

密级: 公开



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

硕士学位论文

基于超材料的太赫兹吸收体及光开关的理论研究

作者姓名: 李新旺

指导教师: 刘红军 研究员 西安光机所

学位类别: 工学硕士

学科专业: 光学工程

研究所: 中国科学院西安光学精密机械研究所

2015 年 5 月

**Theoretical Investigations of Terahertz Absorber and Optical
Switching Based on Metamaterials**

**By
Xinwang Li**

**A Dissertation Submitted to
University of Chinese Academy of Sciences
In partial fulfillment of the requirement
For the degree of
Master of Natural Science**

**Xi'an Institute of Optics & Precision Mechanics,
Chinese Academy of Sciences**

April, 2015

科研道德声明

秉承研究所严谨的学风与优良的科学道德，本人声明所呈交的论文是我个人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。论文中所引用的内容都已给予了明确的注释和致谢。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了致谢。

申请学位论文与资料若有不实之处，本人承担一切相关责任。

论文作者签名： 李新旺 日期： 2015.5.22

知识产权声明

本人完全了解中科院西安光学精密机械研究所有关保护知识产权的规定，即：研究生在所攻读学位期间论文工作的知识产权单位系中科院西安光学精密机械研究所。本人保证离所后，发表基于研究生工作的论文或使用本论文工作成果时必须征得产权单位的同意，同意后发表的学术论文署各单位仍然为中科院西安光学精密机械研究所。产权单位有权保留送交论文的复印件，允许论文被查阅和借阅；产权单位可以公布论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其它复制手段保存论文。

(保密的论文在解密后应遵守此规定)

论文作者签名： 李新旺

导师签名： 刘红岩

日期： 2015.5.22

日期： 2015.5.22

致 谢

三年硕士生活眨眼即将结束，这将会是我人生中永远值得回忆的时光。本论文是在我的导师刘红军研究员的悉心指导下完成的。在研究生的学习工作期间，导师给予了各方面的关怀与照顾。整个论文的选题、调研、进展及写作，都离不开刘老师的帮助和支持。刘老师学识渊博、治学严谨、勤奋敬业，一直鞭策和教导我要努力拼搏。在此向刘老师致以我最深的敬意和最衷心的感谢。

同时，我要感谢本课题组的所有成员。师兄孙启兵、黄楠、王昭路、文进、李少鹏，师姐牟妙丽、安林亮和同窗同学都给了我很多帮助和意见。在此表示诚挚的谢意。

瞬态室姚保利研究员、王屹山研究员、范文慧研究员等在学习和工作中给予了我很多帮助，在此一并表示感谢。

感谢瞬态室李萍女士、马丹女士在平时给予的热心帮助。

感谢研究生部李晋芳、赵萍、张雯等所有老师的帮助。

我最要感谢我的父母，感谢他们这二十六年来无私奉献。不论是在精神还是在物质上，没有他们背后默默的支持，我也不可能有信心和毅力完成硕士学业。再多的话也无法表达出我对他们在我求学期间所作出的巨大牺牲和努力的感激之情。我要感谢和缅怀我亲爱的爷爷，他于今年四月初去世。他在生前始终通过言传身教让我学会了很多人生道理，在此我想表达我最永远的感谢。

最后感谢在百忙之中还能对本论文进行审阅和评定的各位专家和老师们。

李新旺

2015年5月

摘 要

超材料 (Metamaterials) 一般被定义为是一种由亚波长尺寸周期性结构单元构成, 且具有天然媒质所不具有的反常物理特性的新型人工材料。基于这些独特的电磁性质, 该类材料在诸多领域均有广阔的应用前景。尤其是对工作于太赫兹波段的超材料结构的研究工作, 目前人们已经设计和制造出了各式各样的功能器件, 包括有太赫兹滤波器、偏振器、调制器、吸收体和开关等。相比于传统器件, 它具有易集成和重量轻等优点。本论文主要围绕基于超材料的太赫兹吸收体和光开关的理论研究及设计而展开, 论文的主要工作内容如下:

1. 提出了一种垂直级联的超宽带太赫兹超材料吸收体。引入了一个由各金属层磁场谐振耦合而激发的额外吸收峰, 用来增宽吸收谱。叠加之后的吸收谱对 2.6-5.7 THz 的正入射太赫兹波保持吸收率 $>90\%$, 而且吸收谱的半高全宽 (FWHM) 约是中心频率的 95%。通过计算各共振频率的入射太赫兹波功率损耗, 分析了额外吸收峰的产生机理。
2. 通过仿真研究了太赫兹波入射角和偏振角对吸收谱的影响。结果表明, 当入射角不大于 50° 时, 该吸收体仍能在 2.5 THz 左右的频率宽度内维持吸收率 $>88\%$ 。同时, 偏振角的改变对吸收谱幅值几乎不影响。因此该吸收体对入射太赫兹波的偏振不敏感。
3. 设计了一个基于非对称裂环共振器的太赫兹超材料开关。通过改变外加泵浦光强可实现开关在打开与闭合状态之间进行切换。从理论上具体研究了硅中载流子浓度与泵浦光强的关系, 以及载流子的产生和衰减过程。
4. 为了分析光开关各共振的产生机理, 计算了光开关在各共振频率处的电场分布和表面电流分布, 结果发现有一些共振是由 LC 共振和高阶共振的共振耦合产生。进一步, 利用两个简易模型等效光开关的打开和闭合状态, 分析了光开关在工作过程中的模式切换效应。
5. 研究表明, 在 1.26-1.49 THz 的开关窗口内, 开关比大于 10。改变介质层的介电常数和厚度, 可对开关窗口的位置和宽度进行调节。调节范围约为 0.3 THz。此外, 该太赫兹光开关的响应时间可达到 ps 量级。

关键词: 太赫兹, 超材料功能器件, 吸收体, 光开

ABSTRACT

Metamaterials is generally defined as a new artificial material which consists of micro-wavelength periodic unit cell. This kind of material has a great potential application in many fields due to their unique electromagnetic properties. In particular, more and more attention has been paid to the investigation of metamaterial functional devices working at Terahertz (THz) frequency. Nowadays, all kinds of functional devices have been designed and fabricated. Those include THz filter, polarizer, modulator, absorber and switching. Compared with conventional devices, THz metamaterial functional devices are easy-to-integrate and light-weight. The dissertation mainly focuses on the theoretical investigation and design approach of metamaterials based THz absorber and optical switching. The major working contents are listed below:

1. A vertical cascaded ultra-broadband THz metamaterial absorber was proposed. An extra absorption peak, which induced by magnetic resonance coupling of each metallic layer, was introduced to enlarge the absorption spectrum. In the frequency range of 2.6-5.7 THz, the absorption spectrum after superposition can keep absorption higher than 90% for the normal incident THz waves. Additionally, the full width of half maximum (FWHM) approximately reaches to 95% with respect to the central frequency. The incident THz power losses at all resonant frequencies were calculated to analysis the generation mechanism of the extra absorption peak.
2. The incident angle dependent and polarization dependent of the absorption spectrum was investigated through numerical simulation. The results show that the absorber can still sustain absorption above 88% within about 2.5 THz frequency range when the incident angle is less than 50° . At the same time, the variation of the polarization angle has a neglectable influence on the absorption magnitude. Thus, the absorber is polarization insensitive.
3. A terahertz metamaterial optical switching based on asymmetric split-ring resonator was designed. By modulating the pump power, the switching can switch between the ON state and OFF state. The influence of the pump power on the carrier density was specifically investigated through theoretical calculation. Besides, the generation and recombination of the carrier was also analyzed.

4. In order to analyze the detailed generation mechanism of each resonant peak. The distribution of electric field and surface current at their resonant frequencies were calculated. According to the results, some resonances are generated by the resonant coupling of the *LC* resonance and high order resonance. Furthermore, two models were used to simply describe the switching progress of ON/OFF state.
5. The study shows that the switching ratio of the switching window, which locates at the frequency range of 1.26 to 1.49 THz, is higher than 10. The position and width of the switching window can be tuned by changing the permittivity and thickness of dielectric layer. The modulation range is about 0.3 THz. In addition, the response time of the THz optical switching can reach to an order of picoseconds.

Key Words: Terahertz, Metamaterials functional device, Absorber, Optical switching

目 录

致 谢.....	I
摘 要.....	III
ABSTRACT.....	V
第 1 章 绪言.....	1
1.1 太赫兹辐射的基本概念.....	1
1.1.1 太赫兹辐射的主要特性.....	2
1.1.2 太赫兹辐射的应用.....	3
1.1.3 太赫兹时域光谱测量系统.....	4
1.2 太赫兹辐射的产生方法.....	6
1.2.1 电子学方法产生太赫兹辐射.....	6
1.2.2 光子学方法产生太赫兹辐射.....	7
1.3 超材料功能器件的研究现状及存在的问题.....	10
1.3.1 THz 超材料吸收体.....	10
1.3.2 THz 超材料开关.....	12
1.4 课题的意义.....	13
1.5 论文的主要研究内容.....	13
第 2 章 理论基础及仿真方法.....	14
2.1 引言.....	14
2.2 超材料吸收体的表征参数.....	15
2.2.1 复介电常数和复磁导率.....	15
2.2.2 复阻抗.....	15
2.2.3 吸收率.....	16
2.3 超材料有效材料参数的提取方法.....	16
2.4 超材料对电磁波的吸收与损耗机制.....	22
2.5 数值模拟仿真原理及方法.....	23
2.5.1 CST 软件简介.....	23
2.5.2 有限时域差分方法的理论基础.....	24
2.6 本章小结.....	26
第 3 章 超宽带超材料太赫兹吸收体的性能研究.....	27
3.1 引言.....	27
3.2 垂直级联太赫兹超材料吸收体.....	28

3.2.1 结构设计和基本原理.....	28
3.2.2 模拟结果和讨论.....	30
3.2.3 吸收谱的偏振相关性和入射角相关性研究.....	34
3.3 本章小结.....	36
第4章 太赫兹超材料开关.....	37
4.1 引言.....	37
4.2 超材料太赫兹开关.....	37
4.2.1 模型设计.....	37
4.2.2 仿真结果与讨论.....	39
4.2.3 开关调谐性能及共振机理的研究.....	44
4.3 本章小结.....	47
第5章 结论.....	49
5.1 工作的总结.....	49
5.2 展望.....	49
参考文献.....	51
作者简介及在学期间发表的学术论文与研究成果.....	55

第1章 绪言

1.1 太赫兹辐射的基本概念

太赫兹 (THz) 辐射是对频率位于微波和红外光谱区域之间的电磁辐射的统称^[1]。由于处于该频段的光波振荡频域在 10^{12} Hz (即 1 THz) 数量级, 因此又被称为太赫兹波。太赫兹电磁光谱区域没有统一而明确的定义。一般而言, 人们大概地把太赫兹辐射的频率范围设为 0.1 ~ 10 THz; 在有些场合特别限定为 0.3 ~ 3 THz; 有的时候则具有更广泛的定义^[2]。图 1-1 所示即为太赫兹波段在电磁波谱中的位置。

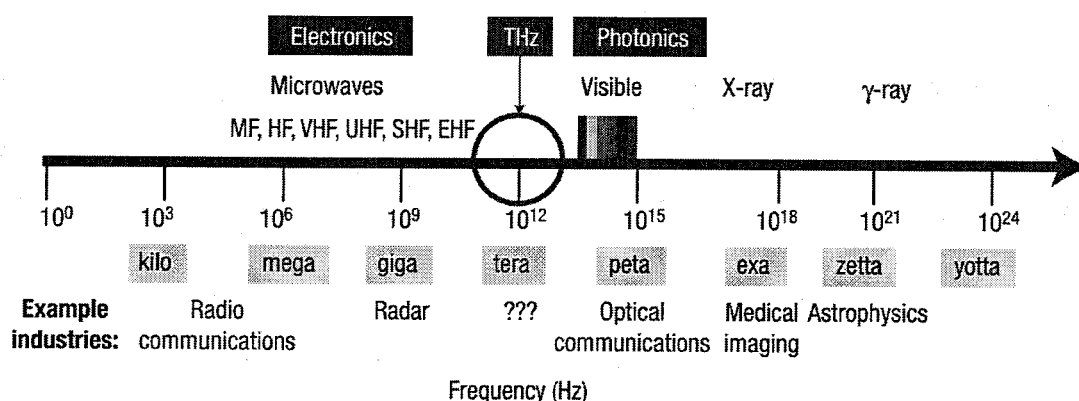


图 1-1 电磁波谱。太赫兹辐射位于红外光和微波辐射之间

由于大多数物体的热辐射都在太赫兹波段, 因此自然界中其实存在着大量的太赫兹辐射源。尽管如此, 在 20 世纪 80 年代之前, 由于缺乏有效而简易的太赫兹辐射源和探测器, 人们对这一部分的电磁光谱的研究非常之少。这一段不为人熟悉的真空地带被称为太赫兹空隙 (THz gap)^[3]。在近三十年中, 得益于超快光电子 (optoelectronic) 技术和低尺度半导体技术的发展, 太赫兹空隙被快速地填补。处于如此特殊的频段, 使得太赫兹辐射具有极其独特的性质。正是这些特性赋予了太赫兹辐射广泛的应用前景, 各国及研究所纷纷对太赫兹辐射进行了广泛而深入的研究。目前为止, 太赫兹技术在疾病检测、环境保护、缉毒反恐、安检国防、太空探测和星际通信等领域都具有非常诱人的发展潜力。

1.1.1 太赫兹辐射的主要特性

太赫兹光谱所具有的光谱特性与一些基本的物理过程有关，比如说分子的转动跃迁，有机化合物中的大振幅简谐振动，固体中的晶格振动，半导体中的带内跃迁和超导体中的能带等^[4]。太赫兹波能引起我们浓厚兴趣的原因之一是由于它具有许多独特的性质，以下分别介绍太赫兹辐射的几个主要的特性。

(1) 太赫兹技术的一个显著特点是它的安全性。由计算可知，一个频率为 1 THz 的光子的能量是 4.1 meV，对应于 33 个波数，它的特征温度是 48 K。相比于 X 射线的光子能量，太赫兹辐射的光子能量小了至少 6 个数量级。由于太赫兹波的光子能量低于各种化学键的键能，因此它不会引起不利的电离反应。这一点在对人体和生物样品的无损检测等应用中尤为重要。

(2) 由于转动和振动的跃迁，大量的分子特别是有机分子对太赫兹辐射表现出强烈的吸收和色散特性。与液态水不同，气态水对太赫兹波的吸收具有更加明显的光谱特性。图 1-2 给出了大气对电磁波的吸收谱，可见太赫兹波在大气中传播有着显著的损耗。又因为不同分子的偶极矩跃迁不同，使得它们相对应的太赫兹光谱也是独一无二的，被称为指纹谱。通过分析太赫兹光谱中所包含的丰富的信息，不但能辨别物质的形貌，还能鉴别物质的组成成分。

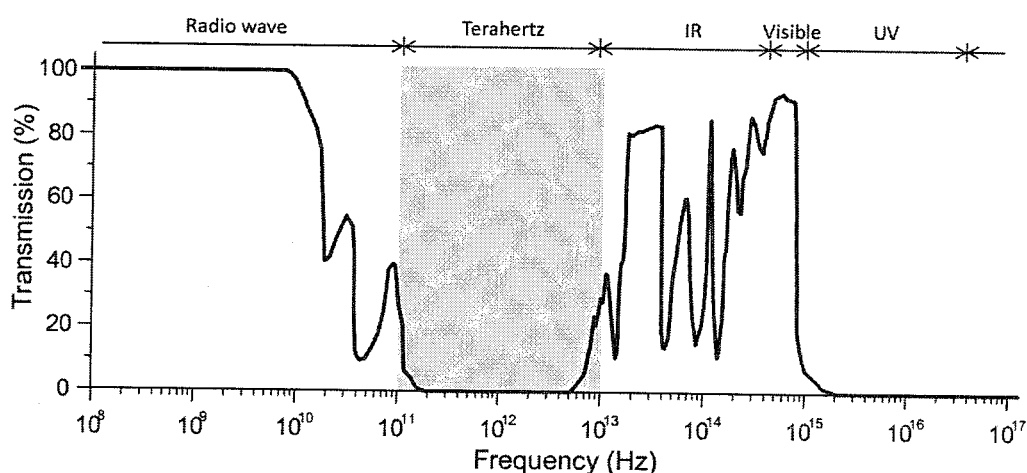


图 1-2 电磁波的大气透过率光谱

(3) 太赫兹波对很多介电材料和非极性的液体具有良好的穿透性。基于此特性，可利用太赫兹波对皮革、纸制品等包裹的不透明物体进行透视成像，在食品质检

和缉毒安检等领域发挥作用。另外，太赫兹辐射还是浓烟（如火灾救护）或风尘环境（如沙漠）中理想的成像光源。

（4）太赫兹波在中短距离高容量的无线通信中具有十分广阔的应用前景。与微波相比，太赫兹波的频率更高，因此在作为通信载体时，太赫兹波在单位时间内能承载更丰富的信息。更进一步来说，太赫兹波的波长更短，使得它具有十分优良的方向性。

（5）太赫兹光脉冲通常包含有多个周期的电磁振荡，而单个太赫兹脉冲的频带可以覆盖 GHz 至 THz 的频率范围，这就使得太赫兹辐射能在较大的频率范围内分析物质的光谱特性。

1.1.2 太赫兹辐射的应用

1. 公共安全：由于太赫兹辐射的低辐射能量及强透过能力，THz 成像技术广泛应用于食品安全检测、医疗检查、机场安检和反恐缉毒等方面，图 1-3 所示为太赫兹技术在安检中的应用。对于非极性物质（如陶瓷、纸制品、衣物和塑料等），THz 波具有较强的穿透性，能探测结构的内部缺陷和隐藏物，可用于非接触、非破坏性的探测，比如机械设备的无损探伤。

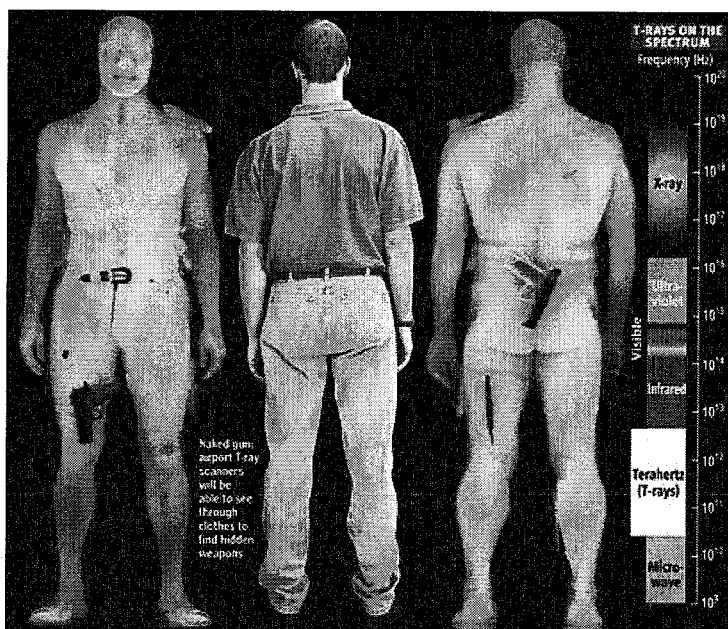


图 1-3 利用太赫兹技术进行安检

2. 生物化学技术领域：大多数生物大分子和凝聚态物质的振动及转动频率位于

THz 频率范围,因此许多物质在该波段具有不同的特征吸收谱。根据这些指纹谱,人们可以不仅能呈现出未知样品的形貌,还能分析其组分和结构。此外,通过分析生化反应过程中 THz 吸收谱的光谱线型,可以挖掘出微观分子的结构及环境等关键信息。太赫兹光谱技术已经应用于对地球大气层的监测,星际介质的分子观察,毒品、有机物、爆炸物和药物分析等领域。

3. 通信技术:相比于微波,太赫兹波段具有高频率、高宽带及多信道数等特点,在宽带通信领域具有很大的发挥空间,特别是在星际卫星间、卫星与地面间及局域网的宽带移动通讯等方面。THz 波用于通信可达到 10 GB/s 的无线传输速度,比当前的超宽带技术快几百到上千倍。同时,THz 波还具有很高的方向性及较强的云雾穿透能力,这使得 THz 波特别适合于卫星间的高保密、高宽带通信。虽然目前的太赫兹辐射源研究不够成熟,但新技术的发展必将解决这些问题,使 THz 通信技术得到广泛应用。

4. 天文探测:太赫兹技术在天文探测领域具有十分重要的地位,它可以结合卫星实现空间成像^[5]。通过太赫兹技术,可以完成星际大气分子特征谱及行星的大气动力学分析等方面的工作。为了更好地实现天文观测,许多国家正在部署一些大型的太赫兹天文计划,如 SMA 和 ALMA 计划等。这对于人们更加深入了解星体的形成及宇宙的起源起到极大的作用。

此外,由于太赫兹辐射对水具有极高的灵敏度,对生物系统中可能表示该区域存在致命缺陷与病变的水体成分的微小改变能快速准确的检测出来,因此太赫兹技术在医疗领域也有很好的发展潜力。另外,太赫兹技术还能用于环境保护,大气中有毒有害物质的检测等。除了以上所述的诸多应用外,太赫兹光谱学和成像技术已经广泛应用于许多的基础科学研究及商业项目。

1.1.3 太赫兹时域光谱测量系统

一种常用的探测 THz 脉冲的方法是太赫兹时域光谱 (THz-TDS) 技术。THz-TDS 测量系统可分为透射式、反射式、椭偏式和差分式等,最常用是透射式的 THz-TDS 测量系统。THz 脉冲的产生及探测的基本实验原理是使用类似于泵浦-探测技术的飞秒脉冲。典型的装置原理图如图 1-4 所示,主要由一个飞秒激光器、一个时间延迟控制系统和一个太赫兹辐射产生装置及探测装置构成。从图中

可以看到, 泵浦光束被分成两部分。其中一束光通过一个平移平台产生一个可控的时间延迟; 另一束光照射发射器并产生 THz 脉冲, 在自由空间传输一段距离后, THz 脉冲被聚集到探测器上, 最终测量出 THz 脉冲的整个时域波形。THz 脉冲在探测器上诱导的瞬变现象通过探测脉冲被测量出来。目前, 常用的产生 THz 脉冲的方法有两种。一种是由光电导天线中的瞬态电流产生, 另一种是通过非线性光学晶体中的光整流现象产生。THz 场的探测同样也可以由光电导天线(光导取样)和非线性晶体(电光取样)完成。

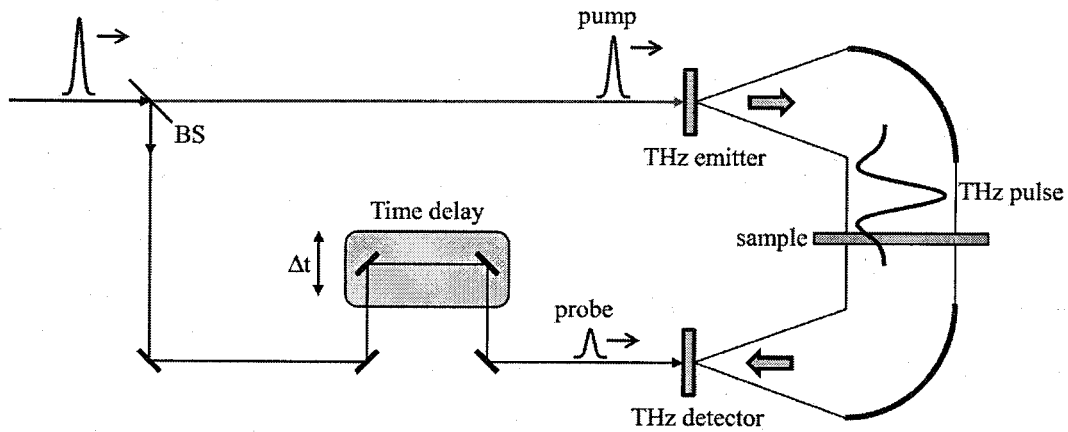


图 1-4 使用飞秒光脉冲产生和探测 THz 脉冲的典型实验原理图

在太赫兹时域光谱测量系统中, 首先测量太赫兹脉冲通过自由空间或参考样品后的时域波形, 称为参考波形。然后再测量太赫兹脉冲通过样品后的时域波形, 称为信号波形。因为 THz-TDS 测量系统同时测量出了太赫兹辐射的幅值和相位, 分别对参考波形和信号波形进行了傅里叶变换, 得到的参考光谱和信号光谱可分别表达成 $A_r \exp[-i\varphi_r(\omega)]$ 和 $A_s \exp[-i\varphi_s(\omega)]$ 。 A_r 和 A_s 分别是参考波形和信号波形的幅值, φ_r 和 φ_s 分别是参考波形和信号波形的相位。通过分析这些光谱信息, 我们不仅能得到样品的吸收率, 还能计算出色散^[6]:

$$\alpha_r = \ln \left(\frac{I_r}{I_s} \right) = \ln \frac{|A_r|^2}{|A_s|^2}, \quad n(\omega) = 1 + \frac{[\varphi_s(\omega) - \varphi_r(\omega)]c}{\omega L},$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2}{L} \ln \left(\frac{1}{A_s(\omega)} \frac{4n(\omega)}{[1+n(\omega)]^2} \right). \quad (1-1)$$

这里的 α_r 和 α 分别是样品的相对吸收系数和吸收系数, n 是样品的折射率, L 是

样品的厚度, ω 是共振角频率, c 是真空中光速。

1.2 太赫兹辐射的产生方法

太赫兹辐射源是太赫兹技术在应用过程中至关重要的一个环节, 目前我们面临的最主要的问题是缺乏高效率、大功率、低成本、超宽带且室温下仍能稳定运行的太赫兹辐射源。迄今为止, 人们已经提出了许多种产生太赫兹辐射的方法。根据太赫兹辐射产生的机理, 太赫兹辐射的产生方法主要有两大类: 电子学方法和光子学方法。

1.2.1 电子学方法产生太赫兹辐射

用电子学方法产生太赫兹辐射, 一般做法是将产生的电磁辐射从微波段移向高频。这种方法容易产生大功率太赫兹波, 且能量转换效率较高, 但是输出的太赫兹频率一般小于 1 THz。利用电子学方法产生太赫兹辐射的主要方法如下:

1. 太赫兹量子级联激光器

THz 量子级联激光器 (Quantum Cascade Lasers, QCL) 具有体积小、能耗低、易集成和频率易调等优点, 是受到人们期望的一种 THz 波辐射源。量子级联激光器是一个只有电子参与的半导体异质结型激光器, 异质结形成一个由不同半导体组成的周期性交替层超晶格。外加偏压诱导超晶格中的电子从较高能量状态向较低的能量状态跃迁, 从而向外辐射出 THz 波。辐射波长仅取决于量子阱中两个激发态之间的能量差, 而与半导体材料的能隙无关。目前, 常用的材料体系是 GaAs/AlGaAs。虽然量子级联 THz 激光器是研究的重点, 但在实验方面很长一段时间都没能获得实质性突破。直到 2002 年, 英国剑桥大学联合意大利 NEST-LNFM 在 THz QCL 的实验工作上取得了突破性进展, 其中 THz 波频率为 4.4 THz、工作温度 50 K、脉冲功率 20 mW^[7]。此后, 各国科学家使用不同的半导体材料开展了 THz QCL 的研究工作, 取得了越来越多的成果。在我国, 中国科学院上海微系统研究所和中国科学研究半导体研究所也已开展了此方面的研究工作^[8]。

2. 利用自由电子的 THz 辐射源

近些年来, 由于电子学的不断发展, 基于真空电子学产生太赫兹辐射的研究越来越成熟, 这些进展包括真空电子器件、自由电子激光器 (Free electron laser,

FEL)、Cherenkov 辐射以及电子回旋脉塞等。其中真空电子器件如返波管 (Backward wave oscillator, BWO)、布洛赫 (Bloch) 振荡器、耿氏 (Gunn) 振荡器、绕射辐射器件 (Orotron)、扩展互作用振荡器 (EIO) 等的工作频率已接近或达到 1 THz。目前, 人们已通过电子回旋管实现在 1 THz 以上产生千瓦级脉冲输出^[9]。我国的一些科研机构及大学, 如中国工程物理研究院、电子科技大学、北京大学和中国科技大学等, 都已在真空电子器件这一方面开展了许多的研究工作并取得了一定的成果。2005 年 4 月 7 日, 中国工程物理研究院成功搭建了我 国第一台基于自由电子激光的可调谐相干 THz 辐射源, 填补了国内的空白^[10]。

3. 基于高能加速器的 THz 辐射源

2005 年 1 月在美国 Honolulu 召开的 THz 辐射源研讨会上, 有人报道了用静电加速器的自由电子激光器, 可在 0.15~6 THz 产生 1 kW 的准连续波输出。这一研究结果是该领域迄今为止最重要的成果之一^[3]。

1.2.2 光子学方法产生太赫兹辐射

利用光子学方法产生太赫兹辐射的一般原理是将输出激光的频率由光波段移向低频, 最终延伸至太赫兹波段。基于该方法产生的太赫兹波具有极强的方向性和相干性, 但是能量转换效率低下, 比较适合于产生 1 THz 以上的太赫兹波。利用光子学方法产生太赫兹辐射的主要方法如下:

1. 基于超短激光脉冲产生 THz 辐射

目前, 大多数的宽带太赫兹辐射源是利用不同材料在超短激光脉冲下受激辐射的原理研制而成。具体例子有光电导 (Photoconductive, PC) 天线技术、光整流 (Optical rectification, OR) 技术、半导体表面技术等。利用飞秒激光脉冲激发物质, 产生的 THz 辐射频谱宽、峰值功率高, 可应用于 THz-TDS 技术中, 但同时该方法存在不能连续调谐、能量转换效率极低等弊端, 产生的太赫兹辐射的平均功率一般在纳瓦或微瓦量级, 不利于一般探测器件的测量。

1) 光电导天线技术

20 世纪 90 年代初, Auston 等人首次使用光电导偶极子天线技术产生了 THz 波^[11]。该方法是目前 THz 波的产生及探测最常用的方法之一。其主要原理如图 1-5 所示。偶极子天线结构是利用半导体沉积技术在 PC 材料(如低温生长的 GaAs

等)表面沉积上金属电极形成的,当泵浦飞秒光脉冲的光子能量大于半导体的禁带宽带时,会在PC材料表面瞬间(10^{-14} s量级)产生大量的电子-空穴对。在外加偏振电场及内建电场的作用下,自由载流子作加速运动,同时载流子密度由于载流子的复合和捕获不断减小。在载流子的加速运动和衰减的共同作用下天线表面形成了瞬变的光电流,从而向外辐射出太赫兹脉冲。

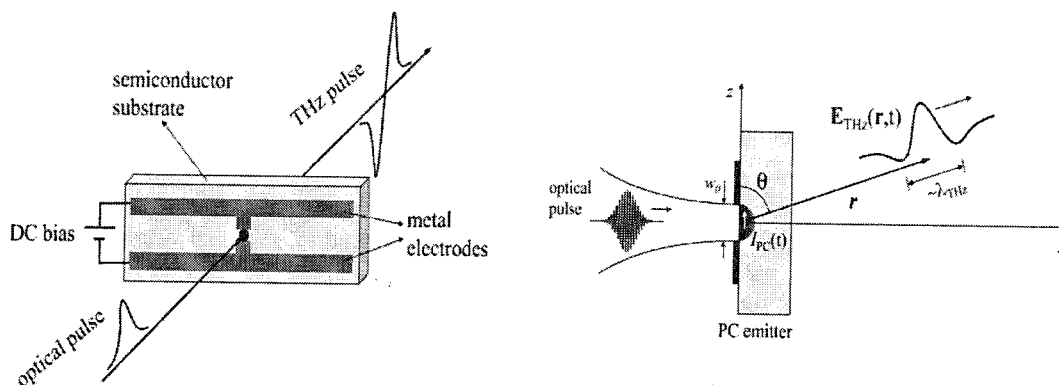


图 1-5 光电导天线在一个飞秒脉冲激励下发射出 THz 脉冲的原理图

2) 光整流技术

1992 年, X. C. Zhang 等人 and S. L. Chuang 等人分别报道了半导体表面的光整流效应^[12]。如图 1-6 所示,该方法的基本原理是当一束高强度的超短脉冲通过类似 ZnTe 电光晶体等非线性介质时,发生了二阶或高阶非线性光学过程,差频之后激发出一个恒定的低频电极化场,由此电极化场辐射出太赫兹波。

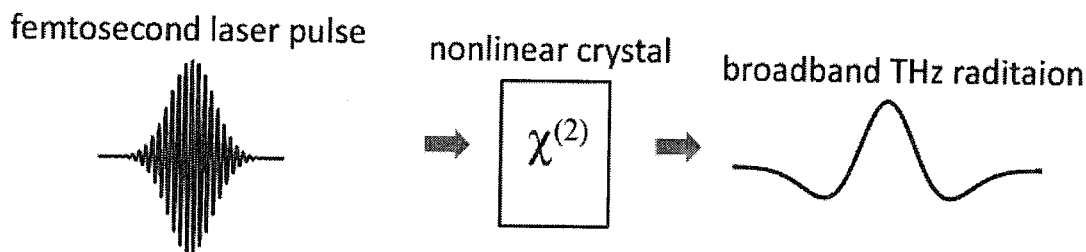


图 1-6 利用光整流在非线性晶体中产生太赫兹辐射

3) 半导体表面技术

1990 年, X. C. Zhang 等报道了飞秒光脉冲激发的光生载流子能在半导体表面电场作用下产生 THz 辐射^[13]。该技术的工作原理是将一束光子能量大于半导体带

隙的超短脉冲入射到半导体材料表面上,在半导体表面被耗尽的同时又被表面电场加速的光载流子激发出超短瞬态电流,进而向外辐射出太赫兹脉冲。这是除了光电导天线外的另一种利用瞬态光电流产生 THz 脉冲辐射的方法,且该方法要求泵浦光有较高的峰值功率。目前,很多半导体如 GaAs、GaSb、InSb、CdTe、CdSe 等都可采用此技术产生 THz 辐射。

4) 空气中激光诱导的等离子体技术

近年来,利用空气中激光诱导的等离子体产生太赫兹辐射的技术引起了人们的广泛关注^[14]。该技术的一般机理是当超短激光脉冲聚集在空气中时,焦点处周围的空气发生电离从而形成等离子体,由此而形成的有质动力会使电子电荷与离子电荷间存在较大的密度差,进一步诱导了强而有力的电磁瞬变现象的产生,最终辐射出太赫兹波。

2. 基于非线性频率变换过程产生 THz 辐射

THz 参量源是利用铌酸锂 (LiNbO_3) 晶体中同时存在红外和拉曼活性的 A1 最低对称光学软膜的色散特性这一特点,将一束近红外的泵浦光入射到参量源中,并激发出频率相近的近红外 Stokes 光子(频率为泵浦光子和振动模之间的差频),同时在物质电子与振动的共同作用下,发生非线性参量过程,最终产生 THz 辐射^[15]。1996 年,日本的 K. Kawase 等人利用调 Q Nd:YAG 激光器泵浦侧面刻有光栅的 LiNbO_3 晶体参量振荡器,使得耦合效率比切角耦合方法提高了 250 倍^[16]。此外,他们还改进以往旋转非线性晶体角度的操作为改变泵浦光的入射角,以提高 THz 波频率的调谐速度。在较短时间里实现了 1 ~ 2 THz 范围内的连续可调谐输出。太赫兹参量源是一种全固态的太赫兹辐射源,具有高转换效率、高相干性、易小型化、可靠性高、易操作等优点,而且还能实现室温条件下的单频、高带宽、可调谐输出。

3. 基于远红外光泵浦产生 THz 辐射

1970 年,张道源等人第一次报道了光泵亚毫米波激光器。泵浦光源使用的是连续可调谐 CO_2 激光器,激光介质则采用甲基氟^[17]。此后,人们不断发现新的激射分子及新的谱线。光泵浦太赫兹激光器 (Optically-Pumped THz Laser, OPTL) 正是一种通过泵浦激射分子到适当的激发态后直接辐射出太赫兹波的激光器,它

是目前比较成熟的 THz 辐射源之一，并且已经实现了商业化。美国国家航空航天管理局（NASA）的“先兆”卫星上使用了该类型的气体激光器，可向太空中持续发射太赫兹辐射以观测大气中 O_3 、 H_2D^+ 、 OH^- 等分子或离子的状况。OPTL 作为太赫兹辐射源无法对输出频率进行连续可调，且要求较大的气体谐振腔和数百瓦的泵浦能量。因此 OPTL 在体积、可靠性、频率稳定性、维护性及运行寿命等方面仍需要进一步的改进。

1.3 超材料功能器件的研究现状及存在的问题

前苏联物理学家 Veselago 在 1967 年提出，如果一种介质的介电常数和磁导率的实部同时为负数，那么它将表现出负折射率^[18]。由于在自然界中找不到这样的介质，他的猜想一直未受到人们的重视。直到 2000 年，Smith 等人在其论文中第一个报道了一种在微波频域同时具有负磁导率和负介电常数的结构材料，并首次使用“Metamaterial”称呼该类型的材料^[19]。随后，J. B. Pendry 等人通过测量一种人工复合结构，第一次在实验上证实了负折射现象的存在。因为“Metamaterials”一词在国内没有一个统一的翻译，在本论文中我们将它译为超材料。其英文前缀“meta”在拉丁语中表示“beyond”，因此超材料表面意义上可理解为超出传统材料之外的新材料。目前为止，超材料仍然没有一个明确、统一的具体定义。通常认为超材料是一种由人工设计的亚波长尺寸的周期性结构单元构成，且具有天然媒质所不具有的反常电磁特性的新型人工材料。其反常的物理性质由单元结构决定，而不是其组成成分^[20]。在过去的短短十几年中，超材料领域迅猛发展，基础物理、光学、材料科学、机械学和电子工程等领域的科研人员纷纷投身于超材料的研究工作中，不断挖掘出超材料在通信技术、军事国防、雷达、医学成像等方面的巨大研究价值与应用潜力，其中尤其引人关注的成果之一就是工作于太赫兹频段的超材料功能器件。

至今为止，人们已经从理论到实验上设计了许多基于超材料的 THz 功能器件，包括滤波器、振幅及相位调制器、偏振器、吸收体、开关、二极管、慢光器件等。本文重点研究与讨论其中的两种 THz 超材料功能器件：THz 超材料吸收体和 THz 超材料开关。

1.3.1 THz 超材料吸收体

所谓的吸收体,指的是一类能将入射到其表面的光波的绝大部分能量吸收转化,而几乎没有能量反射的材料。根据材料的不同损耗机制,被吸收的电磁波将转化为热能或其他形式的能量,从而实现隐身的功能。2008年,N.I. Landy 等人首次报道了一种由电环谐振腔、金属短导线和介质层构成的吸收体^[21],如图 1-7 所示。超材料作为一个有效介质,可以通过复介电常数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ 和磁导率 $\mu(\omega) = \mu_1 + i\mu_2$ 来描述。一般人们为了实现负折射率材料更关心 ε 和 μ 的实部,然而通过调控 ε_2 和 μ_2 可设计出吸收体器件。一方面,通过优化结构不断调整 ε 和 μ 的值,实现吸收体与自由空间的阻抗匹配,从而降低电磁波在吸收体界面的反射。另一方面,分别激励 ε 和 μ 的共振,能够使得入射光的电场和磁场都被吸收。此外,选择能损耗更多电磁波的材料做吸收体,也能提高吸收率。当上下两金属薄层发生强烈的共振耦合时,入射的电磁波被夹在两金属层间的介质层所捕获,在这个区域内损耗殆尽。超材料吸收体具有吸收率极高、吸收介质较薄、重量轻等许多优点,在隐形技术、军事、遥感成像及生物医学等领域具有广阔的应用前景。

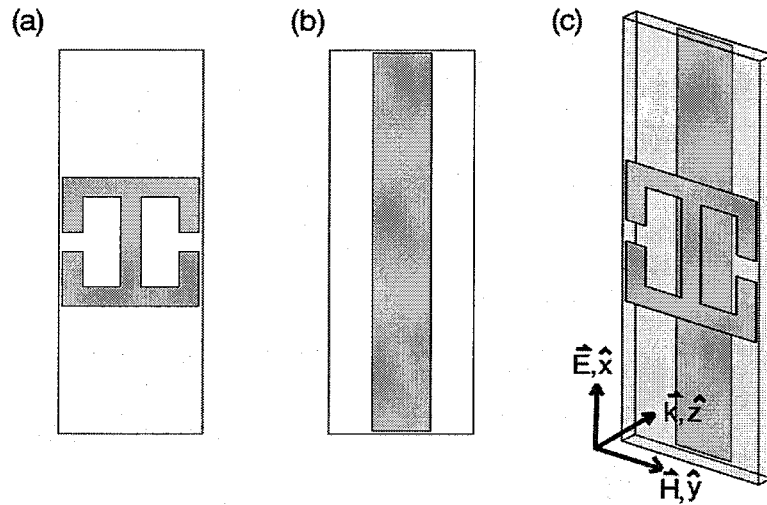


图 1-7 (a)超材料吸收体单元结构的电环谐振器及(b)金属短导线; (c)中所所示的单元结构中画出了入射光波的传输方向

由于受到电磁场共振特性的限制,THz 超材料吸收体的吸收峰频带非常窄。除此之外,它还存在吸收率较低、几何尺寸较大的缺点。这就影响了其在宽带领域中的应用。为了解决这些问题,各种各样的双带、三带、多带以及宽带 THz 超

材料吸收体已经被设计出来，为以后的使用提供了良好的基础。

1.3.2 THz 超材料开关

目前已有的 THz 开关还无法满足实际应用的需求,而超材料则提供了一种动态调控 THz 辐射的方法,该方法具有较大的发展潜力,可用于设计新型的 THz 超材料开关。通过对超材料的不同调整与设计,各式各样基于超材料的 THz 开关已被提出。这些开关器件的运行原理一般是利用外加电场、磁场、温度、光激励、压力等对器件周围环境进行调制,进而实现对其透过谱的共振幅值的调控。在不少应用领域如 THz 通信和 THz 波探测等,新型太赫兹超材料开关为人们提供了一种可供参考的方法。

2006 年, W. J. Padilla 等人报道了第一个 THz 超材料开关^[22]。该开关以 GaAs 为基底, 通过外加的一束泵浦光来激励 GaAs 基底中的自由载流子。在不同光强下激发的载流子密度不同, 谐振器间隙因此将处于开路或短路状态, 对应于共振的打开或闭合状态, 从而实现了超材料共振响应的动态调控。

2007 年, Hou-Tong Chen 等人报道了一种共振频率可调的超材料器件^[23]。在外加泵浦光情况下, 超材料的中心共振频率存在 20% 的频移。该器件的结构如下图所示, 其中基底为硅基蓝宝石层, 谐振器底下镀了一层厚度约为 600 nm 的硅作为电容平面。可以看出, 随着泵浦光强增加, 硅电容平面的电导率变大, 共振频率从 1.06 THz 移动到了 0.85 THz。

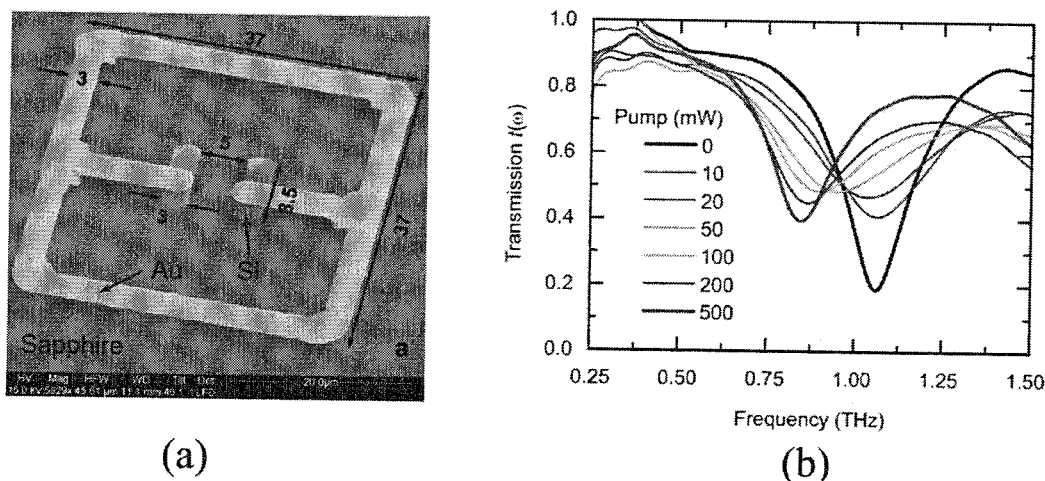


图 1-8 (a)频率可调的平面超材料的扫描电镜显微图(Scanning electron microscopy, SEM); (b)实验测量的透过率谱与泵浦光强的函数关系图

1.4 课题的意义

超材料作为一种新型人工材料,从2000年开始才受到人们越来越多的关注。它拥有天然媒质所没有的物理特性,因此具有非常重要的应用价值与学术价值。尤其是超材料在太赫兹波段的应用,利用超材料对太赫兹辐射进行调控,已经实现了很多基于超材料的太赫兹功能器件。这种器件具有易集成、小型化、质量轻等优点。如果对超材料的基础理论及功能器件的研发设计进行更深入的研究,将会有更多的超材料功能器件问世。这同时也将推动太赫兹技术在经济发展、国防军事、环境保护等方面的发展,给科学技术带来革命性的突破。

1.5 论文的主要研究内容

本论文主要围绕两种 THz 超材料功能器件—THz 超材料吸收体和 THz 超材料开关展开相应工作。第一章介绍了选题的研究背景:简述 THz 辐射的概念、产生与测量方法、特性、应用;还介绍了超材料功能器件的研究现状和存在的问题。第二章中详细介绍了超材料吸收体的基础理论:给出了超材料吸收体的表征参数,包括复阻抗、复介电常数、复磁导率和介质的吸收率;接着讨论了超材料有效参数的反演方法,为 S 参数的计算和数值仿真结果的解释提供理论保障,并进一步讨论了超材料对电磁波的吸收与损耗机制;此外还介绍了用于三维全波仿真的软件 CST 及其计算所采用的时域有效差分法。在第三章提出了一个垂直级联结构的超宽带 THz 超材料吸收体,通过仿真模拟分别对吸收体与入射 THz 波的偏振角和入射角的敏感性进行了分析,并利用等效 LC 电路的理论模型讨论了现象的物理机理。在第四章中,设计了一种基于非对称裂环共振器的太赫兹超材料光开关。不但详细研究了硅与泵浦光强的函数关系及载流子的生成过程,还讨论了光开关的响应时间与开关窗口的可调节性;同时通过计算分析光开关在共振频率处的电场及表面电流分布,结合文中提出的两个等效模型,从理论上很好的解释了开关工作过程中的模式切换效应。最后一章是对论文主要工作的简单总结。

第2章 理论基础及仿真方法

2.1 引言

材料的电磁特性可以用介电常数和磁导率来描述，这两个参数是物质的基本物理量，普遍应用于对介质的宏观电磁特性的研究。介质的微观粒子在电磁场中运动的宏观结果可通过介电常数和磁导率体现，反映出了介质在电磁场中被极化和磁化的性质。一般来说，天然媒质的介电常数 ε 和磁导率 μ 要么都是正值，要么一正一负，或者是复数。到目前为止，人们还未发现自然界中存在介电常数和磁导率都是负值的介质。根据取值正负不同，介质的介电常数和磁导率有四种可能的组合^[24]，如图 2-1 所示。位于象限 I 中的 ε 和 μ 都是正值，根据电动力学理论可知，该象限对应的介质材料的电场矢量、磁场矢量和波矢矢量满足右手关系，所以被称为右手材料，也叫做常规介质。已知的大部分材料都是这类介质。在第

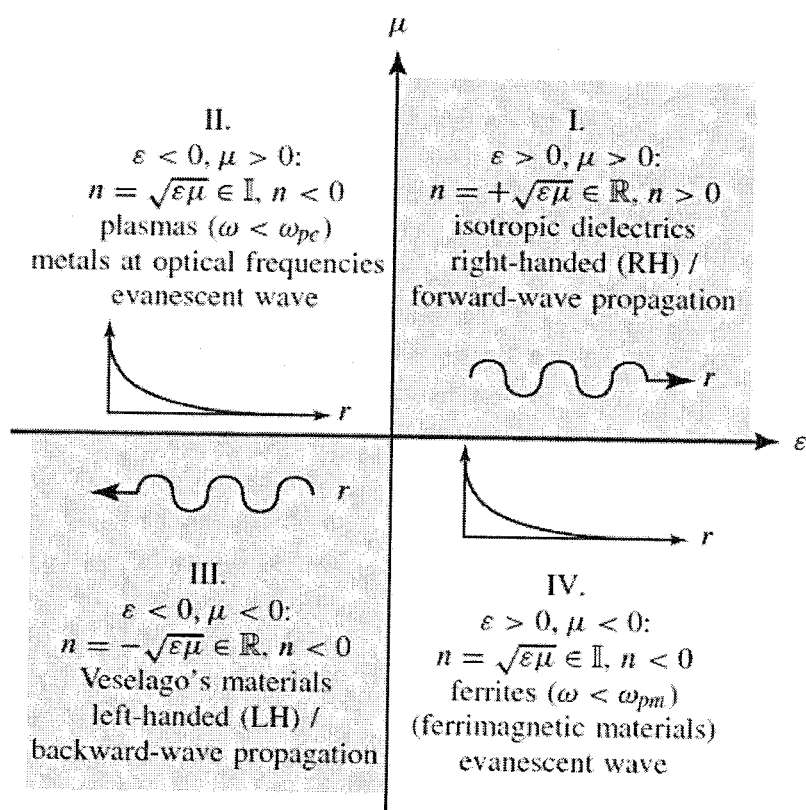


图 2-1 ε 和 μ 的参数空间。横坐标和纵坐标分别对应于介电常数和磁导率的实部

II 象限中, $\varepsilon < 0$ 而 $\mu > 0$, 具有这种介电常数和磁导率的材料被叫做电负材料。等离子导线结构就属于这一类的材料。第 IV 象限所对应的介质, $\varepsilon > 0$ 而 $\mu < 0$, 我们称之为磁负材料。铁氧体和裂环结构就属于磁负材料。磁负材料与电负材料合在一起又统称为单负材料。电磁波虽然能在单负材料中传播, 但是很难透过, 因为电磁波在此类材料中只存在倏逝波。现在人们最关注的是满足第 III 象限参数取值的材料, 即 $\varepsilon < 0$ 且 $\mu < 0$ 。在此种介质中, 电场、磁场和波矢量这三个矢量遵循左手关系, 因此被称为左手材料^[19]。左手材料在许多领域具有非常重大的应用价值, 例如隐身斗篷。超材料作为一种左手材料, 在实际中往往需要通过一些物理参数来分析它的性能优劣。在本章中, 不但介绍了复介电常数和复磁导率这两个重要参量, 还引入了复阻抗和吸收率等参数。此外, 还介绍了这些参数的提取方法, 从理论上对器件的工作机理进行了分析, 同时也对设计更加优良的超材料功能器件具有一定的指导作用。

2.2 超材料吸收体的表征参数

2.2.1 复介电常数和复磁导率

复介电常数和复磁导率是超材料的两个十分重要的物理量, 它们的虚部可用于描述电磁场的损耗。通过 Maxwell 方程, 有

$$\nabla \times H = \sigma E + i\varepsilon'\omega E = i\omega \left(\varepsilon' - i\frac{\sigma}{\omega} \right) E \quad (2-1)$$

这里的 σ 是材料的电导率, ε' 是介电常数的实部。定义介电常数 $\varepsilon = \varepsilon' - i\sigma/\omega = \varepsilon' - i\varepsilon'' = \varepsilon'[1 - i\tan(\sigma_\varepsilon)]$, 同理, 磁导率被定义为 $\mu = \mu'[1 - i\tan(\sigma_\mu)]$ ^[25]。介电常数的虚部与实部 (或磁导率的虚部与实部) 之比定义为电损耗正切 (或磁损耗正切)。如果 $\tan(\sigma_\varepsilon) > \tan(\sigma_\mu)$, 该吸收体为电损耗型材料; 若 $\tan(\sigma_\varepsilon) < \tan(\sigma_\mu)$, 该吸收体则为磁损耗型。如上文所述, 为了提高超材料吸收体的吸收率, 必须通过设计合理的几何结构尽可能的增大 ε'' 和 μ'' 的值。

2.2.2 复阻抗

假设入射电磁波的电场和磁场分别为

$$\vec{E} = E_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad \vec{H} = H_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (2-2)$$

通过上式可将 Maxwell 方程化为

$$\begin{aligned} \vec{k} \times \vec{E} &= \omega \mu \vec{H} \\ \vec{k} \times \vec{H} &= -\omega \varepsilon \vec{E} \\ \vec{k} \cdot \vec{E} &= 0 \\ \vec{k} \cdot \vec{H} &= 0 \end{aligned} \quad (2-3)$$

在电磁场理论中，波阻抗的定义是：

$$Z = Z' + iZ'' = \frac{E}{H} = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} = \sqrt{\frac{\mu_0 \mu_r}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}} = Z_0 \sqrt{\frac{\mu'}{\varepsilon'}} \cdot \sqrt{\frac{1 - i \tan \sigma_\mu}{1 - i \tan \sigma_\varepsilon}} \quad (2-4)$$

波阻抗 Z 可以用来计算电磁波在两种介质分界面处的反射系数及透射系数。而且，由上式(2-4)可知，复阻抗受材料的介电常数与磁导率的影响^[26]。在负折射率材料中，虽然 ε 和 μ 都为负值，但是阻抗 Z 仍为正，这是合情合理的。

2.2.3 吸收率

吸收率是评价超材料吸收体的关键性能指标之一。吸收率越大，吸收频域越宽，超材料吸收体的性能越好。吸收率的计算式可简单的表达为

$$A(\omega) = 1 - R(\omega) - T(\omega) \quad (2-5)$$

其中 $R(\omega)$ 和 $T(\omega)$ 分别表示反射率和透射率。

一般情况下，吸收体的透过率都非常小。所以要实现高吸收率，就要尽可能的减小反射率。如果吸收体与自由空间的阻抗达到完美匹配，那么就能令 $A(\omega)$ 趋近于 1，此时的吸收体就能达到完美吸收。

2.3 超材料有效材料参数的提取方法

对于一个尺寸远小于入射波长的超材料，我们最关心的工作之一就是观测结果中提取出有效材料参数 (Effective material parameters, EMP)，包括介电常数 ε ，磁导率 μ ，折射率 n 和阻抗 Z 。一般情况下，这些参数都是复数，同时具有实部和虚部。这四个参数密切相关，函数关系可写成 $\varepsilon = n/Z$ 和 $\mu = nZ$ 。其中 ε 和 μ 由物质方程定义，被直接代入到 Maxwell 方程中进行求解，而 n 及 Z ，大多数场合用于对不同材料边界处光波现象的描述。即便是单元结构十分复杂的超材料，

我们也可以通过提取组成介质的宏观参量来描述电磁场响应的本征细节。提取均一化参数最简便的方法是利用实验观察得到的复透过率系数 t 和复反射系数 r 。也可以采用电子工程学中常用的散射参数（即 S 参数）来提取有效材料参数。对于一个传统的非磁性介质，它的复折射率 $n = n' + in''$ 可以通过许多方法来求解。目前，最直接有效的计算方法之一是 (R, T) 方法^[27]。该方法只需要测量垂直入射光经过一个已知厚度的介质后反射率 R 及透过率 T 的幅值。根据均一化 Fresnel 定律描述的 (R, T) 和 n 之间的关系，计算出复折射率。另一种方法是在一个宽频谱内测量垂直入射光波的 $R(\omega)$ 或者 $T(\omega)$ 的幅值谱，在利用 Kramers-Kronig(K-K) 关系^[28]求解 n 。这种方法更适用于只能测量 $R(\omega)$ 的不透明介质。

然而，上述所讨论的方法不能直接用来求解一个超材料的有效电磁参数。因为对于一般的超材料，至少有四个参量需要确定。如果用复介电常数 ϵ 和复磁导率 μ 来描述超材料，则需要同时知道这两个变量的实部和虚部，共有四个未知量。同样，对于使用复折射率 $n = n' + in''$ 和复阻抗 $Z = Z' + iZ''$ 来表征超材料的情况，也存在四个未知量需要确定。因此，仅仅知道 R 和 T 的幅值信息已经不能够提取超材料的所需参量，要知道 r 和 t 的所有复系数才行。参数提取在几乎所有的超材料研究中都有十分重要的地位，目前人们已经提出了一系列可行的算法。比如 S 参数提取法^[29]，场平均均匀化^[30]，传输 T 矩阵参数反演法^[31]，基于相位的参数反演法^[32]等。其中 S 参数反演算法是目前最常用的方法，其参数提取过程的基本物理机理非常的简单明了。首先，我们考虑一个在空气中的均匀超材料条形波导，其厚度 d 已知。所谓的均匀条形波导，是指其厚度均匀，且在不同位置都产生相同的反射及透射响应。相比于入射光波长，超材料的尺寸非常小，所有可认为是均匀性介质。假设有一束垂直入射到超材料表面的单位振幅光波，通过分析它在超材料波导空气-材料表面的多次反射情况，可以求出复阻抗 Z 和复折射率 n 与负透过率系数 t 和反射率系数 r 之间的关系。

垂直入射光波在介质中的多次反射过程如图 2-2 所示。一开始，光波入射到空气-材料表面上，有一部分光被反射，另一部分光发生透射。透射光经过材料-空气界面时又出现了部分反射和透射的情况。如此往复，整个过程是一个光波在

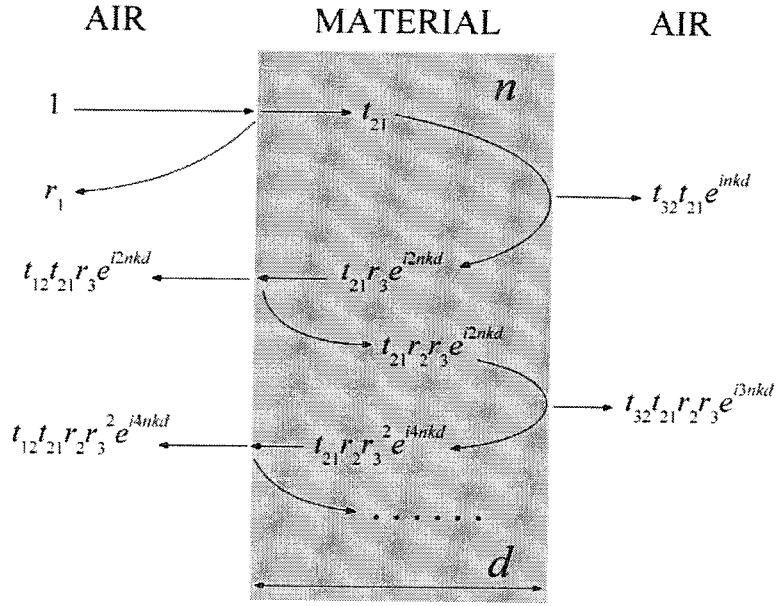


图 2-2 垂直入射光波在一个均匀条形介质的空气-材料界面进行多次反射
超材料内部多次反射的过程。将所有从介质的第一个界面输出的光波求和，有

$$\begin{aligned} r &= r_1 + t_{12}t_{21}r_3e^{i2nkd} + t_{12}t_{21}r_3^2e^{i4nkd} + \dots \\ &= r_1 + t_{12}t_{21}r_3e^{i2nkd} \sum_{p=0}^{\infty} r_3^p e^{i2pnkd} \end{aligned} \quad (2-6)$$

使用常用的级数求和公式 $\sum_{n=0}^{\infty} r^n = \frac{1}{1-r}$ ，上式可化为

$$r = r_1 + \frac{t_{12}t_{21}r_3e^{i2nkd}}{1 - r_3e^{i2nkd}} \quad (2-7)$$

需要指出的是散射参数 S_{11} 就相当于上式的反射系数 r ，而 S_{21} 与透射吸收 t 的关系为 $S_{21} = te^{ikd}$ 。再根据如下关系

$$\begin{aligned} r_2 &= r_3 = -r_1 \\ r_1 &= \frac{Z-1}{Z+1} \\ t_{12} &= 1 + r_2 \\ t_{21} &= 1 + r_1 \end{aligned} \quad (2-8)$$

代入到式(2-6)化简后有

$$S_{11} = r = \frac{r_1(1 - e^{i2nkd})}{1 - r_1^2e^{i2nkd}} \quad (2-9)$$

同理，对于 S_{21} 也有

$$\begin{aligned}
 S_{21} &= t = t_{32}t_{21}e^{inkd} + t_{32}t_{21}r_2r_3e^{3inkd} + \dots \\
 &= t_{32}t_{21}e^{inkd} \sum_{p=0}^{\infty} r_2^p r_3^p e^{i2pnkd} \\
 &= \frac{t_{32}t_{21}e^{inkd}}{1 - r_2r_3e^{i2nk d}} = \frac{(1 - r_1^2)e^{inkd}}{1 - r_1^2e^{i2nk d}}
 \end{aligned} \tag{2-10}$$

联立上面两个式子(2-9)和(2-10)，可得到 n 与 S 参数的关系

$$e^{inkd} = \frac{S_{21}}{1 - r_1 S_{11}} \tag{2-11}$$

上式中的 n 是有效复折射率， $n(\omega) = n_r(\omega) + in_i(\omega)$ ， n_r 是折射率， n_i 是衰减系数， ω 是角频率。 d 是介质的厚度， k 是真空中波数。 r_1 是第一个界面的反射系数，由复波阻抗 $Z(\omega)$ 决定。对上式典型的 Fresnel-Airy 形式进行逆运算，可以推导出如下表达式^[33]

$$Z = \pm \sqrt{\frac{(1 + S_{11})^2 - S_{21}^2}{(1 - S_{11})^2 - S_{21}^2}} \tag{2-12}$$

$$\cos(nkd) = \frac{1 - S_{11}^2 + S_{21}^2}{2S_{21}} \tag{2-13}$$

虽然 n 和 Z 的计算式比较简单，但由于余弦函数和平方根函数的多值性，使得参数提取过程十分繁杂。为了解决这些问题，我们首先需要确定这些参数的实部与虚部的正负取值要求。由于所考虑的超材料是无源介质，因此不存在增益的情况。电磁场在超材料介质中的能量损耗为^[34]

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \omega \left[\varepsilon''(\omega) |E(\omega)|^2 + \mu''(\omega) |H(\omega)|^2 \right] d\omega \tag{2-14}$$

为了满足 $Q > 0$ 的条件，并不需要 ε'' 和 μ'' 同时为正值。而复阻抗 $Z = Z' + iZ''$ 的实部 Z' 就必须大于零，表示衰减系数的复折射率 $n = n' + in''$ 的虚部 n'' 必须大于零。同时，复介电常数 $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ 和复磁导率 $\mu = \mu' + i\mu''$ 的虚部 ε'' 与 μ'' 也必须大于零（在磁电耦合介质与反共振^[35]情况下例外）。也就是有

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Re}[Z] &\geq 0, & \operatorname{Im}[n] &\geq 0, \\
 \operatorname{Im}[\varepsilon] &\geq 0, & \operatorname{Im}[\mu] &\geq 0.
 \end{aligned} \tag{2-15}$$

求解复阻抗的公式(2-12)中的正负号就是为了保证 $\text{Re}[Z] > 0$ ，所以 Z 可以快速而唯一的确定。根据式(2-13)，折射率 n 可通过下式计算：

$$n = \pm \frac{1}{kd} \text{Re} \left[\cos^{-1} \left(\frac{1 - S_{21}^2 + S_{11}^2}{2S_{11}} \right) + 2m\pi \right] \pm i \frac{1}{kd} \text{Im} \left[\cos^{-1} \left(\frac{1 - S_{21}^2 + S_{11}^2}{2S_{11}} \right) \right] \quad (2-16)$$

复折射率的虚部可以通过下式快速获得：

$$n'' = \pm \frac{1}{kd} \text{Im} \left[\cos^{-1} \left(\frac{1 - S_{21}^2 + S_{11}^2}{2S_{11}} \right) \right] \quad (2-17)$$

注意反函数 $\cos^{-1}(x)$ 可对复数进行计算，它的实部取值范围是 $[0, \pi]$ ，但是虚部的取值没有限制。等式右边的正负号是为了保证 $n'' > 0$ 。折射率实部的计算相对而言比较复杂，需要考虑分支问题：

$$n' = \pm \frac{1}{kd} \text{Re} \left[\cos^{-1} \left(\frac{1 - S_{21}^2 + S_{11}^2}{2S_{11}} \right) \right] + \frac{2m\pi}{kd} \quad (2-18)$$

其中 m 是一个代表分支数的整数。这里存在两个问题，一个问题是如何选取等式右边第一项前的符号，另一个问题是如何确定 m 的取值。第一个问题比较简单，只要选择和 n'' 相同的符号即可。而第二个问题，对于绝大多数厚度远小于波长的二维光学超材料，不同的 m 所对应的分支都存在明确的分离，正确的分支既能保证与频率相关的 $n(\omega)$ 在整个宽波长范围内连续，又能满足 ε 和 μ 的虚部对符号选取的要求。一般情况下，参数提取过程是从远离超材料中所有共振的足够大的波长开始，此时可认为 $m = 0$ 。之后，提取的波长逐渐向短波长移动，这时候必须调整 m 的值以保证 $n(\omega)$ 的连续性，并且介电常数 $\varepsilon(\omega)$ 与磁导率 $\mu(\omega)$ 也是频率的连续函数^[36]。接下来，我们就详细讨论这个问题。

考虑到超材料介质的厚度 d ，如果取得太大，那么等式右边第二项 $2m\pi/kd$ 将会很小，各分支之间靠的很近，影响正确解的选取。而当介质厚度 d 接近于入射光的半波长 $\lambda/2$ ，那么余弦函数 $\cos(nkd) \approx \cos(n\pi) = \pm 1$ 。代入到式(2-9)中，可知此时 S_{11} 约等于 0。这样就会在计算过程出现奇点，不利于求解。所以介质的厚度一定要合理设置，一般都远小于入射光波半波长。需要特别指出的是，有效参数提取过程中可能会出现反常物理行为，我们称之为反共振。具体表现为，在一个超材料的平滑磁（电）共振谱线附近伴随有尖锐窄小的反共振，其对应的介电常

数 ε (磁导率 μ) 的虚部将会是负值。该现象是由周期性排列的共振单元之间的共振耦合引起的, 是超材料介质的本征特性。目前人们已多次在等离子超材料中发现这类反常现象。另外, 为了保证算法的确定性并减小误差, 散射参数 S_{11} 和 S_{21} 还要足够偏离零值。

当求出 n 和 Z 后, 可以根据关系式 $\varepsilon = n/Z$ 和 $\mu = nZ$ 立即得到复介电常数 ε 和复磁导率 μ 。即有

$$\varepsilon = \frac{(n'Z' + n''Z'') + i(n''Z' - n'Z'')}{|Z|^2}, \quad \mu = (n'Z' - n''Z'') + i(n'Z'' + n''Z') \quad (2-19)$$

为了保证 $\varepsilon'' > 0$, $\mu'' > 0$, $|n''Z'|$ 要比 $|n'Z''|$ 大才行。如果碰到 $|n''Z'| \approx |n'Z''|$ 的情形, 那么在提取有效参数的过程中可能会产生计算误差, 导致反演得到的介电常数的虚部是负值^[37]。

上述传统的提取方法通过直接计算配合人工选择 $\text{Re}(Z) > 0$ 的分支来计算材料的正确波阻抗 Z , 存在过程繁琐且计算量大的缺点。因此我们需要更加高效简单的算法, 目前已有不少新算法和改进算法。而基于 K-K 关系的算法就是一种选择^[38]。K-K 积分是一种基于因果关系的积分运算, 能将复函数的实部与虚部联系起来。对于一个多值性复对数函数, 利用 K-K 关系可由其虚部直接且唯一地确定实部, 避免了繁琐的分支选择。但是, K-K 算法要求复数的幅值必须连续, 而且不能用于超材料强耦合情形。直接利用上式(2-11), 求出复折射率为

$$n = \frac{1}{kd} \left\{ \text{Im} \left[\ln(e^{inkd}) + 2m\pi \right] - i \text{Re} \left[\ln(e^{inkd}) \right] \right\} \quad (2-20)$$

将上面表达式的实部和虚部分离, 得到

$$n' = \frac{\text{Im} \left[\ln(e^{inkd}) + 2m\pi \right]}{kd} + \frac{2m\pi}{kd} = n'^0 + \frac{2m\pi}{kd} \quad (2-21)$$

$$n'' = \frac{-\text{Re} \left[\ln(e^{inkd}) \right]}{kd} \quad (2-22)$$

可以看到, 折射率的虚部是确定的, 不受对数函数影响。那么折射率的实部就能利用 K-K 关系得到:

$$n'^{KK}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P.V. \int_0^\infty \frac{\omega' n''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (2-23)$$

其中 $P.V.$ 是柯西主值。具体数值计算过程可采用梯度积分的方法, 这里不再详述。

反演算法提取的参数正确性可以通过 Lorentz 和 Drude 模型^[39]验证。

$$\varepsilon_{\text{eff}}(\omega) = 1 + \frac{F_e \omega_{pe}^2}{\omega_{oe}^2 - \omega^2 - i\gamma_e \omega} \quad (2-24)$$

$$\mu_{\text{eff}}(\omega) = 1 + \frac{F_m \omega_{pm}^2}{\omega_{om}^2 - \omega^2 - i\gamma_m \omega} \quad (2-25)$$

这里 ω_{pe} 和 ω_{pm} 是等离子频率, ω_{oe} 和 ω_{om} 是共振频率, γ_e 和 γ_m 是损耗因子, F_e 和 F_m 表示振子强度。虽然 Lorentz 模型经常用来描述像裂环共振器和短金属导线之类的超材料, 但它其实无法模拟一个 $\varepsilon'' < 0$ 或者 $\mu'' < 0$ 的介质^[34]。

2.4 超材料对电磁波的吸收与损耗机制

电磁波正入射到介质表面上, 反射系数 R 可以表达为 $R = (Z_1 - Z_0) / (Z_1 + Z_0)$, 其中 $Z_0 = 377 \Omega$ 是真空阻抗, $Z_1 = ZZ_0$ 是介质的阻抗。为了能最大程度的吸收掉入射的电磁波, 需要 $Z_1 = Z_0$, 即 $Z = 1$ 。此时介质与自由空间阻抗匹配, 电磁波几乎不发生反射。对于自然介质而言, 这个条件难以实现, 但超材料吸收体却可以通过调节 ε 和 μ 实现 $Z = 1$, 从而捕获入射电磁波的绝大部分能量, 通过热效应损耗掉^[40]。根据式(2-11)的反演公式, 有:

$$S_{21} = \frac{1}{\left[\sin(nkd) - \frac{i}{2} \left(Z + \frac{1}{Z} \right) \cos(nkd) \right]} e^{ikd} \quad (2-26)$$

将阻抗匹配时 $Z = 1$ 和 $n = n' + in''$ 的条件代入上式, 得到

$$S_{21} = \frac{1}{\left[\sin(nkd) - i \cos(nkd) \right]} e^{ikd} = \frac{ie^{-n''kd}}{e^{i(n'+1)kd}} \quad (2-27)$$

那么透射率 $T = |S_{21}|^2 = e^{-2n''kd}$ 。当 d 一定时, T 仅由 n'' 决定。也即是说, 在阻抗匹配时, 超材料吸收体的损耗只和 n'' 有关。必须选择合理且足够大的 n'' , 才能实现吸收体的高吸收。假设在 ω_0 处 n'' 取到最大值, 那么有

$$A(\omega_0) = 1 - e^{-\frac{2F\omega_0^2 d}{\gamma c}} \quad (2-28)$$

可以看出, 吸收率不仅受结构几何尺寸, 超材料电导率和损耗因子的影响, 还受

金属与介质板之间的损耗的影响^[25]。

2.5 数值模拟仿真原理及方法

本论文的课题研究需要对三维物体的电磁场响应问题进行模拟仿真，目前已有不少比较成熟的仿真软件可供使用，如 Ansoft HFSS、FDTD、COMSOL Multiphysics、CST Microwave Studio 等。这里我们采用了 CST Microwave Studio。这种软件模拟结果结合理论分析的方法，对于新型超材料结构及器件的设计、研究起到了极大的指导作用。

2.5.1 CST 软件简介

Computer Simulation Technology(CST)公司是全球最大的专业电磁场仿真软件公司，成立于 1992 年，总部位于德国达姆斯塔特市。其出品的工作室套装（共包含八个子软件）之一 CST 微波工作室（英文简称 CST MWS）是一款三维高频无源仿真软件，主要用于无源/高频微波器件、左手材料/光学、天线、RCS、滤波器，以及 EMC/EMI 等的仿真设计和分析。适用于全频段，Hz-GHz、THz 直至可见光波段的任意结构、任意材料模型的电磁问题的分析计算。它同时具有时域和频率算法，共含 11 种电磁算法/求解器，包括频域有限积分（FIFD）、频域有限元（FEM）、矩量法（MoM）、时域有限积分（FITD）、多层快速多极子（MLFMM）、模式降阶、本征模等^[41]。根据具体应用情况，可选择最佳的算法，达到速度与精度的统一。除此之外，它还能够与其他软件如 Matlab、Agilent ADS 进行协同仿真。该软件在超材料研究，左手材料仿真技术和天线设计等领域具有广泛应用。具有消耗内存少、运算速度快，且模拟结果符合实验测量等优点。对提高实际设计生产过程中器件的研究效率及资源利用率具有十分大的帮助。

CST 微波工作室使用的是有限积分法（FIT），但在直角坐标系时域条件下，FIT 可以转换成标准的时域有限差分（Finite Difference Time Domain methods, FDTD）形式。由于本文中的研究目标都是处于 Cartesian 坐标系中，所以可认为整个仿真过程中采用了 FDTD 算法。

2.5.2 有限时域差分方法的理论基础

研究超材料最有效的数值方法之一是 FDTD 方法, 它最早是由 K. S. Yee 在 1966 年提出^[42], 目前已经广泛应用于电磁场问题的数值计算等方面。FDTD 的优点之一就是能够解决绝大多数的微波与天线问题, 它能模拟许多介质, 比如导体、光子晶体、电介质、集总端口、主动器件和色散材料。FDTD 的另一个显著优点是能够进行宽带表征。由于 FDTD 是时域求解器, 它模拟得到的数据可通过变换获得一个宽带响应的频域解。在各向同性的无色散非铁磁性介质中, 时间相关 Maxwell 方程的差分形式可写为^[43]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times H - \frac{1}{\varepsilon} \sigma E \\ \frac{\partial H}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \nabla \times E - \frac{1}{\mu} \sigma_m H\end{aligned}\quad (2-29)$$

使用 FDTD 方法对研究物体划分的空间网格, 称为 Yee 单元。如图 2-3 所画, 电场分量沿着网格的边, 而磁场分量分布于网格六个面的中心。每个 Yee 氏网格单元实际拥有 3 个电场分量 (E_x, E_y 和 E_z) 与 3 个磁场分量 (H_x, H_y 和 H_z), 因此满足 Faraday 感应定律和 Ampere 环流定律。在三维直角坐标系中, 上述两个矢量方程每一个都能转化为三个标量方程, 共得到六个标量方程:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) - \frac{\sigma}{\varepsilon} E_x \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) - \frac{\sigma}{\varepsilon} E_y \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) - \frac{\sigma}{\varepsilon} E_z \\ \frac{\partial H_x}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) - \frac{\sigma_m}{\mu} H_x \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) - \frac{\sigma_m}{\mu} H_y \\ \frac{\partial H_z}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) - \frac{\sigma_m}{\mu} H_z\end{aligned}\quad (2-30)$$

上述六个耦合偏微分方程是 FDTD 数值算法模拟电磁波与任意三维物体相互作用的基础。在直角坐标系中, Yee 单元的尺寸为 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, 三个轴向的尺寸可

相等也可不等,视具体研究情况而定。研究物体的整个体积 V 中都充满了这些单元,可定义一个网格点 (i, j, k) 为 $(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$ 。对于一个含有空间和时间变量的函数 f , 则有

$$f(x, y, z, t) = f(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = f^n(i, j, k)$$

这里的 Δt 是时间步长, n 是当前计算的时间标识, i, j 和 k 则给出了当前计算的空间坐标。那么, 时域和空域上的差分可转化为

$$\frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial t} \Big|_{t=n\Delta t} \approx \frac{f^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - f^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x=i\Delta x} \approx \frac{f^n\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right) - f^n\left(i-\frac{1}{2}, j, k\right)}{\Delta x}$$

在时域中,通过“蛙跳”的方法对方程离散化。即每隔半个时间步长就对电场和磁场分别采一次样,假如在 $t = n\Delta t$ 处计算了电场,那么磁场需要在 $t = (n + 1/2)\Delta t$ 处进行计算。整个计算过程就像就是不断迭代的过程。

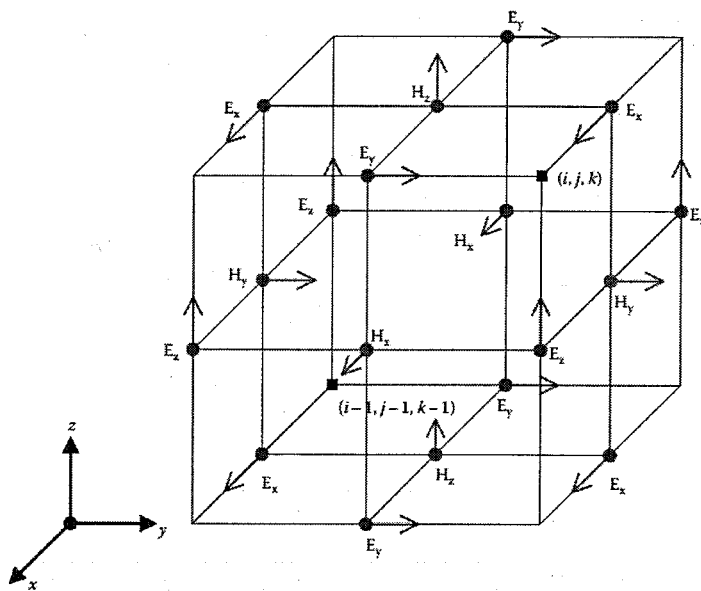


图 2-3 在一个 Yee 单元中的电场和磁场分量

利用 Yee 空间网格的划分,上述偏微分方程在空域上可写为中心差分的形式,以其中一个方程为例:

$$\left. \frac{\partial H_x}{\partial z} \right|_{\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right)} \approx \frac{H_x\left(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}\right) - H_x\left(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}\right)}{\Delta z} \quad (2-31)$$

因此式(2-30)中的一个方程时间离散后可写成

$$\begin{aligned} E_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right) &= \frac{\frac{1}{\Delta t} - \frac{\sigma}{2\mu}}{\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2\mu}} E_x^{n-\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right) \\ &+ \frac{1}{\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2\mu}\right) \cdot \varepsilon \Delta y} \cdot \left[H_z^n\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k\right) - H_z^n\left(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k\right) \right] \\ &- \frac{1}{\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2\mu}\right) \cdot \varepsilon \Delta z} \cdot \left[H_y^n\left(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}\right) - H_y^n\left(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (2-32)$$

这样, Maxwell 方程的微分式直接替换成与场分量相关的有限差分式。在选择合理的初值条件与边界条件后, 就可计算出 Maxwell 方程的时域数值解, 经过傅里叶变换后可获得频率数值解。同时, 为了保证 Yee 算法的数值稳定性, 受限于空间尺寸增量 Δx 、 Δy 和 Δz 的时间步长 Δt 必须设置一个上限值, 以满足 Courant-Friedrich-Levy(CFL)稳定性条件。在三维问题中, 这个条件可以写成^[43]

$$\Delta t \leq \Delta t_{\max} = \frac{1}{C \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}, \quad (2-33)$$

C 是模拟空间中工作模式的最大波速度, 一般而言, $\Delta t = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)_{\min} / 2C_{\max}$ 。

2.6 本章小结

在本章中, 我们简要介绍了超材料的表征参数。重点讨论了有效材料参数的提取方法, 包括算法的使用范围与不足。接着分析了一下电磁波在超材料吸收体中的损耗机制。最后主要介绍了用来模拟仿真的软件及其算法基础。这样, 从理论到仿真计算上, 都能对超材料进行很好的分析。

第3章 超宽带超材料太赫兹吸收体的性能研究

3.1 引言

超材料是一种人工设计并能表现出自然界无法找到的特性的亚波长周期性结构。它使得制造出一种介电常数和磁导率都可控的有效介质成为了可能。通过对超材料结构进行合理有效的设计,已经实现了许多功能器件,比如说负折射率材料^[44],完美棱镜^[45],隐身斗篷^[46]等。近些年来,由于超材料在太赫兹技术的一系列潜在的应用,包括安检,药物检测,太赫兹成像等,使得应用于太赫兹频段的超材料结构的制造和光学表征取得了极大的发展和关注。目前,超材料吸收体成为了人们大量关注的超材料分支之一。超材料吸收体的单元结构相对简单,主要由三个部分组成。一个起到频率选择表面的图案化金属阵列,一个底层基平面,和将金属阵列与基平面隔开一定距离的介质层。单元结构中各层的尺寸和厚度都比外加入射波的波长小。通过调控超材料的有效介电常数 ε 和磁导率 μ ,人们可以实现对某一频率的入射光的近完全吸收。然而,受限于超材料吸收体基于强电磁场共振的共振特性,吸收体一般只能在非常窄的频带内吸收入射电磁波。这就大大限制了其在宽带应用领域的使用性能,比如说太阳能电池^[47]。因此,越来越多的研究工作致力于增强超材料吸收体的吸收带宽。目前为止,主要有两种实现宽带太赫兹超材料吸收体的设计方法。一种方法是通过使用不同尺寸和结构的频率选择表面产生相连的多共振频率^[48]。另一种方法是通过合理设计结构,使相连的共振吸收峰合并在一起,形成一个宽带的吸收频谱^[49]。除此之外,还有其他一些方法,比如基于干涉相消原理设计的宽带超材料吸收体^[50]。

在这一章里,我们主要设计了一种垂直级联结构以实现超宽带的超材料吸收体。通过使用时域有限差分法研究了该结构的吸收特性。同时,我们也具体分析该吸收体吸收谱的偏振相关性和入射角相关性。数值模拟结果表明该结构在 2.6 到 5.7 THz 内有一个吸收率高于 90% 的宽吸收带。当太赫兹波的入射角小于 50° 时,吸收体仍能在一个大于 2.5 THz 的频率范围内维持吸收率高于 88%。此外,在分析了垂直入射的太赫兹波的两个正交偏振分量的吸收光谱后,我们发现该吸收体对入射太赫兹波的偏振不敏感。这一结构的宽带吸收体可以应用于太赫兹成

像，太阳能电池，遥感，和隐形技术等领域。

3.2 垂直级联太赫兹超材料吸收体

3.2.1 结构设计和基本原理

下图 3-1 所示的是一个基于驻波共振的超材料吸收体。在模拟过程中，底层金平面和金层的厚度都是 $0.2\ \mu\text{m}$ ，介质层的厚度为 $2.0\ \mu\text{m}$ 。正方形金层的长度为 $46\ \mu\text{m}$ ，结构周期为 $50\ \mu\text{m}$ 。介质层的介电常数被模拟为 $2.8 + 0.09i$ 。模拟得到的吸收光谱如下图 3-1(b)所示。我们可以看到，在整个太赫兹频带内有三个狭窄的吸收峰值。这三个吸收峰值的共振频率分别为 1.73 、 5.13 和 $8.68\ \text{THz}$ 。在这些峰值中，第一个峰达到了近完全吸收，而其他两个峰的吸收率分别为 87% 和 76% 。这两个峰是由高阶共振模诱导生成的，它们并没有达到近完全吸收的程度。所有的共振频率可以简单由公式 $f_{\text{res}} \approx (2j-1)c/2nL$ ($j = 1, 2, 3, \dots$)^[51] 计算，这里 c 是真空中的光速， n 是介质层的折射率， L 是介质层的厚度，不同的 j 对应于不同阶数的共振模。一般地，随着吸收体结构尺寸的增加，共振频率将会向低频移动。然而同时，一些影响共振峰叠加的并不需要的窄带吸收峰也会随之进入到我们感兴趣的频域，造成最后输出的吸收谱有许多即窄又低的吸收峰。在这样的情况下，我们将设计一种吸收频谱主要集中于 2 到 $6\ \text{THz}$ 的太赫兹超材料吸收体。在这里定义各金属层对吸收谱的平均贡献为吸收谱的半高度全宽除以金属层的数目。在仿

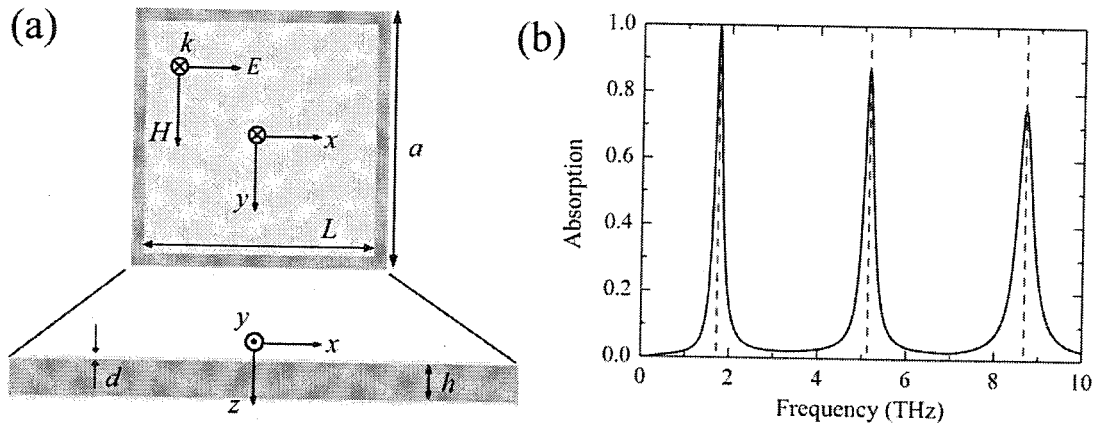


图 3-1 基于驻波共振的平面太赫兹超材料吸收体。(a)结构顶层前视图和底层侧视图；(b)模拟得到的电磁波通过该吸收体后的吸收谱。虚线表示共振峰的位置

真比较了具有不同金层数的级联吸收体后，可以发现层为6层时所对应的平均带宽贡献大于金层为5层或7层等情况。这是因为当有6个金薄层时，合理的尺寸设计使得一个由高阶共振引起的吸收峰也被用来增大吸收带宽。

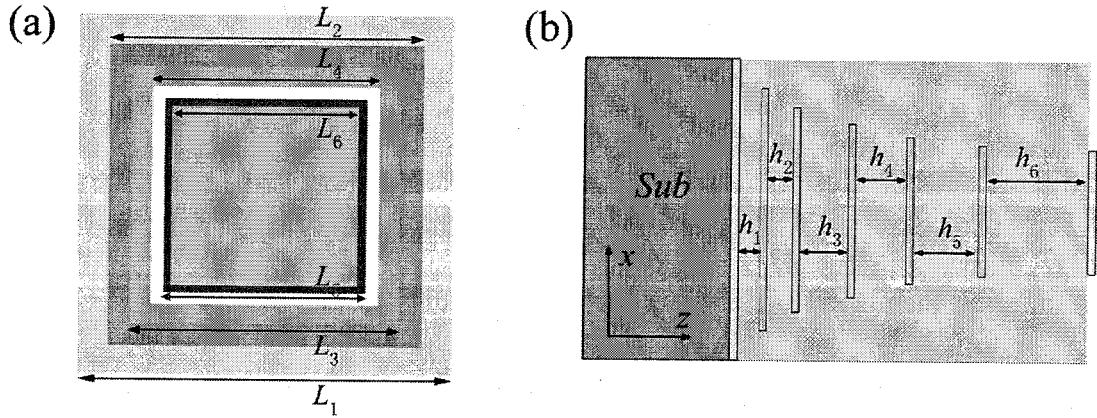


图 3-2 六个金片被堆栈在一起以获得一个宽带的太赫兹超材料吸收体。(a)单元结构的前视图;(b)侧视图。单元结构在 x 和 y 方向上以周期 $a = 34 \mu\text{m}$ 重复，形成一个正方形阵列

上图 3-2 所示为我们设计的一种太赫兹超材料吸收体的单元结构，同时给出了结构的前面图和侧视图。该单元结构由基底金平面，六个金层，和聚酰亚胺介质层构成。由于吸收峰的共振频率主要由各层的尺寸所决定，所以可以通过优化结构参数，将七个相连的共振将合并在一起，形成一个宽带的吸收谱。下面利用模拟仿真进一步研究该吸收体的吸收特性。太赫兹波一般是垂直金平面入射的，此时，金层被模拟为电导率为 $\sigma = 4.0 \times 10^7 \text{ S/m}$ 的损耗金属，介质层则选取为聚酰亚胺，且聚酰亚胺具有频率无关的折射率 $1.8 + 0.06i$ 。各介质层的厚度从 h_1 到 h_6 分别为 $0.6, 0.7, 1.3, 1.4, 1.8$ 和 $2.8 \mu\text{m}$ 。而 6 个金层的尺寸从 L_1 到 L_6 则分别是 $27.4, 23, 19.6, 16.6, 14.8$ 和 $14 \mu\text{m}$ 。此时金层的厚度大于它的穿透深度，所以太赫兹波无法穿过此结构。吸收率可计算为 $A = 1 - R = 1 - |S_{11}|^2$ ，这里 R 是反射率， S_{11} 是和反射率有关的散射参数。与其他已经设计的具有多种介质材料和复杂的金属层结构的级联吸收体不同，本文所提出的级联吸收体的结构更加简单。这是因为金属层被设计成了正方形结构，方便加工制作，而且介质层中只使用了一种介质材料。

3.2.2 模拟结果和讨论

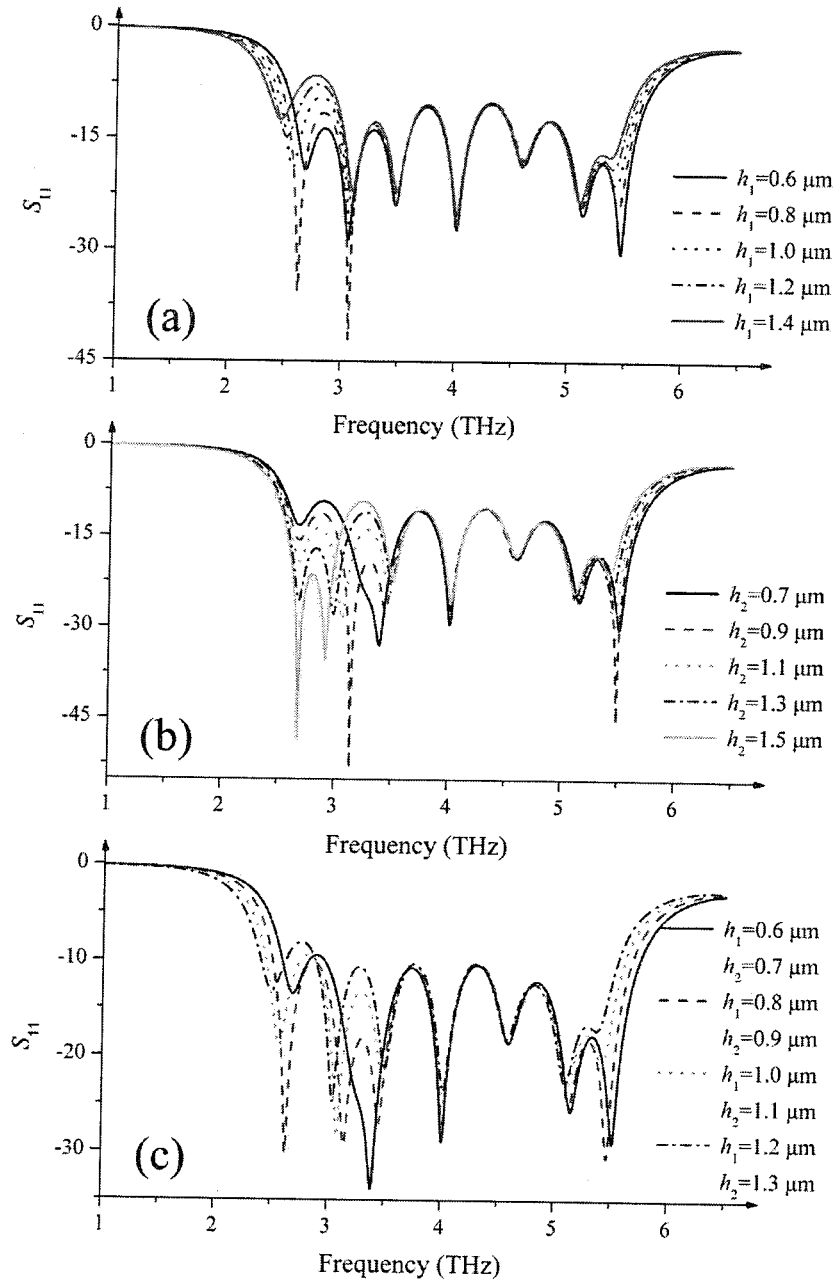


图 3-3 S_{11} 作为 h_1 和 h_2 的函数。(a)随着 h_1 的增加 S_{11} 的变化趋势; (b)随着 h_2 的增加 S_{11} 的变化趋势; (c)同时变化 h_1 和 h_2 时 S_{11} 的变化趋势

对于结构参数与吸收光谱的关系, 这里主要研究和讨论介质层的厚度对吸收光谱的影响。图 3-3(a)和 3-3(b)分别所展示的就是当 h_1 和 h_2 取不同值时的吸收光谱。可以看到, 随着 h_1 的增加, 第一个峰和最后一个峰往低频方向移动。当 h_1 为 $0.8 \mu\text{m}$ 时, 第一个峰在 2.6 THz 处达到了近完全吸收。相比之下, 最后一个峰

的幅值随着 h_1 的增大持续降低。如图 3-3(c) 所示, 当同时改变 h_1 和 h_2 时, 第一个 (第二个) 吸收峰的变化趋势与仅改变单个介质厚度 $h_1(h_2)$ 时的变化趋势相一致。综上可知, 介质层厚度的变化对吸收峰的频率和幅值都存在影响。这一现象可以通过吸收体的干涉相消理论得以解释^[52]。根据该理论, 吸收体的反射率其实是顶层的介质/金层界面的直接反射和底层的介质/金层表面的多次反射相互叠加的结果。这两种反射干涉相消, 在一个合适的介质层厚度时互相完全抵消, 实现了吸收体的零反射。而对于那些介质层厚度偏离最佳值的情况, 这两种反射仅仅只能部分相消, 甚至还有可能干涉叠加, 造成共振频率的红移和吸收峰幅值的降低。在图 3-3(b) 中我们可以发现, 当介质层厚度取某个合适值的时候, 相连吸收峰就会合并在一起。需要说明的一点的是, 这里我们只讨论了 h_1 和 h_2 对吸收谱的影响, 而没有继续讨论其他介质层厚度如 h_3, h_4, h_5 和 h_6 等对吸收谱的影响。这是因为介质层厚度对吸收谱的影响都是类似的, 讨论 h_1 和 h_2 与吸收谱的关系已经足够了。

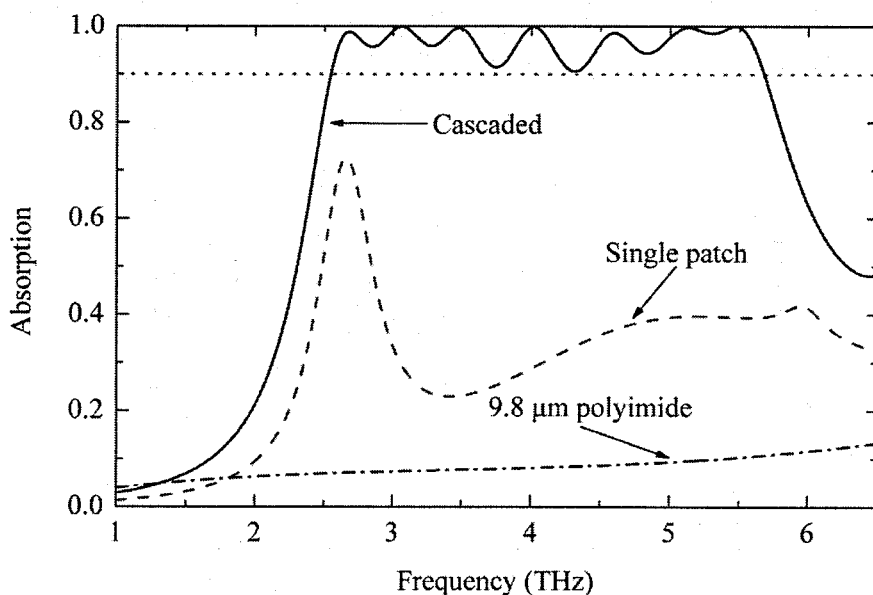


图 3-4 级联太赫兹超材料吸收体模拟得到的吸收谱。同时还画出了单金层结构吸收体和厚度为 $9.8 \mu\text{m}$ 的介质层的吸收谱。点线代表吸收率为 90%

图 3-4 中展现了该级联太赫兹超材料吸收体的吸收谱, 同时还画出了一个介质层厚度为 $0.6 \mu\text{m}$ 而金层尺寸为 $27.4 \mu\text{m}$ 的单层吸收体结构的吸收谱。此外, 还给出了厚度为 $9.8 \mu\text{m}$ 的聚酰亚胺层的吸收谱。对于单层结构来说, 有一个共振频率在 2.66 THz 吸收峰。从图中可以看到, 73% 的入射太赫兹波被吸收了。相比之

下, 对于级联的太赫兹超材料吸收体, 则一共有七个共振吸收峰存在。共振频率分别为 2.72, 3.06, 3.48, 4.01, 4.59, 5.13 和 5.47 THz。已之相对应的吸收率分别是 98.8%, 99.8%, 99.6%, 99.7%, 98.6%, 99.7%和 99.9%。正是归功于这七个紧密相连的共振峰的叠加, 我们可以获得一个在 2.58 到 5.67 THz 范围内吸收率始终高于 90%的宽带宽频谱。吸收谱相对于中心频率 (~ 4 THz) 的 FWHM 约为 95%, 几乎是单层结构 (一般来说不超过中心频率的 20%) 的 5 倍。

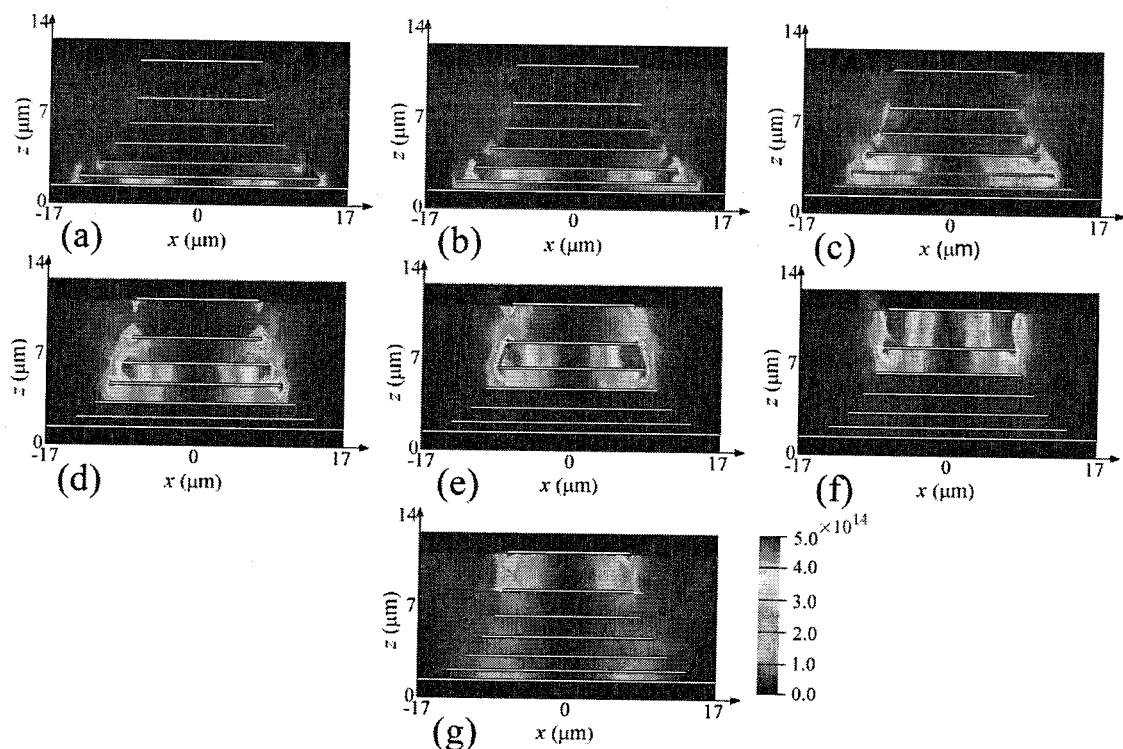


图 3-5 (a)-(g)共振频率分别为 2.72, 3.06, 3.48, 4.01, 4.59 和 5.13 THz 时入射的太赫兹波在 xz 平面($y = 0 \mu\text{m}$)上的功率分布。矩形线段代表金层

为了更深一步了解吸收谱表现出来的光谱特性的物理机理, 这里还研究了入射太赫兹波在七个共振频率处的功率分布, 结果如图 3-5 所示。在 2.72 THz 的共振主要与最底端的电环共振器层有关。同时, 在 3.06, 3.48, 4.01, 4.59 和 5.13 THz 的共振主要是由其所对应的各金属电环共振器层激励的结果。特别需要注意的是, 在图 3-5(g)中人们可以看到第 7 吸收峰的入射功率分布于介质层的一个十分大的区域, 主要位于最顶层的介质层。由此可知顶端电环共振器层对第 7 个共振有极大的影响。这些功率分布图清楚的表明了级联结构的每一个电环共振器都对宽频吸收谱的形成有贡献。

在上图 3-4 中,除了六个强共振峰外,吸收谱上还有一个共振频率在 5.47 THz 的额外的第 7 共振峰。下面我们来讨论和分析这个额外的共振峰的产生机理。特别地,在图 3-6(a)和 3-6(b)中画出了共振频率为 5.47 THz 时 J_x 和 $|H_y|^2$ 在 xz 平面的分布,这里的 J_x 和 $|H_y|^2$ 分别指的是表面电流的 x 分量和磁场强度的 y 分量。从图中可以看出,磁场强度广泛分布于介质层的中心区域和两端,且大部分是在最顶端金层和其相邻金层之间的介质层里。在图 3-6(c)和 3-6(d)中,分别给出了在最顶端金层的下表面的表面电流和相邻金层的上表面的表面电流。很显然,顶层下表面的表面电流和相邻层上表面的表面电流是反向平行的。由共振 LC 电路模型^[53]可知,额外的共振峰是由磁场共振激励产生的。

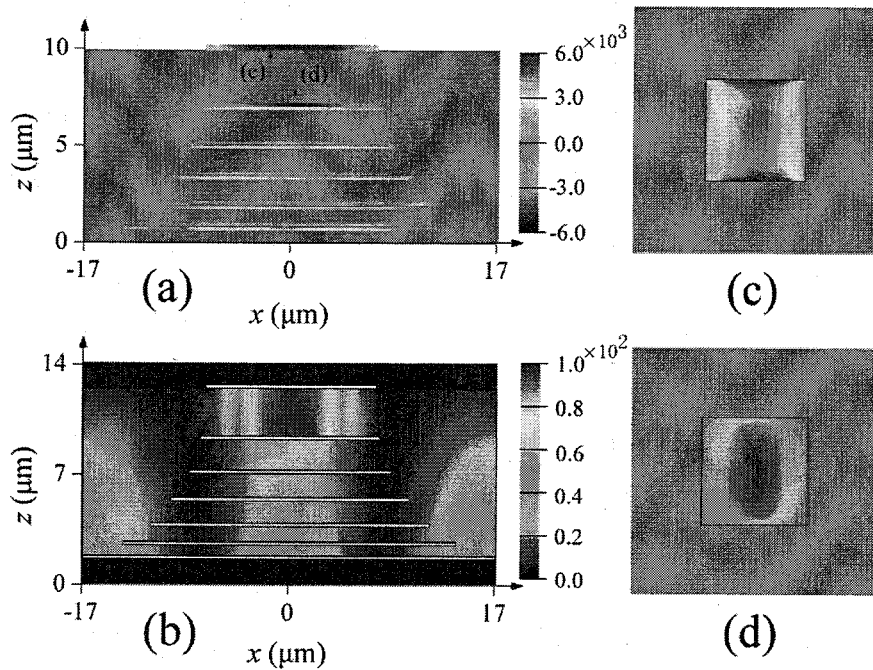


图 3-6 (a)-(b) 共振频率为 5.47 THz 时 J_x 和 $|H_y|^2$ 在 xz 平面($y = 0 \mu\text{m}$)处的分布; (c)-(d) 分别是最顶端金层下表面的表面电流和相邻金层上表面的表面电流

已有的级联结构的吸收体,一般是一个金属层对应于一个共振峰。与之相比,我们所设计的吸收体引入了一个由高阶磁共振模激励产生的额外的共振峰,通过与另外 6 个吸收峰合并叠加,获得了一个更加宽的吸收谱,进而设计出了一个超宽带的太赫兹超材料吸收体。图 3-7(a)所示为 ϵ'' 在取不同值时所对应的吸收谱,这里的 ϵ'' 指的是介电常数的虚部。随着 ϵ'' 的增加,可以发现,吸收峰的幅值开始改

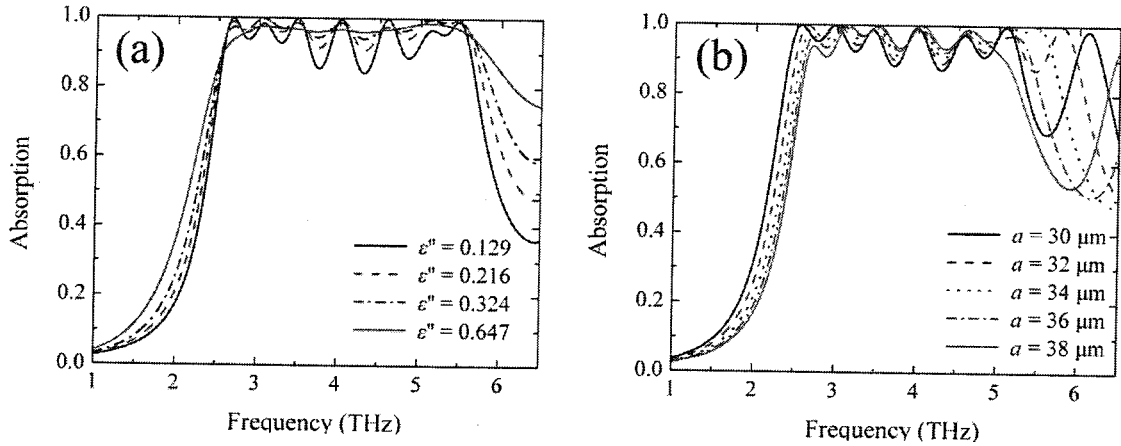


图 3-7 (a)介电常数虚部 ϵ'' 和(b)结构的周期与吸收谱的关系

变,同时光谱的吸收带宽出现展宽,可以根据共振电路模型解释介电常数的虚部对吸收谱的影响^[53]。该理论表明,平面结构的共振模能同时维持着辐射阻尼和损耗阻尼。共振模的辐射阻尼可以在 ϵ'' 取 0 时求解得到。而为了使吸收体实现近完全吸收,就要满足辐射阻尼和损耗阻尼相等这一条件。基于此,当辐射阻尼求解出来时,同时也就确定了损耗阻尼的大小。由于辐射阻尼和损耗阻尼都与 ϵ'' 有关系,因此只要取一个最优的 ϵ'' 时入射电磁波才会在共振频率处实现最大的吸收。需要注意的是每一个吸收峰都各自对应于一个最优的 ϵ'' 。所以 ϵ'' 的选取需要综合考虑所有的吸收峰的情况。当取 $\epsilon'' = 0.216$,此时的吸收谱应该说是相对较好的。在图 3-7(b)中展现出了吸收体结构的周期对吸收谱的影响。可以看到,随着周期的增大,第 7 峰将会向低频方向移动。与结构相同但周期分别为 32 μm 和 36 μm 的吸收体比较,周期为 34 μm 时的吸收体具有更宽的吸收带宽。

3.2.3 吸收谱的偏振相关性和入射角相关性研究

为了研究入射太赫兹波的偏振和入射角对吸收谱的影响,在太赫兹波取不同入射角时吸收体的吸收率与频率的函数关系如图 3-8 所示。图 3-8(a)-(b)对应于太赫兹波的 TE 模,图 3-8(c)-(d)对应于 TM 模。当垂直入射 TE 模时,吸收体在 2.6 到 5.7 THz 的频率范围内能保持吸收率高于 90%。当入射角不大于 50° ,吸收体仍能在一个十分宽的频域(~ 2.5 THz)能维持吸收率大于 88%。对图 3-8(d)所示的垂直入射 TM 模的情况,随着入射角的增大,光谱中吸收率大于 88%的带宽开始变窄,同时吸收峰的幅值也不断降低。综上所述,我们可以得出这样一个结论:

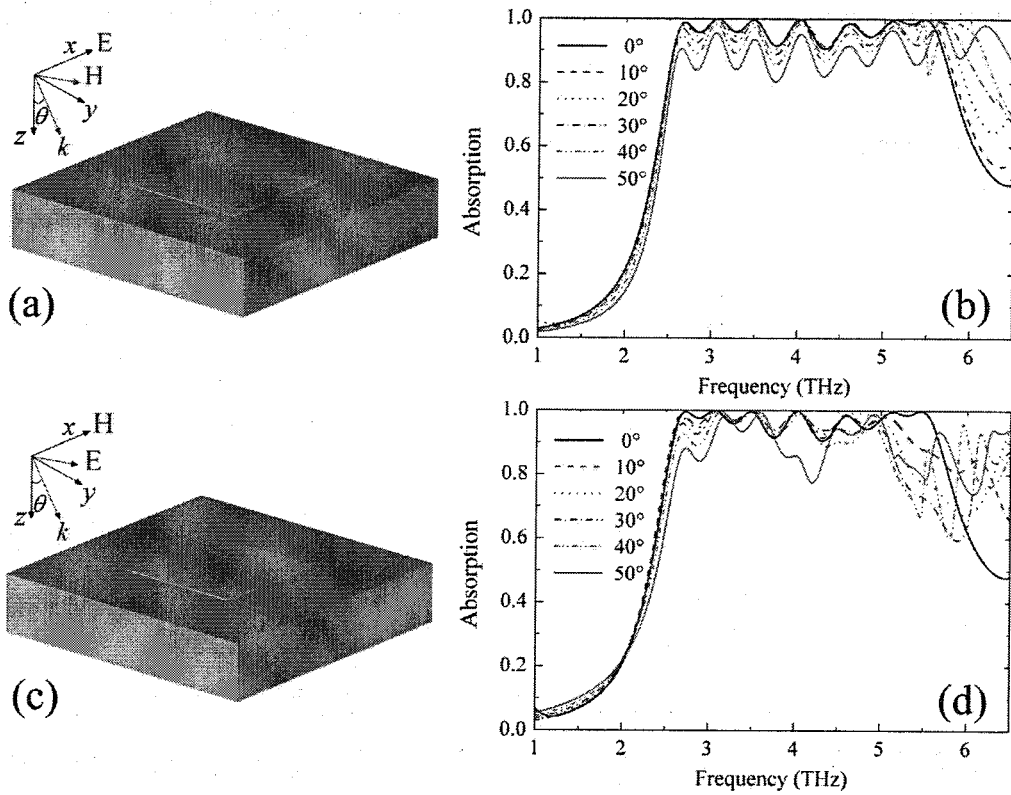


图 3-8 THz 波取不同入射角时级联吸收体的吸收谱。(a)-(b)对应于入射太赫兹波的 TE 模; (c)-(d)对应于 TM 模。其中 θ 是入射角

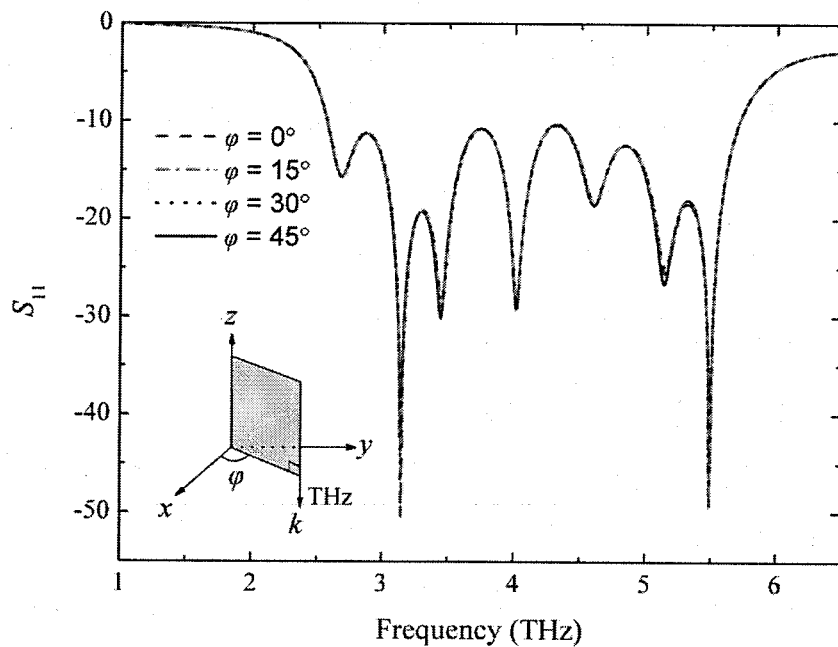


图 3-9 偏振角 ϕ 对吸收谱的影响。 ϕ 指的是入射太赫兹波的电场分量和 x 轴之间的夹角。可以看到, 反射谱几乎不受入射光波偏振角的影响

不论垂直入射的 THz 波是 TE 模还是 TM 模, 只要入射角小于 50° , 吸收谱仍能在约为 2.5 THz 频率宽度内保持吸收率大于 88%。更进一步, 还对吸收体的偏振相关性进行了研究。一般来说, 斜偏振可看成是水平偏振和垂直偏振的叠加。如果一个吸收体对于两个正交偏振不敏感, 那么它也应该对斜偏振的情况是不敏感的。从图 3-8 中很明显地可以看出, 我们设计的吸收体对于正交偏振是不敏感的。为了更充分的说明入射太赫兹波为斜偏振的情况, 还对吸收体在不同偏振角时的反射谱进行了模拟, 结果如图 3-9 所示。当偏振角不断变化时, 反射谱几乎不变, 这说明该吸收体对于垂直入射的太赫兹波偏振不敏感。因此, 该太赫兹吸收体具有偏振不敏感的特点。

3.3 本章小结

在本章中, 我们设计了一种垂直级联的超宽带超材料结构, 并对其电磁共振特性, 偏振相关性及入射角相关性进行了计算和分析。结果表明, 该太赫兹超材料吸收体在 2.6 THz 到 5.7 THz 的超宽频率范围内对正入射 THz 波具有超过 90% 的吸收。吸收谱的 FWHM 相对于中心频率可高达 95%。不仅如此, 通过仿真分析不同偏振角入射的斜偏振情况, 可知该吸收体还具有偏振不敏感性。除此之外, 当入射角不大于 50° 时, 吸收体仍能够在超过 2.5 THz 的频域内对入射 THz 波保持高于 88% 的能量吸收。相比于已有的级联超宽带吸收体结构, 该结构的吸收体引入了一个额外的共振峰, 所以具有更大的平均带宽贡献。这种器件可以应用于遥感成像、THz 探测器等领域。

第4章 太赫兹超材料开关

4.1 引言

超材料的周期性单元结构,被称为“超原子”(meta-atom)。它是超材料设计过程中最重要的特征因素。大多数情况下单元结构是由微米尺寸的开口环谐振器构成,依赖于入射光的偏振特性表现出双各向异性。目前,已有许多不同的太赫兹超材料功能器件被设计出来了,有探测器,调制器,滤波器,偏振器和开关等。特别地,可通过外加激励,如微电机系统,光激励,电场,磁场,压力和温度等实现调控的主动太赫兹超材料受到了越来越多的关注。这些器件能对入射太赫兹波进行简易且动态的调节。近些年来,人们对于太赫兹开关方面做了许多的研究,一系列的太赫兹开关已经被报道出来。这些开关包括有太赫兹光子晶体开关^[54],基于超材料的碳纳米管太赫兹光开关^[55],具有纳米砷二极管薄膜结构的太赫兹光电导开关^[56],和硅基太赫兹光电导开关^[57]等。对于嵌入有硅的光电导太赫兹开关,硅的电导率可由外加泵浦光进行控制,通过改变泵浦光强实现对超材料共振频率和强度的调控。除了泵浦光源外,还可以在硅薄层两端外加一个电压,这样也可以在硅中激发载流子并对硅的电导率进行动态改变。

在这一章中,我们主要设计并研究了一种基于非对称裂环共振器^[58]的硅嵌入太赫兹超材料光开关。硅的电导率随着外加泵浦光功率密度的改变而改变,使得开关工作于不同的共振模式。而这些模式对应于开关的“开状态”和“闭状态”。某一个频率范围内如果“开状态”的透过率比“闭状态”的透过率大一个数量级,我们就定义这个频率范围为开关窗口。通过计算可以发现,该太赫兹开关存在一个从 1.26 THz 到 1.49 THz 的开关窗口。更进一步,我们还对硅在泵浦光下的响应特性进行了理论研究及数值仿真,发现该开关的响应时间小于 1 ps。此外,还发现开关窗口的位置和宽度可通过改变介质层的介电常数和厚度来进行调制。

4.2 超材料太赫兹开关

4.2.1 模型设计

基于硅的电导率能由泵浦光的功率密度进行调控这一光电导特性,可设计出

一种超材料太赫兹光开关。开关的单元结构图如图 4-1 所示，分别画出了结构的平面图和透视图。此单元的结构简易，由一个非对称裂环共振器，光电导硅和聚酰亚胺介质层构成。非对称裂环共振器有两个不同大小的开口：左边的小开口内被嵌入了硅，而右边的大开口则没有。值得注意的是，将会有两束光入射到开关表面。一束是垂直入射且电场平行于非对称裂环共振器开口的太赫兹脉冲。另一束为脉宽 ~ 100 fs 的斜入射近红外泵浦光（中心波长 808 nm），可光激励硅产生光生载流子。为确保硅中载流子能达到准稳态，泵浦脉冲必须要比太赫兹脉冲提前几个皮秒入射到开关表面。同时为了能使泵浦光的功率密度尽可能的均匀，泵浦激光束扩展为直径约为 8 mm 的圆斑，比太赫兹聚焦圆斑（直径约为 3 mm）大。金在太赫兹频域的复介电常数可通过 Drude 模型模拟计算，介电常数可以写为

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\Gamma)} \quad (4-1)$$

这里 ω_p 是等离子频率， Γ 是阻尼频率。 ε_1 和 ε_2 分别是介电常数的实部和虚部。 Γ 可以通过下式计算：

$$\Gamma = \frac{\omega\varepsilon_2}{1 - \varepsilon_1} \quad (4-2)$$

查找资料可得^[59]，当入射光的波长为 $318 \mu\text{m}$ （对于频率为 0.94 THz）时， ε_1 和 ε_2 的值分别为 -8.62×10^4 和 6.23×10^5 。计算后可知，在太赫兹频域，金的阻尼常数约为 7 THz 左右。因此，在模拟过程中，我们取等离子频率 $\omega_p = 1.37 \times 10^{16}$ rad/s，阻尼常数 $\gamma_c = 3.95 \times 10^{13}$ rad/s。

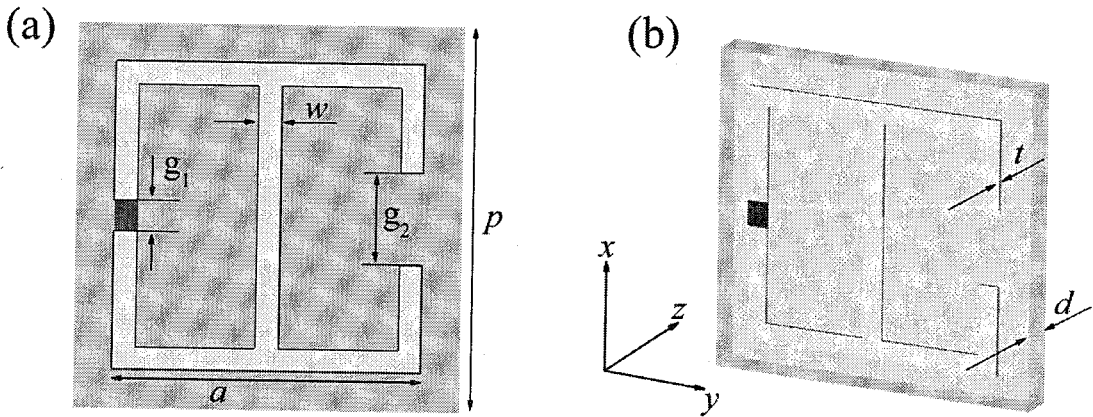


图 4-1 开关的结构示意图。(a)单元结构平面图;(b)单元结构透视图。

图 4-1 中的深灰色区域代表聚酰亚胺介质层，其介电常数模拟为是一个与频率无关的常数 $2.88 + 0.09i$ 。取硅的介电常数为 $\epsilon_{\text{Si}} = 11.7$ ，而且它还有一个与泵浦功率相关的电导率 σ_{Si} 。单元结构在 x 和 y 方向以周期为 $p = 50 \mu\text{m}$ 不断重复。正方形非对称裂环共振器的外边长为 $40 \mu\text{m}$ ，宽带为 $3 \mu\text{m}$ 。由于共振频率和开口的尺寸有关，在考虑到使开状态的透过率最大值和闭状态的透过率最小值尽可能频率相接近这一条件后，两个开口的尺寸分别被取为 $4 \mu\text{m}$ 和 $12 \mu\text{m}$ 。金层和聚酰亚胺层的厚度分别是 $0.5 \mu\text{m}$ 和 $5.3 \mu\text{m}$ 。

太赫兹波和开关的相互作用可利用 LC 电路模型^[60]去加深理解。入射的太赫兹波与非对称裂环共振器作用，在共振器的表面产生一个环形的表面电流。环形电流的流动诱导产生一个电感 L ，且电感的大小与由裂环共振器所包围的区域的面积成正比。裂环的电容 C 可以计算为 $C = \epsilon A/g$ ，这里的 A 表示裂环的有效界面面积， ϵ 是指开口内的有效介电常数， g 是开口的尺寸大小。共振频率为 $\omega_p = (LC)^{-1/2}$ ， L/C 的值决定了共振宽度。

4.2.2 仿真结果与讨论

首先对硅的电导率取不同值时开关表现出来的共振特性进行了数值仿真。在实际应用中，硅电导率的上限可以认为达到 10^5 S/m ^[61]。当入射功率为 1 W 的一束泵浦光在硅中激发光生载流子数 $n \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时，硅的电导率可以取到上述的值。利用时域有限差分方法，我们模拟了硅取不同电导率时开关在 $0 \sim 2 \text{ THz}$ 频率范围内的透过谱，结果如图 4-2 所示。位于高频的高阶共振模由于与此处讨论的内容没有关联性，这里就不具体考虑。图中灰色矩形区域代表了开关窗口，在这个窗口所对应的频域内，硅电导率为 $\sigma_{\text{Si}} = 1 \times 10^5 \text{ S/m}$ 的透过率是硅电导率为 $\sigma_{\text{Si}} = 1 \text{ S/m}$ 的透过率的 10 倍以上。开关窗口对应频率范围为 $1.26 \sim 1.49 \text{ THz}$ ，其中最大透过率和最小透过率分别为 0.89 和 0.01。当硅的电导率为 1 S/m 时，在两个吸收共振之间有一个频率是 1.35 THz 的透过率峰，其透过率为 0.89。然而当硅电导率为 $1 \times 10^5 \text{ S/m}$ 时，开关在 $0 \sim 2 \text{ THz}$ 范围内只有一个共振存在，共振频率为 1.39 THz ，透过率约为 0.01。由此可知， $\sigma_{\text{Si}} = 1 \text{ S/m}$ （无泵浦光）时开关处于开状态； $\sigma_{\text{Si}} = 1 \times 10^5 \text{ S/m}$ 时开关处于闭状态。正是基于这种光电导诱导的模式开关效应^[62]，上述结构可以作为一个超材料太赫兹开关。

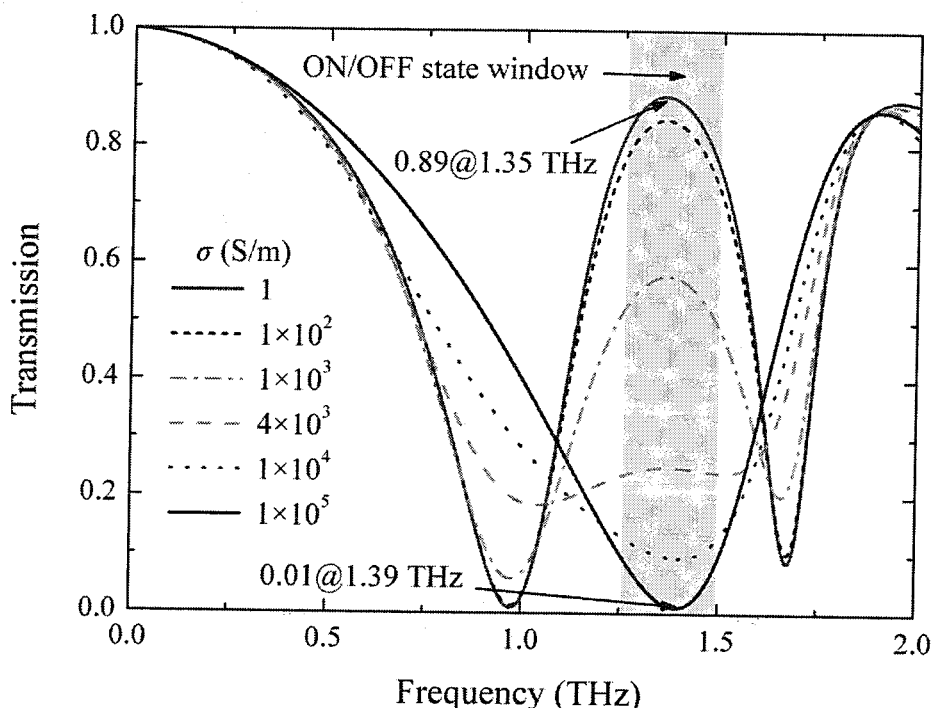


图 4-2 开关在硅的电导率取不同值时的透过率谱。矩形阴影区域表示开关窗口，覆盖 1.26 ~ 1.49 THz

因为开关的动态响应是由不断变化的硅电导率所决定，所以有必要研究泵浦光功率对电导率的影响，计算结果如图 4-3(a)所示。从图中可以看到，硅的电导率几乎与入射泵浦光功率成正比。在我们的假设中，功率为 1 mW 的泵浦光对应的能量密度为 $2 \mu\text{J}/\text{cm}^2$ ，入射到硅表面最终将产生光生载流子浓度 $n \sim 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 。然而在实际过程中，当入射泵浦功率足够大时，由于受其他一些物理过程的影响，硅的电导率将不会与泵浦功率呈线性关系。如图 4-4 所示，与文献中的实验数据^{[61], [63]}相比较，在泵浦功率 $< 500 \text{ mW}$ 时仿真数据和实验数据符合的很好，然而当泵浦功率继续增大，仿真数据和实验数据就存在了偏差。偏差的来源一方面是由于载流子浓度随着泵浦功率的变大而增加，造成了载流子-载流子之间的散射的增强，影响了载流子的迁移速率，最终使电导率达到饱和状态。另一方面，泵浦功率的增加还使多光子过程的概率增强。此时入射多个光子才会产生一个载流子，量子效率的数值从 1 慢慢变为 0.5。尽管如此，如果考虑到实际应用，硅的最大电导率为 1000 S/cm 这一假设仍然是合理可行的，这可以由实验数据确定^[58]。通过数值求解载流子速率方程，可以对硅中载流子的产生过程进行具体分析：

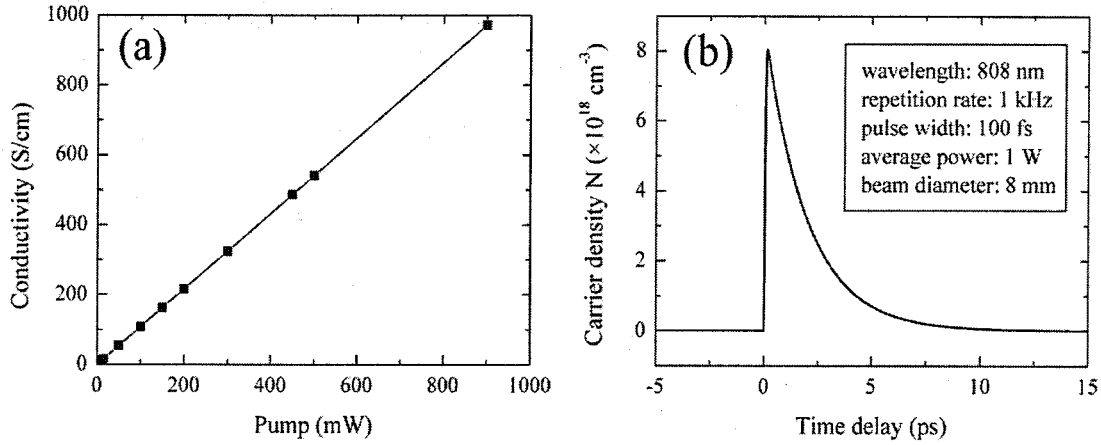


图 4-3 (a)泵浦光功率与硅的电导率的关系; (b)载流子密度与泵浦脉冲时延的函数关系图。插图中列出了泵浦脉冲的具体参数

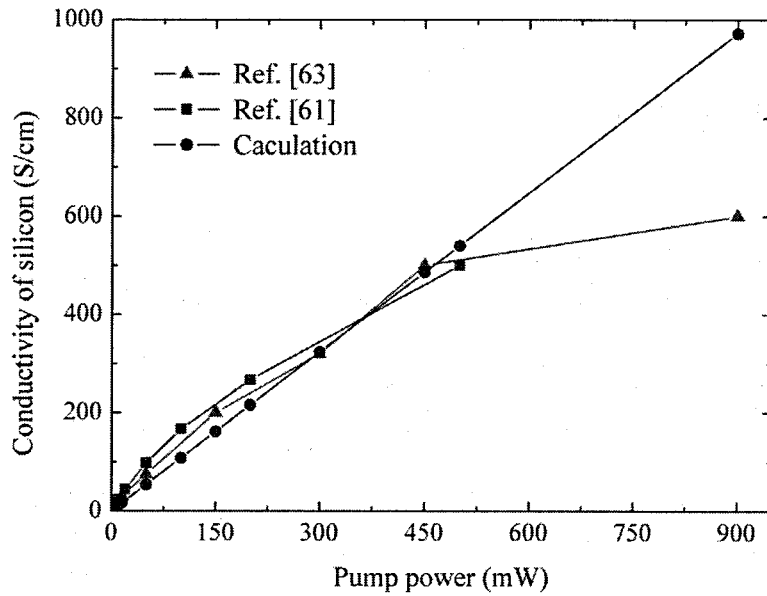


图 4-4 硅的电导率与泵浦功率的函数关系图。三角直线和正方形直线中的数据分别引用自参考文献[63]和[61]。圆点直线表示计算的结果

$$\frac{dN}{dt} = \frac{(1-R)\alpha I}{E_{\text{photon}}} + \frac{(1-R)^2 \beta I^2}{2E_{\text{photon}}} - \frac{N}{\tau_0} \quad (4-3)$$

这里的 N 是载流子密度, R 是硅表面反射率, α 和 β 分别表示吸收系数和双光子吸收系数。 E_{photon} 是单光子的能量, τ_0 是载流子的传输时间。入射泵浦脉冲具有高斯轮廓 $I = I_0 \exp[-2(t/\tau_p)^2]$, 其中 τ_p 的是脉宽。模拟过程中的具体取值如下表^[64]

Parameter	Value
τ_0	2 ps
R	0.33
α	$5.02 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$
β	2 cm/GW
E_{photon}	$2.49 \times 10^{-19} \text{ J}$
τ_p	100 fs

除此之外，最大泵浦光功率取为 1 W（对应能量密度为 2 mJ/cm^2 ）。

上述方程可以利用四阶龙格-库塔法求解。对形如 $y' = f(x, y)$ 的微分方程，可用如下公式求解

$$\begin{aligned}
 y(i+1) &= y(i) + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \\
 K_1 &= f(x_i, y_i), \\
 K_2 &= f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{hK_1}{2}), \\
 K_3 &= f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{hK_2}{2}), \\
 K_4 &= f(x_i + h, y_i + hK_3).
 \end{aligned} \tag{4-4}$$

初始条件为 $x = 0$, $y = 0$ 。步长按 $h = 10 \text{ fs}$ 计算。数值计算后的结果如图 4-3(b)所示，从图中我们可以看出，载流子密度在不到 0.2 ps 的时间内达到了 $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。之后，由于载流子之间的复合，使得载流子密度开始慢慢下降。再过了约为 10 ps 后，硅半导体中只有极少数的自由载流子存在。因此可以得出结论，在选取了上述的参数条件后，硅中的光生载流子寿命约为 10 ps，而这一数值比太赫兹脉冲的寿命（皮秒量级）大。所以可认为 10 ps 的载流子寿命用来实现超快的超材料太赫兹开关是比较理想的。

利用 FDTD 方法计算了 $\sigma_{\text{Si}} = 1 \text{ S/m}$ 和 $\sigma_{\text{Si}} = 1 \times 10^5 \text{ S/m}$ 的时域光谱图，结果如图 4-5 所示。对于具有高斯轮廓的入射太赫兹脉冲，虚线和点虚线分别表示输出的透过光和输出的反射光。当硅的电导率是稳定不变时，我们定义开关的响应时间为透过的光波达到幅值最大值所用的时间和太赫兹波达到幅值最大值所用的时间的差。从图 4-5(a)和 4-5(b)可以看出，在硅取不同电导率时开关的响应时间 τ_1 和 τ_2 都小于 1 个皮秒。

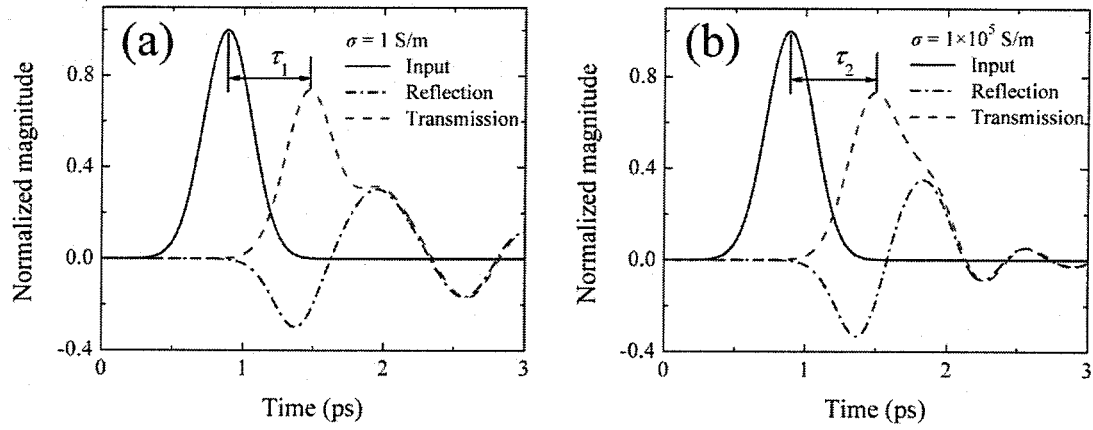


图 4-5 (a) $\sigma_{\text{Si}} = 1 \text{ S/m}$ 时和(b) $\sigma_{\text{Si}} = 1 \times 10^5 \text{ S/m}$ 时的时域光谱图。虚线和点虚线分别表示输出的透过光和输出的反射光。 τ_1 和 τ_2 指的是开关的响应时间

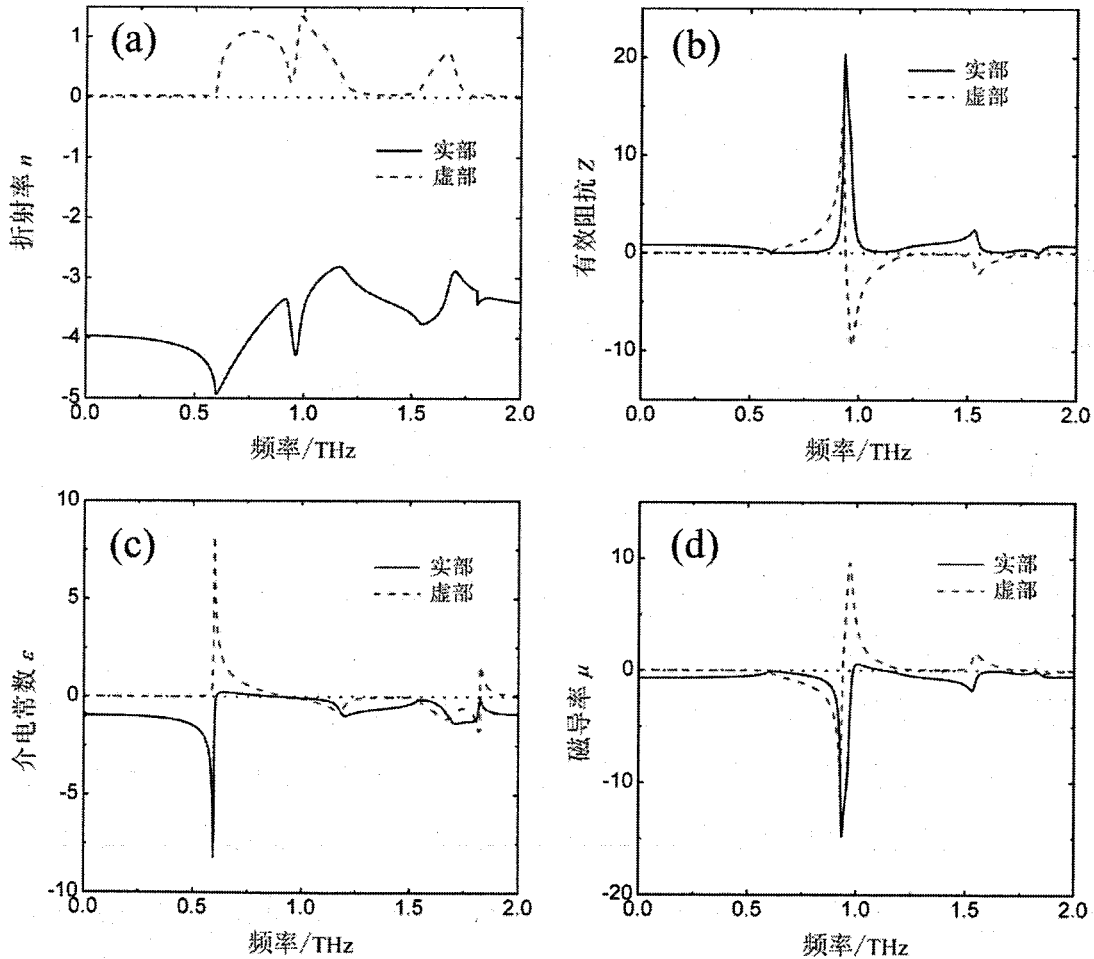


图 4-6 开关处于打开状态时的有效参数，实线表示实部，虚线表示虚部

我们还提取了太赫兹开关的有效参数，研究结果如图 4-6 所示。这里主要简

要地计算了开关处于打开状态时这一情况。从图中可以发现，折射率的虚部和阻抗 Z 的实部都大于零，满足前面的符号条件。在 1.0 THz 左右有 $\varepsilon' = \mu'$ ，对应于开关处于打开状态时的第 1 个共振峰谷。此时介电常数和磁导率的虚部虽然绝大部分大于零，但仍有位于零值以下的部分存在，这是由磁电耦合引起的。折射率虚部 n'' 在 1.0 THz 和 1.66 THz 附近的两个峰值对应于开关打开状态时的第 1 和第 2 共振峰谷。

4.2.3 开关调谐性能及共振机理的研究

图 4-7 中画出了开关处于开状态和闭状态时透过率比值的对数谱，并研究了介质的介电常数和厚度与对数谱之间的函数关系。从图中可以发现，开关窗口能通过改变介电常数和厚度实现调节。这里开关阈值被定义为 $\log_{10}(T_{on}/T_{off}) = 1$ 。当固定介质层厚度为 5.3 μm 时，对数谱的峰值频率随着介电常数的增加将会从 1.45 THz 向低频移动至 1.30 THz。如果介电常数 $\varepsilon = 2.88$ 固定不变，增大介质层的厚度，对数谱峰值频率从 1.61 THz 移至 1.39 THz。当介质层厚度大于 5 μm 时，就算继续增大介质层厚度，开关窗口几乎不发生改变。综上可知，该太赫兹开关是频率可调谐的。

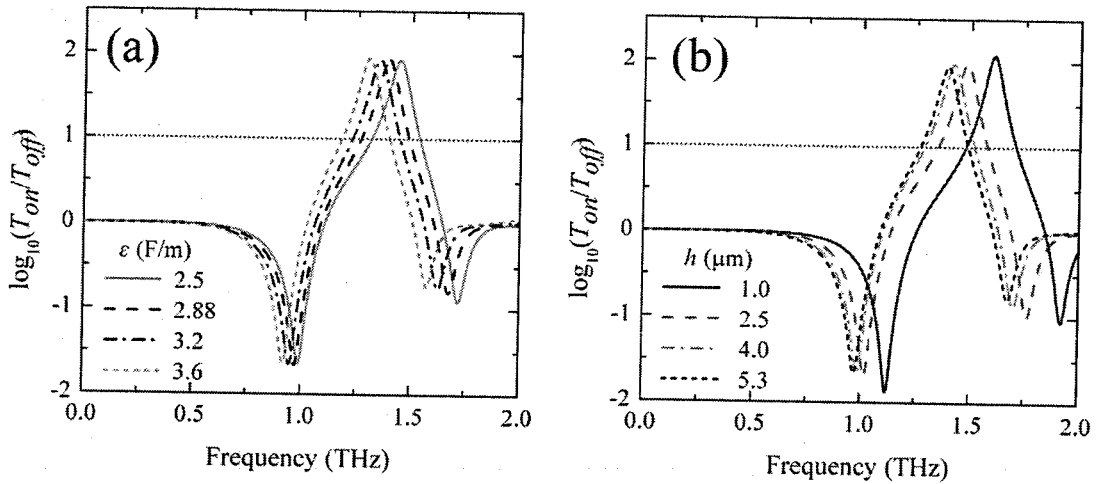


图 4-7 开关比取对数后的对数谱。改变(a)介电常数和(b)介质层的厚度可对开关窗口进行调制。水平点虚线代表开状态的阈值

图 4-8 中分别展现了无泵浦光照 ($\sigma_{si} = 1 \text{ S/m}$) 和重光掺杂 ($\sigma_{si} = 1 \times 10^5 \text{ S/m}$) 两种情况下在它们各自的共振频率处的电场和表面电流分布。很显然可以看出，

这三个共振是由不同的共振模式诱导产生的。前文已经提到，不同的泵浦光功率对应不同的硅电导率，最后产生了模式开关效应。入射太赫兹波的能量聚集在裂环共振器的开口处，形成一个闭合的环形电流，同时使得在开口附近的电场被共振增强。如图 4-8(a)-(b)所示，由于左边开口的尺寸更小，所以导致了左边开口内的电场强度远远大于右边开口。与此同时，左半边裂环共振器的电流密度相应的比右半边大得多^[59]。显然，发生在 0.98 THz 处的共振是由 LC 共振诱导产生的。相比之下，由图 4-8(d)中所呈现的表面电流分布可知，左半边裂环共振器有三段互不相连的电流，对应于三阶共振模。而右半边裂环共振器仅分布着一段闭合的表面电流，表明此时发生的共振是由 LC 共振引起。因此，发生在 1.68 THz 的共振是左半边裂环共振器的三阶共振和右半边裂环共振器的 LC 共振的共振耦合结果。当硅的电导率达到 10^5 S/m 的数量级时（金的电导率为 4.09×10^7 S/m），此时的硅可看成是金属。因此，在图 4-8(e)中所示的左边开口被短路，电场只存在于

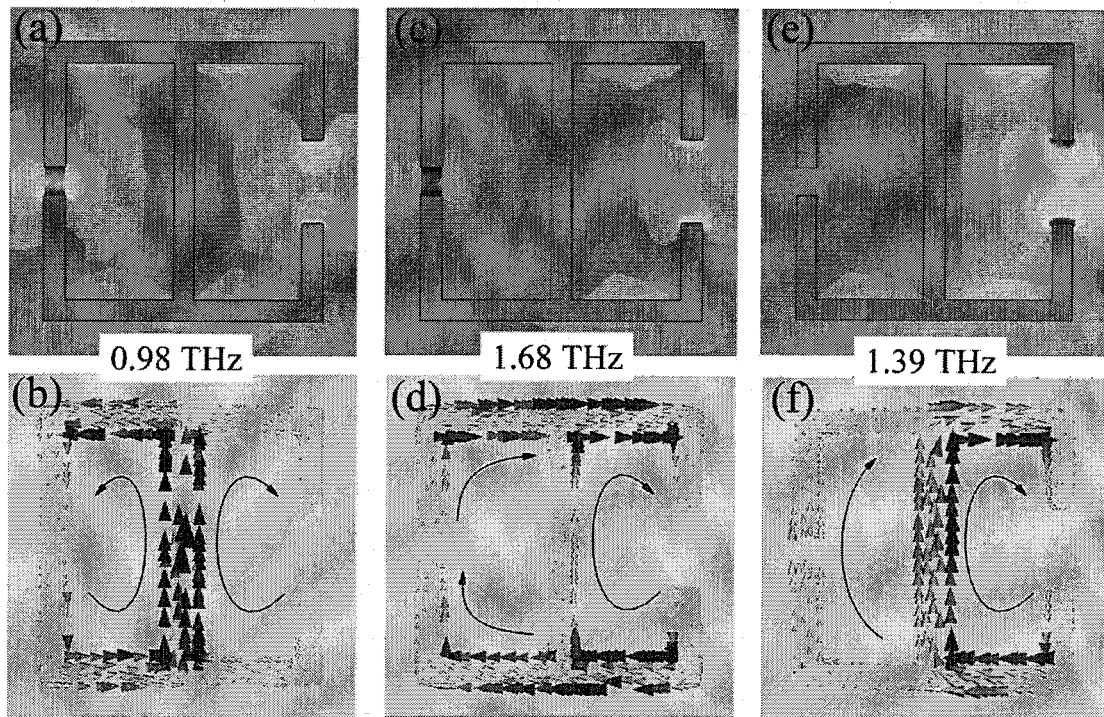


图 4-8 在不同共振频率时的电场和表面电流分布图。(a)-(b) $\sigma_{\text{Si}} = 1$ S/m 时在 0.98 THz 处的电场和表面电流；(c)-(d) $\sigma_{\text{Si}} = 1$ S/m 时在 1.68 THz 处的电场和表面电流；(e)-(f) 当 $\sigma_{\text{Si}} = 1 \times 10^5$ S/m 时在 1.39 THz 处的电场和表面电流；图中没有画出开口内的光电导硅。箭头表示电流方向

右边开口之内。这种情况下,结构的有效电容仅由右边开口决定^[65]。根据图 4-8(f)中的表面电流分布可知,左半边裂环共振器处于二阶共振模式,而右半边裂环共振器则处于 LC 共振。与上面所讨论的发生在 0.98 THz 的共振类似,在 1.39 THz 处的透过率极小值是共振耦合的结果。

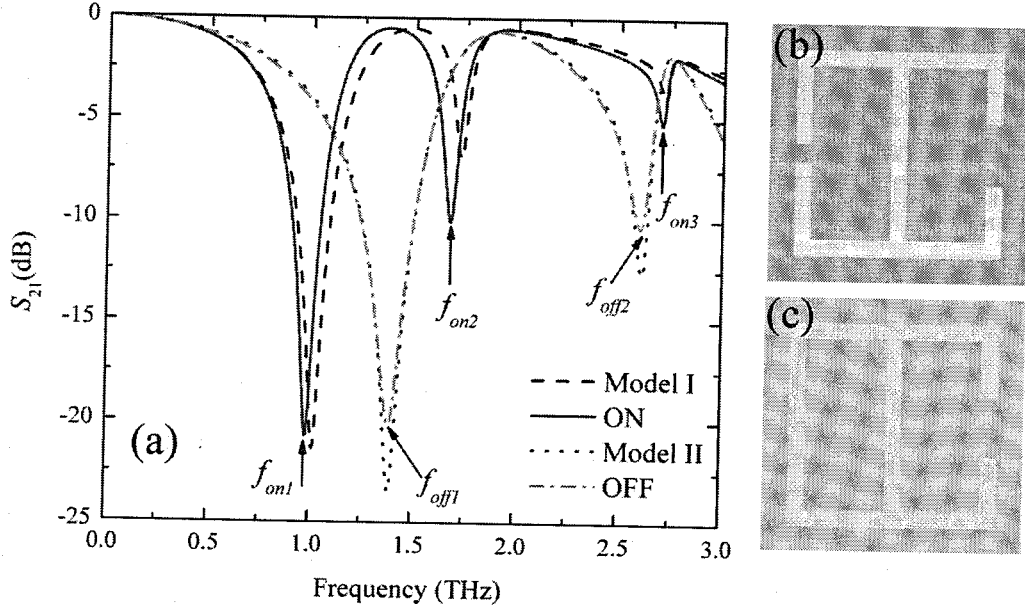


图 4-9 (a)硅的电导率为 1 S/m 和 1×10^5 S/m 时对应开关处于开状态和闭状态时的 S_{21} 参数。同时还画出了(b)模型 I 和(c)模型 II 的 S_{21} 参数与频率的关系

为了更进一步了解模式切换效应的物理机理,对开关及两个分别等效开状态和闭状态的模型进行了模拟,计算的 S 参数如图 4-9 所示。可以看出,除了共振频率和幅值上的微小差异,这两个模型能很好的描述开关在不同共振模式时透过谱的形状。而对于共振频率上的不到几十 GHz 的频移,可认为是由于开口内的介质环境的改变引起的。根据公式 $C = \epsilon A/g$ 和 $f_{res} = (LC)^{-1/2}$ 可知,当硅半导体被嵌入到模型 I 中较小的开口内时,结构的有效电容 C 将会增大,导致共振频率的蓝移^[66]。因此,分别使用模型 I 和模型 II 去分析开关的开状态与闭状态是合理可行的。模型 I 具有两个不同的开口,而模型 II 只有一个在右边的开口。这两个模型的其他结构参数和太赫兹开关的结构参数一样。很显然,模型 I 和模型 II 具有不同的有效电容和电感。在图 4-9(a)中画出了开关处于开状态时的三个共振点。发生在 0.98 THz 的共振 f_{on1} 是由 LC 共振激励产生的。相比之下,在 1.68 THz 处的共振 f_{on2} 是三阶共振和 LC 共振的共振耦合的结果,这一结论在上面已经讨论过。对于开

关处在闭合状态的情况，在 1.39 THz 处的共振 f_{off1} 是偶极子共振和 LC 共振的共振耦合。分别处于 2.60 THz 和 2.70 THz 的共振 f_{off2} 和 f_{on3} 则都是由更加高阶的共振耦合所激励产生。随着泵浦光功率的增大，左半边裂环共振器的 LC 共振和三阶共振渐渐消失。同时，硅半导体中不断增加的光生载流子浓度使得发生在左边开口的共振被“短路”^[65]。因此，如模型 II 所示，左半边裂环共振器成为一个闭合的环形共振器，与此同时，在左半边裂环共振器中出现了偶极子共振。

4.3 本章小结

在这一章里，我们设计了一种基于嵌入有光电导硅的非对称裂环共振器的超材料太赫兹光开关。该开关的结构简单且具有小于 1 ps 的响应时间。改变泵浦光功率密度后，硅半导体的电导率可以从 1 S/m 变化到 1×10^5 S/m，此时开关将会相应的由开状态切换到闭状态。仿真计算后可知该开关具有一个频率范围在 1.26 THz 到 1.49 THz 的开关窗口，开关窗口内的开光比大于 10。特别地，通过改变介质层的介电常数和厚度，可以对开关窗口的位置和宽度进行调节。通过计算共振频率处的电场和表面电流分布，分析了各共振的产生机理。利用两个等效的简易模型，解释了开关在工作过程中的模式切换效应。

第5章 结论

5.1 工作的总结

本论文的工作主要围绕超材料太赫兹吸收体及光开关而开展的。通过对器件结构的设计，仿真和理论分析，具体的研究结果如下所示：

1. 设计了一个六金层垂直级联的超宽带超材料太赫兹吸收体。计算结果表明，该吸收体对 2.6 ~ 5.7 THz 频率范围内的正入射 THz 波吸收率高于 90%。当入射角小于 50°，吸收体仍能在 2.5 THz 的频率宽度内维持吸收率高于 88%。并且，该吸收体还对入射太赫兹波的偏振不敏感。

2. 与已有的级联超材料吸收体不同，该吸收体利用了一个额外的共振峰，所以具有更大的吸收带宽。通过模拟仿真，从理论上分析了额外共振峰产生的原因。

3. 提出了一种基于非对称裂环共振器的超材料太赫兹光开关。研究了开关的表面电流与电场强度分布、各共振频率的产生机理、工作过程中的模式切换。理论研究结果表明，通过改变介质层的介电常数和厚度可以对太赫兹开关窗口的位置和宽度进行调节，在 1.26 ~ 1.49 THz 的开关窗口内，开关比高于 10，开关的响应时间小于 1ps。

5.2 展望

在本论文中，虽然我们设计出了两种新的超材料太赫兹功能器件，并进行了一系列的仿真研究和理论分析。但是受时间和实验条件的限制，本论文还有许多不足之处需要下一步的研究。而且，超材料研究领域还存在大量的问题，阻碍了超材料的发展。其中的一个问题就是微纳超材料结构的制作工艺还不够成熟，生产过程中可能会出现介质层厚度不均，金属层不平行或者相互之间有偏离等情况。对于吸收体，有一个问题就是它的共振峰的频宽太窄了。使得其应用方向受到了极大的限制。另外，我们考虑的 THz 波都是垂直入射的，实际测量中肯定存在入射角。当然，随着人们对超材料研究的不断深入，以及新的材料制作工艺的发展，这些问题将会得到解决。希望本论文所提出的两种超材料太赫兹功能器件，能给人们在今后设计研制类似器件上起到一定的参考意义。