偏振无关的自杂化强耦合：由布里渊区折叠诱导的连续体中的准束缚态块体 WS_2 超表面

Xiongwei Guo、Fu Liu、Jinhai Si、Xun Hou、Kuidong Wang*

教育部物理电子与器件重点实验室和陕西省信息光子技术重点实验室，电子科学与工程学院，西安交通大学，中国西安 *710049*

*通讯作者：wangkuidong@xjtu.edu.cn

关键词：BZF-QBIC 模式， 偏振无关，块体 WS_2, 强耦合

摘要

支持光学模式的高折射率介电超表面，是与过渡金属二硫族化合物（TMDC）材料实现强耦合的理想候选者。然而，由于光学模式具有偏振依赖性，在此类耦合系统中，通常必须采用特定偏振的光照，才能估算最大耦合强度。在此，我们提出一种自杂化强耦合，使布里渊区折叠诱导的连续体中的准束缚态（BZF-QBIC）模式与同一块体 WS_2 超表面中的*A*激子发生耦合。通过改变块体 WS_2 超表面的厚度，我们观察到典型的反交叉行为，拉比劈裂为 165.9毫电子伏特。当入射光的偏振从线偏振变为圆偏振时，这种拉比劈裂保持不变，证明了该自杂化强耦合不依赖于偏振。 本研究为在块体 TMDC 超表面中实现稳健的偏振无关极化激元提供了一种新方法，也为拓展任意偏振下极化激元器件的应用带来了新的思路。

1. 引言

TMDC 激子与光学腔中光子的强耦合，已成为探索低维材料新物理特性的重要平台，其中包括玻色–爱因斯坦凝聚[1,2], 超流性、[3] 谷偏振极化激元[4,5], ，同时也为极化激元激光器[6,7],极化激元光电二极管[8,9] 和开关[10,11]等应用铺平了道路。当激子与光子之间的能量交换速率超过各自的耗散率时，这些强耦合系统可通过拉比劈裂形成两个极化激元分支，即上、下激子-极化激元。由于强光–物质耦合要求激子具有较大的振子强度，并且需要高品质（高Q）的光学模式[12,13], , TMDC 因其较大的束缚能[14,15] 和较大的振子强度[16,17]，被认为是实现强耦合的理想范德华材料之一。对于高Q光学模式，通常采用法布里–珀罗（F–P）腔[18,19] 和等离激元纳米结构[20,21] 将光限制在较小的模式体积内，从而产生高强度的局域电磁场，并实现与 TMDC 材料的强耦合。然而，传统的高Q法布里–珀罗腔通常占据较大的面积（横向尺寸达英寸级），而等离激元结构在可见光波长下存在较强的本征欧姆损耗；这两者都阻碍了这些由 TMDC 支持的强耦合系统在芯片级极化激元器件中的应用。

支持高 Q 光学共振的高折射率介电超表面，为实现基于 TMDC 的强耦合提供了高效且占用空间小的方案[22-25]。这类介电超表面通常与现有的金属—氧化物—半导体技术兼容[26,27] ，并且具有固有的低光学损耗。作为介电超表面支持的典型高 Q 光学模式，光子连续谱准束缚态（QBIC）模式因其显著的局域场增强和灵活的模式可调性[33]，在强耦合研究中尤为引人关注[28-32]。这种 QBIC 模式源于多个基本米氏共振之间的模式耦合与相消干涉，从而抑制了

辐射损耗[34]。然而，现有 QBIC 模式高度依赖于所设计结构的几何对称性破缺，因此呈现出偏振选择性光学性质。因此，TMDC 中基于 QBIC 的强耦合取决于偏振方向，这极大地限制了在低维材料中实现适用于任意偏振的低损耗极化激元器件。

在本研究中，我们提出了块体 WS_2 超表面中的偏振无关自杂化强耦合。这种耦合源于 WS_2 的*A* 激子与结构自身 WS_2 所诱导的偏振无关布里渊区折叠准连续域束缚态（BZF-QBIC）模式之间的相互作用。与介电超表面中传统的偏振依赖光学模式相比，我们设计的C_{4v}对称块体 WS_2 超表面具有偏振无关的内禀特性[35,36],，并产生兼具偏振无关光学特性和高品质因数的 BZF-QBIC 模式[37]。通过优化块体 WS_2 超表面的厚度，使 BZF-QBIC 模式的能量与*A* 激子的能量匹配，我们在任意偏振光（例如*x*线偏振、*y*线偏振以及左、右圆偏振）的吸收光谱中，均观察到拉比劈裂能相同（165.9毫电子伏特）的典型反交叉特征，表明 BZF-QBIC 支持的强耦合具有偏振无关特性。本研究为在 TMDC 材料中实现偏振不敏感的强耦合提供了一种有效方法，并为实现具有任意偏振特性的 TMDC 芯片级极化激元器件铺平了道路。

2. 数值模型

图1(a)展示了自杂化系统：图案化的块体 WS_2 放置在 SiO_2 衬底上。选择块体 WS_2 是因为它具有较高的折射率（$n = 4.4$，@λ =620 nm）和较大的振子强度（与 MoS_2, 、$MoSe_2$, 和 WSe_2相比）。块体 WS_2 的介电常数可用洛伦兹振子模型[19]描述。

$$\varepsilon(E) = \varepsilon_B + \frac{f_0 E_{exc}^2}{E_{exc}^2 - E^2 - iE\Gamma_{exc}} \tag{1}$$

其中，$\varepsilon_B = 20$ 、$f_0 = 0.2$、$E_{exc} = 2$ eV 和 $\Gamma_{exc} = 50$ meV 分别表示背景介电常数、振子强度、共振能量和 *A* 激子的全线宽。块体 WS2 超表面的介电常数可视为纯激子模式的介电常数与背景折射率介质纳米腔所支持的光学模式的介电常数之和。通过将振子强度设为 $f_0 = 0$，可以估算光学模式的贡献；而将背景介电常数设为$\varepsilon_B = 1$，则可以分离出纯激子模式的贡献。通过调节块体 WS_2 超表面的几何参数，例如厚度和晶格周期，可以实现这些模式之间的强耦合。有关块体 WS_2 介电常数的更多信息见图S1。在我们的研究中，WS_2 超表面的光学性质基于有限元法（FEM），使用 COMSOL MULTIPHYSICS 进行计算。沿*x*-和*y*-方向施加周期性边界条件，而沿*z*方向使用完美匹配层。

3. 结果与讨论

3.1 偏振无关的BZF-QBIC模式

为展示所提出的支持偏振无关 BZF-QBIC 模式的块体 WS2 超表面，将振子强度 f_0 设为零（仅考虑背景折射率）。在未扰动情况下（图1(a)），超表面由周期排列的方形晶胞组成，周期为 $P_x = P_y = 165$ nm，厚度为 $H = 20$ nm；每个晶胞包含一个半径为 $R = 50$ nm的中心圆孔。这些几何参数经过有意选择，以实现光学模式与A激子共振之间的自杂化强耦合，具体讨论如下。当引入扰动参数 d （四个相邻孔偏离其原始晶胞中心的偏移量）时（图1(b)），

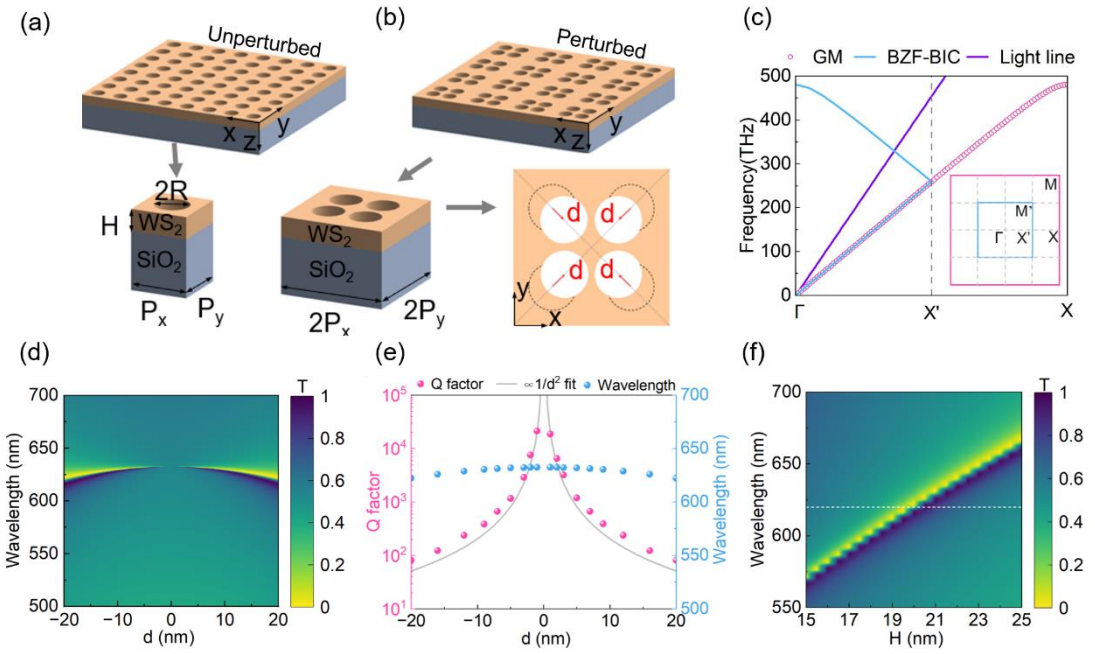


图1 块体 WS_2 超表面中 BZF-QBIC 模式的光学性质。超表面及其对应的晶胞：(a) 未扰动 状态；(b) 受扰动状态，其中扰动参数 d 定义为四个相邻孔偏离其原始晶胞中心的距离。(c) 未扰动（红色空心圆）和受扰动（蓝色实线）情况下的横向磁（TM）能带结构，插图显示了未扰动（红色）和受扰动（蓝色）情况下对应的第一布里渊区。(d) 超表面吸收光谱随扰动参数d的变化。(e) BZF-QBIC 模式的 Q因子和波长随扰动参数d的变化。(f) 超表面吸收光谱随厚度H的变化，白色虚线表示块体 WS_2 中激子的色散（参考文献）。

单个新结构的晶胞由四个圆孔组成。因此，晶胞沿x和y方向的周期性均加倍，同时超表面的第一布里渊区也发生折叠（如图1(c)插图所示）。为展示布里渊区折叠效应，我们计算了这些情况下的横磁（TM）能带结构。如图1(c)所示，在未扰动的情况下，基模位于光线下方，表明该模式为导模（GM）。引入布里渊区折叠效应后，该导模被折叠至光线上方。通过Γ 点处的电磁场分布，可以确认该折叠模式具有准连续域束缚态特征。如图S2所示，电场在 C_2 操作下呈偶对称，而辐射态的电磁矢量在 C_2 操作下呈奇对称，两者对称性不相容，这表明该折叠模式具有准连续域束缚态特征。因此，这种折叠模式称为布里渊区折叠诱导的准连续域束缚态模式。为探究该模式的起源，我们采用多极分解和近场分布方法，提取其主要电磁贡献，即电偶极子（ED，P_α）、磁偶极子（MD，M_α）、电环形偶极子（ETD，$T_\alpha^{(e)}$）、磁环形偶极子（MTD，$T_\alpha^{(m)}$）、电四极子（EQ，$Q_{\alpha\beta}^{(e)}$）和磁四极子（MQ，$Q_{\alpha\beta}^{(m)}$）（补充材料S3）。如图S3(a)所示，BZF-QBIC 模式以 ETD 分量为主，这也与通过近场分析获得的电磁场分布相符（图S3(b)）。与电偶极子模式相比，ETD 模式的电场增强通常局限于孔隙之间，因此，以 ETD 为主的光学模式尤其适合实现强光与物质耦合[38]。

为最大化块体 WS_2 超表面中的自杂化耦合，研究了几何参数对 BZF-QBIC 模式波长和品质因数的影响。如图1(d)所示，在正常入射的x偏振平面波透射光谱中，块体 WS2 超表面的光学模式在扰动条件（$d \neq 0$ nm）下呈现类法诺线形（图S4），而它

在未扰动条件（$d = 0$ nm）下消失。显然，这些模式的线宽随着 d 的增加而增大。为进一步理解扰动参数对 BZF-QBIC 模式的影响，使用 Fano公式[39,40] 拟合透射光谱，以提取这些模式的品质因数（图S4）。随着 d的增加，BZF-QBIC 模式的波长几乎保持不变，而这些模式的品质因数与 d 呈反平方关系（图 1(e)），表明通过调节 d的值，可以获得具有稳定共振波长、用于强耦合的理想高 Q 光学腔。 此外，还通过分析具有不同厚度[2]的 WS H 超表面的透射光谱，研究了 BZF-QBIC 模式的色散行为（固定 d ）。随着 H 的增加，该模式发生红移，而其线宽几乎保持不变（图1(f)）。此外，这些几何参数确保了 BZF-QBIC 模式与 WS_2, 的 A 激子之间的光谱匹配，为后续章节实现自杂化强耦合奠定了基础。

以上结果仅考虑了垂直入射的x偏振光。为将结果推广至任意偏振光照明，如图 2(a) 所示，我们考虑了线偏振光和圆偏振光两种情况。在线偏振辐照情况下，入射光的偏振角 θ 定义为入射光场振荡方向与x轴之间的夹角。我们计算了入射偏振角从 0° 到 90° 时超表面的透射光谱，其中 d 固定为 20 nm（见图 2b 和 S5）。结果清楚地表明，在整个偏振角范围内，光学模式的共振波长和 Q 因子均保持不变。左旋/右旋圆偏振（LCP/RCP）光照明时也呈现出相同的光谱特征（图 2(b)）。超表面这种偏振不敏感透射光谱证实了 BZF-QBIC 模式具有偏振无关特性，这与结构和扰动的$C4v$对称性有关。通过分析其组成部分，也可以证明这种偏振无关性。

BZF-QBIC 模式的多极分解和近场分布。如图 2(c) 所示，无论入射光的偏振态如何（*x*、*y*、左旋圆偏振 和右旋圆偏振），ETD 分量均在 BZF-QBIC 模式中占主导地位。此外，不同偏振辐照下的近场分布保持不变（图 2(d)）。尤其是对于左旋圆偏振和右旋圆偏振光照明，由于二者均由等量的x和y偏振分量构成，但相位差为π，因此可以理解它们具有相同的局域场分布。这表明，采用更一般的椭圆偏振光入射也能激发这些模式；这种光是两个相位固定的正交线偏振分量的叠加

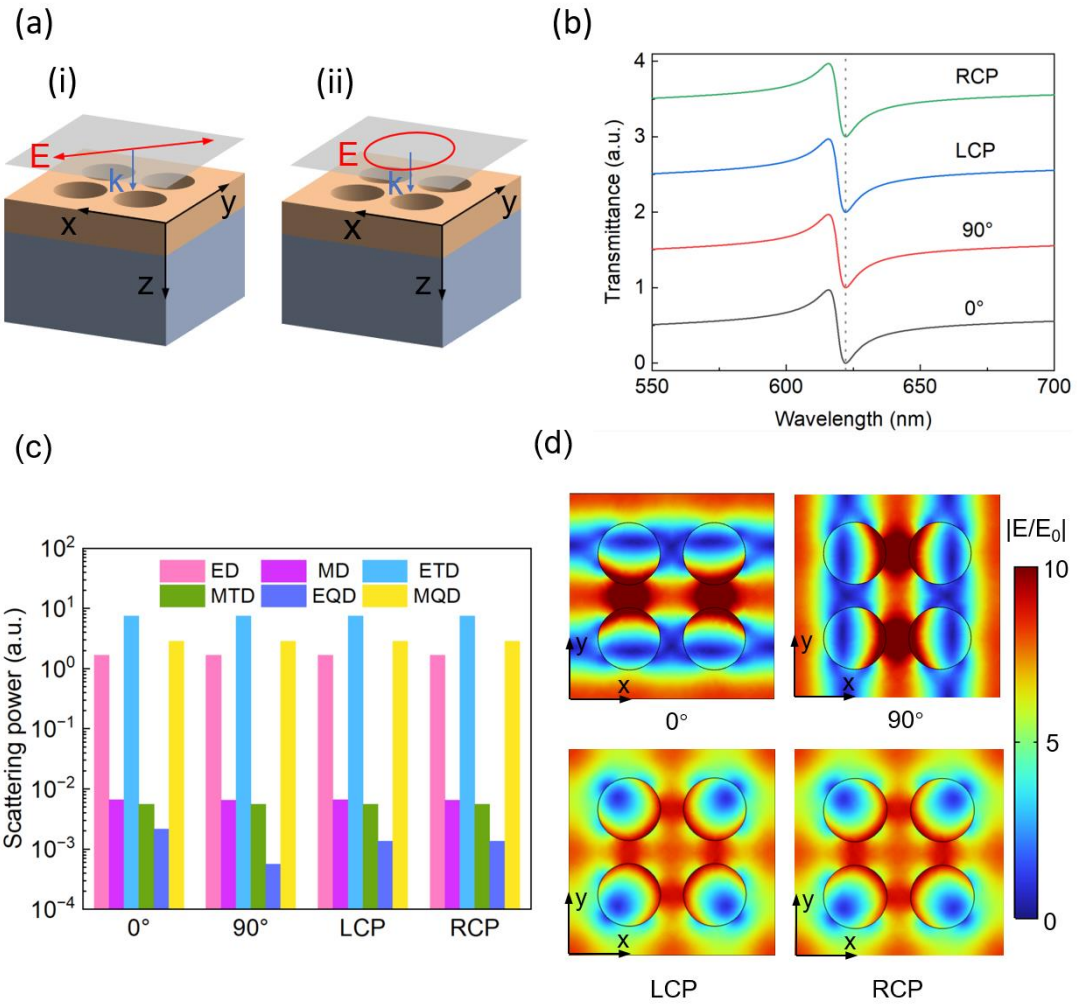


图2 偏振无关的BZF-QBIC模式。(a) 超表面在正入射的线偏振光 (i) 和圆偏振光 (ii) 照射下的示意图。(b) 超表面在*x*偏振、*y*偏振以及左旋/右旋圆偏振（LCP/RCP）光照射下的透射光谱。(c) 相同四种入射偏振态下BZF-QBIC 模式的多极分解和 (d) 近场电场分布。

差异。BZF-QBIC 模式的偏振无关性质对于实现任意偏振下的强耦合尤为关键。

3.2 偏振无关自杂化强耦合

为探究自杂化块体 WS_2 超表面中的偏振无关强耦合，我们同时考虑了支持光学模式的背景折射率介质纳米腔和纯激子模式的折射率（ $f_0 = 0.2$）。我们特意选择这些超表面的几何参数（ P =330 nm、d = 20 nm、 R = 50 nm），以促进A激子与 BZF-QBIC 模式之间的光谱重叠。我们计算了这些块体WS2超表面在x偏振光照射下吸收光谱随 H 的变化，如图 3(a)所示。这些光谱相对于激子模式呈现出两条明显的反交叉分支，表明A激子与 BZF-QBIC 模式之间存在强耦合。波长小于/大于激子波长的分支峰分别对应上/下极化激元（UP/LP）。值得注意的是，UP 与 LP 之间的残余峰源自未耦合A激子所占的部分。

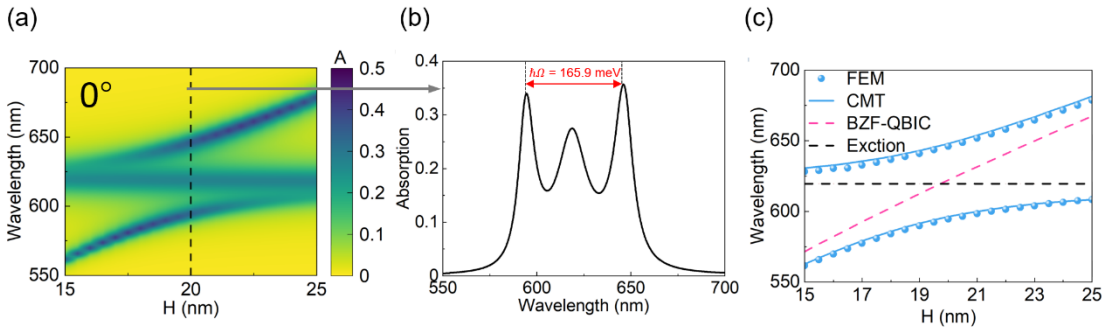


图3 自杂化强耦合的光学性质。(a) 在正入射x偏振光（0°）下，超表面的厚度H变化时自杂化耦合的吸收光谱。黑色虚线对应于(b)零失谐时自杂化结构的吸收光谱。(c) 通过有限元法计算（蓝色圆点）和耦合模理论模型（蓝色实线）获得的自杂化耦合系统的色散关系。黑色和红色虚线分别表示未耦合的A激子和 BZF-QBIC 模式的色散关系。

为确认块体 WS_2 超表面中的自杂化强耦合，采用耦合振子模型（耦合模理论）[41]

$$\begin{pmatrix} E_{cav}+i\hbar\gamma_{cav} & g \\ g & E_{exc}+i\hbar\gamma_{exc} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=E_{UP,LP}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \tag{2}$$

此处，未耦合的 BZF-QBIC 模式和A激子的能量及半高半宽（HWHM）分别记为 E_{cav}、 E_{exc} 和 γ_{cav}、 γ_{exc}。BZF-QBIC 模式与激子之间的耦合强度用g 表示。此外， α 和 β 为满足归一化条件 $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$的 Hopfield 系数，其中 $|\alpha|^2$ 和 $|\beta|^2$ 分别表示极化激元中光与物质组分的相对贡献。当耦合系统满足零失谐条件 $E_{cav}=E_{exc}$时，可得拉比劈裂:

$$\hbar\Omega=E_{UP}-E_{LP}=2\sqrt{g^2-\frac{1}{4}(\hbar\gamma_{cav}-\hbar\gamma_{exc})^2} \tag{4}$$

强耦合系统必须满足以下条件:

$$c_1=\frac{g}{\frac{|\gamma_{cav}-\gamma_{exc}|}{2}}>1 \tag{5}$$

$$c_2=\frac{g}{\sqrt{\frac{\hbar\gamma_{cav}^2+\hbar\gamma_{exc}^2}{2}}}>1 \tag{6}$$

前一个不等式确保拉比劈裂的存在，后一个不等式则保证其在实验中可观测。如图 3(b)所示，根据零失谐条件下的结果可提取出 165.9毫电子伏特的拉比劈裂。进一步考虑 BZF-QBIC 模式和A激子的耗散后，估算得到系统的耦合强度为 83.2 meV。因此，所设计的块体 WS_2 超表面满足强耦合判据（不等式 (5) 和 (6)）。此外，有限元法计算与耦合模理论模型的结果一致（图 3(c)），进一步证明了该超表面中强耦合的存在。得益于 ETD 主导的高 Q BZF-QBIC 模式，所提出的自杂化强耦合系统具有较大的拉比劈裂和较强的耦合强度[32],，从而为极化激元器件拓宽了工作波长范围。

为研究块体

WS_2 超表面中偏振无关的强耦合，照射光从x-偏振扩展到具有任意θ的其他线偏振光，甚至扩展到圆偏振光（左旋圆偏振和右旋圆偏振）。如图4(a-c)所示，计算了块体WS2超表面在厚度变化下，分别处于y-偏振、左旋圆偏振和右旋圆偏振条件时的吸收光谱。对于所有偏振态，光谱均显示出相同的反交叉和拉比劈裂，表明这些偏振下具有相同的强耦合特性。为进一步研究不同偏振光照射下的强耦合行为，在零失谐处比较了超表面在不同偏振光（即具有不同 θ 的线偏振光以及左旋圆偏振和右旋圆偏振）照射下的吸收光谱，如图4(d)所示。在

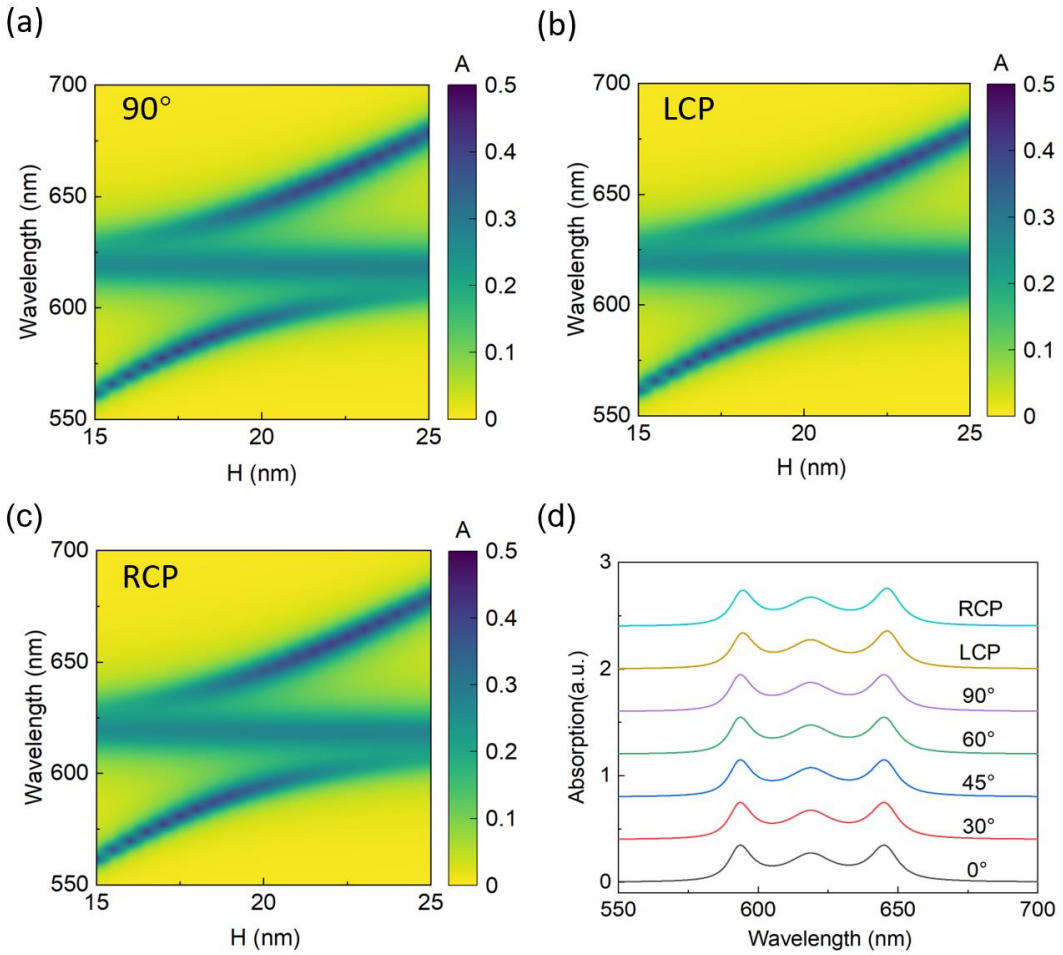


图4 块体 WS_2 超表面中的偏振无关自杂化强耦合。(a) 正入射时，自杂化结构在不同超表面厚度 H 下的吸收光谱，入射光分别为 (a) 90°(y偏振)、(b) 左旋圆偏振和 (c) 右旋圆偏振。(d) 零失谐时耦合系统在受线偏振、左旋圆偏振和右旋圆偏振光照射下的吸收光谱。

所有偏振条件下。鉴于 BZF-QBIC 模式和激子模式均具有偏振无关特性，混合系统的耦合强度始终保持为 83.2 meV。此外，在不同偏振条件下，每个极化激元分支的线宽也相同。这些特征证实了块体 WS_2 超表面中强耦合的偏振无关特性。

本研究中的偏振无关强耦合相较于此前报道的 TMDC 系统[28-32]取得了显著进展；在此前的系统中，由于米氏共振对偏振敏感，只有特定偏振的入射光才能实现最大的耦合强度。此外，所提出的偏振无关 BZF-QBIC 源于布里渊区折叠，而非材料的固有性质；它不局限于自杂化块体 WS_2 平台，还可扩展到其他频率范围，以应用于其他激子或振动系统。最近，有研究报道了一种具有 C4v 对称性的 WSe_2 超表面，该超表面支持简并 QBIC 模式，并能够实现偏振无关强耦合[42]。其 QBIC 模式主要由环面共振主导，这与我们体系中由电偶极跃迁主导的 BZF-QBIC 不同。此外，该模式对结构不对称参数非常敏感，通过精确改变不对称性会导致明显的光谱位移和强耦合的强失谐，从而阻碍稳健型极化激元器件的实现。

在本研究中，我们在块体 WS_2 超表面中实现了对扰动参数不敏感、偏振无关的自杂化强耦合。然而，这种偏振无关强耦合只能在正入射条件下激发。设计一种能够同时支持角度无关和偏振无关 BZF-QBIC 模式的结构，从而在二维材料中实现角度和偏振均无关的强耦合，将进一步拓展极化激元器件的应用场景。这是可行的，因为 TMDC 中的激子模式无色散且与偏振无关。

4. 结论

总之，我们提出了一种新颖的偏振无关自杂化强耦合系统，该系统由块体 WS_2 超表面中的*A*激子与 BZF-QBIC 模式构成。所提出的超表面支持这种偏振无关的高 Q 值 BZF-QBIC 模式，其共振波长不受不对称性的影响，因此特别适用于自杂化强耦合。我们的结果还表明，在块体 WS_2超表面中实现了拉比劈裂为 165.9毫电子伏特的自杂化强耦合。此外，经证实，在不同偏振态激发下，该超表面中的自杂化强耦合与偏振无关。我们的工作为在块体 TMDC 超表面中实现偏振无关强耦合提供了一种新方法，并为拓展具有任意偏振的低维极化激元器件的应用带来了新见解。

5. 致谢

感谢国家自然科学基金委员会第 12304371 号项目和西安交通大学青年人才支持计划的资助。

参考文献

1 Waldherr, M. 等 在混合$MoSe_2$-GaAs单层微腔中观察到玻色子凝聚。《自然·通讯》 **9**, 3286 (2018).https://doi.org/10.1038/s41467-018-05532-72 Anton-Solanas, C. 等 原子级薄晶体中的激子-极化激元玻色子凝聚。*Nature Materials* **20**, 1233–1239 (2021).https://doi.org/10.1038/s41563-021-01000-83 Berman, O. L., Kezerashvili, R. Y. & Lozovik, Y. E. 微腔中嵌入过渡金属二硫属化物的极化激元自旋霍尔效应。*Physical Review B* **99**, 085438 (2019).https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.0854384 Chen, Y.-J., Cain, J. D., Stanev, T. K., Dravid, V. P. & Stern, N. P. 单层半导体中的谷极化激子-极化激元。《自然·光子学》**11**, 431–435 (2017)。https://doi.org/10.1038/nphoton.2017.865 Dufferwiel, S. 等 原子级薄半导体中的谷可寻址极化激元

。《自然·光子学》11, 497–501 (2017). https://doi.org/10.1038/nphoton.2017.125 6 Zhao, J. 等. 室温下单层半导体微腔中的超低阈值极化激元凝聚态。Nano Letters 21, 3331–3339 (2021). https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.1c01162 7 Chen, X. 等. 可转移微腔中的上支激子-极化激元玻色凝聚。Nano Letters 23, 9538–9546 (2023). https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c03123 8 Gu, J., Chakraborty, B., Khatoniar, M. & Menon, V. M. 基于单层二硫化钨的室温极化激元发光二极管。Nature Nanotechnology 14, 1024–1028 (2019). https://doi.org/10.1038/s41565-019- 0543-6 9 Zhao, Q. 等. 激子-极化激元光电二极管。《自然·通讯》17 (2026). https://doi.org/10.1038/s41467-026-68312-8 10 Kim, J. H. 等. 二维半导体中通过等离激元-激子相互转换实现光学逻辑运算。《科学报告》9, 9164 (2019). https://doi.org/10.1038/s41598-019-45204-0 11 Genco, A. 等. 二维半导体微腔中强光-物质相互作用的飞秒开关。Nat. Commun. 16, 6490 (2025). https://doi.org/10.1038/s41467-025-61607-2 12 Törmä, P. & Barnes, W. L. 表面等离激元与发射体之间的强耦合：综述。《物理学进展报告》78, 013901 (2015). https://doi.org/10.1088/0034-4885/78/1/013901 13 Baranov, D. G., Wersäll, M., Cuadra, J., Antosiewicz, T. J. & Shegai, T. 用于强光–物质相互作用的新型纳米结构与材料。ACS Photonics 5, 24–42 (2018). https://doi.org/10.1021/acsphotonics.7b00674 14 Chernikov, A. 等. 单层二硫化钨中的激子束缚能与非氢型里德伯系列。Physical Review Letters 113, 076802 (2014). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.076802 15 He, K. 等. 单层 WSe2 中的紧束缚激子。Physical Review Letters 113, 026803 (2014). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.026803 16 Li, Y. 等. 单层过渡金属二硫属化物光学介电函数的测量：MoS2、MoSe2、二硫化钨和 WSe2。Physical Review B 90, 205422 (2014). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.205422 17 Munkhbat, B., Wróbel, P., Antosiewicz, T. J. & Shegai, T. O. 通过光谱椭偏术测量的若干多层过渡金属二硫属化物在 300–1700 nm 范围内的光学常数：高折射率、各向异性与双曲性。ACS Photonics 9, 2398–2407 (2022). https://doi.org/10.1021/acsphotonics.2c00433 18 Liu, X. 等. 二维原子晶体中的强光–物质耦合。《自然·光子学》9, 30–34 (2015). https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.304 19 Munkhbat, B. 等. 多层结构中的自杂化激子-极化激元

用于高效光吸收的过渡金属二硫族化物。ACS Photonics 6, 139–147 (2019). https://doi.org/10.1021/acsphotonics.8b01194 20 Wen, J. 等. 单根等离激元纳米棒与二维原子晶体耦合，实现室温强光–物质相互作用及主动调控。Nano Letters 17, 4689–4697 (2017). https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b01344 21 Zheng, D. 等. 调控单根置于单层 WSe2上的银纳米棒中的相干等离激元–激子相互作用。Nano Letters 17, 3809–3814 (2017). https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b01176 22 Chen, Y. 等. 集成单层激子极化激元的超表面。Nano Letters 20, 5292–5300 (2020). https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c01624 23 He, Z. 等. 集成电四极模全介质超表面的单层二硫化钨中的强耦合。Nano Letters 25, 10556–10562 (2025). https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5c02217 24 Verre, R. 等. 过渡金属二硫属化物纳米盘作为高折射率介质米氏纳米谐振器。Nature Nanotechnology 14, 679–683 (2019). https://doi.org/10.1038/s41565-019-0442-x 25 Wang, J. 等. 增强全介质异质结构中的反环形偶极–激子强耦合。Photonics Research 10 (2022). https://doi.org/10.1364/prj.453099 26 Kuznetsov, A. I., Miroshnichenko, A. E., Brongersma, M. L., Kivshar, Y. S. & Luk’yanchuk, B. 光学谐振介质纳米结构。Science 354, aag2472 (2016). https://doi.org/doi:10.1126/science.aag2472 27 Baranov, D. G. 等. 全介质纳米光子学：探索更优材料与制造技术。Optica 4, 814–825 (2017). https://doi.org/10.1364/OPTICA.4.000814 28 Kravtsov, V. 等. 与光学连续谱束缚态耦合的单层半导体中的非线性极化激元。Light: Science & Applications 9, 56 (2020). https://doi.org/10.1038/s41377-020-0286-z 29 Sortino, L. 等. 在范德华异质结构超表面中原子层组装超薄光学腔。Nature Photonics 19, 825–832 (2025). https://doi.org/10.1038/s41566-025-01675-4 30 Maggiolini, E. 等. 连续谱束缚态显著增强单层二硫化钨中的光–物质耦合。Nature Materials 22, 964–969 (2023). https://doi.org/10.1038/s41563-023-01562-9 31 Guo, X., Zhang, Y., Si, J., Hou, X. & Wang, K. 布里渊区折叠诱导的连续谱准束缚态与单层 ${\mathrm{WS}}_{2}$ 中的激子强耦合。Physical Review B 113, 235425 (2026). https://doi.org/10.1103/jyn1-ph3z 32 Weber, T. 等. 范德华超表面中自杂化连续谱束缚态带来的本征强光–物质耦合。Nature Materials 22, 970–976 (2023). https://doi.org/10.1038/s41563-023-01580-7

33 Koshelev, K., Lepeshov, S., Liu, M., Bogdanov, A. & Kivshar, Y. 由连续谱束缚态主导的高Q共振非对称超表面。Physical Review Letters 121, 193903 (2018). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.193903 34 Koshelev, K. & Kivshar, Y. 介电共振超光子学。ACS Photonics 8, 102–112 (2021). https://doi.org/10.1021/acsphotonics.0c01315 35 Liu, T. 等. 借助双重简并连续谱准束缚态实现三次谐波产生的偏振无关增强。Nano Letters 25, 3646–3652 (2025). https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5c00146 36 Zhang, S. 等. 通过超表面中的简并保护实现通用偏振无关和角度无关连续谱准束缚态。Laser & Photonics Reviews 19, e00859 (2025). https://doi.org/https://doi.org/10.1002/lpor.202500859 37 Wang, W., Srivastava, Y. K., Tan, T. C., Wang, Z. & Singh, R. 布里渊区折叠驱动的连续谱束缚态。《自然·通讯》14, 2811 (2023). https://doi.org/10.1038/s41467-023-38367-y 38 Al-Ani, I. A. M., As'Ham, K., Huang, L., Miroshnichenko, A. E. & Hattori, H. T. 连续谱束缚态增强TMDC单层的强耦合。Laser & Photonics Reviews 15 (2021). https://doi.org/10.1002/lpor.202100240 39 Yang, Y., Kravchenko, I. I., Briggs, D. P. & Valentine, J. 电磁感应透明的全介质超表面类比。《自然·通讯》5 (2014). https://doi.org/10.1038/ncomms6753 40 Xu, L. 等. 通过磁偶极子准BIC超薄谐振器实现动态非线性图像调谐。Advanced Science 6 (2019). https://doi.org/10.1002/advs.201802119 41 Haroche, S. & Raimond, J.-M. 探索量子：原子、腔体与光子。（Oxford University Press, 2006）。42 Wei, X. 等. 简并环面连续谱准束缚态实现偏振无关激子-极化激元。Physical Review B 114, 045401 (2026). https://doi.org/10.1103/rkn1-pyhg

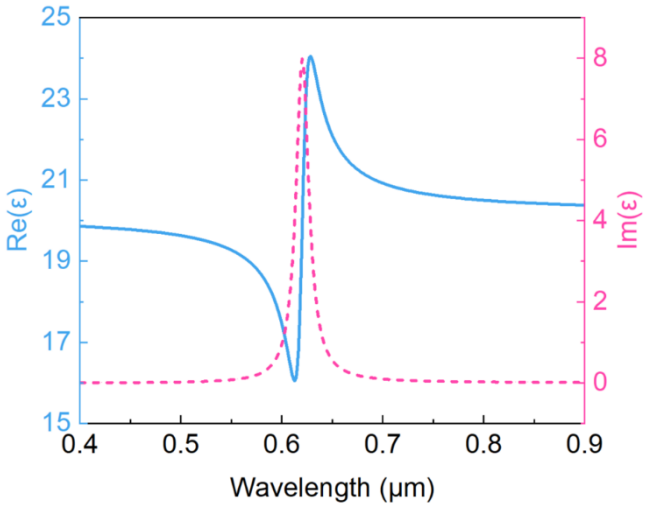
补充材料

布里渊区折叠诱导的连续体中的准束缚态实现块体WS_2超表面的偏振无关自杂化强耦合

Xiongwei Guo, Fu Liu, Jinhai Si, Xun Hou, Kuidong Wang*教育部物理电子与器件重点实验室、陕西省信息光子技术重点实验室，电子科学与工程学院，西安交通大学，中国西安，*710049*

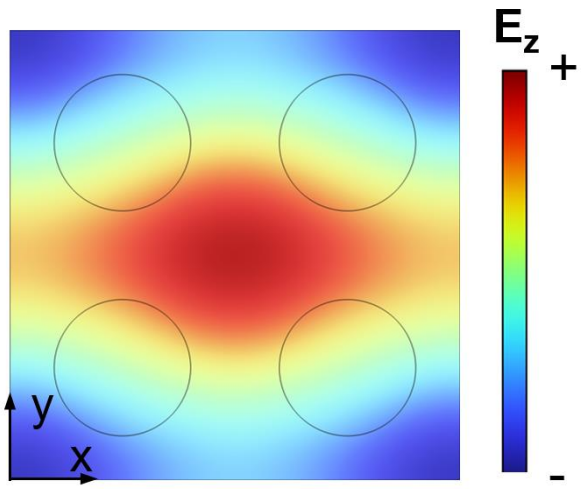
*通讯作者： wangkuidong@xjtu.edu.cn

S1. 块体WS2的色散介电常数。



图S1. 块体WS2介电常数的实部（蓝色实线）和虚部（红色虚线）。

S2. 布里渊区折叠条件下Γ 点处的电场分布。



图S2。 布里渊区折叠条件下 Γ 点处的电场分布。

S3. BZF-QBIC 模式的多极分解和电磁场分布。

我们采用标准多极分解方法分析了 BZF-QBIC 模式的远场辐射，并计算了电偶极子（ED， P_α ）、磁偶极子（MD， M_α ）、电环形偶极子（ETD， $T_\alpha^{(e)}$ ）、磁环形偶极子（MTD， $T_\alpha^{(m)}$）、电四极子（EQ， $Q_{\alpha\beta}^{(e)}$）和磁四极子（MQ， $Q_{\alpha\beta}^{(m)}$ ）的贡献。在笛卡尔坐标系（α、 $\beta = x$、 y、 z ）中，ED、MD、ETD、MTD、EQ 和 MQ 可表示为

$$P_\alpha = \frac{1}{i\omega}\int \vec{j} d^3r \tag{1}$$

$$M_\alpha = \frac{1}{2c}\int (\vec{r}\times\vec{j}) d^3r \tag{2}$$

$$T_\alpha^{(e)} = \frac{1}{10c}\int [(\vec{r}\cdot\vec{j})\vec{r} - 2r^2\vec{j}] d^3r \tag{3}$$

$$T_\alpha^{(m)} = \frac{k^2}{20}\int r^2(\vec{r}\times\vec{j}) d^3r \tag{4}$$

$$Q_{\alpha\beta}^{(e)} = \frac{1}{2i\omega}\int \left[r_\alpha j_\beta + r_\beta j_\alpha - \frac{2}{3}(\vec{r}\cdot\vec{j})\delta_{\alpha,\beta}\right] d^3r \tag{5}$$

$$Q_{\alpha\beta}^{(m)} = \frac{1}{3c}\int \left[(\vec{r}\times\vec{j})_\alpha r_\beta + (\vec{r}\times\vec{j})_\beta r_\alpha\right] d^3r \tag{6}$$

$c, r, \omega, n, k, \vec{E}$ 和 $\vec{j} = i\omega(n^2 - 1)\vec{E}$ 分别表示光速、位置、光的角频率、折射率、波矢、电场和电流密度。各多极矩贡献对应的散射功率可表示为[1,2]

$$I_P = \frac{2\omega^4}{3c^3}|P_\alpha|^2 \tag{7}$$

$$I_M = \frac{2\omega^4}{3c^3}|M_\alpha|^2 \tag{8}$$

$$I_{T^{(e)}} = \frac{2\omega^6}{3c^5}|T_\alpha^{(e)}|^2 \tag{9}$$

$$I_{T^{(m)}} = \frac{2\omega^6}{3c^5}\left|T_\alpha^{(m)}\right|^2 \tag{10}$$

$$I_{Q^{(e)}} = \frac{\omega^6}{5c^5}\sum|Q_{\alpha\beta}^{(e)}|^2 \tag{11}$$

$$I_{Q^{(m)}} = \frac{\omega^6}{40c^5}\sum|Q_{\alpha\beta}^{(m)}|^2 \tag{12}$$

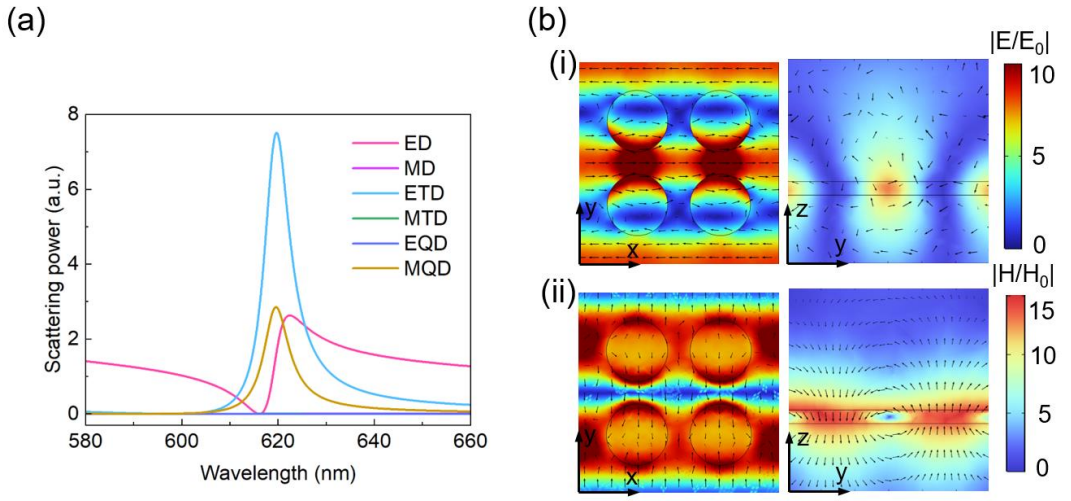


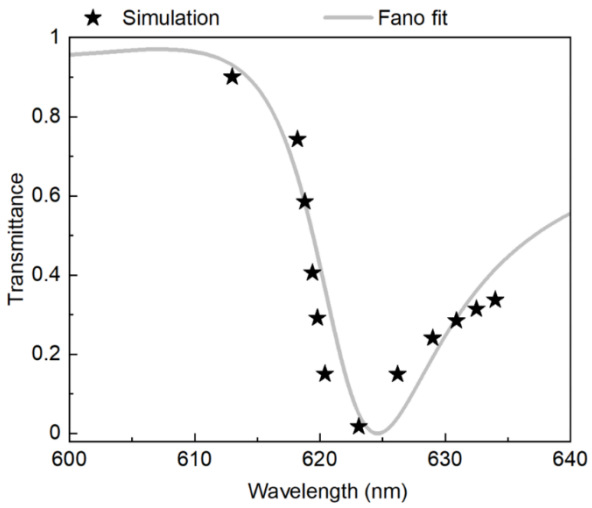
图 S3. (a) BZF-QBIC 模式的多极分解。(b) BZF-QBIC 模式的分布：(i) 电场和 (ii) 磁场。

S4. 使用 Fano公式拟合透射光谱

当扰动参数固定为 $d = 20$ nm 时，模拟得到的透射光谱可以用 Fano公式拟合（灰色实线）

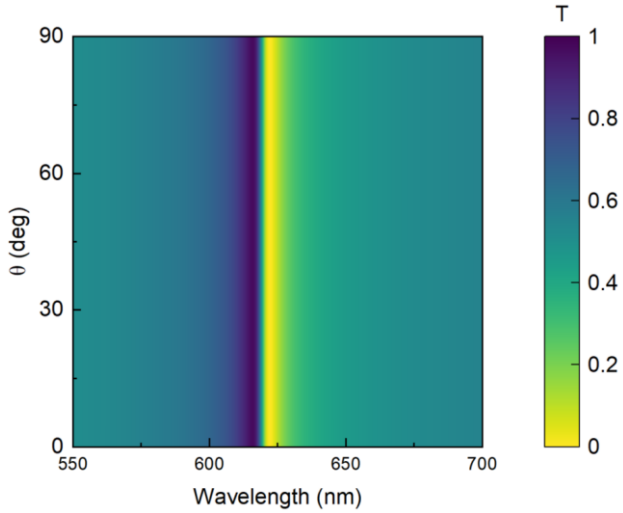
$$T_{Fano}(\omega) = \left|a_1 + ja_2 + \frac{b}{\omega - \omega_0 + j\gamma}\right|^2 \tag{1}$$

其中 a_1， a_2 和 b 均为实常数， ω_0 为中心共振频率。根据 Fano线型可以得到辐射耗散 γ ，进而确定体相 WS_2 超表面中光学模式的品质因数。



Figu图S4. 采用 Fan
o 公式对扰动参数为 20 nm 时的块体 WS{v5}超表面透射光谱进行模拟和拟合。

S5. 偏振角变化时的透射光谱



图S5. 线偏振入射光的偏振角 θ

变化时的透射光谱。

参考文献

1 Savinov, V., Fedotov, V. A. & Zheludev, N. I. 超材料的环形偶极激发与宏观电磁性质。 物理评论*B* **89**（2014年）。
https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.2051122 Arruda, T. J. 核壳球中的电和磁环形偶极激发。 物理评论*B* **109**，235409（2024年）。
https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.235409