

不同厚度衬底上矩形孔金属结构的太赫兹透射特性数值分析

张杲辉 赵国忠

(首都师范大学物理系太赫兹光电子学教育部重点实验室北京市太赫兹波谱与成像重点实验室, 北京 100048)

摘要 利用时域有限差分法对不同材料和厚度衬底上矩形孔金属结构太赫兹 (THz) 波的透射特性进行了数值分析。研究表明: 矩形孔金属阵列对 THz 光谱具有频率选择特性, 这为太赫兹滤波功能器件的开发提供了基础。在实际应用中, 这种金属微结构常常需要制备在某种衬底上, 而衬底材料及厚度无疑会对其太赫兹透射特性带来影响。研究了不同衬底材料和衬底厚度的矩形孔金属结构太赫兹透射性质, 通过数值模拟研究发现, 对于同一种衬底材料, 随着衬底厚度的增加, 矩形孔金属结构的透射峰峰位向低频移动。比较高阻硅和聚四氟乙烯两种衬底材料发现, 高介电常数的硅衬底引起的透射峰移动更为明显。

关键词 光学器件; 太赫兹; 时域有限差分; 衬底材料; 衬底厚度

中图分类号 O436 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201232.1130001

Numerical Simulation of Terahertz Transmission through Rectangular Hole of Metallic Structure on Substrate with Different Thicknesses

Zhang Gaohui Zhao Guozhong

(Key Laboratory of Terahertz Optoelectronics, Ministry of Education, Beijing Key Laboratory for Terahertz Spectroscopy and Imaging, Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China)

Abstract The terahertz transmission characteristics of the rectangular-hole metal structure on different materials and thicknesses of substrates are studied based on the finite difference time domain method. The results show that there exists the frequency selectivity in THz transmission spectrum of the rectangular-hole metallic structure. The frequency selectivity provides the basis of the terahertz filter. In practical applications, these metallic microstructures often need to be deposited on the substrates. Obviously, the substrate material and its thicknesses have influence on the terahertz transmission characteristics of metallic microstructures. We investigate how the different substrate materials and its thicknesses affect the terahertz transmission of entire structure. By numerical simulation, it is found that the transmission peak shifts into the lower frequency with increasing of the substrate thicknesses. Comparing Si and polytetrafluoroethylene (PTFE) as the substrate materials, it is shown that peak shift of Si substrates with high dielectric constant is more obvious.

Key words optical devices; terahertz; finite difference time domain; substrate material; substrate thickness

OCIS codes 040.2235; 310.3915; 000.4430; 070.2615

1 引言

太赫兹 (THz) 波^[1,2] 通常是指频率为 0.1 ~ 10 THz (波长为 30 μm ~ 3 mm) 的电磁波, 在电磁波谱上位于微波和红外辐射之间, 属于远红外波段,

是电磁波谱上新近开发的最后一个频率窗口。经过近几年的发展, 太赫兹波被证明有非常重要的研究和应用价值^[3~5], 有望在光电信息功能材料诊断与表征、太赫兹光电器件小型化以及太赫兹遥感 and 成

收稿日期: 2012-05-02; 收到修改稿日期: 2012-05-17

基金项目: 国家自然科学基金面上项目 (50971094) 资助课题。

作者简介: 张杲辉 (1986—), 男, 硕士研究生, 主要从事太赫兹光谱方面的研究。E-mail: zhang0017.cool@163.com

导师简介: 赵国忠 (1964—), 男, 教授, 主要从事太赫兹光谱与成像、光电功能材料和光电子学等方面的研究。

E-mail: guozhong-zhao@126.com

像等诸多领域得到广泛应用。

近几年,一些研究小组在实验中发现,金属亚波长结构存在透射增强现象^[6],从而促进了太赫兹器件的迅猛发展,各种亚波长周期性金属网格结构被广泛应用于不同的太赫兹器件中^[7~11]。由于金属薄膜厚度比较小,实验上无法直接测量薄膜材料的光学性质,必须镀在相应的衬底上进行实验。研究发现,金属和介质的介电常数对亚波长金属结构的共振透射频率有较大影响^[12]。Sun 等^[13]利用太赫兹时域反射系统测量了厚度为 200 μm 铜膜和 500 μm 铝膜在硅衬底上的折射率,发现折射率随着 THz 频率的增加而减小。Ma 等^[14]应用 THz-TDS 研究了 ZnO 导电膜的太赫兹波透射性质及介电响应,得到了与频率相关的薄膜电导率曲线和折射率曲线。最近,Carretero-Palacios 等^[15]研究了金属薄膜厚度和衬底介电常数对孔形金属网格结构透射特性的影响。目前,各个研究小组对衬底的研究大都集中在不同的衬底对周期性金属网格结构透射特性的影响^[16~18]以及金属薄膜的厚度对太赫兹透射特性的影响^[19,20]。但是,周期性金属网格结构的衬底

材料厚度对太赫兹透射特性的影响至今还没有进行系统的研究。本文对不同厚度和不同衬底材料的周期性矩形孔金属网格结构的太赫兹透射特性进行了数值模拟研究,并给出了理论分析。

2 样品结构和数值模拟

数值模拟研究选用了矩形孔结构,如图 1(a)所示。根据文献^[21],当矩形孔的长宽比为 3:1 时,太赫兹透射谱上会出现比较明显的透射峰。选用理想金属作为矩形孔结构的金属材料,其单孔长 $L=260 \mu\text{m}$,单孔宽 $w=86 \mu\text{m}$,周期 $T=425 \mu\text{m}$,厚度为 $t=200 \text{ nm}$,衬底材料为硅(Si)和聚四氟乙烯(PTFE),其厚度用 d 表示,如图 1(b)所示。以一个矩形孔单元作为基元画出模拟图,设置周期性边界条件使该单元向 x 、 y 两个方向以相同周期伸展为无限大平面。太赫兹信号作为激励源,从金属表面垂直射入矩形孔金属结构。结合实验室实际的频谱波段范围,模拟频率被设置为 0.2~2 THz,并划分网格。

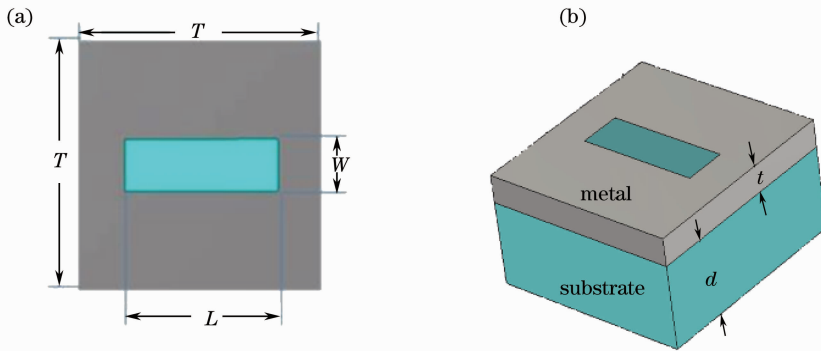


图 1 矩形孔金属结构单元示意图。(a)正视图;(b)侧视图

Fig. 1 Schematic diagram of rectangular-hole metallic structure unit cell. (a) Orthography; (b) side view

基于 Concerto 6.0 电磁场模拟软件的时域有限差分(FDTD)方法,对没有衬底的矩形孔金属结构进行模拟,并将得到的太赫兹透射谱作为参考。之后,对厚度 $d=1, 5, 10 \mu\text{m}$ 的硅衬底和 $d=10, 50, 100 \mu\text{m}$ 的聚四氟乙烯衬底分别进行模拟。比较这些模拟结果与参考谱的变化趋势,可以总结得到衬底材料厚度 d 对矩形孔金属阵列透射特性的影响。

3 模拟结果和讨论

图 2 为 $d=0$ 时矩形孔金属结构的透射谱。由图可知,当频率 $f=0.55 \text{ THz}$ 时,矩形孔金属阵列有明显的共振透射峰,这是由于在二维小孔金属阵

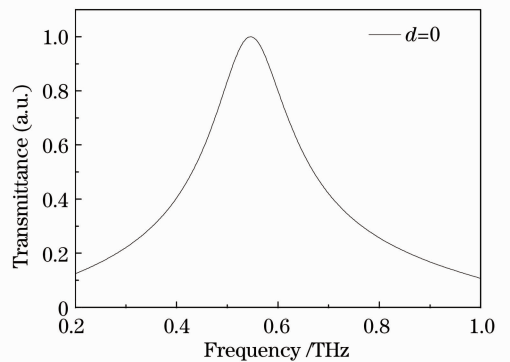


图 2 无衬底矩形孔金属结构的透射谱

Fig. 2 THz transmission spectra of the rectangular-hole metallic structure without substrate

列中,电磁波可以在金属表面激发表面等离子体共振,从而增加电磁波透射。

图3为矩形孔金属结构在不同厚度硅衬底和聚四氟乙烯衬底上的透射谱。由图可知,对于硅衬底上的矩形孔金属结构,当 $d=1\ \mu\text{m}$ 时,透射峰峰位

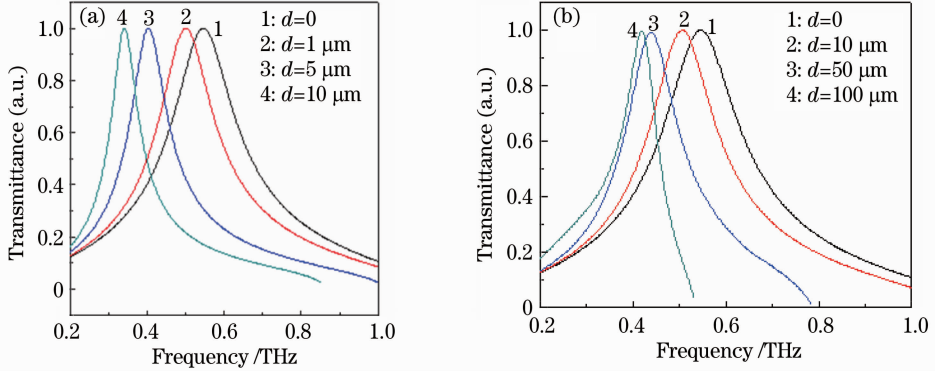


图3 不同厚度衬底上矩形孔金属结构的太赫兹透射谱。(a) 硅衬底; (b) 聚四氟乙烯衬底

Fig. 3 THz transmission of the rectangular-hole metallic structure on different thicknesses of substrates.

(a) Si; (b) PTFE

当太赫兹波垂直入射时,矩形孔金属阵列上被激发的表面等离子体共振波长近似为^[22]

$$\lambda_{\text{sp}} = \frac{T}{\sqrt{m^2 + n^2}} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}}, \quad (1)$$

式中 ϵ_1 为周围介质的有效介电常数, T 为晶格常数, m 和 n 表征光的不同模式,其值为整数。 $\epsilon_2 = \epsilon_{2r} + \epsilon_{2i}$ 是金属的介电常数, ϵ_{2r} 和 ϵ_{2i} 分别代表其实部和虚部,它们与入射光的频率、金属材料、矩形孔的周期和尺寸有关。在实际应用中,衬底厚度 d 远小于 c/ω ,可以视为薄膜。对于放置在空气中的衬底薄膜,文献[23]中给出了薄膜介质折射率 $n(\omega)$ 的表达式:

$$n(\omega) = \sqrt{2A(\omega) - 1}, \quad (2)$$

式中 $A(\omega) = \frac{c}{\omega d} \left| \frac{E_{\text{film}}}{E_{\text{ref}}} - 1 \right|$, E_{film} 和 E_{ref} 分别是光透过介质薄膜后的电场和光在自由空间中传播的参考电场。 $E_{\text{film}}/E_{\text{ref}}$ 表示光通过薄膜的透过率,与衬底薄膜的厚度有关。另一方面,表面矩形孔金属结构对太赫兹波的频率选择效应,也会导致其衬底薄膜的透射率发生变化。结合介电常数和折射率的关系 $\epsilon(\omega) = n^2(\omega)$,可以得到

$$\epsilon_1(\omega) = 2 \frac{c}{\omega d} \left| \frac{E_{\text{film}}}{E_{\text{ref}}} - 1 \right| - 1. \quad (3)$$

从(3)式可以看出,衬底薄膜的介电常数与衬底薄膜的厚度和透过率有直接的关系,厚度 d 的变化会引

起 ϵ_1 发生改变。根据(1)式, ϵ_1 的改变又会引起表面等离子体共振波长发生偏移。而本文模拟结果也印证了这一推论,即矩形孔金属阵列的透射峰峰位随着衬底厚度 d 的增加发生了红移。文献[24]研究了一定厚度衬底上共轴圆环孔金属阵列在可见光波段的透射性能,通过在衬底上刻蚀与圆环孔金属结构相同的结构,发现随着刻蚀深度的增加,共轴圆环孔金属阵列的透射峰峰位发生蓝移。由于在衬底上刻蚀这种微结构,等效于减小了衬底厚度,所以他们的研究与本文模拟结果有一致的规律。

另外,从图3中还可以发现,不同衬底材料的透射峰偏移程度不同。为了观察透射峰峰位随衬底厚度的变化,研究了硅衬底和聚四氟乙烯衬底的厚度与矩形孔金属结构透射峰峰位的关系,如图4所示。图4为硅衬底和聚四氟乙烯衬底上矩形孔金属结构共振峰峰位随厚度的变化关系。当 $d=10\ \mu\text{m}$ 时,硅衬底和聚四氟乙烯衬底透射峰峰位的偏移量分别为 $\Delta\omega_{\text{Si}}=0.21\ \text{THz}$ 和 $\Delta\omega_{\text{PTFE}}=0.04\ \text{THz}$,硅衬底上矩形孔金属结构的共振透射峰峰位偏移量明显大于聚四氟乙烯衬底峰位偏移量。这是由于在同等条件下,两种衬底的介电常数满足 $\epsilon_{\text{Si}} > \epsilon_{\text{PTFE}}$,而(1)式表明介电常数大的介质对共振波长的影响更大,因此硅衬底共振透射峰峰位偏移更加明显。

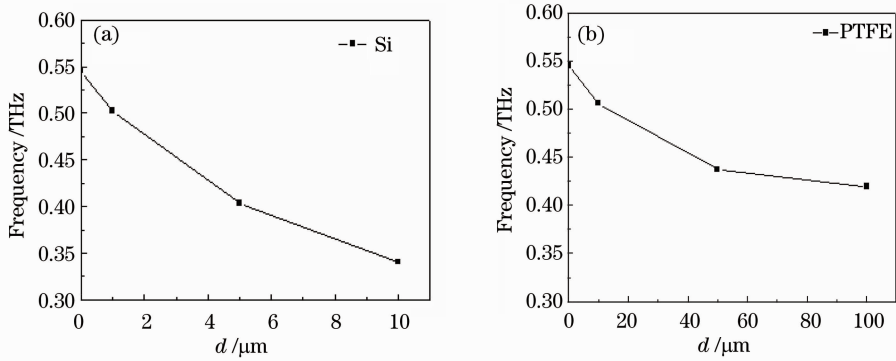


图 4 共振峰频率随厚度的变化关系。(a)硅衬底;(b)聚四氟乙烯衬底

Fig. 4 Relation of resonant peak frequency and substrate thickness. (a) Si substrate; (b) PTFE substrate

从图 4 不难看出,随着衬底厚度的增加,透射峰位的共振频率非线性地减小。如果衬底厚度增加到一定值时,共振频率会趋于饱和值。事实上,影响共振频率的主要因素是金属-衬底界面的等离子体共振^[25]。如果衬底厚度足够大,衬底的作用相当于一半无限大介质,这种界面效应就与衬底厚度的大小无关,因此不难理解共振频率随衬底厚度的增加会趋于一定值,这个共振频率就相当于半无限大介质上金属微结构的等离子体共振频率,从理论上进一步分析这一结果是有意义的。实际应用中,主要利用金属-衬底薄膜结构实现对电磁波的调制,高频共振是更有实际应用价值的,而且随着衬底厚度的增加,衬底对太赫兹波的吸收也是不利的因素。因此,厚衬底结构对于研究太赫兹功能器件没有实际意义。

4 结 论

通过数值模拟,研究了衬底材料和厚度对矩形孔金属结构太赫兹透射特性的影响。研究发现,对于同一种衬底材料,随着衬底厚度的增加,矩形孔金属结构共振透射峰峰位红移。这主要是由于衬底厚度的变化影响了金属微结构的介电常数,改变了表面等离子体共振波长,从而导致了透射峰峰位的移动。此外,还发现高介电常数衬底材料引起的共振透射峰峰位移动更为明显。研究衬底材料和厚度对矩形孔金属结构太赫兹透射特性的影响,能够深入理解此类结构的太赫兹波透射机理,为太赫兹滤波器件的研制提供依据。

参 考 文 献

1 D. Ddragoman, M. Dragoman. Terahertz fields and applications [J]. *Prog. Quantum Electron.*, 2004, **28**(1): 1~66
 2 Zhang Cunlin, Zhang Yan, Zhao Guozhong *et al.*. Terahertz

Detection and Imaging [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2008. 64~69
 张存林, 张 岩, 赵国忠等. 太赫兹感测与成像[M]. 北京: 国防工业出版社, 2008. 64~69
 3 H. Tao, W. J. Padilla, X. Zhang *et al.*. Recent progress in electromagnetic metamaterial devices for terahertz applications [J]. *IEEE J. Sel. Top. in Quantum Electron.*, 2011, **17**(1): 92~101
 4 Liang Lanju, Yan Xin, Yao Jianquan *et al.*. Two-dimensional left-handed material based on parallel metallic double rods in terahertz wave[J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, **32**(3): 0316001
 梁兰菊, 闫 昕, 姚建铨等. 基于平行金属双柱的太赫兹波二维左手材料[J]. *光学学报*, 2012, **32**(3): 0316001
 5 Li Qi, Xia Zhiwei, Yao Rui *et al.*. Analysis of terahertz array imaging system using optical design software [J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(4): 0411001
 李 琦, 夏志伟, 姚 睿等. 基于光学设计软件的太赫兹面阵成像系统性能分析[J]. *中国激光*, 2011, **38**(4): 0411001
 6 T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Gaemi *et al.*. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays [J]. *Nature*, 1998, **391**(6668): 667~669
 7 E. Ekmekci, A. C. Strikwerda, K. Fan *et al.*. Frequency tunable terahertz metamaterials using broadside coupled split-ring resonators [J]. *Phys. Rev. B*, 2011, **83**(19): 3103~3107
 8 Liu Liming, Zhao Guozhong, Zhang Gaohui *et al.*. Polarization characteristics of one-dimensional metallic wire-grating polarizer in terahertz frequency range [J]. *Chinese J. Lasers*, 2012, **39**(3): 0311001
 刘立明, 赵国忠, 张皋辉等. 太赫兹波段一维金属线栅的偏振特性研究[J]. *中国激光*, 2012, **39**(3): 0311001
 9 Yaxin Zhang, Shen Qiao, Wanxia Huang *et al.*. Asymmetric single-particle triple-resonant metamaterial in terahertz band [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, **99**(7): 3111~3113
 10 Wang Xiaoyan, Zhao Guozhong, Zhang Cunlin *et al.*. Investigation on terahertz transmission spectrum through sierpinski fractal structures on copper foils [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(s1): s100507
 王晓燕, 赵国忠, 张存林等. Sierpinski 分形结构的太赫兹透射光谱特性研究[J]. *光学学报*, 2011, **31**(s1): s100507
 11 Yulei Shi, Qingli Zhou, Wei Liu *et al.*. Anomalous transmission of terahertz waves in arrays of double-ring resonators induced by a 400 nm pump pulse [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, **98**(19): 1112~1114
 12 F. de León-Pérez, F. J. García-Vidal, L. Martín-Moreno. Role of surface plasmon polaritons in the optical response of a hole pair [J]. *Phys. Rev. B*, 2011, **84**(12): 5414~5423
 13 W. F. Sun, X. K. Wang, Y. Zhang. Measurement of refractive index for high reflectance materials with terahertz time domain

- reflection spectroscopy [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2009, **26**(11): 4210~4214
- 14 G. H. Ma, D. Li, H. Ma *et al.*. Carrier concentration dependence of terahertz transmission on conducting ZnO films [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **93**(21): 1101~1104
- 15 S. Carretero-Palacios, F. J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno *et al.*. Effect of film thickness and dielectric environment on optical transmission through subwavelength holes [J]. *Phys. Rev. B*, 2012, **85**(3): 5417~5426
- 16 F. J. Garcia-Vidal, Esteban Moreno, J. A. Porto *et al.*. Transmission of light through a single rectangular hole [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**(10): 3901~3905
- 17 M. T. Reiten, D. Roy Chowdhury, J. Zhou *et al.*. Resonance tuning behavior in closely spaced inhomogeneous bilayer metamaterials [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, **98**(13): 1105~1108
- 18 Wang Yawei, Meng Zenghui, Feng Wei *et al.*. Effect on extraordinary transmission of TE wave from different metallic periodic structure covered with dielectric layer [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, **32**(2): 0231002
王亚伟, 孟增辉, 冯伟等. 介质覆盖下周期结构变化对TE波异常透射特性的影响[J]. *光学学报*, 2012, **32**(2): 0231002
- 19 N. Laman, D. Grischkowsky. Terahertz conductivity of thin metal films [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **93**(5): 1105~1108
- 20 M. Li, G. C. Cho, T. M. Lu *et al.*. Time-domain dielectric constant measurement of thin film in GHz-THz frequency range near the Brewster angle [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **74**(15): 2113~2116
- 21 Guozhong Zhao. THz transmission properties of metallic slit array [J]. *Terahertz Science and Technology*, 2010, **3**(2): 85~89
- 22 A. Azad, Y. Zhao, W. Zhang. Transmission properties of terahertz pulses through an ultrathin subwavelength silicon hole array [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2005, **86**(14): 141102
- 23 Zhiping Jiang, Ming Li, X.-C. Zhang. Dielectric constant measurement of thin films by differential time-domain spectroscopy [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, **76**(22): 3221~3223
- 24 A. Roberts, L. Lin. Substrate and aspect-ratio effects in resonant nanoaperture arrays [J]. *Optical Materials Express*, 2011, **1**(3): 480~488
- 25 J. Han, W. Zhang. Terahertz transmission in subwavelength holes of asymmetric metal-dielectric interfaces: the effect of dielectric layer [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **103**(3): 033108

栏目编辑: 李文喆