

多波段近场增强超材料与上转换材料的复合体系研究

肖曼, 任玉*

长春理工大学物理学院, 吉林 长春

收稿日期: 2026年3月31日; 录用日期: 2026年5月11日; 发布日期: 2026年5月19日

摘要

为解决传统上转换材料(Upconversion Nanoparticles, UCNPs)转换效率低与常规超材料单波段共振且功能单一的局限, 本文提出了一种银光栅-沟槽超材料与镱(Yb^{3+})和铒(Er^{3+})共掺杂的氟化钇钠(NaYF_4)相结合的复合结构。通过将 $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ 嵌入银光栅沟槽内部, 在同一结构内实现了多波段共振吸收与特定波段的近场增强。通过时域有限差分法(Finite-Difference Time-Domain, FDTD), 本文系统研究了该复合结构在可见光(Visible, VIS)-近红外光(Near-Infrared, NIR)波段的光学响应特性, 并明确了结构周期、光栅厚度、银层厚度对复合结构吸收峰位、局域场分布以及近场增强性能的调控规律。基于上述调控规律对复合结构进行优化后, 该银光栅-沟槽超材料复合结构在400~1000nm波段内呈现出三个稳定的特征吸收峰, 且在共振波长980 nm处实现了高达 6.6×10^6 的增强因子。该复合结构对推动光电器件向小型化方向发展具有重要意义, 在光谱探测、光伏器件和光通信等领域展现出独特的优势与广阔的应用前景。

关键词

超材料, 上转换材料, 表面等离子共振, 多波段共振

Research on the Composite System of Multi-Band Near-Field Enhancement Metamaterials and Upconversion Materials

Man Xiao, Yu Ren*

School of Physics, Changchun University of Science and Technology, Changchun Jilin

Received: March 31, 2026; accepted: May 11, 2026; published: May 19, 2026

*通讯作者。

文章引用: 肖曼, 任玉. 多波段近场增强超材料与上转换材料的复合体系研究[J]. 应用物理, 2026, 16(5): 477-488.
DOI: 10.12677/app.2026.165044

Abstract

To address the limitations of conventional upconversion nanoparticles (UCNPs), such as low conversion efficiency, and conventional metamaterials, which typically exhibit single-band resonance and limited functionality, this study proposes a composite structure integrating silver-groove grating metamaterials with erbium (Er^{3+}) and ytterbium (Yb^{3+}) co-doped sodium yttrium fluoride (NaYF_4). By embedding $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+},\text{Yb}^{3+}$ within the grooves of the silver grating, multi-band resonant absorption and near-field enhancement at specific wavelengths are realized within a single architecture. Using the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) method, this work systematically investigates the optical response characteristics of the composite structure across the Visible (VIS) to Near-Infrared (NIR) spectrum, and elucidates the influence of structural parameters—including periodicity, grating thickness, and silver layer thickness—on the absorption peaks, localized field distribution, and near-field enhancement performance. Through parameter optimization guided by the above analysis, the silver-groove grating metamaterial composite structure demonstrates three well-defined absorption peaks in the 400~1000 nm range, achieving an enhancement factor as high as 6.6×10^6 at the resonance wavelength of 980 nm. This metamaterial configuration holds significant potential for advancing the miniaturization of optoelectronic devices and exhibits unique advantages and broad application prospects in fields such as spectral detection, photovoltaics, and optical communications.

Keywords

Metamaterials, Upconversion Materials, Surface Plasmon Resonance, Multi-Band Resonance

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

UCNPs 可通过反斯托克斯发光效应将低能量近红外光子转换为高能量可见光或紫外光子, 具有窄带发射、高光化学稳定性及生物相容性等优势。目前被广泛应用于医学诊疗[1]、太阳能转换[2]、光催化[3]及光学信息存储[4]等领域。然而, UCNPs 本身存在的量子产率低、吸收截面小及表面猝灭效应等缺点严重限制了其实际应用[5]。因此, 需要借助等离激元超材料的局域场增强与光场调控能力来解决上述难题。当 UCNPs 与等离激元超材料耦合时, 其近场增强因子(Near-Field Enhancement Factor)是体现局域表面等离激元共振(Localized Surface Plasmon Resonance, LSPR)实现电磁场增强程度的核心参数, 由于 UCNPs 的双光子吸收过程, 所以复合结构产生的近场增强因子通常定义为 $|E_1/E_0|^4$, 但是常见的 UCNPs 等离激元超材料复合结构的近场增强因子仅能达到 $10^1\sim 10^5$ [6]。而且单一共振超材料在抗干扰能力及多波段传感等宽光谱应用中存在明显局限性。其单一结构往往由于转换效率较低致使器件体积庞大、成本高昂, 在降低系统稳定性的同时, 也增加了实际调控的复杂度[7]。为了突破单一共振超材料的局限性, 关于双共振超材料的研究逐渐成为焦点, 研究人员通过对超材料结构的优化与设计, 能够在超材料结构内同时实现两个不同波段的共振响应, 相较于单一共振超材料, 在一定程度上拓展了超材料的光谱响应范围, 在部分双波段传感、简单抗干扰场景中展现出一定的应用优势。尽管如此, 双共振超材料的光谱覆盖范围仍较为狭窄, 通常仅能覆盖两个离散的波段, 无法实现宽光谱范围内的连续覆盖与多波段协同响应, 难以满足宽光谱光伏等对高精度跨波段协同的应用需求[8]。因此, 对于可实现高近场增强、多功能集成、

器件微型化及跨波段高效协同的多波段共振超材料的研究显得尤为必要。

为实现这一目标, 本文将 UCNP 与等离激元纳米结构相结合, 基于 $\text{NaYF}_4:\text{Yb}^{3+},\text{Er}^{3+}$ 的常见激发响应波段 980 nm、1550 nm 设计了一种具有三个独立的共振波段的复合材料结构, 利用表面等离激元共振(Surface Plasmon Resonance, SPR)效应产生的近场增强来提升超材料-上转换材料复合体系的光吸收性能, 同时结合 SPR 效应与上转换发光特性的协同调控, 通过调节几何参数实现了对共振波长的精确调控, 分别在 440 nm、808 nm、980 nm 得到 99.8%、85%、99.3% 的吸收率。在实现宽光谱范围内多波段的连续覆盖、高效协同响应的同时, 在共振波长 980 nm 处得到高达 6.6×10^6 的场增强因子。

本文采用光栅-沟槽超材料结构实现近场增强的方法, 相比其他增强方法, 例如染料敏化、纳米天线阵列及表面增强拉曼光谱(Surface-enhanced Raman Spectroscopy, SERS)具有显著优势。一方面, 该结构可有效规避染料敏化技术在 980 nm 波长激发下存在的信号衰减快、无法长期稳定工作的突出缺陷[9]。另一方面, 能够有效克服纳米天线阵列与 SERS 技术在近红外波段普遍存在的热点分布不均、增强稳定性差的固有劣势, 为 980 nm 波段近场增强应用提供了更可靠的技术路径[10][11]。

2. 光栅-沟槽超材料结构设计

基于超材料与上转换材料的复合结构进行结构设计, 如图 1(a)所示, 该结构自上而下依次为, 周期性 Ag 光栅(高度 $h_1 = 65$ nm)、填充 $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+},\text{Yb}^{3+}$ 的 Ag 沟槽(深度 $D = 30$ nm, 高度 $h_2 = 100$ nm, 顶部光栅宽度 $w_1 = 20$ nm, 底部光栅宽度 $w_2 = 30$ nm), 如图 1(b)俯视图所示, 以及二氧化硅(SiO_2)衬底(高度 $h_3 = 660$ nm)。采用 FDTD 进行数值模拟, 在 x 和 y 方向上采用周期性(Periodic)结构, 在 z 方向上应用完美匹配层(PML)边界条件。为了保证计算的准确性, 网格尺寸设置为 2 nm。采用 400~1600 nm 波段的平面波作为入射光源, 沿 z 轴垂直入射, 结构在 x 和 y 方向的周期分别为 $P_x = 700$ nm 和 $P_y = 600$ nm。Ag、 SiO_2 的介电常数依据 Palik [12] 的实验数据进行设置, $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+},\text{Yb}^{3+}$ 材料的性质则根据 Sokolov [13] 的实验数据进行设置。

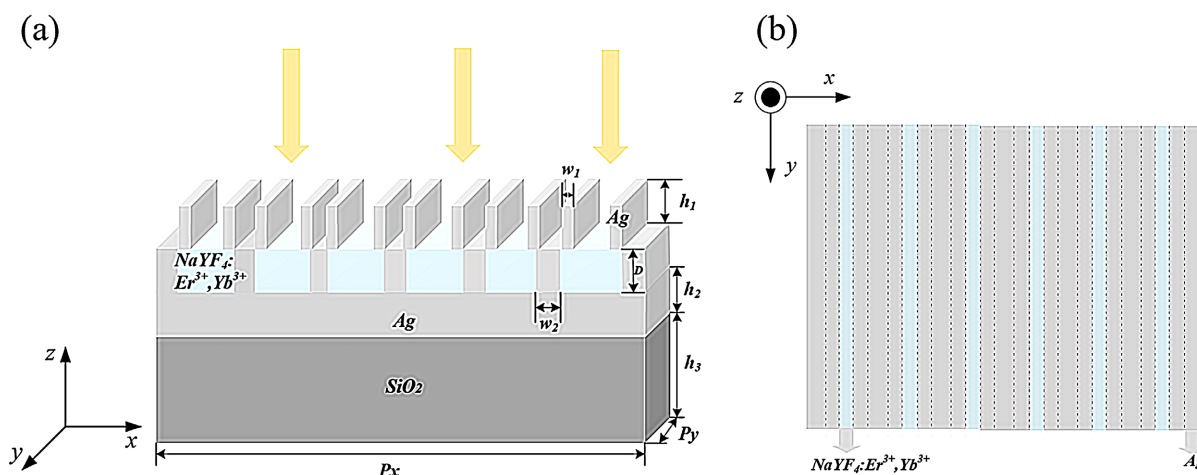


Figure 1. Grating-groove metamaterial: (a) Schematic diagram of the structure; (b) Top view

图 1. 光栅-沟槽超材料: (a) 结构示意图; (b) 俯视图

3. 分析与讨论

对光栅-沟槽超材料结构进行模拟分析, 所得吸收光谱如图 2 所示。吸收光谱中呈现三个明显的吸收峰, 分别位于 440 nm、800 nm 和 980 nm 处, 标记为 Peak1、Peak2 和 Peak3, 其对应吸收率依次高达 98.6%、63%和 99%。该复合结构呈现的多峰共振光学响应特性, 可有效覆盖 $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+},\text{Yb}^{3+}$ 的主要特征

吸收波段,既能通过 440 nm 可见光波段的高效吸收匹配上转换发光需求,又可借助 980 nm 近红外波段的高吸收率适配实际应用中的泵浦光源,同时利用 800 nm 波段填补了中间光谱区域起到衔接作用。因此,三个波段的协同作用可以使复合结构在宽光谱范围内具备高效的光捕获与吸收能力。这一特性不仅有助于增强 UCNPs 对入射光的俘获与利用效率,从而提升其上转换发光性能,也为后续器件的结构优化与性能调控提供了光学模拟层面的参考依据。

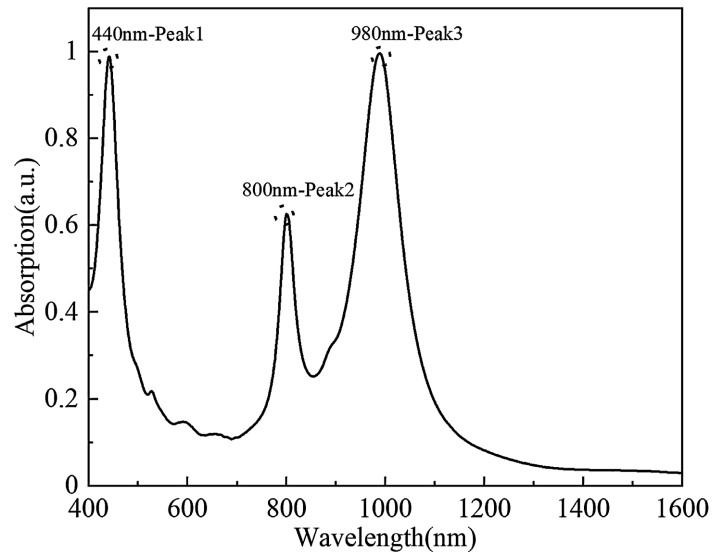


Figure 2. Absorption spectrum curve of grating-groove metamaterial structure
图 2. 光栅 - 沟槽超材料结构吸收光谱曲线

为探究三个共振峰对应的主导机制,对结构在共振波长下的 xy 面电场分布进行分析,如图 3 所示。明显看出,在上转换发射波段 440 nm 处结构激发了强烈的 LSPR,形成周期排列的高场强热点。在共振波长 800 nm 处电场呈现边缘强场、中心暗区的驻波腔模式。在上转换激发波段 980 nm 处电场仍旧呈现周期性条纹分布。通过对比不同波长下的电场行为可以看出,440 nm 与 980 nm 波长处的共振模式在空间分布和形态特征上高度一致,反映出该结构在不同波段具有一致的共振行为与良好的模式稳定性。结合电场分布的高度局域性,可进一步确认其中存在显著的 LSPR 机制。但是在 800 nm 波长处,电场分布呈现出与其他波段不同的特征。这种现象暗示在该波段下,存在表面等离激元(Surface Plasmon Polariton, SPP)与 LSPR 的耦合[14]。这种 440 nm 与 980 nm 双共振特性可实现上转换激发 - 发射双通道协同增强,而 800 nm 暗腔模式提供了额外的光谱调控自由度,为设计高效上转换 - 等离激元耦合体系提供了结构基础。上述结果表明,该结构通过不同共振模式的协同调控,实现了 VIS-NIR 波段的宽光谱高效光捕获与

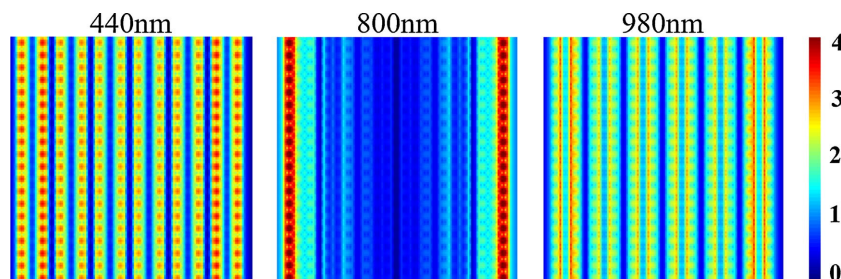


Figure 3. Distribution map of electric field in the xy plane under different resonance wavelengths
图 3. 不同共振波长下 xy 平面电场分布图

局域场增强。

由于周期性结构引入的倒格矢 G (见公式(1), 其中 p 为结构周期, $n = \pm 1, \pm 2 \dots$ 为衍射级次) 提供了 SPP 的波矢 k_{spp} 所需的额外准动量, 使得公式(2)的动量匹配条件得以满足, 其中 k_0 为自由空间光的波矢, θ 为入射光与表面法线的夹角。

$$G = \frac{2\pi}{P} \cdot n \quad (1)$$

$$k_{spp} = k_0 \sin \theta + nG \quad (2)$$

所以, SPP 对纳米结构的周期具有较强依赖性, 而吸收光谱作为反映结构光与物质相互作用的重要表征, 其变化可进一步揭示周期参数对结构共振模式的调控机制。因此, 接下来系统研究 x 方向周期 P_x 对复合超材料结构吸收光谱的影响。选取 $P_x = 700 \text{ nm}$ 、 480 nm 和 260 nm 三种周期进行对比, 对应吸收光谱如图 4 所示。所有光谱中均存在三个明显的吸收峰, 分别标记为 Peak1、Peak2 和 Peak3。随着周期 P_x 减小, Peak1 与 Peak3 在周期变化中保持相对稳定, 其峰值位置和共振强度未出现明显的偏移或波动, 表明二者对周期变化不敏感。由于 LSPR 作为非传播模式无定义波矢, 所以周期变化对 LSPR 的影响较弱。这一现象表明, Peak1 与 Peak3 所对应的共振机制主要依托于 LSPR 效应, 与整体周期结构的关联较弱[15]。相比之下, Peak2 的行为较为复杂。根据公式(3)相位匹配条件(k_{res} 为共振波矢, m 为衍射级次),

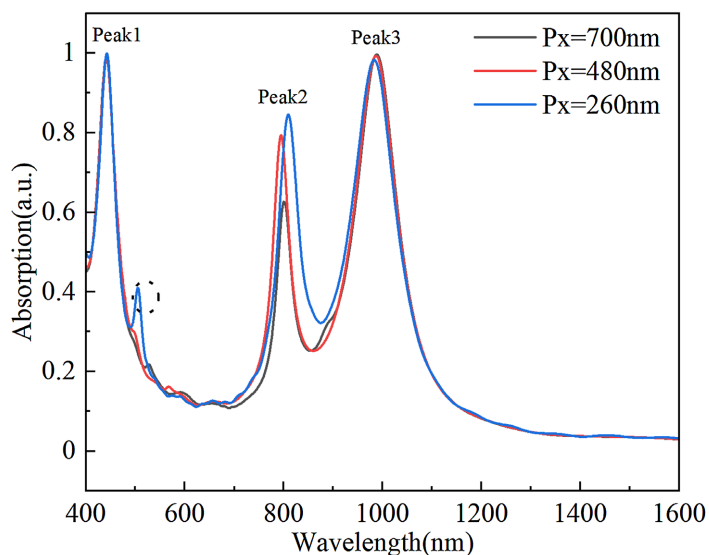


Figure 4. Absorption spectrum variation curves of different P_x structures
图 4. 不同 P_x 结构的吸收光谱变化曲线

$$k_{res} = m \times \frac{2\pi}{P_x} \quad (3)$$

当周期 P_x 从 700 nm 逐渐减小至 260 nm 时, 由于周期较大时间单元结构之间的近场耦合较弱, 共振波长主要受周期调控, 表现为先发生蓝移, 随着周期进一步减小, 近场耦合效应增强, 共振波长转而红移, 同时吸收峰值上升至最高约 0.85 , 并在结构中激发出一个新的共振模式, 产生额外共振峰, 如图 4 虚线所示, 这一特征说明该结构中存在导模共振(Guided-Mode Resonance, GMR)模式[16]。结合此结构的吸收光谱随着周期 P_x 的变化趋势, 再根据 Peak2 的峰位移动速率低于纯 SPP 色散关系的理论预测值, 见公式(4) (ϵ_d 为介质环境的相对介电常数, ϵ_m 为金属介电常数),

$$\frac{d\lambda_{spp}}{dp_x} = \sqrt{\frac{\varepsilon d \varepsilon m}{\varepsilon d + \varepsilon m}} \quad (4)$$

表明该共振波长下的共振模式并非纯 SPP 激发, 而是来自于周期调制的倒格矢 G 提供的准动量补偿机制下的传播 SPP 与局域 LSP 的杂化。深入验证上述共振机制, 改变不同入射角(-60° 至 60°)对周期 $P_x = 260$ nm 结构进行吸收色散图分析。如图 5 所示, 可以明确看到, 400~700 nm 可见光波段的强色散亮带为 SPP-LSP 耦合模式, 随入射角度增大呈显著蓝移, 宽角度内保持高吸收。700~1600 nm 近红外波段的多组分立弱色散亮带为 GMR 模式, 共振波长随角度变化偏移极小。因此, Peak2 主要受 GMR 模式与 SPP-LSP 耦合共振模式所主导。

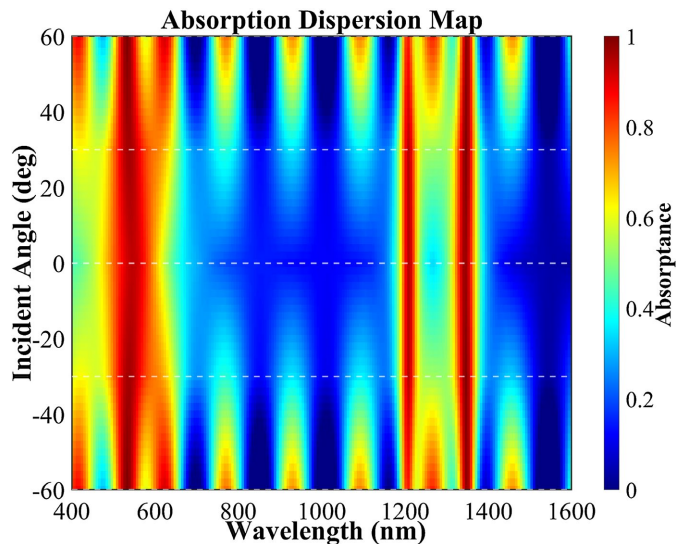


Figure 5. Absorption dispersion diagram of the structure with period $P_x = 260$ nm under different incident angles
图 5. 不同入射角下周期 $P_x = 260$ nm 结构吸收色散图

为了进一步梳理不同共振模式背后的物理本质, 明确各共振峰对应的共振机制差异, 下面观察结构在不同周期参数 P_x 调控下各个特征波长所对应的 xz 平面电场分布特征。如图 6 电场分布图显示, 在 Peak1 对应的波长处, 电场主要集中于上层光栅的结构间隙中, 随着波长减小, 电场逐渐向结构两侧扩散。对于 Peak2, 电场在结构的间隙与边缘处呈现显著的局域增强, 且随着周期 P_x 减小, 该局域增强效应更为明显, 这一变化与其吸收率在该谱段的上升趋势直接对应, 说明其共振强度可通过结构周期进行有效调控。而在 Peak3 对应的共振波长下, 电场则被高度压缩于 UCNPs 内部。同时, 随着周期 P_x 减小, Peak3 对应的电场在结构间隙和边缘处的局域增强效应愈发显著, 这也与其在相应波长附近吸收率的上升趋势相一致。这一特征与 Peak1、Peak2 的电场分布形成了鲜明对比, 也直接印证了其共振机制的独特性。与此同时, 随着周期 P_x 的减小, Peak2 对应的电场在结构间隙和边缘处的局域增强效应变得愈发显著, 电场强度呈现出明显的上升趋势。这一现象与上述观察到的 Peak2 在对应波长区间内吸收率持续上升的变化趋势完全吻合, 进一步从电场分布的角度印证了该共振模式的物理机制, 也为后续深入探究共振增强效应的调控方法提供了直接的实验依据。

接下来尝试对结构进行优化, 由于周期性介质光栅的共振波长 λ 满足公式(5) (n_{eff} 是有效介质折射率, m 为衍射级次),

$$\lambda \approx n_{eff} \times \frac{P_x}{m} \quad (5)$$

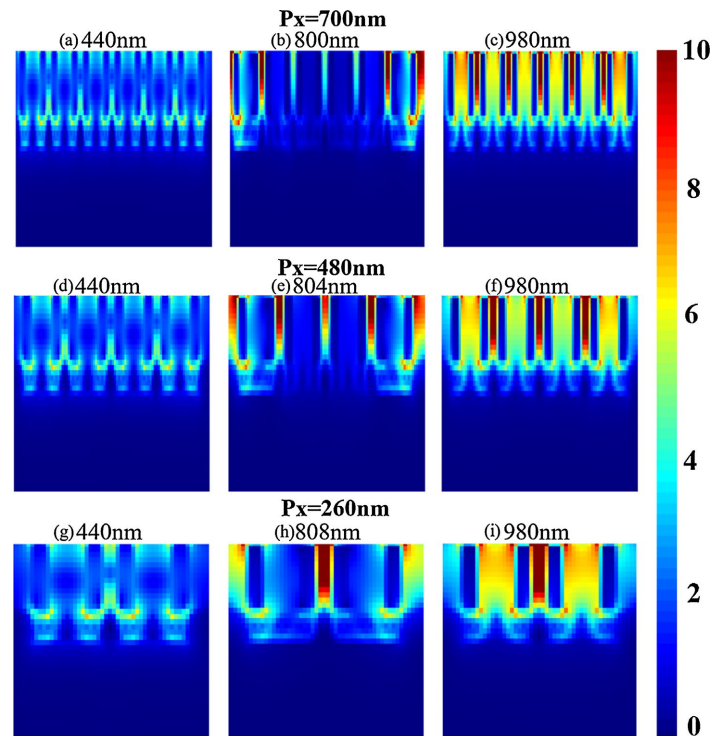


Figure 6. Electric field distribution in the xz plane of different P_x periodic structures at the resonant wavelength
图 6. 不同 P_x 周期结构在共振波长下 xz 平面电场分布

所以通过模式展开法(Mode Expansion Method, MEM)对该结构进行模拟, 得到 $n_{eff} = 2.47$, 表明此时大部分能量分布于 NaYF_4 中, 少部分耦合至金属表面[17][18]。该结果也提示了进一步的优化方向, 通过调整 NaYF_4 层厚度或 Ag 层结构参数, 可使 n_{eff} 更接近上转换材料的发光波长, 从而实现更强的共振增强[19]。因此, 下面通过改变上层光栅的厚度 h_1 来探究结构吸收光谱对结构参数的依赖性。图 7(a)展示了上层金属纳米结构厚度 h_1 变化时结构的吸收光谱变化趋势, 可以看出光谱曲线中始终存在三个吸收峰且随着 h_1 减小均发生蓝移。产生这一现象的原因是, 由于光栅结构对光场的限制作用随厚度减小而减弱, 导致光场能量部分泄露, 因此共振峰位置随厚度减小呈现蓝移趋势。具体来说, Peak1 由低阶共振模式主导, 光栅厚度对其影响较小, 所以峰值变化不明显。而 Peak2 与 Peak3 主要由高阶共振模式主导, 光栅厚度的变化会影响光与结构高阶模式的耦合效率, 因此这两个峰的峰值变化较为显著[20]。此外, 由于高阶模式限制能力的减弱, 结构在短波区域激发了新的弱共振峰。结构增加 Ag 光栅厚度的同时, 也增大了形成间隙模式的两个侧壁的高度, 从而延长了光在 z 方向的路径长度[21]。同样, 当结构中的 Ag 层厚度减小时(图 7(b)), 对于主导 Peak1 和 Peak3 的共振模式, Ag 层主要起光场限制作用, 因此厚度减小过程中峰位保持稳定, 但光场束缚能力下降导致能量泄露, 使得吸收峰值降低[22][23]。而 Ag 层厚度对主导 Peak2 的共振模式影响很小, 因此其峰位与峰值均基本保持不变。在 980 nm 共振波长下, 对比 TE 与 TM 偏振下的 xz 截面电场分布, 如图 8(a)所示, 在 TE 偏振下, 电场能量仅局域于结构顶部界面, 呈均匀层状分布, 光栅间隙内无显著场增强, 未激发间隙等离子体共振(Gap Plasmon Resonance, GPR)。相比之下, 图 8(b)中 TM 偏振下, 电场强度较 TE 偏振增强高, 且强场区高度局域于纳米结构间隙内部, 形成与结构几何吻合的垂直条状分布。这一显著的偏振依赖性强场局域化是 GPR 模式存在的特征。同样在其他两个共振波长下结构的偏振图像均表现以上特征, 上述结果说明, 在三个强共振波长处均存 GPR。因此, 可以确定, Peak1 由 LSPR 和 GPR 共同主导产生, Peak2 由 SPP、LSPR、GPR 以及 GMR 共同提供, Peak3 则

由 LSPR 与 GPR 共同主导产生。

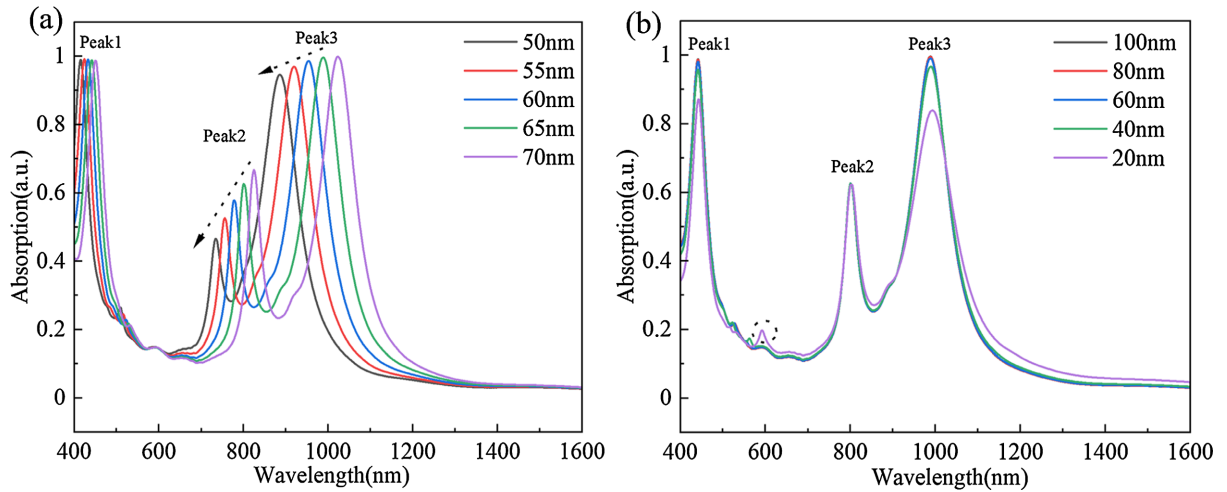


Figure 7. Grating-groove metamaterial structure: (a) Absorption spectrum changes when the thickness of the upper grating h_1 is altered; (b) Absorption spectrum changes when the thickness of the silver layer h_2 is altered

图 7. 光栅 - 沟槽超材料结构: (a) 改变上层光栅厚度 h_1 吸收光谱变化; (b) 改变银层厚度 h_2 吸收光谱变化

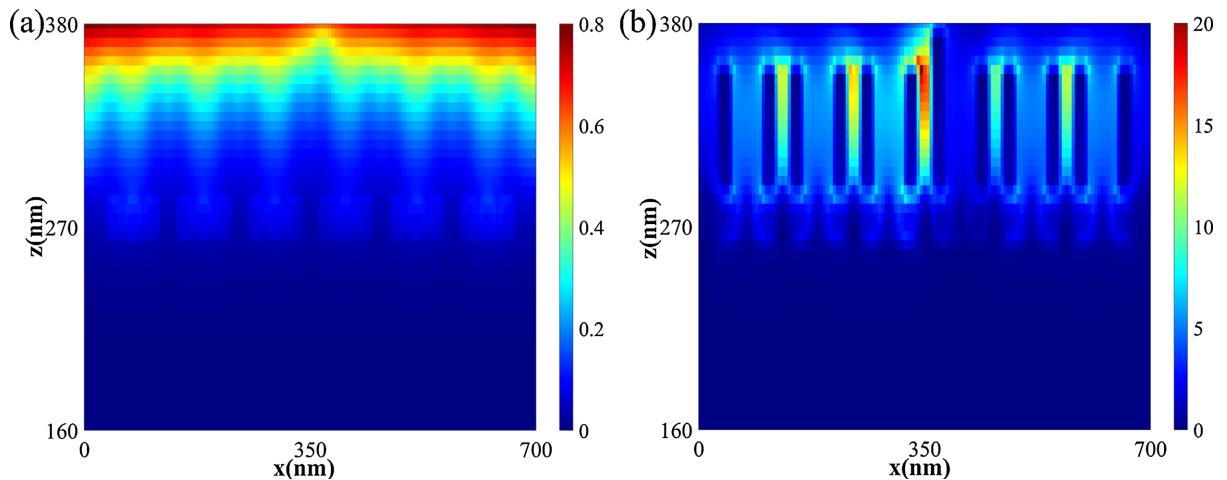


Figure 8. xz -plane electric field distribution of the $P_x = 700$ nm structure at 980 nm resonant wavelength: (a) TE polarization; (b) TM polarization

图 8. $P_x = 700$ nm 结构在 980 nm 共振波长处 xz 面电场分布: (a) TE 偏振; (b) TM 偏振

以上结果表明了结构参数对该超材料复合结构近场增强效应的调控规律, 即该结构的近场增强效果主要由顶层银光栅的几何参数尤其是周期参数主导。其中, 顶层银光栅的几何参数直接决定了表面等离子体共振模式的激发效率与波矢匹配情况, 而底层银层在整个结构中仅起到辅助反射的作用, 其主要功能是将入射到结构内部的光反射回介质层及顶层银光栅区域, 减少光能量的损耗, 间接保障近场增强效应的实现, 但由于其不直接参与表面等离子体模式的激发与耦合过程, 因此其厚度的改变并不会对近场增强因子产生显著影响。所以, 对于上述三共振结构, 可通过分别调节结构周期、光栅厚度和 Ag 层厚度, 实现对 Peak1、Peak2 和 Peak3 的独立调控, 从而针对目标光学性能进行定向结构设计。

由于近场增强因子 ($|E_1/E_0|^4$) 是体现超材料结构近场增强性能的核心数据, 下面针对 $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ 上转换纳米颗粒的激发响应特性, 重点考察其在 980 nm 波段的近场特性。在保持其他几何参数不变的前

提下, 系统地模拟了 x 方向不同周期 P_x 结构对近场增强因子的影响, 如图 9 所示, 该超材料复合结构在 $P_x = 480 \text{ nm}$ 周期下获得最大的近场增强效应, 近场增强因子达到峰值。此时结构波矢匹配效率最高、模式耦合最充分。而当 x 方向周期大于或者小于 480 nm 时, 周期参数的偏离会导致波矢匹配条件被破坏, 同时入射光与结构表面等离激元模式的耦合作用出现失配, 两者共同作用使得结构在 980 nm 共振波长处的局域电磁场增强能力显著降低, 最终表现为近场增强因子的减小。

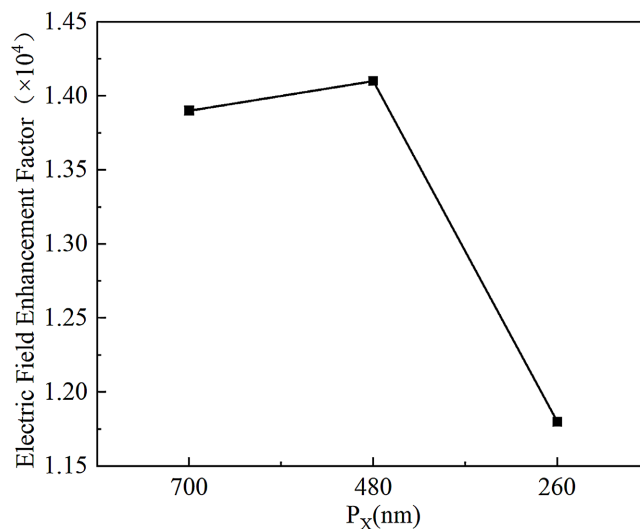


Figure 9. Near-field enhancement factor of the grating-groove metamaterial structure under different P_x periods at the 980 nm resonance wavelength

图 9. 不同 P_x 周期下光栅 - 沟槽超材料结构在 980 nm 共振波长下的近场增强因子

接下来根据研究所得到的调控规律, 针对 UCNP 常见的 980 nm 、 1550 nm 响应波段, 将结构的吸收共振峰调节至响应波段并对比近场增强效果。首先将 $P_x = 700 \text{ nm}$ 、 480 nm 、 260 nm 结构中的上层银光栅厚度由 65 nm 增加至 140 nm 、 143 nm 、 145 nm 使 Peak3 由 980 nm 左右共振峰协调至 1550 nm , 得到的近场增强因子如图 10(a)所示, 1550 nm 共振波长下的近场增强因子随着周期 P_x 的减小呈现先升后降的趋势。当 $P_x = 480 \text{ nm}$ 时, 周期引入的倒格矢 G 与 GPR 模式的准动量实现最优匹配, 此时光栅 - 沟槽超材料复合结构支持 1550 nm 波长下的高阶驻波共振, 入射光与 GPR 模式的耦合效率达到峰值, 从而最大化局域电磁场能量压缩与近场增强效应。当周期 P_x 增大或减小时波矢匹配条件被破坏, 使结构在 1550 nm 波段的近场增强效应减弱。因此, 在此光栅 - 沟槽超材料复合结构中实现 1550 nm 波段的最优近场增强需要周期 P_x 与上层光栅厚度 h_1 的协同设计。

然后继续在不同周期结构中改变上层银光栅厚度, 分别将 $P_x = 700 \text{ nm}$ 、 480 nm 、 260 nm 结构中的上层银光栅厚度 h_1 由 65 nm 增加至 100 nm 、 98 nm 、 95 nm 使 Peak2 由 800 nm 左右共振峰调至 980 nm , 得到结构在 980 nm 共振波长的近场增强因子如图 10(b)所示, 可见 $P_x = 700 \text{ nm}$ 时, 结构呈现最佳近场增强效应, 增强因子可达 6.6×10^6 , 因此保持其他结构参数设置不变, 将 h_1 增加至 100 nm 会得到一个近场性能较好的光栅 - 沟槽超材料结构。相比于 1550 nm 共振, 980 nm 共振对应光栅 - 沟槽超材料复合结构中的低阶 GPR 模式, 需满足长周期布拉格匹配即周期与共振波长相近, 以此获得最优近场增强效果。以上研究结果既证明了上层银光栅厚度是实现共振波长连续红移的有效调控手段, 也说明了光栅周期是决定近场增强效果的核心要素。可见当周期满足目标波长的波矢匹配条件时再结合上层银光栅厚度的精准调控, 才能得到较好的电场增强效果, 进一步体现了周期与结构参数对于共振波长与近场增强效果的动态调控。

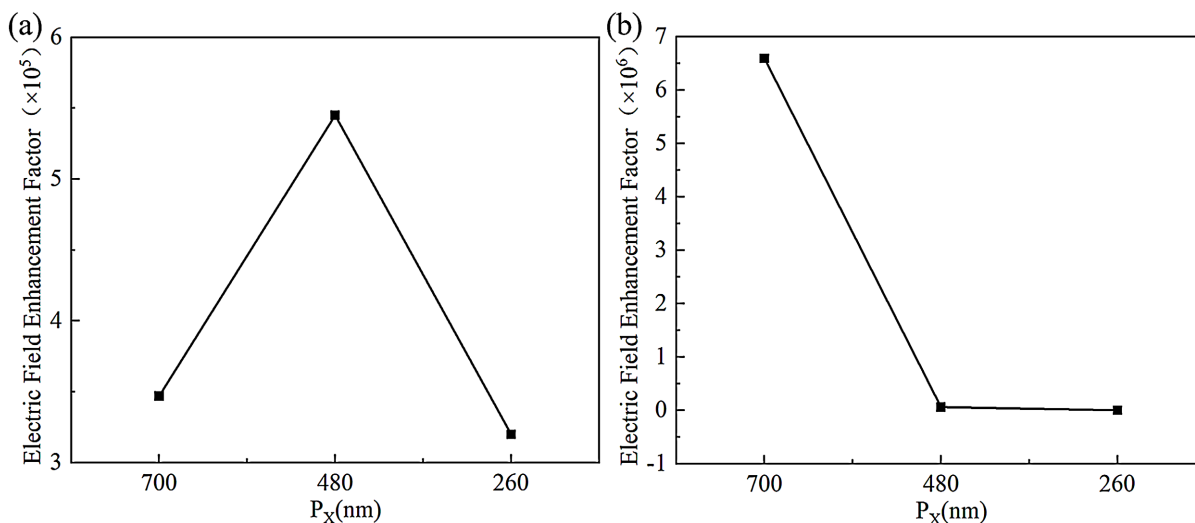


Figure 10. Near-field enhancement factors of the grating-groove metamaterial structure with different P_x periods for varying thickness of the upper silver grating: (a) At 1550 nm resonance wavelength; (b) At 980 nm resonance wavelength

图 10. 改变上层银光栅厚度不同 P_x 周期下光栅 - 沟槽超材料结构的近场增强因子: (a) 1550 nm 共振波长; (b) 980 nm 共振波长

上述光栅 - 沟槽超材料结构可采用光刻工艺制备[24], 首先在 SiO_2 衬底上沉积银层, 之后通过旋涂、溅射等常用方式制备上转换发光层, 最后借助电子束光刻、纳米压印等技术完成光栅图案化。该结构的制造过程中存在纳米尺度多层异质集成、制备精度控制以及上转换层低温高质量制备与 Ag 结构低损耗加工之间的矛盾, 后续可通过引入低温工艺以及高精度制备技术, 实现有效解决。

4. 结论

本研究设计了一种多波段共振覆盖 VIS-NIR 波段范围的光栅 - 沟槽超材料复合结构。首先通过分析电场分布特性以及结构参数调控, 明确了结构内主导共振峰的共振模式与结构参数、结构周期 P_x 对于吸收光谱、近场增强性能的影响规律。随后, 结合模拟分析结果, 进行结构周期 P_x 与上层银光栅的厚度 h_1 的协同优化, 结果表明, 将结构周期 P_x 设置为 700 nm、上层银厚度调整至 100 nm 时, 可使共振峰精确对准 980 nm 波长, 并获得 6.6×10^6 的最佳近场增强因子。基于此优化结构, 当采用 980 nm 光入射时, 借助 $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ 中 Yb^{3+} 的敏化作用与 Er^{3+} 发光中心的协同配合, 同时受益于结构在 980 nm 处的共振增强效应, 激发光场被显著局域与放大, 将实现 541 nm 波段的高效上转换发光[25]。除此之外, 该超材料复合结构所具有的多峰协同响应、光学稳定性高与结构集成度好等突出优势, 在为多功能微纳光子器件的设计提供了新方案的同时, 也为实现高性能、小型化的光电系统开辟了切实可行的技术途径[26]-[28]。

基金项目

本论文得到了以下项目的资助: 吉林省科技发展计划项目(编号: 20240301004GX)“手机用高性能光谱芯片研制”。

参考文献

- [1] Zheng, W., Chen, H., Hou, X., Abakirova, A., Han, M., Feng, Y., *et al.* (2025) Research Trends and Hotspots of Upconversion Nanoparticles for Drug Delivery and Biomedical Targeting in Photodynamic Therapy. *Discover Nano*, **20**, Article No. 285. <https://doi.org/10.1186/s11671-025-04402-8>
- [2] Eraky, M.S., Elsherif, S.S. and Sanad, M.M.S. (2025) Recent Trends in Upconversion Luminescent Inorganic Materials

- and Nanomaterials for Enhanced Photovoltaic Solar Cell and Biological Applications. *Journal of Fluorescence*, **35**, 9205-9229. <https://doi.org/10.1007/s10895-025-04198-x>
- [3] Xin, Y., Wang, J., Jia, R., Dun, C. and Zhang, Z. (2025) Synergistic Structural Engineering and Electronic Modulation Enhance Upconversion Emission and Charge Separation in $\text{LiYF}_4:\text{Yb}^{3+}, \text{Tm}^{3+}/\text{LiYF}_4:\text{Nd}^{3+}/\text{Li}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}_2$ Core-Shell Nanostructure for Efficient Near-Infrared Photocatalysis. *Chemical Engineering Journal*, **506**, Article 160087. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2025.160087>
- [4] Li, J., Xie, Y., Sun, R., Zhou, J. and Sun, L. (2023) Exploring Luminescence Quenching on Lanthanide-Doped Nanoparticles through Changing the Spatial Distribution of Sensitizer and Activator. *Nano Research*, **17**, 4517-4524. <https://doi.org/10.1007/s12274-023-6319-1>
- [5] Clarke, C., Liu, D., Wang, F., Liu, Y., Chen, C., Ton-That, C., *et al.* (2018) Large-Scale Dewetting Assembly of Gold Nanoparticles for Plasmonic Enhanced Upconversion Nanoparticles. *Nanoscale*, **10**, 6270-6276. <https://doi.org/10.1039/c7nr08979a>
- [6] Liu, T., Liu, X., Feng, Y. and Yao, C. (2023) Advances in Plasmonic Enhanced Luminescence of Upconversion Nanoparticles. *Materials Today Chemistry*, **34**, Article 101788. <https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2023.101788>
- [7] Fathnan, A.A. and Powell, D.A. (2021) Beyond the Limits of Single Resonance Huygens' Metasurfaces. 2021 XXXIVth General Assembly and Scientific Symposium of the International Union of Radio Science (URSI GASS), Rome, 28 August 2021-4 September 2021, 1-4. <https://doi.org/10.23919/ursigass51995.2021.9560500>
- [8] Su, J., Liu, D., Sun, L., Chen, G., Ma, C., Zhang, Q., *et al.* (2022) Plasmonic Nanostructures for Broadband Solar Absorption Based on Synergistic Effect of Multiple Absorption Mechanisms. *Nanomaterials*, **12**, Article 4456. <https://doi.org/10.3390/nano12244456>
- [9] Liu, S., Ding, N., Wu, Y., Zi, L., Wang, Y., Hu, J., *et al.* (2022) Narrowband Near-Infrared Photodetectors Based on Perovskite Waveguide Devices. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **13**, 6057-6063. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.2c01301>
- [10] Zhou, X., Liu, S., Xiang, H., Li, X., Wang, C., Wu, Y., *et al.* (2025) Three-Dimensional SERS Substrates: Architectures, Hot Spot Engineering, and Biosensing Applications. *Biosensors*, **15**, Article 555. <https://doi.org/10.3390/bios15090555>
- [11] Lin, L.L., Alvarez-Puebla, R., Liz-Marzán, L.M., Trau, M., Wang, J., Fabris, L., *et al.* (2025) Surface-Enhanced Raman Spectroscopy for Biomedical Applications: Recent Advances and Future Challenges. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **17**, 16287-16379. <https://doi.org/10.1021/acsami.4c17502>
- [12] Palik, E. (1998) Handbook of Optical Constants of Solids. Academic Press.
- [13] Sokolov, V.I., Zvyagin, A.V., Igumnov, S.M., Molchanova, S.I., Nazarov, M.M., Nechaev, A.V., *et al.* (2015) Determination of the Refractive Index of $\beta\text{-NaYF}_4/\text{Yb}^{3+}/\text{Er}^{3+}/\text{Tm}^{3+}$ Nanocrystals Using Spectroscopic Refractometry. *Optics and Spectroscopy*, **118**, 609-613. <https://doi.org/10.1134/s0030400x15040190>
- [14] Dong, J., Gao, W., Han, Q., Wang, Y., Qi, J., Yan, X., *et al.* (2019) Plasmon-Enhanced Upconversion Photoluminescence: Mechanism and Application. *Reviews in Physics*, **4**, Article 100026. <https://doi.org/10.1016/j.revip.2018.100026>
- [15] Lee, T., Jang, J., Jeong, H. and Rho, J. (2018) Plasmonic- and Dielectric-Based Structural Coloring: From Fundamentals to Practical Applications. *Nano Convergence*, **5**, Article No. 1. <https://doi.org/10.1186/s40580-017-0133-y>
- [16] López-Tejiera, F., Rodrigo, S.G., Martín-Moreno, L., García-Vidal, F.J., Devaux, E., Ebbesen, T.W., *et al.* (2007) Efficient Unidirectional Nanoslit Couplers for Surface Plasmons. *Nature Physics*, **3**, 324-328. <https://doi.org/10.1038/nphys584>
- [17] Liu, V. and Fan, S. (2012) S4: A Free Electromagnetic Solver for Layered Periodic Structures. *Computer Physics Communications*, **183**, 2233-2244. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.04.026>
- [18] Zou, C., Sautter, J., Setzpfandt, F. and Staude, I. (2019) Resonant Dielectric Metasurfaces: Active Tuning and Nonlinear Effects. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **52**, Article 373002. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab25ff>
- [19] Zhou, Z., Li, J., Su, R., Yao, B., Fang, H., Li, K., *et al.* (2017) Efficient Silicon Metasurfaces for Visible Light. *ACS Photonics*, **4**, 544-551. <https://doi.org/10.1021/acsphotonics.6b00740>
- [20] Koshelev, K., Tonkaev, P. and Kivshar, Y. (2023) Nonlinear Chiral Metaphotonics: A Perspective. *Advanced Photonics*, **5**, Article 064001. <https://doi.org/10.1117/1.ap.5.6.064001>
- [21] Yue, S., Li, Z., Chen, J. and Gong, Q. (2012) Deep Subwavelength Confinement and Giant Enhancement of Light Field by a Plasmonic Lens Integrated with a Metal-Insulator-Metal Vertical Nanocavity. *Optics Express*, **20**, Article 19060. <https://doi.org/10.1364/oe.20.019060>
- [22] Hlubina, P., Urbancova, P., Pudis, D., Goraus, M., Jandura, D. and Ciprian, D. (2019) Ultrahigh-Sensitive Plasmonic Sensing of Gas Using a Two-Dimensional Dielectric Grating. *Optics Letters*, **44**, 5602-5605. <https://doi.org/10.1364/ol.44.005602>
- [23] Chen, B., Pathak, A., Gangopadhyay, K., Cornish, P.V. and Gangopadhyay, S. (2015) Single-Molecule Detection in

Nanogap-Embedded Plasmonic Gratings. *Nanobiomedicine*, **2**, Article No. 8.

- [24] Yang, Y., Jeon, Y., Dong, Z., Yang, J.K.W., Haddadi Moghaddam, M., Kim, D., *et al.* (2025) Nanofabrication for Nanophotonics. *ACS Nano*, **19**, 12491-12605. <https://doi.org/10.1021/acsnano.4c10964>
- [25] Lu, Y., Zhou, Y., Cheng, D., Li, M., Xu, Y., Xu, J., *et al.* (2023) Quasi-TPPs/Fano Resonance Systems Based on an MDM Waveguide Structure and Its Sensing Application. *Applied Optics*, **62**, 8741-8748. <https://doi.org/10.1364/ao.506123>
- [26] Zhang, L., Zheng, Y., Zhang, J., Yin, Y., Li, Q., Lei, J., *et al.* (2021) Tunable Polarization-Sensitive, Long-Wave Infrared MDM Subwavelength Grating Structure with Wide-Angle, Narrow-Band, and High Absorption. *Optics Express*, **29**, 21473-21491. <https://doi.org/10.1364/oe.428427>
- [27] Liu, M., Zhong, G., Yin, Y., Miao, J., Li, K., Wang, C., *et al.* (2017) Aluminum-Doped Cesium Lead Bromide Perovskite Nanocrystals with Stable Blue Photoluminescence Used for Display Backlight. *Advanced Science*, **4**, Article 1700335. <https://doi.org/10.1002/adv.201700335>
- [28] Wang, L., Sang, T., Gao, J., Yin, X. and Qi, H. (2018) High-Performance Sensor Achieved by Hybrid Guide-Mode Resonance/Surface Plasmon Resonance Platform. *Applied Optics*, **57**, Article 7338. <https://doi.org/10.1364/ao.57.007338>