arXiv:2601.04000v1 [physics.optics] 7 Jan 2026

# 全介质双曲超材料中的太赫兹体等离激元-极化激元调制

Stefano Campanaro，[1] * Luca Bursi，[1] † Stefano Curtarolo，[3] ‡ 和 Arrigo Calzolari [2, 3] §

[1] *Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche, Universitá degli Studi di Modena e Reggio Emilia, I-41125 Modena, Italy* [2] *Istituto Nanoscienze CNR-NANO-S3, I-41125 Modena, Italy*

[3] *Department of Mechanical Engineering and Materials Science, Duke University, Durham, NC 27708, USA*

[4] *Center for Extreme Materials, Duke University, Durham, NC 27708, USA*

等离激元学及其相关应用在太赫兹范围的发展受到普通金属固有高电子密度的限制。全介质系统是很有优势的替代方案，可通过掺杂实现对光学响应的定制化调制。本文聚焦于等离激元基双曲超材料，这类材料通过堆叠掺杂的III-V族半导体制成，已被证明在太赫兹光谱区具有光学活性。我们采用多物理、多尺度理论方法，揭示了掺杂和几何特征（例如厚度、组分、光栅）在调制超材料中高-$k$ 等离激元-极化激元模式方面的作用。

## I. 引言

双曲超材料（HMMs）是一类人工系统，其特点是具有极端光学各向异性：沿一个方向表现为金属，而沿垂直方向则表现为介电质 [1, 2]。这意味着，它们的色散关系 $[\omega(\mathbf{k}) = costant]$ 在几何上由开口双曲面描述，而非像普通材料那样由闭合椭球面描述。因此，只要知道构成材料的介电函数，HMMs 就能支持具有高-$k$ 波矢的非凡电磁（EM）行波 [3], ，其传播过程可由经典电动力学完全描述。通常，HMMs 由金属（如金、银、铜、氮化钛）层和介电质（如 $TiO_2$，ZnO、$Al_2O_3$）层交替堆叠而成，其中高-$k$ 模是金属-介质超晶格的布洛赫模。这些模是体积等离激元极化激元（VPPs），能够沿着贯穿整个堆叠结构的尖锐圆锥传播 [4] ；它们源于各金属/介质界面处表面等离激元-极化激元（SPPs）的共振耦合 [5]。这些独特的光学特性使 HMMs 成为多种先进光学应用的理想候选材料，例如超分辨率成像 [6], 、等离激元传感器 [7, 8], 、新型隐身技术[9, 10], 以及热辐射器 [11, 12]。

近年来实现的大多数超材料在近红外（IR）至紫外（UV）光谱范围内呈现双曲活性（例如参见文献 [13–20]）。然而，能够在太赫兹（THz）区域（即从 300 GHz 到 10 THz）工作的超材料具有极大的技术价值。这将弥合电子学与光学之间的鸿沟，而太赫兹辐射的产生、限制和探测传统上颇具挑战性 [21, 22]。太赫兹技术在以下领域的新兴应用中具有巨大潜力：广泛的无损材料检测和质量控制 [23],医学诊断 [24], 成像 [25], 国防与安全 [26]。

由于其本征电子密度较高（例如，$n_e \sim 10^{22} - 10^{23}$ cm$^{-3}$），等离激元金属——包括贵金属 [27], 过渡金属氮化物 [28–30],以及高熵碳化物 [31–33] ——并不适合实现太赫兹区域，其（屏蔽）等离激元共振位于近红外或可见光范围。金属较高的载流子密度也会导致显著的欧姆损耗，且光谱可调性有限，进一步阻碍了它们在低频双曲超材料平台中的应用。相反，全介质超材料是一种很有前景的替代方案，其导电组分由掺杂半导体构成，这类半导体的电子密度较低（例如，$n_e \sim 10^{18} - 10^{20}$ cm$^{-3}$），且可控。掺杂半导体的欧姆损耗较低，并且与高质量外延生长完全兼容。尤其是窄带隙III-V族半导体（如砷化铟和锑化铟）非常适用于太赫兹和中红外等离激元学 [34–38], ，这得益于其较低的有效质量、较高的迁移率，以及通过掺杂 [39], 、温度 [40], 和电场 [41]对其等离激元响应进行强力调控的能力。近期实验报告 [42–44] 已证明，利用基于III-V族半导体的多层结构，可在中红外和太赫兹频率范围内实现双曲超材料，凸显了这一材料平台的技术潜力。

更一般地说，尽管全介电质超材料的实现已得到实验验证 [42–49], ，但其理论表征仍更为复杂。事实上，半导体的光学性质因系统而异，并且强烈依赖于生长条件（例如组分、掺杂、缺陷浓度等）。因此，介电函数需要通过实验手段获得；否则，就无法对全介电质超材料中的高-$k$ 模式进行建模。此外，即使已有实验测得的介电常数，也不能直接用于预测双曲

* stefano.campanaro@unimore.it
† luca.bursi@unimore.it
‡ stefano@duke.edu§
arrigo.calzolari@nano.cnr.it

其他虽相似但组分不同的材料的响应。从理论角度看，虽然已有少数研究通过基于第一性原理的模拟评估掺杂半导体的等离激元性质，并明确考虑了组分和掺杂调控的作用 [50–53], ，从头算对超材料的描述仍局限于采用均匀化介质处理介电函数 [54–56]。这一有效模型未纳入结构参数（如层数、厚度、光栅耦合器）的影响，而这些参数对于表征和预测超材料中的非寻常波至关重要。这凸显了发展新理论方法的必要性：将材料科学、量子光学和电磁学结合起来，其中：**i.**材料描述应超越采用针对参考块体材料列表的单一经验参数（例如介电常数）；以及**ii.** 应明确考虑结构构型及其与外部环境的界面。

本文旨在通过探究超材料的内在特性，弥合实验观测与对超材料微观理解之间的差距。我们系统地研究了完全由二元 III-V族半导体构成的超材料，并展示了：**i.** 这类材料能够实现工作于太赫兹区域的超材料；**ii.** 通过掺杂和多层结构几何设计实现其光学调制。我们还对 VPP 模式进行了全面的理论分析，深入揭示了如何设计这些超材料以获得所需的光学特性。具体而言，我们采用了一种多尺度方法，将材料的微观描述与传播电磁波的宏观表征相结合，整合了原子尺度的第一性原理模拟、有效介质理论、光子能带结构分析，以及基于散射矩阵法的连续介质电磁技术。

本研究旨在通过将针对具体系统的材料特性融入 VPP 模式的电磁描述，深化对超材料设计原理的理解。由此获得的关键见解有望推动半导体基超材料的优化，助力其应用于太赫兹区域的光电子学、传感和热管理等领域。

## II. 理论方法与计算细节

**材料表征**。采用基于密度泛函理论（DFT）的原子模拟，计算未掺杂和掺杂的 III-V 族半导体的电子结构及复介电函数。所有模拟均使用 Quantum ESPRESSO（QE）套件 [57, 58] 中包含的 DFT 引擎（$pw.x$）完成。交换-相关泛函采用 PBE 广义梯度近似 [59] 。电子-离子相互作用通过 ONCVSP 库 [61] 中的守恒范数赝势 [60] 描述。单粒子波函数采用动能截断值为 120 Ry 的平面波展开。在自洽 DFT 循环中，使用均匀的 $(16 \times 16 \times 16)$ **k** 点网格对布里渊区进行采样；在计算光学性质所需的非自洽场计算中，则使用更密集的 $(60 \times 60 \times 60)$ **k** 网格。采用可变晶胞最小化方法优化晶格参数。通过总能量与力优化方案充分弛豫所有结构，直至每个原子所受的力小于 0.03 eV/Å。未掺杂半导体在原胞 $fcc$ 中模拟，而硅掺杂砷化铟体系则采用不同尺寸的周期性超胞建模（见“结果”部分）。众所周知，DFT 会低估能带隙；我们采用 Dudarev 形式 [62], 下的 DFT 赝杂化 Hubbard 实现 $+U$，即 ACBN 0 [63, 64], ，对其进行校正。该方法涉及有效参数 $U_{eff} = U - J$，其中 $U$ 为校正 Hubbard 项， $J$ 则表示与交换相互作用相关的能量代价。ACBN0 方法已在 PAOFLOW 代码 [65], 中实现，该代码与基于 DFT 的 QE 可执行程序协同运行。各化学物种计算得到的 $U_{eff}$ 值汇总于补充信息（SI）表 S1 中。

复介电函数 $\hat{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ 使用 QE 套件中包含的代码 $epsilon.x$ 进行计算。该代码采用独立粒子形式，描述固体中随频率变化的（$\omega$）德鲁德–洛伦兹模型 [66, 67], ，其中明确包含布洛赫态之间的带内跃迁和带间跃迁，以及类德鲁德弛豫项和类洛伦兹弛豫项，用以考虑电子激发的有限寿命以及耗散性电子散射的影响 [68]。

**有效介质理论（EMT）**。有效介质理论 [69]用于描述周期性重复（即无限）多层结构在宏观尺度上的整体光学性质。在此近似下——当每个组成层的厚度远小于探测辐射的波长时，该近似成立——平行于（$\varepsilon_\parallel$）和垂直于（$\varepsilon_\perp$）光轴（图1a）的方向上的有效介电函数为：

$$\varepsilon_\perp = f_m\varepsilon_m + f_d\varepsilon_d \,, \tag{1}$$

$$\varepsilon_\parallel = \frac{\varepsilon_m\varepsilon_d}{f_d\varepsilon_m + f_m\varepsilon_d} \,, \tag{2}$$

其中 $\varepsilon_m$ ($\varepsilon_d$) 是通过 DFT 计算得到的金属（介电质）材料的复介电函数+$U$； $f_j$ ($j = \{m, d\}$) 是层填充因子，定义为 $f_j = d_j/d_{tot}$ 其中 $d_{tot} = d_m + d_d$ 是周期性晶胞的厚度（图 1a）。通过角度介电函数 $\varepsilon_\varphi$ 和角度 $\Theta$分析 VPP 激发的宏观条件以及非寻常波与光轴之间的夹角；它们是$\varepsilon_\parallel$ 和$\varepsilon_\perp$的几何函数；见补充信息（SI）第 S1 节。

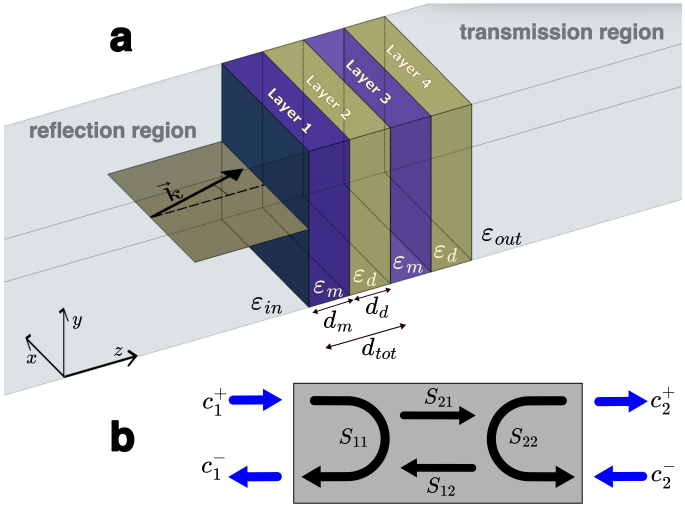


图 1. (a) 有限厚度堆叠结构的示意图，由金属（$m$）和介电质（$d$）层交替组成，每层均由其介电函数 $\varepsilon_j$ 和厚度 $d_j$表征，其中 $j = \{m, d\}$。灰色区域表示用于反射和透射的嵌入介质，也分别由介电函数 $\varepsilon_{in}$ 和 $\varepsilon_{out}$表征。光轴沿 $z$ 方向排列。(b) 单层的散射矩阵表述。前向（$c_1^+$， $c_2^+$）和后向（$c_1^-$， $c_2^-$）传播的波振幅通过散射矩阵的元素 $S_{ij}$ 相互关联。

**散射矩阵法（SMM）**。有限三维多层结构 [70, 71] 中的 VPP 传播通过散射矩阵（ $S$- 矩阵） [72]，进行描述，该方法已在 *AFLOW-EMERALD* 代码 [73]中实现。通过模拟具有指定周期数的有限多层结构，AFLOW-EMERALD 可计算电磁波在整个堆叠结构中的反射率、透射率和吸收，同时考虑各界面的干涉效应、超晶格内部结构引起的共振现象，以及与外部环境的耦合。对于非磁性材料，针对每一层计算散射矩阵，其取决于入射单色辐射的频率、面内波矢（$k_x$）以及从 DFT 模拟$\varepsilon$获得的介电常数（ˆ+$U$ ）。矩阵$\boldsymbol{S}$ 描述了第 $c^+$ 层左侧（1）和右侧（2）界面处，电场和磁场中沿前向（$c^-$）与后向（）传播分量的振幅系数，如图 n 所示。整个多层结构中反射、透射和吸收所形成的电磁场用于计算反射率（R）、透射率（T）和吸收率（A）函数 1b）； [73]更多详情见补充信息第 S1 节。

**光子能带结构（PBS）**。通过计算光子能带结构来研究周期性金属-介质超结构的布洛赫模，其理论公式源自光子晶体理论 [74]。周期性多层结构的三维平移不变性意味着介电函数在布拉菲格矢$\mathbf{R}$的平移下也保持不变，即$\varepsilon(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \varepsilon(\mathbf{r})$。因此，布洛赫-弗洛凯定理成立，并形成允许的电磁态（光子能带）和禁阻的电磁态（光子带隙）。光子能带结构由 *AFLOW-EMERALD*代码 [73] 计算，具体方法是在平面波基组上展开电场和磁场，详见补充信息（SI）S1节。介电函数由构成材料的体相材料第一性原理模拟得出。

## III. 结果

本研究采用的理论方法作用于互补的层次，共同提供了对超材料连贯的多尺度描述。有效介质理论（EMT）基于第一性原理计算得到的材料介电函数，给出无限多层结构的宏观图像，并将其描述为单一的均匀化介质；该方法还预测系统表现为 I 型、II 型双曲超材料或介电质的光谱区域。散射矩阵法（SMM）将分析扩展至有限厚度叠层，明确考虑界面反射、光栅辅助的动量匹配以及与外部环境的耦合，从而能够描述电磁波在实际超材料中的传播。最后，光子能带结构（PBS）分析确定周期性重复多层结构的允许布洛赫模，并阐明在有限厚度叠层和匹配耦合器施加的边界条件下，哪些模式能够被激发。在此，我们假设界面理想；这一近似可在多尺度框架的不同层次上系统地放宽。通过分层运用 EMT、SMM 和 PBS，我们得以将材料特性与定制超材料结构中的传播 VPP 模式联系起来。

**多层组件的光学性质**。按照文献 [42, 43], 中所述的实验结构，我们将超材料建模为二元超晶格，由介电质（III-V族半导体）和金属（硅掺杂砷化铟）材料交替构成，并沿 $z$ 轴堆叠。全介电超材料多层结构的示意图见图 1a。参考文献中的实验所关注的电磁辐射范围为 $\lambda \sim (2-20)\mu$m（即太赫兹至中红外范围），堆叠结构中各构成层的厚度约为 100 nm。由于入射辐射的波长远大于各个组成部分的厚度，因此均匀化假设 [69] 基本成立，可以忽略量子限域效应，并且单一块体材料的复介电函数足以完整表征整体超材料的光学响应。

首先，我们评估了九种III-V族二元半导体（即，

磷化铝、砷化铝、锑化铝、磷化镓、砷化镓、锑化镓、磷化铟、砷化铟和锑化铟）在面心立方闪锌矿相中的电子和光学性质。所得晶格参数（$a_0$）和带隙值（$E_g$）汇总于补充信息的表S1中。结果表明，DFT+$U$方法能够正确再现所有体系的半导体行为（$E_g > 0$），包括窄带隙半导体，例如砷化铟；在标准DFT计算中，这类材料会呈现半金属特性（$E_g < 0$）。通过DFT [75]修正，带隙低估现象显著减轻，尽管所有体系仍存在一定程度的低估。相应的能带结构图（见补充信息S2节）与采用更高阶DFT方法（如杂化泛函或多体GW近似）得到的理论结果吻合良好 [76, 77]。我们采用单粒子德鲁德-洛伦兹方法计算了III-V族半导体的频率相关介电函数 [78]。模拟结果与先前的理论计算 [79] 以及实验数据 [80–82]高度一致。九种III-V族化合物的结果汇总于补充信息S3节。所有体系的两种 $\varepsilon_1$ 和 $\varepsilon_2$（即峰值能量和峰值强度）均得到准确再现。然而，与实验数据相比，我们观察到带间光吸收阈值出现幅度虽小但具有系统性的整体红移，这与上述讨论的模拟能带隙仍存在低估的情况相呼应。

与实验情况一致， [42, 43], 我们多层结构中的金属组分为硅掺杂砷化铟（Si:InAs）。为揭示自由电荷密度对超材料中等离激元-极化激元特性的影响，我们模拟了不同硅浓度下的 Si:InAs。根据虚晶近似，在扩展的砷化铟超胞中引入替位铟的硅原子，对 Si:InAs 进行建模（图2a）。掺杂浓度定义为 $c = N_{Si}/N_{In}$，其中 $N_{Si}$ 为硅掺杂原子的数量，而 $N_{In}$ 为等效未掺杂超胞中的铟原子总数。在实验文献中， [42, 43], 掺杂浓度以所得自由电子密度 $n_{el} \sim 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$表示，对应的名义硅浓度为 $c \simeq 2.2\%$。此处，我们构建了三个模型（分别标记为**1**、**2**和**3**），其掺杂浓度各不相同，范围为$1.6 - 3.7\%$，其中包含实验情况。浓度和晶胞尺寸的详情汇总于表I。经过充分的原子弛豫后，结果表明，硅会使结构产生轻微的局部畸变，且该畸变几乎不受掺杂浓度影响。

如预期，所有模型的基态电子结构均对应于一个 $n$ 型简并导体，如图2b所示，对于中等掺杂模型**2**而言。Si:InAs的态密度（DOS）呈现出未掺杂InAs的所有光谱特征。然而，主体材料的原始能隙在掺杂体系中略有减小，同时能隙区域内没有出现源自Si的峰。Si将其多余的$3p$ 电子提供给主体材料导带，而不会显著改变导带底的形状和曲率。因此，掺杂导致费米能级移入导带，体系表现出类金属行为。其他两个模型也呈现出非常相似的态密度谱，区别仅在于费米能级相对于导带底的位置（$\Delta E_F$ 见表I），这对应于不同的注入电荷，而注入电荷随Si浓度的增加而增加。通过在抛物线近似下反演Drude公式，可以事后估算掺杂产生的有效自由电子密度。模型 $n_e \sim 10^{19}$ cm$^{-3}$ 的结果约为**1**，而模型 $n_e \sim 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$ 的结果约为**2** 和**3**，略低于标称值，但仍与实验数据一致 [42, 43]。

Si:InAs 配置的介电函数采用上述相同的计算流程和参数进行计算。图 2展示了所得介电函数实部（面板 c）和虚部（面板 d）随掺杂浓度变化的曲线。尽管掺杂对 $E \sim 2$ eV 以上的光学性质影响甚微，但它完全改变了光谱低能量部分的介电函数。在低频率下（即 $E \to 0$），Si:InAs 的光学性质不同于原始 InAs，而与简单金属相似。 $E_p$标识出介电函数实部发生变号时的能量 $[\varepsilon_1(E_p) = 0]$，即系统从类金属状态发生光学切换而呈现类介电质状态时的能量。这是表征超材料双曲性质的关键参数（见下文）。在所有 Si:InAs 模型中， $\varepsilon_2(E_p)$ 也可以忽略不计（图 2d）。这对应于激发自由电子密度中一部分电子的集体电子振荡的可能性，这种现象在太赫兹范围内称为屏蔽等离激元共振。在此情况下， $E_p$ 表示该系统的太赫兹等离激元能量。对于纯金属而言， $E_p$ 是无法改变的内禀性质；而对于掺杂半导体，则可以通过控制电子密度，即改变掺杂条件来调节等离激元能量（表 I）。最后值得注意的是，低掺杂浓度模型（**1**）的介电常数在 $\sim 0.3$ eV 处呈现出一个额外峰，在另外两种掺杂模型中则不存在。该结构源于轻度掺杂 InAs 中残余的带间跃迁，这些跃迁发生在基本带隙之上不远处，

表 I. 文中所述三种 Si:InAs 模型的 Si 掺杂浓度（$c$）、超胞晶格参数（$a_0$）、Si-In 和 Si-As 最近邻距离。 $\Delta E_F$ 为费米能级（$E_F$）与导带底之间的能量差； $E_p$ 为等离激元能量。

| 模型 | $c$(%) | $a_0$( Å) | Si-In( Å) | Si-As( Å) | $\Delta E_F$(电子伏特) | $E_p$(电子伏特) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **1** | 1.56% | 24.23 | 4.24 | 2.41 | 0.12 | 0.46 |
| **2** | 3.12% | 18.17 | 4.24 | 2.41 | 0.21 | 0.62 |
| **3** | 3.70% | 12.12 | 4.24 | 2.41 | 0.25 | 0.65 |

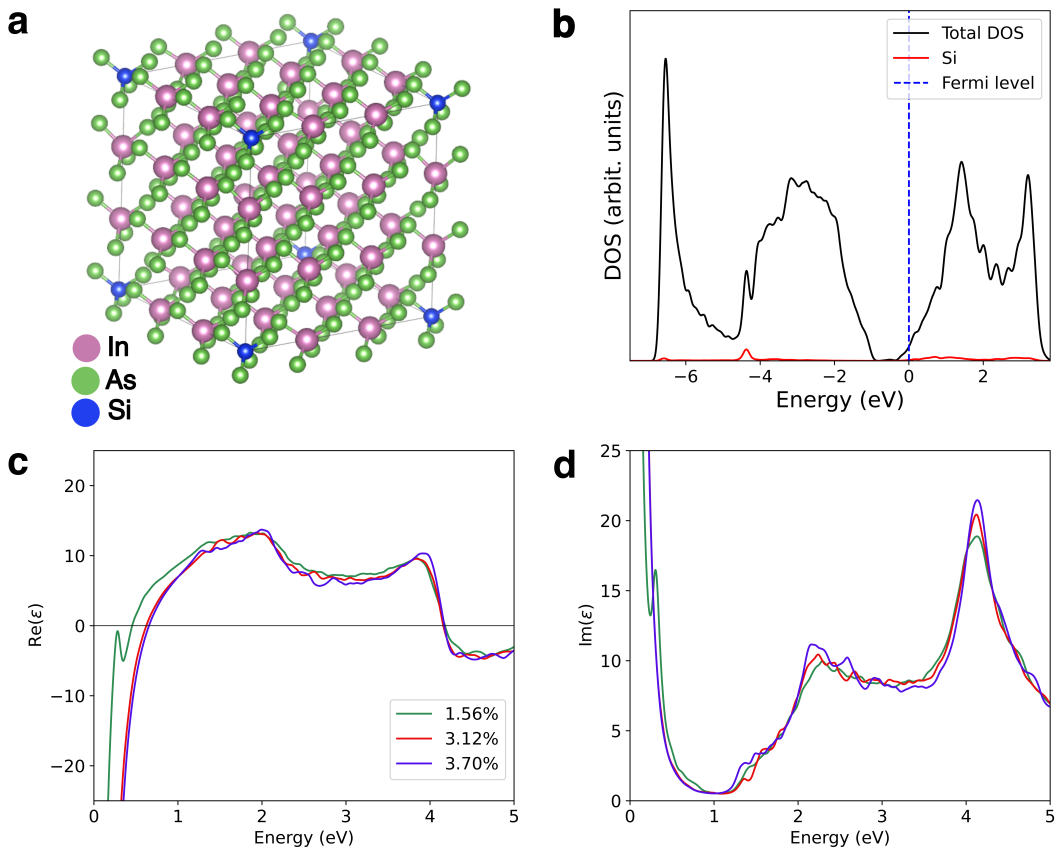


图 2. a) Si:InAs 超胞的原子结构。b) Si:InAs（模型 **2**）的总态密度（黑线）和 Si 投影态密度（红线）。c) Si:InAs 介电函数的实部和 d) 虚部随 Si 浓度的变化。

即基本带隙。随着掺杂水平的提高，费米能级向导带内部移动，泡利阻塞逐渐抑制这些跃迁，相应的吸收特征也会在更高的电子密度下自然消失。这一光谱特征的存在并不会改变 Si:InAs 模型的等离激元特性。

**双曲多层结构**。将超材料视为均匀介质时，有效介质理论可预测多层结构的双曲行为以及堆叠结构内体积等离激元极化激元的光谱特征。超材料的光学性质通过结合本征III-V族半导体（$\varepsilon_d$）和Si:InAs（$\varepsilon_m$）的体介电函数进行评估，这些介电函数由第一性原理计算得到。利用方程（1-2）计算相对于光轴（图1a）的垂直（$\varepsilon_\perp$）和平行（$\varepsilon_\parallel$）分量的有效介电张量。通过将III-V族半导体与Si:InAs的模型**2** 进行混合，共研究了九种多层结构。图 3 显示了等组分（$f_m = f_d = 0.5$）Si:InAs/AlSb 堆叠结构（作为参考），其平行（红线）和垂直（蓝线）介电函数的实部（实线）和虚部（虚线）。其余Si:InAs/III-V多层结构的结果总结于补充信息的S4节中。

双曲色散意味着条件为 $\varepsilon_\perp \cdot \varepsilon_\parallel < 0$。在低能量下（图 3 中的 $E < E_{II} = 0.44$ 电子伏特），$\mathrm{Re}[\varepsilon_\perp]$ 主要由 $\varepsilon_m$ 决定，而 $\mathrm{Re}[\varepsilon_\parallel]$ 主要由 $\varepsilon_d$决定。这意味着垂直分量（蓝线）呈现出类金属行为，与 Si:InAs 类似；而平行分量（红线）则具有典型的介电特性，与未掺杂半导体相似。因此，多层结构表现为 II 型双曲超材料。在 $E \in \{0.44 - 0.47\}$ 电子伏特范围内，$\mathrm{Re}[\varepsilon_\perp]$ 出现零点，对所有系统而言，符号均由负变正。当 $\mathrm{Re}[\varepsilon_m] = -\mathrm{Re}[\varepsilon_d]$时便会出现这种情况，而这又对应于$\varepsilon_\parallel$的最大值。超过这一共振能量后，$\mathrm{Re}[\varepsilon_\parallel]$逐渐减小，直至越过零点，符号由正变负，呈现典型的洛伦兹型特征。洛伦兹共振的能量值取决于所用的 III-V族半导体介电质。当$E > E_I = 0.47$ 电子伏特时，趋势反转， $\varepsilon_\perp$ 由 $\varepsilon_d$ 主导，而$\varepsilon_\parallel$ 由 $\varepsilon_m$主导。因此，$\varepsilon_\parallel$ 具有金属特性，而 $\varepsilon_\perp$ 具有介电行为，对应于

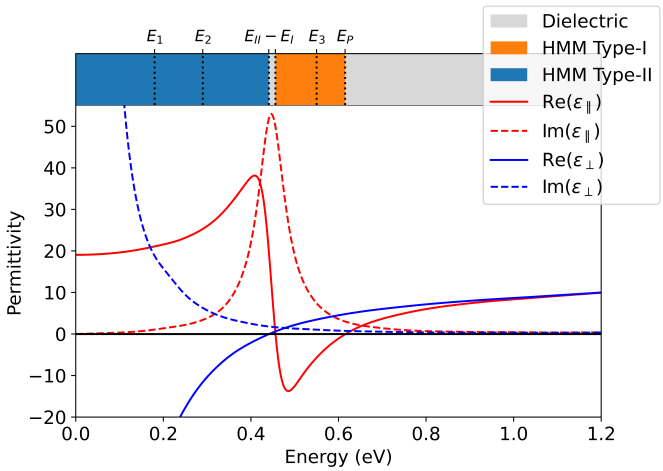


图 3. Si:InAs/AlSb多层结构（$c_2 = 3.12\%$ 和 $f_m = 0.5$）的平行（红线）和垂直（蓝线）介电函数的实部（实线）与虚部（虚线）。顶部色条表示该多层结构的光谱光学特征——即 I 型（橙色）和 II 型（蓝色）双曲特性，以及介电特性（灰色）。垂直虚线标示文中讨论的特征能量。

I 型双曲超材料。当 $E > E_p = 0.62$ 电子伏特时，III-V族和 Si:InAs 两种组分均呈类介电特性，多层结构也是如此。

与文献 [42, 43] 中的实验结果直接比较表明，我们的理论光谱与该多层结构的所有实验特征非常吻合，包括双曲类型特征随辐射能量的交替变化。为更好地与实验数据比较，补充信息（SI）的图 S11 给出了图3中的介电函数随波长而非能量的变化。然而，与实验结果相比，我们的理论光谱存在轻微蓝移。这一微小差异主要归因于：(i) 通过 DFT+$U$ 计算得到的本征半导体带隙仍存在低估；(ii) 实际掺杂水平可能与实验值略有不同；(iii) 理论建模中假设界面理想且无缺陷。尽管存在这些细微差异，与实验结果的一致性从事后角度证实了事后本研究采用的联合 DFT+$U$/有效介质理论方法的准确性。

图4展示了组分、厚度和掺杂对多层结构双曲行为的影响。为更好地了解超材料在光谱低能量部分的光学性质差异，这些结果以波长（$\lambda$）而非能量表示。九种超材料（图4a）的行为随辐射波长而变化。当波长为 $\lambda > \lambda_p = hc/E_p = 2.0\ \mu$m（即 $E < E_p = 0.62$电子伏特）时，出现双曲特征。除一个中间区间外，所有系统都以II型特征（蓝色区域）为主，在该区间内，它们呈现I型色散（橙色区域）。前者与 $\varepsilon_\perp$的负值相关，而后者则与 $\varepsilon_\parallel < 0$的类洛伦兹反转有关。在较短波长（$\lambda < \lambda_p$）下，辐射频率超过金属的等离子体频率，因此多层结构整体呈介电质特性（灰色区域）。由于Si:InAs的等离激元能量随掺杂而变化（表I），可通过控制掺杂浓度来调节双曲范围。提高掺杂浓度（图4b）会使等离子体频率蓝移，从而决定双曲色散行为与椭圆色散行为（即介电质行为）之间的转变。在 $c_1 = 1.56\%$和 $f_m = 0.5$的情况下，Si:InAs/AlSb多层结构在双曲范围内仅呈现II型特征。然而，当金属填充因子介于0.70和0.95之间时，系统还会出现狭窄的频率区间，在其中呈现I型双曲响应。补充图（图 S12，SI）——与图4c类似——显示了最低（$c_1$）和最高（$c_3$）掺杂浓度的情况，证实I型和II型双曲性的起始取决于掺杂水平和金属填充因子。

图4c 展示了组分填充因子变化所对应的趋势 $f_m$，该因子衡量多层结构中金属组分的含量：$f_m = 0$（$f_m = 1$）分别对应纯介电质（纯金属）系统。对于 $\lambda > \lambda_p$，实际的双曲范围取决于填充因子。通常，金属/介电质比例约为 $40-60\%$ 时，双曲色散的光谱范围较宽；随着其中一种组分逐渐占主导地位，该范围会逐步缩小至更长波长。总而言之，通过控制化学物种、掺杂和堆叠结构的几何形状，可以精细调节多层结构的光学特性，并在近红外至太赫兹光谱范围内实现双曲特性。

**体等离激元极化激元**。VPP 激发的光谱分析由角度介电函数 $\varepsilon_\varphi(E)$ 和传播角 $\Theta(\varphi)$ 得出，其中 $E$为能量，$\varphi$ 为入射辐射波矢与$\mathbf{k}$ 超材料内部的波矢和光轴$z$之间的夹角（详见补充信息的 S1 节）。这里，我们聚焦于 Si:InAs/AlSb 多层结构的参考情形（掺杂浓度为 $c_2 = 3.12\%$，填充因子为 $f_m = 0.5$）。由于 $\varepsilon_\varphi$ 是入射辐射能量的函数，我们选取了几个具有代表性的能量（$E_i$），并在图3中用竖直虚线标出。能量 $E_1 = 0.18$ 电子伏特和 $E_2 = 0.29$ 电子伏特对应 II 型双曲特性，而 $E_3 = 0.55$ 电子伏特对应 I 型双曲超材料。

在 $E_1$ 和 $E_2$的情况下，$\varepsilon_\varphi$ 的实部在小角度时为负，超过临界角 $\varphi_c$后则变为正值；随着能量增加，该临界角也会增大（$\varphi_{c1} < \varphi_{c2}$）。对于 $E_3$，这一趋势恰好相反：$\varepsilon_\varphi$ 在小角度时为正，并在 $\varphi_{c3} \sim 65°$处改变符号。这种行为源于描述色散等值面的双曲面具有不同的拓扑结构——I型情况下为双叶，II型情况下为单叶。事实上，条件 $\mathrm{Re}[\varepsilon_\varphi] = 0$

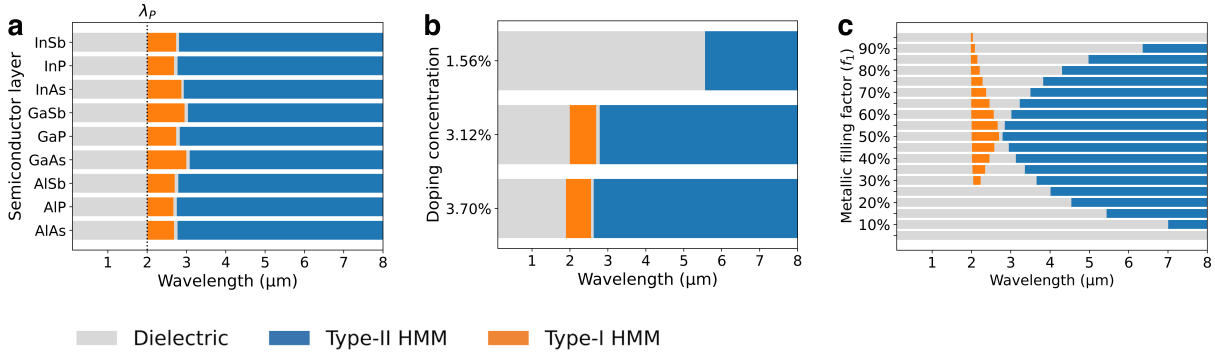


图4. 超材料的光谱光学特征——即双曲型I型（橙色）和II型（蓝色），以及介电质型（灰色）——由以下结构组成：a) III-V族半导体/Si:InAs（$c_2 = 3.12\%$，$f_m = 0.5$），作为介电质组分的函数；b) Si:InAs/锑化铝（$f_m = 0.5$），作为Si掺杂浓度的函数；c) Si:InAs/锑化铝（$c_2 = 3.12\%$），作为填充因子 $f_m$ 在（0.05–0.95）%范围内的函数。

决定了超材料金属响应与介电响应之间的角度边界（相当于块体材料中的等离激元激发），并确定了临界角 $\varphi_c$，该角度满足超材料与外部环境界面处的波矢折射条件（图 1a）。对于每个能量，$\tan(\varphi_c) = k_z/k_x = \sqrt{\varepsilon_\perp/\varepsilon_\parallel}$ 表示描述超材料色散等值面的双曲面的渐近线（图 5b）。因此，对于I型（II型）超材料，$\varphi_c$ 是入射辐射必须达到的最大（最小）角度，才能在堆叠结构中传播。因此，图 $\varphi_{ci}$ 5a中的三个交点对应于激发圆锥形体等离激元极化激元的极端几何条件，其角半径由相应的 $\Theta$ 角度给出（图 5a，下方面板）。对于所有考虑的能量，$\Theta$ 在所有允许的 $\varphi$ 角度下均为负值。这是后向波激发的特征，此时坡印廷矢量$\mathbf{S}$ 与波矢 $\mathbf{k}$ 的横向方向相反。这种反常折射效应是先进变换光学和电磁隐身应用的基础。

在实际实验条件下，角度 $\varphi$ 并不是自由变量，而是由堆叠结构中的双层结构数量，以及用于补偿入射辐射与VPP之间动量失配的匹配装置（例如棱镜或光栅）共同决定的。这意味着，鉴于整个系统（超材料 + 耦合器）的实际几何结构，实际上只有少数几个能量和特定角度 $\varphi$ 能够有效激发VPP。这些因素，加上内部金属/介电质界面产生的多重散射效应，无法通过有效介质理论捕捉，因为有效介质理论将整个多层结构视为单一均匀介质。要对这些效应进行准确描述，才能在定制异质结构的设计和优化中实现预测。

为了克服这些局限，我们采用散射矩阵法，求解了由交替排列的金属/介电材料构成的有限多层结构的电磁问题。这种方法使我们能够模拟电磁波在超材料中的传播行为，并明确纳入光栅层施加的边界条件。与实验样品保持一致 [42, 43]，，我们考虑了一种由 $\mathcal{N} = 10$ 个交替排列的 Si:InAs/AlSb 双层膜周期构成的超材料，其参数如下：掺杂浓度为 $c_2 = 3.12\%$，填充因子为$f_m = 0.5$，单个双层膜的厚度为 $d_{tot} = 100$纳米（图1a）。表征各层的介电函数采用相应块体材料在 DFT+$U$ 水平下计算得到的介电函数。在多层膜堆叠顶部引入一个金光栅层，其周期可变，分别为 $\Lambda = 0.9$ $\mu$米、1.3$\mu$米和1.8 $\mu$米。数值为 $\Lambda = 1.8$ $\mu$米时，对应于参考文献 [42]中采用的实验条件。整个系统——包括多层结构和光栅——均置于空气中，并将空气建模为介电常数为 $\varepsilon = 1.0$的介质。

图 6a 展示了通过改变光栅耦合器的间距计算得到的反射率光谱（R）。在双曲能量范围（$E < E_p = 0.62$ 电子伏特）内，VPP 模式的激发对应于反射率光谱中的局部极小值。例如，在 $\Lambda = 0.9\mu$m 的情况下，可以识别出三个明显的共振——分别标记为 VPP0、VPP1 和 VPP2，并以黄色符号标出。相应的透射率和吸收光谱见补充信息中的图S13。共振 VPP0 出现在 I 型双曲区域，而 VPP1 和 VPP2 出现在 II 型区域。此处，双曲特性由有效介质理论得出（图 3a）。其余 $E > E_p$ 处的极小值对应于介电质中常见的带间激发。VPP0 的反射极小值最为显著，且几乎不受光栅几何结构的影响。增大光栅周期会使反射谷减弱。尽管这三种 VPP 模式位于中红外范围，但这并不意味着超材料的工作范围局限于太赫兹区域。事实上，这些 VPP 能量值是由特定的掺杂、堆叠结构几何形状以及光栅耦合器所施加的动量匹配条件共同决定的。

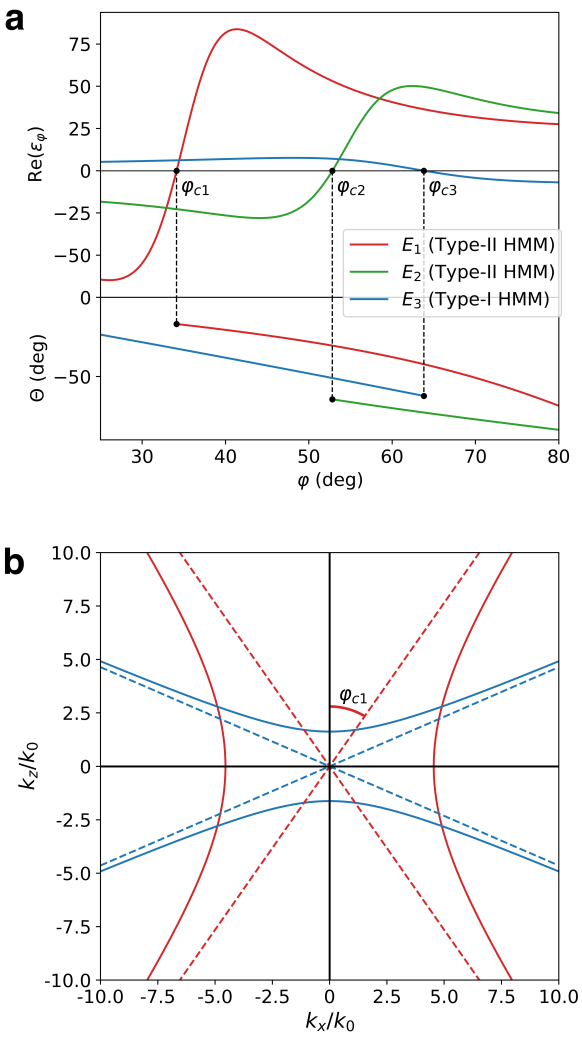


图 5. a）Si:InAs/AlSb 多层结构（$\varepsilon_\varphi$，上方面板）激发的 VPP 的角度介电函数实部，以及相对于光轴的允许圆锥角（Θ，下方面板），对应能量 $c_2 = 3.12\%$、 $f_m = 0.5$），即图 $E_1$、 $E_2$ 和 $E_3$ 3 中所示的能量；b）Si:InAs/AlSb 的二维投影 $k$色散（直线），对应于 $E_1$ （I型，红线）和 $E_2$ （II型，蓝线）。虚线表示双曲面渐近线，其斜率对应于面板 a 中标出的临界角 $\varphi_c$ 。

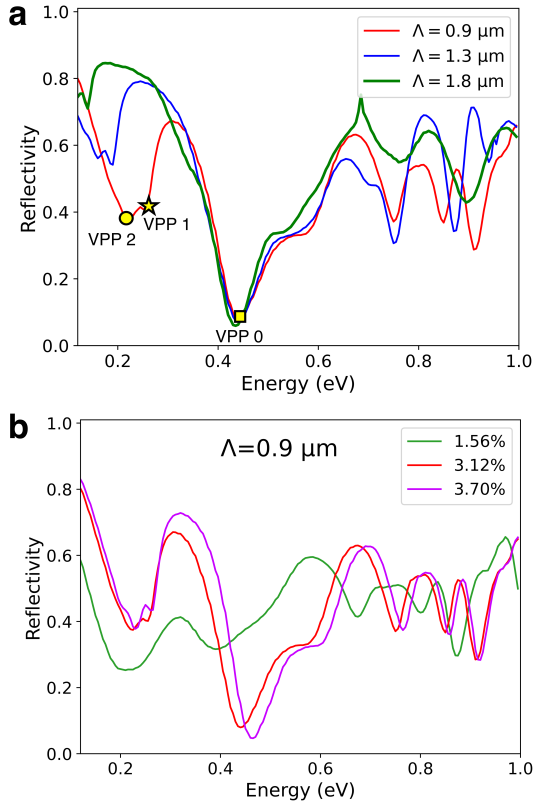


图 6. Si:InAs/AlSb 多层结构反射率光谱（R）的 S矩阵模拟，展示其随以下参数的变化：a）光栅周期（Λ）；b）Si掺杂浓度。黄色方块、星形和圆形分别对应 VPP0、VPP1 和 VPP2。

光栅耦合器。当光栅周期增大时（尤其是对于 $\Lambda = 1.8\mu$ m），与 VPP1 和 VPP2 相关的体积等离激元极化激元分支相较于 $\Lambda = 0.9\mu$m 情况发生红移。这些红移后的模式恰好落在中红外至太赫兹范围内，与实验结果 [42, 43] 一致。

对于非磁性超材料，只能激发横磁模 [83]。图6a中标出的三个VPP对应的磁场分布如图7（上方面板）所示，这实际上证实了电磁波在堆叠结构中传播。然而，只有VPP0波在结构外部以显著强度传播，即 $H > 0$ 在右侧区域。对于VPP1和VPP2，前置光栅允许在多层结构内激发电磁模，而较小的$k$ 失配（这是II型超材料的典型特征）会阻止这些模式透射到空气区域（另请参见补充信息中的图S13透射率图）。因此，这些模式虽可被激发，却仍被限制在堆叠结构内。采用不同的外部介电材料或加入合适的后置光栅，可促进这些模式在多层结构外传播。

根据超材料内部磁场的节点数，VPP模式可分为不同阶数（图7，下方面板）。VPP0没有节点，代表第*0*阶模式；VPP1和VPP2分别有一个和两个节点，对应第*1*阶和第*2*阶模式。导电层中的掺杂调制还会进一步影响VPP模式（图6b），它会改变双曲范围，以及反射率极小值的数量和能量位置。尤其是，低掺杂剂浓度会使反射光谱整体变平，这表明VPP模式的能量损耗更高。这意味着，要有效维持等离激元极化激元波，掺杂水平必须达到最低阈值

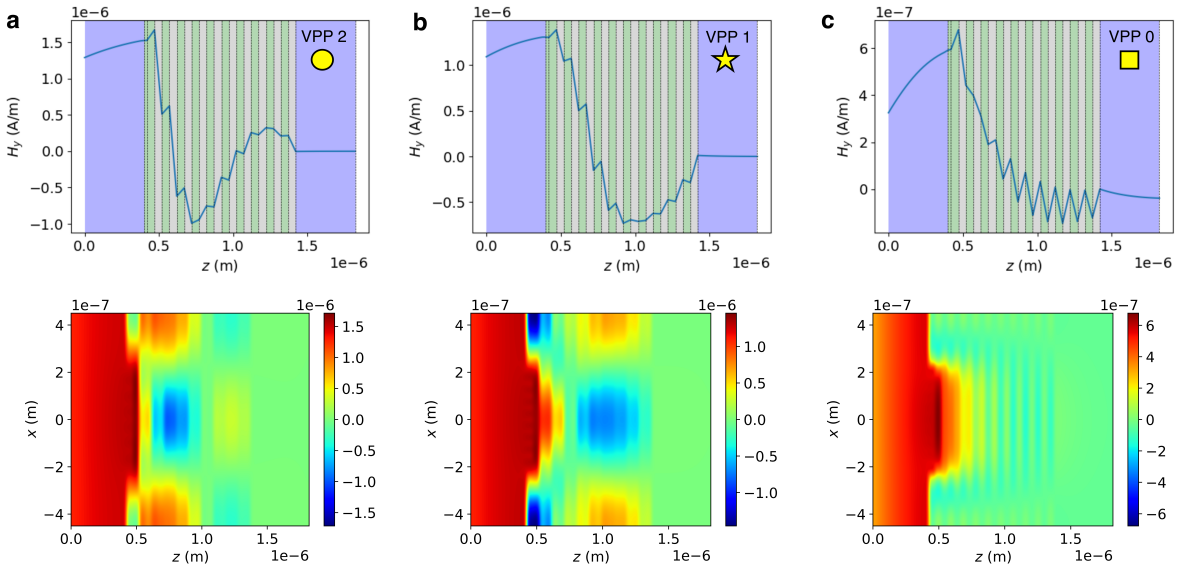


图 7. 图6a 中标识的 Si:InAs/AlSb 超材料 a) VPP2、b) VPP1 和 c) VPP0 模式的磁场强度（上）和二维剖面（下）（$c_2 = 3.12\%$，$f_m = 0.5$，$d_{tot} = 100$ 纳米，$\mathcal{N} = 10$，以及 $\Lambda = 0.9\mu$米）。绿色/灰色区域表示金属/介质双层结构，紫色区域表示反射/透射嵌入介质（即空气）；入射光从多层结构左侧入射，该结构还包括光栅层。二维场分布的计算空间分辨率为 ~11 纳米（沿 $x$ 方向）和 ~23 纳米（沿 $z$ 方向）。

贯穿多层结构。

这项分析证实，这类超材料能够在低至太赫兹频率下支持双曲色散和VPP传播，而双曲响应的具体特征则严格取决于层数和光栅几何结构。因此，计算周期性重复多层结构的光子能带结构很有用，它能给出系统电磁模式的整体分布（即布洛赫态）。Si:InAs/AlSb（$c_2 = 3.12\%$，$f_m = 0.5$，$d_{tot} = 100$ 纳米）的结果汇总于图8中。由于界面处电磁场连续性条件的约束，能量 $E$ 以及平行于（$k_x$）和垂直于（$k_z$）界面的波函数分量（图1a）并非独立变量。图8a中，灰度谱中的像素颜色表示复布洛赫波矢虚部的大小 $k_z$，其随 $E$ 和 $k_x$的变化而变化。较亮区域对应虚部较小的区域，表明电磁波在超材料中的衰减较弱。相反，较暗区域表示虚部较大，因此衰减较强。

尽管光子能带结构（PBS）图为无限多层结构内电磁模式的激发提供了连续解，但有限厚度的堆叠结构和匹配耦合器所施加的边界条件会形成选择规则，从而限制超材料中能够激发的 VPP 模式。例如，加入光栅层会对面内$k_x$ 波矢施加条件，这些条件取决于光栅周期 $\Lambda$。因此，在图 8a 中，我们绘制了能带图，~将其表示为 $k_x = k_x/T_x$的函数，其中 $T_x = 2\pi/\Lambda$，且$\Lambda = 0.9\mu$m。这样便可以将光栅折射分量分解为多个谐波，如~图 8b 所示。整数值 $k_x = 0$、1、.....、$n$（红色竖线）分别对应基波、第一.....次 $n^{th}$ 谐波；谐波阶数越高，折射电磁分量的强度越低。

类似地，有限数量的重复金属/介质双层结构会选定可能的 $k_z$ 垂直于堆叠结构的特定值。在多层结构中只能激发有限数量的布洛赫波；当堆叠结构的厚度为入射辐射半波长的整数倍时，便会发生这种情况。这对应于满足共振条件 $d_{tot}/2\pi k_z = (m+1)/2\mathcal{N}$，其中 $d_{tot}$ 和 $\mathcal{N}$分别表示厚度和重复双层结构的数量，而 $m$ 是一个从 0 到 $\mathcal{N}-1$的整数。 $m$索引表示超材料内部电磁场的节点数，因此直接关联了 $k_z$ 的共振值与上述讨论的 VPP 阶数。图 8a 中的彩色线条表示 Si:InAs/AlSb 中前六个共振 $k_z$ 值对应的等值线，该结构由 $\mathcal{N} = 10$ 个双层结构组成。一旦光栅和厚度条件确定，垂直红线与彩色等值线的交点便对应于超材料内部可能激发的唯一电磁场。改变 $\Lambda$ 和/或 $\mathcal{N}$的值会使光子能带结构图中匹配点的位置发生偏移。

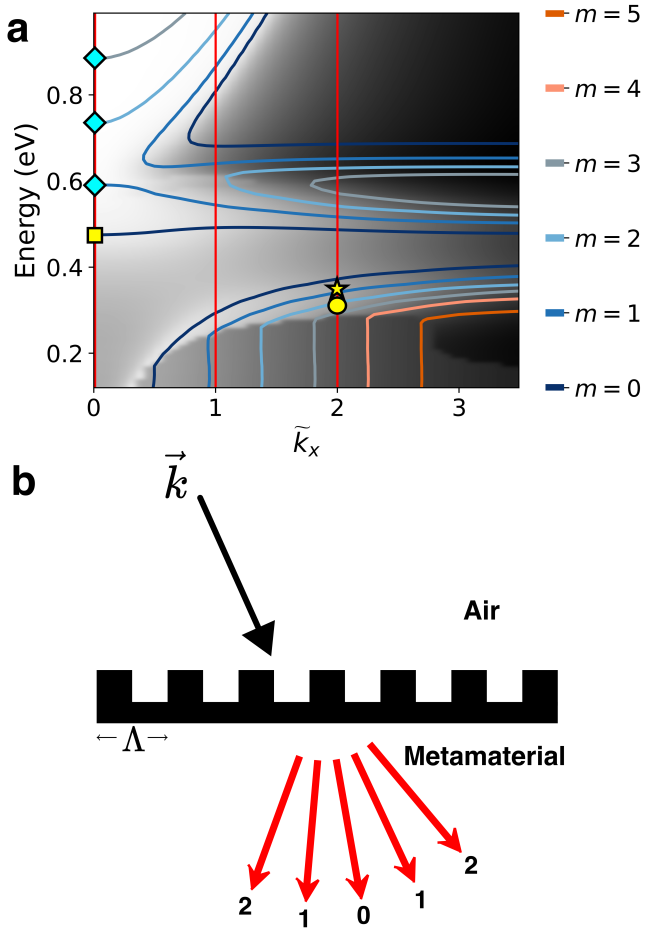


图 8. a) Si:InAs/AlSb 的光子能带结构（ $c_2 = 3.12$ $f_m = 0.5$ $d_{tot} = 100$ %, , nm）。红色竖线表示 $\Lambda = 0.9$ $\mu$m 时最低阶谐波贡献，彩色曲线表示 $k_z$ 金属/介质双层结构的前六个共振值（ $m = \{0 - 5\}$）。彩色符号表示所选几何条件下的电磁解：青色菱形表示普通介质折射模式，黄色符号表示图 6a 中最强的体等离激元极化激元模式。b) 平面光栅产生谐波的示意图。整数标记表示最低阶衍射谐波，对应于面板 a) 中的红线。

对于图 8a，在 $E > 0.6$ 电子伏特时，系统呈现介电特性，因此共振点（青色菱形）对应于普通光折射条件。E˜.74 电子伏特和 0.89 电子伏特处的数值在 $k_x = 0$附近，与图 6a 反射率光谱中的高能量极小值十分接近。对于 $E \sim 0.5$ 电子伏特，系统呈现 I型双曲响应，而匹配点˜位于基频谐波线 $k_x = 0$ 与$m = 0$ 等值线之间，代表 VPP0模式（黄色方块），对应于反射率光谱中的最低极小值。 $m = 0$等值线平坦的能量色散与反射极小值对..... 不敏感相一致

相对于光栅周期的极小值 Λ如图 6a 所示。在较低能量下，系统具有 II 型特征。在这种情况下，基波不会对高阶体等离激元极化激元产生贡献，即在˜处不存在等值线交点 $k_x = 0$。反射光谱中观察到的 VPP1（黄色星形）和 VPP2（黄色圆形）共振主要源自二次谐波衍射峰˜( $k_x = 2$) 以及 $m = 1$ 和 $m = 2$的等值线。相较于反射率极小值强度较低，这些峰靠近图中的深色边缘（即能量耗散较高）。在更高阶的谐波条件下，还可以激发高阶体等离激元极化激元，但其强度较低，因此在反射率光谱中难以辨认。

## 结论

通过结合多尺度和多物理场技术，我们研究了在基于III-V族半导体的双曲超材料中激发和调谐体等离激元极化激元模式的可能性。我们通过改变化学组分、掺杂浓度、金属填充因子、堆叠结构中的层数以及光栅耦合器，分析了多维相空间。这使我们能够与实验值进行直接比较，并深入理解这些双曲超材料中体等离激元极化激元模式的起源。我们采用第一性原理模拟来评估掺杂对介电函数以及组成材料中等离激元激发的影响。有效介质理论能够提供对超材料整体光学响应的认识，而 $S$-矩阵方法则被证明是解读实验光谱的有力工具，因为它直接考虑了实验装置的所有几何特征。最后，光子能带结构对于设计和优化几何条件尤其有用，可用于调谐能够穿过多层结构传播的体等离激元极化激元的能量及其空间分布。我们的综合方法为实现最佳等离激元基双曲超材料铺平了材料—几何协同设计的道路。从组成材料的原子级描述出发，我们证明，恰当地选择组分和几何结构，能够在中红外和太赫兹波段激发多个具有高品质因数（即低损耗）的VPP传播模式。它们的能量和传播长度可以选择性地调控，从而为生物传感应用、热辐射调控和太赫兹探测开辟新途径。特别是，与贵金属相比，选择III-V族半导体有望实现更好的外延生长兼容性，从而改善与其他半导体纳米结构（例如二维材料、量子阱、量子点等）的单片集成，并实现具有增强性能和新型色散工程的混合极化激元太赫兹器件（例如片上光学器件、激光器、探测器和调制器），实现增强的性能和新颖的色散工程。

此外，超材料的高光子态密度，加上掺杂半导体的等离激元可调性，使这些系统有望实现增强的热辐射和辐射热传递，甚至超越黑体极限。

## 致谢

L.B. 感谢 PNRR MUR 项目 ECS 00000033 ECOSISTER 提供的资金支持。A.C. 感谢由国家复苏与韧性计划（NRRP）任务04组成部分2投资1.4、下一代欧盟（NextGenerationEU）资助的国家高性能计算、大数据与量子计算中心（ICSC），项目编号：CN00000013。S.Cur. 感谢美国海军研究办公室通过拨款 N00014-23-1-2615 和 N00014-24-1-2768 提供的支持，以及国防部高性能计算现代化计划（Frontier）提供的支持。S.Cur. 还感谢 Auro Scientific, LLC 提供计算支持。作者感谢 Simon Divilov、Xiomara Campilongo 和 Doug E. Wolfe 博士开展的有益讨论。

## 补充信息

补充信息包括对第2节中介绍并在本文中使用的有效介质理论、散射矩阵法和光子能带结构方法的补充说明。补充信息部分汇总了其他结果：III-V族半导体的结构和电子性质；III-V族半导体的光学性质，包括频率相关介电函数；由 III-V族半导体/Si:InAs ($c_2 = 3.12\%$, $f_m = 0.5$) 构成的超材料的有效介质理论表征，该表征以介电质组分为函数，同时还包括 AlSb/Si:InAs双曲超材料的双曲特性，该特性同时取决于掺杂浓度和金属填充因子；以及通过散射矩阵法模拟获得的有限 AlSb/Si:InAs双曲超材料 ($c_2 = 3.12\%$, $f_m = 0.5$, $\mathcal{N} = 10$) 的完整反射率、透射率和吸收光谱。

## 作者贡献

A.C. 和 L.B. 提出了本研究的构想。S.C. 完成了计算并实现了 AFLOW-EMERALD 代码。S.C.、L.B. 和 A.C. 分析了数据。A.C. 和 S. Cur. 确定了研究方向并负责监督项目。所有作者均参与了稿件的撰写。

## 注释

作者声明不存在竞争性经济利益。

[1] I. I. Smolyaninov, *Hyperbolic metamaterials*, 2053-2571（Morgan & Claypool Publishers，2018）。[2] A. Poddubny、I. Iorsh、P. Belov 和 Y. Kivshar，双曲超材料，Nature Phot. **7**，948（2013）。[3] K. Sreekanth、A. De Luca 和 G. Strangi，利用 1 激发金属-介电质超材料中的体等离激元极化激元**16**，105103 2 2014 d 和 d 衍射光栅，J. Opt.（）。[4] A. Moradi, *Theory of electrostatic waves in hyperbolic metamaterials*（Springer光学科学丛书，2023）。[5] S. V. Zhukovsky、O. Kidwai 和 J. E. Sipe，双曲超材料中体等离激元极化激元的物理本质，Opt. Express **21**，14982（2013）。[6] L. Ferrari、C. Wu、D. Lepage、X. Zhang 和 Z. Liu，双曲超材料及其应用，Prog. Quantum Electron. **40**，1（2015）。[7] K. V. Sreekanth、Y. Alapan、M. ElKabbash、A. M. Wen、E. Ilker、M. Hinczewski、U. A. Gurkan、N. F. Steinmetz 和 G. Strangi，利用双曲超材料提升等离激元传感器的角度灵敏度，Adv. Opt. Mater. **4**, 1767（2016）。[8] A. Kumar、N. Kumar、G. N. Pandey、D. Singh 和 K. B. Thapa，基于超材料等离子体的双曲材料用于微波频段的传感器、探测器和开关应用，《物理学杂志：凝聚态物质》**32**，325701（2020）。[9] X. Yin、C. Long、J. Li、H. Zhu、L. Chen、J. Guan 和 X. Li，通过连接两种不同尺寸的双曲超材料波导阵列的多个吸收带实现超宽带微波吸收器，《科学报告》**5**，15367（2015）。[10] E. E. Narimanov、H. Li、Y. A. Barnakov 和 M. A. Noginov，暗于黑色：吸收辐射的超材料，载于 *Conference on Lasers and Electro-Optics 2010*（Optica出版集团，2010）第 QPDA6 页。[11] S.-A. Biehs、M. Tschikin 和 P. Ben-Abdallah，双曲超材料作为近场黑体的模拟，《物理评论快报》**109**，104301（2012），1112.4966。[12] Y. Guo 和 Z. Jacob，热双曲超材料，Opt. Express **21**, 15014（2013）。[13] P. Shekhar、J. Atkinson 和 Z. Jacob，双曲超材料：基础与应用，Nano Converg.**1**，1（2014）。[14] G. V. Naik、J. Liu、A. V. Kildishev、V. M. Shalaev 和 A. Boltasseva，展示铝掺杂氧化锌作为近红外超材料的等离激元组件，《美国国家科学院院刊》**109**，8834（2012）。

[15] G. V. Naik、V. M. Shalaev 和 A. Boltasseva，以氮化钛作为等离激元组件的外延超晶格表现为双曲超材料，《美国国家科学院院刊》111，7546（2014）。[16] H. Nan、P. Xiong、G.-J. Zhong、Y. Li、R. Li、J.-H. Niu、J. Lei 和 Z.-M. Li，银/二氧化硅和银/二氧化钛纳米级厚度层作为双曲超材料，《ACS应用纳米材料》7，1711（2024）。[17] Y. J. Jen 和 C. T.-L，由铝氧化物/银/铝氧化物多层结构组成的超材料的精确拓扑转变和负折射，Opt. Express 31，7734（2023）。[18] C. T. Riley、J. S. T. Smalley、J. R. J. Brodie、Y. Fain-man、D. J. Sirbuly 和 Z. Liu，双曲超材料纳米颗粒实现近乎完美的宽带吸收，《美国国家科学院院刊》114，1264（2017）。[19] Q. Ma、H. Qian、S. Montoya、W. Bao、L. Ferrari、H. Hu、E. Khan、Y. Wang、E. E. Fullerton、E. E. Narimanov、X. Zhang 和 Z. Liu，双曲超材料辅助照明纳米显微术的实验演示，《ACS纳米》12，11316（2018）。[20] Y. U. Lee、J. Zhao、Q. Ma、L. K. Khorashad、C. Pos-ner、G. Li、G. B. M. Wisna、Z. Burns、J. Zhang 和 Z. Liu，通过随机超分辨散斑实现超材料辅助照明纳米显微术，Nature Commun. 12，1559（2021）。[21] A. J. Hoffman、L. Alekseyev、S. S. Howard、K. J. Franz、D. Wasserman、V. A. Podolskiy、E. E. Narimanov、D. L. Sivco 和 C. Gmachl，半导体超材料中的负折射，Nature Mater. 6，946（2007）。[22] A. Boltasseva 和 H. A. Atwater，低损耗等离激元超材料，Science 331，290（2011）。[23] M. Karali¯unas、K. E. Nasser、A. Urbanowicz、I. Kaˇsalynas、D. Braˇzinskien˙e、S. Asadauskas 和 G. Valuˇsis，利用太赫兹光谱对食品和工业油进行无损检测，《科学报告》8，18025（2018）。[24] A. Gong、Y. Qiu、X. Chen、Z. Zhao、L. Xia 和 Y. Shao，太赫兹技术的生物医学应用，Appl. Spectr. Rev. 55，418（2020）。[25] C. Jansen、S. Wietzke、O. Peters、M. Scheller、N. Vieweg、M. Salhi、N. Krumbholz、C. J¨ordens、T. Hochrein 和 M. Koch，太赫兹成像：应用与展望，Appl. Opt. 49，E48（2010）。[26] A. G. Davies、A. D. Burnett、W. Fan、E. H. Linfield 和 J. E. Cunningham，爆炸物和药物的太赫兹光谱，Mater. Today 11，18（2008）。[27] H. Chen、L. Shao、Q. Li 和 J. Wang，金纳米棒及其等离激元性质，Chem. Soc. Rev. 42，2679（2013）。[28] W. Li、U. Guler、N. Kinsey、G. V. Naik、A. Boltasseva、J. Guan、V. M. Shalaev 和 A. V. Kildishev，氮化钛耐高温等离激元学：宽带超材料吸收器，Adv. Mater. 26，7959（2014）。[29] A. Catellani 和 A. Calzolari，耐高温氮化钛的等离激元性质，《物理评论B》95，115145（2017）。[30] A. Calzolari、A. Catellani、M. Buongiorno Nardelli 和 M. Fornari，具有极高机械硬度的双曲超材料，Adv. Opt. Mater. 9，2001904（2021）。[31] A. Calzolari、C. Oses、C. Toher、M. Esters、X. Campi-longo、S. P. Stepanoff、D. E. Wolfe 和 S. Curtarolo，等离激元高熵碳化物，Nature Commun. 13，5993（2022）。[32] S. Divilov, S. Griesemer, R. C. Koennecker, M. Ammendola, A. Zettel, H. Eckert, J. Shallenberger, X. Campilongo, W. Fahrenholtz, A. Calzolari, D. E. Wolfe, and S. Curtarolo, 可变温度等离激元高熵碳化物，《高熵合金与材料》3, 273 (2025)。[33] G. S. Rohrer, M. Affatigato, M. Backhaus, R. K. Bordia, H. M. Chan, S. Curtarolo, A. Demkov, J. N. Eckstein, K. T. Faber, J. E. Garay, Y. Gogotsi, L. Huang, L. E. Jones, S. V. Kalinin, R. J. Lad, C. G. Levi, J. Levy, J.-P. Maria, L. Mattos Jr.，A. Navrotsky, N. Orlovskaya, C. Pantano, J. F. Stebbins, T. S. Sudarshan, T. Tani, and K. S. Weil，陶瓷科学面临的挑战：陶瓷科学新兴研究领域研讨会报告，J. Am. Ceram. Soc. 95, 3699 (2012)。[34] H. R. Seren, J. Zhang, G. R. Keiser, S. J. Maddox, X. Zhao, K. Fan, S. R. Bank, X. Zhang, and R. D. Averitt，利用半导体等离激元超材料的非线性太赫兹器件，Light: Science & Applications 5, e16078 (2016), 1508.03183。[35] J. Tong, F. Suo, T. Zhang, Z. Huang, J. Chu, and D. H. Zhang, 等离激元半导体纳米沟槽阵列增强的宽光谱毫米波和太赫兹波探测，Light: Science & Applications 10, 58 (2021)。[36] I. Aupiais, R. Grasset, T. Guo, D. Daineka, J. Briatico, S. Houver, L. Perfetti, J.-P. Hugonin, J.-J. Greffet, and Y. Laplace，极限等离激元极限下超小型可调谐太赫兹表面等离激元腔，Nature Commun. 14, 7645 (2023)。[37] J. Duan, M. O. Liedke, W. Dawidowski, R. Li, M. Butterling, E. Hirschmann, A. Wagner, M. Wang, L. B. Young, Y.-H. G. Lin, M. Hong, M. Helm, S. Zhou, and S. Prucnal，面向中红外等离激元学的重掺杂n型砷化镓的制备与表征，J. Appl. Phys. 134, 095102 (2023)。[38] D. Li and C. Z. Ning，中红外波长范围内的全半导体有源等离激元系统，Opt. Express 19, 14594 2011( )。[39] J. Chochol, K. Postava, M. ˇCada, M. Vanwolleghem, M. Miˇcica, L. Halagaˇcka, J.-F. Lampin, and J. Piˇstora，III-V族半导体在远红外和太赫兹范围内的等离激元行为，J. Eur. Opt. Soc. Rapid Publ. 13, 13 (2017)。[40] X. Wang, A. A. Belyanin, S. A. Crooker, D. M. Mittleman, and J. Kono，干涉诱导的半导体磁等离子体太赫兹透明效应，Nature Phys. 6, 126 (2010)。[41] P. Sai, V. V. Korotyeyev, M. Dub, M. S˙lowikowski, M. Filipiak, D. B. But, Y. Ivonyak, M. Sakowicz, Y. M. Lyaschuk, S. M. Kukhtaruk, G. Cywi´nski, and W. Knap，太赫兹等离激元晶体相的电调谐，《物理评论X》13, 041003 (2023)。[42] P. Sohr, D. Wei, S. Tomasulo, M. K. Yakes, and S. Law，红外双曲超材料中同时实现高模式指数和高品质因数，ACS Photonics 5, 4003 2018( )。[43] P. Sohr, D. Wei, Z. Wang, and S. Law，半导体双曲超材料中的强耦合，Nano Lett. 21, 9951 (2021)。[44] M. Desouky, A. M. Mahmoud, and M. A. Swillam，基于砷化铟的半导体双曲超材料中的可调谐中红外聚焦，《科学报告》7, 15312 (2017)。

[45] S. Jahani and Z. Jacob，全介质超材料，Nature Nanotech. 11, 23 (2016)。[46] D. Wei, C. Harris, C. C. Bomberger, J. Zhang, J. Zide, and S. Law，单材料半导体双曲超材料，Opt. Express 24, 8735 (2016)。[47] S. Q. Li, P. Guo, L. Zhang, W. Zhou, T. W. Odom, T. Seideman, J. B. Ketterson, and R. P. H. Chang，利用氧化铟锡纳米棒阵列实现红外等离激元学，《ACS纳米》5, 9161 (2011)。[48] W. Liang, Z. Li, Y. Wang, W. Chen, and Z. Li，基于石墨烯-介质双曲超材料零反射效应的全角度光学开关，Photon. Res. 7, 318 (2019)。[49] H. M. K. Wong and A. S. Helmy，光学频率下晶体半导体中的光学定义等离激元波导，J. Opt. Soc. Am. B 30, 1000 (2013)。[50] F. Caruso and F. Giustino，半导体中的电子-等离激元耦合理论，《物理评论B》94, 115208 (2016)。[51] J.-M. Lihm and C.-H. Park，基于第一性原理研究掺杂半导体中的等离激元-声子杂化，《物理评论快报》133, 116402 (2024)。[52] H. Zhang, V. Kulkarni, E. Prodan, P. Nordlander, and A. O. Govorov，掺杂半导体纳米晶体中量子等离激元共振理论，J. Phys. Chem. C 118, 16035 (2014)。[53] J. Jung and T. G. Pedersen，利用全能带结构计算分析重掺杂半导体的等离激元性质，J. Appl. Phys. 113, 114904 (2013)。[54] J. Gjerde and R. A. Jishi，bamoo$_3$/srhfo$_3$ 双曲超材料光学性质的第一性原理研究，Comput. Mater. Sci. 226, 112199 (2023)。[55] A. Ebrahimian and R. Asgari，层状六方晶体结构中的天然双曲性，《物理评论B》103, 035425 2021( )。[56] M. N. Gjerding, R. Petersen, T. G. Pedersen, N. A. Mortensen, and K. S. Thygesen，具有双曲光色散的层状范德华晶体，Nature Commun. 8, 320 (2017)。[57] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, and R. M. Wentz-covitch，Quantum espresso：用于材料量子模拟的模块化开源软件项目，J. Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009)。[58] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. B. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A. D. Corso, S. de Gironcoli, P. Delugas, R. A. DiStasio, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H.-Y. Ko, A. Kokalj, E. K¨u¸c¨ukbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N. L. Nguyen, H.-V. Nguyen, A. O. de-la Roza, L. Paulatto, S. Ponc´e, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, and S. Baroni，利用Quantum espresso进行材料建模的高级功能，J. Phys.: Condens. Matter 29, 465901 (2017)。

[59] J. P. Perdew、K. Burke 和 M. Ernzerhof，广义梯度近似的简化，《物理评论快报》77，3865（1996）。[60] D. R. Hamann，优化的范数守恒范德比尔特赝势，《物理评论 B》88，085117（2013）。[61] 赝势库，https://github.com/pipidog/ ONCVPSP（2022）。[62] S. L. Dudarev、G. A. Botton、S. Y. Savrasov、C. J. Humphreys 和 A. P. Sutton，氧化镍的电子能量损失谱与结构稳定性：lsda+$u$ 研究，《物理评论 B》57，1505（1998）。[63] B. Himmetoglu、A. Floris、S. De Gironcoli 和 M. Cococcioni，哈伯德校正的 DFT 能量泛函：关联体系的 LDA+$U$ 描述，《国际量子化学杂志》114，14（2014）。[64] L. A. Agapito、S. Curtarolo 和 M. Buongiorno Nardelli，将 dft+$u$ 重新表述为用于加速材料发现的赝杂化哈伯德密度泛函，《物理评论 X》5，011006（2015）。[65] M. Buongiorno Nardelli、F. T. Cerasoli、M. Costa、S. Curtarolo、R. De Gennaro、M. Fornari、L. Liyanage、A. R. Supka 和 H. Wang，Paoflow：一种从电子波函数在原子轨道基组上的投影构建和操作第一性原理哈密顿量的工具，包括拓扑材料的表征，《计算材料科学》143，462（2018）。[66] A. Calzolari、A. Ruini 和 A. Catellani，透明导电氧化物作为近红外等离激元材料：铝掺杂氧化锌衍生物的案例，ACS Photonics 1，703（2014）。[67] R. Colle、P. Parruccini、A. Benassi 和 C. Cavazzoni，基于第一性原理计算的翠绿亚胺盐聚合物光学性质：与近期实验数据的比较，《物理化学 B》111，2800（2007），https://doi.org/10.1021/jp067847n。[68] F. Wooten，*Optical properties of solids*（Academic Press，纽约和伦敦，1972）。[69] O. Kidwai、S. V 和 J. E. Sipe，平面多层超材料的有效介质方法：优势与局限，《物理评论 A》85，053842（2012）。[70] D. W. Berreman，层状和各向异性介质中的光学： $4\times$ 4-矩阵表述，《美国光学学会杂志》62，502（1972）。[71] R. C. Rumpf，改进的散射矩阵表述：与约定一致的半解析方法，《电气研究进展 B》35，241（2011）。[72] M. Born、E. Wolf、A. B. Bhatia、P. C. Clemmow、D. Gabor、A. R. Stokes、A. M. Taylor、P. A. Wayman 和 W. L. Wilcock，*Principles of optics: electromagnetic the-ory of propagation, interference and diffraction of light*，第 7 版，1999 年（剑桥大学出版社，）。[73] S. Campanaro、L. Bursi、S. Curtarolo 和 A. Calzolari，Aflow-emerald——先进层状材料中的电磁模式工程，预印本（2025）。[74] M. Agio 和 L. Andreani，光子带隙材料的电子态，载于 *Encyclopedia of Condensed Matter Physics*，F. Bassani、G. L. Liedl 和 P. Wyder 编（Elsevier，牛津，2005），第 286–294 页。[75] Y.-S. Kim、K. Hummer 和 G. Kresse，使用杂化泛函计算 InP、InAs 和 InSb 的精确能带结构与有效质量，《物理评论 B》80，035203（2009）。[76] Y.-S. Kim、M. Marsman、G. Kresse、F. Tran 和 P. Blaha，面向高效能带结构和有效

质量计算：III-V族直接带隙半导体，《物理评论B》82，205212（2010）。[77] J. Even、L. Pedesseau、E. Tea、S. Almosni、A. Rolland、C. Robert、J.-M. Jancu、C. Cornet、C. Katan、J.-F. Guillemoles和O. Durand，《用于光伏应用的半导体密度泛函理论模拟：杂化有机-无机钙钛矿和III-V族异质结构》，《国际光能杂志》2014，649408（2014）。[78] G. Grosso和G. P. Parravicini，*Solid State Physics*（Academic Press，2013）。[79] S. H. Rhim、M. Kim、A. J. Freeman和R. Asahi，《III-V族半导体激发态及光学性质的完全第一性原理屏蔽交换LDA计算》，《物理评论B》71，045202（2005）。[80] S. Hwang、T. Kim、Y. Jung、N. Barange、H. Park、J. Kim、Y. Kang、Y. Kim、S. Shin、J. Song、C.-T. Liang和Y.-C. Chang，《通过光谱椭偏法确定的磷化铝介电函数和临界点》，《合金与化合物杂志》587，361（2014）。[81] M. Garriga、P. Lautenschlager、M. Cardona和K. Ploog，《砷化铝的光学性质》，《固态通信》61，157（1987）。[82] S. Zollner、C. Lin、E. Sch¨onherr、A. B¨ohringer和M. Cardona，《通过光谱椭偏法测定的1.4至5.8电子伏特范围内锑化铝的介电函数》，《应用物理学杂志》66，383（1989）。[83] I. V. Lindell、S. A. Tretyakov、K. I. Nikoskinen和S. Ilvonen，《具有负参数、能够支持后向波的BW介质》，《微波与光学技术快报》31，129（2001）。[84] S. Ishii、A. V. Kildishev、E. Narimanov、V. M. Shalaev和V. P. Drachev，《双曲介质中体等离激元极化激元产生的亚波长干涉图样》，《激光与光子学评论》7，265（2013）。[85] J. Singh，*Physics of Semiconductors and their Heterostructures*（1993，McGraw-Hill College，）。[86] D. E. Aspnes和A. Studna，《硅、锗、磷化镓、砷化镓、锑化镓、磷化铟、砷化铟和锑化铟在1.5至6.0电子伏特范围内的介电函数和光学参数》，《物理评论B》27，985（1983）。

## 补充信息

### 方法

**基于有效介质理论的体等离激元极化激元**。VPP 激发的宏观条件由角度相关的介电函数推导得出 [84]:

$$\varepsilon_\varphi(E) = \frac{\varepsilon_\perp \varepsilon_\parallel}{\varepsilon_\perp \sin^2(\varphi) + \varepsilon_\parallel \cos^2(\varphi)}, \tag{3}$$

其中 $E$ 为能量， $\varphi$为入射辐射的波矢 $\mathbf{k}$ 与超材料内部光轴 $z$之间的夹角，如图S1所示；$\varepsilon_\parallel$ 和 $\varepsilon_\perp$ 分别为平行和垂直于光轴方向的有效介电函数，其定义见公式1–2（第2节）以及正文图1a。

非常体等离激元极化激元波（即坡印廷矢量）与光轴之间的角度 $\Theta$ 为:

$$\Theta(\varphi) = \tan^{-1}\left(\mathrm{Re}\left[\frac{\varepsilon_\parallel}{\varepsilon_\perp}\right]\tan(\varphi)\right). \tag{4}$$

**散射矩阵法**。矩阵 $\mathbf{S}^{(n)}$ 关联了正文图 1b 所示的第$n$层左右（1 和 2）界面处电场和磁场的前向（$c^+$）与后向（$c^-$）传播分量的振幅系数。将所有层的$\mathbf{S}^{(n)}$ 组合起来，即可得到自由空间中多层结构的总散射矩阵$\mathbf{S}^{(\mathrm{ML})} = \mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(2)} \otimes \cdots \otimes \mathbf{S}^{(\mathcal{N})}$。通过引入矩阵$\mathbf{S}^{(\mathrm{r})}$ 和$\mathbf{S}^{(\mathrm{t})}$，即可轻松将多层结构的性质与外部环境联系起来；这两个矩阵分别考虑反射和透射嵌入区域，即入射光的来源介质和透射光传播进入的介质。系统的总散射矩阵

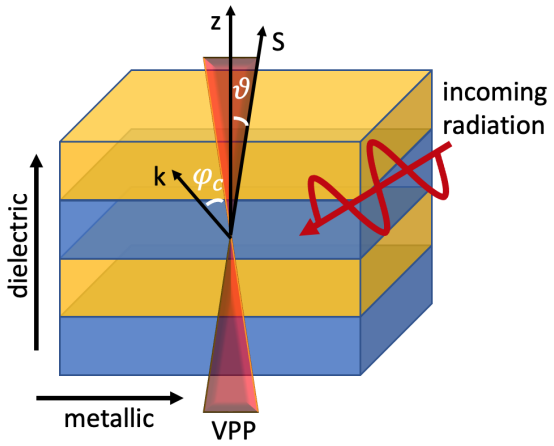


图 S1. 对应于 II 型双曲超材料的横磁（TM）传播波及双曲色散等值面的示意矢量图。

为：$\mathbf{S}^{(\mathrm{tot})} = \mathbf{S}^{(\mathrm{r})} \otimes \mathbf{S}^{(\mathrm{ML})} \otimes \mathbf{S}^{(\mathrm{t})}$。由$\mathbf{S}^{(\mathrm{tot})}$ 可得到反射和透射电磁场的模式系数： $c_r = S_{11}^{(\mathrm{tot})} c_{in}$ 和 $c_t = S_{21}^{(\mathrm{tot})} c_{in}$，其中$c_{in}$、 $c_r$、 $c_t$ 分别为入射、反射和透射辐射的振幅系数。反射率（R）、透射率（T）和吸收（A）函数根据整个多层结构中反射、透射和吸收后形成的电磁场计算得出 [73]。

**光子能带结构**。光子能带结构通过 *AFLOW-EMERALD* 代码 [73]展开电场和磁场的平面波基组来计算，这些基组同时满足布洛赫定理和散度方程。对于磁场，实空间中的麦克斯韦方程:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right] = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{H}(\mathbf{r}) \tag{5}$$

可转换为矩阵关系:

$$\sum_{G'} \mathbf{H}_{G,G'} c_n(\mathbf{k}+\mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} c_n(\mathbf{k}+\mathbf{G}), \tag{6}$$

其中

$$\mathbf{H}_{G,G'} = |\mathbf{k}+\mathbf{G}||\mathbf{k}+\mathbf{G}'| \times \varepsilon^{-1}(\mathbf{G},\mathbf{G}'). \tag{7}$$

$\mathbf{k}$ 是限制在第一布里渊区内的布洛赫矢量，$\mathbf{G}$ 和$\mathbf{G}'$ 是倒格矢， $n$ 是能带索引， $\omega$ 是频率， $c$ 是光速； $\varepsilon^{-1}(\mathbf{G},\mathbf{G}')$ 是 $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$ 的傅里叶变换。介电函数在布拉菲格矢$\mathbf{R}$平移下保持不变，即 $\varepsilon(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \varepsilon(\mathbf{r})$，并由构成块体材料的第一性原理模拟得出。 $c_n$ 是磁场的平面波展开系数:

$$\mathbf{H}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_G c_n(\mathbf{k}+\mathbf{G})\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{G})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}. \tag{8}$$

电场也适用类似的公式。

### 支持数据

表 S2. 使用 ACBN0 代码计算的有效 Hubbard 参数（$U_{eff}$）； [63, 64]晶格参数（$a_0$）； 以及$E_g$在 DFT+$U$ 理论水平下模拟的 III-V 族块体半导体能带隙。实验参考值也列出以供比较。

| 材料 | $U_{eff}$ (电子伏特) | | $a_0$ (Å) | | $E_g$ (电子伏特) | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | 本研究 | 参考值[a] | 本研究 | 参考值[a] |
| AlP | 铝(3p)=16.88 | 磷 (3p)=2.36 | 5.485 | 5.451 | 1.88 | 2.50 |
| AlAs | 铝 (3p)=16.87 | 砷 (4p)=2.08 | 5.692 | 5.661 | 1.67 | 2.12 |
| AlSb | 铝 (3p)=16.87 | 锑 (5p)=1.51 | 6.169 | 6.136 | 1.28 | 1.60 |
| GaP | 镓 (3d)=19.56 | 磷 (3p)=1.96 | 5.483 | 5.451 | 1.80 | 2.27 |
| GaAs | 镓 (3d)=19.61 | 砷 (4p)=1.75 | 5.688 | 5.653 | 0.74 | 1.42 |
| GaSb | 镓 (3d)=19.47 | 锑 (5p)=1.30 | 6.147 | 6.096 | 0.24 | 0.75 |
| InP | 铟 (4d)=14.23 | 磷 (3p)=2.18 | 5.912 | 5.869 | 1.08 | 1.42 |
| InAs | 铟 (4d)=14.30 | 砷 (4p)=1.94 | 6.151 | 6.058 | 0.25 | 0.42 |
| InSb | 铟 (4d)=14.37 | 锑(5p)=1.45 | 6.578 | 6.479 | 0.18 | 0.24 |

[a] 数据来自参考文献 [85]。

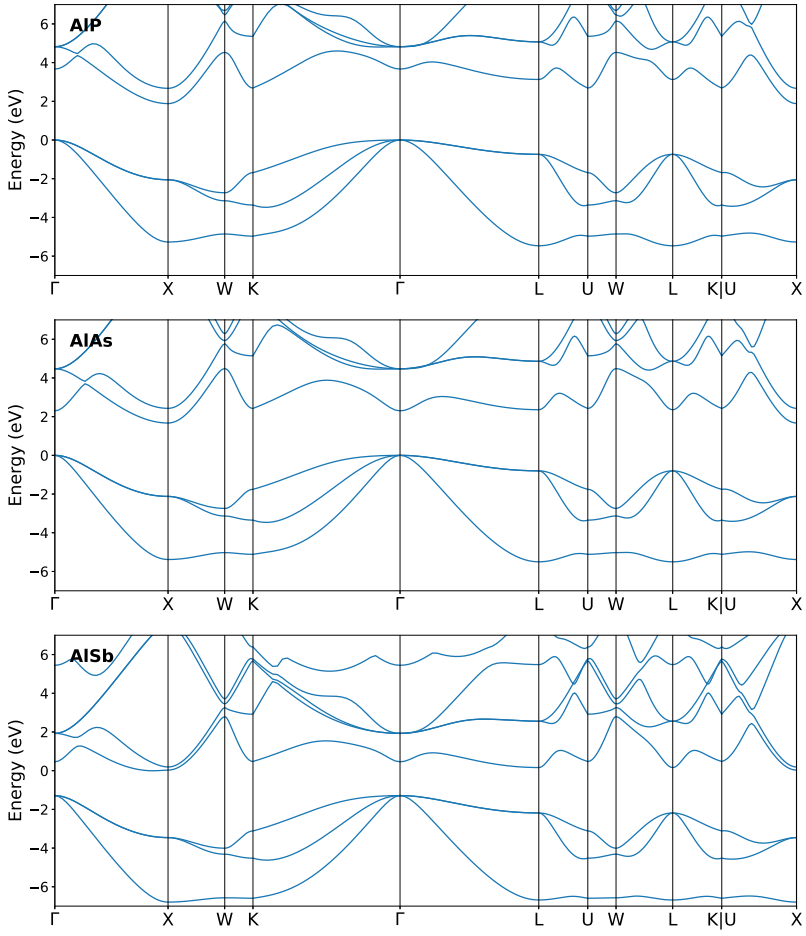


图 S2. 采用 DFT+$U$ 理论计算得到的磷化铝（上方面板）、砷化铝（中方面板）和锑化铝（下方面板）的能带结构。零点设为各体系的费米能级。

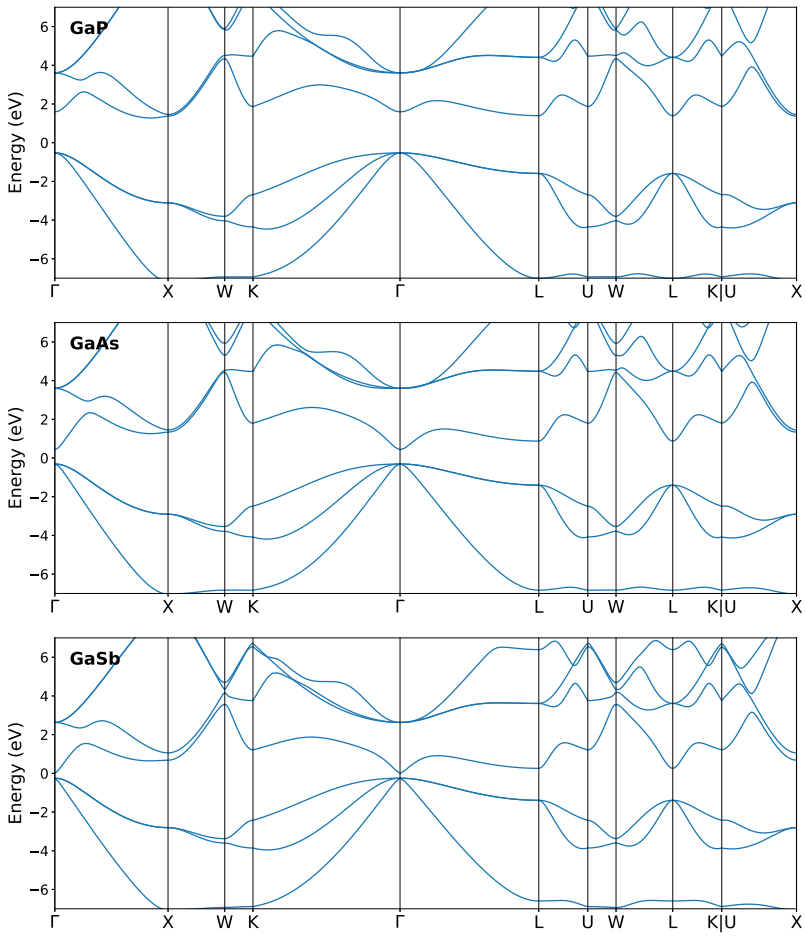


图 S3. 磷化镓（上方面板）、砷化镓（中间面板）和锑化镓（下方面板）的能带结构，采用 DFT+$U$ 理论计算。零点设为各体系的费米能级。

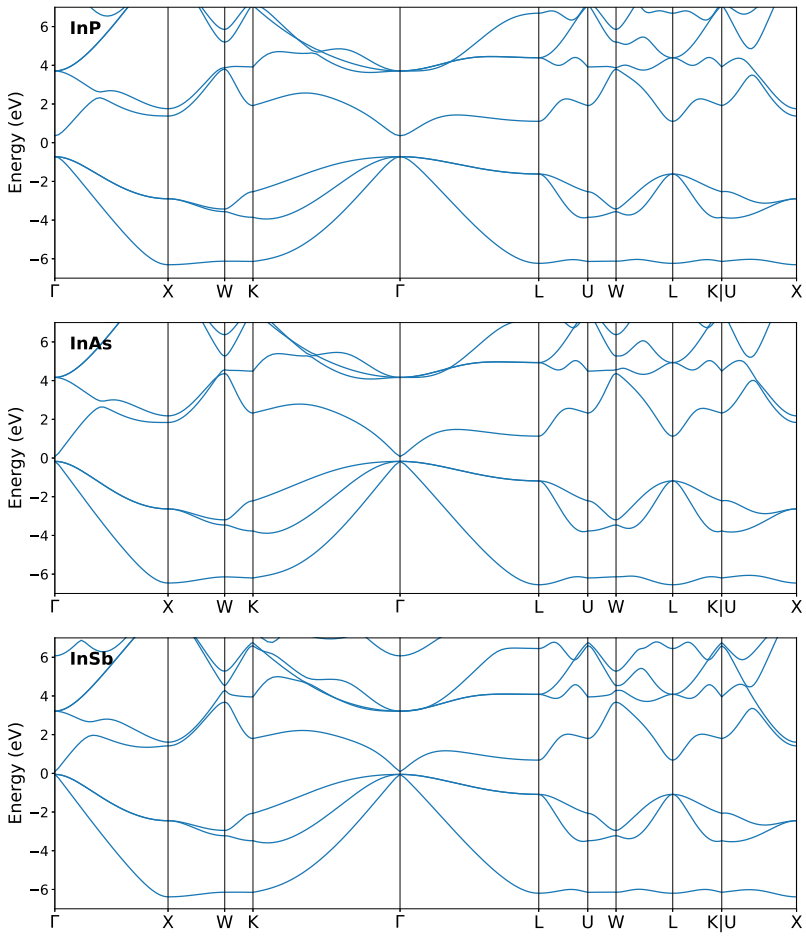


图 S4. 采用 DFT+$U$ 理论计算得到的磷化铟（上方面板）、砷化铟（中间面板）和锑化铟（下方面板）的能带结构。零点设为各体系的费米能级。

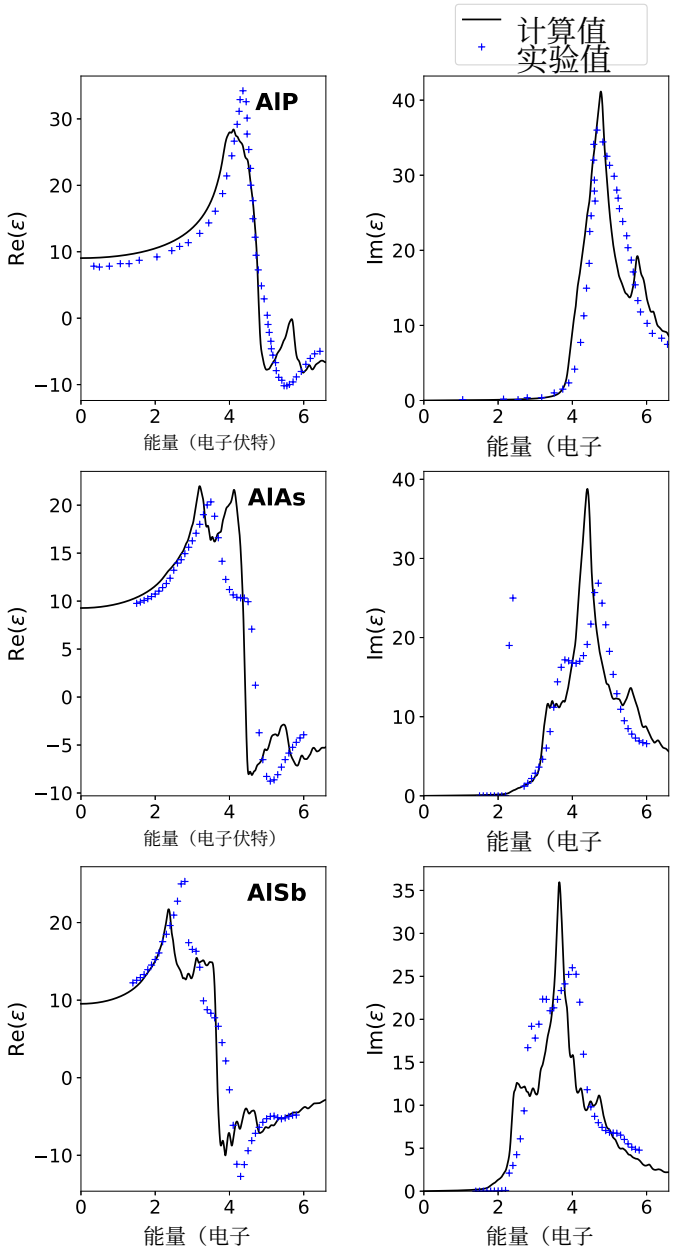


图 S5. (a) 磷化铝、(b) 砷化铝和 (c) 锑化铝体半导体的介电函数实部（左）和虚部（右）的实验值（蓝色叉号）与模拟值（黑线）对比。参考实验数据改编自文献 [80–82]。

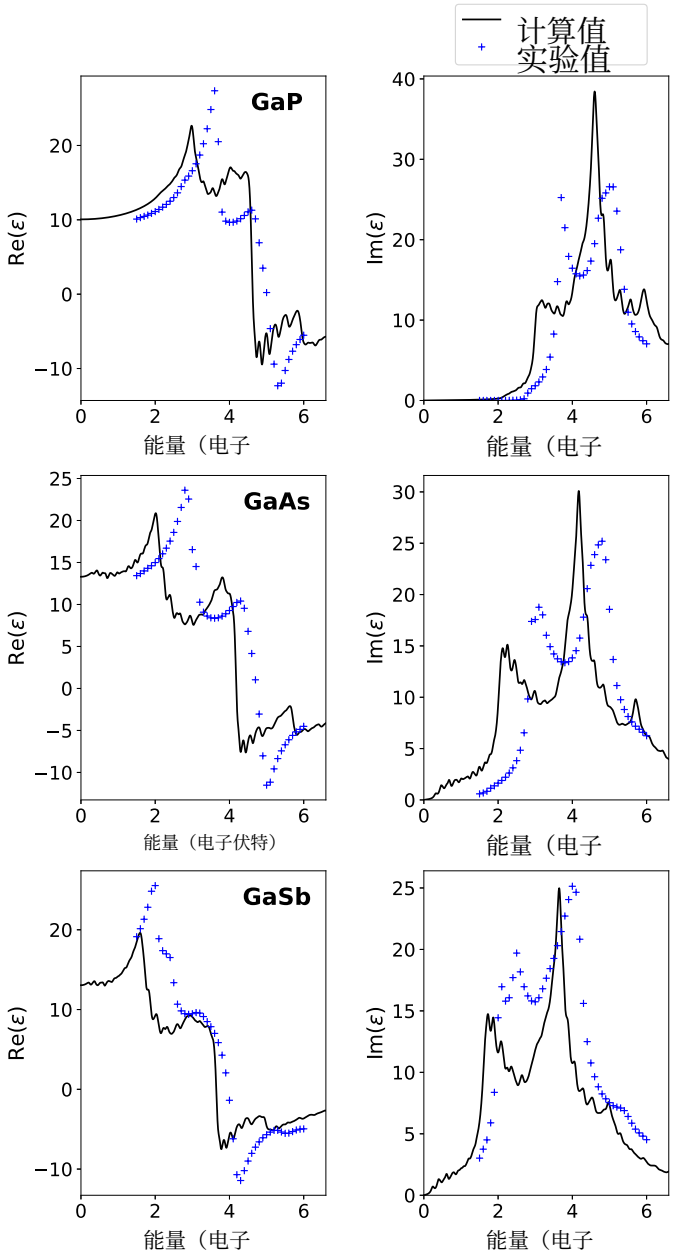


图 S6. (a) 磷化镓、(b) 砷化镓和 (c) 锑化镓体半导体的介电函数实部（左）和虚部（右）的实验值（蓝色叉号）与模拟值（黑线）对比。参考实验数据改编自参考文献 [86].

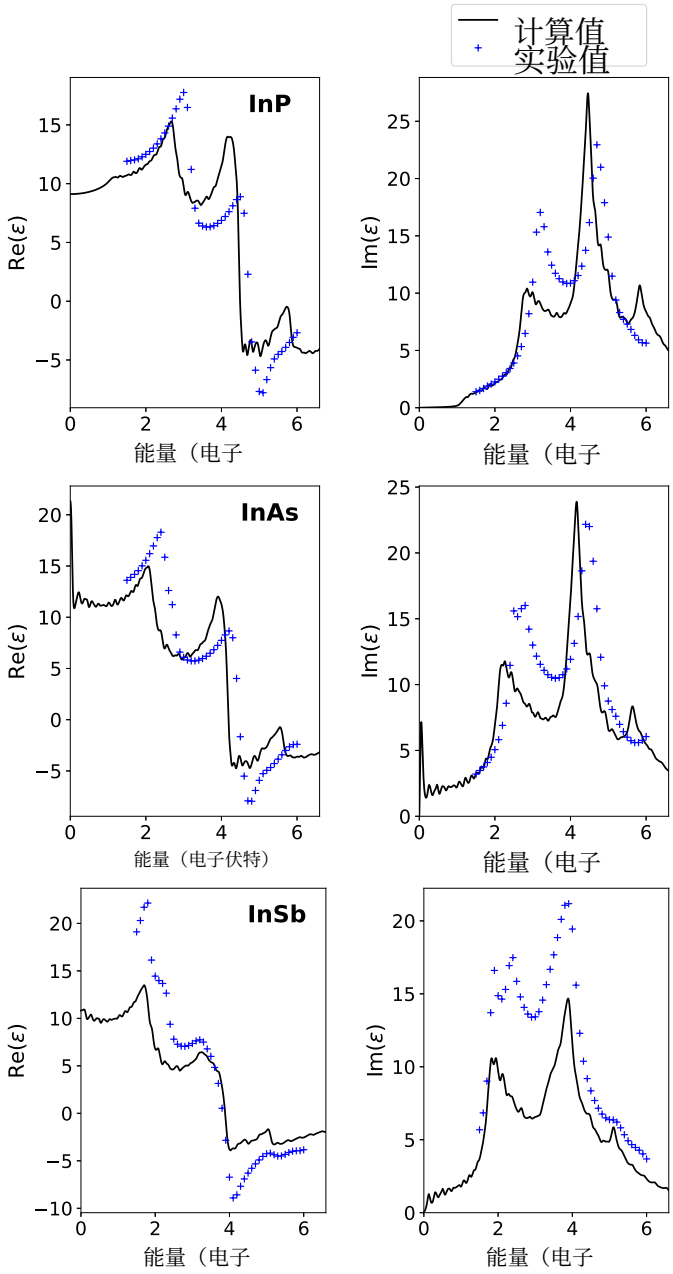


图 S7. (a) 磷化铟、(b) 砷化铟和 (c) 锑化铟体半导体的介电函数实部（左）和虚部（右）的实验值（蓝色叉号）与模拟值（黑线）对比。参考实验数据改编自参考文献 [86].

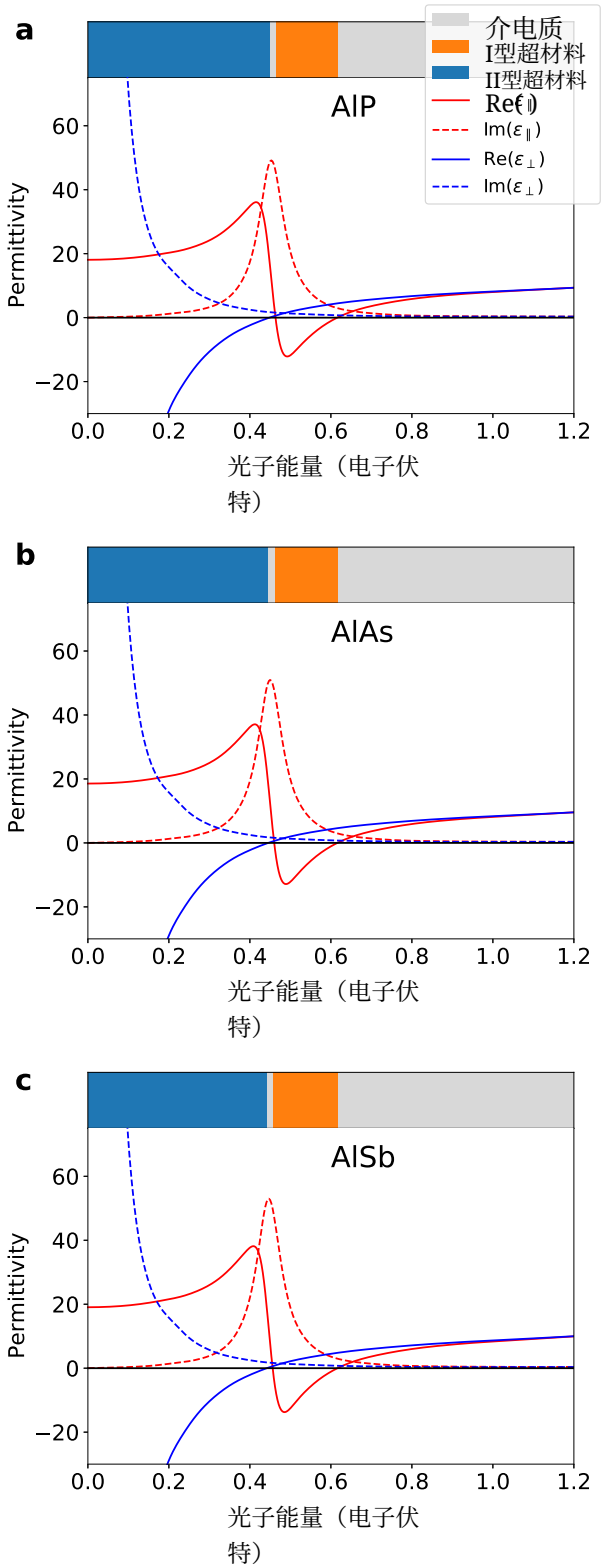


图 S8. 由 AlX（X ＝P (a)、As (b)、Sb (c)）和 Si:InAs ($c_2$ =3.12%）组成、具有相等填充因子（$f_1 = 0.5$）的超材料的平行（红线）和垂直（蓝线）介电函数的实部（实线）与虚部（虚线）。图表上方的色条表示具有 I 型（橙色）和 II 型（蓝色）双曲特性以及介电（灰色）特性的能量区域。图例见面板 (a)。

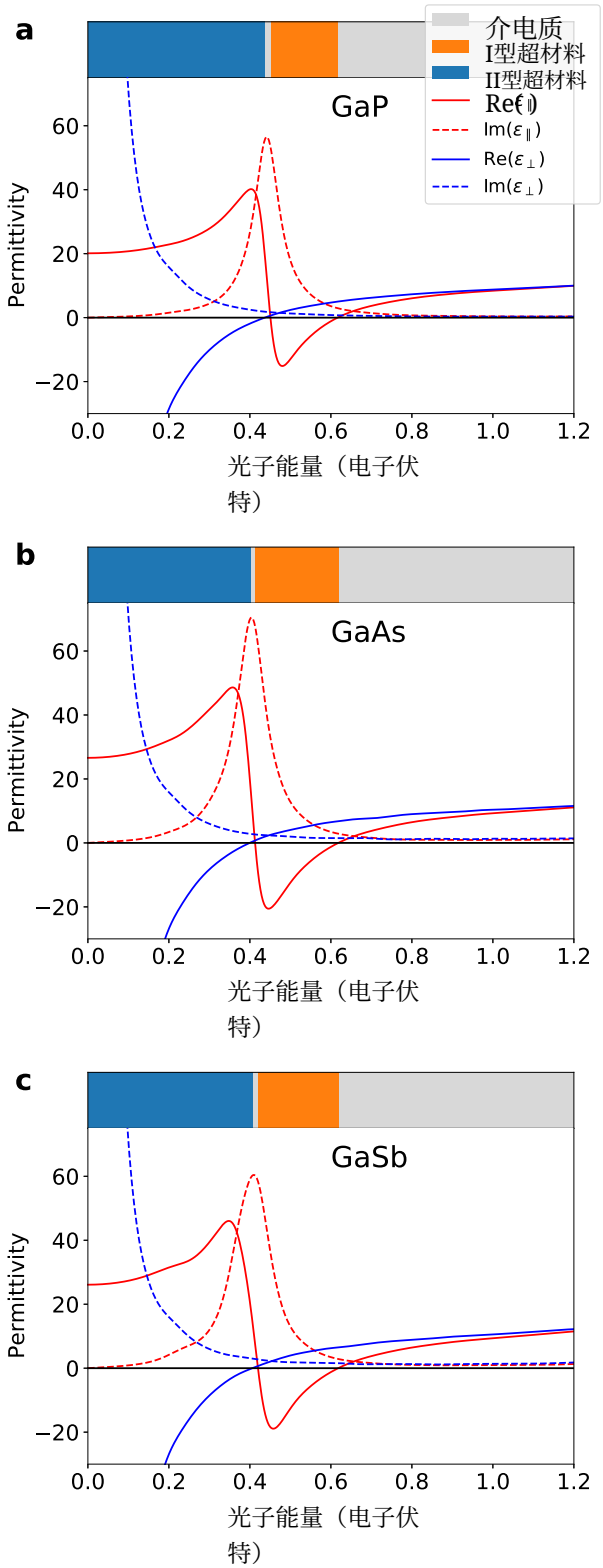


图 S9. 由 GaX（X ＝ P (a)、As (b)、Sb (c)）和 Si:InAs（$c_2$ =3.12%）组成、具有相等填充因子（$f_1 = 0.5$）的超材料的平行（红线）和垂直（蓝线）介电函数的实部（实线）与虚部（虚线）。图上方的条带表示具有 I 型（橙色）和 II 型（蓝色）双曲以及介电质（灰色）行为的能量区域。图例见面板 (a)。

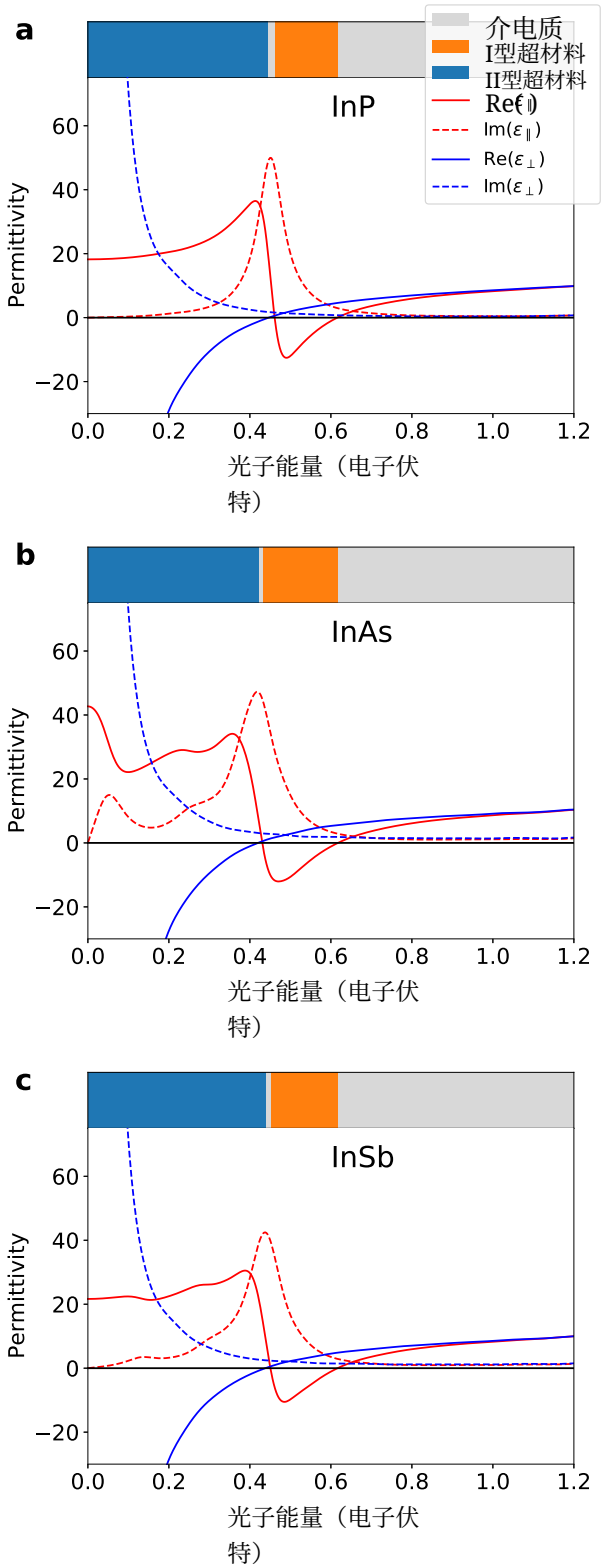


图 S10. 由 InX（X ＝P (a)、As (b)、Sb (c)）和 Si:InAs（$c_2$ =3.12%）组成、具有相等填充因子（$f_1 = 0.5$）的超材料的平行（红线）和垂直（蓝线）介电函数的实部（实线）和虚部（虚线）。图上方的色条表示具有 I型（橙色）和 II型（蓝色）双曲行为以及介电质（灰色）行为的能量区域。图例见面板 (a)。

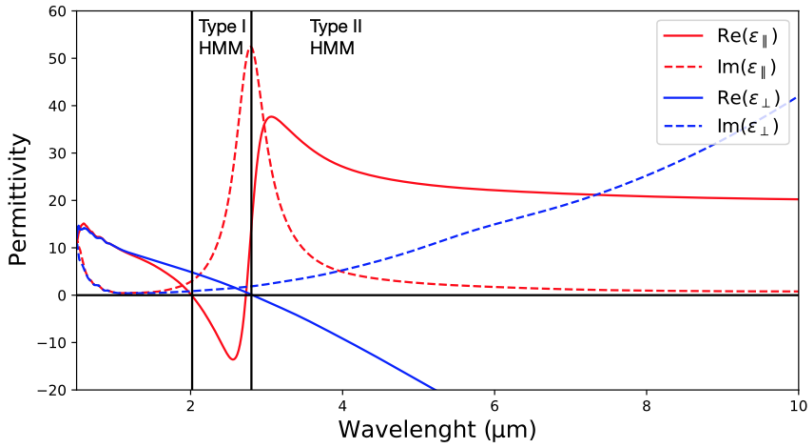


图 S11. Si:InAs/AlSb 超材料（$c_2$ =3.12%）在相等填充因子（$f_1 = 0.5$）下，平行（红线）和垂直（蓝线）介电函数的实部（实线）和虚部（虚线）随波长的变化（而非正文图 3 中的能量）。

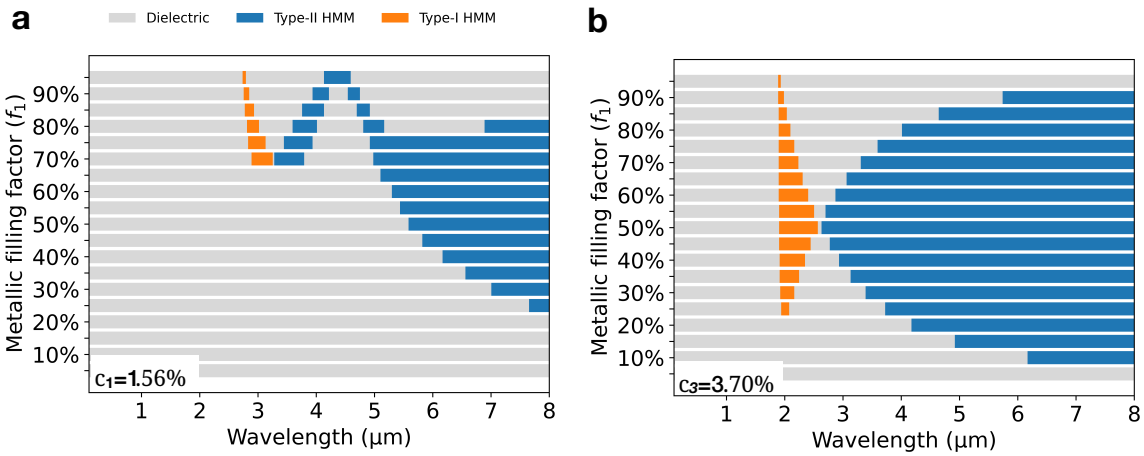


图 S12. Si:InAs/AlSb 超材料的光谱光学特征——即 I 型（橙色）和 II 型（蓝色）双曲特性，以及介电质特性（灰色）——随金属填充因子 $f_m$ 的变化情况，填充因子范围为 (0.05 – 0.95)%：(a) 最低 $c_1 = 1.56\%$ 和 (b) 最高 $c_3 = 3.70\%$ 掺杂浓度。中等掺杂情况 $c_2 = 3.12\%$ 见正文图 4c。

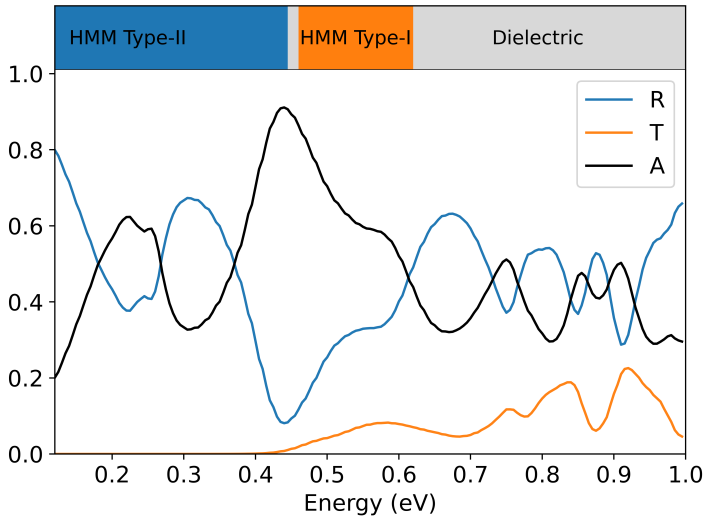


图 S13. Si:InAs/AlSb 多层结构（$c_2 = 3.12\%$、$f_m = 0.5$、$\mathcal{N} = 10$）的反射率（蓝色）、透射率（橙色）和吸收（黑色）光谱。符号和标签对应正文。