

# 外尔半金属调制的范德瓦耳斯声子极化激元色散性质\*

顾梓恒<sup>1)</sup> 臧强<sup>1)2)†</sup> 郑改革<sup>2)3)‡</sup>

1) (南京信息工程大学自动化学院, 南京 210044)

2) (江苏省大气环境与装备技术协同创新中心, 南京 210044)

3) (南京信息工程大学物理与光电工程学院, 南京 210044)

(2023年2月10日收到; 2023年8月18日收到修改稿)

极性电介质支持的表面声子极化激元 (surface phonon polaritons, SPhP) 在红外波段增强光与物质相互作用过程中引起了广泛的关注, 然而存在光场操控有限、调制波段限定在剩余射线带区域的问题. 提出了一种由双轴范德瓦耳斯材料 ( $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>) 和外尔半金属组成的异质结构, 用来研究各向异性 SPhP 的主动可调谐性. 在横磁波入射条件下, 通过  $4 \times 4$  传递矩阵法准确地求解异质系统中的反射系数以及场分布, 描述各向异性 SPhP 的色散性质. 研究表明: 模式杂化和色散操控可以通过方位角度及  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的厚度大小实现. 更重要的是外尔半金属中费米能级的大小能够启用动态色散曲线调节, 而费米能级依赖于外界温度的变化. 因此研究有助于进一步优化和设计基于范德瓦耳斯材料的可控光电器件, 在红外热辐射和生物传感等方面具有较好的应用前景.

**关键词:** 外尔半金属, 表面声子极化激元, 各向异性, 色散关系

**PACS:** 71.36.+c, 07.79.Fc

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230167

## 1 引言

最近, 范德瓦耳斯 (vdW) 极性材料中支持的表面声子极化激元 (surface phonon polaritons, SPhP) 引起了极大的关注<sup>[1-4]</sup>, 其在控制光与物质相互作用方面表现出了独特的物理特性, 具有长寿命、低损耗和超慢群速度等特点. 目前发现的层状 vdW 材料具有优异的双曲响应性能, 同时其原胞可降低到原子水平. 电磁场与 vdW 材料可发生强烈的相互作用, 产生的混合粒子通常称为声子极化激元 (phonon polaritons, PhPs)<sup>[5]</sup>. 各向异性 PhPs 沿层状二维材料表面的传播是由平面内各向异性

结构和声子特性所引起, 能支持平面内的椭圆和双曲 PhPs, 将导致光子态密度的增加和沿材料表面的射线状传播<sup>[6-8]</sup>. 目前报道的天然双曲材料主要是六方氮化硼 (hBN) 与  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub><sup>[9,10]</sup>. 其中  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 中的高度受限和面内各向异性 SPhP 存在于中红外区域的 3 个剩余射线带区域 (reststrahlen band, RB) 中, 其中晶体沿 3 个主轴呈现负介电常数, 其声子响应从中红外延伸到远太赫兹 (THz) 波段 (9–38  $\mu\text{m}$ )<sup>[10-13]</sup>. 双曲 PhPs 模式属于电磁表面波, 具有横磁 (TM) 偏振依赖的特征, 目前研究主要集中在激发方式和结构设计方面<sup>[14]</sup>. 对于含  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 结构的主动调谐机制尚未清楚, 对相应 PhPs 色散的杂化和调制研究不仅能够促进对 SPhP 的认知,

\* 江苏省自然科学基金 (批准号: BK20191396) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: autozang@163.com

‡ 通信作者. E-mail: eriot@126.com

更能拓展其中红外光电子器件中的应用.

将 vdW 材料通过人工堆叠的方式与功能材料组合, 可以使其中支持的 PhPs 色散发生偏移, 实现光谱共振的主动调谐, 为纳米光子器件的相关应用提供更加广阔的平台 [15–17]. 作为一个典型的功能材料, 石墨烯为 PhPs 主动调谐结构的设计提供了更高的自由度. 一方面因为石墨烯在红外和太赫兹光谱范围内支持可调谐的表面等离极化激元 (surface plasmon polaritons, SPPs), 一般可通过外加偏压和化学掺杂等手段改变其费米能级. 另一方面石墨烯能灵活地与 vdW 材料或微纳结构结合, 为实现光电器件的可调谐性提供了可能. 在可调谐的 PhPs 色散模式、近场辐射传热和光谱吸收等方面的应用已经得到证实 [18]. 此外, 相变材料 (phase change material, PCM) 因具有的独特光学特性也很有吸引力. 二氧化钒 ( $\text{VO}_2$ ) 和  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  在加热或脉冲激光刺激时会发生从绝缘态到金属态的相变, 在实现主动可调谐的光-物质相互作用方面已经取得了丰硕的成果 [19,20].

本文研究了  $\alpha\text{-MoO}_3$  和外尔半金属 (Weyl semimetal, WSM) 组成的异质结构中的各向异性 PhPs 的色散及主动调谐问题. 主要工作集中在以下几点: 首先用  $4\times 4$  传递矩阵法计算了  $\alpha\text{-MoO}_3$ /WSM 异质结的杂化 PhPs 的色散图谱, 详细讨论了入射角和方位角对面内各向异性 PhPs 的影响. 接着, 研究不同费米能级下色散图谱的变化, 重点是光谱响应曲线和对应的场分布的变化规律. 费米能级强烈依赖于外界温度, 因此  $\alpha\text{-MoO}_3$  和 WSM 结合思路为红外光子学设计提供了一个全新的思路, 对实现自然或人工双曲材料与光的相互作用具有一定的理论指导意义.

## 2 模型和方法

为了实现  $\alpha\text{-MoO}_3$  中各向异性 PhPs 的主动调谐, 提出了由 WSM 和  $\alpha\text{-MoO}_3$  组成的异质结构, 如图 1(a) 所示,  $\varphi$  代表方位角,  $d$  表示  $\alpha\text{-MoO}_3$  层的厚度. 为保证整体结构无透射, WSM 的厚度应该足够大, 本文取  $10\ \mu\text{m}$ . 在中红外波段,  $\alpha\text{-MoO}_3$  的介电函数张量和涉及的参数均取自文献 [21].  $\alpha\text{-MoO}_3$  的介电函数曲线在  $500\text{--}1100\ \text{cm}^{-1}$  的中红外范围内有 3 个 RB: RB-1 位于  $545\text{--}851\ \text{cm}^{-1}$  内, 起源于沿 [001] 结晶 ( $y$  轴) 方向的面内声子模式. RB-2 和 RB-3 则分别处在  $820\text{--}972\ \text{cm}^{-1}$  和  $958\text{--}1010\ \text{cm}^{-1}$  内, 它们分别起源于沿 [100] ( $x$  轴) 和 [010] ( $z$  轴) 方向的面内声子模式 [21].

WSM 的光学各向异性意味着其对光场的响应在不同方向和偏振下是不同的. 此时的介电函数不再是一个常数, 而是一个二阶张量. 电位移矢量和电场强度之间的关系发生了变化, 以往在推导涉及各向同性介质的亥姆霍兹方程也不再适用. WSM 的能带结构包含偶数个非退化能带接触点 (Weyl 节点). 此处考虑一种最简单的情况, 其中 WSM 包含 2 个具有相反手性的 Weyl 节点, 且在动量空间的间隔为由波矢  $2\mathbf{b}$  表示, 实验已经证实了这种 WSM 的存在. 相应的电位移矢量  $\mathbf{D}$  和电场强度  $\mathbf{E}$  之间的关系服从修正后的本构关系 [22]:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0\varepsilon_d\mathbf{E} + i\frac{e^2}{2\pi^2\hbar\omega}\mathbf{b} \times \mathbf{E}, \quad (1)$$

其中,  $\varepsilon_0$  是真空的介电常数,  $\varepsilon_d$  是  $\mathbf{b} = 0$  时对应的狄拉克半金属的相对介电常数,  $i$  是虚数单位,  $e$  为电子电荷,  $\hbar$  和  $\omega$  分别是约化普朗克常数和角频率.

在这种情况下, 基于  $\mathbf{D} = \varepsilon_0\bar{\varepsilon}\mathbf{E}$  定义的 WSM 的介电函数张量写为 [23]

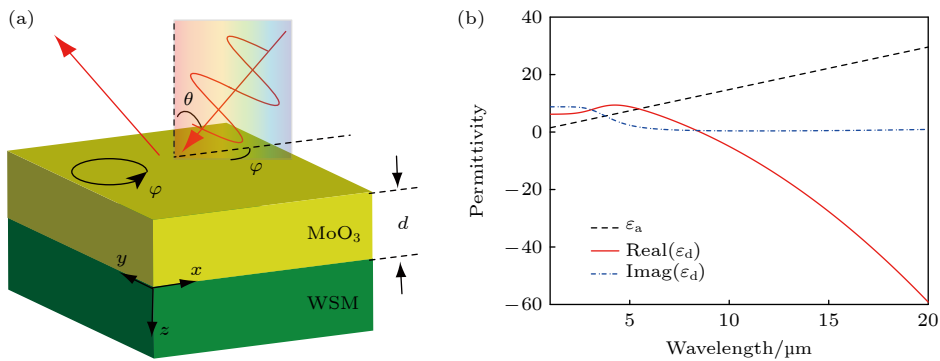


图 1 (a)  $\alpha\text{-MoO}_3$ /WSM 异质结模型示意图; (b) WSM 介电常数张量分量

Fig. 1. (a) Schematic diagram of  $\alpha\text{-MoO}_3$ /WSM heterostructure mode; (b) different parts of permittivity tensor components of WSM.

$$\bar{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_d & 0 & i\epsilon_a \\ 0 & \epsilon_d & 0 \\ -i\epsilon_a & 0 & \epsilon_d \end{bmatrix}, \quad (2)$$

其中, 非对角线项是符号相反的纯虚数,  $\epsilon_a$  的表达式为

$$\epsilon_a = \frac{be^2}{2\pi^2\hbar\omega\epsilon_0}. \quad (3)$$

介电函数中非对角线不对称项的存在打破了洛伦兹互易, 因此可能突破传统的基尔霍夫定律. 对角线项是相同的, 可以通过使用双波段的 Kubo-Greenwood 公式获得:

$$\epsilon_d = \epsilon_b + i\frac{\sigma}{\omega\epsilon_0}, \quad (4)$$

其中  $\epsilon_b$  是背景介电函数,  $\sigma$  是由 (5) 式给出的体电导率 [23]:

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\epsilon_0 r_s g E_F 6\hbar}{\Omega} G\left(\frac{E_F \Omega}{2}\right) + i\frac{\epsilon_0 r_s g E_F}{6\pi\hbar} (\Gamma + \Delta), \\ \Gamma &= \frac{4}{\Omega} \left[ 1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B T}{E_F}\right)^2 \right], \\ \Delta &= 8\Omega \int_0^{\xi_c} \frac{G(\xi E_F) - G(E_F \Omega/2)}{\Omega^2 - 4\xi^2} \xi d\xi. \end{aligned} \quad (5)$$

式中,  $r_s = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar\nu_F)$  是由费米速度  $\nu_F$  定义的有效精细结构常数;  $g$  为 Weyl 节点数目;  $E_F$  是费米能级;  $\Omega = \hbar(\omega + i\tau^{-1})/E_F$  是复数归一化频率,  $\tau^{-1}$  为散射速率; 而  $G(E) = n(-E) - n(E)$ , 其中费米-狄拉克分布函数为

$$n(E) = \{\exp[(E - E_F)/(k_B T)] + 1\}^{-1}.$$

这里  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $T$  代表温度;  $\xi = E/E_F$ ,  $\xi_c = E_c/E_F$  是归一化截止能量,  $E_c$  代表截止能量, 在这个能量之外, 频率色散关系就不再是线性的.

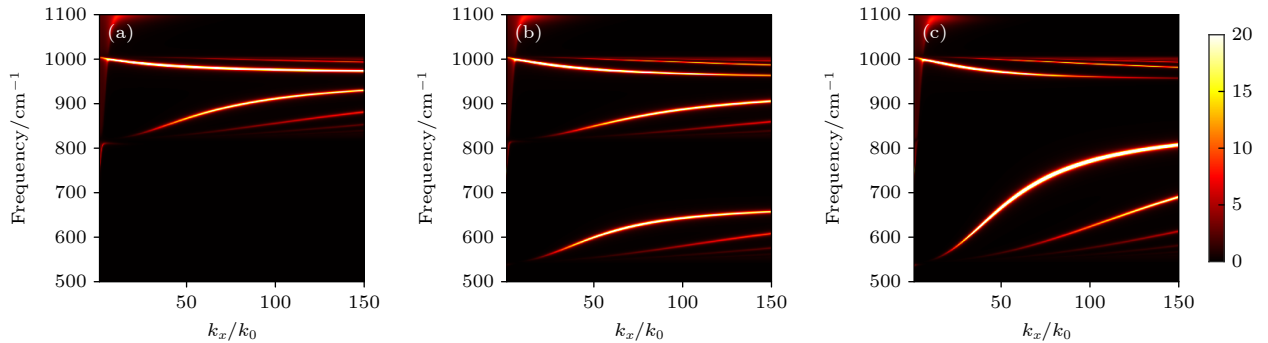


图 2 不同传播角条件下的色散图谱 ( $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的厚度固定在  $d = 50$  nm) (a)  $\varphi = 0^\circ$ ; (b)  $\varphi = 45^\circ$ ; (c)  $\varphi = 90^\circ$ .  $k_0$  和  $k_x$  分别代表真空中和  $x$  方向的波矢

Fig. 2. Dispersion spectra under different propagation angle conditions (Thickness of  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> is fixed at  $d = 50$  nm): (a)  $\varphi = 0^\circ$ ; (b)  $\varphi = 45^\circ$ ; (c)  $\varphi = 90^\circ$ .  $k_0$  and  $k_x$  represent wave vectors in the vacuum and  $x$  direction, respectively.

本文使用的参数取自 Kotov 和 Lozovik [24] 的工作.  $\epsilon_b = 6.2$ ,  $\xi_c = 3$ ,  $\tau = 1000$  fs,  $g = 2$ ,  $b = 2 \times 10^9$  m<sup>-1</sup>,  $\nu_F = 8.3 \times 10^4$  m/s. 相对磁导率  $\mu = 1$ , 这一假设已被用于处理磁光效应.  $E_F$  是温度的函数, 在本文研究中使用  $E_F = 0.15$  eV 为室温下的默认值. 图 1(b) 为  $E_F = 0.15$  eV 对应的介电常数曲线, 可以发现  $\epsilon_d$  的实部随着波长变大而逐渐减小, 直至为负值. 为了研究上述异质结构中的潜在物理机制, 这里用 TM 偏振下异质结构的总菲涅耳反射系数的虚部  $\text{Im}(r_p)$  来表示色散关系.

### 3 $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>/WSM 异质结构的 SPhP 色散

根据图 1(b) 的介电函数性质, 可发现在本文研究的频率范围内 ( $500 - 1200$  cm<sup>-1</sup>), WSM 是可以激发并支持 SPPs 传输的 [25].  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 中的双曲 PhPs 和 WSM 中的 SPPs 在一定条件下的杂化如图 2 所示. 图 2(a) 揭示了  $\varphi = 0^\circ$  对应的离散模式, 主要分布在 RB-2 和 RB-3 内, 归因于  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的双曲各向异性导致的基模和高阶模 SPhP 色散. 另外值得注意的是, 这些模式在 RB-2 光谱区域中表现出正色散 (群速度  $v_g > 0$ ), 而在 RB-3 内则表现出负色散 ( $v_g < 0$ ) 的性质. 当  $\varphi = 90^\circ$  时, 在 RB-1 和 RB-3 中可以发现类似的 SPhP 模式 (图 2(c)). 对于  $\varphi = 45^\circ$ , 发现双曲 PhP 模式存在于  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 所有的 RB 中, 如图 2(b) 所示. 这是由于同传播角相关的介电常数张量中的对角线和非对角线分量取决于沿  $x$  和  $y$  结晶方向的介电常数. 此外, 在 RB-1 和 RB-2 中色散曲线的斜率要小于  $\varphi = 0^\circ$  和  $\varphi = 90^\circ$  对应的情形.

接着研究不同厚度条件下的色散图谱, 结果如图 3 所示, 纵横坐标分别是方位角和频率. 图 3(a)–(d) 分别对应  $d = 50, 500, 1000, 2000$  nm 4 种情形, 所有的图谱都关于  $\varphi = 90^\circ$  成中心对称. 特别地,  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>/WSM 异质结构伴随着  $d$  的增大在  $1000\text{ cm}^{-1}$  附近出现与  $\varphi$  无关的色散模式. 同时伴随着随  $\varphi$  强烈变化的显著色散曲线, 这是由于面内各向异性导致的. 另外,  $d$  的增大诱导更多的色散分支, 这是由于更多的高阶模 PhPs 得以激发, 在图 3(c), (d) 中尤其明显. 实际上, 与  $\varphi$  相关的特征只体现在  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 层中, 具体是因为其支持的双曲 PhP. 其频率可调谐性源自  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的面内各向异性, 导致相对介电常数在随着方位角 ( $\varphi$ ) 旋转, 具体函数关系如 (6) 式所示, 最终体现在色散图谱上 [26,27].

$$\varepsilon(\varphi) = \begin{pmatrix} \varepsilon_x \cos^2 \varphi + \varepsilon_y \sin^2 \varphi & \sin \varphi \cos \varphi (\varepsilon_y - \varepsilon_x) & 0 \\ \sin \varphi \cos \varphi (\varepsilon_y - \varepsilon_x) & \varepsilon_x \sin^2 \varphi + \varepsilon_y \cos^2 \varphi & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中  $\varepsilon_x$ ,  $\varepsilon_y$  和  $\varepsilon_z$  分别对应  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 在 [100], [001] 和 [010] 3 个方向的介电常数.

#### 4 WSM 费米能级参与的 SPhP 主动调谐

目前已经证实双曲 PhPs 可以与 SPPs 耦合, 形成双曲声子-等离激元杂化极化激元 (hyperbolic phonon-plasmon polaritons, HP<sup>3</sup>). 例如 HP<sup>3</sup> 继承了石墨烯 SPPs 电可调谐性和双曲 SPhP 的长寿命, 几乎不受欧姆损耗的影响 [28,29]. 因此, 考虑到 WSM 支持的 SPPs 具有动态可调谐的特性, 设想利用 SPPs 与  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 双曲 PhPs 相耦合的方法实现对  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>/WSM 异质结的色散性质进行有效调控. 图 4(a) 和图 4(b) 分别为  $E_F = 0.1$  和  $0.4$  eV 对应的色散图谱. 对于考虑的面内波矢范围内, 存在非常强的色散变化. 当  $E_F = 0.1$  eV 时, 在 RB-1 中观察到了明显的反交叉, 共振频率位于  $545\text{ cm}^{-1}$  处. 这归因于 WSM 中 SPPs 与  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 双曲 PhPs 之间的杂化. 但是随着  $E_F$  增大到  $0.4$  eV, 这种杂化消失. 这是因为在相同频率和高化学势条件下, WSM 中 SPPs 与  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 双曲 SPhP 之间的动量差比较大, 而 PhPs 之间的相互作用比较弱, 这就造成 SPPs 对  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 间集体共振影响较弱, 因此在  $E_F = 0.4$  eV 处, 主要呈现  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 色散.

多层异质结构无需刻蚀等复杂制备工艺就可实现对表面和界面极化子的调制, 这将会突破

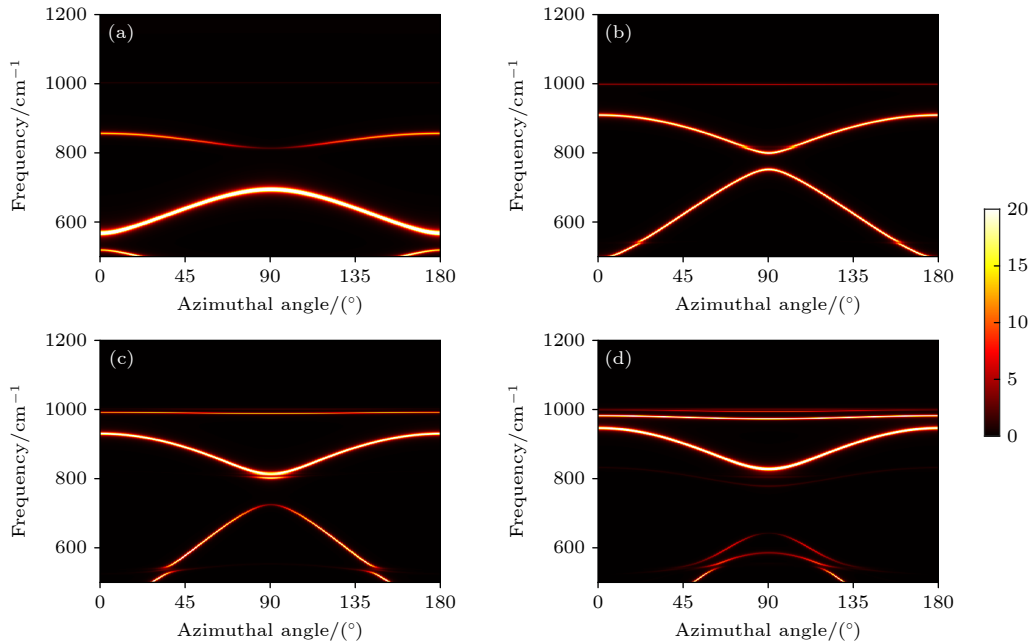


图 3 色散图谱随方位角和  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 厚度的变化 (a) 50 nm; (b) 500 nm; (c) 1000 nm; (d) 2000 nm

Fig. 3. Variation of dispersion spectra with azimuthal angle and  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> thickness: (a) 50 nm; (b) 500 nm; (c) 1000 nm; (d) 2000 nm.

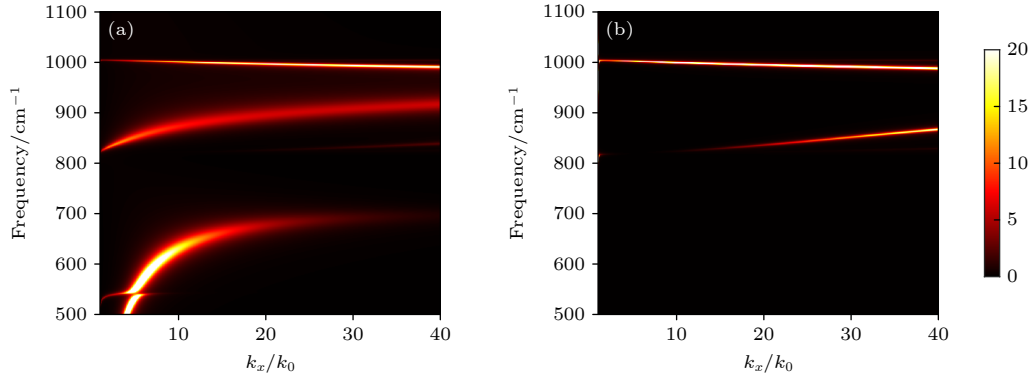


图 4  $d = 50 \text{ nm}$ ,  $\varphi = 0^\circ$ 时, 不同费米能级下的色散图谱 (其他参数同图 2) (a)  $E_F = 0.1 \text{ eV}$ ; (b)  $E_F = 0.4 \text{ eV}$

Fig. 4. Dispersion spectra under different propagation angle conditions at  $d = 50 \text{ nm}$  and  $\varphi = 0^\circ$  (Other parameters are the same as used in Fig. 2): (a)  $E_F = 0.1 \text{ eV}$ ; (b)  $E_F = 0.4 \text{ eV}$ .

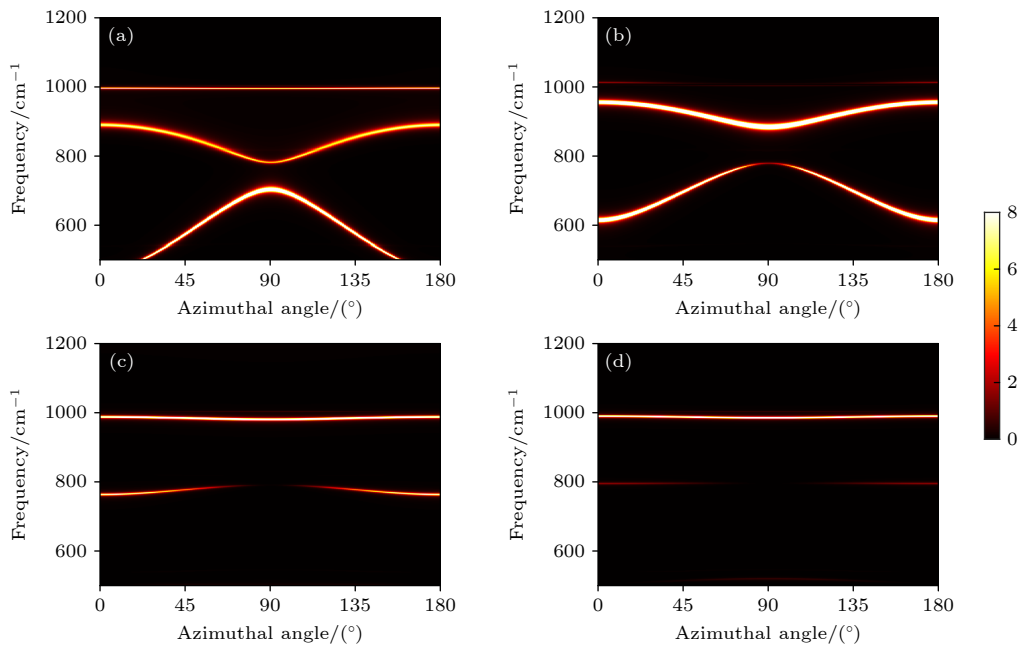


图 5 不同费米能级下色散图谱随方位角和频率的变化 (a)  $E_F = 0.2 \text{ eV}$ ; (b)  $E_F = 0.3 \text{ eV}$ ; (c)  $E_F = 0.35 \text{ eV}$ ; (d)  $E_F = 0.4 \text{ eV}$

Fig. 5. Variation of dispersion spectra with azimuthal angle and frequency with different Fermi levels: (a)  $E_F = 0.2 \text{ eV}$ ; (b)  $E_F = 0.3 \text{ eV}$ ; (c)  $E_F = 0.35 \text{ eV}$ ; (d)  $E_F = 0.4 \text{ eV}$ .

以往研究中界面纳米光调控的限制, 能够为开发片上纳米光子器件提供新的平台. 特别是层状  $\alpha\text{-MoO}_3$  支持的各向异性双曲 PhPs, 对未来的纳米光子应用具有巨大潜力. 引入 WSM 的动态调谐, 在全吸收和热辐射调制等方面均具有较好的应用前景<sup>[30,31]</sup>. 图 5(a)–(d) 对应  $E_F = 0.2, 0.3, 0.35, 0.4 \text{ eV}$  这 4 种条件下随方位角和频率变化的

色散图谱. 很明显,  $E_F$  的增大伴随着双曲色散的消失, 留下的是几乎不随方位角变化的介电函数近零模式. 此种情形下, WSM 中 SPPs 与  $\alpha\text{-MoO}_3$  双曲 PhPs 之间的动量差逐渐变大, 因此两种极化激元之间的相互作用仍然是比较弱的. 值得指出的是  $E_F$  是温度相关的, 两者之间的关系可以通过 (7) 式研究<sup>[32]</sup>:

$$E_F(T) = \frac{2^{1/3} \left[ 9E_F(0)^3 + \sqrt{81E_F(0)^6 + 12\pi^6 k_B^6 T^6} \right]^{2/3} - 2\pi^2 3^{1/3} k_B^2 T^2}{6^{2/3} \left[ 9E_F(0)^3 + \sqrt{81E_F(0)^6 + 12\pi^6 k_B^6 T^6} \right]^{1/3}}, \quad (7)$$

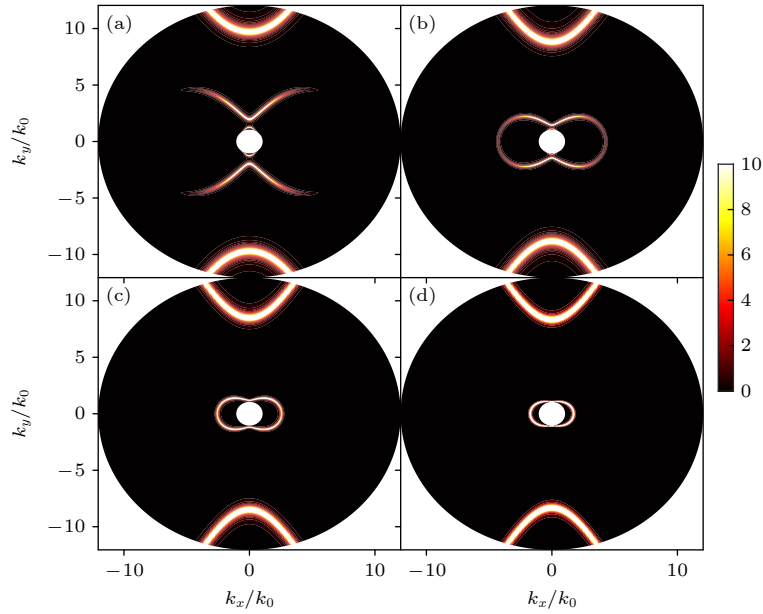


图 6 不同费米能级下杂化 SPhP 的等频线 (其他参数同图 2) (a)  $E_F = 0.2$  eV; (b)  $E_F = 0.25$  eV; (c)  $E_F = 0.3$  eV; (d)  $E_F = 0.35$  eV

Fig. 6. Equal-frequency curves of hybridized SPhP at different Fermi levels (Other parameters are the same as used in Fig. 2):

(a)  $E_F = 0.2$  eV; (b)  $E_F = 0.25$  eV; (c)  $E_F = 0.3$  eV; (d)  $E_F = 0.35$  eV.

其中  $E_F(0) = 0.163$  eV,  $E_F(300\text{ K}) = 0.15$  eV. 因此  $\alpha\text{-MoO}_3/\text{WSM}$  异质结的调谐是随着温度动态变化的, 这一点在红外辐射吸收和频率选择方面具有非常好的应用前景.

进一步地, 可以通过等频线研究 SPPs 与  $\alpha\text{-MoO}_3$  双曲 PhPs 间的杂化, 相关结果如图 6 所示. 具体为波数固定在  $750\text{ cm}^{-1}$  时, 色散曲线随波矢分量  $k_x$  和  $k_y$  的变化结果. HP<sup>3</sup> 分支激发的范围限定在:  $-\sqrt{-\varepsilon_x/\varepsilon_y} < k_y/k_x < \sqrt{-\varepsilon_x/\varepsilon_y}$ , 因此  $E_F$  的变化导致 HP<sup>3</sup> 分散模式在波矢空间表现有所不同, 起到主动调谐的目的<sup>[33]</sup>. 对比图 6(a) 和图 6(b) 发现, 当  $E_F$  从 0.2 eV 变化到 0.25 eV 时, 等频线出现了由开放到闭合的突变, 这是一种典型的拓扑转变. 等频线开放, 表明 PhPs 沿固定角度高度定向传播. 而等频线闭合表明 PhPs 可以沿所有面内方向传播. 当  $E_F$  增大到 0.3 和 0.35 eV 时, 闭合等频线的范围在缩小, 如图 6(c) 和图 6(d) 所示. 充分说明通过改变  $\alpha\text{-MoO}_3$  的介电环境, 不仅可以起到调控 PhPs 波长的作用, 还可以控制其传播.

## 5 结 论

为了实现  $\alpha\text{-MoO}_3$  的面内各向异性 PhPs 的杂化及主动调谐, 设计了一种  $\alpha\text{-MoO}_3/\text{WSM}$  异质结. 表现出的杂化 PhPs 分散模式具有明显的面内

各向异性行为, 并且很大程度上依赖于传播方位角.  $\varphi = 0^\circ$  对应的离散模式, 主要分布在 RB-2 和 RB-3 内, 这些模式在 RB-2 光谱区域中表现出正色散 ( $v_g > 0$ ), 而在 RB-3 内则表现出负色散 ( $v_g < 0$ ) 的性质. 当  $\varphi = 90^\circ$  时, 在 RB-1 和 RB-3 中可以发现类似的 PhP 模式. 对于  $\varphi = 45^\circ$ , 双曲 SPhP 模式存在于  $\alpha\text{-MoO}_3$  所有的 RB 中, 在 RB-1 和 RB-2 中色散曲线的斜率要小于  $\varphi = 0^\circ$  和  $\varphi = 90^\circ$  对应的情形. 利用 WSM 支持的 SPPs 与  $\alpha\text{-MoO}_3$  双曲 SPhP 相耦合的方法成功实现了对杂化模式的有效调控. 对于本文考虑的面内波矢范围内, 费米能级改变导致非常强的色散图谱变化. 更重要的是, 当  $E_F$  从 0.2 eV 变化到 0.25 eV 时, 等频线出现了由开放到闭合的突变, 这是一种典型的拓扑转变. 此研究中涉及的双轴 vdW  $\alpha\text{-MoO}_3$  结构不需要复杂的制备工艺, 完全基于平面转移和沉积技术. 此外,  $\alpha\text{-MoO}_3$  是一种半导体材料, 在有源光电器件的应用方面表现出了较好的特点, 比如对外掺杂敏感和光电转换效率高. 本文结论原则上可以推广到具有与各向异性不同 RB 的其他类型的层状材料, 通过选择合适的材料能促进多种应用.

## 参考文献

- [1] Duan J H, Chen J N 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 110701 (in Chinese) [段嘉华, 陈佳宁 2019 物理学报 **68** 110701]

- [2] Zheng J L, Dai Z G, Hu G W, Ou Q D, Zhang J R, Gan X T, Qiu C W, Bao Q L 2021 *Chin. Opt.* **14** 812 (in Chinese) [郑嘉璐, 戴志高, 胡光维, 欧清东, 张津瑞, 甘雪涛, 仇成伟, 鲍桥梁 2021 *中国光学* **14** 812]
- [3] Xu K Q, Hu C, Shen P Y, Ma S Q, Zhou X L, Liang Q, Shi Z W 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 027102 (in Chinese) [徐琨淇, 胡成, 沈沛约, 马赛群, 周先亮, 梁齐, 史志文 2023 *物理学报* **72** 027102]
- [4] Hu G W, Ou Q D, Si G Y, Wu Y J, Wu J, Dai Z G, Krasnok A, Mazor Y, Zhang Q, Bao Q L, Qiu C W, Alù A 2020 *Nature* **582** 209
- [5] Chaudhary K, Tamagnone M, Rezaee M, Bediako D K, Ambrosio A, Kim P, Capasso F 2019 *Sci. Adv.* **5** eaau7171
- [6] Álvarez-Pérez G, González-Morán A, Capote-Robayna N, Voronin K V, Duan J H, Volkov V S, Alonso-González P, Nikitin A Y 2022 *ACS Photonics* **9** 383
- [7] Duan J, Álvarez-Pérez G, Voronin K V, Prieto I, Taboada-Gutiérrez J, Volkov V S, Martín-Sánchez J, Nikitin A Y, Alonso-González P 2021 *Sci. Adv.* **7** eabf2690
- [8] Hajian H, Rukhlenko I D, Hanson G W, Low T, Butun B, Ozbay E 2020 *Nanophotonics* **9** 3909
- [9] Lee I H, He M Z, Zhang X, Luo Y J, Liu S, Edgar J H, Wang K, Avouris P, Low T, Caldwell J D, Oh S H 2020 *Nat. Commun.* **11** 3649
- [10] Menabde S G, Jahng J, Boroviks S, Ahn J, Heiden J T, Hwang D K, Lee E S, Mortensen N A, Jang M S 2022 *Adv. Optical Mater.* **10** 2201492
- [11] Erçağlar V, Hajian H, Rukhlenko I D, Ozbay E 2022 *Appl. Phys. Lett.* **121** 182201
- [12] Schwartz J J, Le Son T, Krylyuk S, Richter C A, Davydov A V, Centrone A 2021 *Nanophotonics* **10** 1517
- [13] Larciprete M C, Dereshgi S A, Centini M, Aydin K 2022 *Opt. Express* **30** 12788
- [14] Gong Y, Zhao Y, Zhou Z, Li D, Mao H, Bao Q, Zhang Y, Wang G 2022 *Adv. Opt. Mater.* **10** 2200038
- [15] Zheng Z, Chen J, Wang Y, Wang X, Chen X, Liu P, Xu J, Xie W, Chen H, Deng S, Xu N 2018 *Adv. Mater.* **30** 1705318
- [16] Zhang Q, Zhen Z, Yang Y F, Gan G W, Jariwala D, Cui X D 2019 *Opt. Express* **27** 18585
- [17] Huang W, Sun F, Zheng Z, Folland T G, Chen X, Liao H, Xu N, Caldwell J D, Chen H, Deng S 2021 *Adv. Sci.* **8** 2004872
- [18] Hu G, Shen J, Qiu C W, Alù A, Dai S 2020 *Adv. Optical Mater.* **8** 1901393
- [19] Dai S, Zhang J, Ma Q, Kittiwatanakul S, McLeod A, Chen X, Corder S N G, Watanabe K, Taniguchi T, Lu J, Dai Q, Jarillo-Herrero P, Liu M, Basov D N 2019 *Adv. Mater.* **31** 1900251
- [20] Passler N C, Heßler A, Wuttig M, Taubner T, Paarmann A 2020 *Adv. Optical Mater.* **8** 1901056
- [21] Zhang Q, Ou Q, Hu G, Liu J, Dai Z, Fuhrer M S, Bao Q, Qiu C W 2021 *Nano Lett.* **21** 3112
- [22] Hofmann J, Das S S 2016 *Phys. Rev. B* **93** 241402
- [23] Zhao B, Guo C, Garcia C A C, Narang P, Fan S 2020 *Nano Lett.* **20** 1923
- [24] Kotov O V, Lozovik Y E 2018 *Phys. Rev. B* **98** 195446
- [25] Tamaya T, Kato T, Tsuchikawa K, Konabe S, Kawabata S 2019 *J. Phys. Condens. Matter* **31** 305001
- [26] Schubert M 1996 *Phys. Rev. B* **53** 4265
- [27] Wu X H, Fu C J, Zhang Z M 2019 *Int. J. Heat Mass Tran.* **135** 1207
- [28] Hajian H, Ghobadi A, Dereshgi S A, Butun B, Ozbay E 2017 *J. Opt. Soc. Am. B* **34** D29
- [29] Fandan R, Pedrós J, Schieffele J, Boscá A, Martínez J, Calle F 2018 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51** 204004
- [30] Wang Y, Khandekar C, Gao X, Li T, Jiao D, Jacob Z 2021 *Opt. Mater. Express* **11** 3880
- [31] Wu J, Wu B Y, Wang Z M, Wu X H 2022 *Int. J. Therm. Sci.* **181** 107788
- [32] Ashby P E C, Carbotte J P 2014 *Phys. Rev. B* **89** 245121
- [33] Wu X H 2020 *J. Heat Transfer* **142** 072802

# Dispersion properties of van der Waals phonon polaritons modulated by Weyl semimetals\*

Gu Zi-Heng<sup>1)</sup> Zang Qiang<sup>1)2)†</sup> Zheng Gai-Ge<sup>2)3)‡</sup>

1) (*School of Automation, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China*)

2) (*Jiangsu Collaborative Innovation Center on Atmospheric Environment and Equipment Technology, Nanjing 210044, China*)

3) (*School of Physics and Optoelectronic Engineering, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China*)

( Received 10 February 2023; revised manuscript received 18 August 2023 )

## Abstract

Surface phonon polaritons (SPhP) as an alternative constituent for mid-infrared (MIR) nanophotonic applications have attracted extensive attention and they maybe solve the intrinsic loss problem of plasmonics. SPhP arise in polar dielectrics due to IR-active phonon resonances, leading to negative permittivity within the Reststrahlen band. Although SPhP have great potential in enhancing the interaction between light and matter in the infrared region, it is still limited to enhance optical fields and fixed resonance band because of the existing Reststrahlen band. Moreover, active manipulating of phonon polaritons in MIR range remains elusive. The significant research progress of natural van der Waals (vdW) crystal and heterostructures have been made, which are characterized by an anisotropic polaritonic response, leading to elliptical, hyperbolic, or biaxial polaritonic dispersions. Among these structures, SPhP with hyperbolicity in  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> are of particular interest, due to not only the strong field confinement, low losses, and long lifetimes, but also the natural in-plane anisotropic dispersion. A heterostructure composed of a biaxial vdW material ( $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>) and a Weyl semimetal (WSM) is proposed to study the active tunability of anisotropic SPhP. The control of polaritons can show more degrees of freedom, which has not yet been addressed. Under the incident condition of transverse magnetic incident wave, the reflection coefficient and field distribution in the heterogeneous system are accurately solved by the 4×4 transfer matrix method, and the dispersion properties of anisotropic SPhP are described in detail. Variation of dispersion spectrum with azimuthal angle and  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> thickness is presented. The research results indicate that mode hybridization and dispersion manipulation can be realized by controlling the azimuth angle and the thickness of  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>. More importantly, the Fermi level of WSM enable the adjustment of dynamic dispersion curve, which depends on the change of external temperature. Isofrequency curves of hybridized SPhP at different Fermi levels are also demonstrated. By chemically changing the Fermi level of  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>, the topology of polariton isofrequency surfaces transforms from open shape to closed shape as a result of polariton hybridization. Therefore, our research is helpful in further optimizing and designing active optoelectronic devices based on vdW materials, which have good application prospects in infrared heat radiation and biosensing.

**Keywords:** Weyl semimetals, surface phonon polaritons, anisotropy, dispersion relation

**PACS:** 71.36.+c, 07.79.Fc

**DOI:** [10.7498/aps.72.20230167](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230167)

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20191396).

† Corresponding author. E-mail: [autozang@163.com](mailto:autozang@163.com)

‡ Corresponding author. E-mail: [eriot@126.com](mailto:eriot@126.com)



外尔半金属调制的范德瓦耳斯声子极化激元色散性质

顾梓恒 臧强 郑改革

Dispersion properties of van der Waals phonon polaritons modulated by Weyl semimetals

Gu Zi-Heng Zang Qiang Zheng Gai-Ge

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 197102 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230167

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230167>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

耦合Frenkel–Kontorova双链的格波解及其色散关系

Lattice wave solution and its dispersion relation of two coupled Frenkel–Kontorova chains

物理学报. 2022, 71(15): 154401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212362>

几种范德瓦耳斯铁电材料中新奇物性的研究进展

Research progress of novel properties in several van der Waals ferroelectric materials

物理学报. 2022, 71(12): 127305 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220349>

电子温度对螺旋波等离子体中电磁模式能量沉积特性的影响

Effects of electron temperature on energy deposition properties of electromagnetic modes propagating in helicon plasma

物理学报. 2020, 69(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201018>

螺旋波等离子体中螺旋波与Trivelpiece–Gould波模式耦合及线性能量沉积特性参量分析

Parametric analysis of mode coupling and liner energy deposition properties of helicon and Trivelpiece–Gould waves in helicon plasma

物理学报. 2020, 69(11): 115201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200062>

强碰撞磁化尘埃等离子体中的漂移波

Drift wave in strong collisional dusty magnetoplasma

物理学报. 2020, 69(17): 175201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200468>

各向异性三维非对称双锥五模超材料的能带结构及品质因数

Phononic band structure and figure of merit of three–dimensional anisotropic asymmetric double–cone pentamode metamaterials

物理学报. 2020, 69(13): 134302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200364>