第 41 卷 第 14 期/2021 年 7 月/光学学报



基于双椭圆结构的高 Q 值太赫兹超材料传感器

曾庆鹏¹, 胡放荣^{1*}, 周远², 邹莹畅², 汪之又²

¹桂林电子科技大学电子工程与自动化学院,广西 桂林 541004;

2长沙学院电子与电气工程学院湖南省光电健康检测工程技术研究中心,湖南长沙 410022

摘要 设计了一种基于双椭圆结构的高品质因数(Q值)太赫兹(THz)超材料传感器,该传感器的每个单元均包含 两个厚度为 0.2 μm、位于聚合物基底上且互成一定角度的金属椭圆。用时域有限积分法对传感器的结构进行了 优化,通过破坏面内反转对称性使金属椭圆阵列组成的超表面激发垂直入射的 THz 波。实验结果表明,该传感器 的 Q 值高达 348。在传感器表面覆盖厚度为 20 μm 的待测物时,其灵敏度为 293 GHz/RIU(Refractive index unit),可用于高灵敏度检测、痕量生物样本检测和疾病早期诊断等领域。

关键词 传感器;太赫兹超材料;品质因数;连续域束缚态;双椭圆结构 中图分类号 O436 **文献标志码** A

doi: 10.3788/AOS202141.1428001

High Q-Value Terahertz Metamaterial Sensor Based on Double Ellipse Structure

Zeng Qingpeng¹, Hu Fangrong^{1*}, Zhou Yuan², Zou Yingchang², Wang Zhiyou²

¹ School of Electronic Engineering and Automation, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, Guangxi 541004, China;

² Hunan Engineering Technology Research Center of Optoelectronic Health Detection, School of Electronic and Electrical Engineering, Changsha University, Changsha, Hunan 410022, China

Abstract A high quality factor (Q-value) terahertz (THz) metamaterial sensor based on double ellipse structure is designed in this paper. Each cell of the sensor contains two 0.2 μ m thick metal ellipses at a certain angle and located on the polymer substrate. The sensor structure is optimized by the finite integral time domain method, and the destruction of in-plane inversion symmetry leads to the excitation of vertically incident THz waves by the metasurface composed of the metal elliptical array. Experimental results show that the Q-value of the sensor is as high as 348. When the sensor surface is covered with a test object with a thickness of 20 μ m, its sensitivity is 293 GHz/RIU (refractive index unit), and the sensor can be applied to high-sensitivity detection, trace biological sample detection, and early disease diagnosis.

Key words sensors; terahertz metamaterials; quality factor; bound states in the continuum; double ellipse structure

OCIS codes 130.6010; 110.6795; 120.6650

1 引 言

太赫兹(THz)波位于红外和微波之间,具有良

好的穿透性、安全性以及物质识别的指纹谱等特性, 在物质鉴别、无损检测、无线通信等领得到了广泛的 应用。近年来, THz 吸收器^[1-2]、滤波器^[3-4]、调制

基金项目:国家自然科学基金(62065005)、广西自然科学基金(2020GXNSFDA238019,2018GXNSFBA198116)、湖南省 重点研发项目(2020SK2111)

通信作者:^{*}hufangrong@sina.com

收稿日期: 2020-12-30; 修回日期: 2021-01-15; 录用日期: 2021-02-05

第 41 卷 第 14 期/2021 年 7 月/光学学报

研究论文

器^[5]、偏振器^[6-7]和传感器^[8]等成为 THz 领域的研究热点。由于 THz 波的光子能量低,不会产生有害的电离辐射;且使用 THz 波检测物质时不需要进行标记,不会对待测物质造成污染和损害。此外,很多生物大分子的晶格振动、偶极子旋转和振动跃迁、低频振动吸收都处于 THz 频段。因此,THz 光谱也适合于生物传感等领域。

超材料(MMs)^[9-11]是人工构建的电磁材料或结 构,具有自然界中不存在的奇异电磁响应,如负折射 率^[12]、负磁导率^[13]和负介电常数^[14]。设计超材料 结构并优化尺寸以获得所需 THz 波的谐振时,这些 谐振会对其表面物质折射率的变化做出响应。用这 种方式设计的 THz 超材料传感器检测生物样本的 研究已取得了许多重要成果[15-19],但这些研究大部 分工作集中在传感器灵敏度(S)的优化上,对传感 器高品质因数(Q值)的关注很少。超灵敏的谐振 检测性需要通过高Q值谐振实现,而具有极窄线宽 谐振的传感器对谐振频率的变化更敏感,因此,研究 并设计高Q值的THz传感器已成为当前THz领 域的研究热点。大多数金属超材料的 Q 值受高欧 姆损耗和辐射损耗的严重限制,因此,超高Q值共 振超材料的设计也成为一个极具挑战性和现实应用 的关键任务。人们主要通过使用低损耗超导体、电 介质材料或优化金属亚波长结构的形状和尺寸等措 施降低超材料的辐射和非辐射损耗。但 THz 波段 的低损耗超导体、电介质材料非常稀少且成本较高, 因此,一般通过优化金属亚波长结构的形状和尺寸

激发 THz 超高 Q 值谐振。Ma 等^[20]提出了一种基 于中心对称双 F 形金属的超高灵敏传感器,其 Q 值 为 49.6。Wang 等^[21]提出了一种基于柔性薄膜的 亚波长结构金属开口环谐振器阵列的超材料生物传 感器,其灵敏度为 243 GHz/RIU(Refractive index unit),Q 值为 14.2。Yang 等^[22]利用反转对称双开 口环组成的 THz 超材料激发双极端尖锐的谐振器, 其 Q 值超过 100,但这些器件依旧不能满足许多测 量领域对高 Q 值的需求。

针对上述问题,本文提出了一种基于双椭圆结构的 THz 超材料传感器。通过破坏传感器超表面的面内反转对称性激发低损耗、高 Q 值的谐振。经结构优化后,该传感器的 Q 值高达 348,灵敏度达到 293 GHz/RIU,可适用于对痕量物质的高灵敏、高精度检测。

2 设计与仿真

2.1 结构设计

实验设计的超材料传感器结构如图 1(a)所示, 其坐标轴表示电磁方向。该器件单元由一层聚合物 (PC)基底和位于其上一对关于 Y 轴对称的金属双 椭圆组成。图 1(b)为该超材料传感器的单元结构 参数,其中,金属椭圆的厚度为 0.2 μ m,基底厚度为 200 μ m, P_x 和 P_Y 分别为该结构单元在 X 和 Y 方 向的长,2a 和 2b 分别为椭圆的长轴和短轴长度,d 为两个椭圆的圆心距, θ 为该椭圆长轴与 Y 轴的夹 角。优化后,该传感器单元结构的参数如表 1 所示。





秋					
Table 1 Parameters of the optimized sensor					
$P_X / \mu m$	$P_Y / \mu m$	$a/\mu{ m m}$	$b/\mu{ m m}$	$d/\mu{ m m}$	$\theta / (°)$
120	120	30	10	60	6
传感器的谐振频率可表示为[23]					
$f = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}},$					(1)

借业后住咸哭的轰粉

式中,*L* 为等效电感,*C* 为等效电容。图 1(a)中的 THz 波垂直传感器表面入射时,产生的透射谱如 图 1(c) 所示。可以发现,在谐振频率 f =1.426 THz 处会产生尖锐的谐振吸收峰,传感器的 $Q = f_0 / X_{FWHM}^{[24]}$,其中, f_0 为中心频率, X_{FWHM} 为 透射谱的半峰全宽(FWHM)。

研究论文

2.2 结构参数对传感器的影响

利用全波电磁分析软件 CST 微波工作室对传 感器的性能进行了仿真分析,仿真时采用基于有限 积分技术(FIT)的频率求解器计算传感器的透射系 数和电场分布。将 X 和 Y 方向设为周期性边界,Z 方向设为开放边界,THz 波垂直入射在传感器表 面。金属层为有耗金属金,其电导率 $\sigma = 4.561 \times 10^7 \text{ S/m,PC}$ 衬底的介电常数 $\varepsilon = 2.7^{[25]}$ 。

由于传感器的结构对其性能的影响较大,因此, 先采用控制变量法对该传感器的单元结构参数 P_x 和 P_y 进行优化。对 P_x 进行优化时, $P_y=120 \mu$ m, $a=30 \mu$ m, $b=10 \mu$ m, $\theta=6^\circ$, $d=P_x/2$ 。当 P_x 以 10 μ m 的步长从 80 μ m 增大到 140 μ m 时,传感器 的透射谱如图 2(a)所示。可以发现,当 $P_x =$ 120 μ m 时,其谐振峰非常尖锐,传感器对应的 Q 值 最大。当 P_y 以 10 μ m 的步长从 80 μ m 增大到 140 μ m 时,传感器的透射谱如图 2(b)所示。可以

第 41 卷 第 14 期/2021 年 7 月/光学学报

发现,当 $P_{y}=120 \ \mu m$ 时,传感器对应的Q值最大, 为 348。因此,实验选择 $P_{\rm Y} = 120 \ \mu {\rm m}$ 。此外,还可 发现,当Px 增大时,谐振吸收峰会产生明显红移。 原因是在 X 方向相邻单元距离最近的两个椭圆上 的表面电流会相互排斥,Px 增大后,这种电荷间的 相互排斥力会减小,椭圆上的表面电流分布宽度会 增大,最终导致传感器的等效电感 L 增大,谐振频 率 f 发生红移。当 P_{y} 增大时,谐振吸收峰会产生 明显蓝移。原因是在 Y 方向相邻单元距离最近的 两个椭圆上的表面电流也会相互排斥, P_v 增大后, 这种电荷间的相互排斥力会减小,椭圆上的表面电 流分布长度会增大,并向椭圆两端扩展,此时会产生 $2 个 效 \overline{\alpha}_{:1}$) 传感器的等效电感 L 增大, 谐振频率 f 发生红移;2)传感器的等效电容 C 减小,谐振频率 f 发生蓝移。由于等效电容 C 减小引起的谐振频 率蓝移比等效电感L 增大引起的谐振频率红移大, 最终导致谐振频率发生蓝移。





Fig. 2 Influence of structural parameters on the transmission spectrum. (a) P_X ; (b) P_Y

对 P_x 和 P_y 优化后,继续优化传感器的结构参数,包括椭圆长轴 2a、椭圆短轴 2b 以及 X 和 Y 方向的夹角 θ,传感器的透射谱及其对应的 Q 值和谐振峰 FWHM 随结构参数 a、b 和角度 θ 的变化曲线如图 3 所示。由图 3(a)可知,当 $P_x = P_y =$ 120 μm, b = 10 μm, θ = 6°, a 从 25 μm 增加到 55 μm 时,谐振吸收峰发生红移且吸收峰的深度增大。由图 3(d)可知,图 3(a)对应的 FWHM 值不断增大,Q 值急剧减小,a = 30 μm 时传感器的 Q 值最大,为 348。由图 3(b)和图 3(e)可知,当 b 以 2.5 μm 的步长从 7.5 μm 增大到 22.5 μm 时,传感器的 Q 值逐渐下降,因此,实验取 b = 10 μm(b = 7.5 μm 时,谐振吸收峰深度过小,故不予考虑)。由图 3(c)和图 3(f)可知,当 θ 从 0°增加到 12°时,中心谐振点 f₀ 的位置几乎不变,谐振吸收峰深度增加

的同时 FWHM 值也不断增加。当 $\theta = 6^{\circ}$ 时, FWHM为3.3 GHz,传感器的Q值高达348。值 得注意的是,图3(a)中 $a = 25 \mu m$ 以及图3(c)中 $\theta = 0^{\circ}$ 时都出现了谐振峰突然消失的现象。

优化并确定传感器的单元结构参数后,继续研 究传感器对待测物的响应特性。若待测物的介电常 数为ε,其折射率可表示为

$$n = \sqrt{\varepsilon \mu}$$
, (2)

式中, μ 为介质的磁导率,大多数材料都是非磁性 的,即磁导率 $\mu = 1$ 。将待测物的折射率设置为 1.5,改变传感器表面覆盖的待测物厚度 t,得到待 测物厚度对传感器灵敏度的影响如图 4(a)所示。 当 t 从 0.5 μ m 逐渐增加到 30 μ m,谐振中心频率 f_0 逐渐向低频移动时,相对平移量 Δf 与待测物厚 度 t 的关系如图 4(b)所示。可以发现,随着待测物







Fig. 4 Influence of the object to be tested on the sensing performance. (a)–(b) Influence of t on the transmission spectrum and frequency shift; (c)–(d) influence of n on the transmission spectrum and frequency shift; (e)–(f) influence of β

on ${\boldsymbol{Q}}$ value and ${\boldsymbol{S}}$

厚度的增加, Δf 不断增大,增长速率却逐渐减小。 当待测物厚度增加到 20 μm 后,相对频移量几乎不 变。原因是 THz 波会激发传感器表面的电流发生 振荡,这种电流振荡对外辐射的电磁波会随着距离 的增大快速衰减。因此,当待测物厚度增大到一定 值时,频移趋向于零(饱和现象),这表明该传感器可 检测的最大厚度为 20 μm。

当待测物的厚度为 0.5 μm 时,传感器的频移 量达到 15 GHz,其灵敏度可表示为^[26-27]

$$S = \Delta f / \Delta n , \qquad (3)$$

研究论文

式中, Δn 为折射率的变化量。计算结果表明,当待 测物的厚度为 0.5 μ m 时,传感器的灵敏度 S 为 30 GHz/RIU。当传感器表面覆盖 20 μ m 厚不同折 射率的待测物时,其透射光谱如图 4(c)所示。可以 发现,当折射率 n 从 1.0 增加到 2.0 时,谐振吸收峰 频率 f_0 从 1.426 THz 逐渐减小到 1.134 THz。 图 4(b)为频移 Δf 与折射率 n 的拟合曲线,其中, $\Delta f = 293n - 296$,此时,传感器灵敏度 S 达到 293 GHz/RIU。此外,THz 波的入射角也是影响传 感器性能的一个重要参数,图 4(e)和图 4(f)分别为 入射角 β 对传感器Q 值和灵敏度S 的影响,可以发 现,传感器的Q 值随入射角 β 的增大而减小,当 β = 45°时,传感器的Q 值降低至 157,但仍远大于常规 超材料 THz 传感器的Q 值;若待测物的折射率和 厚度不变,如 n=1.5和 t=20 μ m 时,入射角 β 对 第 41 卷 第 14 期/2021 年 7 月/光学学报

传感器灵敏度 S 的影响很小。

3 理论建模

利用 FIT 模拟谐振吸收峰频率处的电场分布、 磁场分布和表面电流分布,结果如图 5 所示。可以 发现,共振电场能量远远大于磁场能量。计算得到 共振点 1.426 THz 处的电场分布如图 5(a)所示;金 属椭圆在 THz 波的激发下两端产生正负电荷,每个 相邻周期阵列中四个椭圆的一端相互产生电场,形 成了电四极矩。电四极矩是由矩形对角同性电荷与 相邻异性电荷形成的电场震荡激发的共振模型,如 图 5(b)所示。这也解释了仿真中始终保持圆心距 $d=P_x/2$ 的原因,即防止因相邻椭圆激发的电四极 子共振距离不同而产生两个谐振峰,从而分散共振 能量,减小共振峰深度,进而影响传感器的性能。



图 5 共振机理。(a)电场分布;(b)电四极子模型 Fig. 5 Resonance mechanism. (a) Electric field distribution; (b) electric quadrupole model

使用连续域束缚态(BIC)理论解释该传感器产 生高Q值的原因,结果表明,没有能量泄漏和空间 局部化分布的非辐射电磁状态下,传感器的共振频 率位于结构辐射模式的连续谱中,这种状态也被称 为 BIC^[28]。BIC 表示能量嵌入辐射波连续谱中的定 域态,其核心思想是消除共振模与周围空间所有辐 射通道之间的耦合。当超表面结构在平面内满足 (x;y)→(-x;-y)关系时,该超表面具有面内反 转对称性,辐射波的耦合常数通过连续波偶然消失 时的相消干涉,也被称为对称保护^[29]。真正的 BIC 状态是理想的无损结构,谐振峰的宽度消失,且对应 的Q值为无穷大。但实际上谐振峰的 FWHM 和 Q值都是有限的,当周期阵列的面内反转对称性被 破坏时,真正的 BIC 就会变成准 BIC,此时激发了电 磁波的高Q值共振,并通过调整不对称参数改变Q 值^[30]。该传感器超表面上的参数 θ 是产生不对称 参数的主要因素,当 $\theta=0$ °时,超表面结构在平面内 满足(x;y)→(-x;-y),此时出现真正的 BIC,谐 振峰消失,如3(c)所示。当 θ >0°时,超表面上的面 内反转对称性被破坏,出现了准 BIC,且 Q 值随着 θ 的增大逐渐变小,如图 3(c)和图 3(f)所示。当 $\theta \neq$ 0°时,椭圆度 a/b 会直接影响超表面的非反转对称 点数,椭圆长轴与短轴也间接影响着传感器非反转 对称点的数量。当a/b 过大时,非反转对称点数增 加,Q 值也会增加;当a/b 接近于1时,面内非反转 对称点变少,此时又会出现 BIC,谐振峰消失。

4 结 论

设计了一种基于金属双椭圆结构的 THz 超材 料传感器。仿真结果表明,该传感器的 Q 值高达 348,远远超出其他 THz 超材料传感器,并通过 BIC 理论解释了该传感器高 Q 值产生的原因。当传感 器表面覆盖一层厚度为 20 μm 的待测物时,其灵敏 度可达到 293 GHz/RIU;当待测物的厚度为 0.5 μm 时,其灵敏度为 30 GHz/RIU。该生物传感 器结构简单、制作成本低,可用于痕量生物分子的快

研究论文

速检测和疾病早期诊断等重要领域。

参考文献

- Li H, Yu J, Chen Z. Broadband tunable terahertz absorber based on hybrid graphene-vanadium dioxide metamaterials[J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(9): 0903001.
 李辉,余江,陈哲.基于混合石墨烯-二氧化钒超材 料的太赫兹可调宽带吸收器[J].中国激光, 2020, 47(9): 0903001.
- [2] Li D M, Yuan S, Yang R C, et al. Dynamical optical-controlled multi-state THz metamaterial absorber [J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(8): 0816001.
 李达民,袁苏,杨荣草,等.动态光调控多态太赫兹 超材料吸收器[J].光学学报, 2020, 40(8): 0816001.
- [3] Wu D M, Fang N, Sun C, et al. Terahertz plasmonic high pass filter [J]. Applied Physics Letters, 2003, 83(1): 201-203.
- [4] Sun Y F, Tao C B, Sun J D, et al. Filter-enhanced high-sensitivity HEMT terahertz detector at room temperature[J]. Acta Optica Sinica, 2018, 38(3): 0304001.
 孙云飞,陶重犇,孙建东,等.滤波器增强的高灵敏 度室温 HEMT 太赫兹探测器[J].光学学报, 2018, 38(3): 0304001.
- [5] Lee S, Lee K E, Lee W J, et al. Two-terminal graphene oxide devices for electrical modulation of broadband terahertz waves [J]. Advanced Optical Materials, 2016, 4(4): 548-554.
- [6] Ren L, Pint C L, Arikawa T, et al. Broadband terahertz polarizers with ideal performance based on aligned carbon nanotube stacks [J]. Nano Letters, 2012, 12(2): 787-790.
- [7] Wang W T, Liu J J, Li X J, et al. Direct fabrication of terahertz polarizer and filter by laser inducing and non-electrolytic plating with copper[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(12): 1231002.
 王文涛,刘建军,李向军,等.激光诱导和化学镀铜 制备太赫兹偏振器和滤波器[J].光学学报, 2012, 32(12): 1231002.
- [8] Ahmed K, Ahmed F, Roy S, et al. Refractive indexbased blood components sensing in terahertz spectrum[J]. IEEE Sensors Journal, 2019, 19(9): 3368-3375.
- [9] Keshavarz A, Vafapour Z. Thermo-optical applications of a novel terahertz semiconductor metamaterial design [J]. Journal of the Optical Society of America B, 2018, 36(1): 35-41.
- [10] Cen C L, Yi Z, Zhang G F, et al. Theoretical design

of a triple-band perfect metamaterial absorber in the THz frequency range[J]. Results in Physics, 2019, 14: 102463.

- [11] He X Y, Liu F, Lin F T, et al. Investigation of terahertz all-dielectric metamaterials [J]. Optics Express, 2019, 27(10): 13831-13844.
- [12] Smith D R, Padilla W J, Vier D C, et al. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity[J]. Physical Review Letters, 2000, 84(18): 4184-4187.
- [13] Pendry J B, Holden A J, Robbins D J, et al. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena [J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1999, 47(11): 2075-2084.
- [14] Pendry J B, Holden A J, Stewart W J, et al. Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures[J]. Physical Review Letters, 1996, 76(25): 4773-4776.
- [15] Wu X J, Pan X C, Quan B G, et al. Self-referenced sensing based on terahertz metamaterial for aqueous solutions [J]. Applied Physics Letters, 2013, 102 (15): 151109.
- [16] Xu W D, Xie L J, Zhu J F, et al. Gold nanoparticlebased terahertz metamaterial sensors: mechanisms and applications [J]. ACS Photonics, 2016, 3(12): 2308-2314.
- [17] Wang W, Yan F P, Tan S Y, et al. Ultrasensitive terahertz metamaterial sensor based on vertical split ring resonators[J]. Photonics Research, 2017, 5(6): 571-577.
- [18] Yang Y P, Xu D Q, Zhang W L. High-sensitivity and label-free identification of a transgenic genome using a terahertz meta-biosensor[J]. Optics Express, 2018, 26(24): 31589-31598.
- Zhao X, Lin Z Q, Wang Y X, et al. Label-free self-referenced sensing of living cells by terahertz metamaterial-based reflection spectroscopy[J]. Biomedical Optics Express, 2019, 10 (3): 1196-1206.
- [20] Ma A C, Zhong R B, Wu Z H, et al. Ultrasensitive THz sensor based on centrosymmetric F-shaped metamaterial resonators [J]. Frontiers in Physics, 2020, 8: 584639.
- [21] Wang Z, Geng Z, Fang W. Exploring performance of THz metamaterial biosensor based on flexible thinfilm [J]. Optics Express, 2020, 28 (18): 26370-26384.
- [22] Yang S Y, Tang C C, Liu Z, et al. Simultaneous excitation of extremely high-Q-factor trapped and octupolar modes in terahertz metamaterials [J]. Optics Express, 2017, 25(14): 15938-15946.

第 41 卷 第 14 期/2021 年 7 月/光学学报

研究论文

- [23] Hu F R, Wang L, Quan B G, et al. Design of a polarization insensitive multiband terahertz metamaterial absorber [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2013, 46(19): 195103.
- [24] Kojima S, Kitahara H, Nishizawa S, et al. Terahertz time-domain spectroscopy of low-energy excitations in glasses [J]. Journal of Molecular Structure, 2005, 744/745/746/747: 243-246.
- [25] Saadeldin A S, Hameed M F O, Elkaramany EMA, et al. Highly sensitive terahertz metamaterial sensor
 [J]. IEEE Sensors Journal, 2019, 19 (18): 7993-7999.
- [26] Al-Naib I. Biomedical sensing with conductively coupled terahertz metamaterial resonators [J]. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 2017, 23(4): 1-5.

- [27] Chen J, Peng C, Qi S B, et al. Photonic microcavityenhanced magnetic plasmon resonance of metamaterials for sensing applications [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2019, 31 (2): 113-116.
- [28] Yesilkoy F, Arvelo E R, Jahani Y, et al. Ultrasensitive hyperspectral imaging and biodetection enabled by dielectric metasurfaces [J]. Nature Photonics, 2019, 13(6): 390-396.
- [29] Friedrich H, Wintgen D. Interfering resonances and bound states in the continuum [J]. Physical Review A, General Physics, 1985, 32(6): 3231-3242.
- [30] Koshelev K, Lepeshov S, Liu M K, et al. Asymmetric metasurfaces with high-Q resonances governed by bound states in the continuum [J]. Physical Review Letters, 2018, 121(19): 193903.