Toroidal耦合Anapole模式的新型太赫茲超表面 传感器研究

刘晓阳

上海理工大学光电信息与计算机工程学院,上海

收稿日期: 2025年4月30日; 录用日期: 2025年5月23日; 发布日期: 2025年5月30日

摘要

文章设计了一种基于Toroidal和Anapole模式耦合的太赫兹超表面传感器,通过优化金属谐振器结构,实现了高效电磁场局域化和高灵敏度检测。该传感器由对称开口环和金属条带组成,在高阻硅衬底上激发双谐振模式。仿真分析表明,在0.73 THz和0.89 THz处分别观察到显著的Toroidal和Anapole模式共振,其中环偶极矩与电偶极矩的相位调控是关键物理机制。通过折射率灵敏度测试,两种模式分别达到260 GHz/RIU和250 GHz/RIU的灵敏度,且频移响应高度同步,展现了其在多模式协同传感中的应用潜力。研究结果为太赫兹波段的高性能超表面传感器设计提供了新思路,尤其在物质检测领域具有重要价值。

关键词

太赫兹,开口环,超表面,传感器

Research on a Novel Terahertz Metasurface Sensor Based on Toroidal-Coupled Anapole Mode

Xiaoyang Liu

School of Optical-Electrical and Computer Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Apr. 30th, 2025; accepted: May 23rd, 2025; published: May 30th, 2025

Abstract

This study presents a terahertz metasurface sensor based on the coupling of Toroidal and Anapole

modes, achieving highly localized electromagnetic fields and high-sensitivity detection through optimized metal resonator structures. The sensor consists of symmetrically arranged split rings and metal strips fabricated on a high-resistivity silicon substrate, enabling dual-mode resonance. Simulation results reveal distinct Toroidal and Anapole mode resonances at 0.73 THz and 0.89 THz, respectively, with the phase modulation between toroidal and electric dipole moments serving as the key physical mechanism. Refractive index sensitivity tests demonstrate values of 260 GHz/RIU and 250 GHz/RIU for the two modes, with highly synchronized frequency shifts, highlighting their potential for multi-mode cooperative sensing. This work provides a novel approach for designing high-performance terahertz metasurface sensors, particularly for applications in material detection.

Keywords

Terahertz, Split Ring, Metasurface, Senor

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc. This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0). http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/

1. 引言

超表面作为超材料的二维形态,近年来在光电传感领域展现出巨大的应用潜力。这种由亚波长尺度 (通常小于工作波长)的人工单元结构周期性排列而成的平面材料[1],通过精心设计的单元构型和排列方 式,能够实现对电磁波前相位、振幅和偏振态的灵活调控。与传统材料相比,超表面最显著的特征在于 其能够产生自然界材料所不具备的奇异电磁响应特性[2]-[4],如异常折射、光学隐身和偏振转换等。在传 感应用方面,超表面展现出三大独特优势:首先,其亚波长结构产生的局域场增强效应可将电磁能量高 度集中在纳米尺度范围内,极大增强了光与物质的相互作用强度;其次,这种结构对外界环境折射率的 微小变化极为敏感,能够实现高精度检测;再者,得益于现代微纳加工技术的进步,超表面可以方便地 在硅基、柔性聚合物等多种衬底材料上实现规模化制备[5]-[7]。这些特性使其成为新一代高性能传感平台 的理想选择。特别是在太赫兹波段(0.1~10 THz),超表面传感器因其独特的技术优势在生物医学检测领域 获得了广泛应用。相较于传统检测方法,太赫兹超表面传感技术具有以下突出特点:检测成本低廉、灵 敏度可达分子级别、响应时间在毫秒量级、无需对被测物进行荧光标记等预处理[8][9]。目前,研究人员 已开发出基于等离子体共振、法诺共振、连续域束缚态(BIC)等多种物理机制的增强型传感结构[10][11], 通过优化结构参数和激发条件,进一步提升了传感器的品质因数和检测极限。这些进展为疾病标志物检 测、环境污染物监测等应用开辟了新途径。I型超构传感器通过优化谐振模式体积提升了灵敏度[12],而 重叠开口谐振环则利用双环形模式实现了乙醇溶液的高灵敏度检测[13]。研究人员还通过镀锗薄膜激发 准连续域束缚态(QBIC),进一步提高了传感性能[14]。特别是基于拓扑波导耦合的传感器,其品质因数 (FOM)高达 4000 RIU/mm⁻¹ [15]。在生物检测方面,免疫传感器展现出独特优势。LC 谐振模式结合 CA125 抗体技术,检测限达 0.01 U/ml [16]; 高 Q 值环形超表面更实现了 24.2 pg/ml 的寨卡病毒蛋白检测[17]。 未来通过优化 O 值和 FOM,有望进一步提升检测性能。

Toroidal 模式是一种特殊的电磁谐振模式,其电磁场分布呈现出独特的环形(或涡旋状)结构。与常见的电偶极矩(Electric Dipole)或磁偶极矩(Magnetic Dipole)模式不同,环形偶极模式的场分布表现为电流或磁场沿闭合环路径流动,形成环状偶极矩[18]。

Anapole 模式因电偶极与环形偶极的反向干涉而产生,在微波、太赫兹及光学波段备受关注。相较于 LC、Fano 和环形偶极等模式,该模式通过 ED 与 TD 的有效耦合,能显著增强局域场并压缩线宽,展现 出更优的传感性能。但其非辐射特性导致远场不可见[19],限制了实际应用。

本研究通过理论设计和数值仿真,系统研究了一种基于 Toroidal 和 Anapole 模式耦合的新型太赫兹 超表面传感器。传感器采用高阻硅衬底上制备的金谐振器阵列结构,通过优化开口环和金属条带的几何 参数,成功实现了 0.73 THz (Toroidal 模式)和 0.89 THz (Anapole 模式)的双谐振特性。多极子散射分析表 明,Toroidal 模式由环偶极矩主导,而 Anapole 模式则源于电偶极矩与环偶极矩的反向干涉。通过结构分 解研究发现,开口环子结构在 0.74 THz 处表现出强 Toroidal 共振,而金属条带子结构在 0.86 THz 处展现 出更强的场局域能力。折射率灵敏度测试显示,两种模式分别达到 260 GHz/RIU 和 250 GHz/RIU 的高灵 敏度,且频移响应具有高度同步性(R² = 0.99)。

2. 双模式耦合的太赫兹超表面传感器结构设计

构想的超表面结构的一个单元如图 1 所示,在厚度为 500 微米的高阻硅衬底上制备金(Au)谐振器,高阻硅衬底的折射率为 4.5,金的电导率 σ 为 4.56 × 10⁷,共振结构由四个相同规格的开口环(SRRs)和一个金属条带组成,各项几何参数如图 1 所示,其中 P = 96 um, Ro = 15 um, Ri = 9 um, L = 60 um, w = 10 um, d = g = 3 um。



Figure 1. Schematic diagram of a metasurface unit cell 图 1. 超表面结构单元示意图



Figure 2. Schematic of metasurface excitation modes: (a) Toroidal mode; (b) Anapole mode 图 2. 超表面激发模式示意图: (a) Toroidal 模式; (b) Anapole 模式

如图 2(a)、图 2(b)所示,当太赫兹光束电场平行于金属棒方向的偏振方向入射时,沿着两个 SRR 的 表面电流以相反的自旋被激发,从而构建了一个首尾相接的磁场并将其限制在单胞中,如紫色箭头所示。

这样的回线磁场导致环偶极子矢量产生,如图中的绿色箭头所示。环偶极矩不能简单地被认为是电多极 或磁多极的函数,而它们是由沿着环面子午线流动的电流产生的。当环偶极矩与电偶极矩同向时,激发 Toroidal 模式;当环偶极矩与电偶极矩反向干涉时,激发 Anapole 模式。

为了具体理解提出的超表面的共振机制,基于电荷和电流密度的泰勒公式对散射功率(*I*)的多极展开进行计算,包括电四极、磁四极以及环形偶极矩的贡献[18]:

$$I = \frac{2\omega^4}{3c^3} \left| \boldsymbol{P} \right|^2 + \frac{2\omega^4}{3c^3} \left| \boldsymbol{M} \right|^2 + \frac{4\omega^5}{3c^4} \left| \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{T} \right|^2 + \frac{2\omega^6}{3c^5} \left| \boldsymbol{T} \right|^2 + \frac{\omega^6}{5c^5} \Sigma \left| Q_{\alpha\beta} \right|^2 + \frac{\omega^6}{20c^5} \Sigma \left| \boldsymbol{M}_{\alpha\beta} \right|^2 + O\left(\frac{1}{c^5}\right)$$
(1)

电偶极矩(Electric Dipole):

$$\boldsymbol{P} = \frac{1}{i\omega} \int \mathbf{j} \, \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \tag{2}$$

磁偶极矩:

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2c} \int (\mathbf{r} \times \mathbf{j}) d^3 \boldsymbol{r}$$
(3)

环偶极矩:

$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{10c} \int \left[\left(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j} \right) \mathbf{r} - 2r^2 \mathbf{j} \right] d^3 r$$
(4)

电四极:

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{i\omega} \int \left[r_{\alpha} j_{\beta} + r_{\beta} j_{\alpha} - \frac{2}{3} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}) \right] \mathrm{d}^{3}r$$
(5)

磁四极:

$$M_{\alpha\beta} = \frac{1}{3c} \int \left[\left(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j} \right)_{\alpha} r_{\beta} + \left(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j} \right)_{\beta} r_{\alpha} \right] \mathrm{d}^{3}r$$
(6)

其中j和r分别为电流密度和位移矢量。

当 Toroidal 模式激发时, **T** 的散射功率在 I 中占主导部分, 当 Anapole 模式激发时, $|\varphi(\mathbf{T}) - \varphi(\mathbf{P})| = \pi$, $\varphi(\mathbf{T}) \Rightarrow \varphi(\mathbf{P})$ 分别为环偶极矩和电偶极矩的相位。

3. 仿真结果分析

本文采用 COMSOL Multiphysics 5.6 电磁仿真软件对超表面结构在太赫兹波段的电磁响应特性进行 全波数值模拟。在仿真建模过程中,首先通过参数化扫描优化确定了超表面单元的最优几何尺寸,包括 金属谐振结构的长度、宽度、厚度以及介质衬底的参数。为准确模拟超表面阵列的周期性特征,在 x 和 y 方向设置了 Floquet 周期性边界条件,并在 z 方向(波传播方向)的模型顶部和底部添加了 15 层的完美匹 配层(PML)以消除边界反射对仿真结果的影响。

在激励设置方面,采用平面波端口激励,使太赫兹波以垂直入射方式照射超表面,其中电场极化方向平行于金属棒的长轴方向。为精确分析超表面的多极子散射特性,通过内置的场分解功能计算了包括电偶极子(ED)、磁偶极子(MD)、环形偶极子(TD)等在内的多极子散射功率。仿真过程中采用自适应网格

剖分技术,在金属 - 介质界面等场强梯度变化剧烈区域进行局部网格加密,确保计算结果的收敛性和准确性。所有仿真计算均在频率域求解器中进行,频率扫描范围为 0.4~1.4 THz,步长为 0.01 THz,以获得高分辨率的频谱响应特性。



Figure 3. (a) Metasurface transmission spectrum; (b) Multipole scattering power spectrum 图 3. (a) 超表面透射谱; (b) 多极子散射功率谱





图 3(a)、图 3(b)显示了本文提出的超表面在太赫兹波段的透射谱和多极子散射功率谱,对于散射功 率谱,其中每条功率谱线与前文公式计算的物理量一一对应,直接观察谱线得到结果:太赫兹波分别在 f₁ = 0.73 THz 和 f₂ = 0.89 THz 处产生了透射谷。通过多极子散射功率对两处透射谷的共振模式进行分析, 如图 2(b)所示,在f₁ = 0.73 THz 处,透射率达到最低的同时,环偶极矩 T 的强度贡献最大,是 M 的 10 倍,甚至是 P 的 100 倍,显然,在此处的散射功率由环响应占主导,而其他多极子辐射的功率被显著抑 制,说明大部分太赫兹波能量在此处激发 Toroidal 模式共振,在f₂ = 0.89THz 处,透射率达到最低的同 时,环偶极矩 T 的强度显著增强,而电偶极矩 P 的强度有所降低,但与f₁处的共振模式不同,此处激发 Anapole 模式,通过计算 *P* 和 *T* 的相位可以得出两处频点对应的 *P* 与 *T* 的相位差,如图 4 所示。当 $f_1 = 0.73$ THz, $|\varphi(T) - \varphi(P)| = 0$,此时电偶极矩与环偶极矩同向,从相位角度验证了 Toroidal 模式的激发; $f_2 = 0.89$ THz 时, $|\varphi(T) - \varphi(P)| = \pi$,此时电偶极矩与环偶极矩反向产生干涉,产生 Anapole 模式,鉴于此 处电偶极矩与环偶极矩的强度有较大差距,可判断为弱 Anapole 模式。

为进一步研究传感器产生共振的机制,将超表面结构分解为基本两种结构:成对称分布的开口环和 单根金属条带结构,分别计算太赫兹波照射时产生的透射谱与多极子散射功率谱。

如图 5 所示,对于 4 个对称排列的开口环超表面子结构,电场沿垂直金属环开口偏振方向的太赫兹 波垂直设在超表面上,沿四个金属环的表面激发表面电流,两组开口环产生的环偶极矩在 y 方向上进行 叠加,产生高强度的 Toroidal 模式共振。通过仿真计算传感器的透射率,如图 6(a)所示,在 f = 0.74 THz 处,透射率最低下降到 0.04 处,说明了传感器在该频点处极强的能量耦合,进一步研究多极子的散射功率;如图 6(b)所示,很明显在 f = 0.74 THz 处,环偶极矩 T 占主导地位,比电偶极矩 P 的强度高出两个 数量级,也显著高于其他分量,验证了该处产生 Toroidal 模式共振的推测。



Figure 5. Schematic of the metasurface subunit: split-ring resonator





图 6. (a) 开口环结构太赫兹透射谱; (b) 多极子散射功率谱

如图 7 所示,对于单金属条带的超表面子结构,电场沿平行于金属棒偏振方向的太赫兹波垂直设在 超表面上,沿四个金属环的表面激发表面电流,两组开口环产生的环偶极矩在 y 方向上进行叠加,产生 高强度的 Toroidal 模式共振。通过仿真计算传感器的透射率,如图 8(a)所示,在*f*=0.86 THz 处,透射率 最低下降到 0.006 处,远低于开口环结构的下限,说明了传感器在该频点处能量耦合强于开口环产生的 Toroidal 模式,进一步研究多极子的散射功率;如图 8(b)所示,很明显在 0.86 THz 处,环偶极矩 T 占主 导地位,比电偶极矩 P 的强度高出两个数量级,也显著高于其他分量,说明此处即使没有明显产生环形 电流的结构,仍能产生 Toroidal 模式的共振。



Figure 7. Schematic of the single metallic strip structure 图 7. 单金属条带结构示意图



Figure 8. (a) Terahertz transmission spectrum of the single metallic strip structure; (b) Multipole scattering power spectrum 图 8. (a) 单金属条带结构太赫兹透射谱; (b) 多极子散射功率谱

为研究传感器的检测性能,通过在超表面上添加分析物层,模拟折射率变化对超表面响应的影响, 建立超表面传感器的灵敏度分析,根据微扰理论,透射率对分析物折射率的具体依赖性可表述如下:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_{0}} = \frac{-\int \left(\Delta\varepsilon \left|\overline{E_{0}}\right|^{2} + \Delta\mu \left|\overline{H_{0}}\right|^{2}\right) dv}{\int \left(\varepsilon \left|\overline{E_{0}}\right|^{2} + \Delta\mu \left|\overline{H_{0}}\right|^{2}\right) dv} \approx -\frac{1}{2} \frac{\left(\int_{v_{0}} \left|\overline{E_{0}}\right|^{2} + \Delta\mu \left|\overline{H_{0}}\right|^{2}\right) dv}{\int_{v_{0}} \left(\varepsilon \left|\overline{E_{0}}\right|^{2}\right) dv}$$
(7)

其中, $\Delta\omega/\omega_0$ 表示共振角频率的相对变化, E和 H分别为原始超表面系统中的电场和磁场。V 代表分析 物在超表面上的有效积分体积, $\Delta\varepsilon$ 表示分析物介电常数的变化量。通常定义折射率灵敏度 S为 $S = \Delta f/\Delta n$ (Δn 和 Δf 分别表示分析物折射率和共振频率的变化量)以表征传感器灵敏度,单位是 GHz/RIU (Refractive Index Unit)。根据公式(7),图 9(a)展示了透射率谷偏移量与分析物折射率之间的理论关系,利用仿真计算 了两种模式各自的灵敏度,对于 Toroidal 模式,当折射率从 1.1 变化到 1.5 时,累计产生 0.130 THz 的频

移,对于 Anapole 模式,累计产生 0.125 THz 的频移,图 9(b)展示了对两种模式频移数据的线性拟合,R² 高达 0.99,反映出传感器两种模式灵敏度良好的线性规律,分别计算两种模式的灵敏度,结果表明该结构的 Toroidal 模式达到 260 GHz/RIU 的灵敏度, Anapole 模式的灵敏度达到 250 GHz/RIU。两种模式的灵敏度相近,具有良好灵敏度特性的同时也有很高的频移同步性。



Figure 9. Simulated sensitivity results of the sensor: (a) Transmission spectrum; (b) Linear fitting of frequency shift 图 9. 传感器的灵敏度仿真结果: (a) 透射谱; (b) 频移两线性拟合

4. 结论

本文通过仿真研究了一种基于双模耦合的新型太赫兹超表面传感器。该传感器通过耦合 Toroidal 模和 Anapole 模,在太赫兹波段实现了高灵敏度检测,双模灵敏度分别达到 260 GHz/RIU 和 250 GHz/RIU。 两种模式的透射谷频移具有良好同步性,支持双模同步测量,适用于生物标志物等微量物质检测。研究 结果为太赫兹超表面传感器设计提供了新思路,未来可进一步探索 BIC 等多模耦合机制以优化性能。该 工作为高灵敏度太赫兹传感器的开发奠定了理论基础。

参考文献

- Zang, X., Yao, B., Chen, L., Xie, J., Guo, X., Balakin, A.V., *et al.* (2021) Metasurfaces for Manipulating Terahertz Waves. *Light: Advanced Manufacturing*, 2, 148-172. <u>https://doi.org/10.37188/lam.2021.010</u>
- [2] Pendry, J.B., Holden, A.J., Stewart, W.J. and Youngs, I. (1996) Extremely Low Frequency Plasmons in Metallic Mesostructures. *Physical Review Letters*, **76**, 4773-4776. <u>https://doi.org/10.1103/physrevlett.76.4773</u>
- [3] Pendry, J.B., Holden, A.J., Robbins, D.J. and Stewart, W.J. (1999) Magnetism from Conductors and Enhanced Nonlinear Phenomena. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 47, 2075-2084. https://doi.org/10.1109/22.798002
- [4] Smith, D.R., Padilla, W.J., Vier, D.C., Nemat-Nasser, S.C. and Schultz, S. (2000) Composite Medium with Simultaneously Negative Permeability and Permittivity. *Physical Review Letters*, 84, 4184-4187. https://doi.org/10.1103/physrevlett.84.4184
- [5] Tao, H., Strikwerda, A.C., Liu, M., Mondia, J.P., Ekmekci, E., Fan, K., *et al.* (2010) Performance Enhancement of Terahertz Metamaterials on Ultrathin Substrates for Sensing Applications. *Applied Physics Letters*, 97, Article 261909. <u>https://doi.org/10.1063/1.3533367</u>
- [6] Tao, H., Chieffo, L.R., Brenckle, M.A., Siebert, S.M., Liu, M., Strikwerda, A.C., et al. (2011) Metamaterials on Paper as a Sensing Platform. Advanced Materials, 23, 3197-3201. <u>https://doi.org/10.1002/adma.201100163</u>
- [7] Chen, L., Xu, N., Singh, L., Cui, T., Singh, R., Zhu, Y., et al. (2017) Defect-Induced Fano Resonances in Corrugated Plasmonic Metamaterials. Advanced Optical Materials, 5, Article 1600960. <u>https://doi.org/10.1002/adom.201600960</u>
- [8] Lyu, J., Shen, S., Chen, L., Zhu, Y. and Zhuang, S. (2023) Frequency Selective Fingerprint Sensor: The Terahertz Unity

Platform for Broadband Chiral Enantiomers Multiplexed Signals and Narrowband Molecular AIT Enhancement. *Photo-niX*, **4**, Article No. 28. <u>https://doi.org/10.1186/s43074-023-00108-1</u>

- [9] Lyu, J., Huang, L., Chen, L., Zhu, Y. and Zhuang, S. (2024) Review on the Terahertz Metasensor: From Featureless Refractive Index Sensing to Molecular Identification. *Photonics Research*, **12**, 194-217. https://doi.org/10.1364/prj.508136
- [10] Ahmadivand, A., Gerislioglu, B., Ahuja, R. and Kumar Mishra, Y. (2020) Terahertz Plasmonics: The Rise of Toroidal Metadevices Towards Immunobiosensings. *Materials Today*, **32**, 108-130. <u>https://doi.org/10.1016/j.mattod.2019.08.002</u>
- [11] Tan, T.C., Plum, E. and Singh, R. (2019) Surface Lattice Resonances in THz Metamaterials. *Photonics*, 6, Article 75. <u>https://doi.org/10.3390/photonics6030075</u>
- [12] Gupta, M. and Singh, R. (2020) Terahertz Sensing with Optimized *Q*/v_{eff} Metasurface Cavities. *Advanced Optical Materials*, 8, Article 1902025. <u>https://doi.org/10.1002/adom.201902025</u>
- [13] Xu, J., Liao, D., Gupta, M., Zhu, Y., Zhuang, S., Singh, R., et al. (2021) Terahertz Microfluidic Sensing with Dual-Torus Toroidal Metasurfaces. Advanced Optical Materials, 9, Article 2100024. <u>https://doi.org/10.1002/adom.202100024</u>
- [14] Tan, T.C., Srivastava, Y.K., Ako, R.T., Wang, W., Bhaskaran, M., Sriram, S., et al. (2021) Active Control of Nanodielectric-Induced THz Quasi-BIC in Flexible Metasurfaces: A Platform for Modulation and Sensing. Advanced Materials, 33, Article 2100836. <u>https://doi.org/10.1002/adma.202100836</u>
- [15] Li, Z., Luo, X. and Gu, Q. (2023) Topological On-Chip Lasers. APL Photonics, 8, Article 070901. <u>https://doi.org/10.1063/5.0150421</u>
- [16] Lin, S., Wang, Y., Peng, Z., Chen, Z. and Hu, F. (2022) Detection of Cancer Biomarkers CA125 and CA199 via Terahertz Metasurface Immunosensor. *Talanta*, 248, Article 123628. <u>https://doi.org/10.1016/j.talanta.2022.123628</u>
- [17] Ahmadivand, A., Gerislioglu, B., Manickam, P., Kaushik, A., Bhansali, S., Nair, M., et al. (2017) Rapid Detection of Infectious Envelope Proteins by Magnetoplasmonic Toroidal Metasensors. ACS Sensors, 2, 1359-1368. <u>https://doi.org/10.1021/acssensors.7b00478</u>
- [18] Zhang, C., Xue, T., Zhang, J., Liu, L., Xie, J., Wang, G., et al. (2021) Terahertz Toroidal Metasurface Biosensor for Sensitive Distinction of Lung Cancer Cells. Nanophotonics, 11, 101-109. <u>https://doi.org/10.1515/nanoph-2021-0520</u>
- [19] Baryshnikova, K.V., Smirnova, D.A., Luk'yanchuk, B.S. and Kivshar, Y.S. (2019) Optical Anapoles: Concepts and Applications. *Advanced Optical Materials*, **7**, Article 1801350. <u>https://doi.org/10.1002/adom.201801350</u>