周期性超材料中的尺寸效应

Victor V. Gozhenko

乌克兰国家科学院物理研究所，乌克兰基辅瑙基大道*46*号，邮编*03680*[*]

arXiv:2301.03518v1 [physics.optics] 9 Jan 2023

摘要

本文考察了周期性电磁超材料的光学性质随其相对晶胞尺寸 d/λ变化的情况。针对若干实际超材料，在涵盖其不同工作状态的宽广相对晶胞尺寸范围内，对反射 R 和透射 T 系数进行了数值计算。文中讨论了 R 和 T 行为的特点，并阐明了这些特点的成因。所得结果支持这样一种观点：对于晶胞尺寸与入射波长相当的超材料，均匀化概念本身并不适用；这一结论与此前发表的一些结果相反。

I. 引言

大多数电磁超材料都是周期性结构，其单元由人工嵌入体构成，经过设计后可使整个超材料样品呈现特定的电磁响应（例如负折射或选择性反射率）。如果周期性超材料的单元尺寸

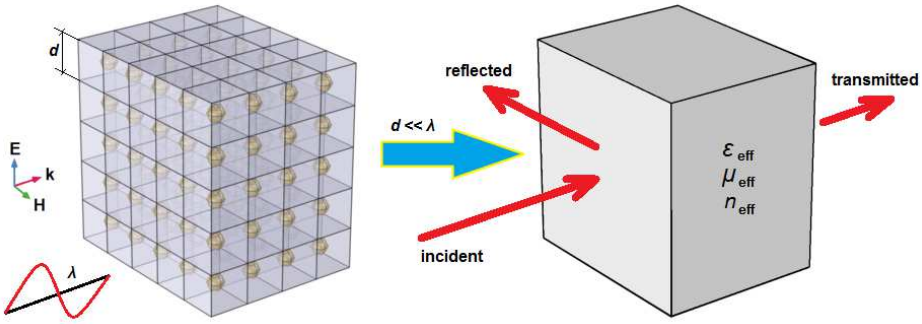


图 1. 超材料均匀化的概念。由尺寸为 d 的单元构成的周期性超材料受到波长为 λ 的入射电磁波照射。如果 $d \ll \lambda$，那么入射波就无法“感知”超材料的非均匀性，超材料本身的表现就像一种连续均匀介质，其参数为 ε_{eff}、 μ_{eff}、 n_{eff}。如果超材料与相应均匀介质的光学性质（例如反射率和透射率）相同，那么用该均匀介质表示超材料就是正确的。

* vigo@iop.kiev.ua

d（晶格常数）远小于其工作波长 λ, $d \ll \lambda$，则可将其视为连续均匀介质。在这种情况下，可用有效参数来表征超材料——有效介电常数 ε_{eff}、磁导率 μ_{eff} 和折射率 $n_{\text{eff}} = \sqrt{\varepsilon\mu}$，见图 1。

计算给定超材料的有效参数值（包括其夹杂物的形状、尺寸和材料，以及晶胞的尺寸和几何形状）十分重要，例如，这有助于预测该超材料在实验和应用中呈现的光学性质。计算过程基于求出晶胞内的局部电场和磁场，并对这些场在整个晶胞内进行适当的平均。对于简单夹杂物，有时可以通过解析方法完成；一般情况下则需要进行数值计算。

为便于计算周期性超材料的有效参数，人们提出了多种均匀化理论和方法（例如，参见文献 1–6）。这些方法的差异尤其体现在计算超材料中局部场平均值的方式上。

在超材料应用中，条件 $d \ll \lambda$（例如，$d = 0.01\lambda$）并非总能满足。例如，光学应用（其中 $\lambda \approx 400 \ldots 800\,\text{nm}$）意味着晶胞尺寸应在 50 nm 左右或更小。然而，由于晶胞尺寸越小，超材料样品的制造工艺成本越高，因此此类应用中常使用 $d = 200 \ldots 300$ nm（即 $d/\lambda \approx 0.25 \ldots 0.5$）的超材料。另一方面，有些应用——尤其是负折射率应用——要求超材料工作在谐振区（此时可以实现负的 n），也就是说 $d/\lambda \approx 0.5 \ldots 1.0$。因此，一些作者尝试提出适用于更大范围 d/λ 值的均匀化方法，而不只是适用于较小的 d。其中一些作者认为，他们的方法适用于单元尺寸较大乃至任意的超材料（例如，文献 1、3 和 6）。

严格来说，任何均匀化方法都只能在长波长（准静态）范围内为超材料给出合理结果，此时满足条件 $d \ll \lambda$。相反，在波长较短（相对于单元尺寸）的情况下，即 $d \gg \lambda$，均匀化概念本身就会失效，超材料不能被视为均匀介质。在这种情况下，入射波在超材料中的传播遵循几何光学定律，而入射波被超材料夹杂物反射

起着至关重要的作用。最后，在中间范围内，即 $d \approx \lambda$ 时，均匀化方法不应奏效，因为这些方法没有考虑衍射效应（例如布拉格反射），而这些效应在此情况下十分显著。

此前 [4], 已经表明，随着超材料的相对晶胞尺寸从零增大到约 $d/\lambda = 0.4$，不同均匀化方法得出的结果会越来越分歧。在较大的 d/λ 值下，仍可形式上计算超材料均匀化后的有效参数，但这些参数无法正确描述超材料的光学性质。

本文在更宽的相对晶胞尺寸范围 d/λ内考察周期性超材料的光学性质，并更详细地讨论晶胞尺寸对超材料光学行为的影响。

II. 基本公式

我们关注于计算超材料的可观测量——透射率 T 和反射率 R 。它们是无量纲系数，定义如下：

$$T = \frac{I_{\mathrm{tr}}}{I_0}, \qquad R = \frac{I_{\mathrm{ref}}}{I_0},$$

其中， I_0、 I_{tr}、 I_{ref} 分别是入射波、透过超材料的波和反射波的强度。强度是相应波的能流密度，可通过对这些波的坡印廷矢量 S 取时间平均值来计算（为简便起见，下文省略下标）：

$$I = \langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{\tau} \int_{t}^{t+\tau} \mathbf{S}(t')dt'$$

对于单色入射平面波的情况

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]}, \tag{1}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]} \tag{2}$$

所有涉及的波也都是单色波，其强度可由下式计算：

$$I = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*),$$

其中，星号表示复共轭。根据电磁波与有损介质相互作用所遵循的能量守恒定律，可得

$$T + R + A = 1,$$

其中， A是介质的吸收率（吸收系数），用于定义电磁能量在介质内部被吸收的速率。如果已知介质的 T 和 R 值（即通过实验测得或理论计算得出），则可求出其吸收率：

$$A = 1 - T - R.$$

III. 数值结果与讨论

针对具有立方晶格、由各种形状夹杂物构成的超材料进行了数值模拟。这些夹杂物包括超材料科学及其应用中常用的球体、杆、开口环谐振器（SRR）和Ω形夹杂物（“Ω形结构”）。计算了模拟超材料在多个入射角 θ下、相对晶胞尺寸 d/λ 取较大范围时的光反射率 R 和透射率 T。除计算 R 和透射率 T 外，还给出了超材料在不同工作状态下晶胞内的局部 E 场分布。所有计算均使用 COMSOL Multiphysics 软件完成。以下展示部分具有代表性的计算结果。

模拟超材料晶胞的示意图如图 2 所示。这些材料主要是厚度为 d 的无限单层结构，而图 2d 所示的是厚度为 $3d$ 的三层结构。所有材料的单元尺寸 $d = 500$ nm 均相同，并且在所有计算中保持不变。通过改变入射波的波长 λ 来改变相对晶胞尺寸 d/λ 。

从图 3 可以看出，即使在正入射条件下，所有夹杂物对入射波都有显著响应；球形包涵体的响应呈类偶极特征（见面板 (a) 中平面的场分布），而“带杆的开口谐振环”系统和“Ω形结构”的响应则更为复杂。

入射角 θ 也会影响超材料内部的电磁场分布：即使在准静态区（$\lambda = 10d$）中，对于简单的球形包涵体，电

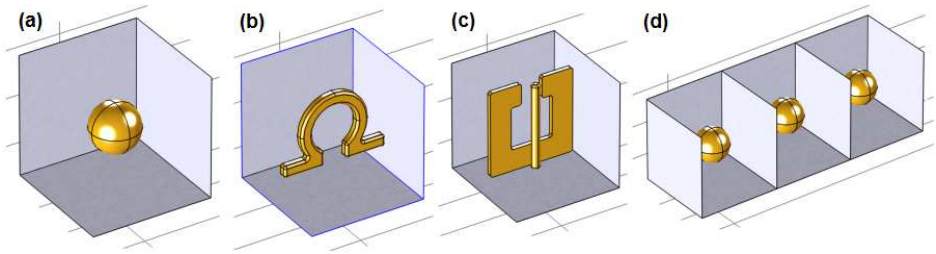


图2. 模拟超材料的晶胞：(a) 球形颗粒单层；(b) Ω形结构单层；(c) 开口谐振环与杆单层；(d) 球形颗粒三层结构。所有夹杂物均由金制成，单个晶胞的尺寸为 $d = 500$ nm。

场在　　正入射和斜入射时晶胞的表现差异显著，见图4　　.

图5–7展示了对图2a、c、d所示超材料进行数值计算得到的透射光谱和反射光谱。

根据图5，当足够长的波（ $\lambda = 3000$ nm，即单元尺寸 d的六倍）正入射到金球单层上时，超材料表现为透明薄片：在此范围内，其反射系数 R 接近零，透射系数 T 接近1。若 λ减小并接近单元尺寸 d，超材料会逐渐失去透明性，反射性也越来越强。反射系数在 $\lambda = 1.2d = 600$ nm处达到最大值 $R = 0.45$ ，此时透射系数最小（$T = 0.3$）。进一步减小 λ会使材料透明度单调增加（在$\lambda = d = 500$ nm处达到峰值 $T \approx 0.77$ ），同时其反射率单调下降，直至 $R \approx 0$。当 $\lambda \leq 600$ nm时（即 $d/\lambda \geq 0.83$），　R 和 T 的行为发生剧烈变化，这可能是周期性超材料中衍射和干涉效应开始出现所致。

请注意，在 $\lambda \leq 650$ nm 时，　$T + R$ 之和明显小于 1，即 $d/\lambda \geq$0.77。这意味着此情况下超材料的光吸收相当显著。吸收系数 $A = 1 - T + R \approx 0.67$ 的最小值出现在 $\lambda = 550$nm，这表明超材料夹杂物吸收了约三分之一的入射能流。吸收可归因于入射波以及来自相邻颗粒的散射波在各个夹杂物（金球）中诱导的电流。

类似　　在斜入射时观察到了类似行为（见图中的相应曲线。　　5

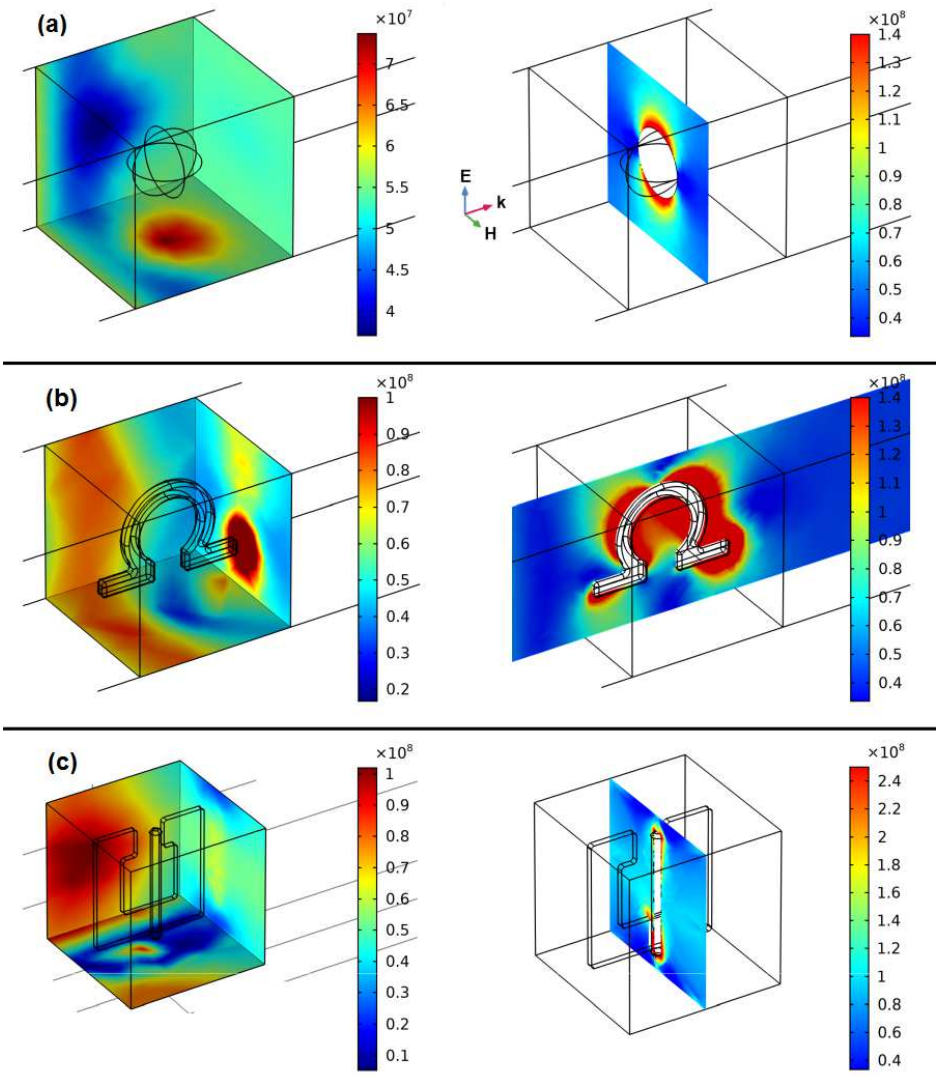


图3。图2a–c所示超材料晶胞内电场 E 绝对值的局部分布。左列为晶胞边界上的电场；右列为晶胞中平面内的电场。 $\lambda = 1000$ nm，正入射（$\theta = 0$）。入射波的 E 和 H 矢量方向示于面板（a）中。 $|\mathbf{E}|$ 的分布可以很容易地确定电能集中的位置。

对于 $\theta = 45°$ 的情况：随着 λ 减小， R、 T 变化不足的区域（从 $\lambda \approx 1.8d = 900$ nm 开始）转变为它们发生突变并呈现振荡行为的区域。但请注意，在这种情况下，即使 λ 较大，超材料仍是半透明的： $\lambda = 3000$ nm 处为 $R + T \approx 0.62$ 。

图示　　图6中指的是由“开口谐振环加杆”构成的金色夹杂物单层，并且 ha　　ve

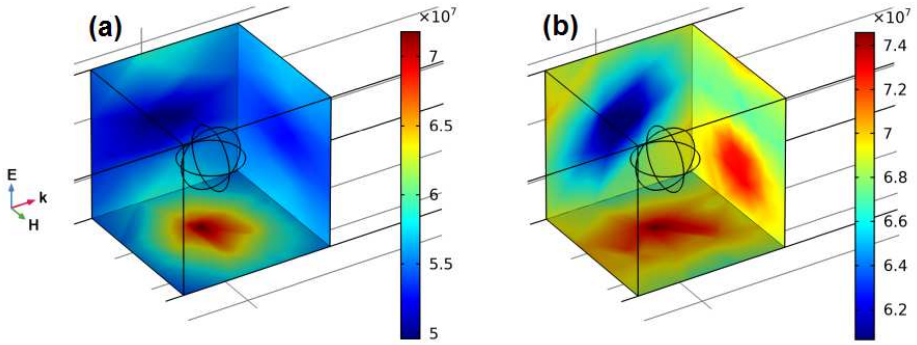


图4. $|\mathbf{E}|$ 在 $\lambda = 5000$ nm处金球单层晶胞边界上的局部分布。(a) $\theta = 0$; (b) $\theta = 45°$。

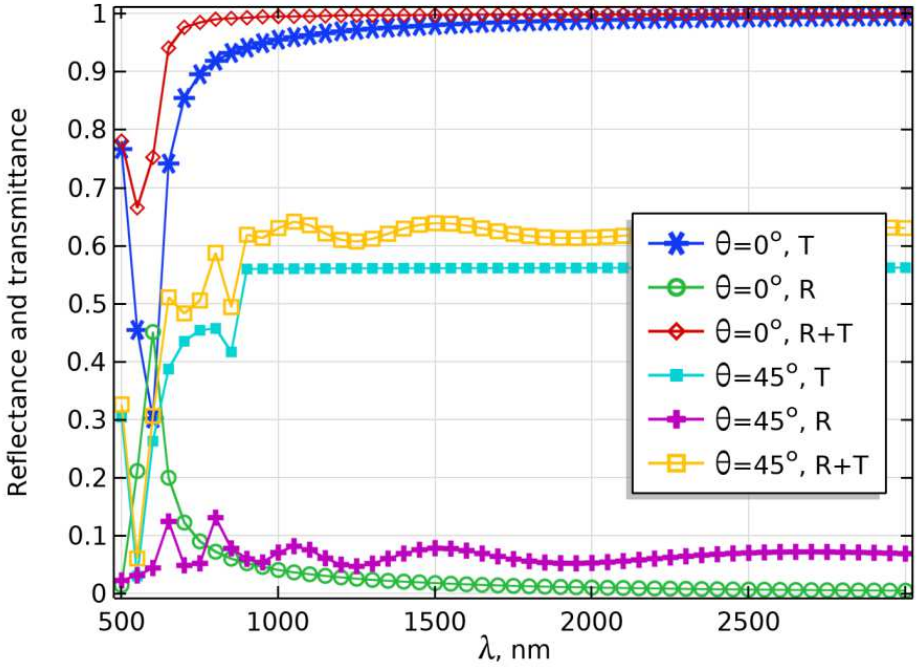


图5. 金球单层在法向入射和斜入射下的透射光谱和反射光谱， $\theta = 0$ 和 $\theta = 45°$。

在正入射和斜入射下均有三个不同的区域。随着 λ 从最大值5000 nm减小到约3200 nm，单层的光学性质呈单调变化。此外，在达到 $\lambda \approx 1400$nm之前，存在一个振荡区域，在该区域中，可以观察到 R 的峰和谷，以及 T 的峰和谷，其波长几乎是$d = 500$ nm的整数倍。这些峰和谷可归因于发生在

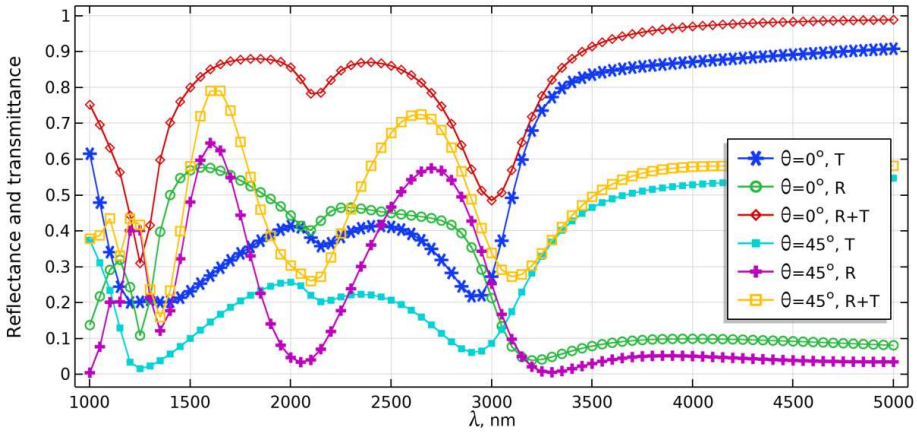


图6. 金色夹杂物“开口谐振环加杆”单层结构在正入射和斜入射条件下的透射率和反射率光谱，$\theta = 0$ 和 $\theta = 45°$。

周期系统是其结构元件在入射波激发下相互作用的结果。随着 λ进一步减小， R 和 T 的振荡变得更加混乱。与球形包涵体的情况一样，分裂环谐振器与杆层即使在足够大的波长下也呈半透明状： $T + R < 0.6$ 在 $\lambda = 10d = 5000$ 纳米处。

金球单层结构以及带杆的开口谐振环单层结构的光学行为特征，在更厚的金球三层结构中也可以观察到，见图7。在这种情况下，请注意 R 中的两个峰（分别位于正入射和斜入射条件下）以及 T 中的谷（位于正入射条件下），它们全部恰好位于 $\lambda = 1000$纳米处，即晶格常数 d的两倍处。显然，这些现象可以归因于上述光栅共振。

IV. 结论

所得结果证实了这一观点 [4] ：在中间工作区域，当超材料晶胞尺寸与工作波长处于同一量级时，使用任何超材料均质化方法都应谨慎。均质化方法无法准确预测周期性超材料光学性质时的相对晶胞尺寸值 d/λ ，取决于其夹杂物的几何形状和材料参数。对于本文研究的超材料，光学性质在不同的 d/λ 值处会发生突然而显著的变化（与其长波长值相比）：斜入射下金球单层结构约为 0.56，正入射下金球三层结构为 0.4，而

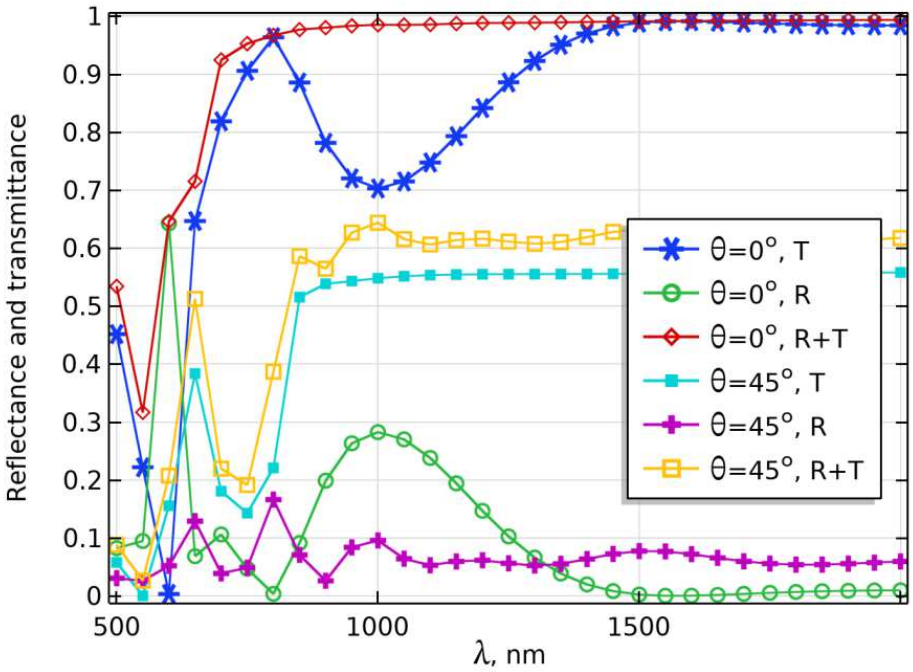


图7. 金球三层结构在正入射和斜入射下的透射率和反射光谱， $\theta = 0$ 和 $\theta = 45°$。

带杆的开口谐振环单层结构约为 0.16。对于更大的 d/λ 值，衍射和干涉效应对超材料光学性质的形成起着关键作用，因此其性质呈现振荡行为，而均匀化概念无法预测这种行为。

---

[1] Pendry J.B., Holden A.J., Robbins D.J. 和 Stewart W.J. IEEE Trans. Microw. Theory Tech.**47**2075–84 (1999).[2] D. Smith 和 J. Pendry，J. Opt. Soc. Am. B **23** 391-403 (2006).[3] I. Tsukerman，J. Opt. Soc. Am. B **28** 577–86 (2011).[4] V.V. Gozhenko、A.K. Amert 和 K.W. Whites，NewJ. Phys. **15** 043030 (2013).[5] S. Yoo 等，Nanophotonics 8 (6) 1063–1069 (2019).[6] O. Rybin 和 V. Khardikov，Optik **268** 169768 (2022).