

中文摘要

作为一类具有负磁导率(μ)、负介电常数(ϵ)、反向多普勒效应、反向透波和完美吸收等特殊性能的人工复合新材料,超材料以其优异的光学性能在近年来引起了学者们的广泛关注。本文利用新型的石墨烯二维材料代替传统的贵金属材料对超材料吸收器性能展开研究。通过电磁仿真软件 CST Microwave Studio 2019 (CST) 对吸收器中可调谐、偏振不敏感/敏感、高性能吸收以及宽角度入射进行分析与研究,同时利用阻抗匹配理论以及多重反射干涉理论进行对比验证,并进一步对太赫兹吸收器的应用价值进行探讨。本文主要研究内容具体如下:

(1) 首先,本文设计了一种基于石墨烯的单带超材料完美吸收器,结构采用的是经典的“三明治”结构,底部是足够厚的金层,中间介质层选取的是介电常数为 2.35 的 TOPAS 层,顶层表面是覆着的石墨烯图案层。采用 CST 软件对该结构进行仿真发现,在 TE 或者 TM 偏振电磁波入射时,在频率为 5.485THz 处出现吸收率接近 100%的吸收峰,此时达到完美吸收,两种入射状态下的吸收峰重合,并利用通过使用多重反射干涉理论 (MRIT) 和阻抗匹配理论 (IMT) 验证了仿真结果,结果表明理论结果与仿真结果吻合良好。

(2) 其次,本文提出了另一种新型的可调谐超材料吸收器,它由非旋转对称的石墨烯图案层、TOPAS 介质层和厚实的金属表面组成,形成一个简单而又经典的三明治结构,可以有效地提高吸收效率。研究表明,所提出的吸收器的吸收特性是偏振敏感和动态可调的,与广泛研究的偏振不敏感的超材料吸收器相比,对于 TE 偏振入射电磁波 (EMW),可以在 4.268THz 和 6.032THz 的频率上产生双波段吸收,吸收系数分别高达 99.99%和 99.79%。讨论了石墨烯的几何参数以及化学势和弛豫时间对吸收特性的影响。通过使用多重反射干涉理论 (MRIT) 和阻抗匹配理论 (IMT) 验证了仿真结果,结果表明理论结果与仿真结果吻合良好。该吸收器可以在较大的入射角范围内对 TE 光实现良好的吸收。此外,通过选择两种不同的石墨烯化学势,可以实现良好的太赫兹开关性能。此外,还详细研究了在折射传感领域的应用,具备较高的灵敏度和品质因数 (FOM)。

关键词: 超材料; 吸收器; 太赫兹; 石墨烯; 可调谐

1 绪论

1.1 太赫兹技术概述

太赫兹 (Terahertz, THz) 波段特指频率范围为 0.1-10THz 的电磁波波段, 对应的波长范围是 $30\mu\text{m}$ - $3000\mu\text{m}$ ^[1]。如图 1.1 所示, 太赫兹波段处于高频红外和低频毫米波之间, 对该波段内的研究不能完全采用微波和光波理论, 所以此波段也被称为“太赫兹间隙”^[2]。

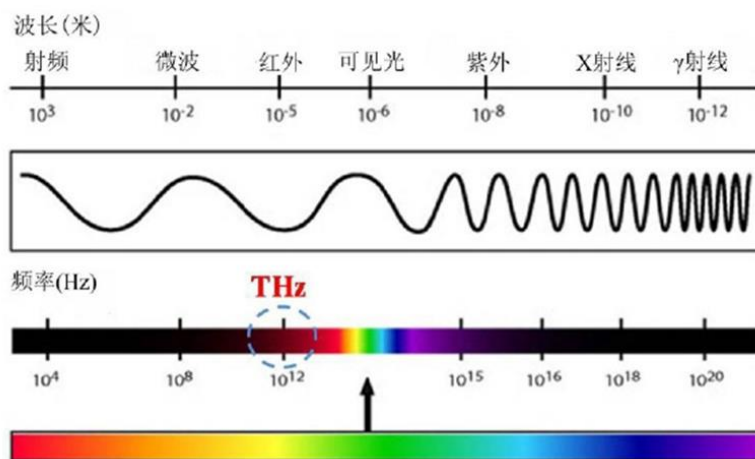


图 1.1 太赫兹波段频谱图^[2]。

Fig. 1.1 Terahertz band spectrogram^[2].

超材料吸收器是一种新型的电磁波吸收装置, 在太赫兹波段尤为重要。与光波比较, 太赫兹电磁波有着许多独到的优势, 其中最显著的是:

(1) 低能量特性^[3-4]: 太赫兹光子的能量非常低, 1THz 所携带的光子能量仅为 4.1meV 。电离时不会破坏被检测的物质的结构, 所以用太赫兹波照射被测生物时不会造成伤害。因此, 太赫兹波适用于无损检测、医学成像和生物检测等领域。

(2) 穿透特性^[5]: 太赫兹波对大部分介质 (塑料、陶瓷、纸盒和衣物等材料) 具有较强的透射性, 所以该特性可以应用于物质检测的领域。

(3) 相干特性^[6]: 太赫兹波可以直接测量电场的相位和振幅, 从而可以很方便的提取出所测样品的反射系数、吸收系数和折射率等参数。

(4) 高分辨率特性: 结合太赫兹成像技术^[7-8], 太赫兹波可以实现微波波段难以达到的高分辨率图像特性。

1.2 石墨烯简介

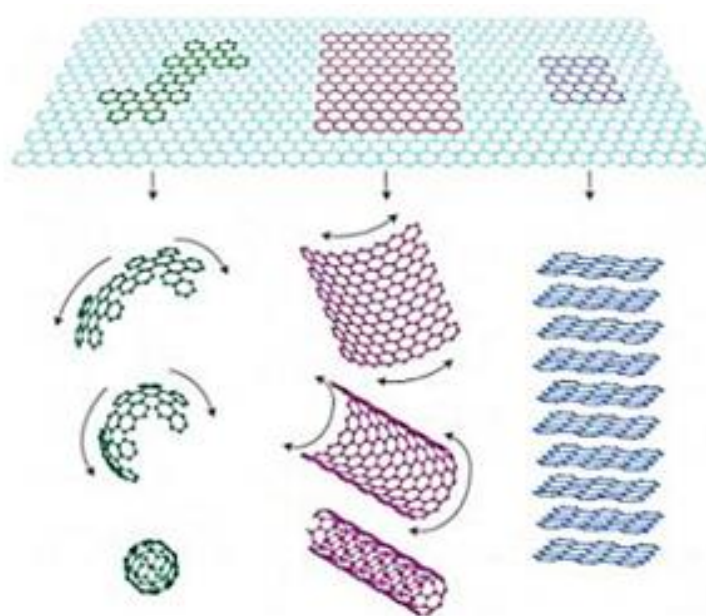


图 1.2 石墨烯基本结构单元^[9-10]。

Fig. 1.2 Graphene basic structural unit^[9-10].

石墨烯是由单层碳原子排列为六边形组成的蜂窝状结构的二维金属材料^[9-10]，如图 1.2 所示。石墨烯具有狄拉克线性色散关系，可以通过外加栅极电压对电荷密度进行大范围的调节，而且在室温的条件下，载流子平均自由程可以高达 1cm。石墨烯的载流子高迁移率和可调性等特性弥补了金属材料的不足，使得石墨烯成为了一种新的低耗散、可调节的等离激元材料。石墨烯等离激元与入射电磁波有很强的耦合作用，对周围环境极其敏感，这一特性也使得石墨烯在生物传感领域有很大的发展前景。

石墨烯的制备方法有两种，分别是物理方法和化学方法。其中，物理方法是以石墨为原材料，通过化学气相沉积法（Chemical vapor deposition, CVD）、机械剥离法来制备单层石墨烯。这种方法虽然操作简单、获取的石墨烯杂质少、原料廉价，但是产量低、耗时长，所以在大规模生产石墨烯的过程中，一般采用的是化学方法，其中最主要的制备方法是氧化还原法，其方法操作步骤简便。下面简单介绍这几种方法^[11-13]。

(1) 机械剥离法^[11]。机械剥离法是以石墨为原料，在力（机械力、化学力、流体或者气体产生的力）的作用下，对石墨进行逐层剥离。这种方法是获得单层石墨烯最简单、便捷的方法，大大降低了制备成本，但获得的石墨烯可能会具有裂纹、损伤、

边缘不规则以及产量低等缺点,所以,这种方法主要用于获得小尺寸的单层石墨烯,不利于规模化的生产制备。

(2) 氧化还原法^[12]。氧化还原法也是以石墨为原料,首先将石墨进行氧化处理,改变石墨层片的自由电子对,从而可以进一步增强石墨的亲水性,便于石墨在水中分散。其次就是将氧化后的石墨放入水中以形成均匀而又稳定的氧化石墨烯胶体。最后,由于氧化石墨烯是绝缘体,需要进一步还原(化学剂还原、固相还原、催化还原)成石墨烯,进而得到缺陷少而且性能较好的石墨烯。此方法成本低、周期短、产量大,常被应用于石墨烯复合材料的制备中。

(3) 化学气相沉积法^[13]。该方法一般是以碳氢化合物作为碳源,在铜、镍等金属的基体上通过将碳源高温分解形成碳原子,碳原子会沉积在金属表面,最后在基体的表面上连接形成一层薄膜,进而形成石墨烯。化学气相沉积法是制备石墨烯最常见的方法。

1.3 超材料吸收器概述

超材料(MM)是一种由周期性排列的人工单元结构阵列形成的复合材料,通过合理地设计超材料结构单元,可以实现负磁导率、负介电常数、反向多普勒效应、反向波透射和完美吸收等独特性能,都能够有效地调节微波和太赫兹频段的电磁波。另外,超材料还可能应用到通讯天线、雷达、隐形科技、吸波材料等领域。因此,它们已经成为国内外研究的热点之一。在大量已报道的研究成果中,用于电磁波吸收的超材料器件备受关注,根据材料、结构形式和频率特性可分为不同类型^[14-16],例如:平板层状结构和金字塔结构的窄带、多带、宽带吸收器^[17-22]等。早期研究的吸收器因其吸收频带窄、密度大以及当这类结构一旦制作完成后其性能无法改变等缺点而在实际应用上有一定程度的局限性。因此,人们开始致力于研究基于新型材料且具有动态调节特性的超材料吸收器,因此在本文的第三、四章引入基于石墨烯的超材料吸收器。

1.3.1 单频带超材料吸收器

随着超材料器件在不同领域研究的深入,研究者们开始利用超材料来改善传统器件的性能。在电磁吸收器领域,已经取得了许多优于传统吸波装置的优点,超材料吸收器不仅可以实现对入射波的强吸收,而且结构更轻、更薄^[23-25]。此外,超材料吸

吸收器的几何形状可根据具体需求进行调整^[26-28]。如图 1.3 所示, Landy 等人于 2008 年提出了首个“三明治”结构的经典超材料完美吸收器, 结构由微带线和开口谐振环组合而成, 从图中可以得到, 该吸收器实现了单峰 ($f = 11.5\text{GHz}$) 的完美吸收, 并从理论和实验上验证了其在微波波段的高吸收效应^[29], 为后续对吸收器的研究打下了良好的基础。

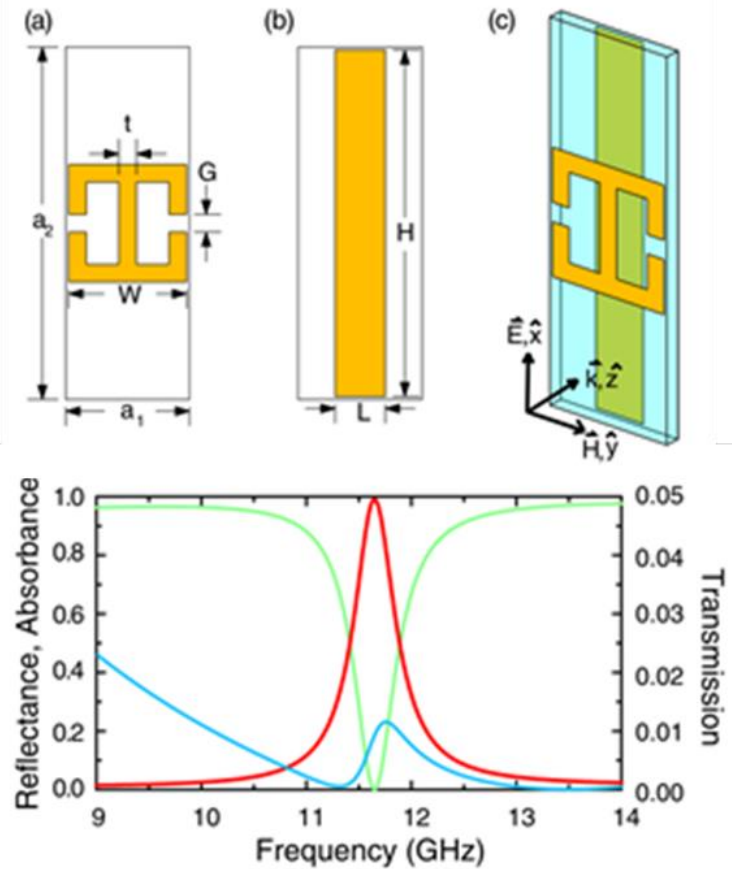


图 1.3 Landy 等人提出的完美吸收器^[29]。(a)、(b)和(c)吸收器单元结构图;
(d)吸收器的反射率、透射率和吸收率。

Fig. 1.3 The perfect absorber proposed by Landy et al . (a)、 (b) and (c)
diagram of absorber cell structure; (d) reflectance、transmittance and
absorbance of the absorber.

如图 1.4 所示, 2020 年 Hu 等人提出一种用于太赫兹区域折射率传感应用的超窄完美超材料吸收器(PMA)^[30]。所设计的 PMA 由不透明铜/硅衬底上的砷化镓(GaAs)十字形谐振器阵列组成。模拟结果表明, 在 2.44THz 下, 所提出的 PMA 可以获得近乎完美的吸收峰, 吸光率为 99.49%, 品质因数值为 637。通过电场分布、磁场分布

解释了窄吸收的物理机制。作为折射率传感器，其灵敏度和性能系数分别高达 $1.94\text{THz}/\text{RIU}$ （折射率单位）和 506RIU^{-1} 。这些结果使所提出的 PMA 在检测、成像和传感应用方面具有很大的潜力。

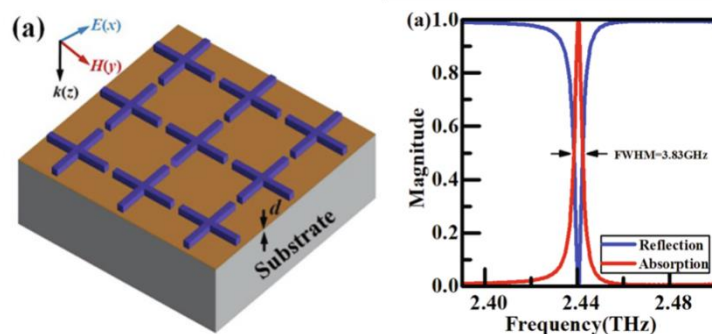


图 1.4 Hu 等人提出的完美吸收器^[30]。

Fig. 1.4 The perfect absorber proposed by Hu et al^[30].

如图 1.5 所示，2020 年 Amiri M 等人^[31]引入了一种由新月形谐振结构构成的超材料吸收器，当入射角 $\theta=80^\circ$ 时，对 TE 和 TM 偏振光的吸收率分别达到 70%和 93%。

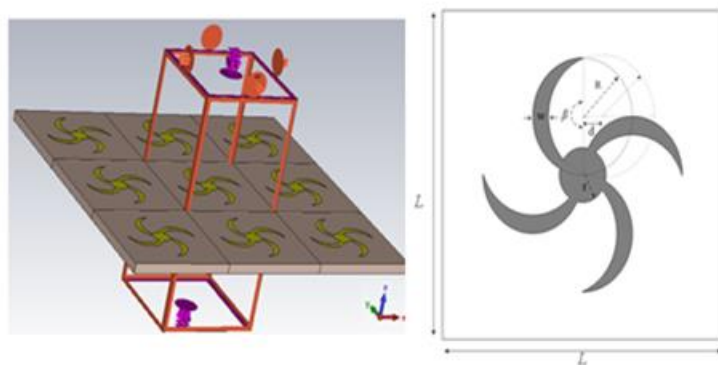


图 1.5 文献^[31]设计和提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.5 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber designed and proposed in the literature^[31].

如图 1.6 所示，2021 年 Yu 等人研究了一种全金属材料制成的 THz 超材料吸收器^[23]。该吸收器在 1.563THz 处表现出对电磁波的单波段吸收，吸波率为 99.95%，作者仔细分析了吸收器结构参数对吸收的影响，还研究了该吸收器在折射率传感领域的应用。数值计算表明，当折射率 (n) 从 1 变化到 1.05 时，传感器灵敏度为 $74.18\mu\text{m}/\text{RIU}$ ，传感器品质因数 (Q 因子) 为 36.35。

如图 1.7 所示，在 2021 年 Wang 等人利用金属纳米柱阵列和石墨烯构造出一种

吸收效率可调的超材料完美吸收器 (MPA) [33], 并采用时域有限差分法进行了优化与分析。仿真结果表明, 通过调谐石墨烯的化学势可实现吸收效率调谐范围为 0.5 的 MPA, 且 MPA 的最高吸收效率可达到 97%。

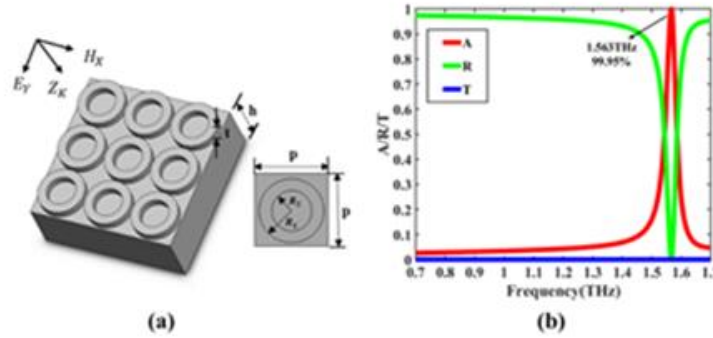


图 1.6 Yu 等人提出的完美吸收器[23]。(a)为吸收器单元结构图；(b)吸收器的反射率、透射率和吸收率。

Fig. 1.6 The perfect absorber proposed by Yu et al[23]. (a) shows the structure of the absorber unit; (b) reflectance、 transmittance and absorption of the absorber.

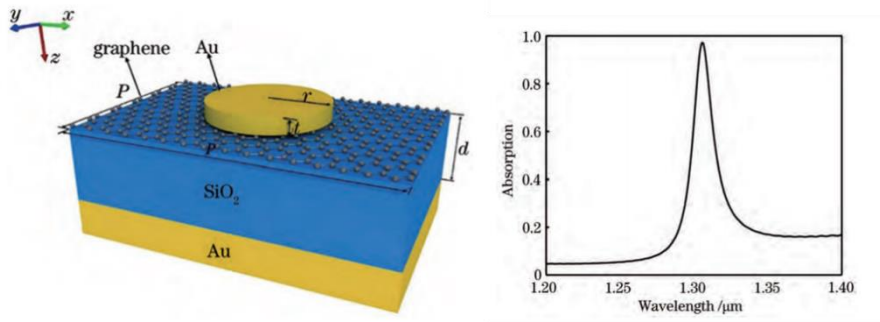


图 1.7 Wang 等人提出的基于石墨烯的可调超材料完美吸收器[33]。

Fig. 1.7 A tunable metamaterial perfect absorber based on graphene proposed by Wang et al[33].

1.3.2 多频带和宽频带超材料吸收器

此后, 人们提出了许多超材料吸收器, 但其中很多都集中在单频吸收上, 对具有双频和多频吸收特性的超材料吸收器的研究较少[32-35]。随着对超材料吸收器的不断深入研究, 人们通过各种不同的方法设计出一个又一个多频段和宽频带超材料吸收器。

传统的超材料吸收器存在结构成型后吸收频率固定等缺点。为了实现动态可调

谐的吸收特性，人们采用了许多不同的方法，例如，一些新型材料如石墨烯、液晶^[37]、二氧化钒(VO_2)^[38]等已被应用于超材料吸收器的设计中。在参考文献^[36]中，设计了一种由电控掺杂半导体阵列组成的多色超像素太赫兹超材料吸收器。在参考文献^[37]中，作者实验证明了一种液晶超材料吸收器作为太赫兹波长的空间光调制器。然而，根据最新研究，大多数液晶材质在太赫兹波段的双折射系数较低，这使得它们在实际应用中很难达到预期的效果。同时，控制温度以实现 VO_2 从绝缘体向金属的转变的过程中，必然会影响整个结构^[38]的热稳定性。而石墨烯具有通过施加或改变外部偏置电压即可控制表面电导率的特点，是构建动态可调超材料吸收器的首选材料。因此，设计和研究谐振模式简单、易于制造的石墨烯基超材料吸收器很有必要。此外，前人对石墨烯超材料吸收器的研究很少关注其偏振敏感特性，而这对于偏振成像、选择性光谱检测等应用至关重要。

如图 1.8 所示，在文献^[22]中提供了一项新型的双频段可调谐超材料吸收器，它采用石墨烯材料，在 6.62THz 和 9.36THz 的入射光垂直照射下，其吸收率可达 99.9% 和 98.9%，大大提高了吸收效率。通过改变石墨烯的化学势，吸收器的谐振频率和吸收强度都得到了改善，而且吸收器的共振频率和吸收强度还可以被灵活控制。通过调节石墨烯的弛豫时间，能够独立调节吸收器的吸收强度，从而实现最佳性能。

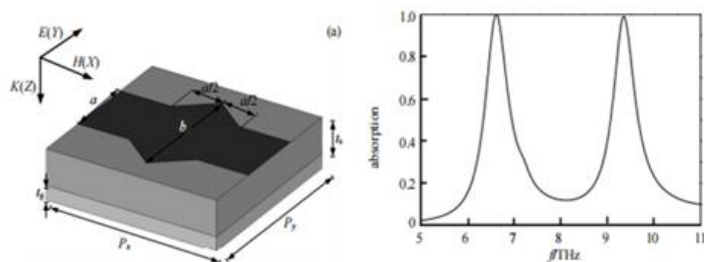


图 1.8 Song 等人提出的完美吸收器^[22]。(a)基于石墨烯的双波段可调谐超材料吸收器单元结构图；(b)吸收器的吸收谱。

Fig. 1.8 The perfect absorber proposed by Song et al^[22]. (a) Structure diagram of the graphene-based dual-band tunable metamaterial absorber unit; (b) absorption spectrum of the absorber.

如图 1.9 所示，2021 年 Pouria Zamzam^[39]等人提出了一种新型的太赫兹双波段超材料吸收器，数值模拟结果表明，在 6.86THz 时，吸收器的吸收率为 99.99%，在 4.08THz 时，吸收器的吸收率为 88.03%。这种近乎完美的可调谐太赫兹吸收特性在滤波、检测和成像方面具有很大的潜力。然而，虽然实现了双波段吸收，但是其中一

个吸收峰的吸收率却低于 90%。

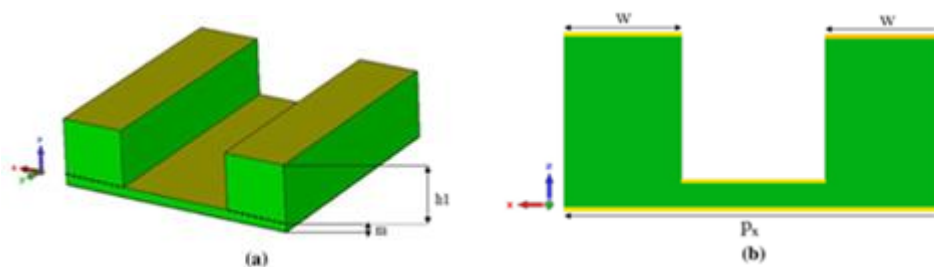


图 1.9 文献^[39]提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.9 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber proposed in the literature^[39].

如图 1.10 所示，2019 年 Zao Yi 等人^[40]提出了一种新型基于石墨烯的可调谐三带完美超材料吸收器，如图 1.10 所示。石墨烯椭圆环形的电导率参数可通过外加偏置电压轻松调节，从而实现了吸收特性动态控制。此外，由于吸收器结构的高度对称性，所设计的吸收器对入射 THz 波的极化方向是不敏感的。

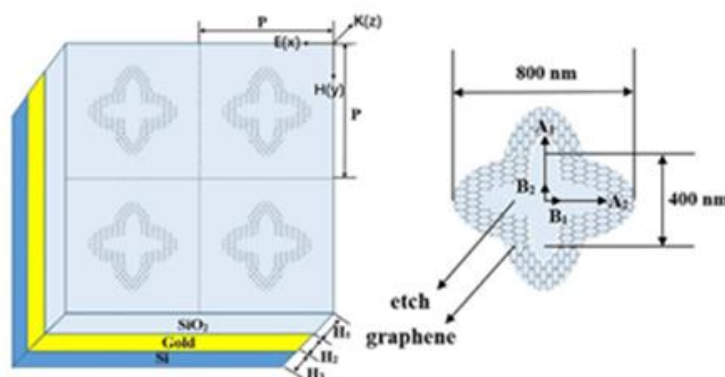


图 1.10 文献^[40]提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.10 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber proposed in the literature^[40].

如图 1.11 所示，2020 年 Wang 等人^[41]中报道了一种基于铜-介质-铜的三层结构的三带完美超材料吸收器。理论研究表明，三个吸收峰(343.82THz、297.42THz 和 263.47THz)的吸收率分别为 87.1%、99.9%和 99.6%，且它们对偏振角和入射角的变化不敏感。如图 1.12 所示在文献^[25]中，Lai 等人提出了一种具有近乎完美吸收的 THz 超材料吸收器，获得了四个窄带宽、大吸收系数的 THz 吸收带。文章讨论了所提结构的几何尺寸对四波段光吸收性能的影响。此外，考虑到潜在的传感应用，还探讨了所提出的吸收器件的传感性能。如图 1.13 所示，2021 年 Pouria Zamzam^[42]等人又提出一种基于双层石墨烯的四波段极化不敏感超材料完美吸收器。

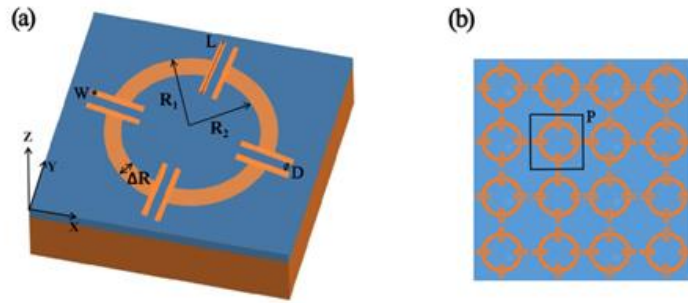


图 1.11 文献^[41]设计和提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.11 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber proposed in the literature^[41].

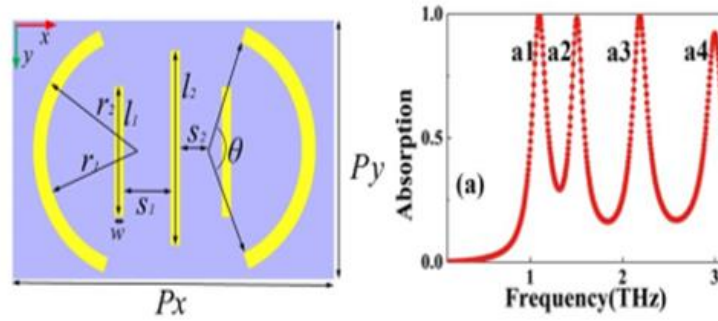


图 1.12 Lai 等人提出的四波段可调谐超材料吸收器单元结构图以及吸收器的吸收谱。

Fig. 1.12 The structure diagram of the four-band tunable metamaterial absorber cell and the absorption spectrum of the absorber proposed by Lai et al.

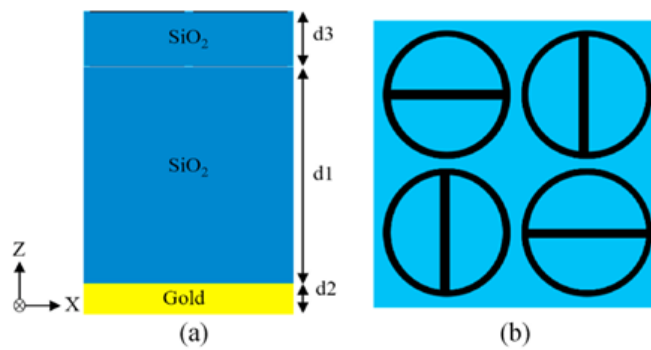


图 1.13 文献^[42]设计和提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.13 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber proposed in the literature^[42].

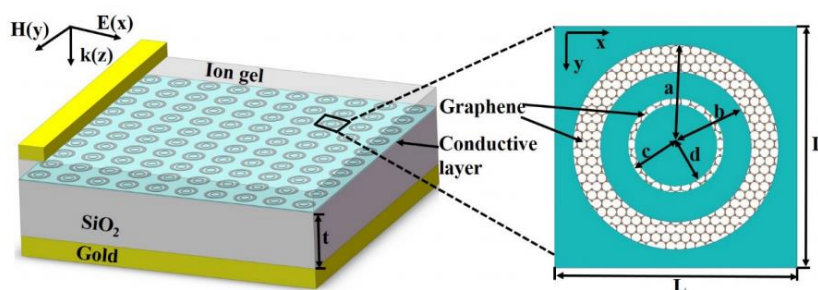


图 1.14 文献^[43]设计和提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.14 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber proposed in the literature^[43].

如图 1.14 所示，2018 年 Mou 等人提出了一种基于石墨烯超材料的可调谐宽带太赫兹(THz)吸收器，在 1.18-1.64THz 范围内具有 90%以上的高吸收率。两个石墨烯环之间的等离子体杂化显著增大了吸收带宽，可以通过控制石墨烯的相关参数进一步调整。如图 1.15 所示，2022 年 Yang 等人提出了一种基于相变材料二氧化钒(VO_2)的可调谐宽带太赫兹超材料吸波器^[44]。仿真结果表明，在正常入射下，吸收带宽达到 3.78THz，吸收率超过 90%。通过改变 VO_2 的导电性，该结构的吸收率可从 2.7% 动态调节到 98.9%，从而使结构从一个完美的反射态转变为吸收态。

如图 1.16 所示，2022 年 Norouzi-Razani 等人^[45]研究了一种基于石墨烯圆盘和方环的宽带超材料完美吸收器，该吸收器在 2.173THz (1.482-3.655THz) 的带宽范围内，可以实现吸收率大于 90%的吸收特性，该结构对入射电磁波的极化方向不敏感，并且在入射角为 0-30° 范围内仍具有良好的吸收性能。

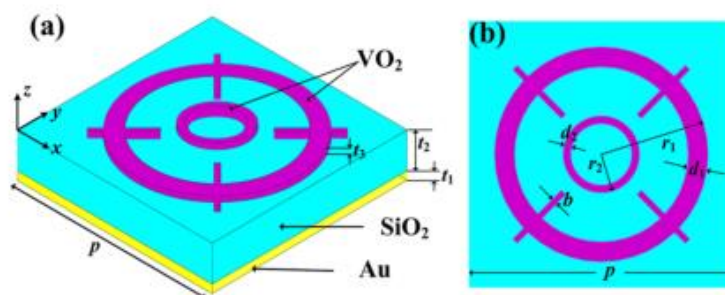


图 1.15 文献^[44]设计和提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.15 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber proposed in the literature^[44].

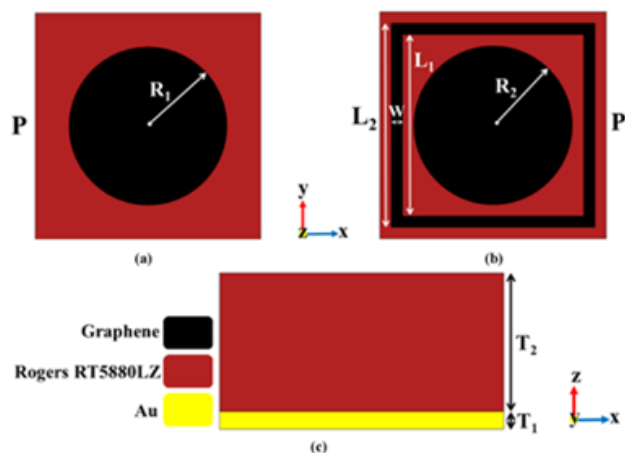


图 1.16 文献^[45]设计和提出的超材料吸收器结构示意图。

Fig. 1.16 Schematic diagram of the structure of the metamaterial absorber proposed in the literature^[45].

1.4 本文的主要研究内容

本文主要设计了两种基于石墨烯的太赫兹超材料吸收器，使用 CST 软件研究了其吸收特性，并对参数加以了优化。结合电磁场分布特性，以及几何参数和电磁参数对吸收性能的影响，从多个角度详尽地讨论了吸收器的吸收原理、对电磁波入射角度和极化角度的依赖性。通过多重反射干涉、阻抗匹配和传输线理论对仿真结果进行了对比验证。同时，也就所设计超材料吸收器的潜在应用进行了研究。具体如下：

第一章是全文绪论，对太赫兹技术、石墨烯材料和超材料吸收器的概念和国内外研究动态进行了简要的介绍。

第二章是简单介绍石墨烯的电导率特性、阻抗匹配理论、传输线理论、多重反射干涉理论等数值仿真和理论计算方法。

第三章是本文的主要研究内容之一，提出了一种新型的基于石墨烯的窄带 THz 超材料吸收器，5.485THz 的频率处实现完美吸收，而且该吸收器还具备极化不敏感和宽角度入射等特点。通过多重反射干涉理论和阻抗匹配理论对仿真结果进行了验证。最后，我们还研究了该吸收器件的开关特性，结果表明该吸收器可应用于 THz 开关与 THz 调制器等领域。

第四章是本文的第二个主要研究内容，在前面研究内容的基础上，设计了另一种基于石墨烯的极化敏感的 THz 超材料吸收器。研究表明，在 TE 偏振下 THz 波段的电磁波入射时，该吸收器可以产生两个近乎完美的吸收带，吸收峰分别位于 4.268THz 和 6.032THz。利用阻抗匹配理论、多重反射干涉理论、以及电场、表面电

流和功率流的分布解释了吸收的物理机理。最后，探讨了在折射率传感领域的应用。

第五章是本文的总结和展望部分。对本文的研究内容进行了总结和概括，并对今后的研究内容和工作进行了前景展望。

2 解析理论与数值方法

2.1 石墨烯的电导率模型

石墨烯的电导率可以用 Kubo 公式^[46-47]来准确表示, 其中包括带内电导率 σ_{intra} 和带间电导率 σ_{inter} ^[48-51]:

$$\sigma_g(\omega) = \sigma_{intra}(\omega) + \sigma_{inter}(\omega) \quad (2.1)$$

$$\sigma_{intra}(\omega, \tau, \mu_c) \approx \frac{ie^2Tk_B}{\pi\hbar^2(\omega + i\tau^{-1})} \left[\frac{\mu_c}{Tk_B} + 2 \ln \left(\exp \left(-\frac{\mu_c}{Tk_B} \right) + 1 \right) \right] \quad (2.2)$$

$$\sigma_{inter}(\omega, \tau, \mu_c) = \frac{ie^2}{4\pi\hbar} \ln \left[\frac{2|\mu_c| - (\omega + i/\tau)\hbar}{2|\mu_c| + (\omega + i/\tau)\hbar} \right] \quad (2.3)$$

其中 $i = \sqrt{-1}$, ω 代表入射电磁波的角频率, k_B 是玻尔兹曼常数, e 是电子电荷, μ_c 是石墨烯的化学势, τ 是弛豫时间, 而 T 是环境的绝对温度, \hbar 是约化的普朗克常数。此外, 在太赫兹波段内, 满足如下关系:

$$\hbar\omega \ll 2\mu_c \quad (2.4)$$

由半导体物理可以得知石墨烯的化学势 μ_c 与载流子浓度 n 满足关系:

$$n = \frac{1}{\pi\hbar v_F^2} \int_0^\infty [f_d(x) - f_d(x + 2\mu_c)] x dx \quad (2.5)$$

其中, $f_d(x)$ 是费米-狄拉克分布函数, 可以表示为:

$$f_d(x) = (1 + e^{(x-\mu_c)/(k_B T)})^{-1} \quad (2.6)$$

从上式可以看出改变石墨烯表面载流子浓度 n 可以影响石墨烯的化学势 μ_c 。在实际应用中, 通常通过改变外部偏置电压的方式调节石墨烯表面载流子浓度, 从而改变石墨烯的化学势。外加偏置电压 V_g 与石墨烯的化学势 μ_c 相互之间的关系可以表示为^[52]:

$$\mu_c \approx \hbar V_F \sqrt{\frac{\pi\epsilon_r\epsilon_0 V_g}{et_d}} \quad (2.7)$$

其中 ϵ_r 代表介质的相对介电常数, ϵ_0 是真空中介电常数, t_d 是介质层的厚度。

2.2 超材料吸收器的数值计算方法

随着技术的进步, 电磁场的计算方法也发生了巨大的变化, 目前最常用的计算方

法有时域有限积分法 (Finite Integration Time Domain, FITD)、时域有限差分法 (Finite Difference Time Domain, FDTD)、传输线法 (Transmission Line Matrix Method, TLM)、有限元法 (Finite Element Method, FEM)、矩量法 (Method of Moments, MoM)、线方法 (Method of Line, ML) 和解析法 (Analytical Method, AM) 等方法, 其中, 有限元法 (FEM) 的基本思想是分片插值得离散形式和能量最低原理^[53]。它可以有效地解决复杂的电磁场问题, 并且具有良好的准确性和可靠性。需要注意的是, FEM 直接求解的是研究对象所对应的场分量, 而不是其所对应的微分方程。FEM 的求解过程首先是将研究对象分解成有限个单元, 其次利用插值函数表示求解单元对应的场分量, 接下来, 再将各个结构单元对应的插值函数都取能量泛函的极值, 最后, 利用直接求解法或者叠代法便可对求解方程组, 进而便能得到每个节点处的未知场量。本文数值计算主要借助于基于有限积分法的三维电磁仿真软件 CST Microwave Studio 2019 (CST) 进行。

下面简单介绍使用 CST 软件进行数值仿真的几个主要步骤, 图 2.1 分别是 CST 微波工作室创建模板的界面、启动后的工作界面和仿真计算结束后的后处理界面。具体如下^[54]:

(1) 选择计算模板。选择 Microwaves & RF / Optical 中 Periodic Structures 模板, 再选择 FSS, Metamaterial-Unit Cell 中 Phase Reflection Diagram, 最后选择 Frequency Domain 求解器, 设置合适的研究频段或波长范围。

(2) 设置材料属性。材料库中已有的材料, 可以直接使用。对于本文所使用的石墨烯材料, 需要通过 CST 自带的宏计算进行设置。

(3) 建立模型结构。

(4) 设置背景属性和边界条件。设置工作频率范围、背景环境、端口属性以及边界条件。

(5) 数据处理与分析。选择频域求解器、自适应网格进行初步求解。利用软件提供的参数扫描功能和内置的参数优化功能对相关参数进行优化, 使得效果达到最优的吸收性能。

(6) 后处理。计算所需要的物理参数和性能参数, 导出数据利用 Origin 等软件绘制出物理参数分布图。

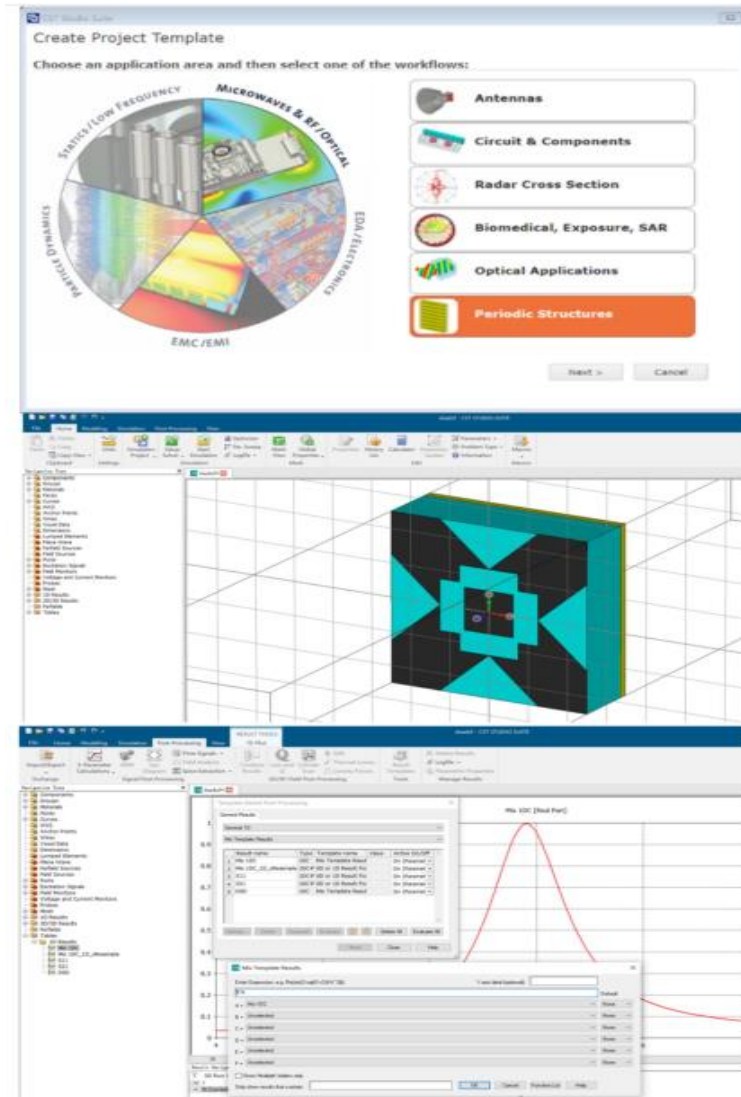


图 2.1 CST 创建模板界面、启动后的工作界面和后处理界面。

Fig. 2.1 CST creation template screen、 working screen after startup and post-processing screen.

2.3 超材料吸收器的相关理论

2.3.1 阻抗匹配理论

由于所设计超材料吸收器底部金属板的厚度远远大于所考虑的频率范围内电磁波的趋肤深度，所以传输为零，即 $T(\omega) = |S_{21}|^2 = 0$ 。因此，吸收可以写成： $A(\omega) = 1 - R(\omega) - T(\omega) = 1 - R(\omega)$ ，其中， $R(\omega) = |S_{11}|^2$ ，基于阻抗匹配理论^[55]，反射率也可以表示为：

$$R(\omega) = \left| \frac{Z_1 - Z_0}{Z_1 + Z_0} \right|^2 \quad (2.8)$$

在上述表达中, $Z_0 = 377\Omega$ 代表自由空间的阻抗, Z_1 代表超材料吸收器的等效阻抗^[56-57]。阻抗匹配理论的简单推导过程如下:

当电磁波入射到厚度为 t 的均匀平板上时, 传输矩阵可以表示为:

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(nkt) & -\frac{z}{k} \sin(nkt) \\ \frac{z}{k} \sin(nkt) & \cos(nkt) \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

其中, $k = 2\pi/\lambda$ 表示入射电磁波在真空中的传播系数, 其值可表示为, n 表示介质折射率, z 表示波阻抗。S 参数和传输矩阵 T 中的各个元素之间的关系可以表示为^[58]:

$$S_{21} = S_{12} = \frac{2}{T_{11} + T_{22} + \left(ikT_{12} + \frac{T_{21}}{ik} \right)} = \frac{1}{\cos(nkt) - \frac{i}{2} \left(Z + \frac{1}{Z} \right) \sin(nkt)} \quad (2.10)$$

$$S_{11} = S_{22} = \frac{T_{22} - T_{11} + \left(ikT_{12} - \frac{T_{21}}{ik} \right)}{T_{11} + T_{22} + \left(ikT_{12} + \frac{T_{21}}{ik} \right)} = \frac{i}{2} \left(\frac{1}{Z} - Z \right) \sin(nkt) \quad (2.11)$$

基于上面式子, 当我们把所设计的超材料吸收器等效为厚度远小于波长的介质板时, 其归一化等效阻抗就可以表示为:

$$\frac{Z_1}{Z_0} = \sqrt{\frac{(1 + S_{11})^2 - S_{21}^2}{(1 - S_{11})^2 - S_{21}^2}} = \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\epsilon_{eff}}} \quad (2.12)$$

当 $Z_1 \approx Z_0$ 时, 意味着达到了阻抗匹配条件, 超材料吸收器的反射大大降低, 从而实现完美吸收。上式还说明, 超材料吸收器的完美吸收要求其有效相对介电常数(ϵ_{eff})和有效相对磁导率(μ_{eff})近似相等。此外, 由于超材料吸收器的等效阻抗取决于其结构形状和几何参数, 因此, 我们可以通过结构设计和参数优化来实现阻抗匹配条件。

2.3.2 传输线理论

超材料吸收器由顶层谐振单元阵列、中间介质层和底层金属底板三部分构成, 超材料吸收器一般是由亚波长的谐振单元周期排列而成, 因此可以将其等效为不同的阻抗元件(等效电容、等效电感和等效电阻)。2009年, Q.Wen 等人^[59]第一次运用传输线理论对太赫兹波段内的吸收原理进行了探究, 如图 2.2 所示为所提出的超材料吸收器的单元结构图, 传输线理论将所设计的超材料结构等效成一个电子电路模型, 利用电路分析的相关原理对器件的性能进行分析。

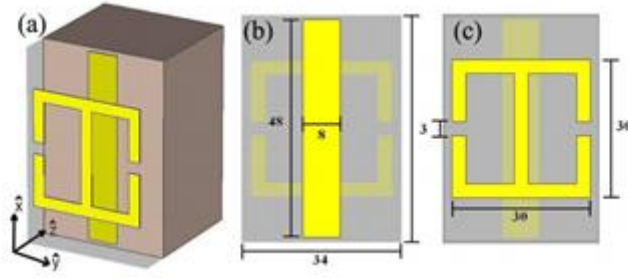

 图 2.2 超材料吸收器的单元结构^[59]。

 Fig. 2.2 Cell structure of the metamaterial absorber^[59].

所设计的吸收器结构的吸收频率可以表示为^[60]:

$$f = \frac{1}{2\pi\sqrt{L_{eff}C_{eff}}} \quad (2.13)$$

在图示 2.3 中, Z_0 表示输出阻抗、 Z_i 表示输入阻抗, C_1 、 L_1 和 R_1 分别表示顶层 LC 电路的结构化参数, C_1 、 L_1 和 R_1 分别表示顶层偶极子共振的结构化参数, C_1 、 L_1 和 R_1 分别表示底层反射面的结构化参数, M 表示顶层在不同共振模式下的耦合模型参数^{[59][61]}。

根据传输线理论模型, 超材料单元结构的顶层谐振环的 ABCD 矩阵可以表示为^[62]:

$$\begin{bmatrix} A_{front} & B_{front} \\ C_{front} & D_{front} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{X_1 X_2}{X_1 + X_2} + M & 1 \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

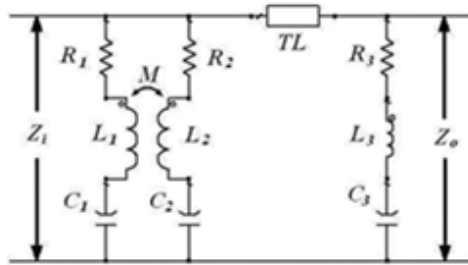

 图 2.3 超材料结构的等效电路模型^[59]。

 Fig. 2.3 Equivalent circuit model for metamaterial structures^[59].

中介质层的 ABCD 矩阵可表示为:

$$\begin{bmatrix} A_{iso} & B_{iso} \\ C_{iso} & D_{iso} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(kl) & jZ_c \sin(kl) \\ \frac{j\sin(kl)}{Z_c} & \cos(kl) \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

而底部金属基板的 ABCD 矩阵可以表示为:

$$\begin{bmatrix} A_{bottom} & B_{bottom} \\ C_{bottom} & D_{bottom} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{X_3} & 1 \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

公式(2.14)~(2.16)中, k 表示电磁场的波矢量, l 表示介质层的厚度, Z_c 为介质层的特征阻抗, X_1 、 X_2 、 X_3 可以分别表示为:

$$X_1 = \frac{1}{j\omega C_1} + R_1 + j\omega(L_1 - M) \quad (2.17)$$

$$X_2 = \frac{1}{j\omega C_2 + R_2 + j\omega(L_2 - M)} \quad (2.18)$$

$$X_3 = \frac{1}{j\omega C_3} + R_3 + j\omega L_3 \quad (2.19)$$

因此, 超材料吸收器的 ABCD 矩阵就可以表示为乘积的形式:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} A_{front} & B_{front} \\ C_{front} & D_{front} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{iso} & B_{iso} \\ C_{iso} & D_{iso} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{bottom} & B_{bottom} \\ C_{bottom} & D_{bottom} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(kl) + \frac{jZ_c \sin(kl)}{X_3} \\ \left(\frac{1}{\frac{X_1 X_2}{X_1 + X_2} + M} + \frac{1}{X_3} \right) \cos(kl) + \frac{j \sin(kl)}{X_3 Z_c} \left(X_3 + \frac{Z_c^2}{\frac{X_1 X_2}{X_1 + X_2} + M} \right) \\ \frac{jZ_c \sin(kl)}{\cos(kl) + \frac{jZ_c \sin(kl)}{\frac{X_1 X_2}{X_1 + X_2} + M}} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.20)$$

由式(2.20)可以进一步计算得超材料吸收器的 S 参数矩阵:

$$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{AZ_o + B - (CZ_o + D)Z_i}{AZ_o + B + (CZ_o + D)Z_i} & \frac{2\sqrt{Z_i Z_o}}{AZ_o + B + (CZ_o + D)Z_i} \\ \frac{2\sqrt{Z_i Z_o}}{AZ_o + B + (CZ_o + D)Z_i} & \frac{-AZ_o + B - (CZ_o - D)Z_i}{AZ_o + B + (CZ_o + D)Z_i} \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

2.3.3 多重反射干涉理论

多重反射干涉理论 (MRIT)^[63]也经常被用来分析解释超材料吸收器的吸收特性。图 2.4 给出了多重反射干涉理论的示意图, 它相当于一个支持 FP 共振的经典法布里-珀罗 (FP) 腔。当太赫兹波从空气中以入射角 θ_1 入射到超材料吸收器的上表面时,

一部分会以反射系数 $r_{11} = |r_{11}|e^{i\varphi_{11}}$ 反射回空气中，剩余部分会以透射系数 $t_{21} = |t_{21}|e^{i\varphi_{21}}$ 进入介质间隔层并继续传播，直到它被反射系数为 $r_{23} = |r_{23}|e^{i\varphi_{23}} = -1$ 的金底板完全反射。然后，被反射的电磁波继续在介质层中传播，同样的反射和透射将在顶部界面和底板发生多次，如图 2.4 所示。

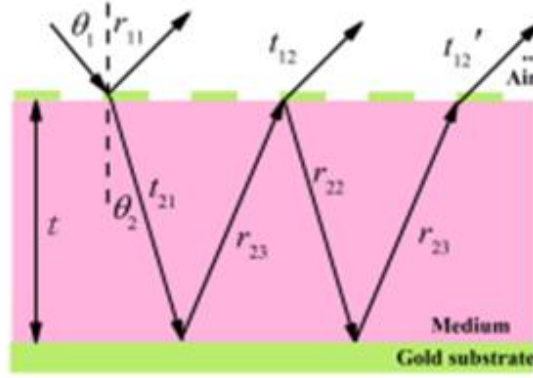


图 2.4 多重反射干涉理论的示意图。

Fig. 2.4 Schematic diagram of multiple reflection interference theory.

整体的反射可以表示为：

$$\begin{aligned}
 r &= r_{11} + t_{12} + t_{12}' + t_{12}'' + \dots \\
 &= r_{11} + t_{21}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d}t_{12} + t_{21}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d}t_{12} \\
 &\quad \times r_{22}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d} + t_{21}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d}t_{12} \\
 &\quad \times (r_{22}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d})^2 + t_{21}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d}t_{12} \\
 &\quad \times (r_{22}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d})^3 + \dots + t_{21}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d}t_{12} \\
 &\quad \times (r_{22}e^{-i\beta d}r_{23}e^{-i\beta d})^m \\
 &\approx r_{11} + \frac{t_{21}t_{12}r_{23}e^{-i2\beta d}}{1 - r_{22}r_{23}e^{-i2\beta d}} \quad (2.22)
 \end{aligned}$$

其中 $\beta = nk_0$ ， n 是间隔层的折射率， k_0 是自由空间的波数，透射波从介质层传输到金底板的传输距离为：

$$d = \frac{t}{\cos \theta_2} = \frac{t}{\cos(\arcsin(\sin \theta_1 / \sqrt{\varepsilon_2/\varepsilon_1}))} \quad (2.23)$$

其中 t 是介质层的厚度， θ_1 和 θ_2 是 THz 波的入射角和折射角， ε_1 和 ε_2 空气和介质层的介电常数。当 THz 波垂直入射时， $\theta_1 = 0$ ， $d = t$ 。因此，只要反射率 $R = |r|^2 = 0$ ，则可以实现完美吸收。根据公式 (2.22) 可以得知，振幅条件和相位条件分别为：

$$|r_{11}| = |r_{11}r_{22} - t_{21}t_{12}| \quad (2.24)$$

$$\varphi_{22} - \pi - 2\beta d = 2m\pi, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (2.25)$$

2.4 本章小结

本章首先介绍了石墨烯的电导率相关知识，并介绍了超材料吸收器的数值计算方法，接下来，简单介绍了阻抗匹配理论、传输线理论以及多重反射干涉理论等研究超材料吸收器常用的三个解析理论。

3 基于石墨烯的单波段可调谐 THz 超材料吸收器的设计与研究

3.1 引言

超材料作为一种人造电磁材料是通过周期性地排列一些亚波长单元结构，从而实现天然材料所不具有的特殊电磁特性^[64]。也正是因为太赫兹波具有能量低、对人体伤害小、脉冲短等优点，被广泛应用于调制、成像、隐身等领域^[65-69]。

然而，在太赫兹超材料吸收器的实际应用中，实现灵活调谐是一个重要的问题。在吸收器研究动态中，大多数由金属-介质-金属“三明治”结构实现，其吸收特性和几何结构为固定的。为了解决此问题，引入有源介质材料来提高超材料吸收器的整体性能。2011年，Ju L 等人第一次在石墨烯条带中观察到局域表面等离子激元（LSPs）的吸收，并通过施加栅极电压来增强 LSPs 共振，从而实现了对吸收峰的调节，这也为后续的研究打下良好的基础，为实现太赫兹可调的光探测器创造了一种新思路^[21]。入射的电磁波会与石墨烯表面等离子激元发生强耦合作用，在后续的研究中，通过改变结构的样式、参数以及更换介质，都会对吸收峰产生影响。其中，石墨烯材料的加入可以实现吸收器吸收性能动态可调谐。石墨烯材料不仅在光电子和力学方面呈现出优异的性能^[70]，而且通过控制外置电压从而获得可调节的表面电导率^[71]，所以石墨烯成为最有前途的材料之一。理论和实验结果均表明，石墨烯可以在红外和太赫兹范围内支持表面等离子体激元(SPPs)的传播和约束^[72]。在很多基于石墨烯的超材料吸收器的设计过程中，石墨烯的高吸收来源于拥有巨大光能聚集能力的共振 SPPs^[73]。

基于以上石墨烯的独特优势，利用石墨烯制备超材料吸收器在近年来引起了广泛的关注。本章设计了一种简单的基于单层石墨烯图案的窄带 THz 超材料吸收器，并研究了其吸收特性，所提出的超材料吸收器是经典的三层“三明治”结构，研究结果表明，该吸收器可以在 $f = 5.485\text{THz}$ 的频率处实现完美吸收，并且在 TE 和 TM 极化下，吸收可以保持一致特性，所以可以证明该吸收器还具有极化不敏感，通过改变入射角的范围可以得出该吸收器具有良好的宽角度入射特性。此外，还利用多重反射干涉理论和阻抗匹配理论对仿真结果进行了理论分析和结果验证，数值计算结果表明仿真模拟结果具有较高的一致性。最后，我们还研究了该吸收器件的开关特性，通过调节石墨烯的电动势从而达到开关功能，结果表明该吸收器可应用于 THz 开关与

THz 调制器等领域。

3.2 模型设计

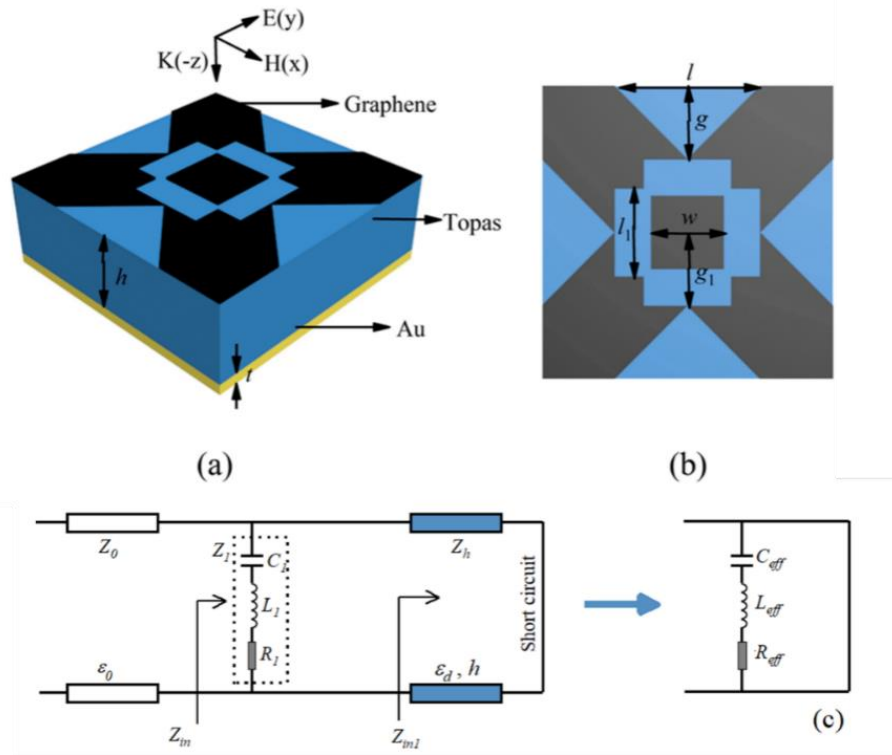


图 3.1 提出的基于石墨烯的窄带超材料吸收器：(a)周期性结构示意图；(b)超材料吸收器的顶视图以及相关参数；(c)等效电路模型图。

Fig. 3.1 The proposed graphene-based narrow-band metamaterial absorber: (a) schematic diagram of the periodic structure; (b) top view of the metamaterial absorber and related parameters; (c) equivalent circuit model diagram.

图 3.1(a)展示了基于石墨烯的单波段超材料吸收器的三维结构，而图 3.1(b)则是它的单元格的俯视图，可以清晰地看到它的细节。吸收器由三层组成：顶部的石墨烯图案，中间的电介质层和底部的金属底面（Au）。在设计顶部表面层的石墨烯图案首先是，在介质层表面铺上一层石墨烯层，然后在用点成线、线成面的方法减掉 4 个三角形和两个长方形条，最后在图案的中间添加一个正方形图案设计而成。中间电介质层选择 Topas，其介电常数为 $\epsilon_d = 2.35$ ，其厚度为 $h = 1.5\mu\text{m}$ 。底层金属地是金（Au），其电导率为 $\sigma = 4.2 \times 10^7 \text{S/m}$ ，其厚度设定为 $t = 0.2\mu\text{m}$ ，其厚度足以阻止传输。石墨烯图案的顶层具有对称性的特点，表明吸收是偏振不敏感的。吸收器结构的周期为 $d = 5\mu\text{m}$ ，其他最佳几何参数为 $d = l = l_1 = 5\mu\text{m}$ ， $t = 0.2\mu\text{m}$ ， $h = 1.5\mu\text{m}$ ， $g =$

$1.25\mu\text{m}$, $g_1 = 1.5\mu\text{m}$ 。

利用数值模拟求得的 S 参数，吸收率表示为 $A(f) = 1 - R(f) - T(f) = 1 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2$ ，其中， $R(f)$ 代表反射率， $T(f)$ 则表示透射率。由于金底板的厚度 t 远大于金在 THz 范围内的趋肤深度，因此阻止了电磁波的透射。于是，吸收率就可以简化为 $A(f) = 1 - R(f)$ ，此时当反射率趋于 0 时，吸收率就可以达到最大值 1，实现完美吸收。图 3.1(c)给出了所设计的超材料吸收器的等效电路模型，其中 Z_0 代表自由空间的阻抗，而顶层石墨烯可以被视为 RLC 串联电路，它的等效阻抗可以用 $Z_l = R_1 + j\omega L_1 + 1/j\omega C_1$ 来表示；中间的介质层可以等效为一段传输线，其等效阻抗为 $Z_1 = jZ_d \tan(\beta_d h)$ ，其中 $Z_d = Z_0/\sqrt{\varepsilon_d}$ ， β_d 和 h 表示传播常数和介质层的厚度，金底板可视为短路。输入阻抗可以表示为： $1/Z_{in} = 1/Z_1$ ，因此，其吸收率就可以通过下式求得：

$$A = 1 - |S_{11}|^2 = 1 - \left| \frac{Z_{in} - Z_0}{Z_{in} + Z_0} \right|^2 \quad (3.1)$$

采用水平微纳米加工技术，可以制备出具有亚波长结构尺寸的超材料吸收器。这种技术由三个基本组成部分：薄层沉淀、光刻图案和图案转换，第一步是将微纳米结构形式逐层覆盖在水平衬底上，第二步是图案转换，它可以根据图像分辨率来确定微纳米结构形式的大小，因此，为了实现图文成像方法，必须对中间状态进行再加工，即第三步，即在平面基底上进行蚀刻。

3.3 仿真结果分析和物理机制讨论

图 3.2(a)显示了 TE（电场沿 Y 轴偏振，黑色曲线）和 TM（电场沿 X 轴偏振，红色曲线）偏振的 THz 在电磁波照射下，所设计的基于石墨烯的超材料吸收器的吸收谱。可以发现，在两种极化条件下，吸收谱均在频率为 5.485THz 处出现了一个的完美吸收带，峰值吸收率接近 100%，吸收器表现出偏振不敏感的特性。此外，为了证明研究的准确性，也为了说明导致完美吸收的物理机理，我们使用 MRIT 的理论进行进一步的分析计算，结果如图 3.2(b)红色曲线所示，显然，使用 MRIT 的计算结果和使用 CST 的数值模拟结果是一致的，因此也说明，THz 电磁波在介质层中的 FP 谐振及其在顶部界面发生的相消干涉是产生吸收的主要原因。对于超材料吸收器来说，除了对不同偏振态的入射光保持高吸收系数外，宽入射角的特性也是实际应用的另一个重要标准。因此，我们模拟了吸收光谱对入射角的依赖性，图 3.2(c)显示了不同

入射角下的吸收光谱结果。可以看出，当入射角度低于 70° 时，可以保持单波段近乎完美的吸收。进一步增加入射角将导致吸收的迅速降低。因为在这种情况下，照射在吸收器上的电场太弱，无法沿石墨烯图案激发出 LSPR（局部表面等离子体极化共振）。因此，耦合到吸收器的电磁场也将被削弱，由此产生的吸收也将减少。尽管如此，吸收器在 0° 到 70° 的入射角范围内可以保持比较高的吸收强度，这足以说明所提出的吸收器具有良好的广角入射特性，有利于实际应用。图 3.2(d)再次证明，极化角从 0° 增加到 90° 均可以保持比较高的吸收强度。

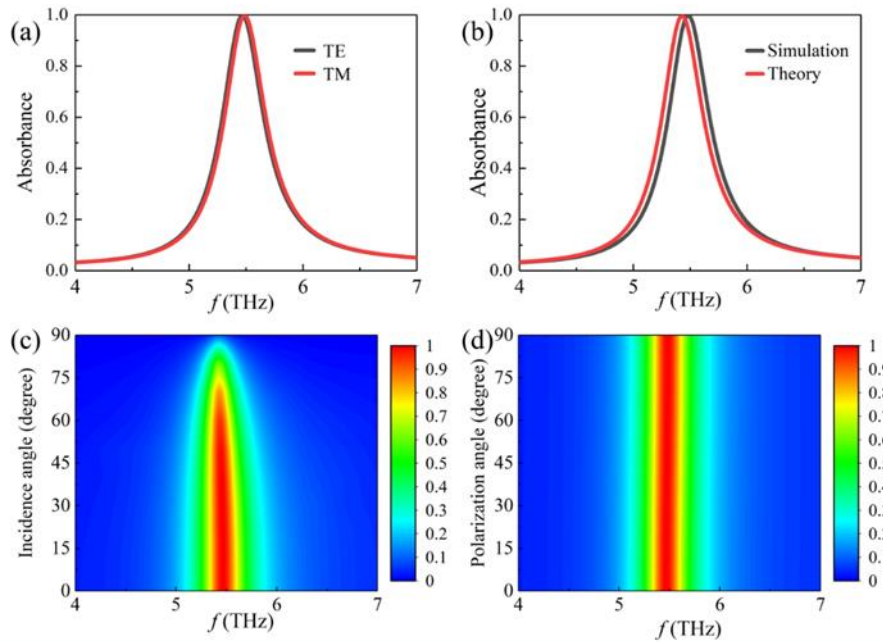


图 3.2 (a)所设计的超材料吸收器对应于 TE（电场沿 y 轴偏振）和 TM（电场沿 x 轴偏振）入射光的吸收光谱；(b)TE 光的模拟吸收光谱（黑色曲线）与 MRIT 理论计算的吸收光谱（红色曲线）的比较；(c)不同入射角下的吸收光谱；(d)不同入极化角下的吸收光谱。

Fig. 3.2 (a) Absorption spectra of the designed metamaterial absorber corresponding to TE (electric field polarization along y-axis) and TM (electric field polarization along x-axis) incident light; (b) comparison of the simulated absorption spectrum of TE light (black curve) with the absorption spectrum calculated by MRIT theory (red curve); (c) absorption spectra at different incidence angles; (d) absorption spectra at different incidence polarization angles.

为了更好地理解完美吸收的物理机制，我们计算了吸收器的归一化等效阻抗，如图 3.3 所示，黑色和红色曲线分别表示归一化有效表面阻抗 $Z_1(f)$ 的实部和虚部。显然，在 5.485THz 处， $Z_1(f)$ 的实部接近 1，虚部接近 0，这表明在这个频率附近与自

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/587002056102006153>