

基于 NSGA-II 的太赫兹超材料传感器频率选择设计*

屈薇薇¹⁾ 王玉蓉¹⁾ 李桂琳¹⁾ 黄炎¹⁾ 易琴¹⁾ 邓琥^{†1)}

1) (西南科技大学信息与控制工程学院, 四川 绵阳 621010)

摘要 太赫兹超材料传感器的谐振频率是实际应用中影响传感器灵敏度的重要因素。目前的设计大多依赖于设计人员不断调整结构参数, 不能精确调整结构, 无法依据检测需求设计不同谐振频率超材料传感器。本文提出了一种基于带精英策略的非支配排序遗传算法的超材料传感器优化设计方法, 结合不同光谱特征的表面结构, 通过算法对谐振频率精确控制。以谐振频率及其吸收率和品质因子为设计目标, 对超材料的结构参数进行多目标优化。仿真结果表明, 该方法能够高效、准确地生成符合预期光谱特征的结构。所设计的三个传感器在目标频率处均有吸收峰, 具有较高的传感灵敏度, 最高可达 351.43GHz/RIU。本文提出的设计方法显著提高了太赫兹超材料传感器的设计效率, 为设计适合特定分子振动特性的多频传感器提供了新的途径, 生物传感和材料检测等领域具有重要的应用潜力。

关键词: 太赫兹超材料传感器, 频率选择, 遗传算法, 多目标

PACS: 78.20.Ci, 81.05.Xj, 78.47.jh

基金: 西南科技大学创新基金(批准号: 4ZX7128)资助的课题。

† 通信作者. E-mail: denghu@swust.edu.cn

第一作者. E-mail: quweiwei@swust.edu.cn

录用稿件, 非最终出版稿

1 引言

太赫兹(THz)具有宽频带、低能量和高穿透性等优点^[1-3],且能与生物分子的振动和旋转模式强相互作用,因此广泛用于生物成分检测^[4, 5]。但太赫兹波长和小尺寸分子之间的尺度不匹配导致相对较弱的光与物质相互作用。超材料是一种亚波长结构组成的人造电磁材料^[6, 7],可通过设计调控太赫兹波的振幅和相位,与 THz 相互作用时能够产生强烈的电磁耦合,对表面周围的介电常数变化十分敏感^[8],因此太赫兹超材料传感器能够实现高灵敏度的无损检测。研究表明,当待测物的特征吸收峰与传感器谐振频率精确匹配时,可显著增强超表面对微量或痕量待测物与 THz 波的相互作用^[9]。多频窄带传感器能提供多个吸收峰,增加反映物质差异的信息量^[10, 11],从而提高检测灵敏度。此外,若谐振峰与待测物特征吸收峰匹配也可实现多个特异性分子识别。

为实现多频共振,研究者通常采用结构嵌套、形状缩放、旋转、排列或堆叠等设计方式^[12, 13]。因此有效利用现有的基础结构,将具有不同频谱特性的表面结构进行组合,降低结构的复杂性。这种方式不仅能保留各单元结构的固有响应特性,还可通过调控参数激发结构间的耦合效应,从而获得单一结构难以实现的光谱特性^[14, 15]。然而,结构的嵌套会出现更多的待调整参数,通过人工调整参数获取目标响应的难度会大大增加。

近年来,许多研究者将算法应用于太赫兹超材料传感器的设计当中。基于深度学习或神经网络的设计方法可以根据需要预测结果,但训练网络需要大量数据集^[16-21]。进化算法不依赖于训练样本,可以根据设计目标自动优化,显著缩短了设计时间,具有较强的通用性^[22, 23]。Wang 等人通过遗传算法设计编码表面结构,所设计结构的相对带宽高达 127.8%^[24]。Mokhtari 等人通过粒子群优化算法对宽

带超材料传感器进行了优化^[25]，在 200 ~ 4500nm 波长范围内，优化结构的平均吸收率高达 91.63%。Li 等人通过多目标萤火虫算法^[22]设计了一种双频吸收器，吸收率均超过 99%。Pham-Van 等人利用遗传算法优化超材料拓扑结构，在 17-26 GHz 的宽频率范围内实现了约 95%的平均吸收^[26]。我们团队利用 PSO 对超材料吸收器进行优化，在 1-2THz 获得了完美吸收峰^[27]。然而，单目标优化算法无法平衡目标之间产生的冲突，总会有一方出现偏差，无法满足设计效果。因此，我们团队将多目标优化算法应用到设计中，取得了较好的设计效果^[28]。目前，多频传感器的设计仍主要依赖传统试错法，该方法难以满足在实际应用中往往对频率位置的精确控制需求。此外，上述基于多目标的优化方法均依赖“领导个体”对搜索方向进行引导，目标的增多会导致“领导个体”选择的随机性增加，导致算法无法收敛。带精英策略的非支配排序遗传算法(Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II, NSGA-II)的优化不依赖“领导个体”，性能受到的影响较小。

本文采用 NSGA-II 对超材料传感器进行设计，嵌套两个具有不同特性的表面结构，通过调整表面结构参数，达到不同的电磁响应要求。以谐振频率及其吸收率和品质因子为设计目标，对介质厚度和结构参数进行优化。NSGA-II 通过选择交叉和遗传变异产生新个体，利用快速非支配排序对群体中的个体进行等级划分，然后通过拥挤度对个体进行评价，实现超材料传感器的频率选择设计。

2 结构设计

如图 1 所示，所设计的结构结合了两个已研究的具有不同电磁响应的表面结构(结构 1—四“L”^[28]和结构 2—开口方环嵌套十字^[27])，在获得个体特征的同时，也可以获得其结构组合特征。将嵌入在结构 2 中的“十字”结构掏空即可得到结构 1。因此，将结构 2 中的“十字”结构替换为结构 1，得到本文的结构。底层为金属

基板，由纯铜材料构成，电导率为 $5.69 \times 10^7 \text{S/m}$ 。为防止入射电磁波透射出传感器，应使得金属底板的厚度应大于铜在 THz 频段的趋肤深度，因此设置为 $0.2 \mu\text{m}$ 。中间介质层为厚度为 h 的聚酰亚胺，其相对介电常数 $\epsilon_r = 3.5$ ，为顶部金属结构与底部金属底板之间的电磁耦合提供空间，有效消耗入射电磁波。顶部的金属结构决定了传感器的电磁特性，其材料也是纯铜，厚度为 $0.2 \mu\text{m}$ 。结构的周期 $P=200 \mu\text{m}$ ，外环长度 L 、环宽度 w 、间隙尺寸 g 、L 形结构长度 l 、宽度 b 和介质层厚度 h 为待优化参数。

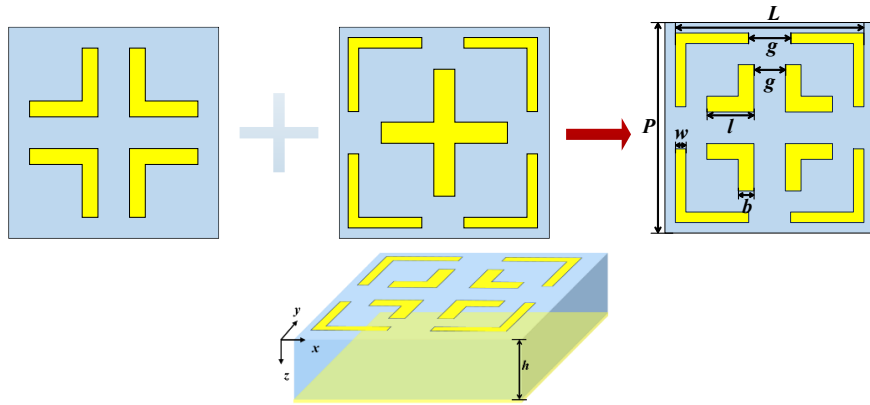


图 1 单元结构

Fig.1. Unit structure

表 1 参数限制条件

Table 1. Parameter Limitation Conditions

Constraint name	Constraint equation	Constraint scope
g_1	$2l + g - L$	$g_1 \leq 0$
g_2	$L - P + 5$	$g_2 \leq 0$
g_3	$w - (L - g) / 6$	$g_3 \leq 0$
g_4	$b - l / 4$	$g_4 \leq 0$

在优化过程中，如果对参数不加限制，会造成结构重叠或产生无法实际加工的结构。因此，使用四个不等式(Eq. (g_1)-(g_4))规范参数，如表 1 所示。在优化方环结构时，采用式(g_1)保证方环内部的结构不会与方环产生重叠，式(g_2)保证微结

构不会超出周期 P ，且保证边缘留有一定的余量。式(g_3)和式(g_4)分别限制外圈宽度 w 和内部结构宽度 b 不会太宽造成结构变形。当 $w=0$ 时，单元结构为结构 1；当 $g=0$ 时，变为结构 2；如果两者都不为零，则默认为结构 3。

超材料传感器的性能主要用吸收率 A 、灵敏度 S 和品质因子 Q 来表征，如式 (1)、(2)、(3)所示。

$$A=1-R(\omega)-T(\omega) \quad (1)$$

$$S=\frac{\Delta f}{\Delta n} \quad (2)$$

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

其中， $R(\omega)$ 为反射率， $T(\omega)$ 为透射率， Δf 为谐振频率的偏移量， Δn 为分析物折射率的变化量， f_0 为谐振频率， X_{FWHM} 表示谐振峰半高宽。吸收率表示传感器捕获入射电磁波能量的效率，吸收率越高，意味着传感器的谐振模式越强，与被测物质相互作用时产生的信号强度越大。灵敏度是传感器对外部环境折射率微小变化的响应能力^[29]，它是评价传感器能否作为传感器的关键指标。品质因子用于评价谐振峰的“尖锐”程度。

3 方法

3.1 遗传算法

遗传算法 (Genetic Algorithm, GA) 是受生物进化启发而形成的全局搜索方法，算法首先随机生成一个初始种群，其中每个个体 (即候选解) 由一条染色体表示，染色体由代表特定优化参数的基因序列构成。算法通过模拟自然选择、交叉和变异等遗传操作，在每一代筛选较优个体，并通过交叉重组和随机变异产生一群更适合环境的个体，使种群在搜索空间中进化到越来越好的区域。

超材料传感器的关键参数 (如单元结构尺寸、周期、厚度等) 是连续变量。

实数编码可以避免离散化误差，适合处理多参数耦合和复杂物理约束，更适合超材料传感器的实际加工要求。实数编码不需要编码和解码，可以降低计算复杂度，更容易接近最优解。

在算法优化的过程中，会选择优秀的个体进行繁殖，将其优秀的基因传递给下一代。从当代选择双亲对其染色体进行交叉来产生新的子代个体，此操作为交叉重组。与单点或多点交叉相比，均匀交叉以等概率交换亲本个体的每个位点，提高了种群的多样性，增强了全局搜索能力。因此，本文采用均匀交叉产生后代染色体，如式(4)和式(5)所示。

$$Cx_i = \alpha \cdot x_i + (1 - \alpha) \cdot x_j \quad (4)$$

$$Cx_j = \alpha \cdot x_j + (1 - \alpha) \cdot x_i \quad (5)$$

其中， Cx_i 和 Cx_j 表示交叉产生的子代， α 为与染色体具有相同维数的随机数矩阵，其值在区间[0,1]内均匀分布， x_i 和 x_j 表示被选中的两个亲本。

此外，在遗传学中突变发生的概率较大，保证了遗传的多样性。算法通过对个体基因进行随机扰动，防止种群陷入局部最优解，确保算法能够持续探索解空间的其他区域。在进化后期，种群可能趋于同质化，而变异能够引入新基因，从而恢复种群多样性。本文采用高斯突变的方法来生成子代染色体。

$$Mx_i(j) = x_i(j) + \beta \cdot rand \quad (6)$$

其中， β 为变异步长的标准差，决定了变异的扰动强度； $Mx_i(j)$ 表示对 x_i 的染色体的第 j 个基因变异得到的子代染色体，而 $rand$ 为服从标准正态分布的随机数。

为防止算法设计的传感器结构不合理，本文在各参数之间设置约束条件，对结构进行规范。当交叉变异发生并产生新个体时，可能产生不符合约束条件的个体。由于该个体对应的变量值不符合约束条件，该个体不应该被选择或降低其被

选中的概率。因此，在算法求解过程中加入了惩罚项，在每个目标函数实际值的基础上减去违反的约束条件之和，如式(7)所示。

$$P(x) = F(x) - \sum_{i=1}^4 \max(0, g_i(x)) \quad (7)$$

当染色体取值满足条件时，惩罚项值为 0，即不施加惩罚；否则，惩罚项的值将根据偏离约束的程度确定。偏离程度越大，惩罚值越高，以此达到限制粒子收敛位置的目的。

3.2 带精英策略的非支配排序遗传算法

带精英策略的非支配排序遗传算法(NSGA-II)是一种基于非支配排序的多目标优化算法。通过改进的非支配排序与拥挤度比较机制，有效兼顾了收敛性与多样性。其中，非支配关系的定义为：若粒子 x 在所有目标上均不劣于粒子 y ，且至少在一个目标上优于粒子 y ，则粒子 x 支配粒子 y ；若粒子 x 在所有目标上均不优于粒子 y ，则粒子 x 与粒子 y 之间为非支配关系。算法根据目标函数值对所有染色体进行非支配等级划分。

首先，在种群中选取所有不被其他染色体支配的染色体作为帕累托等级 1。在剩余染色体中，再次选取不被其他染色体支配的个体作为帕累托等级 2，依此类推，直至种群中所有染色体都被分配等级。每个个体 x_i 均设置两个参数：数值 H_i 与集合 $L(i)$ 。其中， H_i 表示种群中支配个体 x_i 的解个体数量， $L(i)$ 为被个体 x_i 支配的解个体集合。将 x_i 与其余个体逐一比较：若 x_i 被 x_j 支配，则 H_i 加 1，将 x_i 加入集合 $L(j)$ ；若 x_i 支配 x_j ，则将 x_j 加入集合 $L(i)$ ， H_j 加 1。已相互比较过的个体不再重复比较，完成所有个体间的相互比较后，找出种群中所有 $H_i=0$ 的个体，将其归为帕累托等级 1。遍历每个等级 1 的个体，将其对应的 $L(i)$ 中每个被支配个体的 H_i 值减 1。随后移除等级 1 的个体，再次找出当前种群中 $H_i=0$ 的个体作

为帕累托等级 2。遍历每个等级 2 的个体，同样将其 $L(i)$ 中每个被支配个体的 H_i 值减 1，依此循环直至所有个体完成分层，流程如图 2 所示。

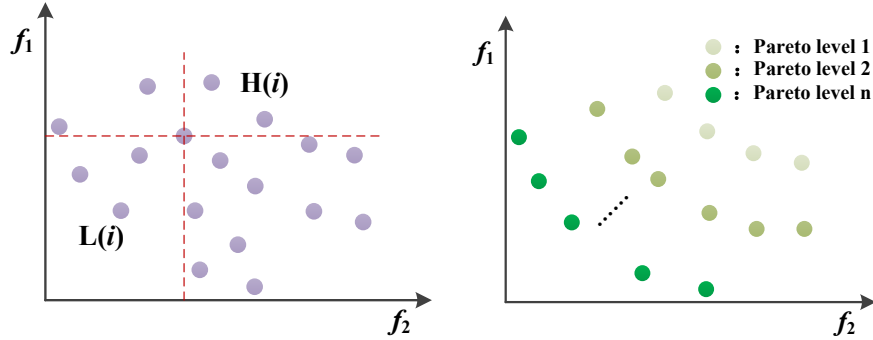


图 2 非支配等级划分

Fig. 2. Non-dominant hierarchy division

拥挤度距离用于衡量个体在其邻域内的分布密度，距离值越大，表明个体周边区域越“稀疏”，有利于维持种群多样性。处于同一非支配等级的个体无法直接判定优劣，可通过拥挤度距离辅助筛选更优个体。拥挤度距离的计算需要基于各目标函数值的大小对种群进行升序排序。首先，对属于同一非支配等级的个体进行排序。位于边界的个体被赋予无穷大拥挤度距离，以确保被优先选择。随后，针对每个目标函数 F_m ，计算中间个体 x_i 的拥挤度距离。该距离为 x_i 在目标函数 F_m 上左右相邻个体 x_{i-1} 与 x_{i+1} 之间归一化距离的总和。个体的总拥挤度距离值为其在各目标上相应距离之和，如公式(8)所示。

$$D(x_i) = \sum_{m=1}^n \frac{F_m(x_{i+1}) - F_m(x_{i-1})}{F_{m\max} - F_{m\min}} \quad (8)$$

其中， $D(x_i)$ 表示第 i 个个体的拥挤度距离， $F_m(x_{i+1})$ 和 $F_m(x_{i-1})$ 为第 i 个个体在第 m 个目标函数上左右相邻个体的函数值，而 $F_{m\max}$ 和 $F_{m\min}$ 分别为第 m 个目标函数的最大值与最小值。

本文将吸收率与谐振频率作为每个吸收峰的设计指标，每个吸收峰均通过三个评价函数来引导算法进行优化。如式(9)、式(10)和式(11)所示： F_1 对应吸收率，

F_2 为实际谐振频率与目标谐振频率之间距离的倒数, F_3 为品质因子 Q 。在优化过程中使 F_1, F_2, F_3 同时尽可能大。

$$F_1 = A \quad (9)$$

$$F_2 = \frac{1}{|f_{real} - f_{obj}|} \quad (10)$$

$$F_3 = Q \quad (11)$$

3.3 设计流程

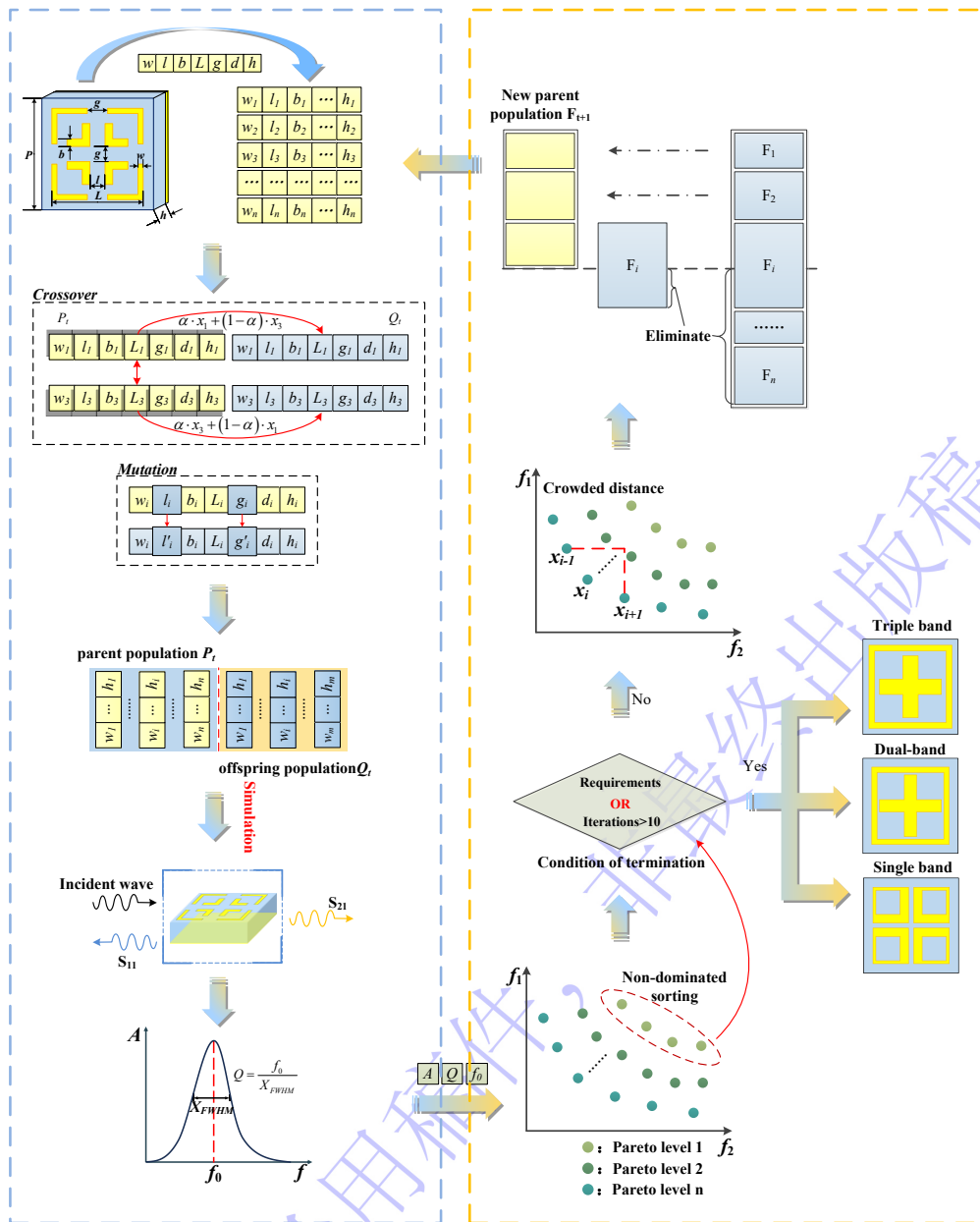


图3 算法设计流程

Fig. 3. Algorithm design process

用于优化超材料传感器的非支配排序遗传算法(NSGA-II)流程如图3所示。

在初始阶段,定义交叉率(P_c)和变异率(P_m)等参数。遗传算法中的交叉概率和变异概率是影响算法性能的关键参数。交叉是产生新个体的主要手段,交叉概率通常需设置较高值(一般在0.6~0.95之间),以保证种群中基因的多样性;变异概率则取值较低,维持种群多样性和跳出局部最优,一般在0.001到0.1之间取值,以避免过度破坏种群中的优良基因,但在种群小、代数少的情况下,算法容易丧失多样性,需要一个较高的变异率。因此交叉率取一个中间值 $P_c=0.8$,能在促进优良基因交换和维持搜索方向稳定性之间达到良好平衡;变异率 $P_m=0.1$,能为算法提过较强的随机扰动。根据待优化的变量及其相应的约束条件,随机生成包含 N 条染色体的初始种群。每条染色体代表超材料传感器的一种具体设计方案,包含结构细节与介质厚度信息。随后,根据交叉率随机配对 $[N \cdot P_c/2] \times 2$ 条染色体进行均匀交叉操作。同时,基于变异率随机选取 $N \cdot P_m$ 条染色体,并随机选择其中某些基因进行变异。将通过交叉变异产生的子代种群与父代种群合并为统一种群。将染色体所包含的信息赋值到传感器模型,通过仿真软件计算得到各染色体对应的吸收光谱,进而获得目标函数值。根据目标函数对种群进行等级划分,并判断等级1中是否存在满足设计要求的个体,或是否已达到最大迭代次数。若是,则算法结束;否则,计算个体的拥挤度距离,选取前 N 条染色体作为新一代父种群,继续循环直至满足终止条件。太赫兹超材料传感器的性能评估依赖于全波电磁仿真CST Microwave Studio,单次电磁仿真较为耗时,粒子的评估成本较高,所以不适合进行大规模的种群仿真,所以选择较小的种群规模 $N=10$ 。针对最大迭代次数的设定,针对该传感器结构的参数空间,优化目标在10-15代内就可以找到符合设计要求的解,设置最大迭代次数为20,能够提供充

分的余量来确保算法有足够代数进行搜索。

4 结果讨论

4.1 设计结果

通过 NSGA-II 分别设计了符合不同频率要求的三个传感器，以验证方法的有效性，结果如表 2 所示。传感器谐振频率分别要求单个频率在 1.6THz，两个谐振频率位置在 1.4 THz 和 1.7THz，三个的谐振频率要求在 1.3THz、1.6THz 和 1.9THz 处，误差范围为 ± 0.05 THz。经过 7 次迭代达到设计要求，其结构参数为表 2 第一行($w=8 \mu\text{m}$, $L=160 \mu\text{m}$, $g=11 \mu\text{m}$, $l=71 \mu\text{m}$, $b=18 \mu\text{m}$, $h=17 \mu\text{m}$)，吸收光谱如图 5(b)所示，单频传感器在 1.60THz 处存在一个完美吸收峰。经过 10 次迭代，双频获得一个在 1.43THz 和 1.69THz 处存在吸收峰的传感器，虽然在其他频率处也出现了谐振峰，但是在误差范围内找到了所需的谐振峰。如图 5(d)所示，其结构参数见表 2 第二行($w=11 \mu\text{m}$, $L=161 \mu\text{m}$, $g=0 \mu\text{m}$, $l=65 \mu\text{m}$, $b=13 \mu\text{m}$, $h=15 \mu\text{m}$)。经过 10 次迭代，三频传感器结构参数为 $w=9 \mu\text{m}$, $L=172 \mu\text{m}$, $g=0 \mu\text{m}$, $l=64 \mu\text{m}$, $b=16 \mu\text{m}$, $h=17 \mu\text{m}$ 时，分别在 1.31THz, 1.59THz 和 1.9THz 处实现吸收，如图 5(f)所示。可以看到，本文的设计方法可以根据设计要求实现传感器的选频设计，虽然双频和三频在低频处的吸收峰吸收率较低，但均实现了传感器的选频设计。

表 2 优化后的结构参数

Table 2. Optimized structural parameters

	$w/\mu\text{m}$	$L/\mu\text{m}$	$g/\mu\text{m}$	$l/\mu\text{m}$	$b/\mu\text{m}$	$h/\mu\text{m}$	f/THz	$A(\%)$	Q
单频	8	160	11	71	18	17	1.60	99.89	177.59
双频	11	161	0	65	13	15	1.43	74.05	34.07
							1.69	99.97	89.32
三频	9	172	0	64	16	17	1.31	79.93	33.39
							1.59	99.72	82.11
							1.90	98.77	37.79

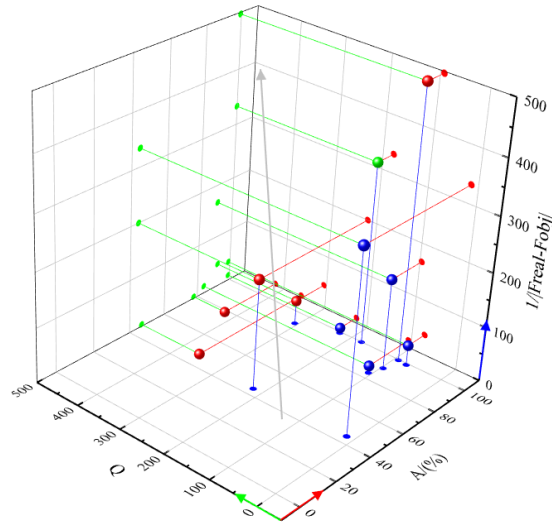
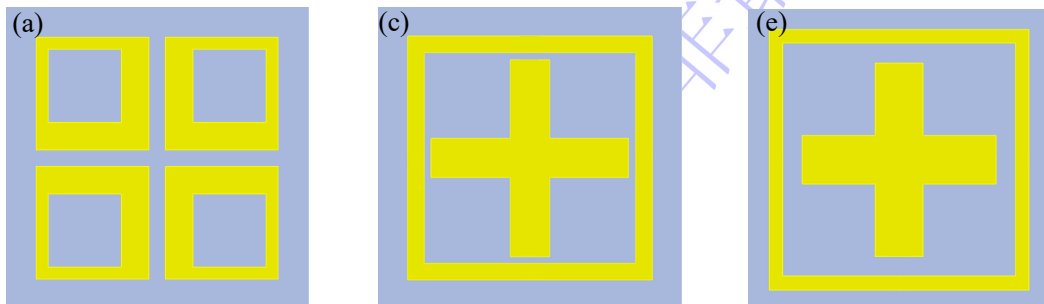


图 4 单频传感器部分非支配解集的迭代过程

Fig. 4. The iterative process of the non-dominated solution set of the single-band sensor part

以单频传感器为例，图 4 为单频传感器设计过程中生成的非支配解集，各坐标轴上的箭头方向为各对应参数期望的优化方向。随着迭代过程的推进，每一代的非支配解集被其后代所取代，从而逐步逼近更优的非支配前沿，获得的最终解 ($A=99.89\%$, $Q=177.59$, $f=1.60\text{THz}$) 相较于初始代 ($A=83.87\%$, $Q=106.04$, $f=1.67\text{THz}$) 性能都有了较大的提升。红色与绿色数据点表示最新一代的非支配解，彼此之间互不支配。其中绿色点代表本文最终选取的权衡解，尽管该解在任一目标函数上并非最优，但在多个性能指标之间实现了良好的平衡，表现出综合较优的性能。最终解在距离目标频率更近的同时，吸收率和品质因子分别提升了 19% 和 67.5%。



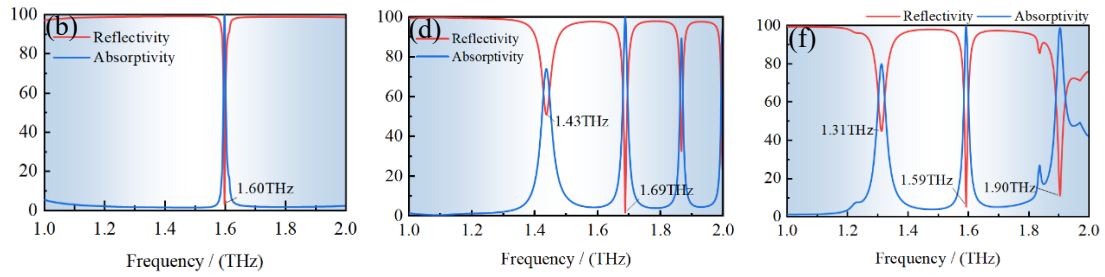
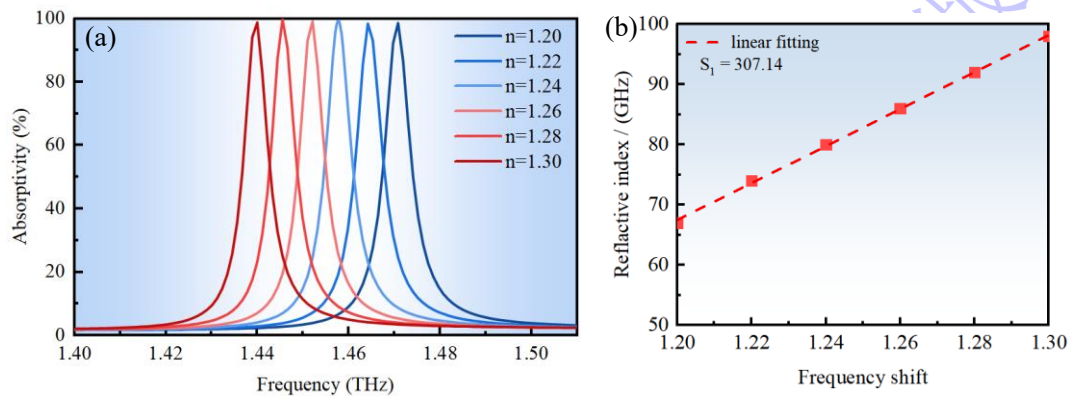


图 5 优化后的结构及其光谱。(a) (b)单频；(c) (d)双频；(e) (f)三频

Fig. 5. Optimized structure and its spectrum. (a) (b) Single-band; (c) (d) Dual-band; (e) (f) Triple-band.

为进一步评估传感性能,通过引入微小变化的折射率来模拟分析物成分的改变。在传感器表面覆盖一层厚度为 $15\ \mu\text{m}$ 的分析物薄层,并分析相应共振频率的偏移情况。随着折射率的升高,共振频率呈现明显的红移现象,如图 6 所示。通过对频率偏移与折射率之间的关系进行线性拟合,以拟合曲线的斜率定义传感器灵敏度。结果显示:单频传感器的灵敏度约为 $307.14\ \text{GHz/RIU}$;双频传感器的两个共振峰灵敏度分别为 $351.43\ \text{GHz/RIU}$ 和 $340\ \text{GHz/RIU}$;三频传感器的三个共振峰灵敏度依次为 $195.7\ \text{GHz/RIU}$ 、 $265.7\ \text{GHz/RIU}$ 和 $291.43\ \text{GHz/RIU}$ 。



录用稿件

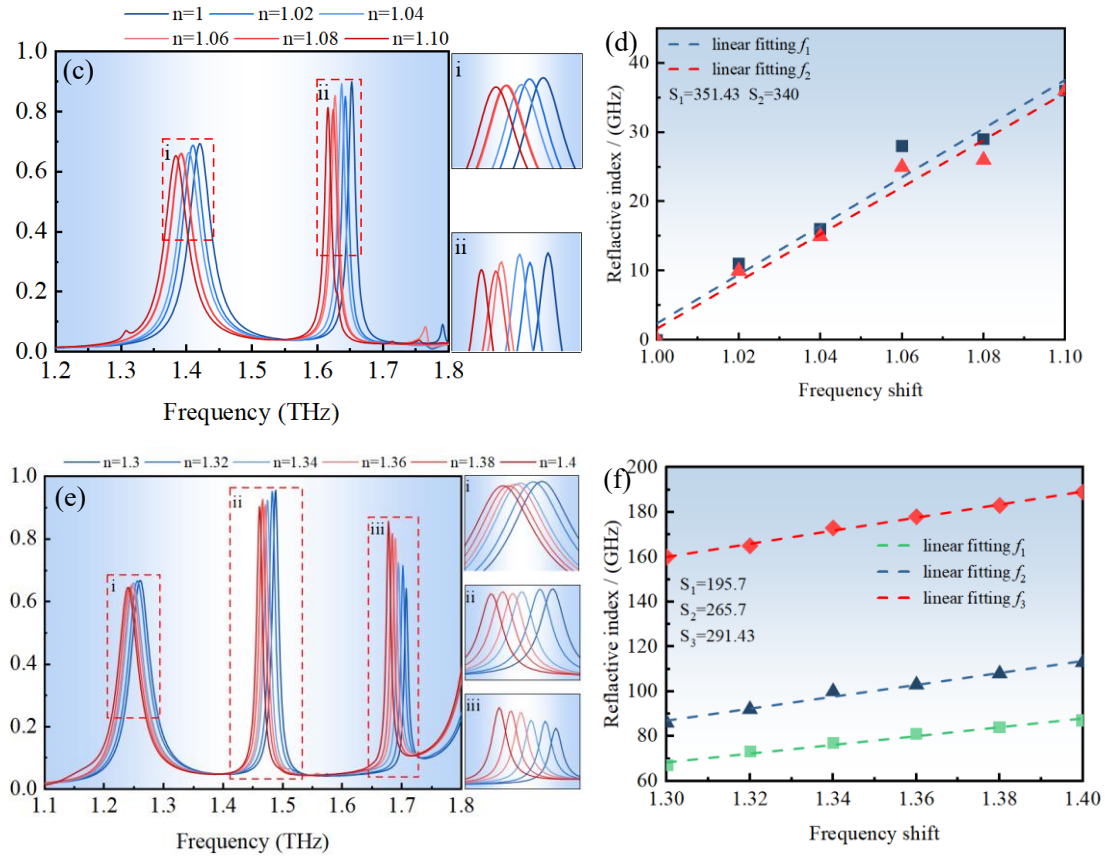


图 6 不同折射率下传感器的谐振频率变化及拟合曲线。(a) (b)单频；(c) (d)双频；(e) (f)三频

Fig. 6. Variation of resonant frequency and fitting curve of absorber under different refractive indices. (a) (b) Single-band; (c) (d) Dual-band; (e) (f) Triple-band.

图 7 为三个传感器在不用极化方向和不同入射角度下的光谱。由于三个传感器均为中心对称结构，在不同极化方向的电磁波照射下，其光谱特性保持一致，表现出极化不敏感特性。因此，在实际应用中，传感器的放置方向不会对检测结果产生影响。值得注意的是，这三个传感器的结构对入射角的变化较为敏感，当电磁波的入射角度发生变化时，其光谱响应会发生显著变化。因此，在实际应用中，需确保入射电磁波垂直入射至传感器表面，以保证检测性能的稳定性。

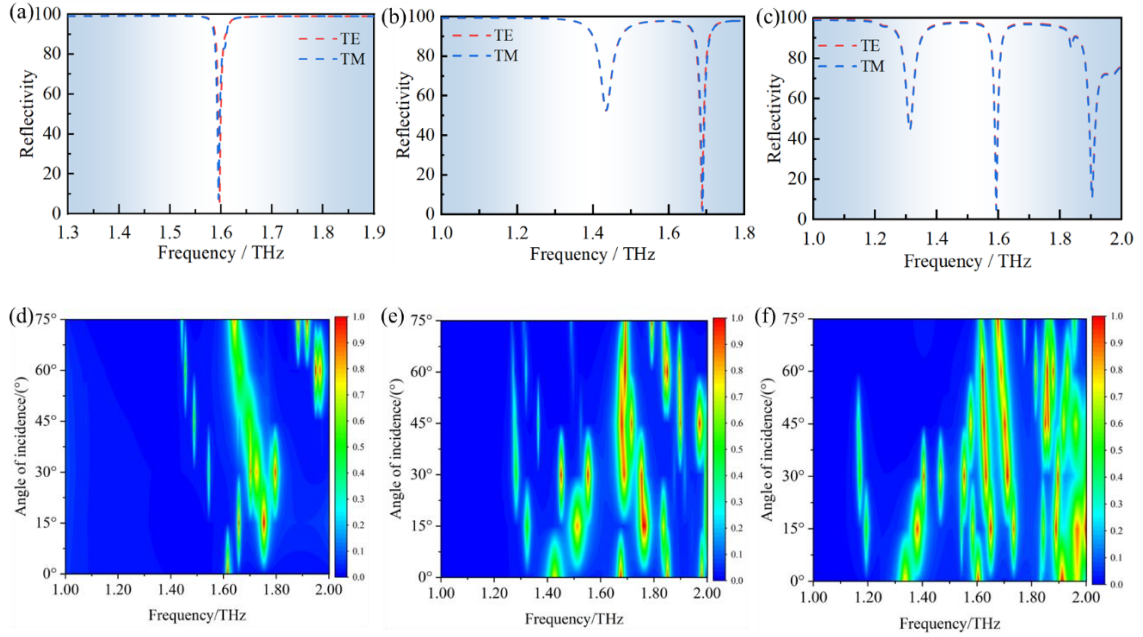


图 7 传感器在不同极化方向(a)、(b)、(c)和不同入射角(d)、(e)、(f)的光谱特性。(a)(d)单频；(b)(e)双频；(c)(f)三频

Fig. 7. Spectral characteristics of the sensor in different polarization directions (a), (b), (c) and different incident angles (d), (e), (f). (a) (d) Single-band; (b) (e) Dual-band; (c) (f) Triple-band.

4.2 电磁分析

为了进一步解释太赫兹传感器的吸收原理，分析了太赫兹传感器谐振频率点处的电场和表面电流分布。由图 8(a)和(d)可以看出，单频传感器 1.60THz 处的电场主要集中在结构中心，电流主要集中在结构两臂外侧，且电流方向相反说明 1.60THz 处的共振为电偶极子共振。此外在间隙处的电流方向相反形成一个小的闭合环路，在这里形成一个 LC 谐振。结构通过电偶极子共振和 LC 谐振的共同作用使入射电磁波的能量在谐振频率处被消耗，从而达到接近 100%的完美吸收。图 8(b)、(c)、(e)和(f)显示了双频传感器的表面电场和电流。外环在 1.43THz 处的电场强度更高，外环的电流强度也明显高于其他位置，说明外环对 1.43THz 处的谐振峰起主导作用。同样，1.69THz 处的电场主要分布在十字结构中，并与外环耦合，说明 1.69THz 处的谐振峰是由十字结构引起的。在相同的维度下，1.43THz

处的电场强度明显弱于 1.69THz 处的电场强度，说明该结构与 1.69THz 处的入射电磁场耦合更好，因此在 1.69THz 处具有更高的吸收率。在 1.43THz 处，电流方向沿入射电场方向对称分布，形成电偶极子谐振。1.69THz 处在外环与十字结构均有较强的电流，外环电流被分为三段，可能是由于受到十字结构左右两端的电流影响，与其形成一个环路的 LC 谐振，十字结构中间段电流方向也沿着电磁场方向。

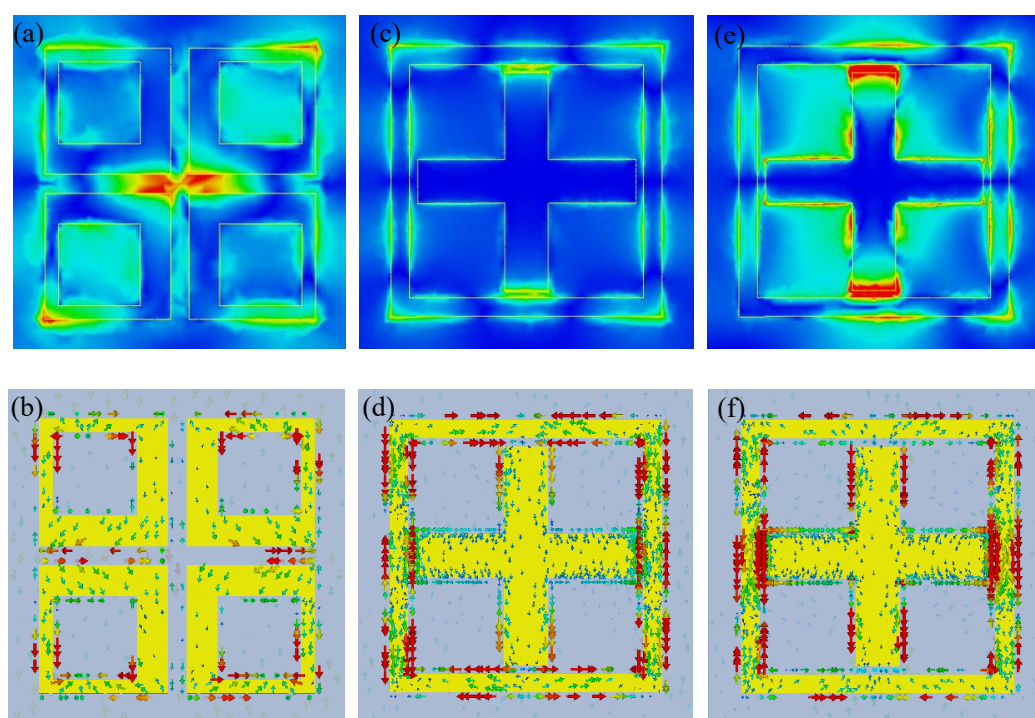


图 8 单双频传感器的表面电场(a)、(c)、(e)和电流分布(b)、(d)、(f)。(a)(b)单频传感器；(c)(d) 双频 1.43THz 处；(e)(f) 双频 1.69 THz 处。

Fig. 8. Surface electric field (a), (c), (e) and current distribution (b), (d), (f) of single and dual-band absorbers. (a) (b) Single-band; (c) (d) Dual-band at 1.43THz; (e) (f) Dual-band at 1.69THz.

三频传感器的吸收原理与双频传感器的吸收原理相似。1.31THz 处的吸收峰由外环主导，1.59THz 处的吸收峰由内部十字结构与电磁场耦合形成。图 9(c)显示在 1.90THz 处，内外都存在强电场，因此其吸收峰是由结构整体引起的。此外，在 1.90THz 处金属表面电流很弱，没有大量电子在流动，电子全都被局域在的强

电场中,使得底层与顶层结构会产生强烈耦合,表面结构与底层金属板发生了 LC 谐振,能量在介质层中被损耗,从而产生完美吸收。

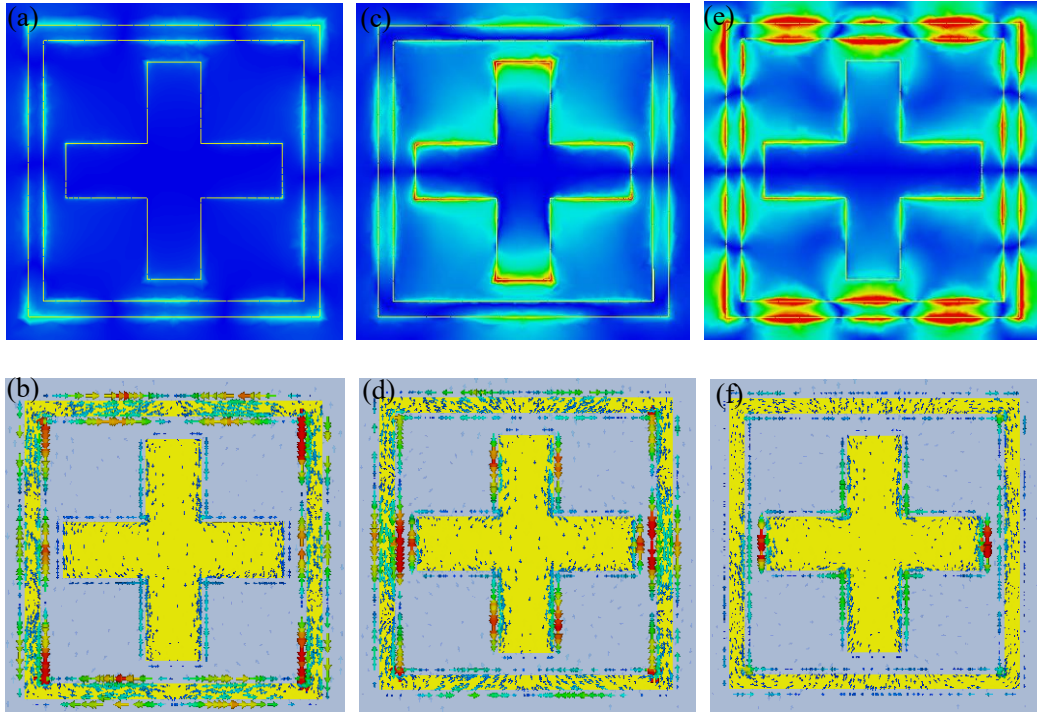


图 9 三频传感器的表面电场(a)、(c)、(e)和电流分布(b)、(d)、(f)。(a) (b) 1.31 THz; (c) (d) 1.59THz; (e) (f)1.9 THz。

Fig. 9. Surface electric field(a)、(c)、(e) and current distribution(b)、(d)、(f) of the three-band absorber. (a) (b) 1.31 THz; (c) (d) 1.59THz; (e) (f)1.90 THz.

4.3 阻抗匹配分析

当自由空间的阻抗 Z_0 与传感器的等效阻抗 Z_1 匹配,即 $Z_0 = Z_1$, 此时归一化阻抗 $Z = Z_1 / Z_0$ 的实部为 1、虚部为 0, 超材料传感器对入射电磁波将无反射。此外,传感器底部的金属板会阻挡电磁波的透射,实现零透射。当结构同时满足阻抗匹配条件时,入射电磁波在超材料结构作用下会激发电谐振与磁谐振,从而被结构完美吸收。因此,设计目标是通过结构调整实现阻抗匹配。

图 10 展示了三种设计传感器对应的归一化阻抗实部与虚部。在图(a)中,单频传感器在 1.60 THz 处的归一化阻抗实部为 1.036,虚部为 0.0019,接近 1,因

此在该频率接近完美吸收。图(b)中，双频传感器在 1.43 THz 处的吸收峰对应归一化阻抗实部为 0.33，虚部为 0.127，与 1 差异较大；而在 1.69 THz 处归一化阻抗实部为 0.966，虚部为-0.006，接近 1。因此，该传感器在 1.69 THz 处实现了近完美吸收，而在 1.43 THz 处的吸收率相对较低。图(c)中，三频传感器在 1.31 THz 处的归一化阻抗实部为 0.382、虚部为 0.039；在 1.59 THz 处实部为 0.973、虚部为 0.077；在 1.90 THz 处实部为 1.247、虚部为 0.035，归一化阻抗与 1 的差异越大，对应频率的吸收率越小。

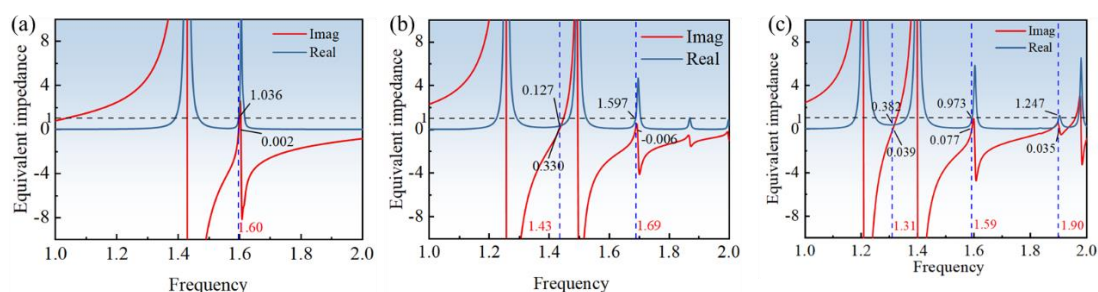


图 10 三种传感器的归一化阻抗图。(a)单频传感器；(b)双频传感器；(c)三频传感器

Fig. 10. Normalized impedance diagrams of the three types of absorbers. (a) Single-band; (b) Dual-band; (c) Triple-band.

4.4 性能分析

传感器可以通过以下工艺制造：首先，在硅衬底上沉积一层 200nm 厚的铜膜作为反射层，然后采用旋涂法在反射层上制备厚度为 h 的介质层。最后，通过电子束刻蚀与光刻技术对顶部微结构层（200nm）进行加工。本文采用的介质材料为聚酰亚胺，其线性热膨胀系数（CTE）约为 20~80ppm/K，粗略估算在 ± 50 K 的温度波动下，几何尺寸的相对变化约为 0.1~0.4%。因此为研究制造误差和温度对吸收性能的影响，引入了在 -5%至 5%范围内变化的随机误差，并分析了在此误差条件下传感器结构的性能稳定性。表 3 展示了单频、双频及三频传感器在两组不同随机误差下的性能表现，每组误差的第一行为随机误差，第二行为误差

下的参数值。结果表明，单频传感器在第一组误差下和三频传感器在第二组误差下吸收率下降较为显著，其余情况下的吸收性能均未出现明显下降。此外，所有结构的谐振频率偏移均未超过 ± 0.05 THz，符合设计要求的频率误差，表现出较好的容错性。

表 3 制造误差下的性能

Table 3. Performance under manufacturing errors

	$w/\mu m$	$L/\mu m$	$g/\mu m$	$l/\mu m$	$b/\mu m$	$h/\mu m$	f/THz	$A(\%)$	Q
单频	2.35%	-1.51%	0.23%	-2.67%	0.82%	1.9%	1.61	97.03	162.96
	8.19	157.58	11.03	69.1	18.15	16.68			
	3.33%	2.34%	3.68%	1.25%	-3.71%	2.79%	1.574	88.07	189.71
	8.27	163.74	11.4	71.88	17.33	17.48			
双频	3.47%	1.43%	2.06%	1.95%	-0.86%	1.24%	1.41	74.41	34.1
	11.38	163.30	0	66.26	12.89	15.19	1.67	99.88	88.27
	-2.63%	1.65%	-3.75%	-1.78%	-3.63%	-3.22%	1.43	82.54	37.96
	10.71	163.65	0	63.84	12.53	14.52	1.7	94.73	75.93
三频	2.59%	1.56%	-1.46%	3.6%	-3.72%	-0.49%	1.32	83.21	37.64
	9.23	174.68	0	66.31	15.40	16.92	1.595	98.03	82.78
	4.59%	0.47%	-3.61%	-3.51%	-2.42%	3.41%	1.91	94.81	74.57
	9.41	172.81	0	61.76	15.61	17.58	1.33	74.49	32.61
							1.62	87.40	67.00
							1.92	99.91	52.29

图 11 为各结构参数对传感器性能的误差敏感性。通过控制变量法，在允许误差范围内将参数设置为最大误差值并保持其余参数不变，发现外长度 L 对传感器性能的影响最为显著，介质厚度 h 的影响次之，第三为 L 型结构的长度 l 。此外，三频传感器的 Q_3 受到参数影响较大，但谐振频率均未受到较大影响。在加工制备过程中需严格控制参数 L 、 h 和 l 的误差，以降低其最终性能的负面影响。

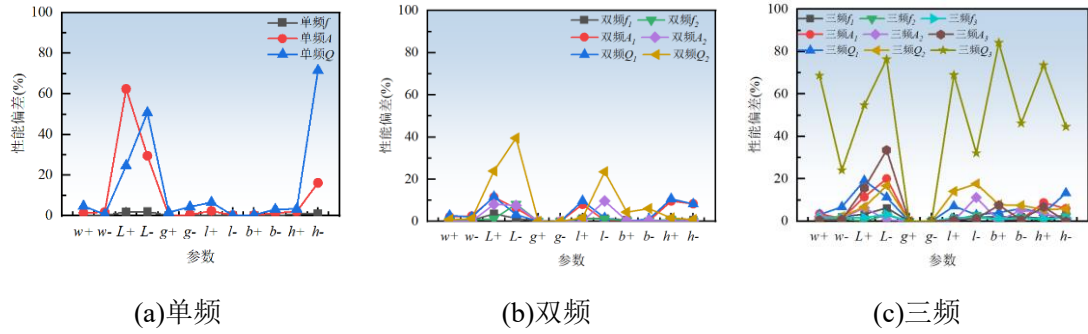


图 11 关键参数对性能的影响

Fig. 11. Impact of Key Parameters on Performance. (a) Single-band; (b) Dual-band; (c) Triple-band.

本文所设计的传感器与近年来报道的同频段传感器性能对比结果如表 4 所示。由对比可知，所列传感器的最高吸收率均接近完美吸收，其中部分文献实现了极高的品质因子。本文的设计目标不是单纯追求单一指标的极致化，算法在搜索过程中，也存在 Q 值极高的结构，但该谐振峰的位置未能在指定频率地误差范围内，多个频率位置的谐振峰吸收率也存在极低的现象。因此，最终选择的是一个满足所有频率约束且综合性能最优的折中解，而某个值最大化的解，因此最终得到的 Q 值与文献中相比较低。但本文设计的传感器在保持高吸收率与较高品质因子的同时，取得了更高的传感灵敏度，传感性能更好。

表 4 传感器性能对比

Table 4. Comparison of sensor performance

Ref.	f /THz	A (%)	Q	S (GHz/RIU)
[26]	1.613	99.56	/	264.5
本文设计的单频结构	1.6	99.89	177.59	307.14
[30]	0.5-2.3	99.9	/	237.5
[31]	0.5-1.3	96	/	264.2
本文设计的双频结构	1-2	99.97	89.32	351.43
[32]	0.8-1.5	99.9	177	200
[33]	0.1-1.8	99.9	482.5	280
本文设计的三频结构	1-2	99.72	82.11	291.43

5 结论

为更高效地获得谐振频率与材料特征频率匹配的超材料传感器,并提升检测效率,本文将非支配排序遗传算法应用于超材料传感器的频率选择设计中。通过结合不同特性的结构并调节相应参数,实现了不同的电磁性能。以各吸收峰的谐振频率、吸收率和品质因子为设计目标,利用算法对结构进行优化,确保每个目标频率处尽可能达到最高吸收率。经优化设计后,成功实现了三个满足不同频率需求的传感器,其谐振峰均位于目标频率 ± 0.05 THz 范围内。在传感应用方面,三种传感器均表现出较高的灵敏度。相较于单频传感器,多频传感器可利用多个吸收峰的频移信息判断分析物成分,从而提高识别准确性。此外,本文结合阻抗匹配理论与表面电场、电流分布,深入分析了结构对吸收特性的影响。研究结果表明,非支配排序遗传算法可根据检测需求自适应地选择超材料传感器参数,进一步提高设计效率,在超材料传感领域展现出较强的应用潜力。

参考文献

- [1] Wang D X, Luo S Y, Xu K D 2024 *ACS Appl Mater Interfaces* 16 27969
- [2] Wang Y, Cui Z J, Zhang X J, Zhang D C, Zhang X, Zhou T, Wang X 2021 *Acta Phys. Sin.* 70 247802 (in Chinese) [王玥, 崔子健, 张晓菊, 张达麓, 张向, 周韬, 王暄 2021 物理学报 70 247802]
- [3] Zhang J J, Zhang G C, Song X X, Zhang H T, Liang Y, Dai Z J, Yao J Q 2025 *Acta Opt. Sin.* 45 0224002 (in Chinese) [张晶晶, 张桂才, 宋效先, 张海婷, 梁莹, 戴子杰, 姚建铨 2025 光学学报 45 0224002]
- [4] Shen P, Ji Y Y, Ma L, Feng J X, Li Y F, Song C W, Yang F, Wang X H, Fan F, Chang S J 2025 *Trends Anal Chem* 191 118342
- [5] Miah A, Al Zafir S, Hasnain M, Das J, Haque S M A, Wahed A 2025 *PLoS One* 20 e0328077
- [6] Wei T, Zhang Y J, Ge H Y, Jiang Y Y, Wu X Y, Sun Z Y, Ji X D, Bu Y W, Jia K K 2024 *Acta Phys. Sin.* 73 224201 (in Chinese) [魏涛, 张玉洁, 葛宏义, 蒋玉英, 吴旭阳, 孙振雨, 季晓

- 迪, 补雨薇, 贾柯柯 2024 物理学报 73 224201]
- [7] Xu J W, Ouyang S J, Duan S X, Zou L R, Ye D N, Yang S J, Deng X H 2024 *Chin Phys B* 33 768
- [8] Pang H Z, Wang X, Wang J L, Wang Z L, Liu S, Tian H Q 2021 *Acta Phys. Sin.* 70 168101 (in Chinese) [庞慧中, 王鑫, 王俊林, 王宗利, 刘苏雅拉图, 田虎强 2021 物理学报 70 168101]
- [9] Zhang J H, Lang T T, Hong Z, Liu J J, Wang P 2022 *IEEE Sens J* 22 16513
- [10] Yang Z S, Li A Q, Wang Z T, Huang F, Chen Z Y 2025 *Physica E* 173 116323
- [11] Fang S J, Yang Z C, Tao Y, Lv W Z, Jiang J Y, Zhang D Q, Wang B X, Yang G F, Shu F Z 2025 *Opt Laser Technol* 183 112345
- [12] Han X C, Zhang Z J, Qu X 2021 *Optik* 228 166086
- [13] Xu Z C, Gao R M, Ding C F, Zhang Y T, Yao J Q 2014 *Chin Phys Lett* 31 054205
- [14] Liu X J, Xia F, Wang M, Liang J, Yun M J 2023 *Photonics* 10 205
- [15] Gu C, Qu S B, Pei Z B, Xu Z, Liu J, Gu W 2011 *Chin Phys B* 20 017801
- [16] Niu J N, Chao X J, Lian H C, Luo J, Qi L H 2025 *Chem Eng J* 519 165123
- [17] Ge H Y, Cao W Y, Wang S, Ji X D, Jiang Y Y, Liu X X, Zhou Y T, Zhang Y, Sun Q C, Wang Y X 2025 *Nanomaterials* 15 1256
- [18] Luo Y, Qiu K P, Xu T Q, Zhang F L, Yue P 2025 *Eng Appl Artif Intell* 151 110801
- [19] Yin S, Zhong H T, Huang W, Zhang W T 2025 *Opt. Laser Technol* 181 111684
- [20] Zhou S, Gai Y X, Lan G Q 2024 *Opt. Commun* 562 130561
- [21] Xie Z H, Qu W W, Deng H, Li G L, Shang L P 2023 *Acta Opt. Sin.* 43 1316001 (in Chinese) [谢朝辉, 屈薇薇, 邓琥, 李桂林, 尚丽平 2023 光学学报 43 1316001]
- [22] Li G L, Huang Y, Wang Y R, Qu W W, Deng H, Shang L P 2025 *Photonics* 12 637
- [23] Qin B Y, Li Y, Liao Q T, Qiu J, Yang R Z, Zheng J C, Zhong H S 2024 *Phys Scr.* 99 065555
- [24] Wang Y D, Wu G Z, Zhang J, Wu X Y, Yuan G D, Liu J G 2024 *Opt. Laser Technol* 170 110262
- [25] Mokhtari A, Rezaei M H, Zarifkar A 2023 *Photonics Nanostruct* 53 101105
- [26] Pham-Van D, Tran-Manh C, Bui-Huu N, Pham-Phuong A, Ta-Minh-Tuan A, Pham-Hoang D, Vu-Minh T, Nguyen-Anh D, Do-Hoang T, Bui-Xuan K, Bui-Son T, Pham-van V, Vu-Dinh L, Pham-Van H 2024 *Opt Mater* 147 114679
- [27] Qu W W, Wang Y R, Li G L, Xie Z H, Li Z R, Deng H, Shang L P 2025 *J Phys D-Appl Phys*

- [28] Wang Y R, Qu W W, Li G L, Deng H, Shang L P 2025 *Acta Phys. Sin.* 74 057801 (in Chinese)
[王玉蓉, 屈薇薇, 李桂林, 邓琥, 尚丽平 2025 物理学报 74 057801]
- [29] Yang X J, Xu H, Xu H Y, Li M, Yu H F, Cheng Y X, Hou H L, Chen Z Q 2024 *Acta Phys. Sin.* 73 157802 (in Chinese) [杨肖杰, 许辉, 徐海焯, 李铭, 于鸿飞, 成昱轩, 侯海良, 陈智全 2024 物理学报 73 157802]
- [30] Li B, Wei L G, Li J K 2024 *J Mod Opt* 71 75
- [31] Sun Y Z, Chen Y X, Qin X F, Huang Y, Liu W L, Xu N X, Wang B X 2025 *Phys Scr.* 100 12
- [32] Li L, Ge H Y, Jiang Y Y, Li G M, Wang F, Lv M, Ji X D, Jia Z Y, Li Z, Zhang Y 2022 *Coatings* 12 11
- [33] Zhao Y, Zhu Z J, Zhao K, Zhao Y, Zhang C H 2024 *IEEE Sens J* 24 34337

录用稿件，非最终出版稿

Frequency selection design of terahertz metamaterial sensors based on non-dominated genetic algorithm-II

Qu Weiwei¹⁾, Wang Yurong¹⁾, Li Guilin¹⁾, Huang Yan¹⁾, Yi Qin¹⁾, Deng Hu^{1)†}

1) (*School of Information and Control Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, Sichuan, China*)

Abstract

Terahertz (THz) radiation, situated in the spectral gap between microwave and infrared frequencies (0.1 - 10 THz), offers distinct advantages including broadband coverage, low photon energy, and unique penetrability. Given that this regime encompasses the fingerprint vibrational modes of numerous biological macromolecules, it presents transformative potential for high-precision sensing. Metamaterials, comprising periodically arranged subwavelength units, can induce robust electromagnetic coupling under THz excitation, facilitating the development of high-sensitivity, non-destructive THz sensors. Precise alignment between the sensor's resonance frequency and the characteristic absorption peak of the analyte maximizes the light-matter interaction at the interface. However, achieving such precise alignment remains a key challenge. Conventional design paradigms predominantly rely on empirical parameter tuning, which lacks precision in frequency targeting, whereas deep-learning-based inverse designs are often constrained by the requirement for massive training datasets and prohibitive computational costs.

This study proposes an efficient optimization framework for THz metamaterial sensors utilizing the Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II) with an elitist strategy. By employing fast non-dominated sorting to stratify the population and integrating crowding distance metrics for individual selection, the algorithm achieves robust frequency selection and performance optimization. To enhance design flexibility, two surface geometries with different spectral responses were integrated, allowing for multi-dimensional modulation of the electromagnetic properties through geometric parameter tuning. An automated co-simulation platform was established by interfacing MATLAB with CST Microwave Studio. Taking the resonant frequency, peak

absorptivity, and quality factor (Q-factor) as multi-objective functions, the algorithm successfully optimized three distinct sensor configurations tailored to specific spectral requirements. Numerical results demonstrate that the resonant peaks of all optimized designs align with the target frequencies within a marginal error of ± 0.05 THz, achieving a peak sensitivity of 351.43 GHz/RIU. Based on impedance matching theory and the analysis of surface electric fields and induced current distributions, the underlying physical mechanism is identified as the synergistic effect of electric dipole resonance and magnetic resonance.

The application of NSGA-II to the frequency-selective design of THz metamaterials enables the realization of tunable multi-band responses by merging structures with heterogeneous electromagnetic properties. This optimization framework significantly enhances design efficiency and provides a systematic methodology for developing multi-band sensors tailored to specific molecular vibrational characteristics, holding substantial promise for applications in biosensing and material characterization.

Keywords: terahertz metamaterial sensor, frequency selection, genetic algorithm, multi-objective

This work was supported by Southwest University of Science and Technology [Grant No.

24ZX7128]

† Corresponding author. denghu@swust.edu.cn

The first author. quweiwei@swust.edu.cn

录用稿件，非最终出版稿