

基于 α -MoO₃光栅型吸收控制超表面

隋超*, 刘悦, 周胜#

哈尔滨师范大学物理与电子工程学院, 光电带隙材料教育部重点实验室, 黑龙江 哈尔滨

收稿日期: 2021年10月8日; 录用日期: 2021年11月5日; 发布日期: 2021年11月16日

摘要

设计了基于 α 相三氧化钼(α -MoO₃)的三层结构吸收器。该结构顶层为 α -MoO₃光栅, 中间为电介质, 底部为金层。模拟结果表明, 当TE波正入射时, 超表面在19.36 μm 处存在吸收峰, 吸收率达到99.6%。与单层 α -MoO₃对TE波的吸收相比, 超表面的吸收率大幅增加。此外研究了晶轴方向和入射角度对吸收率的影响, 结果表明可以通过改变晶轴方向来调节吸收峰位置, 并且超表面对入射角度不敏感。设计的超表面在光学滤波器和传感方面具有潜在的应用价值。

关键词

超表面, α -MoO₃, 吸收

Grating-Type Controllable Absorption Metasurfaces Based on α -MoO₃

Chao Sui*, Yue Liu, Sheng Zhou#

Key Laboratory for Photonic and Electronic Bandgap Materials of Ministry of Education, School of Physics and Electronic Engineering, Harbin Normal University, Harbin Heilongjiang

Received: Oct. 8th, 2021; accepted: Nov. 5th, 2021; published: Nov. 16th, 2021

Abstract

A three-layer structure absorber based on α phase molybdenum trioxide (α -MoO₃) was designed. The structure was composed of a top layer of α -MoO₃ grating, a dielectric layer in the middle and a gold layer at the bottom. The simulation results show that the absorption peak existed at 19.36 μm when TE wave was normal incidence, and the absorption reached 99.6%. Compared with the absorption of TE wave by monolayer α -MoO₃, the absorption of metasurface increased greatly. Fur-

*第一作者。

#通讯作者。

thermore, the effects of crystal axis direction and incidence angle on absorption were also studied. The results show that the position of absorption peak can be adjusted by changing the direction of crystal axis, and the metasurface was insensitive to the incidence angle. The design of the metasurface provides potential applications for optical filters and sensors.

Keywords

Metasurface, α -MoO₃, Absorption

Copyright © 2021 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

超材料作为有别于天然材料的人工结构材料, 由于其独特的电磁特性在最近几年被广泛研究。天然材料由原子或分子组成, 超材料由人工构造的微结构组成, 通过不同的微结构设计, 使电磁波的传播方式从根本上得到改变。超表面是厚度很薄的人工周期材料, 可以视作超材料的二维形式。与超材料比较, 超表面具有损耗较低、厚度更薄、制作简单等优点[1]。对于超表面的设计而言, 材料的选择、各层材料的结构与顺序以及超表面的尺寸都对研究结果有重要的影响。超表面大致可以分为偏振转换超表面[2]、波前控制超表面[3]、吸收超表面[4]等。其中吸收超表面在太赫兹成像和热检测器中的潜在应用, 使其成为近年来超表面研究中的焦点。

双曲超材料是一类具有高度各向异性, 色散关系具有双曲形式的人工复合材料, 在电磁波的调控方面, 拥有一般人造超材料无法比拟的性质与能力。由于双曲超材料等频色散曲线是双曲型, 可以支持较大的波矢, 即在介质内可以传播波长很短的波, 因此可以突破衍射极限, 在亚波长成像[5] [6] [7]等方面有较多应用。自然界中有少量的天然双曲材料[8] [9], 相比于金属材料或人工合成的双曲超材料, 天然双曲材料的光学损耗更低[10], 拥有更加优良的光学性能。

双曲材料作为一种特殊类别的各向异性介质, 在不同的轴上具有金属或介电特性[11] [12] [13], 已经被证明可以在材料的双曲频率区域内产生宽带吸收。2016年 Wu 等提出了石墨烯-hBN 多层膜结构, 在红外频率下实现完美吸收[14]。2017年 Zhao 等证明, 在中红外区域, 使用由六方氮化硼(hBN)构成的梯形金字塔可以实现全向宽带的完美吸收[15]。2019年 Song 等提出了一种基于 hBN 和二氧化钒三层结构的超表面, 通过改变温度可以切换超表面的吸收范围[16]。2020年 Deng 等利用有限差分域模拟, 从理论上证明了梯形 α 相三氧化钼贴片阵列由于其红外宽双曲区域, 可用于实现宽带完美吸收[17]。

该文提出了一种基于双轴双曲材料 α 相三氧化钼(α -MoO₃)的吸收超表面, 并对其性质进行了分析。

2. 建模仿真

该文设计的吸收超表面由 α -MoO₃ 层、电介质层以及金属反射层构成。超表面结构见图 1, 结构单元为周期性光栅。上层 α -MoO₃ 层由两部分组成, 其中 α -MoO₃ 薄层厚度为 0.2 μm , 光栅厚度为 0.1 μm 。光栅周期为 0.3 μm , 其中凹槽宽度为 0.2 μm 。中间层电介质厚度为 0.3 μm , 介电常数为 2.2。底层金属反射层厚度为 0.1 μm 。

作为双轴双曲材料, α -MoO₃ 三个正交轴上的介电常数都不相同, 这点与单轴双曲材是有区别的。 α -MoO₃ 的介电常数[18]表示为:

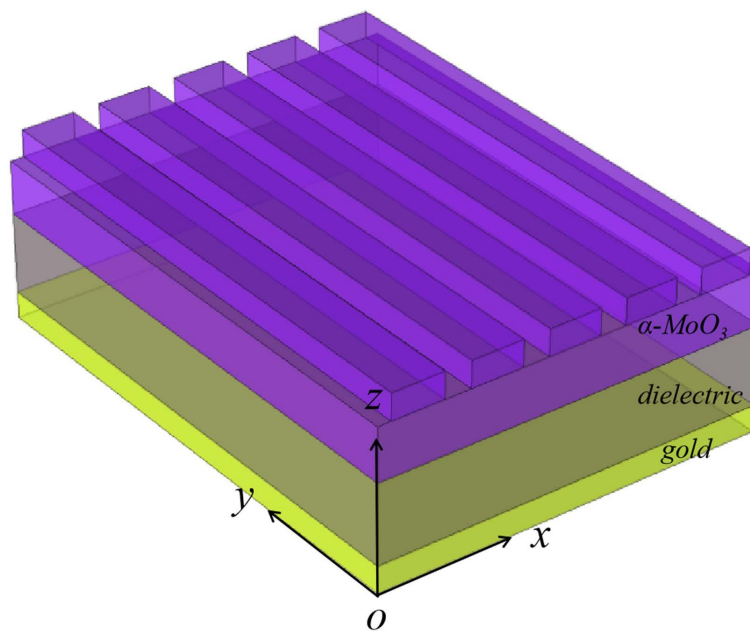


Figure 1. Metasurface configuration diagram
图 1. 超表面位型图

$$\varepsilon(j) = \varepsilon_{\infty}^j \left(1 + \frac{\omega_{LO}^{j2} - \omega_{TO}^{j2}}{\omega_{LO}^{j2} - \omega^2 - i\omega\tau_j} \right), \quad j = x, y, z \quad (1)$$

其中 $\varepsilon_{\infty_x} = 4.8$, $\omega_{TO_x} = 816 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_{LO_x} = 970 \text{ cm}^{-1}$; $\varepsilon_{\infty_y} = 5.2$, $\omega_{TO_y} = 542 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_{LO_y} = 856 \text{ cm}^{-1}$; $\varepsilon_{\infty_z} = 5.1$, $\omega_{TO_z} = 956 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_{LO_z} = 1012 \text{ cm}^{-1}$ 。 $\tau = 8$ 。 ω_{LO} 和 ω_{TO} 分别为纵向光学声子频率和横向光学声子频率, τ 是阻尼常数。 x 、 y 、 z 分别表示晶体的三个主轴, 分别对应 $\alpha\text{-MoO}_3$ 的晶体方向 [100]、[001] 和 [010]。 $\alpha\text{-MoO}_3$ 的介电常数表现为张量形式如公式(2)所示:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} \quad (2)$$

介电常数随波长的变化见图 2。

金或银这一类的贵金属在中红外频段具有随入射电磁波频率变化的负介电函数。本文金属层材料为金, 用经典的 Drude 模型介电常数表示:

$$\varepsilon_m = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\omega_c} \quad (3)$$

式中 ω 是入射波频率、共振频率 $\omega_p = 2\pi \times 2.175 \times 10^{15} / \text{s}$, 阻尼常数 $\omega_c = 2\pi \times 6.5 \times 10^{12} / \text{s}$ [19]。

利用上述公式在 COMSOL 软件中设置各层材料, 模拟单层 $\alpha\text{-MoO}_3$ 、 $\alpha\text{-MoO}_3$ /电介质层的吸收性质。COMSOL 软件中 RF 模块应用在电磁和光学的模拟仿真, 采用有限元算法。模型和仿真的一些基本要点如下: 在顶部和底部设置了完美匹配层(PML), 并在底部表面采用散射边界条件。沿 x 和 y 方向采用对称周期边界条件。我们注意到, 超表面特征单元为周期性结构, 使用周期性边界条件建模可以简化模拟, 因此在模拟中应用了周期边界条件。位型中的光栅部分利用工作平面进行建立。网格设置为细化, 可以获得足够的自由度并缩减计算时间。反射和透射光谱通过“S 参数”分析对象计算, 它利用一个平面波

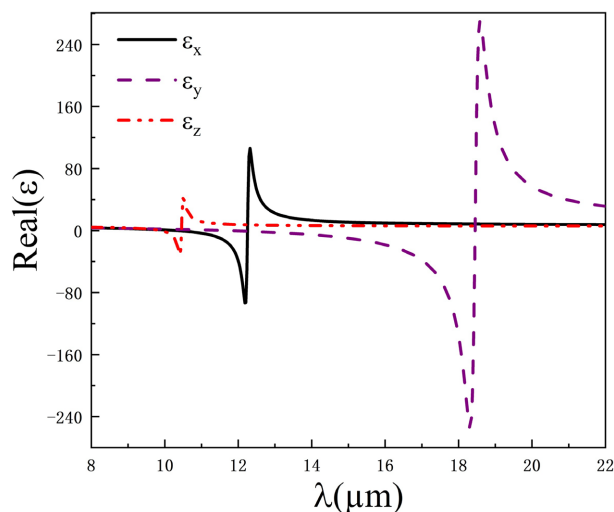


Figure 2. The dielectric constant of $\alpha\text{-MoO}_3$
图 2. $\alpha\text{-MoO}_3$ 介电常数

激发源从上方端口入射到超表面，该文入射波为 TE 波。超表面的四周为空气，空气的相对介电函数和相对磁导率为 1。利用 COMSOL 软件对所设计的超表面的吸收进行全波段仿真，可以得出波长扫描下的透射率(T)、反射率(R)和吸收率($A = 1 - R - T$)。最后通过参数化扫描获得入射角度对吸收率的影响。

3. 结果分析与讨论

首先模拟了有光栅层和没有光栅层时，超表面对 TE 波的吸收情况，入射波波长为 8~21 μm 。从模拟结果可以看到，两者在研究波长范围内都出现了一个近完美吸收，见图 3(a)。有无光栅层时超表面的吸收率分别达到 99.6%和 97%，并且峰值发生了移动。有光栅层时，吸收峰位置在 19.36 μm 处；无光栅层时，吸收峰位置在 19.10 μm 处。接着对单层 $\alpha\text{-MoO}_3$ 吸收率进行模拟，见图 3(b)。可以发现单层 $\alpha\text{-MoO}_3$ 对电磁波的吸收率是很低的。TE 波的吸收率在研究范围内最高仅为 15%左右。对比单层 $\alpha\text{-MoO}_3$ 的吸收率，该文设计的超表面对吸收率的提高是十分显著的。当电磁波入射到超表面时，超表面与电磁波相互作用，激发 $\alpha\text{-MoO}_3$ 层内声子极化子，使电场局域化进而引起高吸收。TE 波入射时超表面的电场振幅俯视图和侧视图表明，电场集中在 $\alpha\text{-MoO}_3$ 光栅层与薄层中，见图 4。

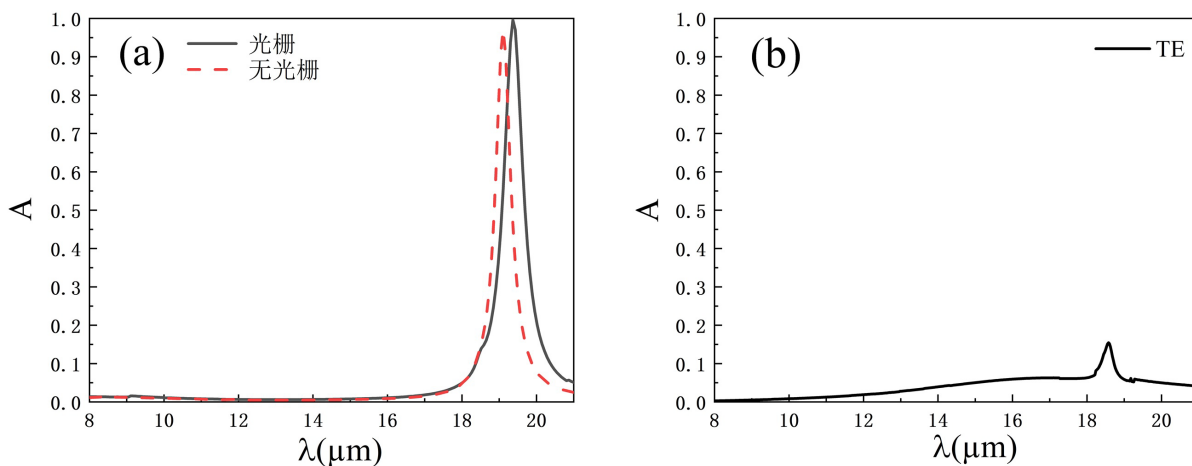


Figure 3. Absorption; (a) metasurface; (b) monolayer $\alpha\text{-MoO}_3$
图 3. 吸收率；(a) 超表面；(b) 单层 $\alpha\text{-MoO}_3$

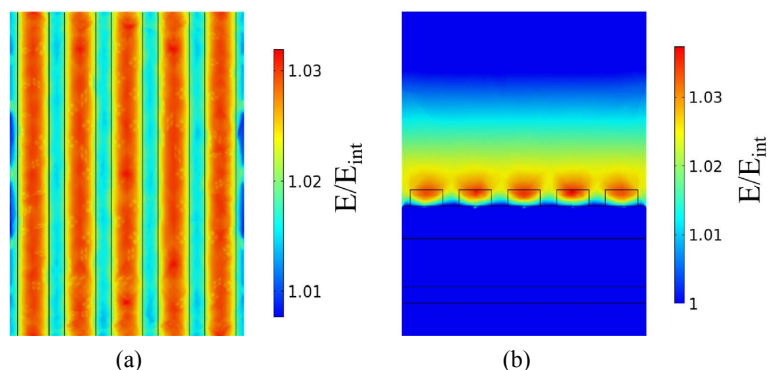


Figure 4. Electric field amplitude of metasurface; (a) top view; (b) side view
图 4. 超表面电场振幅; (a) 俯视图; (b) 侧视图

其次研究入射角度对吸收率的影响, 见图 5。图 5(a)为入射角为 30° 、 45° 、 60° 时, 无光栅层超表面对 TE 波的吸收光谱。可以发现随着入射角增大, TE 波的吸收峰峰值及对应电磁波波长都没有发生改变。入射角在 30° 以下, 吸收器的吸收率几乎没有变化。但随着入射角的增大, 吸收率有所下降。入射角为 60° 时, 吸收率已经下降为 80% 左右。由于入射波为 TE 波, 电场方向并不随着入射角变化而改变, 始终沿着 y 方向, 所以不会引起其他波长范围的吸收。加上光栅层后, 超表面对 TE 波的吸收率受入射角变化的影响不大。随着入射角增大, TE 波的吸收峰峰值及对应电磁波波长没有发生改变, 保持在完美吸收状态。当入射角为 60° 时, 吸收率略有下降, 但仍然可以达到 90% 左右。所以加入光栅层后, 可以使设计的超表面对入射角度不敏感性加强。

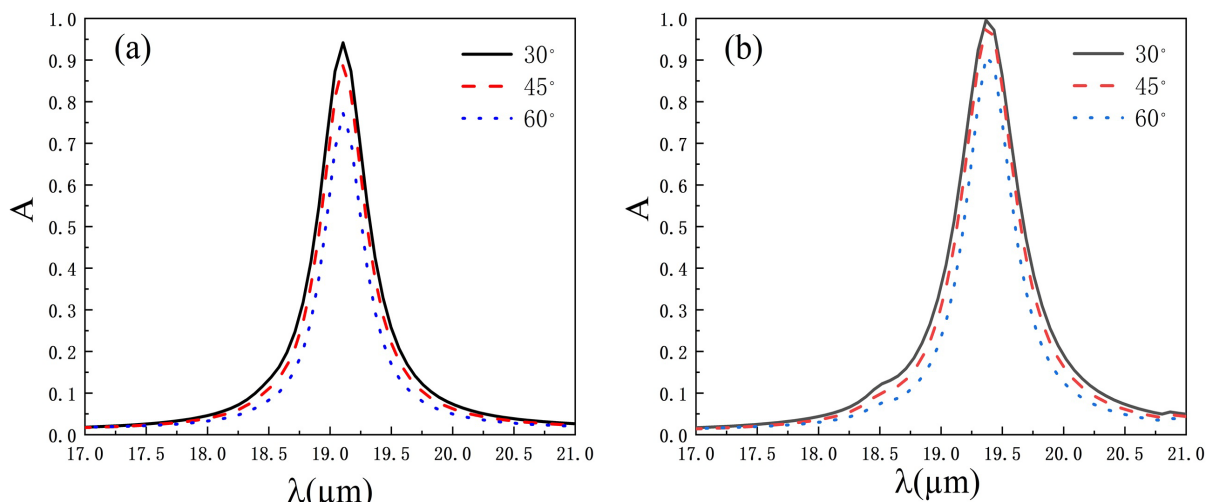


Figure 5. Image of absorption varying with incident angle; (a) no-grating metasurface; (b) grating metasurface
图 5. 吸收率随入射角变化图像; (a) 无光栅的超表面; (b) 光栅超表面

由于 α - MoO_3 三个正交晶体轴的介电常数不同, 所以在实际模拟计算情况中, 晶轴处于不同方向时会影响 α - MoO_3 的吸收特性, 最后研究了晶轴方向对吸收率的影响。本文只对各晶轴变换 90° 进行了模拟计算, 具体结果见图 6(a)、图 6(c)。晶轴方向改变后, 吸收峰位置发生改变。在 x -[001]、 y -[100]、 z -[010] 情况下, $12.64 \mu\text{m}$ 处出现吸收峰, 峰值为 92.7%; 在 x -[100]、 y -[010]、 z -[001] 情况下, $10.61 \mu\text{m}$ 处出现吸收峰, 峰值为 97.7%。见图 6(b)、图 6(d) 表明, 在本文研究内容内, α - MoO_3 晶轴方向改变并不影响超表面的角度不敏感特性, 在 60° 的入射范围内仍能保持近完美吸收。

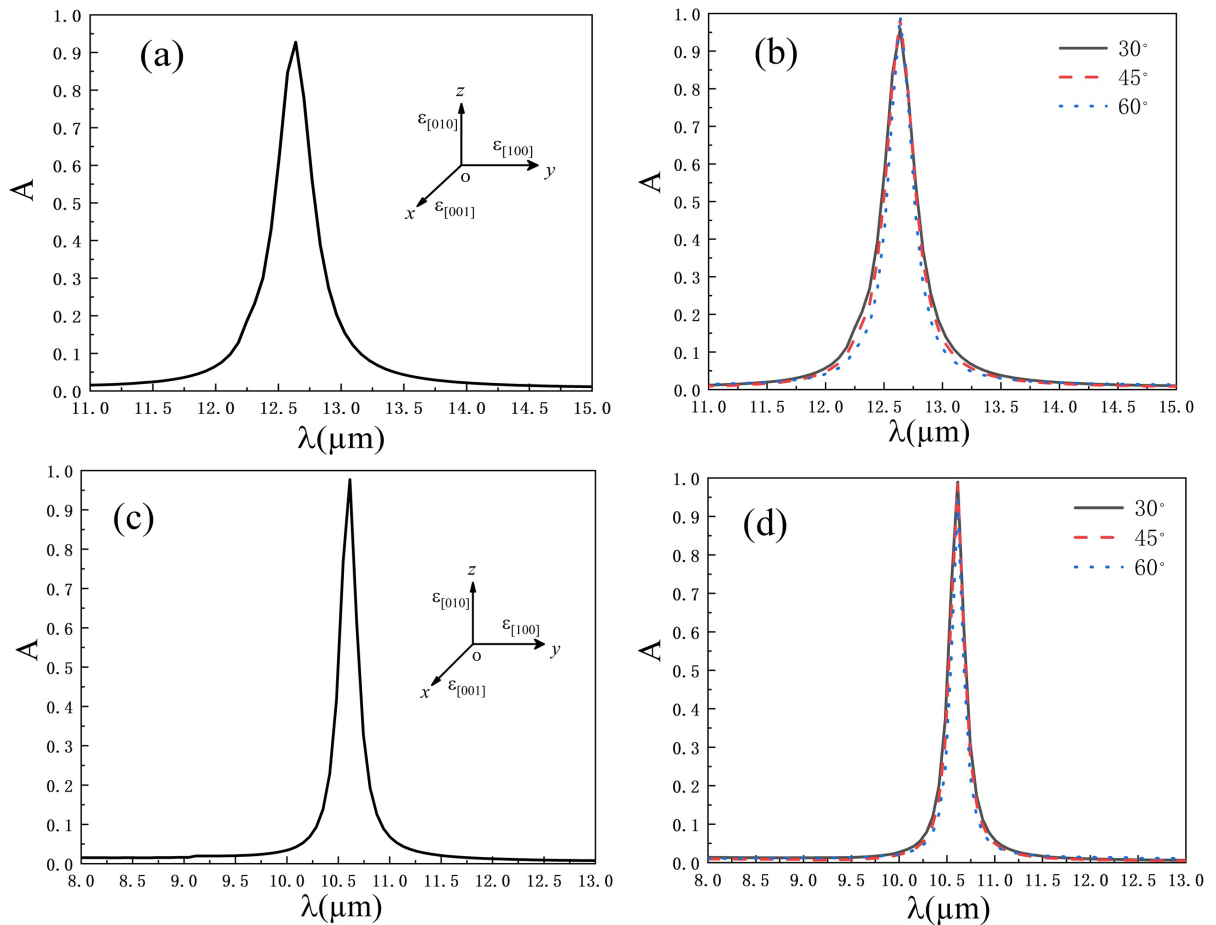


Figure 6. Absorption at different crystal axes; (a) x-[001], y-[100], z-[010] normal incident absorption spectra; (b) Absorption spectra of x-[001], y-[100], z-[010] incident angles of 30°, 45°, 60°; (c) x-[100], y-[010], z-[001] normal incidence corresponding absorption spectrum; (d) Absorption spectra of x-[100], y-[010], z-[001] incident angles of 30°, 45°, 60°

图 6. 不同晶轴方向下的吸收率; (a) x-[001]、y-[100]、z-[010]正入射对应吸收光谱; (b) x-[001]、y-[100]、z-[010]入射角为 30°、45°、60°对应的吸收图谱; (c) x-[100]、y-[010]、z-[001]正入射对应吸收光谱; (d) x-[100]、y-[010]、z-[001]入射角为 30°、45°、60°对应的吸收图谱

4. 结束语

该文设计了基于 α 相三氧化钼(α -MoO₃)的光栅结构吸收超表面, 研究了不同入射角下超表面对 TE 波的吸收率, 以及不同晶轴方向对吸收率的影响。利用有限元软件 COMSOL 进行仿真模拟。仿真结果表明, 晶轴在 x-[100]、y-[001]、z-[010]情况下, 当 TE 波正入射时超表面在 19.36 μm 处存在吸收峰, 峰值为 99.6%; 在 x-[001]、y-[100]、z-[010]情况下, 12.64 μm 处出现吸收峰, 峰值为 92.7%; 在 x-[100]、y-[010]、z-[001]情况下, 10.61 μm 处出现吸收峰, 峰值为 97.7%。本文设计的超表面在三种晶轴变换情况下对入射角均不敏感, 入射角范围在 60°以内都能获得较好的吸收性能。本文设计的超表面在晶轴方向变化对 TE 波高吸收范围不同, 可用于进行频率选择, 在光控开关、吸波器、隐身技术、光电检测器等方面具有重要的应用。

参考文献

- [1] Zheludev, N.I. (2010) The Road Ahead for Metamaterials. *Science*, **328**, 582-583. <https://doi.org/10.1126/science.1186756>

- [2] Zhou, Y.L., Cao, X.Y., Gao, J. and Li, S.J. (2017) A C/X Dual-Band Wide-Angle Reflective Polarization Rotation Metasurface. *Radioengineering*, **26**, 699-704. <https://doi.org/10.13164/re.2017.0699>
- [3] Lin, Z., Ba, Z. and Wang, X. (2020) Broadband High-efficiency Electromagnetic Orbital Angular Momentum Beam Generation based on a Dielectric Metasurface. *IEEE Photonics Journal*, **12**, Article No. 4600611. <https://doi.org/10.1109/JPHOT.2020.2991114>
- [4] Tang, S.T., Chau, J., Yeung, K. and Yang, Z. (2019) Perfect Absorption Metasurfaces with Multiple Meta-Resonances. <https://arxiv.org/abs/1903.03493>
- [5] Rho, J., Ye, Z., Xiong, Y., Yin, X., Liu, Z., Choi, H., *et al.* (2010) Spherical Hyperlens for Two-Dimensional Sub-Diffractive Imaging at Visible Frequencies. *Nature Communications*, **1**, Article No. 143. <https://doi.org/10.1038/ncomms1148>
- [6] Jacob, Z., Alekseyev, L.V. and Narimanov, E. (2006) *Optical Hyperlens*: Far-Field Imaging beyond the Diffraction Limit. *Optics Express*, **14**, 8247-8256. <https://doi.org/10.1364/OE.14.008247>
- [7] Liu, Z., Lee, H., Xiong, Y., Sun, C. and Zhang, X. (2007) Far-Field Optical Hyperlens Magnifying Sub-Diffraction-Limited Objects. *Science*, **315**, 1686. <https://doi.org/10.1126/science.1137368>
- [8] Caldwell, J.D., Kretinin, A.V., Giles, A.J., Fogler, M.M., Francescato, Y., Ellis, C.T., *et al.* (2014) Sub-Diffractive Volume-Confined Polaritons in the Natural Hyperbolic Material Hexagonal Boron Nitride. *Nature Communications*, **5**, Article No. 5221. <https://doi.org/10.1038/ncomms6221>
- [9] Zheng, Z., Xu, N., Oscurato, S., Tamagnone, M., Sun, F., Jiang, Y., Ke, Y., Chen, J., Huang, W. and Wilson, W., *et al.* (2019) A Mid-Infrared Biaxial Hyperbolic Van Der Waals Crystal. *Science Advances*, **5**, Article No. eaav8690. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aav8690>
- [10] Zhou, S., Khan, A., Wang, X.Z. and Wang, X.-Z. (2019) Extraordinary Reflection and Refraction from Natural Hyperbolic Materials. *Optics Express*, **27**, 15222-15235. <https://doi.org/10.1364/OE.27.015222>
- [11] Song, X., Liu, Z., Xiang, Y. and Aydin, K. (2018) Biaxial Hyperbolic Metamaterials Based on Multilayer Anisotropic Black Phosphorus and Gold Thin Films. *Optics Express*, **26**, 5469-5477. <https://doi.org/10.1364/OE.26.005469>
- [12] Roberts, J.A., Yu, S., Ho, P.H., Schoeche, S., Falk, A.L. and Fan, J.A. (2019) Tunable Hyperbolic Metamaterials Based on Self-Assembled Carbon Nanotubes. *Nano Letters*, **19**, 3131-3137. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b00552>
- [13] Poddubny, A., Iorsh, I., Belov, P. and Kivshar, Y. (2013) Hyperbolic Metamaterials. *Nature Photonics*, **7**, 948-957. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2013.243>
- [14] Wu, J., Jiang, L., Guo, J., Dai, X., Xiang, Y. and Wen, S. (2016) Turnable Perfect Absorption at Infrared Frequencies by a Graphene-hBN Hyper Crystal. *Optics Express*, **24**, 17103-17114. <https://doi.org/10.1364/OE.24.017103>
- [15] Zhao, B. and Zhang, Z. (2017) Perfect Absorption with Trapezoidal Gratings Made of Natural Hyperbolic Materials. *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, **21**, 123-133. <https://doi.org/10.1080/15567265.2017.1289573>
- [16] Song, X., Liu, Z., Scheuer, J., Xiang, Y. and Aydin, K. (2019) Tunable Polaritonic Metasurface Absorbers in Mid-IR Based on Hexagonal Boron Nitride and Vanadium Dioxide Layers. *Journal of Physics D Applied Physics*, **52**, Article ID: 164002. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab0262>
- [17] Deng, G., Dereshgi, S.A., Song, X., Wei, C. and Aydin, K. (2020) Phonon-Polariton Assisted Broadband Resonant Absorption in Anisotropic α -Phase MoO₃ Nanostructures. *Physical Review B*, **102**, Article ID: 035408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.035408>
- [18] Álvarez-Pérez, G., Folland, T.G., Errea, I., Taboada-Gutiérrez, J., Duan, J., Martín-Sánchez, J., *et al.* (2020) Infrared Permittivity of the Biaxial van der Waals Semiconductor α -MoO₃ from Near- and Far-Field Correlative Studies. *Advanced Materials*, **32**, Article ID: 1908176. <https://doi.org/10.1002/adma.201908176>
- [19] Liu, N., Langguth, L., Weiss, T., Kästel, J., Fleischhauer, M., Pfau, T., *et al.* (2009) Plasmonic Analogue of Electromagnetically Induced Transparency at the Drude Damping Limit. *Nature Materials*, **8**, 758-762. <https://doi.org/10.1038/nmat2495>