

基于二氧化钒和狄拉克半金属的太赫兹传感器/ 滤波器设计

张璐,陈哲*,孙超逸,赵玉媛,孙华燕,许永平,黄泽宇 云南大学信息学院,云南昆明 650500

摘要 设计了一种基于二氧化钒和狄拉克半金属的滤波/传感太赫兹超表面。该超表面由基于狄拉克半金属的镜面对称双开口环以及具有矩形孔的二氧化钒薄膜构成。通过调控超表面中二氧化钒的电导率,可以实现传感器/滤波器两种功能的切换。结果显示:当二氧化钒处于绝缘态时,超表面工作在传感器模式,此时,增大样品厚度及样品与传感器的距离均可增大传感器的灵敏度;当二氧化钒处于金属态时,超表面工作在滤波器模式,滤波器在中心频率处的插入损耗为1.3 dB,回波损耗为12.7 dB。这种具有多功能的超表面在太赫兹传感器和滤波器等方面具有较高的应用价值。

关键词 光学器件;太赫兹;超表面;多功能;狄拉克半金属;二氧化钒 中图分类号 O436 **文献标志码** A

DOI: 10.3788/AOS231431

1引言

太赫兹(THz)波是指波长在 0.03~3 mm 范围内, 频率为 0.1~10 THz,介于微波与红外线之间的电磁 波^[1-2],已被广泛应用于无线通信、医学成像和安全检 测等领域。由于传统材料对太赫兹波的弱响应阻碍了 太赫兹技术的发展,研究者们提出超材料的概念,从而 推动了太赫兹技术的进一步发展。超材料是一种复合 型人工合成材料,具有奇特的物理结构以及天然材料 所不具有的电磁特性^[3]。超表面作为二维超材料可以 实现对电磁波在振幅、相位、偏振等方面的调控,因此 被广泛应用于太赫兹功能器件的设计^[4-6]。

太赫兹传感器在环境监测、医学研究、食品安全等 方面发挥了重要作用^[74]。然而,随着研究的深入,研 究者们发现基于传统金属材料不能实现介电常数的动 态调节,对于设计动态可调的太赫兹传感器存在一定 的限制。近年来,石墨烯、狄拉克半金属、二氧化钒 (VO₂)等可调谐材料的出现为实现超表面传感器提供 了新的思路^[9-10]。其中,狄拉克半金属被称为三维 (3D)石墨烯。与石墨烯相比,狄拉克半金属不容易受 到介电常数干扰,没有表面多余电子,容易制备,而且 性能稳定。此外,狄拉克半金属具有线性能量色散:在 较低频率下,金属响应占主导地位,表现为等离激元; 在更高的频率下,介电响应占主导地位^[11]。因此,狄拉 应用^[12]。2022年,Wang等^[13]基于狄拉克半金属实现 了可调谐高灵敏度超表面传感器,该传感器实现了3 个吸收率均大于99.8%的完美吸收峰,传感器的最大 灵敏度高达238 GHz/RIU,实现了高灵敏度太赫兹传 感。2023年,Hou等^[14]基于光学连续域束缚态(BIC) 提出一种超表面,实现了无限大品质因子传感器,其折 射率灵敏度为158 GHz/RIU。利用狄拉克半金属设 计太赫兹超表面器件为超表面以及传感器设计提供了 新的思路,但随着实际应用要求的提高,具有固定功能 的超表面在一些应用场合中受到限制。

二氧化钒作为一种相变材料,因其在发生相变前 后电导率能实现5个数量级的改变而被广泛应用于多 功能器件设计^[15]。近年来,研究者们将二氧化钒与狄 拉克半金属结合,设计多功能太赫兹超表面,有效解决 了超表面功能单一的问题。2020年,Wang等^[16]将二 氧化钒嵌入介质层中,利用二氧化钒的相变特性实现 了不对称传输和双向吸收两种功能的切换。2022年, Yi等^[17]提出一种基于狄拉克半金属和二氧化钒的新 型多功能太赫兹超表面,当二氧化钒为金属态时,出现 两个完美的吸收峰,而当二氧化钒为绝缘态时,随着狄 拉克半金属费米能级由85 meV增加到180 meV,该超 表面可以实现从四分之一波片到半波片的功能切换。 2023年,Zhang等^[18]提出一种多功能超表面吸收器,当 二氧化钒由绝缘态转变为金属态时,该超表面实现了 双窄带吸收到宽带吸收响应的切换。上述研究在实现

收稿日期: 2023-08-17; 修回日期: 2023-09-19; 录用日期: 2023-10-07; 网络首发日期: 2023-11-14

基金项目:国家自然科学基金(62061051)、云南省基础研究计划(202001BB050056, 202101AT070187, 202301AT070249) 通信作者: *zhechen@ynu.edu.cn

多功能超表面的同时,丰富了狄拉克半金属材料在太 赫兹器件中的应用。

太赫兹滤波器作为太赫兹系统中的一种选频器 件,由于其可滤除不需要的频段以及应用环境中的噪 声,在太赫兹系统中有十分重要的作用^[19-21]。然而,在 已有的基于狄拉克半金属和二氧化钒的多功能超表面 研究中鲜有关于滤波器的设计。

本文提出一种基于狄拉克半金属的镜面对称双开 口环的传感器/滤波器多功能超表面,利用具有矩形孔 的二氧化钒薄膜对超表面进行功能切换。探究了当二 氧化钒处于绝缘态时,超表面工作在传感器模式下的 传输特性,并对该超表面的传感性能进行计算。随着 样品厚度的增加,传感器灵敏度会增大,当样品厚度为 45 µm时,传感器灵敏度为226 GHz/RIU,并且达到灵 敏度阈值。当二氧化钒处于金属态时,超表面工作在 滤波器模式下,滤波器的中心频率为0.84 THz,中心 频率处的插入损耗为1.3 dB,回波损耗为12.7 dB。 此外,还结合电场分布图解释了该超表面的工作原理。

结构设计及材料说明 2

图1所示为基于二氧化钒-狄拉克半金属的太赫 兹传感器/滤波器可切换超表面的单元结构示意图。 如图1(a)所示, E为入射太赫兹波的电场, H为入射太 赫兹波的磁场, K 为入射太赫兹波的波矢。图1(d)为 该超表面的正视图,该单元由四层结构组成,底层为聚 酰亚胺 (polyimide) 介质层, 其相对介电常数为 $\epsilon_{\text{polyimide}} = 3.5 + 0.0027 i^{[16]}$,厚度为 $h_1 = 10 \,\mu\text{m}$;第二层

第44卷第2期/2024年1月/光学学报

由关于y轴镜面对称的两个开口环谐振器(MASRR) 组合而成,其俯视图如图1(b)所示,厚度为 h_2 = 0.2 µm; 第 三 层 为 polyimide 介 质 层 , 厚 度 为 $h_3 = 2 \mu m;$ 顶层为具有矩形孔的二氧化钒薄膜层,其 俯视图如图 1(c)所示,厚度为 $h_4 = 0.2 \,\mu m_o$ 该超表面 单元结构的几何参数设置如下:沿x方向的周期 P_x = $200 \,\mu\text{m}$,沿y方向的周期 $P_y = 100 \,\mu\text{m}$,镜面对称开口 环的外圆半径为 $r=40\,\mu m$,开口环宽度为 $w_1 = 14 \mu m$,被切去的分裂口宽度为 $w = 14 \mu m$,开口 中心与圆环圆心的距离为 $d = 15 \, \mu m$ 。顶层二氧化钒 矩形孔径长度为L=80 µm。

根据随机相位近似理论,狄拉克半金属(AlCuFe) 的复电导率在长波极限条件下由 Kubo 公式^[11]表示,电 导率实部和虚部分别为

$$\operatorname{Re}\sigma(\Omega) = \frac{e^2}{\hbar} \frac{gk_{\rm F}}{24\pi} \,\Omega G(\,\Omega/2\,),\tag{1}$$

$$\operatorname{Im} \sigma(\Omega) = \frac{e^{2}}{\hbar} \frac{gk_{\mathrm{F}}}{24\pi^{2}} \left\{ \frac{4}{\Omega} \left[1 + \frac{\pi^{2}}{3} \left(\frac{T}{E_{\mathrm{F}}} \right)^{2} \right] + 8\Omega \int_{0}^{\epsilon_{\mathrm{C}}} \frac{G(\varepsilon) - G(\Omega/2)}{\Omega^{2} - 4\varepsilon^{2}} \varepsilon \mathrm{d}\varepsilon \right\},$$
(2)

式中:e为电荷量;G为费米分布函数;对于AlCuFe而 言,简并因子g=40; $k_{\rm F}=E_{\rm F}/(\hbar v_{\rm F})$ 为费米动量;T为 非零温度; \hbar 为约化普朗克常量; $v_{\rm F} = 10^6$ m/s 为费米 速度; $E_{\rm F}$ 为费米能级; Ω 为散射率; $\epsilon_{\rm C} = E_{\rm C}/E_{\rm F}, E_{\rm C}$ 为截 止能量。图2给出了归一化电导率的实部和虚部随着 狄拉克半金属费米能级的变化曲线。

(3)



图1 超表面单元结构示意图。(a)超表面单元结构 3D 模型;(b) 狄拉克半金属层的俯视图;(c) 超表面单元结构的俯视图;(d) 单元结 构的正视图

Fig. 1 Schematic of metasurface unit structure. (a) 3D model of metasurface unit structure; (b) top view of Dirac semimetallic layer; (c) top view of metasurface unit structure; (d) front view of unit structure

考虑带间电子传输,狄拉克半金属的介电常数[11] $\varepsilon = \varepsilon_{\rm b} + i\sigma/\omega\varepsilon_0$, 可以表示为 式中: ϵ_0 为真空的相对介电常数: $\epsilon_b = 1$ 为背景的相对



图 2 不同费米能级下狄拉克半金属的动态电导率。(a)实部;(b)虚部 Fig. 2 Dynamic conductivity of Dirac semimetals at different Fermi energy levels. (a) Real part; (b) imaginary part

介电常数;σ为狄拉克半金属的电导率。

在太赫兹频率范围内,二氧化钒的相对介电常数 可以通过Drude模型^[22]表示,即

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_{p}^{2}(\sigma_{VO_{2}})}{\omega^{2} + i\omega\gamma}, \qquad (4)$$

式中: $\epsilon_{\infty} = 12$ 为无穷大频率处的相对介电常数;碰撞 频率 $\gamma = 5.75 \times 10^{13} \operatorname{rad/s}; \omega_{p}^{2}(\sigma_{VO_{*}})$ 为等离子频率^[22]。

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathrm{p}}^{2}(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{VO}_{2}}) = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{VO}_{2}}}{\boldsymbol{\sigma}_{0}} \boldsymbol{\omega}_{\mathrm{p}}^{2}(\boldsymbol{\sigma}_{0}), \qquad (5)$$

式中: $\sigma_0 = 3 \times 10^5$ S/m; $\omega_p(\sigma_0) = 1.4 \times 10^{15}$ rad/s。 当二氧化钒的电导率改变时,二氧化钒可以实现绝缘态 到 金 属 态 的 过 渡,在 仿 真 过 程 中,电导 率 $\sigma_{VO_2} = 10$ S/m 时二氧化钒处于绝缘态,而 $\sigma_{VO_2} = 200000$ S/m 时二氧化钒处于金属态。在实际应用中 二氧化钒的相变过程可以通过温度的改变实现,在室 温 28 ℃时,二氧化钒的载流子浓度非常低,此时二氧 化钒的电导率 $\sigma_{VO_2} = 10$ S/m,二氧化钒处于绝缘态; 当温度增加至 68 ℃时,二氧化钒的电导率 $\sigma_{VO_2} = 200000$ S/m,二氧化钒转变为金属态^[23]。

利用电磁仿真软件 CST Microwave Studio 2020 中的频域求解器对所设计超表面结构的电磁特性进行 建模以及仿真。太赫兹波沿着z轴垂直于超表面单元 结构表面入射,并且在x和y方向上均采用周期边界条 件(unit cell),在z方向上采用开放边界条件(open add space)。在本文的仿真模拟中,使用TE极化。为了确 保仿真的准确性,采用自适应网格设置。经过仿真得 到与频率相关的S参数,即|S₂₁|和|S₁₁|,分别表示透射系 数和反射系数。

3 仿真结果与分析

3.1 二氧化钒为绝缘态时,超表面为传感器

当二氧化钒的电导率为10 S/m即二氧化钒为绝缘态,且狄拉克半金属的费米能级为170 meV时,所提出的超表面工作在传感器模式。当非对称参数 d=15 μm时,其传输谱如图3所示。可以看到,在0~2 THz的频率范围内出现4个谐振谷,分别为d1、d2、

d3、d4,频率分别为 $f_{d1} = 0.592 \text{ THz} \sqrt{f_{d2}} = 1.316 \text{ THz} \sqrt{f_{d3}} = 1.676 \text{THz} \sqrt{f_{d4}} = 1.762 \text{ THz} \sqrt{f_{d2}} = 1.316 \text{ THz} \sqrt{f_{d3}} = 1.676 \text{ THz} \sqrt{f_{d4}} = 1.762 \text{ THz} \sqrt{f_{p1}} = 0.75 \text{ THz} \sqrt{f_{p2}} = 1.488 \text{ THz} \sqrt{f_{p3}} = 1.758 \text{ THz} \sqrt{f_{p1}} = 0.75 \text{ THz} \sqrt{f_{p2}} = 1.488 \text{ THz} \sqrt{f_{p3}} = 1.758 \text{ THz} \sqrt{f_{p3}} = 1.758 \text{ THz} \sqrt{f_{p3}} = 1.244 \text{ THz} \sqrt{f_{p3}} = 0 \ \mu \text{m} \ \text{bt}$,谐振单元的传输谱在 1.244 THz 处出现一个谐振波谷。



图 3 二氧化钒为绝缘态时的传输谱 Fig. 3 Transmission spectra when vanadium dioxide is in the insulating state

接下来,对谐振原理进行分析。当非对称参数 $d = 15 \, \mu m$ 、狄拉克半金属的费米能级 $E_{\rm F} = 170 \, {\rm meV}$ 时,将镜面对称谐振结构(MASRR)划分为中间部分 较长的镜面对称谐振环C1-MSRR以及两边的较短镜 面对称谐振环C2-MSRR两个部分分别进行传输谱分 析。从图4可以看出,单一的C1-MSRR和C2-MSRR 均被入射的电磁波激发,产生透射波谷,而二者相互结 合形成透射峰。为了探究这一现象的物理机制,进一 步研究了透射峰p1和p2对应频率处的电场分布。图 5(a)、(c)、(d)、(f)所示为C1-MSRR和C2-MSRR单 独作用时 p1、p2处的电场分布,可以明显看出,C1-MSRR单独对入射电磁波响应较为强烈,C2-MSRR 的响应不明显。然而,它们组合后的响应均被抑制,如 图 5(b)、(e)所示。这说明 C1-MSRR 和 C2-MSRR 在 p1和p2两个传输峰处的电场相互抵消,因此在这两个 频率处出现传输透明峰。



图 4 当 *d*=15 μm 时, C1-MASRR、C2-MASRR以及MASRR的传输光谱。(a)0~1.3 THz时的传输谱;(b)1.3~2 THz时的传输谱 Fig. 4 Transmission spectra of C1-MASRR, C2-MASRR, and MASRR when *d*=15 μm. (a) Transmission spectra at 0-1.3 THz; (b) transmission spectra at 1.3-2 THz



图 5 传输峰 p1和 p2处的电场分布图。(a)p1处 C2-MSRR 的电场图;(b)p1处 MASRR 的电场图;(c)p1处 C1-MSRR 的电场图; (d)p2处 C2-MSRR 的电场图;(e)p2处 MASRR 的电场图;(f)p2处 C1-MSRR 的电场图

Fig. 5 Electric field distribution at transmission peaks p1 and p2. (a) Electric field diagram of C2-MSRR at p1; (b) electric field diagram of MASRR at p1; (c) electric field diagram of C1-MSRR at p1; (d) electric field diagram of C2-MSRR at p2; (e) electric field diagram of C1-MSRR at p2; (e) electric field diagram of C1-MSRR at p2

为了探究 p3 的形成原理,对比了当 $d = 0 \sim 15 \, \mu m$ (步长为 5 μm)时 p3 处的电场分布图,如图 6(a)所示。 当 $d = 0 \, \mu m$ 时,谐振结构对称,在开口处出现强度较 小的电场分布。如图 6(d)所示,当 $d = 15 \, \mu m$ 时,可以 明显观察到 C1-MSRR 的电场强度极大,由此可以得 出结论:当引入非对称分裂口时,在p3处C1-MSRR的 电场会被激发。对比 $d = 5 \sim 15 \mu m$ 的电场强度,如图 $6(b) \sim (d)$ 所示,在p3处,电场强度随着d增大而明显 增大。由此得出结论:p3是由非对称量d的引入而产 生的,并且其谐振强度会随着d的增加而变大。



图 6 传输峰 p3处的电场分布图。(a) $d=0 \mu m$;(b) $d=5 \mu m$;(c) $d=10 \mu m$;(d) $d=15 \mu m$ Fig. 6 Electric field distribution at transmission peak p3. (a) $d=0 \mu m$; (b) $d=5 \mu m$; (c) $d=10 \mu m$; (d) $d=15 \mu m$

为了探究非对称参数开口中心与圆环中心的距离 对传输特性及传感器性能的影响,在保证其他结构参 数固定不变的情况下,调整非对称参数d=0~15μm (步长为5µm)。图7所示为不同非对称参数d对应的 传输谱。可以看出:随着非对称参数 d不断增大,d1处 的传输系数逐渐减小,且d1向低频方向移动了 70 GHz;d2处的传输系数逐渐增大,且d2的谐振频率 右移了58 GHz;d3处的传输系数逐渐减小,并且向更 高频方向移动了86 GHz;d4处的传输系数逐渐减小, 但谐振频率不发生变化;p1处的传输系数逐渐增大, 而且p1处的谐振频率右移了38GHz;p2处的传输系 数逐渐增大,且谐振频率略微左移;p3处的传输系数 与谐振频率均不发生变化。当 d=0 μm 时,在 1.244 THz 处出现共振波谷,表现为单共振;当 d≈ 5 µm 时,第一共振谷(d1)、第三共振谷(d3)、第四共振 谷(d4)同时被激发,呈现出4个共振谷,分别出现在 0.662 THz、1.26 THz、1.59 THz、1.76 THz处。

总之,通过增大非对称参数d,传输谱不仅表现为 从单谐振到多谐振的可调谐性能,同时共振强度也有 所改变,并且谐振频率也会随着d的改变而发生变化, 这是因为非对称参数d的大小会影响谐振环非对称分 裂口处的电场强度。因此,在实际应用中,可以通过调 节超表面的非对称参数d对传感器进行重构。









为进一步讨论非对称参数 d 对谐振的影响,探讨随着 d 的增加各谐振点的 Q 值变化。绘制了 $d = 0 \sim 15 \mu m$ (步长为5 μm)各个谐振点对应的 Q 值变化曲线,如图 8 所示。其中 p3 的 Q 值随着 d 的增加而增大,当 $d = 15 \mu m$ 时 Q 值最大,可以达到 175.8。其他谐振点的 Q 值随着 d 的增大而减小,当 $d = 5 \mu m$ 时,Q 值最大,此时 d1 处的 Q 值为 10.68, p1 处的 Q 值为 5.09, p2 处的 Q 值为 16.44, d3 处 Q 值为 33.13, d4 处的 Q 值最大,高达 587.33。



图 8 *d*从0 μm 增加到 15 μm 时各个谐振点的 Q 值变化曲线。(a)d1、p1、p2 对应的 Q 值随 *d* 的变化;(b)d3、p3、d4 对应的 Q 值随 *d* 的 变化

Fig. 8 Plots of Q variation corresponding to each resonance point as d increases from 0 μ m to 15 μ m. (a) Q variation with d for d1, p1, and p2; (b) Q variation with d for d3, p3, and d4

为探究狄拉克半金属费米能级对传感器谐振频率 的影响,研究了 $d = 15 \mu m$ 条件下,不同费米能级对传 输谱的影响。如图9所示,随着费米能级的增加,d1、 d2、d3均向更高频率方向移动,并且谐振强度都有所 增大。当费米能级从90 meV增加到170 meV时,d1 从0.532 THz移动到0.592 THz,右移了60 GHz;d2 从1.222 THz移动到1.316 THz,右移了94 GHz;d3 从1.58 THz移动到1.676 THz,右移了96 GHz;d4几 乎不产生频移。因此,费米能级的改变不仅能够实现 谐振强度的调整,还可以实现谐振频率重构。

接下来对所设计的超表面传感器进行性能分析。

传感性能的优劣主要通过品质因数Q、灵敏度S等性能参数来衡量。品质因数Q的定义为谐振的中心频率 f_0 与半峰全宽 d_{FWHM} 的比值,即 $Q = f_0/d_{FWHM}$ 。Q值越大,表示损耗越小,共振峰越窄,半峰全宽越小。当传感器的灵敏度相同时,Q值越大,频率变化越容易被检测到,传感性能越好。灵敏度S的定义为共振频率的变化量 Δf 与折射率的变化量 Δn 之比,即 $S = \Delta f / \Delta n$ 。 S值越大,表示共振频率对折射率的变化越敏感,在测量时越容易分辨出不同折射率的物体。

综合考虑谐振点的Q值和谐振强度这两个因素。 在接下来关于传感性能的讨论中,选择非对称参数



图 9 费米能级(E_F)从 90 meV 增加到 170 meV 时的传输谱 Fig. 9 Transmission spectra when the Fermi energy level (E_F) increases from 90 meV to 170 meV

 $d = 15 \mu m$ 时 d3、p3谐振点作为传感器使用时的观测 点,此时 d3的Q值为10.28,p3的Q值为175.8。

为研究该超表面传感器对外加样品的折射率灵敏度,在谐振结构上方覆盖一层折射率不同的样品,并通 过调整样品厚度*t*和折射率*n*来研究其对谐振频率的 影响。首先,固定非对称参数*d*=15μm,费米能级

第 44 卷 第 2 期/2024 年 1 月/光学学报

 $E_{\rm F} = 170 \,{\rm meV}$,样品厚度 $t = 10 \,{\mu}{\rm m}$,并使其覆盖整个 谐振结构(200 ${\mu}{\rm m} \times 100 \,{\mu}{\rm m}$),图 10(a)所示为覆盖样 品超表面的 3D 模型,图 10(b)为覆盖样品超表面的正 视图,电磁波垂直于样品表面入射,当样品的折射率不 同时,该超表面的传输响应谐振频率会发生相应的偏 移,根据谐振频率随样品折射率的变化对该超表面结 构的传感灵敏度进行评估,谐振频率随样品折射率变 化越大,说明传感灵敏度越高。

首先,将样品折射率n从1增加到2(步长为 0.2),并进行仿真分析。图11(a)展示了仿真结果, 随着样品折射率n的增大,d2、d3、p2、p3这4个谐振 点均向低频方向移动,这是因为位于传感器表面的样 品折射率变化会导致超表面周围介电常数发生变化, 超表面将这种变化体现为谐振频率的变化。其中d3 的偏移量最大,且d3处的Q值相对较大,因此在接下 来关于传感器灵敏度的研究中将d3作为观测谐 振点。

为了更加直观地展示样品折射率对谐振频率的影响,绘制了谐振频率偏移量随样品折射率n的变化。 图 11(b)所示为对d3谐振频率偏移量随折射率的线性 拟合结果,其中圆球点表示不同折射率的频率偏移量, 虚线表示拟合曲线。将频率偏移量定义为 $F_s = f - f_0$,其中f表示超表面覆盖样品之后的谐振频 率, f_0 为超表面无样品覆盖时的谐振频率。从图 11(b) 可以看出,随着样品折射率的增加,频率偏移量线性增 大。d3谐振频率随折射率偏移量对应的拟合函数为 $F_s = 0.106n - 0.1127$,拟合度 R^2 为 0.98。将线性拟 合函数的斜率定义为传感器的灵敏度 S,所以d3 处的 折射率灵敏度 S为 106 GHz/RIU。



图 10 样品覆盖整个谐振结构(200 μm×100 μm)示意图。(a)3D图;(b)正视图 Fig. 10 Schematic of the sample covering whole resonant structure (200 μm×100 μm). (a) 3D view; (b) front view

为了深入探究外加样品对谐振频率产生影响的机制,利用等效电路思想分析谐振频率。狄拉克半金属谐振层被分裂口分成两个弧形谐振器,将它们分别等效为电感 L_1 和 L_2 ,而分裂口可以等效为电容C,狄拉克半金属谐振层为镜面对称型结构,所以等效电路也呈现镜面对称,从而形成LC谐振模型^[24],如图12所示。谐振频率为 $f=(2\pi\sqrt{LC})^{-1}$,主要由等效电感L、等效电容C决定。其中L主要由几何参数决定,而等效电容^[25]可以表示为

 $C = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(v) E(v) dv, \qquad (6)$

式中: ε₀ 为真空介电常数; ε(v)为超表面电容性结构周 围环境的介电常数; E(v)为超表面电容性结构周围环 境的电场。由于工作环境的介电常数对空间电场起着 决定性作用,因此等效电容C主要由超表面电容性结 构周围环境的介电常数决定。当样品覆盖在传感器表 面时,样品会取代传感器电容性结构周围的环境物质, 即空气,超表面电容性结构周围环境的介电常数被改



图 11 传输谱及谐振频率偏移量随折射率的变化。(a)当覆盖样品折射率n从1增加到2时谐振结构的传输谱;(b)当覆盖样品折射 率n从1增加到2时d3谐振点处的频率偏移量拟合曲线

Fig. 11 Transmission spectra and resonance frequency shift as a function of refractive index. (a) Transmission spectra of resonance structure when refractive index *n* of covered sample is increased from 1 to 2; (b) fitting curve of frequency shift at the resonance point of d3 when refractive index *n* of covered sample increases from 1 to 2

变,从而改变等效电容*C*。样品折射率*n*与相对介电 常数以及相对磁导率存在以下关系^[26]:

$$n = \sqrt{\varepsilon \mu} \, \circ \tag{7}$$

大部分物质都是非磁性的,即µ=1,因此样品折 射率与样品相对介电常数有关,介电常数的改变会影 响超表面开口处的等效电容,从而引起谐振频率的移 动。所以,当样品折射率变大时,相对介电常数会增 大,从而使得*C*增大,谐振频率左移。



图 12 LC 谐振模型图 Fig. 12 LC resonance model

综合考虑各谐振点处的Q值和灵敏度S,选择谐振 波谷d3作为所提传感器的最佳观测点,并进一步研究 样品厚度对频率偏移量的影响。首先,将样品折射率n 设为1.6,并将样品厚度 t设为从5 μm 增加到50 μm(步 长为5 μm)。图13(a)显示了传输响应随着样品厚度增 加的变化情况。可以看出:当样品厚度增加时,d3处的 谐振频率左移;当样品厚度为45 μm 时,d3处的谐振频 率向低频方向偏移了0.276 THz;当t>45 μm时,d3处 的谐振频率不再随着样品厚度增加而左移。

为了更加直观地表示频率偏移量随样品厚度的变化,进一步绘制了d3处的频率偏移量与样品厚度之间的数值关系,如图13(b)所示。可以观察到:随着样品 厚度的增加,d3处的频率偏移量不断增大,但增长速 度逐渐减小,当待测样品的厚度t>45μm时,频率偏 移量几乎不再改变。这是因为当样品厚度增大时,超 表面分裂环开口周围的空气会逐渐被样品代替,使得 分裂环开口周围的介电常数增大,等效电容增大,频率 向左频移量增大。但当样品足够厚时,样品完全取代 分裂口处的空气,继续增大样品厚度,超表面传感器周 围的介电常数不再改变,等效电容不再发生变化,从而 谐振频率不再改变,频移量趋于饱和。



图 13 频率偏移量随样品厚度的变化。(a)通过改变样品厚度 *t* 从 5 μm 增加到 50 μm 时 d3 处的传输谱;(b) d3 处的频率偏移量随样 品厚度 *t* 的变化

Fig. 13 Variation of frequency shift with sample thickness. (a) Transmission spectra at d3 when increasing sample thickness t from $5 \,\mu$ m to 50 μ m; (b) variation of frequency shift of d3 with sample thickness t

为进一步探讨样品厚度 t 对传感器灵敏度 S 的影响,对 d3处传感灵敏度随样品厚度的变化情况进行分析,结果如图 14 所示。可以明显观察到:随着样品厚度增加,传感器灵敏度有所提高,在 25 µm 时达到 186 GHz/RIU;当样品厚度超过 45 µm 时,传感器灵敏度随着厚度增加发生的变化量逐渐趋于饱和,最大值为 226 GHz/RIU。



图 14 d3处灵敏度随样品厚度 t 的变化曲线 Fig. 14 Variation curve of sensitivity at d3 with sample thickness t

最后,进一步探究样品与超表面的距离对灵敏度 的影响,固定样品厚度为10 μm,当样品与超表面之间 的距离从10 μm增加到90 μm时,超表面的传感灵敏度 会先快速增大后略微减小,当样品距离超表面70 μm 时,灵敏度达到最大值130 GHz/RIU,如图15所示。





Fig. 15 Variation of sensitivity with distance between sample and metasurface

3.2 二氧化钒为金属态时,超表面为带通滤波器

当二氧化钒的电导率为200000 S/m,即二氧化钒为金属态,费米能级为 E_F =170 meV,非对称参数d=15 μ m时,超表面在0~2 THz频率范围出现带通响应,其S参数如图16所示,即当二氧化钒为金属态时,超表面工作在带通滤波器模式。此时,在0.84 THz处传输谱出现一个谐振峰值点,为该带通滤波器的中心频率。中心频率处的插入损耗为1.3 dB,回波损耗为

12.7 dB, -3 dB带宽为 229 GHz。



图 16 二氧化钒为金属态时的传输谱和反射谱 Fig. 16 Transmission and reflection spectra of vanadium dioxide in the metallic state

接下来对该超表面工作在滤波器模式时的谐振原 理进行研究。为了更好地解释带通滤波器的通带形成 原理,绘制了当二氧化钒为绝缘态和金属态且d= 15 µm, 狄拉克半金属费米能级为170 meV 时的传输 谱,如图17所示。可以明显看出,当二氧化钒为金属 态时,传输峰值p2和p3均被抑制,从而形成带通滤波 器的阻带。为了更好地解释这种现象,分别对图18所 示的 p2 和 p3 频率处的电场进行讨论。当二氧化钒为 金属态时开口处的电场明显比二氧化钒为绝缘态时的 电场弱,进一步验证了上述结论。同时,对fal= 0.592 THz 频率处的电场进行对比, 如图 19(a)、(b)所 示。当二氧化钒为绝缘态时,开口处的电场十分强烈, 对应为谐振波谷;当二氧化钒为金属态时,开口谐振环 的中间部分电场被抑制。此外,还对带通滤波器的中 心频率处的电场进行研究,如图19(c)、(d)所示。二 氧化钒无论是绝缘态还是金属态,电场都集中在开口 谐振环的开口外侧,且电场强度不受二氧化钒电导率 的影响。综上所述,滤波器的阻带形成是因为二氧化 钒为金属态时,顶层的二氧化钒薄膜阻碍了太赫兹波 进入超表面,从而降低了开口处的电场强度。



图 17 二氧化钒为绝缘态和金属态时的传输谱 Fig. 17 Transmission spectra of vanadium dioxide in the insulating and metallic states



图 18 p2、p3处的电场图。(a)二氧化钒为绝缘态时 p2处的电场图;(b)二氧化钒为金属态时 p2处的电场图;(c)二氧化钒为绝缘态时 p3处的电场图;(d)二氧化钒为金属态时 p3处的电场图

Fig. 18 Electric field diagrams at p2 and p3. (a) Electric field at p2 when vanadium dioxide is in the insulating state; (b) electric field at p2 when vanadium dioxide is in the metallic state; (c) electric field at p3 when vanadium dioxide is in the insulating state; (d) electric field at p3 when vanadium dioxide is in the metallic state



图 19 电场图。(a)二氧化钒为绝缘态时 d1 处的电场图;(b)二氧化钒为金属态时 d1 处的电场图;(c)二氧化钒为绝缘态时滤波器中 心频率处的电场图;(d)二氧化钒为金属态时滤波器中心频率处的电场图

Fig. 19 Electric field diagrams. (a) Electric field diagram at d1 when vanadium dioxide is in the insulating state; (b) electric field diagram at d1 when vanadium dioxide is in the metallic state; (c) electric field diagram at the center frequency of the filter when vanadium dioxide is in the insulating state; (d) electric field diagram at the center frequency of the filter when vanadium dioxide is in the metallic state; is in the metallic state

随后分析了非对称参数 d 的改变对带通滤波器传输特性的影响。图 20 所示为狄拉克半金属的费米能级为 170 meV、d为 0~15 μm 时,该超表面的传输特性示意图。可以看出,随着非对称参数 d 的增大,带通滤波器的中心频率从 0.62 THz 右移到 0.84 THz,且插入损耗有所减小,由 2.71 dB减小到 1.3 dB。

为了探索狄拉克半金属费米能级对滤波器性能的 影响,研究了 d=15μm、二氧化钒电导率为 200000 S/m、狄拉克半金属费米能级为90~170 meV 时超表面的传输特性,如图21所示。可以明显观察 到:当费米能级能量增大时,该滤波器的插入损耗会有 所减小,且带通滤波器的中心频率会发生轻微的右移, 但狄拉克半金属的费米能级对带通滤波器的中心频率



图 20 二氧化钒为金属态时不同非对称参数 d 对应的传输谱 Fig. 20 Transmission spectra of vanadium dioxide in the metallic state with different asymmetric parameters

及插入损耗的影响都较小。



图 21 不同费米能级时的传输谱 Fig. 21 Transmission spectra at different Fermi energy levels

4 结 论

提出一种基于狄拉克半金属及二氧化钒的多功能 太赫兹超表面。该超表面由四层结构组成,其中狄拉 克半金属层由两个镜面对称的开口谐振环组成。功能 的切换通过调节具有矩形凹槽的二氧化钒薄膜的电导 率实现。当二氧化钒处于绝缘态时,该超表面实现了 高Q值传输波谷,并且随着非对称量d的增大谐振强 度会增大。从传感器的应用角度来看,当样品厚度为 10 µm时, 传感器的灵敏度为106 GHz/RIU, 并且传感 器灵敏度会随着样品厚度的增加而增大;当样品厚度 为 45 μm 时, 传感器的灵敏度达到饱和值为 226 GHz/RIU。当二氧化钒为金属态时,该超表面工 作在滤波器模式,中心频率为0.84 THz,中心频率处 的插入损耗为1.3 dB,回波损耗为12.7 dB。并且可 以通过调节非对称参数d的大小实现滤波器中心频率 的调谐。所提出的超表面可以在同一结构中实现多功 能的切换,有效解决了超表面功能单一的问题。因此, 所提出的超表面结构在多功能器件及太赫兹通信中具 有潜在的应用价值。

参考文献

- Tonouchi M. Cutting-edge terahertz technology[J]. Nature Photonics, 2007, 1(2): 97-105.
- [2] Chen Z, Zhang B, Zhang Y, et al. 220 GHz outdoor wireless communication system based on a Schottky-diode transceiver[J]. IEICE Electronics Express, 2016, 13(9): 20160282.
- [3] Ferguson B, Zhang X C. Materials for terahertz science and technology[J]. Nature Materials, 2002, 1(1): 26-33.
- [4] 崔琦,陈哲,王岩.基于二氧化钒超材料的太赫兹波相位动态 调控[J].中国激光,2022,49(3):0314001.
 Cui Q, Chen Z, Wang Y. Dynamic manipulation of terahertz wave phase based on vanadium dioxide metamaterials[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(3):0314001.
- [5] Sihvola A. Metamaterials in electromagnetics[J]. Metamaterials, 2007, 1(1): 2-11.
- [6] Wang D X, Xu K D, Luo S Y, et al. A high *Q*-factor dual-band terahertz metamaterial absorber and its sensing characteristics[J]. Nanoscale, 2023, 15(7): 3398-3407.

- [7] Qin J, Jiang S B, Wang Z S, et al. Metasurface micro/nanooptical sensors: principles and applications[J]. ACS Nano, 2022, 16(8): 11598-11618.
- [8] 姜去寒,马毅,黄俐皓,等.高灵敏太赫兹双谐振法诺传感器 检测透明质酸[J].光学学报,2023,43(9):0928001.
 Jiang Q H, Ma Y, Huang L H, et al. Highly sensitive terahertz dual-band Fano sensor for detecting hyaluronic acid[J]. Acta Optica Sinica, 2023, 43(9):0928001.
- [9] 易南宁,宗容,龚江,等.基于二氧化钒-狄拉克半金属混合超 材料的单/双波段可切换太赫兹吸波器[J].中国激光,2022,49
 (3):0314002.

Yi N N, Zong R, Gong J, et al. Single-/dual-band switchable terahertz absorber based on vanadium dioxide-dirac semi-metal hybrid metamaterial[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(3): 0314002.

- [10] Xu K D, Li J X, Zhang A X, et al. Tunable multi-band terahertz absorber using a single-layer square graphene ring structure with T-shaped graphene strips[J]. Optics Express, 2020, 28(8): 11482-11492.
- [11] Kotov O V, Lozovik Y E. Dielectric response and novel electromagnetic modes in three-dimensional Dirac semimetal films[J]. Physical Review B, 2016, 93(23): 235417.
- [12] Zhuang H W, Ding W, Tan H H, et al. Terahertz plasmonic sensor based on bulk Dirac semimetals[J]. Optical and Quantum Electronics, 2023, 55(5): 390.
- [13] Wang X Y, Lin J C, Yan Z Y, et al. Tunable high-sensitivity sensing detector based on Bulk Dirac semimetal[J]. RSC Advances, 2022, 12(50): 32583-32591.
- [14] Hou B, Li Z Y, He L, et al. Enhanced quasi-BIC refractive index sensing based on controlling the Fermi energy of Dirac semimetal metasurface[J]. Optics & Laser Technology, 2023, 164: 109537.
- [15] Zhang B H, Xu K D. Switchable and tunable bifunctional THz metamaterial absorber[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2022, 39(3): A52-A60.
- [16] Wang T L, Zhang H Y, Zhang Y, et al. Tunable bifunctional terahertz metamaterial device based on Dirac semimetals and vanadium dioxide[J]. Optics Express, 2020, 28(12): 17434-17448.
- [17] Yi N N, Zong R, Qian R R. Multifunctional terahertz metasurface utilizing Dirac semi-metal and vanadium dioxide hybrid metamaterials[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2022, 146: 106682.
- [18] Zhang Y G, Zhang R, Liang L J, et al. Multifunctional terahertz absorber based on the Dirac semimetal and vanadium dioxide[J]. Applied Optics, 2023, 62(3): 813-819.
- [19] Shi L L, Chi T Y, Su R F, et al. Freestanding narrowband terahertz filters based on aluminum foil[J]. Optics Express, 2023, 31(11): 17547-17556.
- [20] Zhan Z Q, Wei J, Miao Y, et al. Polarization-independent narrowband terahertz filter based on all-dielectric metasurfaces [J]. IEEE Photonics Journal, 2023, 15(2): 4600606.
- [21] 王岩,陈哲,崔琦.基于二氧化钒的可调谐太赫兹宽带带通滤 波器[J].光学学报,2021,41(20):2023002.
 Wang Y, Chen Z, Cui Q. Tunable terahertz broadband bandpass filter based on vanadium dioxide[J]. Acta Optica Sinica, 2021,41(20):2023002.
- [22] Xie Q, Sun J F, Su C X, et al. Multifunctional metasurface for broadband absorption and polarization conversion based on graphene-VO₂[J]. Diamond and Related Materials, 2023, 137: 110119.
- [23] Driscoll T, Kim H T, Chae B G, et al. Memory metamaterials
 [J]. Science, 2009, 325(5947): 1518-1521.
- [24] Ebrahimi A, Nirantar S, Withayachumnankul W, et al. Secondorder terahertz bandpass frequency selective surface with miniaturized elements[J]. IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, 2015, 5(5): 761-769.

[25] Li F Y, He K, Tang T T, et al. The terahertz metamaterials for sensitive biosensors in the detection of ethanol solutions[J]. Optics Communications, 2020, 475: 126287.

[26] 徐新河, 吴夏, 肖绍球, 等. 磁电超材料折射率特性分析[J]. 物

理学报, 2013, 62(8): 084101. Xu X H, Wu X, Xiao S Q, et al. Analysis of refractive index characteristics for magnetoelectric metamaterials[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(8): 084101.

A Terahertz Filter/Sensor Design Based on Vanadium Dioxide and Dirac Semimetals

Zhang Lu, Chen Zhe[°], Sun Chaoyi, Zhao Yuyuan, Sun Huayan, Xu Yongping, Huang Zeyu

School of Information Science and Engineering, Yunnan University, Kunming 650500, Yunnan, China

Abstract

Objective With the continuous advancement of terahertz technology, its applications in wireless communication, medical imaging, and security screening are expanding. Metasurfaces are widely used in terahertz device designs due to their effective modulation properties for terahertz waves. Traditional metallic materials fail to achieve active tuning of terahertz devices. Therefore, the design of terahertz devices with multifunctionality using tunable materials such as vanadium dioxide and Dirac semimetals has become increasingly attractive. In this work, we propose a metasurface with configurable functions based on Dirac semi-metallic mirror-symmetric double-opening rings. By utilizing the phase transition property of the vanadium dioxide, we have realized the switching of the filter and sensor functions in a single device structure. The results not only demonstrate the possibility of implementing the multifunctional metasurface design in the terahertz band but also can promote the application of terahertz technology in the future.

Methods In this study, a metasurface terahertz device with switchable sensor and filter functions was designed by utilizing the Dirac semimetal and vanadium dioxide. When the vanadium dioxide was transformed from the insulating state to the metallic state, the structure could operate as a sensor and a filter, respectively. By using the frequency-domain finite-element method (FEM) based on the commercial software CST Microwave Studio, the performance of the designed device was simulated. The transmission spectra in both functional modes were studied. Based on the three-dimensional electromagnetic simulations, the analysis of the physical mechanism of the device was carried out through the resonance characteristics and the electric field distributions. Moreover, the sensitivity of the device used as a sensor was investigated through simulation by changing the samples with different refractive indices.

Results and Discussions By changing the ambient temperature, the vanadium dioxide in the designed device can be transformed from the insulating state to the metallic state, so that the device works in sensor and filter mode, respectively. When the vanadium dioxide is in the insulating state, the device is in the sensor mode, and it achieves sharp transmission dips (Fig. 3). We explain the resonance principle through the transmission spectrum and the electric field distributions (Figs. 4-6). In addition, the resonance can be enhanced as the parameter d increases (Fig. 7), simultaneously causing a change in the Q value at each resonance point. As d increases, the Q value of p3 increases, while other resonance points decrease (Fig. 8). Moreover, the Fermi energy level also influences the resonant frequency and resonant intensity of the sensor (Fig. 9). Simulations show that the sensitivity can be increased with the increase in the sample thickness. When the sample thickness is 10 µm, the sensitivity is 106 GHz/RIU, and when the sample thickness is increased to 45 µm, the sensitivity reaches a saturation value of 226 GHz/RIU (Fig. 14). Moreover, the effect of the distance between the sample and the metasurface on the sensitivity was explored when the sample thickness was fixed at 10 μ m. The results show that as the distance increases, the sensitivity increases and reaches a maximum value of 130 GHz/RIU (Fig. 15). When the vanadium dioxide is in the metallic state, the device turns out into the bandpass filter mode. It operates with the insertion loss of 1.3 dB at the center frequency of 0.84 THz while the return loss is 12.7 dB (Fig. 16). The resonance mechanism of the filter was discussed through the transmission curves and electric field distributions. The top vanadium dioxide layer can prevent the terahertz waves from entering the metasurface, thereby suppressing the electric field intensity of the resonance rings (Figs. 17-19). Furthermore, the center frequency can be tuned by adjusting the length of the parameter d(Fig. 20).

Conclusions A terahertz metasurface based on vanadium dioxide and Dirac semimetal is proposed, which can switch between two functions by adjusting the conductivity of vanadium dioxide. When vanadium dioxide is in the insulating

state, the metasurface is a terahertz sensor, and the sensitivity of the sensor is related to the thickness of the sample and the distance between the sample and the sensor. When the vanadium dioxide is in the metallic state, the metasurface is a terahertz bandpass filter, which has a center frequency of 0.84 THz. The insertion loss and return loss at the center frequency are 1.3 dB and 12.7 dB, respectively. The resonance principle is investigated by analyzing the electric field distributions of this metasurface. This work demonstrates the possibility of implementing the multifunctional metasurface design in the terahertz band. The structure proposed in this paper has potential applications in future terahertz sensor, filter, and multifunctional device designs.

Key words optical device; terahertz; metasurface; multifunction; Dirac semimetal; vanadium dioxide