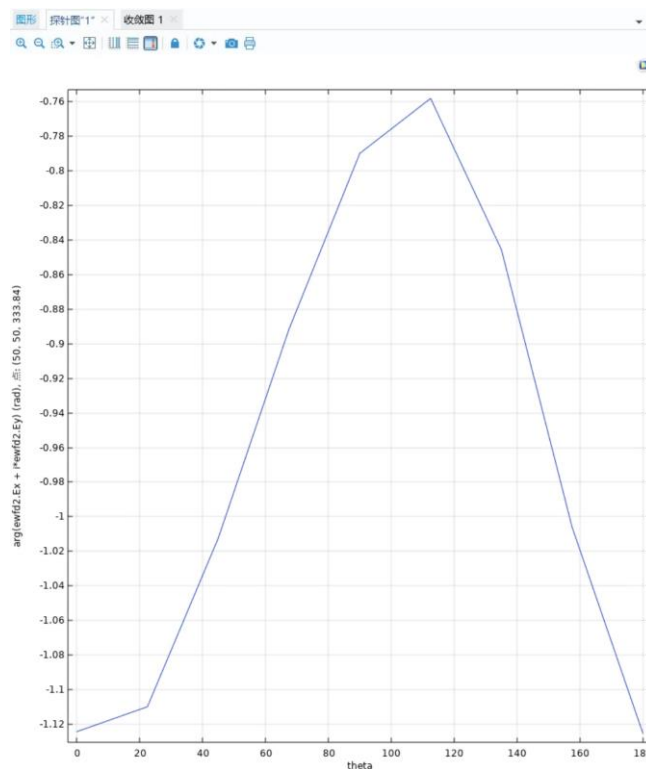
输出 倍频 圆偏光 $E_y + iE_x$ 的 相位，随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$ ，平滑覆盖 $[2.17, 2.5]$ rad

结论：对该旋向的 相位调制 作用有，但很弱，未覆盖 $0 \sim \pi$ ；但在

0~90 度内可视为线性；非线性几何相位。

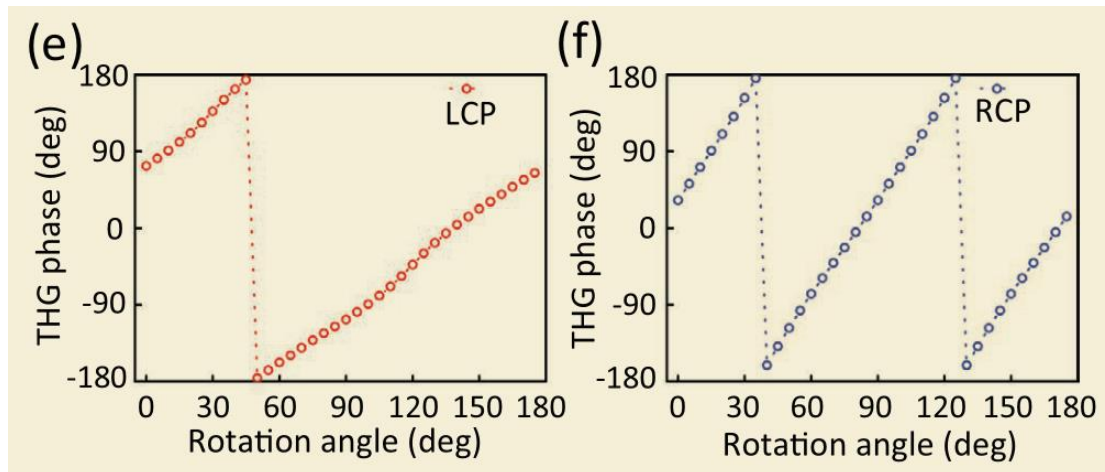


输出 倍频 圆偏光 $Ex + iEy$ 的 振幅, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 偏离 平均值 3.9×10^9 不大



输出 倍频 圆偏光 $Ex + iEy$ 的 相位, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 平滑覆盖 $[-1.12, -0.76]$ rad

结论：对另一旋向的 相位调制 作用也很弱，且几乎等程度的弱。



随转角变化, 对 左右旋 圆偏振 三次谐波, 引入的 三阶 非线性 几何相位⁶

一、 LN 非线性 超表面: 只要用 d33, 就无法用几何相位

1. 若想用到 d33, 则垂直光轴入射, 且至少有分量沿 z 轴

如果同时还想用 pb 相位, 则入射圆偏振。

一方面, 当圆偏振基波 垂直光轴 进入 LN 后, 基波偏振态 会自行转换, 产生的倍频偏振态 也会自动转换, 不可控。

另一方面, 圆偏振基波也有分量不沿 z 轴, 会用到 n_o , 以及 d_{31} ; 而偏振沿 z 轴的基波分量, 会用到 n_e , 以及 d_{33} 。——使得倍频过程, 以及倍频光传播过程, 也几乎不可控。

所以使用圆偏光, 垂直 z 轴入射 LN, 是下下之举, 万万不能。

2. 要想用 几何相位, 则需要 平行光轴 入射

但随之而来的问题就是, 只能用到 d_{22} , 效率进一步降低 (薄膜、

⁶ 2020 - Nonlinear Wavefront Control by Geometric-Phase Dielectric Metasurfaces - Advanced Optical Materials - Liu et al

失配、大尺寸光斑)。

结论：LN 超表面 几乎完全无法 使用 几何相位。

也就是，基本上不可用转角 + 入射圆偏光，来做 非线性超表面。

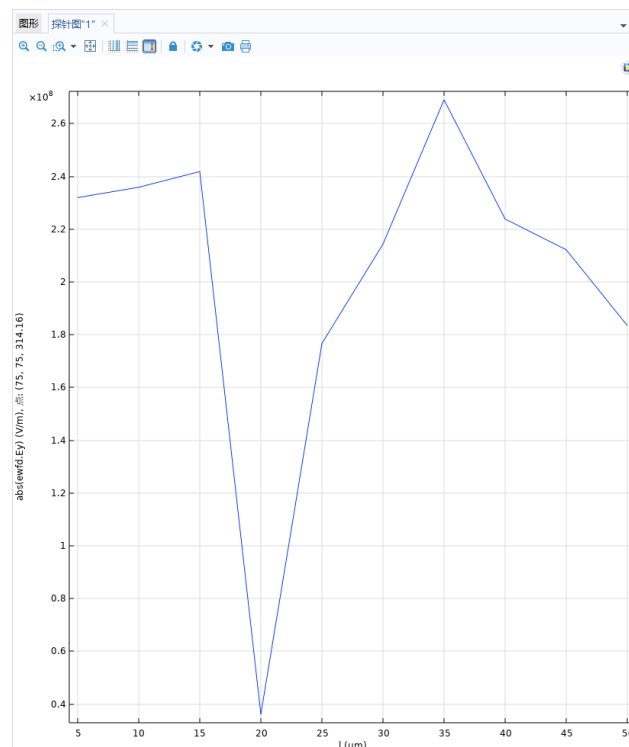
二、 因工艺限制，柱子高度不可调，则用不上 传播相位

三、 只剩 共振相位，也就是波导模式、米散模型等

因此，只剩下 入射 z 向 线偏光 (为用到 d_{33}) + 改变柱子长宽
(以及 转角，但这不是几何相位)，这一种可能的方案。

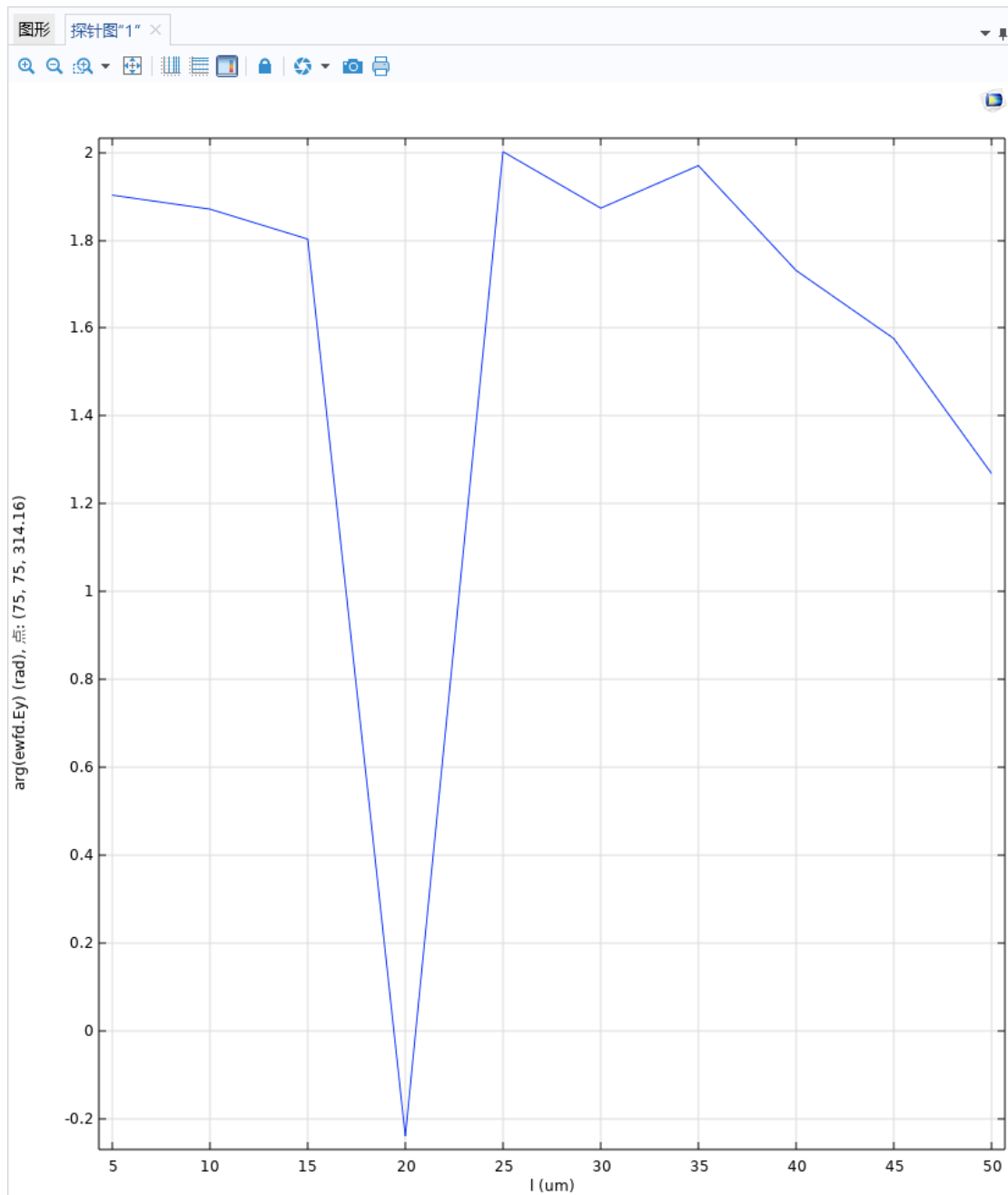
G. 验证：C2 对称性 单胞，THz 线性 超表面 – 共振相位

a) 扫 矩形 LN 柱子 长宽比 $l:w$



输出 线偏光 E_y 的 振幅，随着 $l \in [5, 50]$ um，偏离 平均值 1.6×10^8 起伏很大，

有个 dip，说明有共振。

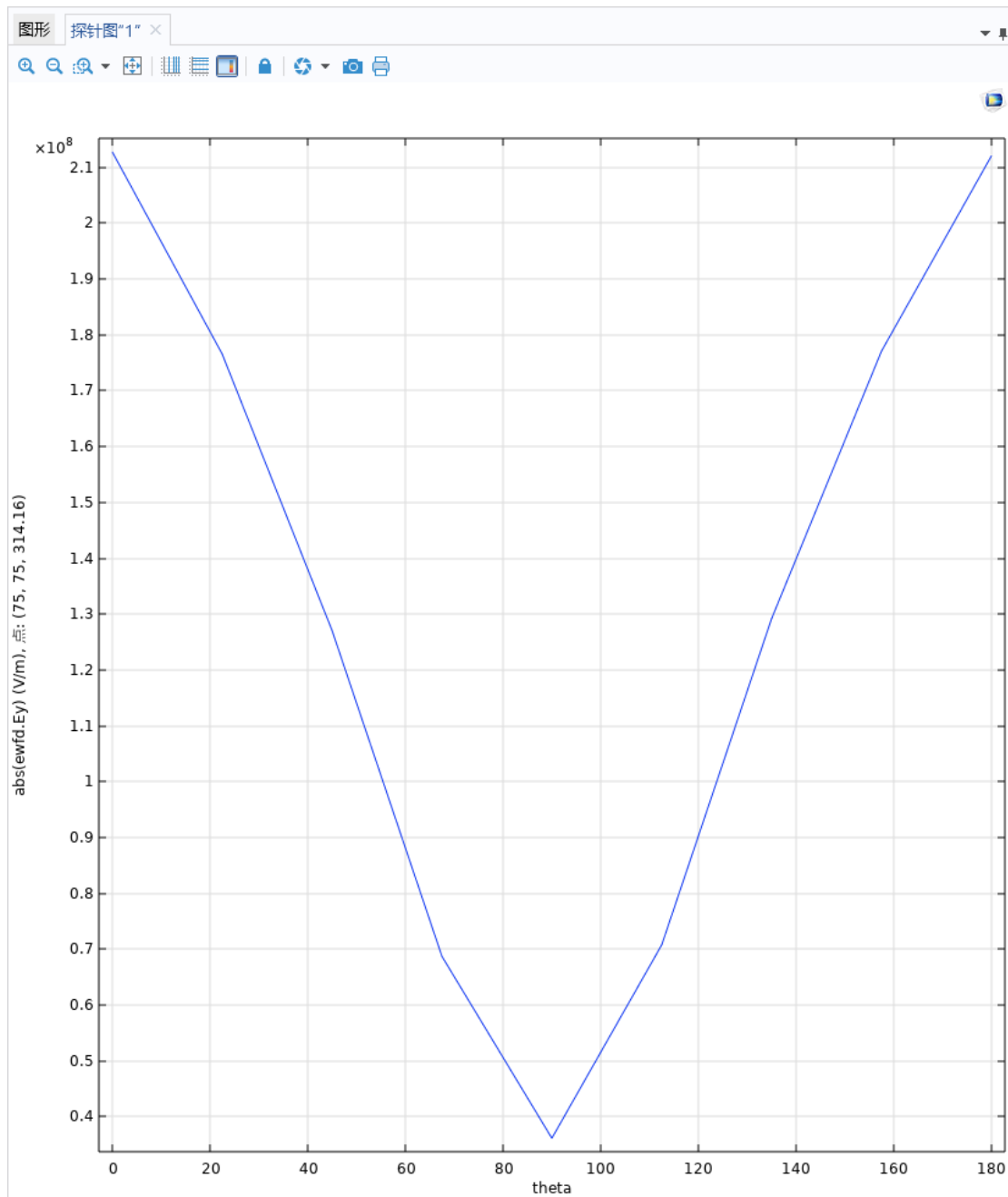


输出 线偏光 Ey 的 相位, 随着 $l \in [5, 50]$ um, 非线性 变化,

有个 dip, 且 与 振幅的 dip 相同位置, 说明在此处 确有 共振。

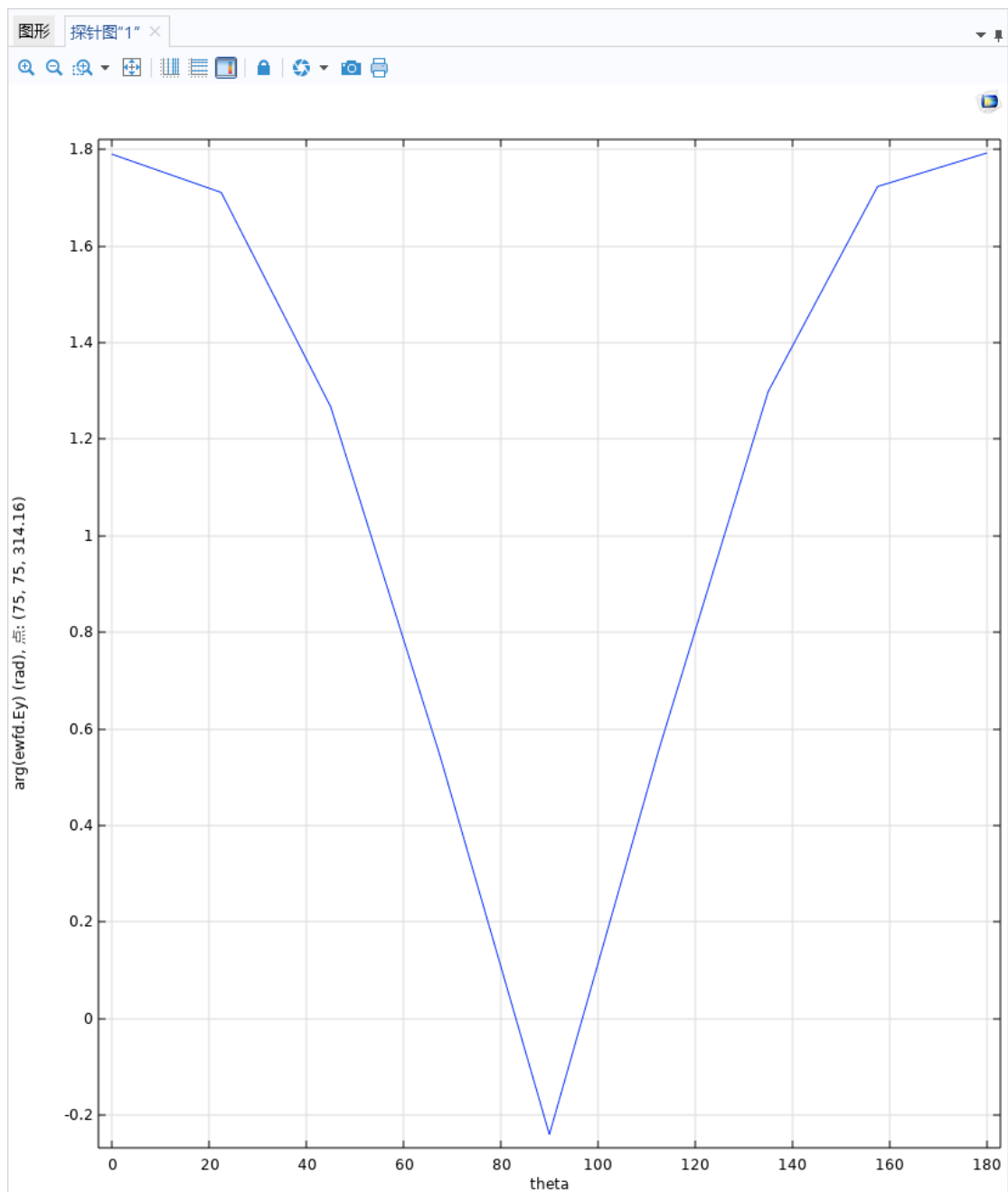
结论: 米氏散射 FP 谐振器 共振结构 会引入 共振相位, 但同时 也会引入 共振损耗 (或 增强), 导致 振幅 跟随变化, 并且 不可预期 协同变化趋势。

b) 扫 矩形 LN 柱子 转角 θ



输出 线偏光 E_y 的 振幅, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 先线性减小, 后线性增大

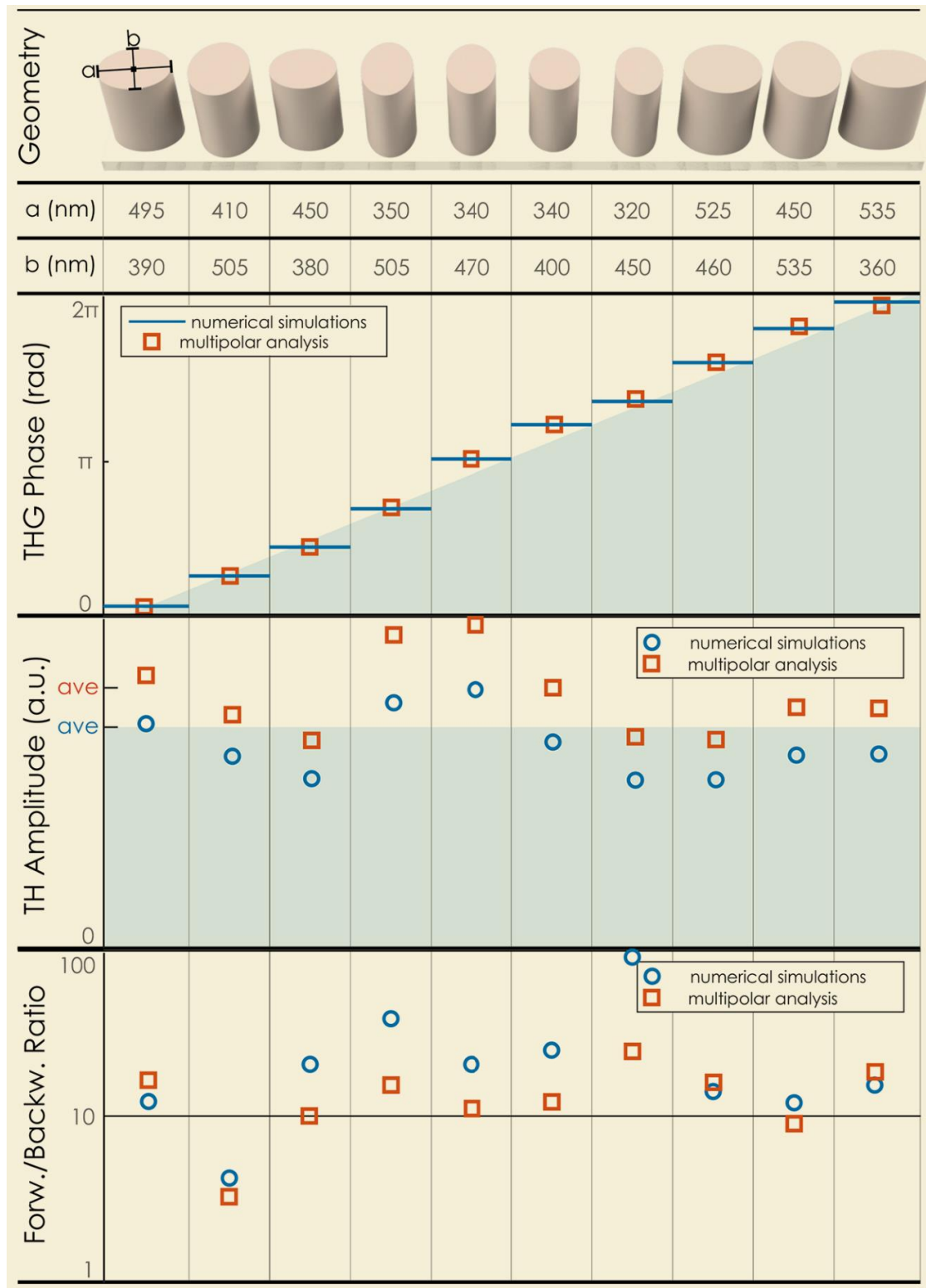
转角 90 度时, 有个 dip, 说明 此处 有共振。



输出 线偏光 E_y 的 相位, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 先线性减小, 后线性增大

转角 90 度时, 有个 dip, 说明 此处 有共振。

结论: 相位 与 振幅 同步变化, 且在 $0 \sim 90$ 度的转角内, 可视为 线性 或 \cos 变化。



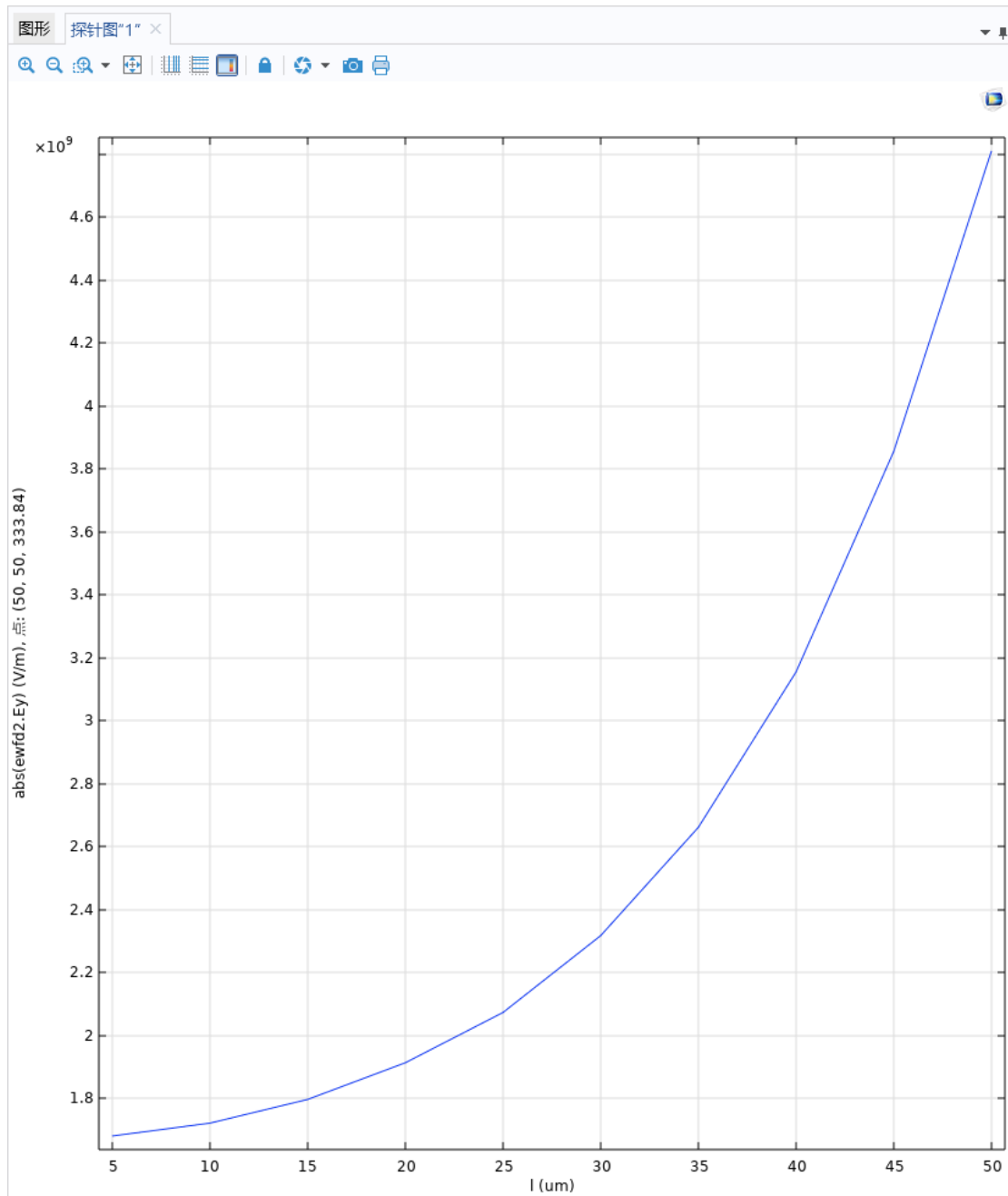
改变柱子长宽，构建数据库，非线性地挑选不同长宽比的柱子，使共振相位连续线性分布，且

同时满足：共振振幅都接近平均值、高透射率 $> 90\%$ ⁷

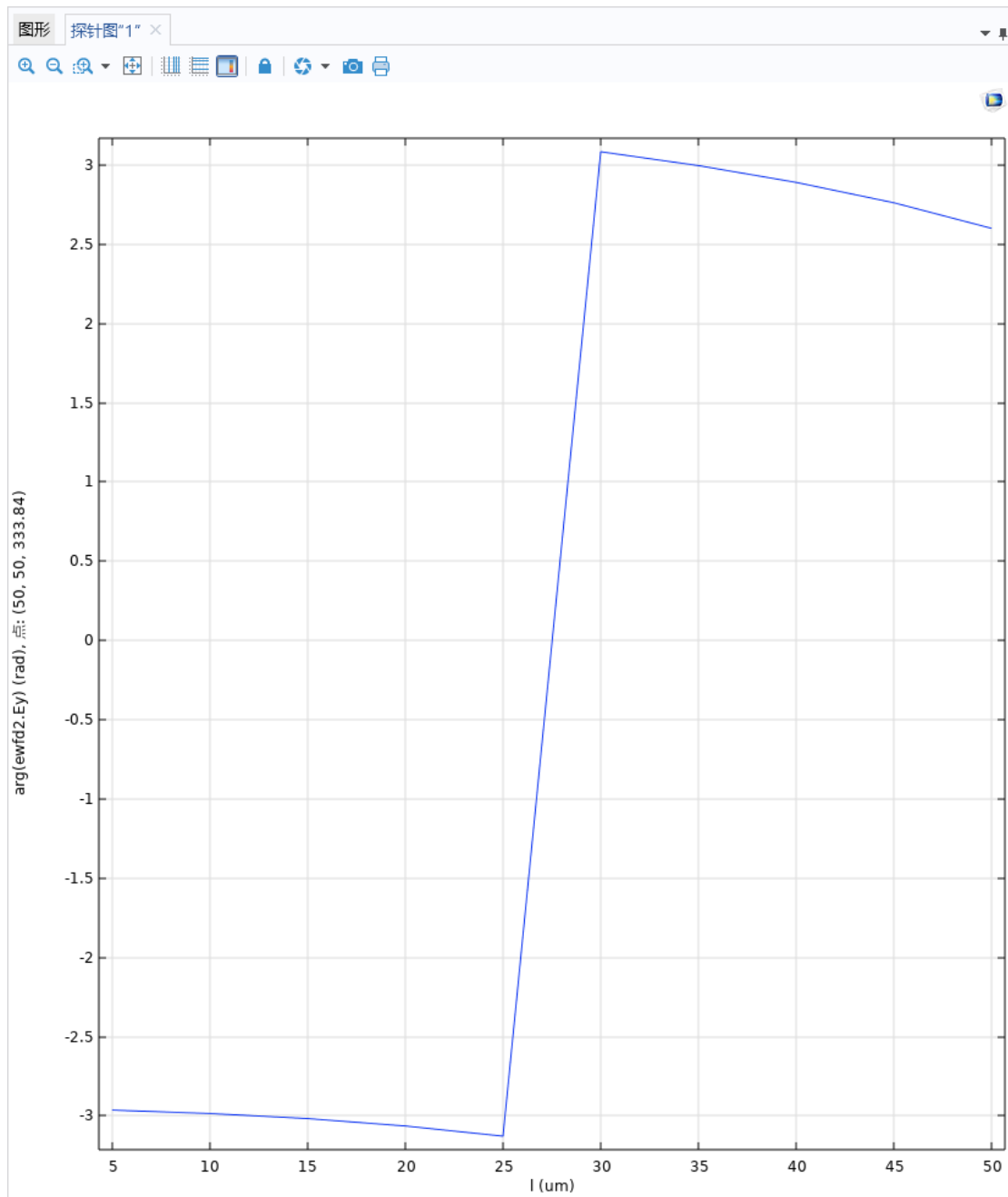
⁷ 2018 - Nonlinear Wavefront Control with All-Dielectric Metasurfaces - Nano Letters - Wang et al

H. 设计: C2 对称性 单胞, THz 倍频 超表面 – 共振相位

a) 扫 矩形 LN 柱子 长宽比 $l:w$



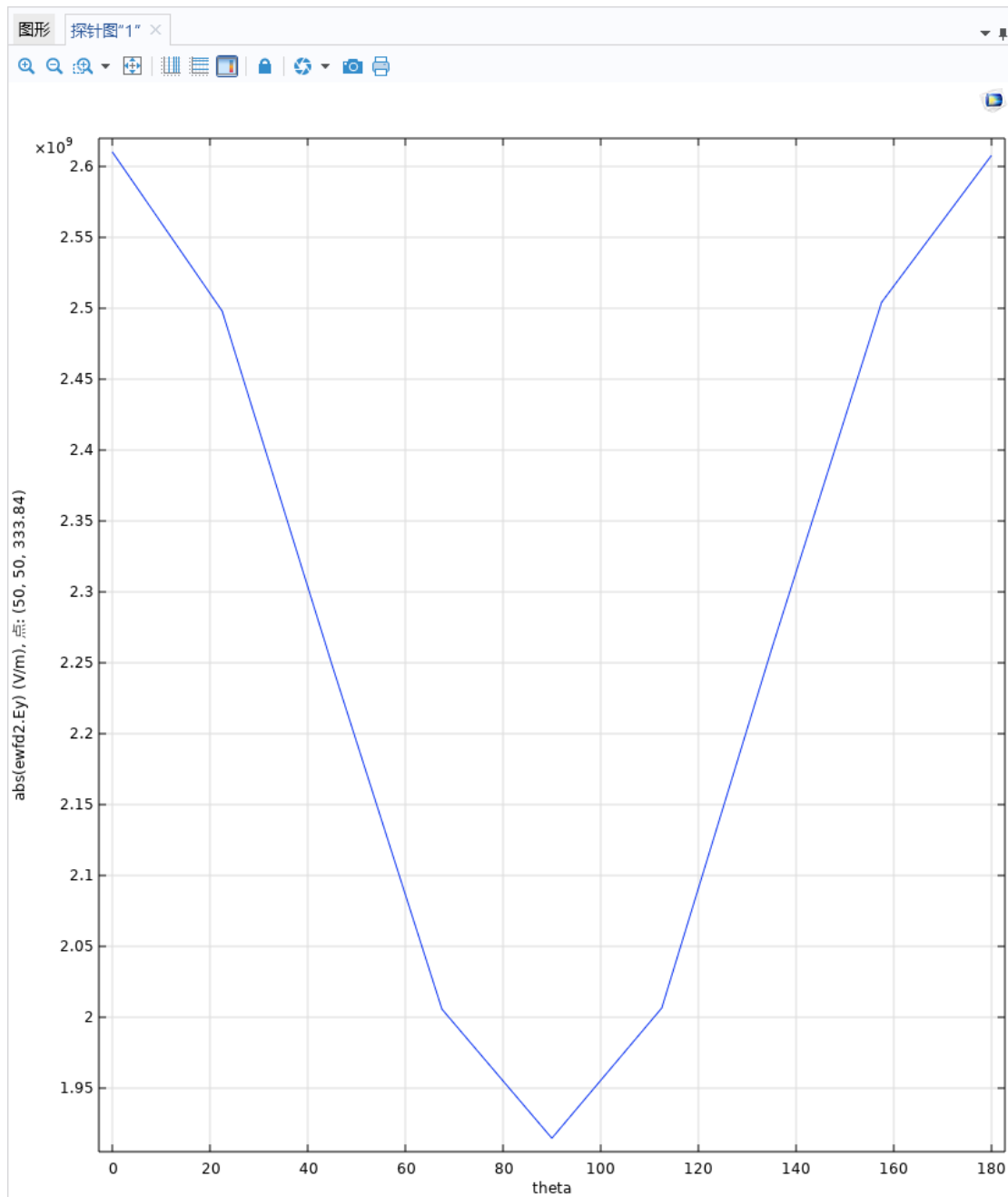
输出 倍频 线偏光 E_y 的 振幅, 随着 $l \in [5, 50] \mu\text{m}$, 二次方增长



输出 倍频 线偏光 E_y 的 相位, 随着 $l \in [5, 50] \text{ um}$, 均在 $\pm\pi$ 附近

结论: 调单胞 长宽比, 对 倍频 THz 有 振幅调制作用, 没有 相位调制作用。

b) 扫 矩形 LN 柱子 转角 θ

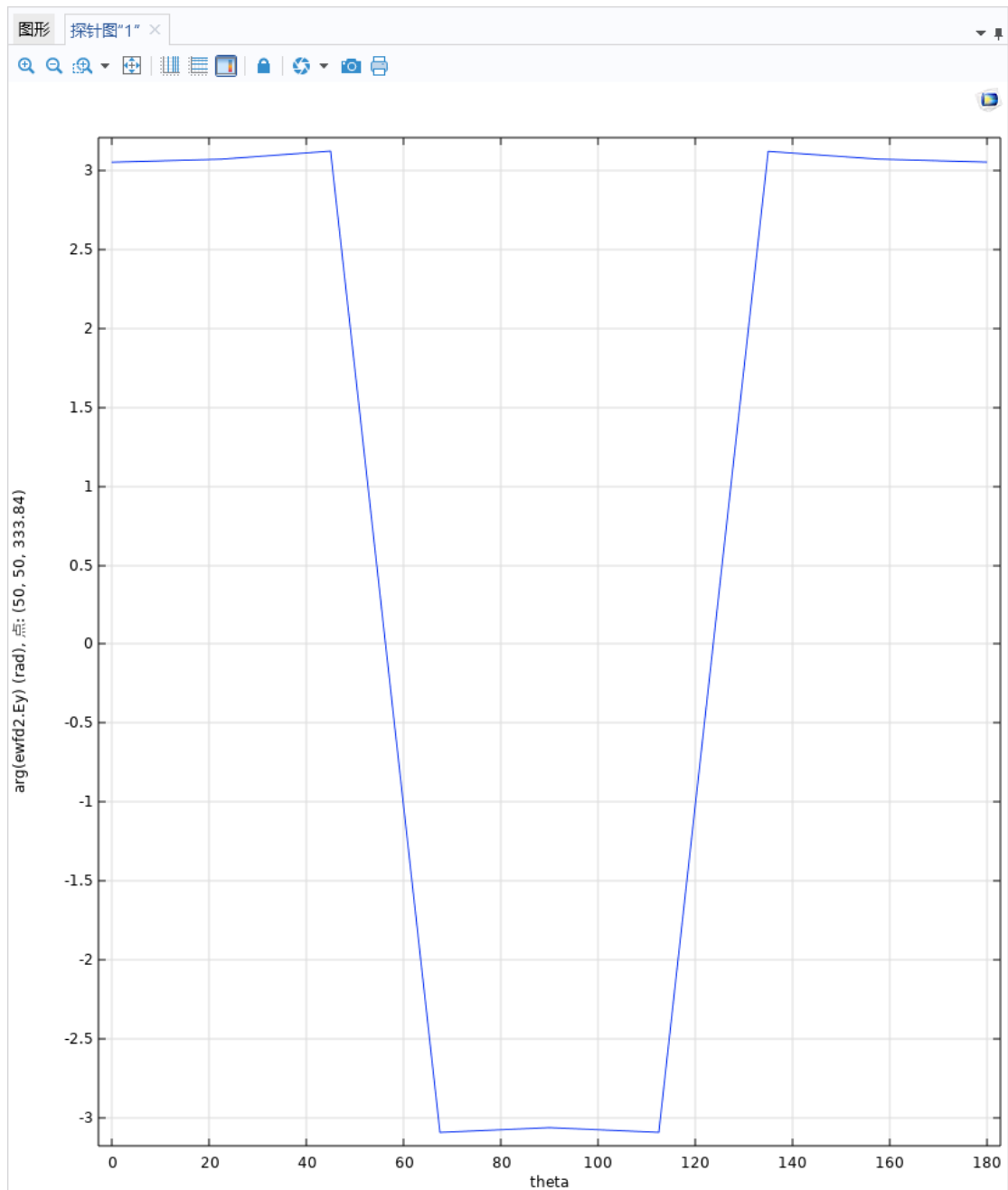


输出 倍频 线偏光 E_y 的 振幅, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 先线性减小, 后线性增大

转角 90 度时, 有个 dip, 说明 此处 有共振 (估计是 倍频共振 引起的⁸)。

但注意, 该 dip 没有线性的深, 所以 振幅调制作用 有限。

⁸ 因为 设置了 400 μm 的 基波 以 均一折射率 2.3 单通, 200 μm 倍频光 折射率 有分布

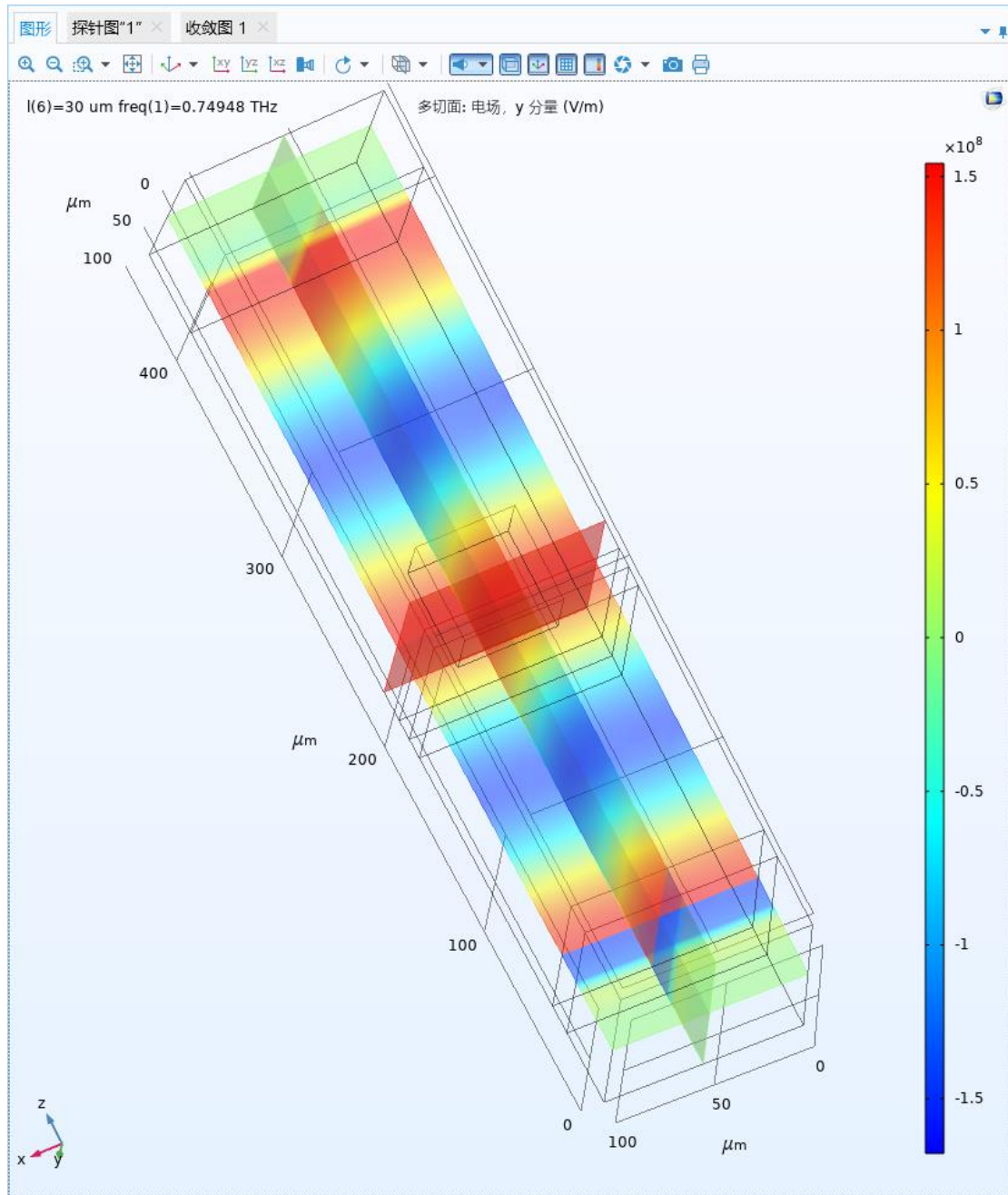


输出 倍频 线偏光 E_y 的 相位, 随着 $\theta \in [0, 180^\circ]$, 均在 $\pm\pi$ 附近

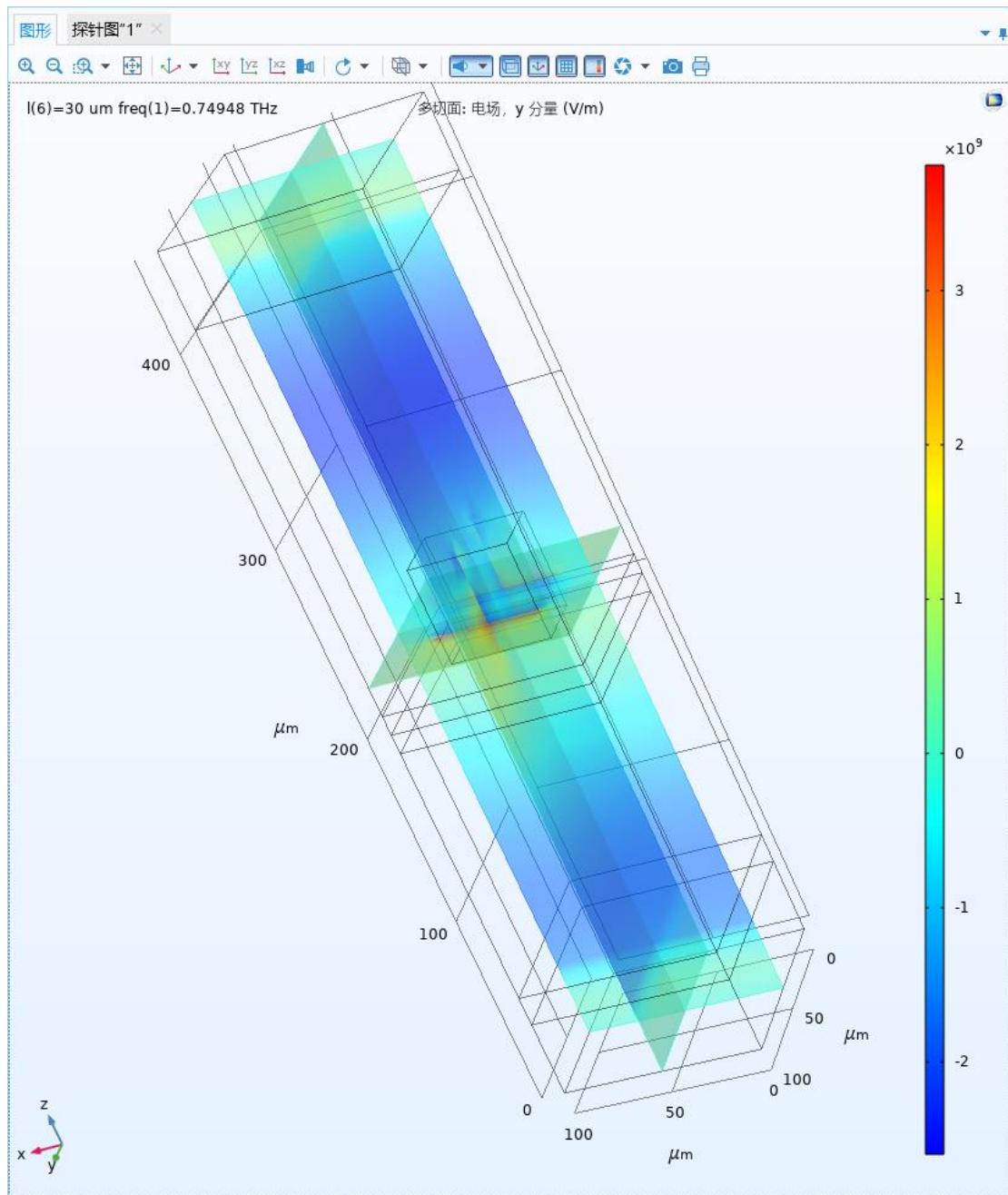
结论: 调单胞 转角, 可在 $0 \sim 90$ 度内, 有限地调振幅, 无法调相位。

总的结论: LN 非线性 超表面 只能 利用共振, 调 THz 振幅; 不能调 THz 相位, 也就是 无法引入 共振相位; 而 LN 线性 超表面 对 THz 的吸收 和 反射损耗, 又高于 Si 的 线性 超表面……所以在 THz 波段的全介质 超表面 方面, 暂时看不到 LN 的应用前景。

A. 后记:关于 为什么要用 THz 倍频,模拟 光整流 出 THz



基波 400 μm (0.75 THz) 场分布, 背景折射率采用均一分布 $n_0 = 2.3$



倍频 200 μm (1.5 THz) 场分布, 折射率 n 和 χ 按实际分布

由于 网格尺寸 不能大于 最小波长的 $1/6$, 因此若要模拟本来就很吃资源的非线性过程, 最好用一个更低频率、波长更长的光作为泵浦。

那么倍频过程就是首选, 它只需要引入一束光, 不像差频, 还需要引入两束, 双泵浦, 且至少有一束泵浦, 频率比目标 200 μm (1.5

THz) 高, 网格得更细。

而双泵浦频域差频, 又比时域采用飞秒脉冲泵浦, 来模拟光整流, 要好。二者本质上是一样的, 但后者除了空间细分之外, 还需要时间上划分步长。对于三维+时域的问题, 根本算不了。

因此, 从计算资源节约程度上, 单 THz 泵浦 倍频 > 双 THz 泵浦 差频 > 双光波段 泵浦 差频 > 时域 光整流。单是采用 单 THz 泵浦 倍频 的 方案, 再加上三维和扫描参数, 计算量已经很大了。

从本质上, 而这几者都是二阶非线性过程, 且都生成同一频率的光 200 μm (1.5 THz), 因此对于描述 THz 场 在 LN 柱子 内部产生、传播、反射、折射、散射、共振的过程, 原则上是等价的。

泵浦是什么不重要, 关注的是在 LN 柱子中生成非线性频率转换出来的 THz。

另外, 对于 单 THz 泵浦 倍频, 若背景折射率采用 $n_g = 2.3$, 则在 LN 中, 其波矢失配量 $\Delta k = 2*n_g\omega_p/c - n_T\omega_T/c = (n_g - n_T)*\omega_T/c$, 与差频 $\Delta k = n_g\Delta\omega/c - n_T\omega_T/c = (n_g - n_T)*\omega_T/c$ 是一样的。