

基于超表面人工基元序构协同的太赫兹涡旋二次谐波产生

李林涛^{1,2}, 王 陈¹, 文永正^{1,4}, 于凯新¹, 谭 永¹, 张任飞³, 姚佳栋³, 孙竞博¹, 李 勃^{2,4}, 周 济¹

(1. 清华大学材料学院, 新型陶瓷材料全国重点实验室, 北京 100084; 2. 清华大学深圳国际研究生院, 材料研究院, 广东 深圳 518055; 3. 乌镇实验室, 超材料研究中心, 浙江 嘉兴 314500; 4. 苏州实验室, 江苏 苏州 215000)

摘 要: 太赫兹(THz)频段非线性超表面在实现片上频率转换与波前调控一体化方面具有重要应用前景。然而, 现有人工非线性结构多集中于增强非线性辐射强度, 在频率转换过程中难以实现相位的独立调控。本工作基于洛伦兹力诱导的太赫兹非线性机理, 提出一种通过超表面人工基元谐振模式操控, 实现二次谐波相位和波前涡旋按需设计的方法。仿真分析表明, 在单一基元谐振模式主导且工作频点固定的条件下, 结构几何参数可改变局域场相位关系, 从而调控二次谐波相位。在此基础上设计并制备 8 种离散相位基元, 实验测量结果显示, 各基元在基频附近具有一致的谐振特性, 其二次谐波相位在 $0\sim 2\pi$ 范围内形成离散等相位差分布。进一步利用实验标定的各超表面二次谐波响应, 通过螺旋梯度序构排布实现阵列的空间相位编码, 基于等效源模型对阵列远场进行重构计算, 结果表明该离散相位基元可实现具有螺旋相位分布特征的二次谐波涡旋光, 且涡旋光的拓扑荷数可控。本工作验证了人工非线性超表面中通过谐振相位实现频率转换和波前调控的可行性, 为太赫兹片上非线性功能器件的波前设计提供了新的技术路径。

关键词: 太赫兹二次谐波; 非线性超表面; 谐振相位调控; 涡旋光产生

中图分类号: O782 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)07-2184-11

网络出版时间: 2026-06-23



太赫兹(THz)波通常指频率位于 $0.1\sim 10.0$ THz 之间的电磁辐射, 处于宏观经典电磁理论向微观量子理论过渡的能谱区域。其低光子能量、高带宽以及对多种非极性材料良好的穿透能力, 使其在新一代信息通信、精密光谱探测与无损检测等领域展现出重要应用潜力^[1-4]。上述应用的实现依赖于高性能太赫兹辐射源, 而随着系统功能密度的提升, 单一频率输出且波束形态固定的辐射源已难以满足需求。更广泛的应用不仅要求产生新的频率分量, 还需要对辐射波前进行可编程调控, 以实现波束偏转、聚焦及轨道角动量光束等复杂电磁场构形^[5-6]。因此, 发展能够在同一平台内同时实现频率转换与波前调控的一体化太赫兹辐射体系, 是推动太赫兹功

能器件走向集成化的重要基础。

在拓展太赫兹频谱覆盖与提升系统功能密度方面, 非线性频率转换为拓展太赫兹频谱覆盖提供了关键途径, 其中二次谐波产生(second-harmonic generation, SHG)是最基本的非线性过程之一^[7]。然而, 常规晶体的非线性谐波产生过程, 依赖于双折射或准相位匹配条件, 其谐波相位主要由晶体取向、温度或泵浦光波长决定^[8-10], 缺乏空间调控自由度, 难以在新频率产生的同时实现波前按需构建。因此, “谐波产生”与“谐波相位调控”通常需要分步完成: 先非线性材料中实现频率转换, 再借助透镜或棱镜等线性光学元件对谐波波前进行调制。多级器件级联方式不仅引入额外损耗, 而且还显著增加系统

收稿日期: 2026-03-13。 修订日期: 2026-05-09。

基金项目: 国家重点研发计划(2023YFB3811400); 国家自然科学基金基础科学中心项目(52388201); 国家自然科学基金(52332006, 12504387, 52573329); 北京市自然科学基金(Z240008); 中国博士后科学基金会(BX20250299, 2025M773396)。

第一作者: 李林涛(1998—), 男, 博士研究生;

王 陈(1996—), 女, 博士。

通信作者: 文永正(1987—), 男, 博士, 副研究员;

李 勃(1976—), 男, 博士, 研究员;

周 济(1962—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2026-03-13. Revised date: 2026-05-09.

First author: LI Lintao (1998—), male, Doctoral candidate.

WANG Chen (1996—), female, Ph.D.

E-mail: llt24@mails.tsinghua.edu.cn; wang-chen@mail.tsinghua.edu.cn

Correspondent author: WEN Yongzheng (1987—), male, Ph.D., Associate Professor.

LI Bo (1976—) male, Ph.D., Professor.

ZHOU Ji (1962—) male, Ph.D., Professor.

E-mail: weny Zheng@tsinghua.edu.cn; boli@mail.tsinghua.edu.cn; zhouji@tsinghua.edu.cn

体积, 与太赫兹器件微型化和集成化的发展趋势相矛盾。与此同时, 受自然晶体材料非线性系数低、色散显著及吸收损耗强等因素制约, 在太赫兹波段实现高效率二次谐波产生本身已具有较大挑战性, 在频率转换过程中进一步实现谐波相位的可设计调控则更加困难。

近年来, 由亚波长人工结构基元构成的超表面为太赫兹波调控提供了新的实现方式^[11-13]。在线性响应条件下, 基于传播相位或几何相位的超表面已实现波束偏转^[14-15]、聚焦^[16-17]及涡旋光^[18-19]产生等功能。另一方面, 利用谐振结构诱导的局域场增强效应^[20-25], 可在半导体中实现二阶非线性响应, 为太赫兹非线性辐射提供了新的实现方式。已有研究表明, 利用超表面功能基元谐振模态构筑产生强洛伦兹力, 驱动自由载流子产生非简谐振荡^[26-27], 可实现显著的二次谐波辐射。然而, 现有基于磁电耦合人工非线性的太赫兹超表面研究主要关注非线性辐射强度的增强, 而未涉及谐振相位在非线性辐射过程中的作用, 非线性信号的相位仍被结构所限制, 难以实现独立于幅值调控的相位设计, 从而限制了非线性波前的空间构建能力。因此, 建立谐振相位与非线性辐射相位之间的映射关系, 是实现频率转

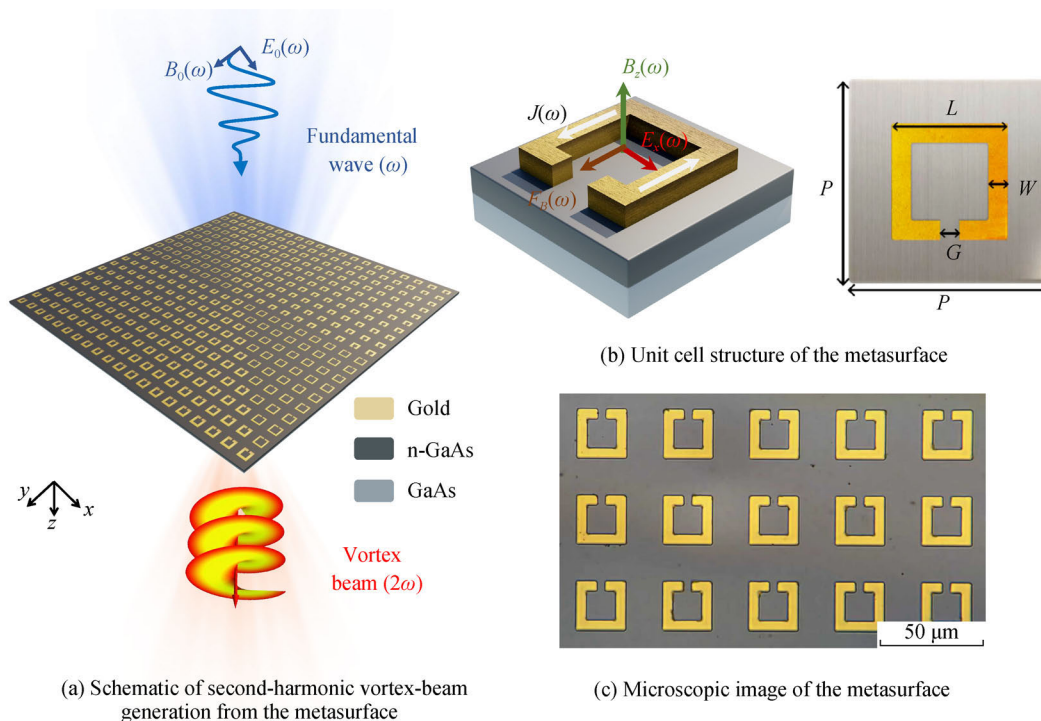
换过程中波前调控的关键科学问题。

基于上述背景, 本工作设计并制备了砷化镓基开口环谐振超表面, 通过调节结构几何参数实现二次谐波相位的连续调控, 并建立谐振相位与二次谐波相位之间的映射关系, 构建了 8 种等间隔的非线性相位基元, 实现 $0 \sim 2\pi$ 的离散相位覆盖。进一步通过空间序构设计, 在频率转换过程中直接完成非线性波前构建, 获得不同拓扑荷数的太赫兹二次谐波涡旋光。该工作在超薄尺度内实现了“谐波产生-相位调控”的一体化, 为高集成度太赫兹非线性功能器件的设计提供了新的实现途径。

1 实验与方法

1.1 工作机理与结构设计

为实现太赫兹二次谐波辐射波前的可设计调控, 构建了一种基于砷化镓(GaAs)的开口环谐振超表面, 其工作原理如图 1a 所示。该结构在沿 z 方向传播的 x 线偏振基频太赫兹波入射条件下, 周期排布的谐振基元阵列在实现二次谐波产生的同时, 通过对各基元非线性辐射相位的序构排布实现二次谐波波前的直接调控, 从而在频率转换过程中形成具有螺旋相位分布的涡旋光束。与传统先产生谐波再



P is the period of the unit cell; L is the side length of the split-ring resonator; W is the width of the metallic ring; G is the gap size.

图 1 太赫兹二次谐波涡旋光产生机理示意图

Fig. 1 Schematic illustration of the terahertz second-harmonic vortex beam generation from the GaAs-based metasurface

利用附加光学元件调控相位的方式不同, 该超表面在单一平面结构中实现了二次谐波产生与波前调控的一体化功能。

基元结构如图 1b 所示, 开口环金属谐振器沉积于掺杂 n-GaAs 层之上, 在周期 P 的超表面阵列中构成基本结构基元, 其中 L 为开口环边长, W 为金属环线宽, G 为开口间隙宽度。入射基频太赫兹波激发金属谐振基元产生强电磁耦合 LC 共振, 谐振电流 $J(\omega)$ 在空间上沿环臂闭合分布, 在开口间隙处形成显著增强的局域电场 $E_x(\omega)$, 在环中心产生垂直于表面的局域磁场 $B_z(\omega)$ 。局域电场驱动掺杂 GaAs 层中的自由载流子产生沿基频电场方向的漂移运动, 其速度满足 $v(\omega) \propto E_x(\omega)$, 而局域磁场通过洛伦兹力 $F = q(v \times B)$ 对载流子施加垂直方向的非线性驱动力。由于载流子漂移速度 $v(\omega)$ 与局域磁场 $B_z(\omega)$ 均随入射波以基频振荡, 其乘积项包含 2ω 频率分量, 从而形成二阶非线性电流源, 并向远场辐射出与入射基波正交偏振的二次谐波信号, 即二次谐波非线性电流满足:

$$J_{2\omega} \propto E_x(\omega) \times B_z(\omega) \quad (1)$$

则二次谐波相位为:

$$\phi_{2\omega} = \phi E_x(\omega) + \phi B_z(\omega) \quad (2)$$

式中: $\phi_{2\omega}$ 为二次谐波相位; $\phi E_x(\omega)$ 为基频局域电场相位; $\phi B_z(\omega)$ 为基频局域磁场相位。该关系表明, 二次谐波的辐射相位由谐振局域电场与磁场的相位共同决定。通过调节开口环的边长 L 、线宽 W 与间隙 G 等几何参数, 可改变 LC 谐振条件, 从而连续调控 $E_x(\omega)$ 与 $B_z(\omega)$ 的相位差, 实现二次谐波相位的调控设计。图 1c 为实际加工的样品光学显微图。

为了实现二次谐波涡旋光产生, 通过调节谐振基元的几何尺寸参数设计了 8 种超表面基元 (MP1~MP8), 在保持辐射幅值处于同一量级的条件下, 实现了以 0.25π 为间隔的离散相位覆盖, 形成 $0 \sim 2\pi$ 的完整相位空间。前 4 个基元分别获得 0 、 0.25π 、 0.5π 、 0.75π 的相位步进, 后 4 个基元通过沿 z 轴旋转 180° 引入 π 相位跳变, 形成 8 种离散二次谐波相位状态。基元的序构排布遵循远场涡旋光生成规律: 每个基元与中心点的方位角与对应的相位需满足:

$$\phi(x, y) = l \cdot \arctan(y/x) \quad (3)$$

式中: $\phi(x, y)$ 为结构基元在该位置的相位; l 为拓扑荷数, $\arctan(y/x)$ 代表结构基元在二维坐标上的

方位角。通过对不同 l 值的二次谐波涡旋光相位板进行计算, 可得到 8 种基元在超表面阵列中的理论序列排布, 实现二次谐波螺旋波前的产生。

1.2 数值模型与参数设置

基于上述机理, 在商用有限元仿真软件 (COMSOL Multiphysics) 中建立三维全波电磁仿真模型。通过仿真优化结构参数, 确定结构基元的周期 P 为 $42 \mu\text{m}$, 开口环边长 L 为 $24 \mu\text{m}$, 环宽 W 为 $4.9 \mu\text{m}$, 开口间隙宽度 G 为 $4 \mu\text{m}$, 厚度为 200 nm , 掺杂砷化镓层厚度为 $1 \mu\text{m}$, 高纯砷化镓衬底厚度为 $625 \mu\text{m}$ 。仿真中材料参数如下: 金的直流电导率为 $4.2 \times 10^7 \text{ S/m}$, 砷化镓的介电常数均为 12.9, 高纯砷化镓衬底的电导率为 $1 \times 10^{-9} \text{ S/m}$, 掺杂砷化镓的电导率为 6400 S/m , 迁移率为 $0.4 \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 碰撞频率为 $4.3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, 为描述洛伦兹力引起的磁电耦合效应, n 型砷化镓 (n-GaAs) 采用各向异性电导率张量进行建模, 具体形式为^[27]:

$$\tilde{\sigma}(B) = \tilde{\sigma}(\omega) \begin{pmatrix} \frac{1}{1+\beta^2} & -\frac{\beta}{1+\beta^2} & 0 \\ \frac{\beta}{1+\beta^2} & \frac{1}{1+\beta^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

其中: $\beta = \tilde{\mu}_e(\omega) B_z(\omega)$; $B_z(\omega)$ 为 z 方向局域磁场强度; $\tilde{\sigma}(\omega)$ 和 $\tilde{\mu}_e(\omega)$ 分别为基频下电导率和迁移率。

时域仿真采用垂直入射的线偏振太赫兹脉冲作为激励源, 其基频时域电场满足:

$$E(t) = |E_0(\omega)| \exp[-(t-t_0)^2 / \Delta t^2] \sin(\omega t) \quad (5)$$

其中: 振幅峰值 $|E_0(\omega)| = 1 \times 10^7 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$; $\omega = 2\pi \times 0.8 \times 10^{12} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$; $t_0 = 12 \text{ ps}$; $\Delta t = 4 \text{ ps}$, 计算可知基波周期为 1.25 ps , 二次谐波周期为 0.625 ps 。仿真时间步长设定为 0.02 ps , 总仿真时间为 30 ps 。

1.3 样品制备

在仿真优化得到的结构参数指导下, 选用金属开口环作为谐振基元, 并采用掺杂 GaAs 提供载流子层、高纯 GaAs 作为衬底构建器件。样品制备以 4 英寸、晶向为 $\langle 100 \rangle$ 、厚度为 $625 \mu\text{m}$ 的双抛高纯 GaAs 晶片为基底, 首先利用金属有机化学气相沉积技术在其表面外延生长 $1 \mu\text{m}$ 厚的 Si 掺杂 n 型 GaAs 层, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, 该外延层的载流子迁移率为 $0.4 \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 电导率为 $6400 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$ 。随后在其上继续外延沉积一层 10 nm 厚的本征 GaAs 薄层, 用以实现对下方掺杂层的隔离与保护, 避免其在后续金属结构制备过程中与金属直接接触而产生导通

效应, 从而影响谐振特性。在完成外延生长的 GaAs 外延片表面旋涂光刻胶(RZJ-304), 经紫外曝光与显影形成预定图形后, 采用磁控溅射方法依次沉积 30 nm 厚的 Ti 黏附层和 200 nm 厚的 Au 功能层。通过剥离工艺去除多余金属及光刻胶, 仅保留设计的谐振结构基元图形, 随后对 GaAs 基片进行清洗并划片, 获得最终样品。4 种结构基元在同一片基底上加工完成, 每个器件的有效面积为 5 mm×5 mm。其光学显微照片如图 1c 所示, 金属结构边界清晰、阵列排布均匀, 表明所制备超表面具有良

好的加工一致性。

1.4 测试系统

为了表征所设计的非线性超表面在太赫兹频段的二次谐波响应, 采用了自主搭建的强场太赫兹时域光谱(THz-TDS)测试系统, 如图 2 所示。飞秒激光由钛蓝宝石激光系统产生, 其输出脉冲的中心波长为 800 nm, 脉冲宽度为 35 fs, 重复频率为 1 kHz, 单脉冲能量可达 7 mJ。输出激光经分束器分为两路: 一路作为泵浦光用于激发太赫兹辐射, 另一路作为探测光用于电光采样检测。

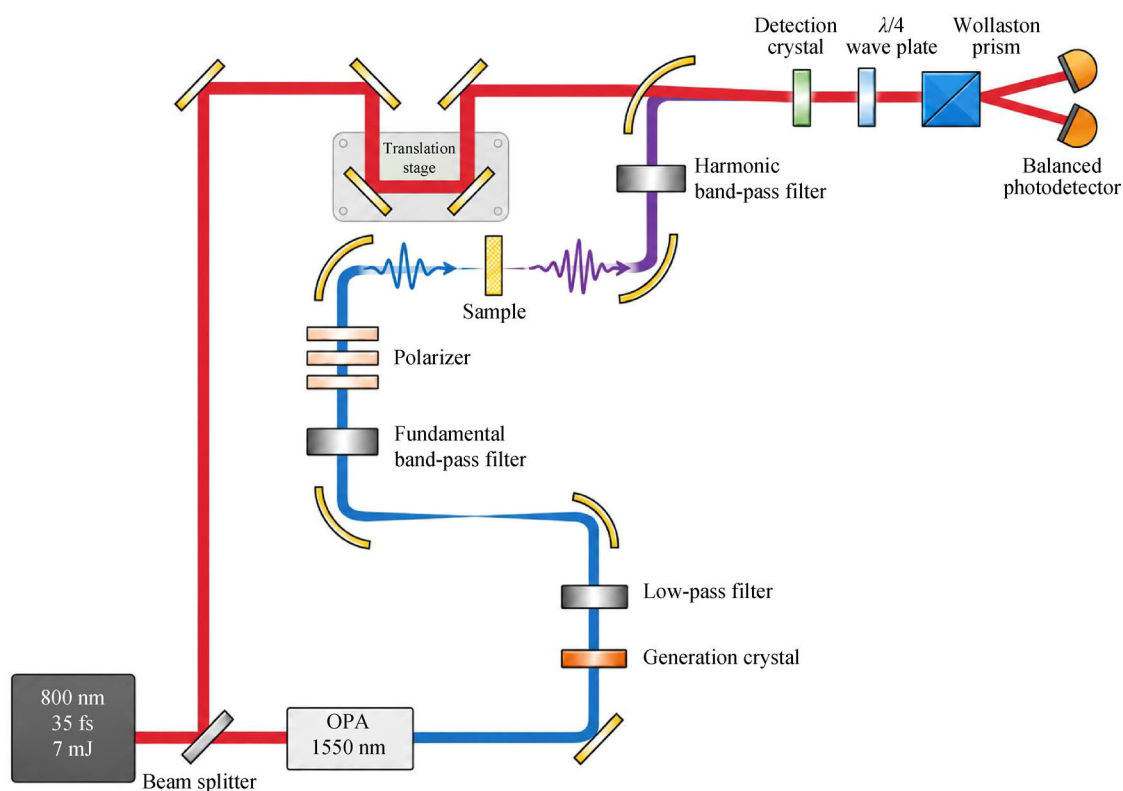


图 2 太赫兹时域光谱测试系统
Fig. 2 Terahertz time-domain spectroscopy system

在太赫兹产生支路中, 泵浦光首先驱动光参量放大器产生中心波长为 1550 nm 的红外脉冲, 随后利用非线性有机晶体的光整流效应激发出强场太赫兹脉冲。生成的太赫兹波经带通滤波器筛选出目标基频成分, 并利用太赫兹偏振片调控其入射偏振态。基频太赫兹脉冲通过离轴抛物镜聚焦于待测样品表面。样品的透射场中同时包含基频成分与非线性产生的二次谐波成分。为实现微弱非线性信号的提取, 在探测前端放置了中心频率为基频两倍的带通滤波器, 以有效滤除基频杂散光并分离出二次谐波信号。在探测支路中, 经衰减后的飞秒探测脉冲通过光学延迟线调节, 在非线性探测晶体中与太赫兹脉冲实

现时空重合。太赫兹电场诱导的瞬态双折射效应改变了探测光的偏振态, 随后利用由 1/4 波片、沃拉斯顿棱镜和平衡探测器组成的差分检测系统进行信号采集。输出的差分电流信号与太赫兹瞬态电场强度成正比。通过高精度扫描时间延迟, 系统能够完整重建二次谐波脉冲的时域波形, 并经快速傅里叶变换获取其频谱特征。

2 结果与讨论

2.1 基于超表面人工基元的太赫兹二次谐波相位设计

通过调节开口环几何尺寸改变谐振状态, 实现

局域电磁场相位的可控偏移。构建了 4 种具有不同谐振相位的超表面基元(MP1~MP4)，其相邻基元产生的二次谐波相位差为 0.25π ，制备样品如图 3 所示。基于洛伦兹力驱动的太赫兹非线性电流模型式(1)可知，当结构绕 z 轴旋转 180° 时，谐振电流方向

发生反转，从而导致局域磁场 $B_z(\omega)$ 方向翻转，而开口间隙处的局域电场方向保持不变，因此二次谐波非线性电流的符号反转，对应辐射相位产生 π 跳变。因此，通过 8 种离散相位超表面基元，可实现 $0\sim 2\pi$ 的完整相位覆盖，其结构参数如表 1 所示。

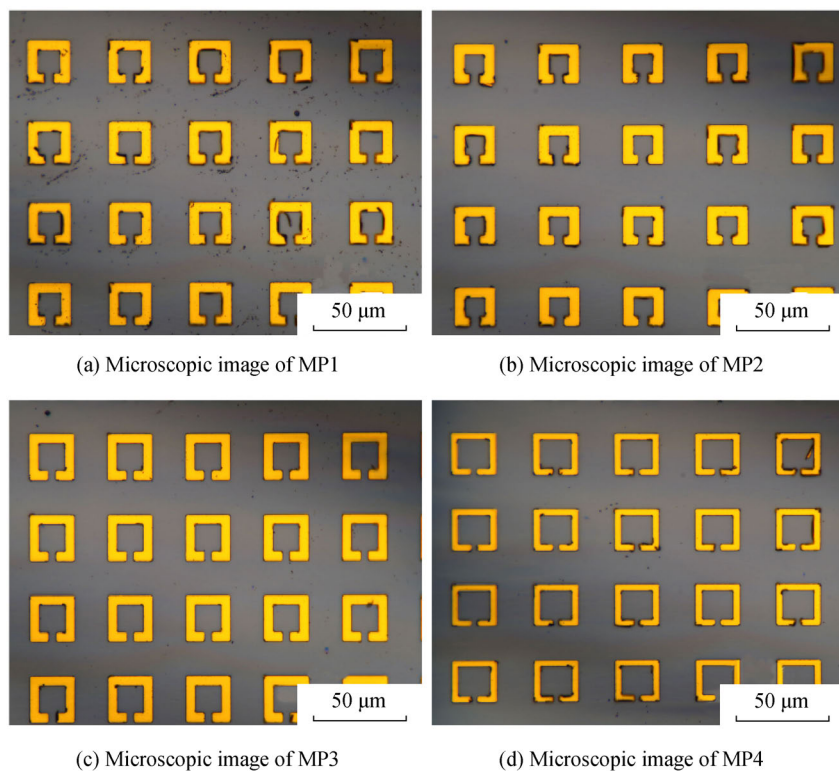


图 3 MP1~MP4 超表面阵列的光学显微图

Fig. 3 Optical micrographs of the MP1–MP4 metasurface arrays

表 1 设计的 8 种超表面基元(MP1~MP8)及其几何参数和二次谐波相位

Table 1 Eight designed metasurface unit cells (MP1–MP8) with their geometric dimensions and corresponding SHG phases

	$L/\mu\text{m}$	$W/\mu\text{m}$	$G/\mu\text{m}$	Phase/rad
MP1	20	5.0	5.0	0π
MP2	22	5.0	4.5	0.25π
MP3	24	4.9	4.0	0.50π
MP4	23	3.3	3.0	0.75π
MP5	20	5.0	5.0	1.00π
MP6	22	5.0	4.5	1.25π
MP7	24	4.9	4.0	1.50π
MP8	23	3.3	3.0	1.75π

为验证所提出的人工二阶非线性产生机理，分别通过频域与时域仿真对超表面的谐振特性、局域

电磁场增强效应及二次谐波进行了系统分析。根据上述仿真模型和参数的构建，频域仿真中采用 x 偏振的宽带太赫兹波垂直入射超表面，通过 S 参数计算得到反射率、透射率及吸收率，如图 4a 所示。可观察到在 0.78 THz 处吸收达到最大值，该频率为超表面的谐振频率，对应于开口环结构的磁电耦合 LC 共振模式。在该频率处谐振电流沿金属环闭合分布，从而在结构中心区域形成显著增强的 z 方向局域磁场，同时在开口间隙处产生强 x 方向局域电场。超表面谐振时局域磁场分布如图 4b 所示，相比于入射磁场， z 方向的局域磁场最大振幅为 27.1 倍；局域电场分布如图 4c 所示，相比于入射电场， x 方向的局域电场最大振幅为 13.8 倍。强局域电磁场的空间共存为洛伦兹力驱动的非线性载流子振荡提供了必要条件，从而形成与理论模型一致的人工二阶非线性电流源。

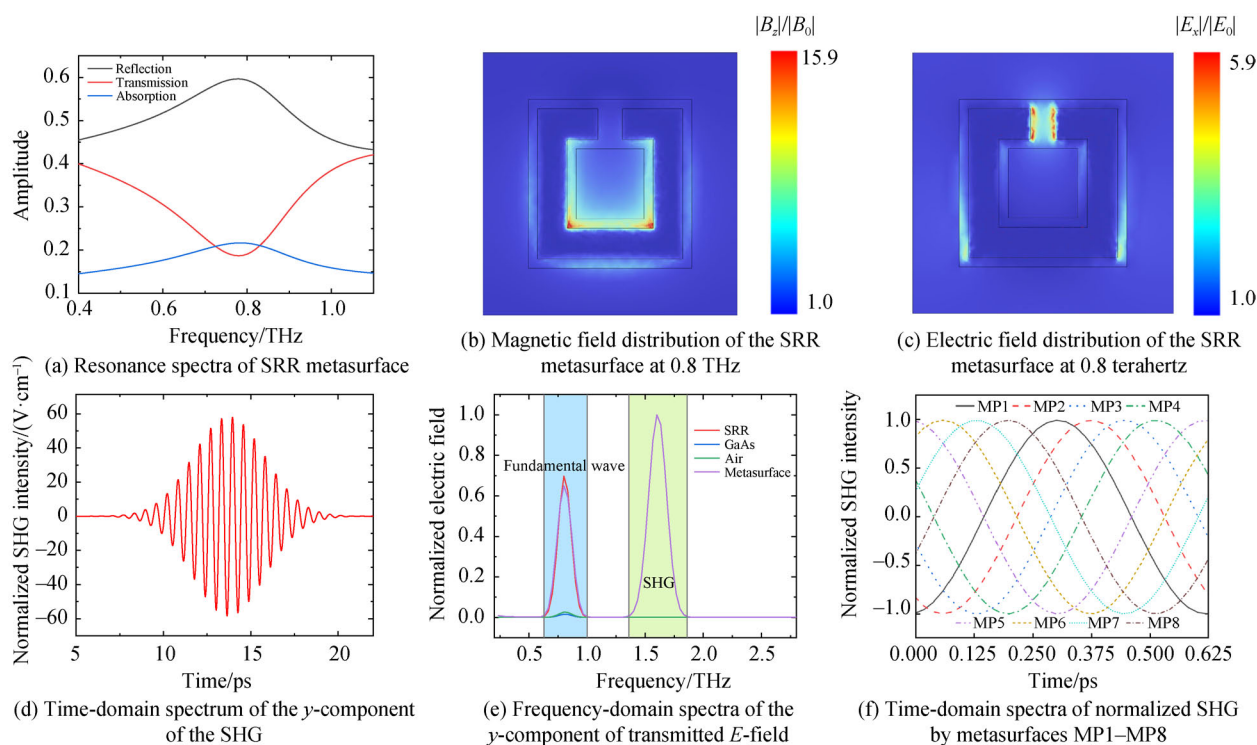


图 4 超表面二次谐波产生的仿真结果

Fig. 4 Simulated SHG of the metasurface

在此基础上,通过时域仿真进一步分析二次谐波的产生过程。仿真中入射 x 偏振基频太赫兹脉冲时,在线性情况下透射场中 y 偏振分量为零;而在考虑磁电耦合输运模型后,可在 y 偏振方向观测到明显的非线性太赫兹信号。经仿真得到 y 分量的透射电场时域谱,再通过 1.2~2.0 THz 的带通滤波器处理,得到超表面产生的二次谐波时域谱如图 4d 所示。对透射 y 偏振电场进行傅里叶变换,得到如图 4e 所示的透射偏振电场频域谱,除了基频 0.8 THz 信号外,可观察到明显 1.6 THz 的倍频信号,证明所提出的人工二阶非线性产生机理是成立的。需要指出的是,图 4e 中在基频附近存在微弱的 y 偏振分量。为明确其来源,分别计算了悬空开口环(SRR)、GaAs 衬底、纯空气域和完整超表面结构的透射 y 偏振电场频谱。结果表明,基频处的 y 偏振分量主要来源于金属 SRR 结构,而空气和 GaAs 衬底模型中的 y 偏振基频分量极弱。对于空气、GaAs 衬底和 SRR 结构,理论上在 x 偏振平面波入射下不会产生 y 偏振转换,其在仿真中基频处偏振转化主要来源于有限网格划分和数值精度等因素。特别是, SRR 结构由于具有金属边界、有限开口和强谐振局域场分布,对网格离散和场分量投影更为敏感,因此该基频分量在开口环结构中表现得更为明显。该基频

分量与 2ω 处的二次谐波信号在频率和物理机制上均可明确区分。后续相位分析均基于二次谐波频段滤波后的信号进行,因此 y 偏振基频信号不会影响 MP1~MP8 二次谐波相位调控结果的判定。

进一步对不同结构参数的超表面基元 MP1~MP8 进行相同的仿真分析,提取其二次谐波时域电场并进行归一化处理,如图 4f 所示。结果表明,不同基元的二次谐波信号呈现出稳定的相位偏移,相邻基元之间的相位差约为 0.25π ,实现了 $0\sim 2\pi$ 范围内二次谐波的相位覆盖,表明通过调节谐振结构的几何参数可以有效调控二次谐波相位。

为验证所提出的非线性相位调控机理,首先利用太赫兹时域光谱系统对 MP1~MP4 4 种超表面的线性透射谱进行测试,如图 5a 所示。4 种结构在 0.8 THz 附近均表现出明显的谐振响应,且谐振频率基本一致,说明不同结构基元在相同工作频点下可实现相位调控。进一步通过比较 MP4 及其绕 z 轴旋转 180° 后结构的二次谐波时域波形对相位调控机制进行验证,如图 5b 所示。两者在整个时间窗口内呈现严格反相分布,对应稳定的 π 相位差。因此,凭借设计的 MP1~MP4 超表面实现二次谐波 $0\sim\pi$ 的等间隔相位调控,并结合其旋转结构得到 MP5~MP8,从而构建出 8 种离散非线性相位基元,实现

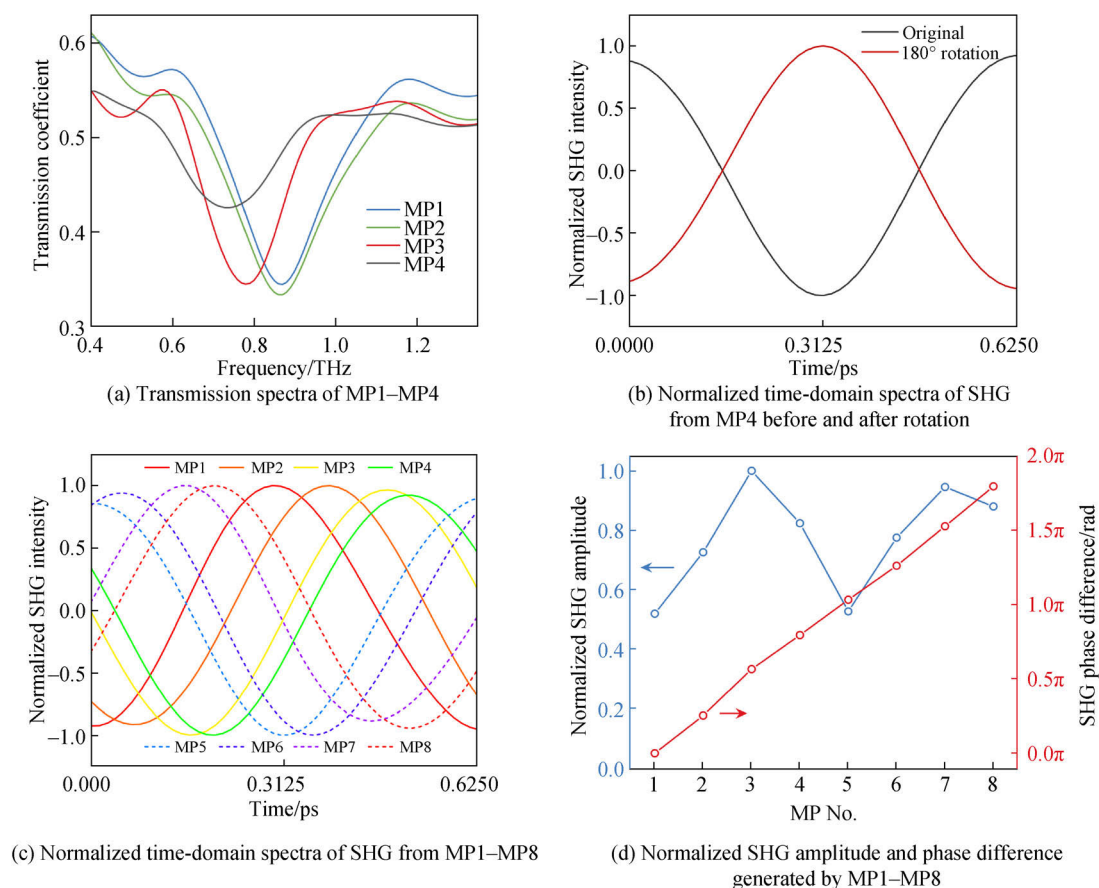


图5 超表面 MP1–MP8 线性透射及二次谐波响应
Fig. 5 Linear transmission and SHG responses of metasurfaces MP1–MP8

0~2 π 的完整相位覆盖。实验中采用 0.8 THz x 偏振太赫兹波垂直入射超表面, 对 y 偏振方向透射信号进行傅里叶变换及带通滤波, 提取 1.6 THz 二次谐波分量, 再对幅值进行归一化处理, 得到如图 5c 所示的结果。不同结构产生的二次谐波波形相位呈现明显且稳定的相位偏移。其中, MP1~MP4 为原始结构, MP5~MP8 为对应的旋转结构。为更清晰地展示相位调控效果, 图 5d 给出了 MP1~MP8 的二次谐波的幅值和相位分布。结果表明, 相邻单元之间的相位差约为 0.25 π , 均匀覆盖 0~2 π 空间。尽管不同单元的辐射幅值存在一定波动, 但相位调控保持高度线性关系, 实验结果表明该离散相位单元在目标频点实现稳定相位步进。因此, 该离散相位单元能够作为后续构建非线性波前的基本序构单元。

为将实验相位结果与前述非线性相位调控机理建立一一对应关系, 需要强调本工作中二次谐波相位的来源。对于该类由谐振电流诱导的人工非线性过程, 在固定工作频点且由单一 LC 谐振模主导的条件下, 结构几何参数主要改变谐振模下局域电场与磁场的相对相位关系, 从而改变非线性等效源项

的相位并最终体现在远场二次谐波相位中。基于这一点, 图 5b 所示的“MP4 旋转 180° 后二次谐波波形反相”不仅表明相位发生 π 跳变, 也等价于对前述机理中等效源符号项的验证: 结构旋转导致环形电流方向反转, 进而使与电流相关的磁场相位发生翻转, 人工非线性项的整体相位增加 π 。该结果说明, 结构取向可作为稳定的二值(0/ π)相位控制自由度, 并与结构几何参数引入的连续相位漂移相结合, 共同构成本工作的非线性相位设计机制。

2.2 超表面序构协同下的太赫兹涡旋二次谐波产生

涡旋光束是一种携带螺旋相位波前的特殊结构光场, 其轨道角动量由拓扑荷数 l 决定, 旋转方向由 l 的正负表示。沿 z 轴传播时, 柱坐标下的电场可表示为:

$$E(r, \phi, z) = E_0(r, \phi, z) \exp(-ikz) \exp(il\phi) \quad (6)$$

其中: $E(r, \phi, z)$ 为振幅强度; $k = 2\pi/\lambda$ 为波数; ϕ 为方向角; l 为拓扑荷数。

相应的相位分布为:

$$\phi(r, \phi, z) = -l\phi + kz \quad (7)$$

拓扑荷数 l 决定波前奇点周围的螺旋相位变化, 增大 l 会增加相位绕中心旋转的次数, 从而影响远场涡旋光束的空心环结构和螺旋方向。该理论为超表面离散相位基元的序构排布提供指导: 在远场形成螺旋波前的条件下, 每个基元的二次谐波相位 $\phi(x, y)$ 应与其相对于阵列中心的方位角 $\theta = \arctan(y/x)$ 满足式(3)。基于建立的“谐振相位-非线性辐射相位”映射关系, 离散谐振基元可作为具有可控复振幅的非线性辐射子波源, 通过空间排布实现非线性波前的直接构建。八种结构基元在目标频率处提供等间隔相位非线性响应, 实现了 $0 \sim 2\pi$ 范围内的完整相位覆盖, 从而为轨道角动量光束的产生提供了基本的空间调控自由度。本工作设计了拓扑荷数分别为 ± 1 、 ± 2 的二次谐波相位板, 整体的排布设计方式如图 6 所示, 按照式(3)的相位分布进行空间排布, 确保远场形成连续螺旋相位梯度。该二次谐波相位板共由 20×20 基元组成, 按照上述方位角关系构建阵列并进行仿真分析。

为了解析非线性辐射的远场分布特性并降低全波时域仿真的计算复杂度, 本工作采用了一种等效源模型。鉴于超表面产生的二次谐波源于局域场耦

合驱动的非线性极化电流, 其辐射特性可由频域中的等效表面电流源描述。在基元间距远小于传播距离且近场耦合可忽略的条件下, 远场辐射可由各离散子源的相干叠加得到。采用等效源模型对非线性远场进行求解, 其形式可表示为:

$$\mathbf{J}_{\text{eff}}(2\omega) = J_0 A_{\text{SHG}} e^{i\phi_{\text{SHG}}} \hat{\mathbf{y}} \quad (8)$$

式中: A_{SHG} 和 ϕ_{SHG} 为各离散基元的辐射二次谐波的特定振幅复相位, 由实验测量结果给出。该方法在保持相位与强度分布一致性的前提下, 显著提升了求解效率。

基于该模型计算得到的远场强度和相位分布如图 6 所示, 当 y 偏振太赫兹波垂直入射相位板, 其幅度分布图均呈现典型的空心环结构, 轴心处强度趋近于零, 表明辐射场发生完全相消干涉并形成稳定的相位奇点。随着拓扑荷数绝对值的增加, 环形半径逐渐增大, 反映出高阶轨道角动量模态的能量向外扩展特性。对应的远场相位分布满足涡旋光束的物理特性, 拓扑荷数为 ± 1 、 ± 2 的二次谐波涡旋光分布携带了 2π 、 4π 变化的螺旋相位。相位沿方位角连续变化, 总变化量为 $2\pi l$, 证明所产生的二次谐波

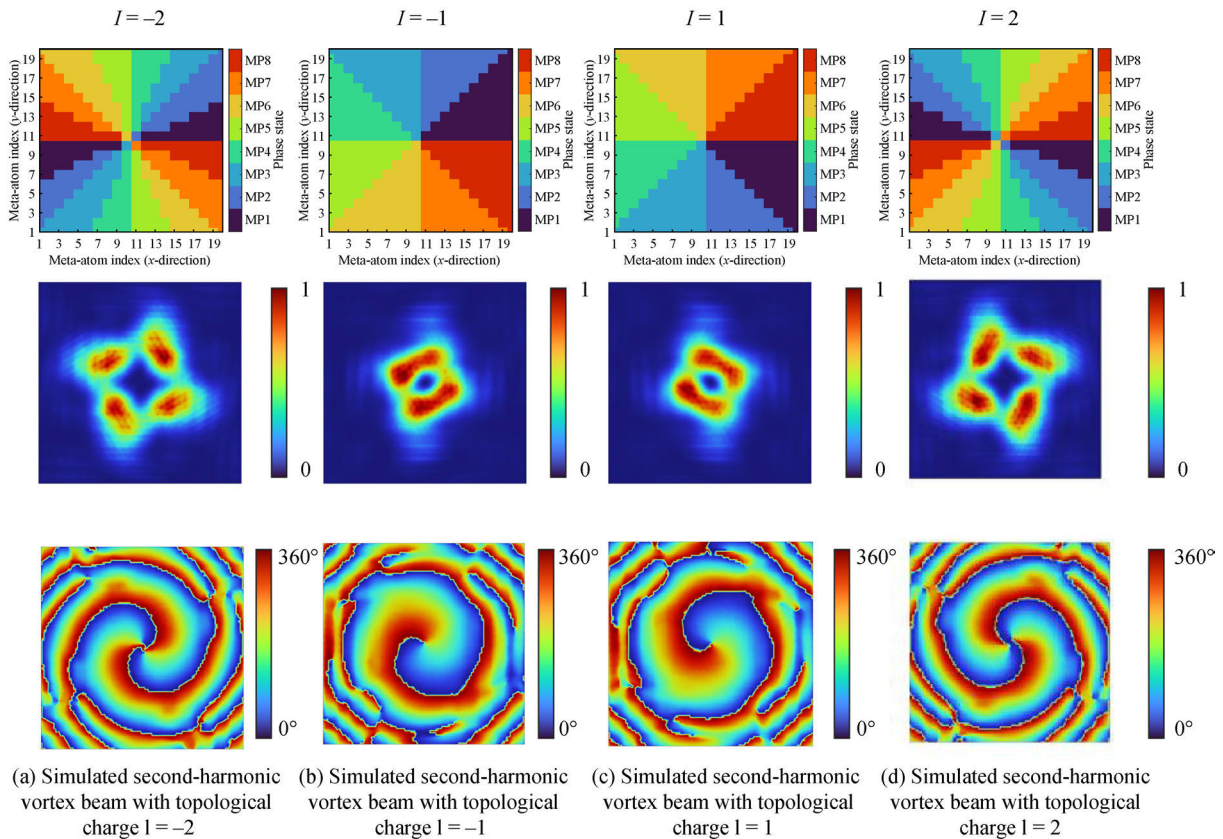


图 6 不同拓扑荷数下二次谐波涡旋光的远场辐射特性

Fig. 6 Far-field radiation characteristics of the SHG vortex beams

辐射携带确定的轨道角动量。当拓扑荷数符号改变时，相位螺旋方向反转而强度分布保持不变。尽管采用的是离散相位采样，该结构仍可在远场重构出连续螺旋波前，其物理本质为对理想相位分布的空间量化逼近。该结果验证了基于谐振相位调控的非线性波前工程方法在太赫兹频段的可行性。

3 结论

基于洛伦兹力驱动的人工二阶非线性机理，提出一种利用谐振相位响应实现太赫兹二次谐波相位可设计调控的方法。通过调节谐振结构几何参数改变基频局域电磁场的相对相位关系，实现对二次谐波相位的有效控制，并构建了由 8 种离散相位基元组成的二次谐波相位基元库，实现 $0\sim 2\pi$ 范围内的完整相位覆盖。实验结果表明，各基元在相同谐振频点附近具有一致的谐振特性，其二次谐波相位呈稳定等步进分布。进一步通过基元的序构排布实现阵列空间相位编码，并基于等效源模型重构远场辐射，成功获得不同拓扑荷数的太赫兹二次谐波涡旋光束。该研究在超表面中实现了频率转换与波前调控的一体化，为太赫兹非线性超表面的相位工程设计及片上结构光源的实现提供了新的技术途径。

参考文献:

- [1] TONOUCHI M. Cutting-edge terahertz technology[J]. Nature Photon, 2007, 1(2): 97–105.
- [2] MITTLEMAN D M. Frontiers in terahertz sources and plasmonics[J]. Nature Photon, 2013, 7(9): 666–669.
- [3] FERGUSON B, ZHANG X C. Materials for terahertz science and technology[J]. Nature Mater, 2002, 1(1): 26–33.
- [4] LEE Y S. Principles of Terahertz Science and Technology[M]. New York: Springer Science & Business Media, 2009.
- [5] ZHANG G Z, LI S T, CHANG L B, et al. MXene-based electromagnetic attenuation materials in microwave and terahertz bands[J]. Rare Met, 2026, 45(2): e70079.
- [6] HU S Y, LI P Y, CHEN H, et al. Photonic meta-crystals[J]. Microstructures, 2025, 5(4): 2025082.
- [7] CHAULEAU J Y, TRASSIN M. Sensing multiferroic states non-invasively using optical second harmonic generation[J]. Microstructures, 2024, 4(1): 2024005.
- [8] KEILMANN F. Far-infrared nonlinear optics[J]. Far Infrared Sci Technol, 1986, 666: 193.
- [9] VASWANI C, MOOTZ M, SUNDAHL C, et al. Terahertz second-harmonic generation from lightwave acceleration of symmetry-breaking nonlinear supercurrents[J]. Phys Rev Lett, 2020, 124(20): 207003.
- [10] 杨春晖, 马天慧, 朱崇强, 等. 中远红外及太赫兹波段非线性晶体硒化镱[J]. 硅酸盐学报, 2017, 45(10): 1402–1409.
- [11] CHEN W T, ZHU A Y, CAPASSO F. Flat optics with dispersion-engineered metasurfaces[J]. Nat Rev Mater, 2020, 5(8): 604–620.
- [12] KILDISHEV A V, BOLTASSEVA A, SHALAEV V M. Planar photonics with metasurfaces[J]. Science, 2013, 339(6125): 1232009.
- [13] SUN S L, HE Q, HAO J M, et al. Electromagnetic metasurfaces: Physics and applications[J]. Adv Opt Photon, 2019, 11(2): 380–479.
- [14] HOSSEININEJAD S E, ROUHI K, NESHAT M, et al. Digital metasurface based on graphene: An application to beam steering in terahertz plasmonic antennas[J]. IEEE Trans Nanotechnol, 2019, 18: 734–746.
- [15] LI Y, LI X, ZHAO M L, et al. Polarization-frequency multiplexed terahertz reconfigurable metasurface for diversified vortex beams generation and multi-spot patterns in full-space enabled by vanadium dioxide[J]. Phys Scr, 2026, 101(3): 035504.
- [16] LI X Z, WEI W, YANG X D. Multi-functional terahertz metasurface for a vortex beam, multi-channel focusing, polarization conversion, and broadband absorption based on vanadium dioxide[J]. Appl Opt, 2024, 63(7): 1695–1701.
- [17] NIU L, FENG X, ZHANG X Q, et al. Electric-magnetic-switchable free-space skyrmions in toroidal light pulses via a nonlinear metasurface[J]. Optica, 2026, 13(2): 203.
- [18] WU M Z, HE X J, LU G J, et al. Multi-mode non-diffraction vortex beams enabled by polarization-frequency multiplexing transmissive terahertz metasurfaces[J]. J Appl Phys, 2024, 136(10): 103102.
- [19] LI J S, CHEN J Z. Multi-beam and multi-mode orbital angular momentum by utilizing a single metasurface[J]. Opt Express, 2021, 29(17): 27332–27339.
- [20] HAIL C U, MICHAELI L, ATWATER H A. Third harmonic generation enhancement and wavefront control using a local high-Q metasurface[J]. Nano Lett, 2024, 24(7): 2257–2263.
- [21] LIU H Z, GUO C, VAMPA G, et al. Enhanced high-harmonic generation from an all-dielectric metasurface[J]. Nature Phys, 2018, 14(10): 1006–1010.
- [22] PHUOC K T, ROUSSE A, PITTMAN M, et al. X-ray radiation from nonlinear Thomson scattering of an intense femtosecond laser on relativistic electrons in a helium plasma[J]. Phys Rev Lett, 2003, 91(19): 195001.
- [23] CORDE S, PHUOC K T, LAMBERT G, et al. Femtosecond x rays from laser-plasma accelerators[J]. Rev Mod Phys, 2013, 85(1): 1–48.
- [24] SUN J, KOSEL J. Finite-element modelling and analysis of Hall effect and extraordinary magnetoresistance effect[M]//Finite Element Analysis - New Trends and Developments. InTech, 2012: 201–224.
- [25] WANG C, TAN Y, WEN Y Z, et al. Multioctave terahertz frequency synthesis via simultaneous excitations of intrinsic and extrinsic nonlinearities in metasurfaces[J]. ACS Nano, 2025, 19(50): 42497–42505.
- [26] WANG C, WEN Y Z, TAN Y, et al. On-demand generation and control of giant terahertz nonlinearity with metasurfaces[J]. Laser Photonics Rev, 2025, 19(3): 2401224.
- [27] WEN Y Z, ZHOU J. Artificial nonlinearity generated from electromagnetic coupling metamolecule[J]. Phys Rev Lett, 2017, 118(16): 167401.

作者贡献声明:

李林涛、王 陈: 论文撰写, 实验设计与实施, 相关图表绘制与数

据分析, 论文修改

于凯新: 实验、相关图表绘制与数据分析, 论文框架构建

谭永、姚佳栋、张任飞、孙竞博: 实验系统搭建、辅助测试、数

据分析、结果讨论

文永正、李勃、周济: 研究方向提出、课题设计、研究指导、

论文框架统筹及终稿修订

Terahertz Second-Harmonic Vortex Generation Based on the Synergistic Design of Metasurface Meta-Atoms and Spatial Arrangement

LI Lintao^{1,2}, WANG Chen¹, WEN Yongzheng^{1,4}, YU Kaixin¹, TAN Yong¹, ZHANG Renfei³, YAO Jiadong³,
SUN Jingbo¹, LI Bo^{2,4}, ZHOU Ji¹

(1. School of Materials Science and Engineering, State Key Laboratory of New Ceramic Materials, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 2. Institute of Materials Research, Tsinghua Shenzhen International Graduate School, Tsinghua University, Shenzhen 518055, Guangdong, China; 3. Research Center for Metamaterials, Wuzhen Laboratory, Jiaxing 314500, Zhejiang, China; 4. Suzhou Laboratory, Suzhou 215000, Jiangsu, China)

Extended Abstract

Introduction Terahertz (THz) waves, typically spanning the frequency range from 0.1 to 10 THz, possess unique characteristics such as low photon energy, broad bandwidth, and strong penetration through nonpolar materials, enabling important applications in wireless communication, biomedical sensing, and nondestructive evaluation. Efficient manipulation of the amplitude, frequency, and phase of THz radiation is essential for the development of high-performance functional devices. Metasurfaces composed of subwavelength artificial meta-atoms provide a versatile platform for THz wavefront engineering through tailored electromagnetic responses. However, most reported THz metasurfaces operate in the linear regime and rely on propagation or geometric phase, which limits their functionality to the fundamental frequency and prevents the integration of frequency conversion and wavefront control. Second-harmonic generation (SHG) offers an effective approach for extending the accessible THz spectral range. Conventional nonlinear crystals, however, suffer from low nonlinear efficiency and stringent phase-matching requirements in this frequency region, which restrict device miniaturization and integration. Resonant artificial microstructures in semiconductors provide an alternative nonlinear mechanism through strong local electromagnetic field enhancement, where the Lorentz-force-driven nonlinear current gives rise to an effective second-order response. Nevertheless, the phase of nonlinear radiation remains difficult to control independently of the radiation amplitude. Therefore, establishing a deterministic relationship between the resonance phase and the nonlinear radiation phase is critical for nonlinear wavefront engineering. In this work, a GaAs-based metasurface is designed to correlate the resonance phase at the fundamental frequency with the phase of the second-harmonic radiation, enabling phase-engineered nonlinear wavefront construction.

Methods The metasurface consists of gold split-ring resonators patterned on a silicon-doped n-type GaAs epitaxial layer grown on a semi-insulating GaAs substrate. Under normal incidence of an x-polarized THz wave, the resonant current in the metallic ring generates a localized magnetic field perpendicular to the surface and a strongly enhanced electric field in the split gap. The electric field drives free carriers in the n-GaAs layer, while the localized magnetic field exerts a Lorentz force on the moving carriers, resulting in a nonlinear current oscillating at twice the fundamental frequency. Three-dimensional full-wave simulations based on the finite-element method were carried out to optimize the structural parameters and analyze both the linear resonance and nonlinear time-domain response. An anisotropic conductivity tensor was introduced to describe the magneto-electric coupling induced by the Lorentz force. Four meta-atoms with equally spaced resonance phases were designed, and an additional π phase shift was obtained by rotating the structures by 180° , resulting in eight discrete nonlinear phase states covering the full $0-2\pi$ range. The samples were fabricated using metal-organic chemical vapor deposition, photolithography, magnetron sputtering, and lift-off processes. The nonlinear response was characterized using a home-built strong-field terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS) system, in which the second-harmonic signal was extracted by spectral filtering and detected via electro-optic sampling.

Results and discussion Frequency-domain simulations show that all metasurface structures exhibit pronounced resonances near 0.8 THz, ensuring that the nonlinear phase comparison is performed under nearly identical linear response conditions. At the resonance frequency, strong local electric and magnetic field enhancements are observed, providing the physical origin for the Lorentz-force-driven nonlinear current. Time-domain simulations and experimental measurements confirm the generation of a cross-polarized second-harmonic signal at 1.6 THz. The four designed meta-atoms provide a phase interval of 0.25π , and the corresponding rotated structures introduce an additional π phase shift, resulting in eight discrete nonlinear phase states with nearly uniform spacing over the entire $0-2\pi$ range. Although slight amplitude variations exist among different unit cells, the measured phase evolution follows the designed linear dependence, indicating that the nonlinear phase can be effectively modulated through the resonance phase. Based on the experimentally extracted complex responses of the meta-atoms, an equivalent surface current model

was employed to reconstruct the far-field radiation. By arranging the discrete phase elements according to the helical phase distribution, the reconstructed far-field exhibits a doughnut-shaped intensity profile and a continuous azimuthal phase variation of 2π , which are the characteristic features of vortex beams. These results confirm that the experimentally obtained nonlinear phase library enables nonlinear helical wavefront construction through ordered spatial arrangement of the meta-atoms.

Conclusions A nonlinear metasurface capable of phase-engineered terahertz second-harmonic radiation has been designed and experimentally demonstrated. By correlating the resonance phase at the fundamental frequency with the phase of nonlinear radiation, eight discrete nonlinear phase states covering the full $0-2\pi$ range were achieved through meta-atom design and structural rotation. Based on the experimentally extracted complex responses, nonlinear helical wavefronts were reconstructed through ordered spatial arrangement of the phase elements. The results verify that nonlinear wavefront engineering can be achieved through the cooperative strategy of meta-atom design and ordered arrangement. This approach enables the integration of frequency conversion and wavefront shaping within a planar artificial structure and provides a feasible route for phase engineering in nonlinear THz metasurfaces as well as for integrated structured-light sources in THz communication, imaging, and information processing.

Keywords terahertz metasurface; second-harmonic generation; nonlinear phase control; vortex beam