

# $\alpha$ 相三氧化钼中各向异性双曲声子极化激元的耦合性质\*

钱黎明<sup>1)</sup> 孙梦然<sup>1)</sup> 郑改革<sup>1)2)†</sup><sup>1)</sup> (南京信息工程大学物理与光电工程学院, 南京 210044)<sup>2)</sup> (南京信息工程大学, 江苏省大气环境与装备技术协同创新中心, 江苏省气象光子与光电探测国际合作联合实验室, 南京 210044)

(2022 年 11 月 9 日收到; 2023 年 1 月 12 日收到修改稿)

天然双曲声子极化激元材料- $\alpha$ 相三氧化钼 ( $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>) 能够支持高度局域的表面声子极化激元 (surface phonon polaritons, SPhPs), 达到在中红外波段对光与物质相互作用的过程进行揭示以及调节的目的. 我们理论上提出并研究了基于 Kretschmann 结构的单层和多层  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的面内各向异性表面声子极化激元 (ASPhPs). 通过 4×4 传递矩阵法 (TMM) 快速准确地求解多层各向异性介质系统中的反射系数, 描述多层系统中激发的 SPhPs 及色散性质. 结果证实层间耦合可以通过多层膜的堆叠以及层厚来调制. 当入射角度大于全内反射角时, 满足 SPhP 激发的相位匹配条件. 在 40°角范围内, SPhP 谐振随着入射角度的增加迅速蓝移, 但是随后色散曲线不再随着入射角的增大而移动. 间隙层的增大会还会致使法布里-珀罗 (FP) 共振模式的激发. 层状异质结构中的 ASPhPs 是当今纳米光子技术的重要组成部分, 我们的研究有助于进一步优化和设计基于极化双曲材料的可控光电器件.

**关键词:**  $\alpha$  相三氧化钼, 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.72.20222144

## 1 引言

表面等离极化激元 (surface plasmon polaritons, SPPs) 已经在超材料与超表面、增强拉曼与非线性、增强光吸收和高灵敏探测等方面取得了突出的成果<sup>[1-3]</sup>. 但是, 其在发展过程中不可避免地受到以下限制: 1) 在光学频率中金属具有较高的固有损耗, 导致 SPPs 的许多应用无法实现; 2) 金属受到电子寿命的限制, 制约了在中远红外波段的应用. 近年来, 一种类似于 SPPs 的表面波- SPhPs 引起了广泛的研究兴趣<sup>[4-7]</sup>. SPhP 的激发是由于光子与声子的耦合, 是极化光学声子与入射光在中红外波段相互作用导致原子集体振荡的一种表面

波模式. 由于声子寿命可达皮秒量级, 相比于 SPP, SPhP 具有更强的光约束力和更低的光学损耗. 利用 SPhP 在中红外波段传感器、光声探测、热辐射源、表面光谱增强和强耦合等领域有很好的应用前景<sup>[8,9]</sup>. SPhPs 可以在极性晶体材料的纵波 (LO) 和横波 (TO) 声子频率之间被激发. 这个频率区域通常称为 Restrahlen 带 (RB). 在这个范围内, 极性电介质的介电常数响应是负的, 因此具有金属般的高反射率和支持类似于 SPP 的局域和传播 SPhP<sup>[10-12]</sup>. 然而, 迄今报道的面内高度限域和低损耗的 SPhP, 在面内均是各向同性地传播, 先天因素决定了其在纳米尺度上的光场调控自由度有限.

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, 已经被证明可

\* 江苏省自然科学基金 (批准号: BK20191396) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: 002382@nuist.edu.cn

以在双曲频率区域内支持的双曲表面声子极化激元 (HSPhPs)<sup>[13–16]</sup>. 最近, 研究人员在正交相三氧化钼 ( $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>)、五氧化二钒 (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) 等范德瓦尔斯晶体以及拓扑绝缘体材料中报道了面内自然存在的 HSPhPs, 在新型红外光子器件的设计和应用方面极具潜力<sup>[17,18]</sup>. 其中  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 中的高度受限和面内 ASPhPs 存在于中红外区域的三个 RB 中, 其中晶体沿三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>[19,20]</sup>. HSPhPs 模式属于电磁表面波, 具有横磁 (TM) 偏振依赖的特征, 同时由于其与光子在实际情况中动量不匹配, 目前的研究主要集中在激发方式和结构设计方面<sup>[21]</sup>. 对于  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 材料中 SPhPs 的高效耦合方式的研究不仅能够促进对 SPhPs 的认知, 更能拓展其在中红外光电子器件中的应用.

将双曲材料通过人工堆叠的方式组合, 使其中的 HSPhPs 发生相互耦合, 不仅可以进一步深入挖掘双曲材料的独特性质, 而且可以为纳米光子器件的相关应用提供更加广阔的平台. 本文研究了二维  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 中 HSPhPs 的色散及耦合问题. 主要工作集中在以下几点: 一是采用各向异性传输矩阵方法计算了 KRS5/ $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 异质结的杂化 SPhPs 的色散; 接着研究 KRS5/ $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>/氟化钡 (BaF<sub>2</sub>)/ $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 结构的近场耦合性质, 详细讨论了结构参数及入射角度对面内 APhPs 的影响规律. 通过研究不同间隙层厚度下的混合 SPhPs 模式, 在辐射热通量和光子隧穿强度调制方面具有潜在的应用.

## 2 模型和方法

### 2.1 $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的介电函数

$\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 是一种新型范德瓦耳斯晶体, 其支持的各向异性传输的 SPhPs 表现出面内双曲性. 该 SPhPs 也是由晶格振动的光学声子与电磁波耦合形成的, 其寿命长达 20 ps. 在中红外波段,  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的介电函数张量定义为<sup>[22,23]</sup>

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_x(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_y(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_z(\omega) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

$\epsilon_x(\omega)$ ,  $\epsilon_y(\omega)$  和  $\epsilon_z(\omega)$  代表三个主轴分量. 虽然这种各向异性晶体的介电常数是频率  $\omega$  的复杂函数,

但通常可以借助于洛伦兹模型近似.  $\epsilon_x(\omega)$ ,  $\epsilon_y(\omega)$  和  $\epsilon_z(\omega)$  可以按照如下的方式计算得到:

$$\epsilon_x(\omega) = \epsilon_x^\infty \left( \frac{(\omega_{x1}^{\text{LO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{x1}\omega}{(\omega_{x1}^{\text{TO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{x1}\omega} \right) \times \left( \frac{(\omega_{x2}^{\text{LO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{x2}\omega}{(\omega_{x2}^{\text{TO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{x2}\omega} \right) \times \left( \frac{(\omega_{x3}^{\text{LO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{x3}\omega}{(\omega_{x3}^{\text{TO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{x3}\omega} \right), \quad (2)$$

$$\epsilon_y(\omega) = \epsilon_y^\infty \left( \frac{(\omega_y^{\text{LO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_y\omega}{(\omega_y^{\text{TO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_y\omega} \right), \quad (3)$$

$$\epsilon_z(\omega) = \epsilon_z^\infty \left( \frac{(\omega_{z1}^{\text{LO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{z1}\omega}{(\omega_{z1}^{\text{TO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{z1}\omega} \right) \times \left( \frac{(\omega_{z2}^{\text{LO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{z2}\omega}{(\omega_{z2}^{\text{TO}})^2 - \omega^2 - i\gamma_{z2}\omega} \right). \quad (4)$$

模型中涉及的参数列在表 1 中. 图 1 (a) 和 (b) 分别为  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 介电函数的实部和虚部. 可以发现在 8 $\mu\text{m}$  到 20 $\mu\text{m}$  的中红外范围内有 3 个 RB: 波段 1 在 11.75 到 18.35  $\mu\text{m}$  的范围内, 起源于沿 [001] 结晶 ( $y$  轴) 方向的面内声子模式. 带 2 和带 3 则分别处在 10.29 至 12.19  $\mu\text{m}$  和 9.90 至 10.44  $\mu\text{m}$  的范围内, 它们分别起源于沿 [100] ( $x$  轴) 和 [010] ( $z$  轴) 方向的面内声子模式. 在这些区域内光传输具有明显的反射特性.

表 1  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 的介电函数的洛伦兹模型对应的参数  
Table 1. The parameters corresponding to the Lorentzian model of the dielectric function of  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>.

主轴	模式序数	$\epsilon^\infty$	$\omega_{\text{TO}}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{LO}}/\text{cm}^{-1}$	$\gamma/\text{cm}^{-1}$
$x$	1		506.7	534.3	49.1
$x$	2	5.86	824.1	963	6
$x$	3		998.7	999.2	0.35
<hr/>					
		$\epsilon_y^\infty$	$\omega_{\text{TO}}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{LO}}/\text{cm}^{-1}$	$\gamma/\text{cm}^{-1}$
$y$	1	6.59	544.6	850.1	9.5
<hr/>					
		$\epsilon_z^\infty$	$\omega_{\text{TO}}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{LO}}/\text{cm}^{-1}$	$\gamma/\text{cm}^{-1}$
$z$	1		444	508	1.5
$z$	2	4.47	956.7	1006.9	1.5

### 2.2 基于衰减全反射的表面声子共振激发

通过 Krestchamann 装置利用衰减全反射 (ATR) 方法可以有效地激发 SPhP 并测量光谱响

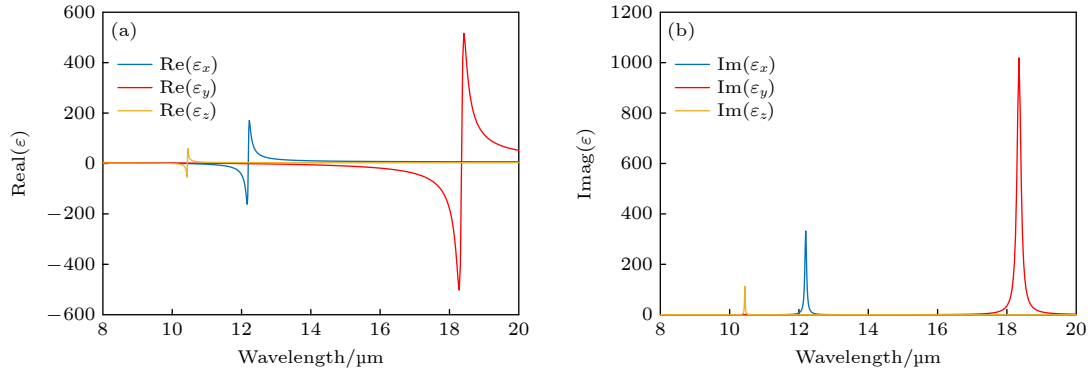


图 1 研究涉及的材料介电函数曲线 (a), (b) 对应通过 (1) 式—(4) 式计算得到的介电函数的实部和虚部

Fig. 1. The dielectric function curves of the materials involved in the study: (a), (b) The real part and imaginary part of the dielectric function calculated by Eq. (1)–Eq.(4), respectively.

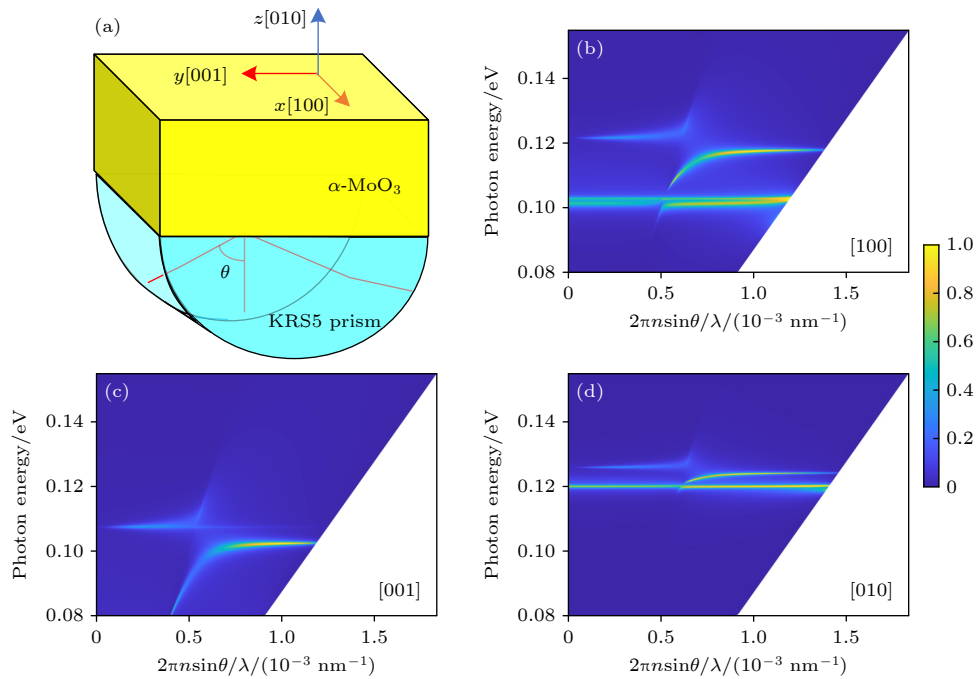


图 2 (a) 单一  $\alpha$ - $\text{MoO}_3$  层色散曲线的研究模型; (b)–(d) 计算得到的面内波矢量和光子能量函数的反射光谱. 亮线代表不同方向上 SPhP 的色散曲线

Fig. 2. (a) Model of the dispersion curve of a single  $\alpha$ - $\text{MoO}_3$  layer; (b)–(d) the calculated reflectance spectra as a function of in-plane wave vector and photon energy. Bright lines represent the dispersion curves of SPhP in different directions.

应, 如图 2(a) 所示. 在此结构中, 面内动量由入射角和棱镜的折射率共同决定, 棱镜的色散关系可用公式表示为:  $k_y = \sqrt{\varepsilon_{\text{prism}}} \frac{\omega}{c} \sin \theta$ . 其中,  $k_y$  是倏逝波平行平面的波矢量,  $\varepsilon_{\text{prism}}$  是棱镜的介电常数, 对于 KRS5 棱镜,  $\varepsilon_{\text{prism}} = 5.76$  [24]. 当棱镜全反射产生的倏逝波在棱镜与  $\alpha$ - $\text{MoO}_3$  界面处发生耦合, 当  $k_y$  与 SPhP 波矢相等时, SPhP 被激发, 其色散关系可以通过各项异性传输矩阵方法计算得到. 图 2(b)–(d) 分别为三个方向上的色散吸收图谱,  $\alpha$ - $\text{MoO}_3$  的厚度固定在  $1 \mu\text{m}$ . 水平轴  $k_x$  代表面内

波矢量, 定义为  $k_x = 2\pi n \sin \theta / \lambda$ . 其中  $\theta$  是入射角, 从  $0^\circ$  到  $90^\circ$  变化. 色散图谱可以明显地划分为声子区和光子区. 另外一个显著的特点是电磁波不能在 LO 和 TO 声子频率内传播, 入射到晶体上的外部辐射在这个频率范围内被完全反射. 同时, 在真空中光线右侧, 纵向和横向声子频率 RB 内可以清楚地发现 SPhP 色散曲线. 由于  $\text{Re}[\varepsilon_x] < 0$ ,  $\text{Re}[\varepsilon_y] < 0$ ,  $\text{Re}[\varepsilon_z] < 0$ , 表明这些模式仅限于材料表面, 并且不会形成驻波.

在介电函数基础上研究单层  $\alpha$ - $\text{MoO}_3$  晶体反

射率, 设薄膜  $\alpha\text{-MoO}_3$  厚度为  $1\ \mu\text{m}$ , 晶轴方向满足  $[100]\text{-}x$ ,  $[001]\text{-}y$  和  $[010]\text{-}z$ , 仿真波段为  $9\text{--}14\ \mu\text{m}$ , 入射波设为 TM 波. 由于  $\alpha\text{-MoO}_3$  的各向异性光学响应, 沿三个面内方向  $[100]$ ,  $[001]$  和  $[010]$  的反射谱明显不同 (如图 3 所示). 模拟结果证实了 Reststrahlen 带内的高反射, 以及在 TO 声子频率

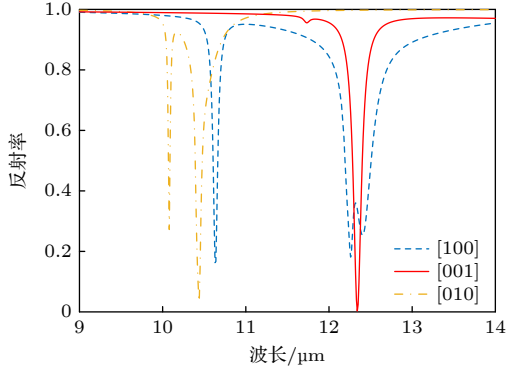


图 3 由厚度为  $1\ \mu\text{m}$  的  $\alpha\text{-MoO}_3$  组成的 Kretschmann 结构对应的反射谱线

Fig. 3. Reflection spectral corresponding to the Kretschmann structure composed of  $\alpha\text{-MoO}_3$  with a thickness of  $1\ \mu\text{m}$ .

处的反射谷 (与 SPhP 谐振对应). 这些特征的出现是由于入射的波矢量和 SPhP 频率匹配的结果.

### 3 双层 $\alpha\text{-MoO}_3$ 中的 APhPs 耦合性质

$\alpha\text{-MoO}_3$  中 SPhP 的传播特性本质上与  $\alpha\text{-MoO}_3$  的各向异性晶体结构有关. 虽然平面内各向异性的 SPhP 可以通过扭转双层范德华材料中的单个薄层来控制, 但通过外部手段来调制 APhPs 是另外一种有效的方式. 我们设计如图 4 所示的双层  $\alpha\text{-MoO}_3$  模型, 该模型基底为 KRS5 棱镜, 中间间隙为单层  $\text{BaF}_2$ .  $\alpha\text{-MoO}_3$  的厚度固定在  $d = 1\ \mu\text{m}$ , 在研究过程中主要改变间隙层的厚度  $t$  来实现 APhPs 之间的耦合. 光源通过玻璃介质入射到  $\alpha\text{-MoO}_3$  上的入射角为  $\theta$ . 为了获得共振角, 入射角扫描是从  $20^\circ\text{--}80^\circ$  生成的, 经过 401 次迭代. 我们在这里只考虑 TM 极化, 并让声子极化激元沿  $x$  方向. 在包含各向异性薄层  $\alpha\text{-MoO}_3$  结构中, 传输矩阵可以计算为:  $M = M_1 P M_2$  [25,26].

其中

$$M_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_{0z}\varepsilon_1}{k_{1z}\varepsilon_0} & 1 - \frac{k_{0z}\varepsilon_1}{k_{1z}\varepsilon_0} & 0 & 0 \\ 1 - \frac{k_{0z}\varepsilon_1}{k_{1z}\varepsilon_0} & 1 + \frac{k_{0z}\varepsilon_1}{k_{1z}\varepsilon_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{1z} + k_{0z}}{\omega\mu_0} \right) & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{1z} - k_{0z}}{\omega\mu_0} \right) \\ 0 & 0 & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{1z} - k_{0z}}{\omega\mu_0} \right) & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{1z} + k_{0z}}{\omega\mu_0} \right) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$M_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_{2z}\varepsilon_0}{k_{0z}\varepsilon_2} & 1 - \frac{k_{2z}\varepsilon_0}{k_{0z}\varepsilon_2} & 0 & 0 \\ 1 - \frac{k_{2z}\varepsilon_0}{k_{0z}\varepsilon_2} & 1 + \frac{k_{2z}\varepsilon_0}{k_{0z}\varepsilon_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{0z} + k_{2z}}{\omega\mu_0} \right) & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{0z} - k_{2z}}{\omega\mu_0} \right) \\ 0 & 0 & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{0z} - k_{2z}}{\omega\mu_0} \right) & \frac{\omega\mu_0}{k_{1z}} \left( \frac{k_{0z} + k_{2z}}{\omega\mu_0} \right) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

这里,  $k_{0z} = \sqrt{\varepsilon_0}\omega \cos \theta_i / c$  表示入射光沿  $z$  方向的波矢量分量,  $k_{1z} = \sqrt{\varepsilon_1}\omega \cos \theta_i / c$  和  $k_{2z} = \sqrt{\varepsilon_2}\omega \cos \theta_i / c$  分别表示入射光在 KRS5 棱镜和出射介质中 (此处为  $\text{BaF}_2$ ) 的波矢  $z$  方向分量,  $\omega$  是角频率. 当入射光在均质介质 (即  $\text{BaF}_2$ , 折射率取为 1.4 [27]) 中传播时, 对应的传播矩阵表示为

$$P = \begin{pmatrix} \exp(-ik_{2z}d) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(-ik_{2z}d) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-ik_{2z}d) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-ik_{2z}d) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

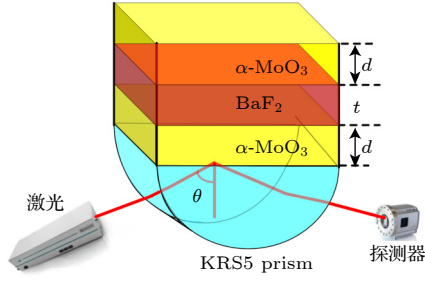
图4 双层  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 耦合的多层膜模型

Fig. 4. Stacked film model of double-layer  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> for coupling research.

从整个结构的传递矩阵  $M$ , 可以得到反射系数如下:

$$r_{pp} = \frac{M_{31}M_{23} - M_{21}M_{33}}{M_{13}M_{31} - M_{11}M_{33}}. \quad (8)$$

$$r_{sp} = \sqrt{\left(\frac{k_{1z}}{\omega\mu_0}\right)^2 + \left(\frac{k_{1x}}{\omega\mu_0}\right)^2} \frac{M_{43}M_{31} - M_{41}M_{33}}{M_{13}M_{31} - M_{11}M_{33}}. \quad (9)$$

因此, TM 偏振下的反射率可以表示如下:

$$R_p = |r_{pp}|^2 + |r_{sp}|^2. \quad (10)$$

通过这种方法可以计算偏振反射系数的虚部  $\text{Im}(r_{pp})$ , 用来分析多层结构中 SPhPs 的色散 [28].

图 5 给出了不同厚度的 BaF<sub>2</sub> 对应的反射图谱, 图 5(a)  $t = 20$  nm, 图 5(b)  $t = 100$  nm, 图 5(c)  $t = 500$  nm, 图 5(d)  $t = 1000$  nm. 从图 5 可以看出, 当入射角度大于全内反射角时, 满足 SPhP 激发的相位匹配条件. 当入射角在 40° 范围内, SPhP 随着入射角度的增加迅速蓝移. 但是随后色散曲线不再随着入射角的增大而改变. 另一方面,  $t$  的增大会致使法布里-珀罗共振模式的激发, 在图 5(c) 和图 5(d) 中可以清楚地看到. 与图 5(b) 结果比较, 会发现双层  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 组成的复合结构对应的反射图谱在 750—850 cm<sup>-1</sup> 频率范围内表现出明显的交叉劈裂混合状态.

此外, 为了深入地揭示双层  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 之间 SPhP 的耦合规律, 图 6 计算了不同频率和间隙厚度下系统的等频曲线. 其中图 6(a)—(c) 分别对应在频率 820 cm<sup>-1</sup> 处  $t = 100$  nm,  $t = 500$  nm 和  $t = 1000$  nm 处的情形. 从图 6 明显地观察到, 由于存在一定的衰减长度, 波矢范围随着间隙的增加在收缩, 但是当  $t$  增大到 500 nm 和 1000 nm 时, 等频线基本没有变化, 在图 6(d)—(i) 中发现类似的现象. 图 6(d)—(f) 分别对应在频率 900 cm<sup>-1</sup> 处  $t = 100$  nm,  $t = 500$  nm 和  $t = 1000$  nm 处的情形. 当两层  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 靠近时, 与  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> 相关的 SPhP 的倏逝场可以

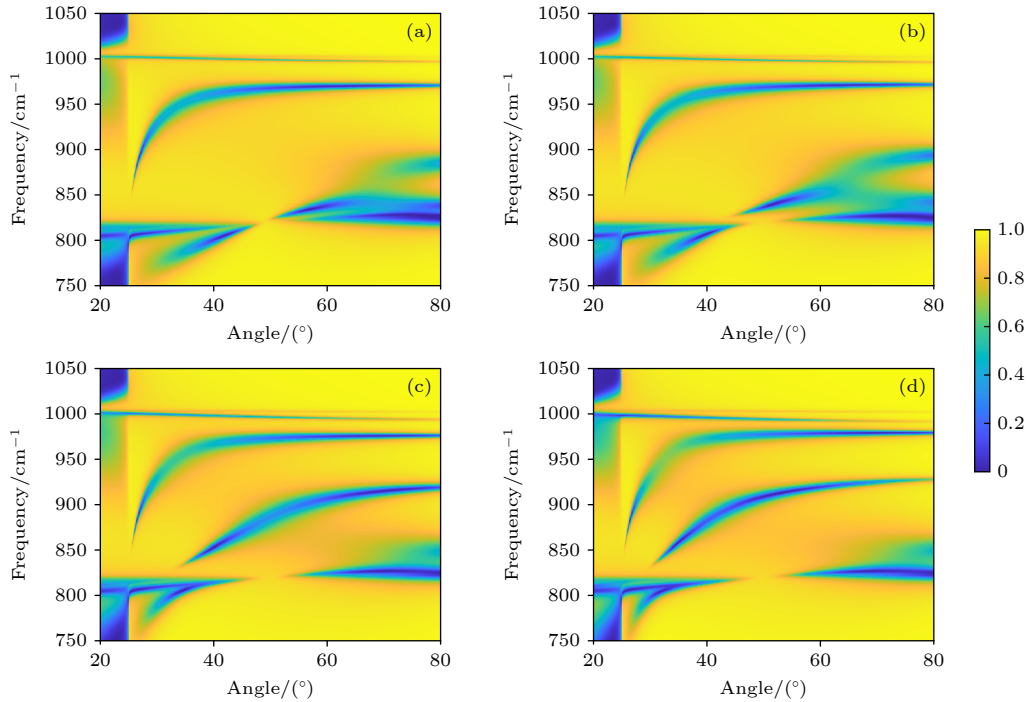


图 5 计算得到的在不同  $t$  条件下反射率随入射角度的变化图谱 (a)  $t = 20$  nm; (b)  $t = 100$  nm; (c)  $t = 500$  nm; (d)  $t = 1000$  nm

Fig. 5. Calculated spectrum of reflectance variation with incident angle under different conditions: (a)  $t = 20$  nm; (b)  $t = 100$  nm; (c)  $t = 500$  nm; (d)  $t = 1000$  nm.



相互作用, 导致两条色散曲线. 两条色散曲线的形状也会随着间隙层厚度的变化而改变. 图 6(g)—(i) 分别对应在频率  $1000\text{ cm}^{-1}$  处  $t = 100\text{ nm}$ ,  $t = 500\text{ nm}$  和  $t = 1000\text{ nm}$  处的情形. 在此频率处, 两层  $\alpha\text{-MoO}_3$  之间的耦合作用非常微弱, 几乎消失.

图 7(a) 中显示了  $t = 1000\text{ nm}$ ,  $\theta = 50^\circ$  时的反射率光谱. 在 RB 内具有明显的高反射率, 以及  $912, 990$  和  $1003\text{ cm}^{-1}$  处的三个谐振. 由临界耦合

的条件, 我们知道 SPhP 共振的幅度和宽度很大程度上取决于间隙层厚度. 图 7(b) 中给出了以频率和位置为函数的  $|E_x|$  场幅度. 在 SPhP 共振频率下 ( $912\text{ cm}^{-1}$ ), 可以观察到  $\alpha\text{-MoO}_3$  与  $\text{BaF}_2$  界面处的场增强. 由于部分激发返回棱镜导致一定的辐射损耗, 所以靠近棱镜的  $\alpha\text{-MoO}_3$  层中的场强度相对较小. 在共振频率  $990\text{ cm}^{-1}$  处, 在上下  $\alpha\text{-MoO}_3$ - $\text{BaF}_2$  界面处都有场增强峰, 并在内部呈现相位

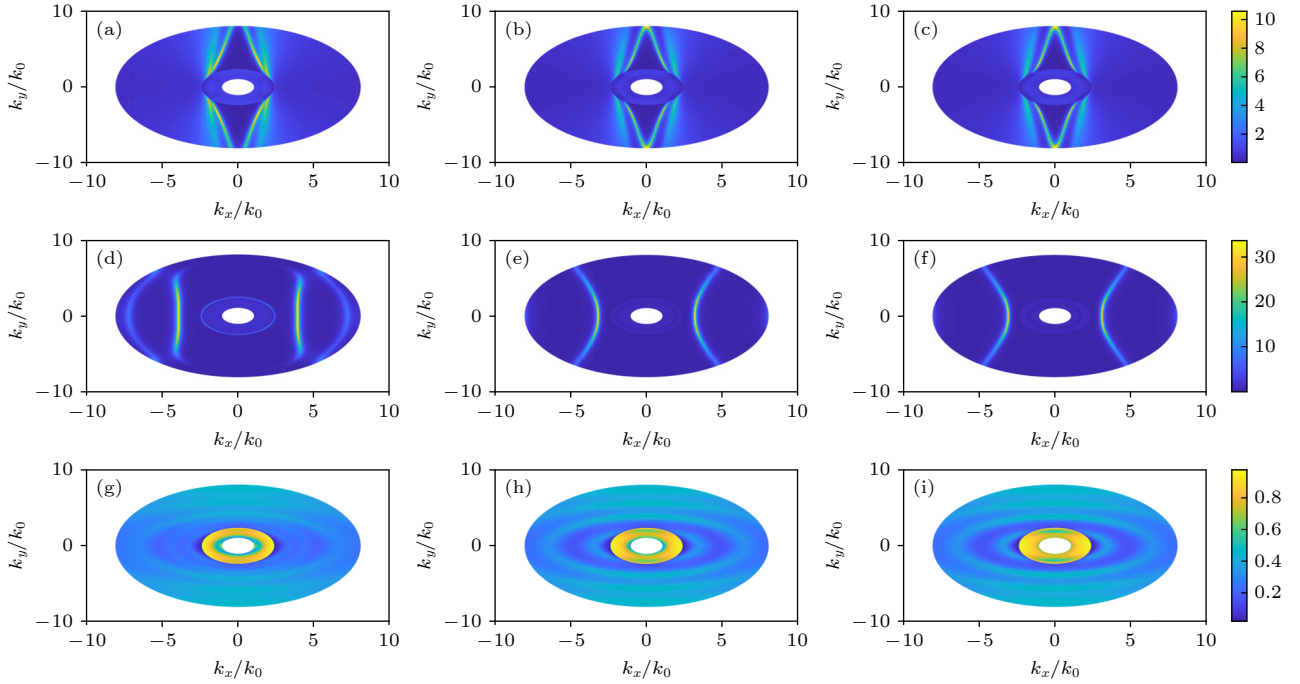


图 6 (a)–(c) 频率为  $820\text{ cm}^{-1}$  处  $t = 100\text{ nm}$ ,  $t = 500\text{ nm}$  和  $t = 1000\text{ nm}$  时数值计算得到的等频曲线; (d)–(f) 频率为  $900\text{ cm}^{-1}$  处  $t = 100\text{ nm}$ ,  $t = 500\text{ nm}$  和  $t = 1000\text{ nm}$  时数值计算得到的等频曲线; (g)–(i) 频率为  $1000\text{ cm}^{-1}$  处  $t = 100\text{ nm}$ ,  $t = 500\text{ nm}$  和  $t = 1000\text{ nm}$  时数值计算得到的等频曲线

Fig. 6. (a)–(c) The iso-frequency curves obtained by numerical calculation with  $t = 100\text{ nm}$ ,  $t = 500\text{ nm}$  and  $t = 1000\text{ nm}$  at a frequency of  $820\text{ cm}^{-1}$ ; (d)–(f) the iso-frequency curves obtained by numerical calculation at  $t = 100\text{ nm}$ ,  $t = 500\text{ nm}$  and  $t = 1000\text{ nm}$  at a frequency of  $900\text{ cm}^{-1}$ ; (g)–(i) the iso-frequency curves obtained by numerical calculation at  $1000\text{ cm}^{-1}$  with  $t = 100\text{ nm}$ ,  $t = 500\text{ nm}$  and  $t = 1000\text{ nm}$ .

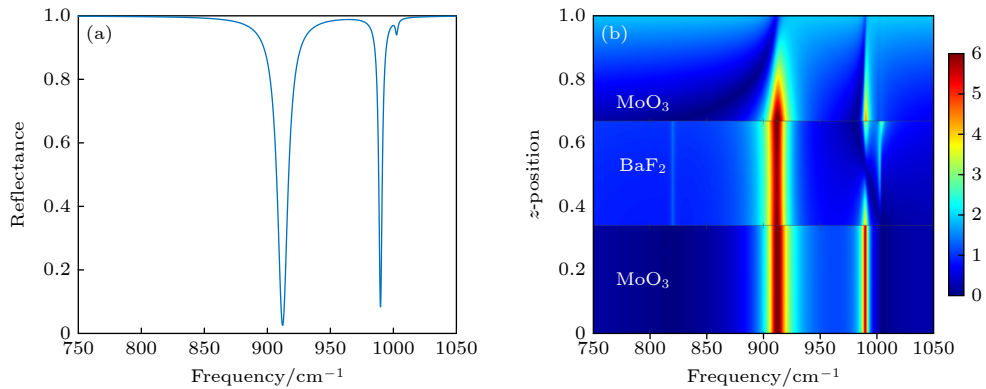


图 7 (a) 在 Kretschmann 结构中激发的 SPhP 反射谱线,  $t = 1000\text{ nm}$ ,  $\theta = 50^\circ$ ; (b) 多层界面处的  $|E_x|$  强度分布

Fig. 7. SPhP reflection spectral excited in the Kretschmann structure with  $t = 1000\text{ nm}$  and  $\theta = 50^\circ$ ; (b)  $|E_x|$  intensity distribution within the multilayered structure.

翻转, 表明具有一阶波导性质的模式被激发. 对于  $1003\text{ cm}^{-1}$  处的谐振, 其强度明显低于  $912$  和  $990\text{ cm}^{-1}$  处对应的谐振强度. 因此, 为了确定更复杂结构中的非线性源, 多层系统内部的电场分布是关键工具.

## 4 结 论

为了研究单层和多层  $\alpha\text{-MoO}_3$  的面内 ASPhPs 的激发及耦合性质, 设计了一种基于 Kretschmann 结构的多层膜结构, 基本组成形式为  $\text{KRS5 棱镜}/\alpha\text{-MoO}_3/\text{BaF}_2/\alpha\text{-MoO}_3$ . 通过  $4\times 4$  TMM 对含多层各向异性介质的复合结构就行分析和设计, 计算得到了不同频率处的反射系数, 描述了激发的 SPhPs 色散性质和双层  $\alpha\text{-MoO}_3$  支持的 SPhPs 耦合. 当入射角度大于全内反射角时, 满足 SPhP 激发的相位匹配条件, 对应于反射谱线中的共振谷. 在  $40^\circ$  范围内, SPhP 随着入射角度的增加迅速蓝移. 但是随后色散曲线不再随着入射角的增大而改变. 当两层  $\alpha\text{-MoO}_3$  靠近时, 与  $\alpha\text{-MoO}_3$  相关的 SPhP 的倏逝场可以相互作用, 导致两条色散曲线. 两条色散曲线的形状也会随着间隙层厚度的变化而改变. 该设计无需复杂的刻蚀工艺, 简化了支持 ASPhPs 器件的制备工艺. 描述 ASPhPs 基本结构的色散和耦合性质, 对双曲波导的设计、中红外全向吸收和热发射以及声子增强的红外吸收光谱仪等的研究具有较好的参考价值.

## 参考文献

- [1] Guan F X, Dong S H, He Q, Xiao S Y, Sun S L, Zhou L 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 157804 (in Chinese) [管福鑫, 董少华, 何琼, 肖诗逸, 孙树林, 周磊 2020 物理学报 **69** 157804]
- [2] Zhu X P, Zhang S, Shi H M, Chen Z Q, Quan J, Xue S W, Zhang J, Duan H G 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 247301 (in Chinese) [朱旭鹏, 张轼, 石惠民, 陈智全, 全军, 薛书文, 张军, 段辉高 2019 物理学报 **68** 247301]
- [3] Shu F Z, Fan R H, Wang J N, Peng R W, Wang M 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 147303 (in Chinese) [束方洲, 范仁浩, 王嘉楠, 彭茹雯, 王牧 2019 物理学报 **68** 147303]
- [4] Ma S Q, Deng A L, Lü B S, Hu C, Shi Z W 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 127104 (in Chinese) [马赛群, 邓奥林, 吕博赛, 胡成, 史志文 2022 物理学报 **71** 127104]
- [5] Jacob Z 2014 *Nat. Mater.* **13** 1081
- [6] Chen M, Lin X, Dinh T H, Zheng Z, Shen J, Ma Q, Chen H, Jarillo-Herrero P, Dai S 2020 *Nat. Mater.* **19** 1307
- [7] Wu X, Fu C J 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **168** 120908
- [8] Feng K, Streier W, Zhong Y, Hoffman A J, Wasserman D 2015 *Opt. Express* **23** A1418
- [9] Passler N C, Ni X, Hu G, Matson J R, Carini G, Wolf M, Schubert M, Alu A, Caldwell J D, Thomas G Folland T G, Paarmann A 2022 *Nature* **602** 595
- [10] Dai S, Quan J, Hu G, Qiu C, Tao T, Li X, Alu A 2019 *Nano Lett.* **19** 1009
- [11] Zhao B, Zhang Z M 2017 *Opt. Express* **25** 7791
- [12] Zheng Z, Xu N, Oscurato S L, Tamagnone M, Sun F, Jiang Y, Ke Y, Chen J, Huang W, Wilson W L, Ambrosio A, Deng S, Chen H 2019 *Sci. Adv.* **24** eaav8690
- [13] Larciprete M C, Dereshgi S A, Centini M, Aydin K 2022 *Opt. Express* **30** 12788
- [14] Ni G, McLeod A S, Sun Z, Matson J R, Lo C F B, Rhodes D A, Ruta F L, Moore S L, Vitalone R A, Cusco R, Artús L, Xiong L, Dean C R, Hone A J, Millis J C, Fogler M M, Edgar J H, Caldwell J D, Basov D N 2021 *Nano Lett.* **21** 5767
- [15] Ma W, Hu G, Hu D, Chen R, Sun T, Zhang X, Dai Q, Zeng Y, Alù A, Qiu C W, Li P 2021 *Nature* **596** 362
- [16] Pavlidis G, Schwartz J J, Matson J, Folland T, Liu S, Edgar J H, Caldwell J D, Centrone A 2021 *APL Mater.* **9** 091109
- [17] Chen M, Sanders S, Shen J, Li J, Harris E, Chen C, Ma Q, Edgar J H, Manjavacas A, Dai S 2022 *Adv. Opt. Mater.* **10** 2102723
- [18] Toyin O R, Ge W X, Gao L 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 016801
- [19] Wei C W, Cao T 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 048701 (in Chinese) [魏晨崧, 曹瞰 2021 物理学报 **70** 048701]
- [20] Chen M, Lin X, Dinh T, Zheng Z, Shen J, Ma Q, Chen H, Jarillo-Herrero P, Dai S 2020 *Nat. Mater.* **19** 1372
- [21] Gong Y, Zhao Y, Zhou Z, Li D, Mao H, Bao Q, Zhang Y, Wang G 2022 *Adv. Opt. Mater.* **10** 2200038
- [22] Hajian H, Rukhlenko I D, Ercaglar V, Hanson G, Ozbay E 2022 *Appl. Phys. Lett.* **120** 112204
- [23] Zhang Q, Ou Q, Hu G, Liu J, Dai Z, Fuhrer M S, Bao Q, Qiu C W 2021 *Nano Lett.* **21** 3112
- [24] Passler N C, Paarmann A 2017 *J. Opt. Soc. Am. B:Opt. Phys.* **34** 2128
- [25] Wu X H, Fu C J, Zhang Z M 2020 *J. Heat Transfer* **142** 072802
- [26] Passler N C, Jeannin M, Paarmann A 2020 *Phys. Rev. B* **101** 165425
- [27] Li H H 1980 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9** 161
- [28] Xia S, Zhai X, Wang L, Xiang Y, Wen S 2022 *Phys. Rev. B* **106** 075401

# Coupling interactions of anisotropic hyperbolic phonon polaritons in double layered orthorhombic molybdenum trioxide<sup>\*</sup>

Qian Li-Ming<sup>1)</sup> Sun Meng-Ran<sup>1)</sup> Zheng Gai-Ge<sup>1)2)†</sup>

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

2) (*Jiangsu International Joint Laboratory on Meteorological Photonics and Optoelectronic Detection, Jiangsu Collaborative Innovation Center on Atmospheric Environment and Equipment Technology, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China*)

( Received 9 November 2022; revised manuscript received 12 January 2023 )

## Abstract

The natural hyperbolic phonon polariton material-orthorhombic molybdenum trioxide ( $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>) has recently attracted much interest, due to the associated ultra-confinement of light and enhanced light-matter interactions. We theoretically propose and study the in-plane anisotropic phonon polaritons (APhPs) in the Kretschmann structure with monolayer and dual layers  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub>. The excitation of phonon polaritons and the corresponding dispersion properties in this multilayer system are studied by using a generalized 4×4 transfer matrix method (TMM). The frequency dispersions with geometrical parameters are also discussed in detail. The results confirm that the interlayer coupling can be modulated by stacking the multilayer films and regulating the thickness of each layer. More interestingly, when the distance between double  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> layers is much smaller than the propagation length of PhPs, a strong coupling phenomenon occurs, and the photon tunneling probability and intensity can be greatly improved. When the incident angle is greater than the total internal reflection angle, the phase matching condition for SPhP excitation can be satisfied. Within the 40° incident angle, the SPhP blue-shifts rapidly with the increase of incident angle. But then the dispersion curve no longer changes with increase of incidence angle. The enlargement of the interstitial layer can also lead the Fabry-Perot (FP) resonance mode to be excited. The APhP in layered heterostructure is an important part of today's nanophotonic technology, our study can help optimize and design tunable optoelectronic devices based on hyperbolic materials.

**Keywords:** orthorhombic molybdenum trioxide, surface phonon polaritons, anisotropic, dispersion

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

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222144

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

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: 002382@nuist.edu.cn



## $\alpha$ 相三氧化钼中各向异性双曲声子极化激元的耦合性质

钱黎明 孙梦然 郑改革

## Coupling interactions of anisotropic hyperbolic phonon polaritons in double layered orthorhombic molybdenum trioxide

Qian Li-Ming Sun Meng-Ran Zheng Gai-Ge

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 077101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222144

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222144>

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

腔光子-自旋波量子耦合系统中各向异性奇异点的实验研究

Observation of the anisotropic exceptional point in cavity magnonics system

物理学报. 2020, 69(4): 047103 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191632>

低维材料极化激元及其耦合特性

Polaritons in low-dimensional materials and their coupling characteristics

物理学报. 2022, 71(12): 127104 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220272>

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>

层状氧化钼的电子结构、磁和光学性质第一原理研究

First-principles study of electronic structure, magnetic and optical properties of laminated molybdenum oxides

物理学报. 2019, 68(5): 057101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181962>

黑磷各向异性拉曼光谱表征及电学特性

Anisotropic Raman characterization and electrical properties of black phosphorus

物理学报. 2021, 70(3): 037801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201271>

表面等离极化激元的散射及波前调控

Scatterings and wavefront manipulations of surface plasmon polaritons

物理学报. 2020, 69(15): 157804 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200614>