

文章编号: 1005-5630(2023)06-0008-06

DOI: 10.3969/j.issn.1005-5630.202302130017

太赫兹超材料传感器双开口针尖化设计

孙 璨, 吴 旭, 吴 静, 李嘉伟, 刘文莉, 梁 平

(上海理工大学 光电信息与计算机工程学院, 上海 200093)

摘要: 为了更深入地研究如何提高太赫兹超材料的品质因子, 从而提高超材料传感器的检测灵敏度, 对太赫兹超材料传感器结构进行了针尖化设计。以双开口方形环为例, 对其双开口狭缝进行双针尖结构设计, 通过理论仿真研究双侧开口针尖角度对太赫兹超材料传感器的共振频率、电流分布、共振峰半峰宽的影响。进一步根据公式计算出品质因子 Q 值, 分析双针尖设计对双开口方形环检测灵敏度的增强效果。仿真结果表明, 针尖角度为 150° 时, 传感器的 Q 值可提升至未针尖化模型的 5 倍。所提出的针尖化设计也可适用于其他谐振器单元结构, 将其引入现有的太赫兹超材料传感器设计中, 将有助于进一步提高传感器检测灵敏度。

关键词: 太赫兹; 超材料; 针尖化; 传感器

中图分类号: O 433 **文献标志码:** A

Design of double opening needle point for terahertz metamaterial sensor

SUN Can, WU Xu, WU Jing, LI Jiawei, LIU Wenli, LIANG Ping

(School of Optical-Electrical and Computer Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: In order to further study how to improve the quality factor of terahertz metamaterials and improve the detection sensitivity of metamaterials, we carried out the needle point design of a terahertz metamaterials sensor structure. In this paper, taking the double-opening square ring as an example, the double opening slit was designed with a double-needle structure. Through theoretical simulation, the influence of the angle of the double-sided open needle point on the resonant frequency, current distribution, and half-peak width of the resonant peak of the terahertz metamaterial sensor were studied. Furthermore, the Q value was calculated according to the formula, and the enhancement effect of the double-needle design on the detection sensitivity of the double-open square ring was analyzed. The simulation results show that when the needle angle is 150° , the Q value of the sensor can be increased to 5 times of the model without needle pointing. The needle point design proposed in this paper can also be applied to other resonator unit structures.

收稿日期: 2023-02-13

基金项目: 上海市国内科技合作重点项目(21015800200); 国家自然科学基金(61805140)

第一作者: 孙 璨(1997—), 女, 硕士研究生, 研究方向为太赫兹生物医学。E-mail: sun1785669@163.com

通信作者: 吴 旭(1988—), 女, 讲师, 研究方向为太赫兹生物医学。E-mail: wuxu@usst.edu.cn

Introducing it into the existing terahertz metamaterial sensor design will help to further improve the sensor detection sensitivity.

Keywords: terahertz; metamaterial; needle point; sensor

引 言

太赫兹(terahertz, THz)波通常是指频率在0.1~10 THz范围^[1],波段在0.01~3 mm范围的电磁波^[2-4]。由于太赫兹波的光子能量低,只有1 meV^[5],远远小于细胞电离时所需要的能量^[6],在检测时不会对人体和生物组织造成伤害^[7-8],因此太赫兹波可应用于生物医学检测领域,如人体检测、医学成像^[9-11]、疾病标志物检测等。目前,已经有实验直接通过太赫兹波测得了(纯品状态下)疾病标记物的太赫兹特征光谱^[12-13]。但由于实际的组织、血液等生物样本中生物标志物的质量仅在 μg 甚至 ng 量级,而传统太赫兹波检测灵敏度通常在 mg 量级,因此很难通过太赫兹波直接检测出实际人体样品中的生物标志物^[14]。太赫兹超材料是一种人工合成的,具有特殊物理特性的新材料,可以通过局部电场增强有效提高检测灵敏度^[15-18]。除此之外,超材料还具有易于制备,易于处理,易于选择的优势^[19],所以太赫兹超材料被越来越多地加以研究和应用^[19-22]。

具有高品质因子(Q 因子)是超材料应用于生物医学检测的必备条件^[23-27]。因此,近年来太赫兹超材料的研究重点在于提升材料的 Q 值。Koshelev等^[28]研究得到基于连续体中的束缚态(bound states in the continuum, BIC)原理构建的超材料,理论上可达到超高 Q 值。Gupta等^[29]通过将反对称磁偶极子的相互作用与镜像不对称Fano谐振器耦合,在2D平面超表面上产生强烈的环形共振,突破了传统Fano谐振器的 Q 值。Yuan等^[30]提出了一种全介电不对称超表面结构,在制备的全介电超表面上证明了超过三阶的光可致发光增强,获得了超高的 Q 值。Liang等^[31]通过超辐射和亚辐射之间的破坏干扰,激发石墨烯材料等离子体诱导透明(plasmonic induced transparency, PIT),调节单一石墨烯结构的费米能级和石墨烯的载流子迁移

率,有效地调节这种PIT超材料的 Q 值。Bazgir等^[32]基于纳米孔径谐振器构建超材料,利用石墨烯-SiN多层双曲材料结构增加吸收,提高器件的 Q 值。然而,以上所提到的设计结构较复杂,虽然理论仿真 Q 值较高,但现有加工的误差会改变超材料的实际尺寸,导致实际测试 Q 值往往达不到理论效果。

本文提出在不改变原有几何形状的基础上,通过改变几何形状缺口处的针尖角度来提高超材料的 Q 值。以双开口方形环构建的太赫兹超材料传感器为例,通过结构仿真和理论分析,改变开口处针尖角度的大小,分析双针尖角度的变化对共振频率处的电流、吸收曲线及 Q 值的影响,从而研究传感器在谐振点处的谐振机理和结构参数对谐振频率的影响。该研究结果可推广至其他谐振器单元结构,进一步提高谐振器品质因子,从而可以提高现有成熟的超材料的生物检测灵敏度。

1 设计原理

本文以双开口方形环双针尖结构为例,设计太赫兹超材料传感器。此类超材料的原理是,当入射电磁波作用在超材料表面,由于其非对称性,沿着电场方向为轴线的左右部分会产生电势差,诱导电容电感(inductive-capacitive, LC)效应,生成振荡电流。在谐振器单元中,开口处可看作一个电容,其余部分可以看作一个电感。整个结构从等效电路模型角度来看就构成了LC振荡电路,其共振频率可以表示为

$$\omega_{LC} = (LC)^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{L} \sqrt{\varepsilon(0) \int_0^v \varepsilon(v) E(v) dv}} \quad (1)$$

式中: L 为电感; C 为电容; ω_{LC} 为共振频率; $E(v)$ 为间隙处电场强度; $\varepsilon(0)$ 为间隙处初始介电常数; $\varepsilon(v)$ 为不同电场强度下的介电常数; v 为电场强度。研究发现超材料传感器的几何参数会

引起电感 L 发生改变。

由于超材料传感器是高频谐振，可以认为它是等离子体共振，所以谐振频率可表示为

$$\omega_d \propto 1/(2D\epsilon_{\text{eff}}^{1/2}) \quad (2)$$

式中： ϵ_{eff} 为周围的平均介电常数； D 主要与超材料传感器的几何参数相关。

共振频率由开口谐振环结构参数决定。因此，通过调节开口谐振环结构参数可以控制超材料在太赫兹波段任意频率实现共振。当针尖角度发生改变时，谐振环开口处几何参数发生变化，从而导致超材料传感器的谐振频率发生变化。

2 结构设计

设计了一种双开口方形环双侧针尖结构的太赫兹超材料生物传感器，该双针尖结构传感器由 2 部分组成，其三维结构示意图如图 1(a) 所示。整个超材料传感器是由无数个相同结构的谐振单元和一层聚四氟乙烯基底组成。超材料的谐振单元为铜双开口方形环。薄铜层的厚度为 50 nm，基底厚度 $d = 2 \mu\text{m}$ 。仿真时基底的相对介电常数设置为 3.9，双开口方形环的材料设置为理想电

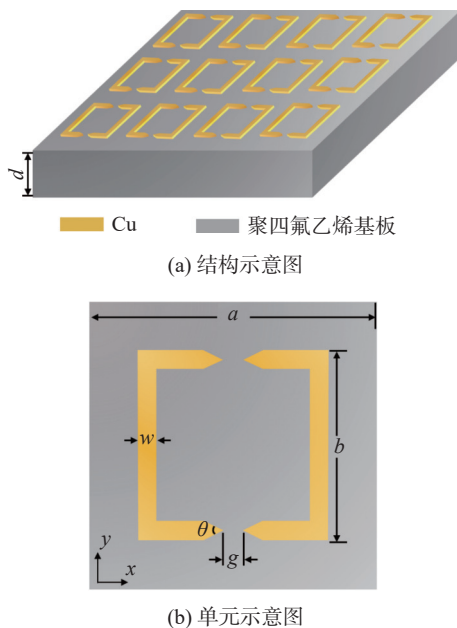


图 1 双开口方形环双侧针尖结构超材料

Fig. 1 The bimaterial biosensor with double open square ring and double needle tip structure

导体。超材料生物传感器的每个谐振单元如图 1(b) 所示， a 为单元结构在 x 轴和 y 轴的周期长度； b ， w 分别为金属条长度和宽度； g 为开口宽度。具体参数设置为 $a = 15 \mu\text{m}$ ， $b = 10 \mu\text{m}$ ， $w = 2 \mu\text{m}$ ， $g = 1 \mu\text{m}$ 。 θ 为针尖角度，通过对参数 θ 的调节，实现对双开口方形环双侧针尖角度大小的调控。

3 仿真结果及分析

3.1 共振频率处电流分布

首先，本文对不同双侧针尖角度下，双开口方形环超材料传感器的电流分布进行了研究，具体如图 2 所示。由图 2(a)~(f) 的电流分布可知，双开口方形环在开口处附近的电场强度最强，共振频率最高。分析其原因，当太赫兹波垂

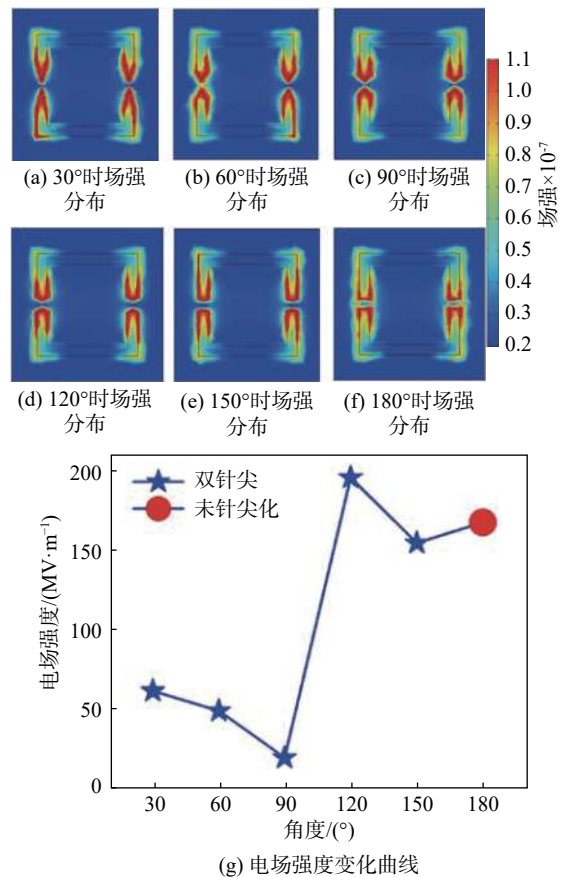


图 2 不同针尖角度对应的共振频率表面电场强度分布图

Fig. 2 The surface electric field intensity distribution of resonance frequency corresponding to different tip angles

直入射到传感器的结构表面时, 传感器表面形成电场耦合, 在金属方形环结构的开口处会聚集大量的正负电荷, 使金属开口环处的电场增强, 从而在开口处形成电流。基于等效电容和电感原理, 电流增大, 电感也会随之增大, 使得开口处电场变强, 传感器的共振频率也会随之增高。

保持方形环的各个结构参数一致, 将方形金属环的开口距离始终控制为 $1 \mu\text{m}$, 仅改变双侧的针尖角度。图 2(a)~(e) 分别是双侧开口处为 30° , 60° , 90° , 120° , 150° 针尖化时单个金属方形环结构的电场强度分布图, 图 2(f) 为初始未针尖化模型的电流分布图。由图 2(a)~(f) 电场强度分布可知, 方形金属环的电场效应在开口处最强, 结果表明针尖化并没有改变电流分布最强的位置。图 2(g) 所示为, 随着针尖角度的变化, 开口环处的电场强度变化情况。由曲线可知: 在针尖角度 $30^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ 时, 随着针尖角度的增大, 超材料传感器的电场强度减小; 针尖角度 $90^\circ < \theta \leq 150^\circ$ 时, 随着针尖角度的增大, 超材料传感器的电场强度先增大后减小, 且当开口处针尖角度为 120° 时, 超材料传感器的电场强度最大。

3.2 谐振频率曲线分布

通过谐振频率曲线进一步分析双针尖角度的变化对谐振频率的影响。图 3 为双侧开口处角度为 30° , 60° , 90° , 120° , 150° 以及 180° (未针尖化) 时, 各角度的谐振频率曲线光谱图。为了更清楚地分析谐振频率的移动, 对光谱进行了归一化处理。从图 3 中黑色曲线能够观察到, 当针尖角度为 30° 时, 该双开口太赫兹超材料传感器的共振响应频率位于 8.27 THz , 谐振频率最大; 随着针尖角度的增大, 谐振频点持续向低频移动。当针尖角度为 180° (未针尖化) 时, 该双开口太赫兹超材料传感器的共振响应频率位于 7.81 THz 。由此得到, 在开口间距不变条件下, 将双侧开口进行针尖化时, 传感器的共振响应频率位于 $7.81 \sim 8.27 \text{ THz}$ 之间。综上所述, 随着开口方形环开口处针尖角度增大, 太赫兹超材料传感器的工作频率逐渐减小。

为了更清楚地观察谐振频率随针尖角度的变化, 研究了针尖角度与谐振频率的关系, 结果如图 4 所示。随着针尖角度的增大, 谐振频率逐渐

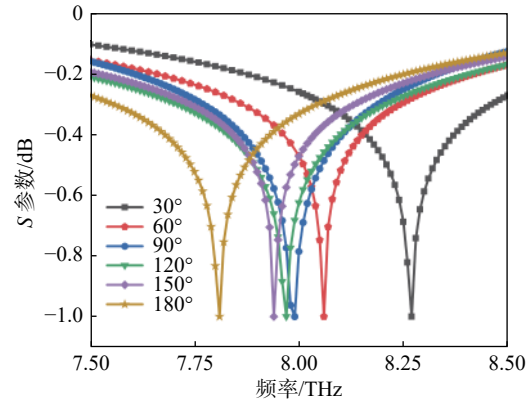


图 3 不同针尖角度对应的谐振频率曲线

Fig. 3 Resonant frequency curve corresponding to different needle angle

递减, 并且针尖角度与谐振频率的变化呈非线性关系。当针尖角度从 30° 增大到 90° , 相应的谐振频率发生红移, 频移幅度为 0.28 THz 。当针尖角度从 90° 增大到 180° (未针尖化), 谐振频率的红移幅度为 0.18 THz 。由此可知, 相对于钝角间的变化, 针尖角度在锐角间的变化对谐振频率的影响更为明显。原因可能是在锐角间角度改变时, 针尖处与空气的接触面积变化较大, 在钝角间角度改变时, 针尖处与空气的接触面积变化较小。

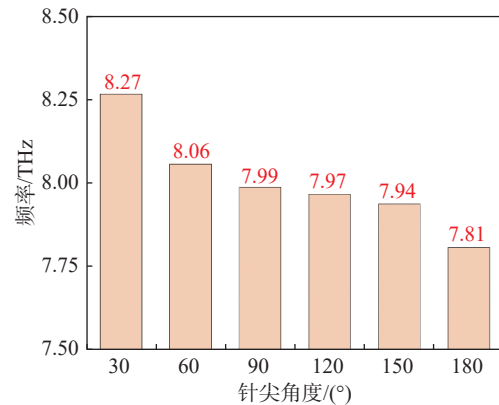


图 4 针尖角度和和谐振频率位置变化曲线

Fig. 4 Position change curve of needle tip angle and harmonic frequency

根据上述结果, 可以认为: 针尖化可以有效增加开口类传感器共振峰的响应频率, 并且针尖角度越尖锐, 响应频率向高频移动的幅度越大。

3.3 超材料品质因子 Q

品质因子 Q 表示振子的共振频率相对于带

宽的大小,在一定共振频率下,可以表示为系统储存的能量和每个周期外界提供的能量之比。因此, Q 值可用来表征谐振器的光学共振性质, Q 值越大,表明损耗越小,共振峰越窄,测量光谱的变化越容易被区分。进一步分析针尖角度对超材料传感器灵敏度的影响,根据式(3)计算得到不同针尖角度下的 Q 值,结果如表 1 所示。

表 1 不同双针尖角度下的 Q 值计算
Tab. 1 Calculation of Q factor under different double needle angles

角度/(°)	半峰宽/ μm	Q 值
30	0.61	51.69
60	0.13	60.00
90	0.22	36.32
120	0.19	41.95
150	0.13	61.08
180	0.64	12.20

谐振器的 Q 值可表示为

$$Q = \frac{f_0}{X_{\text{FWHM}}} \quad (3)$$

式中: f_0 为共振频率; X_{FWHM} 为半峰全宽。

从表 1 可以看到, 双侧开口针尖化可以有效提高开口类传感器共振峰的 Q 值, 由计算结果可以得到针尖角度为 150° 时 Q 值最高, 约为未针尖化模型的 5 倍。

4 结 论

本文设计了双开口方形环双侧针尖超材料传感器模型, 通过改变针尖角度的大小, 分析了针尖角度的变化对共振频率处的电流影响以及吸收曲线的变化, 研究了双开口方形环双侧针尖角度变化对电场强度和共振频率的影响。结果发现: 随着针尖角度的增大, 传感器的共振频率逐渐减小, 半峰宽和 Q 值随针尖角度变化而变化, 且在针尖角度为 150° 时, 半峰宽最小, Q 值最高, 从而确定最优针尖角度为 150° , 此时灵敏度达到最高, 约为未针尖化模型的 5 倍。开口针尖化设计提升了太赫兹超材料的传感灵敏性。该研究为提高太赫兹超材料灵敏度提供了新的思路。

参考文献:

- [1] 陈宸, 吴芳龙, 周红梅. 太赫兹光谱和成像技术在口腔医学中应用的研究进展 [J]. 四川大学学报 (医学版), 2023, 54(01): 203–207.
- [2] KEISER G R, KLARSKOV P. Terahertz field confinement in nonlinear metamaterials and near-field imaging[J]. *Photonics*, 2019, 6(1): 22.
- [3] JIANG Y Y, LI G M, GE H Y, et al. Machine learning and application in Terahertz technology: a review on achievements and future challenges[J]. *IEEE Access*, 2022, 10: 53761 – 53776.
- [4] ZHAO X Y, WANG G Y, MENG Q H, et al. Terahertz transmission characteristics of magneto-fluidic carrier liquid based on microfluidic technology[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2022, 42(10): 3012 – 3016.
- [5] JIN Z M, PENG Y, FANG Y Q, et al. Photoinduced large polaron transport and dynamics in organic-inorganic hybrid lead halide perovskite with Terahertz probes[J]. *Light: Science & Applications*, 2022, 11(1): 209.
- [6] YANG J, QI L M, WU L Q, et al. Research progress of Terahertz metamaterial biosensors[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2021, 41(6): 1669 – 1677.
- [7] BAI S S, YANG H Y. New proposals for application of Terahertz imaging technique in chinese medicine[J]. *Chinese Journal of Integrative Medicine*, 2022, 28(4): 366 – 373.
- [8] ZHU Y M, SHI C J, WU X, et al. Terahertz spectroscopy algorithms for biomedical detection[J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(1): 0130001.
- [9] LIU S J, YU F, LI K, et al. The application of Terahertz spectroscopy and imaging in biomedicine[J]. *Physics*, 2013, 42(11): 788 – 793.
- [10] DABOUI V, CHANCERELLE Y, CROUZIER D, et al. What's new in biomedical applications for Terahertz (THz) technology[J]. *Medecine Sciences*, 2009, 25(8-9): 739 – 743.
- [11] GRIC T, SOKOLOVSKI S G, ALEKSEEV A G, et al. The discrete analysis of the tissue biopsy images with metamaterial formalization: identifying tumor locus[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2021, 27(5): 4700608.
- [12] 王莹莹, 汪丽平, 李恬. 同型半胱氨酸的太赫兹特征吸收光谱分析 [J]. 光学学报, 2019, 39(10):

- 350–354.
- [13] CUI G Q, LIANG J F, ZHAO H W, et al. Research on Terahertz properties of rat brain tissue sections during dehydration[C]//Proceedings of SPIE 10623, 2017 International Conference on Optical Instruments and Technology: IRMMW-THz Technologies and Applications. Beijing: SPIE, 2017: 106230A.
- [14] GU H Y, SHI C J, WU X, et al. Molecular methylation detection based on Terahertz metamaterial technology[J]. *Analyst*, 2020, 145(20): 6705 – 6712.
- [15] PAL S, PRAJAPATI Y K, SAINI J P, et al. Sensitivity enhancement of metamaterial-based surface plasmon resonance biosensor for near infrared[J]. *Optica Applicata*, 2016, 46(1): 131 – 143.
- [16] ELEFThERIADES G V, SIDDIQUI O, IYER A K. Transmission line models for negative refractive index media and associated implementations without excess resonators[J]. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, 2003, 13(2): 51 – 53.
- [17] WU J W, YUAN T T, LIU J J, et al. Terahertz metamaterial sensor with ultra-high sensitivity and tunability based on photosensitive semiconductor GaAs[J]. *IEEE Sensors Journal*, 2022, 22(16): 15961 – 15966.
- [18] LU X J, GE H Y, JIANG Y Y, et al. Design and analysis of a dual-band THz metamaterial sensor with high refractive index sensitivity[J]. *Frontiers in Physics*, 2022, 10: 973033.
- [19] LIU K, ZHANG R, LIU Y, et al. Gold nanoparticle enhanced detection of EGFR with a Terahertz metamaterial biosensor[J]. *Biomedical Optics Express*, 2021, 12(3): 1559 – 1567.
- [20] DENG X X, SHEN Y C, LIU B W, et al. Terahertz metamaterial sensor for sensitive detection of citrate salt solutions[J]. *Biosensors*, 2022, 12(6): 408.
- [21] 马佳路, 唐靖超, 王凯程. 一种基于 THz-TDS 技术用于食品添加剂高灵敏度区分的超材料传感器 [J]. *红外与毫米波学报*, 2022, 41(03): 581–588.
- [22] YANG J H, LIN Y S. Design of tunable Terahertz metamaterial sensor with single- and dual-resonance characteristic[J]. *Nanomaterials*, 2021, 11(9): 2212.
- [23] ZHANG C H, LIANG L J, DING L, et al. Label-free measurements on cell apoptosis using a Terahertz metamaterial-based biosensor[J]. *Applied Physics Letters*, 2016, 108(24): 241105.
- [24] GRIC T, SOKOLOVSKI S G, NAVOLOKIN N, et al. Metamaterial formalism approach for advancing the recognition of glioma areas in brain tissue biopsies[J]. *Optical Materials Express*, 2020, 10(7): 1607 – 1615.
- [25] XIAO M Y, LANG T T, REN Z, et al. Flexible graphene-based metamaterial sensor for highly sensitive detection of bovine serum albumin[J]. *Applied Optics*, 2022, 61(35): 10574 – 10581.
- [26] PENG Y, HUANG J L, LUO J, et al. Three-step one-way model in Terahertz biomedical detection[J]. *Photonix*, 2021, 2(1): 12.
- [27] MA L, CHEN D X, ZHENG W X, et al. Thermally tunable high-Q metamaterial and sensing application based on liquid metals[J]. *Optics Express*, 2021, 29(4): 6069 – 6079.
- [28] KOSHELEV K, BOGDANOV A, KIVSHAR Y. Meta-optics and bound states in the continuum[J]. *Science Bulletin*, 2019, 64(12): 836 – 842.
- [29] GUPTA M, SINGH R. Toroidal versus fano resonances in high Q planar THz metamaterials[J]. *Advanced Optical Materials*, 2016, 4(12): 2119 – 2125.
- [30] YUAN S, QIU X Z, CUI C C, et al. Strong photoluminescence enhancement in all-dielectric fano metasurface with high quality factor[J]. *ACS Nano*, 2017, 11(11): 10704 – 10711.
- [31] LIANG D H, CHEN T. Optical modulated graphene metamaterial based on plasmon-induced transparency in the Terahertz band: application for sensing[J]. *Diamond and Related Materials*, 2023, 131: 109613.
- [32] BAZGIR M, RAZAVI Z, EBRAHIMI S, et al. Highly Q-factor refractive index sensor based on graphene stack[J]. *Optik*, 2022, 268: 169811.

(编辑: 李晓莉)