

# 光子晶体理论应用于二元溶液浓度测量的研究

阿不都热苏力 帕孜来提 阿布都外力

新疆大学物理科学与技术学院, 新疆 乌鲁木齐 830046

**摘要** 运用平面波展开法,研究了光子晶体在溶液浓度检测领域上的应用。选择二维三角晶格光子晶体(Si和Ge)作为基底,在空气孔内填充待测百分比浓度不同的混合二元溶液材料,得到了二元溶液填充的光子晶体在不同偏振模式下的光子禁带结构。结果表明,以二元溶液作为空气圆孔中的介质材料,当溶液质量百分比浓度不同时光子带隙(PBG)会发生变化。这对溶液质量百分比浓度检测应用方面有一定的指导作用。

**关键词** 光学器件; 光子晶体; 平面波展开法; 二元溶液; 光子能带结构

**中图分类号** O524; O434

**文献标识码** A

**doi:** 10.3788/LOP52.011203

## Research on the Binary Solution Concentration Detection Based on Photonic Crystal Theory

A.Abuduresuli A.Pazilaiti A.Abuduwaili

*School of Physics and Technology, Xinjiang University, Urumqi, Xinjiang 830046, China*

**Abstract** The application of photonic crystal in the solution concentration detection is investigated by using plane wave expansion method. A two-dimensional triangular lattice photonic crystal (Si and Ge) is chosen as the substrate, filling the air hole with different percentage concentration of mixed binary solution materials which will be measured, and the photonic band gap of the photonic crystal filled with binary solution under different polarization modes is obtained. The results show that when the binary solution is used as the dielectric material in the air hole, the photonic band gap (PBG) changes with the different percentage concentrations of the solution quality. This has a certain guiding function in solution mass percentage concentration detection applications.

**Key words** optical devices; photonic crystal; plane wave expansion method; binary solution; photonic band structure

**OCIS codes** 120.0280; 120.4570; 120.4820; 230.5298; 230.4320

## 1 引言

光子晶体的实际应用较广泛,在研究和制作光子器件方面有巨大潜力。近几年来,化学和生物传感器技术发展的主要方向为“裸眼检测技术”<sup>[1]</sup>,光子晶体独特的结构和光学性能为化学和生物传感器裸眼检测技术提供了新的方向<sup>[2]</sup>。为此,人们可以通过采用不同的介质,使得光子晶体功能化,功能化的光子晶体在吸收入射光后其晶体结构会发生变化,从而会引起晶体结构色的改变,这是光子晶体传感器的检测原理,其应用涉及生物化学物质、各种临床及日常生活中的溶液、毒剂及环境污染物等的检测<sup>[3-4]</sup>。与临床有关的溶液的检测是传感器技术的探索热点。光子晶体将取代复杂昂贵的酶生物和电化学传感器,为临床中常见相关常见溶液的检测提供一个快速及简便的检测途径<sup>[5-6]</sup>。本文以光子晶体的基本禁带理论为基础,运用平面波展开法的Matlab编程语言计算了介电常数不同的二维光子晶体结构的禁带特性,分析了光子晶体禁带特性受结构参数的影响,同时讨论了光子晶体在应用方面的设计方案及其传感器领域内的应用。

## 2 光子晶体的平面波展开法

平面波展开法是研究光子晶体能带的一种简便计算方法。它应用布洛赫(Bloch)定理把相对介电常数

收稿日期: 2014-06-09; 收到修改稿日期: 2014-07-02; 网络出版日期: 2014-12-18

基金项目: 国家自然科学基金(11164030, 11465019)

作者简介: 阿不都热苏力(1961—),男,博士,教授,主要从事光子晶体应用方面的研究。E-mail: abdrusul@sina.com

和电磁场在倒格矢空间以平面波叠加的形式展开,将 Maxwell 方程组从实空间变换到离散傅里叶空间而化成一个本征方程,求解本征方程即可得到光子晶体能带及带隙。

如果光子晶体处在无源空间,并且组成光子晶体介质为各向同性无耗无磁性介质,电磁波在这种光子晶体中传播时,其行为由两个相互独立的方程来描述。只含电场或磁场的主方程式为<sup>[7-11]</sup>

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

(1)式和(2)式分别为代表电场和磁场强度的本征方程。其中  $c$  为真空中光速,  $\omega$  为电磁波震荡频率,  $\varepsilon(\mathbf{r})$  为光子晶体介电常数,  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  分别为磁场和电场强度矢量,在光子晶体中均是空间位移矢量  $\mathbf{r}$  的周期性函数。

对于二维三角晶格光子晶体(如图 1 所示),根据 Bloch 定理,将(1)式和(2)式中的  $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$ 、 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  和  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$  平面波展开:

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} K(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (3)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} B(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (4)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} A(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (5)$$

式中  $\mathbf{G}$  称为倒晶格向量,  $\mathbf{k}$  是被限制于第一布里渊区的波矢。

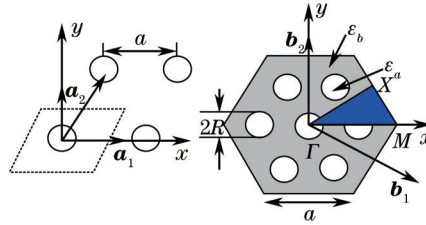


图 1 三角晶格结构和第一布里渊区

Fig.1 Triangular lattice and first Brillouin zone

将(3)~(5)式代入(1)式或(2)式,分别可得 TM 和 TE 偏振态下的本征方程:

$$\sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}| |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') h_1(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_1(\mathbf{G}), \quad (\text{TM}) \quad (6)$$

$$\sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') h_2(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_2(\mathbf{G}). \quad (\text{TE}) \quad (7)$$

在求解光子晶体带隙过程中,一个非常重要的问题就是求解  $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$  的傅里叶展开,对于二维圆柱形三角晶格组成的光子晶体结构,将(6)式或(7)式中的介电常数  $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$  的傅里叶展开可以写出解析表达式:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_a} f + \frac{1}{\varepsilon_b} (1-f), & \mathbf{G} = 0 \\ 2f \left( \frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R)}{|\mathbf{G}|R}, & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases}, \quad (8)$$

式中  $J_1$  为一阶贝塞尔函数,  $f = 2\pi R^2 / (\sqrt{3} a^2)$  为空气圆孔占整个晶胞的百分比,即三角晶格的填充因子。  $\varepsilon_a$  为待测液体的介电常数,  $\varepsilon_b$  为背景材料的介电常数,  $R$  为介质柱截面半径,  $a$  为晶格常数。将(8)式代入(6)式和(7)式,式变成  $2N \times 2N$  的矩阵形式,因此每个  $\mathbf{k}$  点都可以找到其对应的  $\mathbf{M}$  矩阵,解出其本征值  $\omega_{kn}$ ,便可得出二维三角晶格光子晶体的带隙结构图。对于三角晶格光子晶体(如图 1 所示),各正格子基矢表示为

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0) \mathbf{a}_2 = \left( \frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right), \quad (9)$$

$$b_1 = \frac{2\pi}{a} \left( 1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right), b_2 = \frac{2\pi}{a} \left( 0, \frac{2}{\sqrt{3}} \right). \quad (10)$$

表征不可约布里渊区的各点  $\Gamma, X, M$  为

$$\Gamma = \frac{2\pi}{a} (0, 0), X = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{\sqrt{3}}{3}, 0 \right), M = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{1}{3} \right). \quad (11)$$

### 3 数值计算结果

通过求解本征方程(6)式和(7)式,可以计算三角晶格光子晶体的带隙结构。由于光子晶体的带隙越宽,其性能越好,因此,测定百分浓度时尽量选带隙较宽和介电常数差较大的材料,这样做有利于简便检测。本文的二维三角形晶格结构的空气孔型光子晶体设计为如图1所示。模拟系统参量设计如下:选用两种高介电材料硅(Si,  $\epsilon_b = 11.7$ )和锗(Ge,  $\epsilon_b = 16$ )作为背景材料,氯苯与己烷,溴苯与己烷和碘苯与己烷作为待测样品。空气孔的半径为  $r/a = 0.4 \mu\text{m}$ ,晶格常数为  $1 \mu\text{m}$ 。模数为  $n=10$ ,倒格子点数300。溶液的质量百分浓度变化范围限定为0~100%,温度控制为  $20^\circ\text{C}$ 。由图2~7分别为背景光学材料Si和Ge与注入圆柱形空气孔的氯苯-己烷、溴苯-己烷和碘苯-己烷介质构成的二维三角晶格光子晶体的带隙结构图。纵坐标采用标度化的无量纲频率  $\omega a / (2\pi c)$ ,而横坐标采用标度化的Bloch波矢  $k$ 。从图2、3中可以看出,由氯苯-己烷(介电常数为  $\epsilon_a = 2.63$ )和Si构成的三角晶格光子晶体中TE模有1个能隙,即  $\text{gap: } 0.241 \sim 0.303, \Delta = 22.6\%$ ;出现的带隙宽度也比较宽,占全带隙的22.6%,而将Ge材料作为背景的三角晶格光子晶体中TE模有2个能隙,即  $\text{gap: } 0.211 \sim 0.292, \Delta = 32\%$ ;  $\text{gap: } 0.677 \sim 0.685, \Delta = 1.2\%$ ;出现的带隙宽度也比较宽。

从图4~7中可以看出,由溴苯-己烷和碘苯-己烷溶液组成的二元溶液作为三角晶格光子晶体的空气孔介质材料,随着介电常数的不同,出现的带隙其宽度相应地变化。

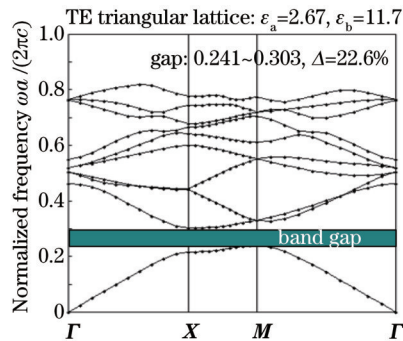


图2 三角晶格结构TE模带隙图[氯苯-己烷(Si)]

Fig.2 Dispersion diagram of the triangular lattice, TE mode [chlorobenzene-hexane material (Si)]

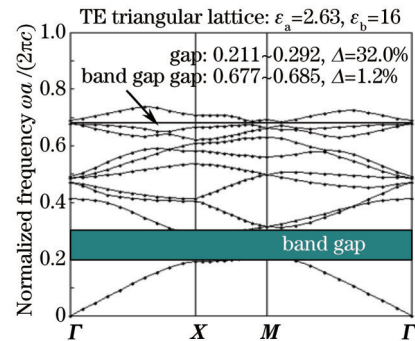


图3 三角晶格结构TE模带隙图[氯苯-己烷(Ge)]

Fig.3 Dispersion diagram of the triangular lattice, TE mode [chlorobenzene-hexane material (Ge)]

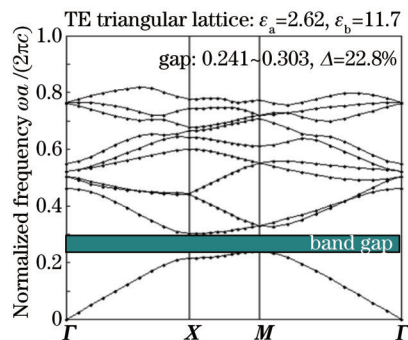


图4 三角晶格结构TE模带隙图[溴苯-己烷(Si)]

Fig.4 Dispersion diagram of the triangular lattice, TE mode [bromo-hexane material (Si)]

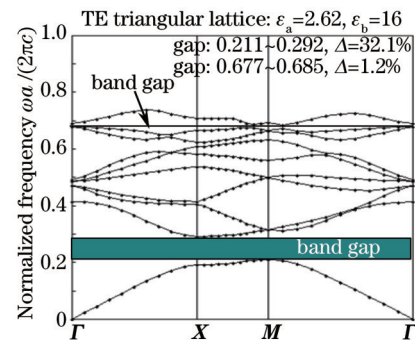


图5 三角晶格结构TE模带隙图[溴苯-己烷(Ge)]

Fig.5 Dispersion diagram of the triangular lattice, TE mode [bromo-hexane material (Ge)]

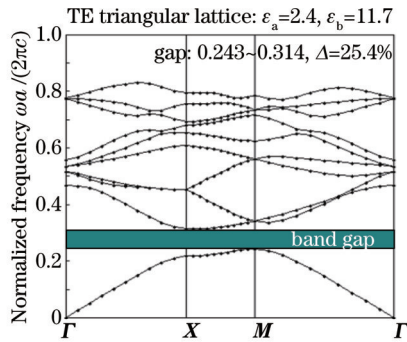


图6 三角晶格结构TE模带隙图[碘苯-己烷(Si)]

Fig.6 Dispersion diagram of the triangular lattice, TE mode [iodobenzene-hexane material (Si)]

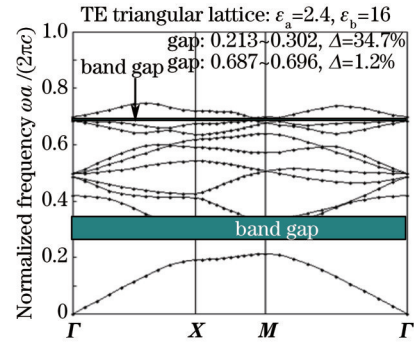


图7 三角晶格结构TE模带隙图[碘苯-己烷(Ge)]

Fig.7 Dispersion diagram of the triangular lattice, TE mode [iodobenzene-hexane material (Ge)]

在不同百分浓度和介电常数情形下,对三角晶格光子禁带进行数值模拟计算得到了表1所示的禁带宽度。图8和图9是根据表1中的计算数据来画成的二元溶液百分浓度与其介电常数的变化曲线图,在图中的正方、圆和三角点各代表一定百分浓度所对应的带隙值。可以看出,在一定温度下,二元溶液百分浓度与其光子带隙最大宽度约呈线性关系。当溶液的浓度逐渐增大时,其对应的光子带隙最大宽度随之变小,且呈一定的比例关系。通过上述的数值模拟可以得出:对于温度一定的二元混合溶液的百分浓度与光子晶体的带隙呈近似线性关系,被测溶液百分浓度越大,产生的带隙越小。根据这个原理,可以通过光子晶体的光强大小变化来测定溶液的百分浓度。

表1 二元溶液百分比浓度对光子晶体带隙宽度的影响

Table 1 Photonic crystal band gap width with the percentage concentration of binary solution

Binary solution	Temperature /°C	Percentage concentration	Dielectric constant	Band gap range (Si)	Band gap range (Ge)
Chlorobenzene-hexane material	20	0	1.89	0.2468~0.3428	0.2152~0.3272
		0.243	2.63	0.2407~0.3024	0.2108~0.2912
		0.461	3.38	0.2352~0.2740	0.2069~0.2649
		0.658	4.15	0.2301~0.2524	0.2032~0.2445
		0.837	4.91	0.2255~0.2360	0.1999~0.2287
Bromo-hexane material	20	0	1.89	0.2468~0.3428	0.2152~0.3272
		0.238	2.62	0.2408~0.3028	0.2109~0.2916
		0.455	3.34	0.2355~0.2753	0.2076~0.2692
		0.652	4.05	0.2308~0.2549	0.2037~0.2468
		0.834	4.75	0.2265~0.2392	0.2006~0.2318
Iodobenzene-hexane material	20	0	1.89	0.2468~0.3428	0.2152~0.3272
		0.227	2.40	0.2425~0.3133	0.2121~0.3011
		0.439	2.93	0.2384~0.2899	0.2092~0.2797
		0.637	3.48	0.2345~0.2708	0.2064~0.2619
		0.824	4.04	0.2308~0.2552	0.2037~0.2471
		1.0	4.64	0.2271~0.2414	0.2011~0.2339

## 4 结 论

根据带隙计算的平面波展开法,以Si和Ge介质为本底材料,以禁带宽度较大的三角晶格光子晶体TE模的禁带模型为研究对象,计算了不同百分浓度情况下光子晶体带隙宽度的变化状况。本研究的设计中二维三角晶格光子晶体的空气孔内填溶液以后,将光子晶体的两侧用两个玻璃片封住,然后用波长589 nm的纳光灯照射光子晶体,穿过的光强被光电探测器测量。通过光电探测器测量穿过光子晶体以后变化的光强



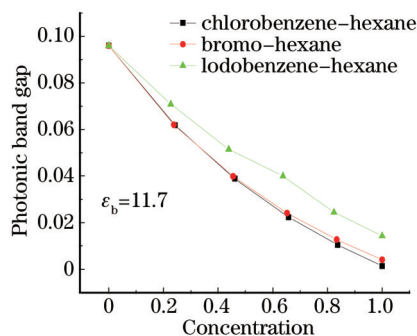


图8 三种溶液百分浓度随光子带隙的变化(Si背景)

Fig.8 Three kinds of percentage solution concentration change with band gap (Si background)

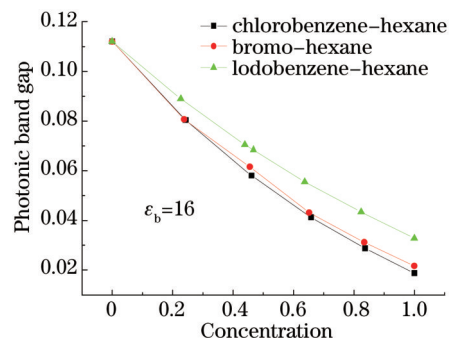


图9 三种溶液百分浓度随光子带隙的变化(Ge背景)

Fig.9 Three kinds of percentage solution concentration change with band gap (Ge background)

可以知道二元混合溶液的百分浓度。结果表明,当温度为 20 °C 的氯苯-己烷、溴苯-己烷和碘苯-己烷三种二元溶液作为介质柱材料时,溶液中氯苯、溴苯和碘苯在溶液中的百分含量的增大,光子晶体禁带宽度变小。氯苯-己烷和溴苯-己烷的禁带宽度比较接近,碘苯-己烷溶液的禁带宽度最大。

### 参考文献

- Duan Tingrui, Li Haihua, Meng Zihui, *et al.*. Application of photonic crystals in chemical and bio-sensors[J]. Chemistry, 2009, 72(4): 298-305.  
段廷蕊, 李海华, 孟子晖, 等. 光子晶体应用于化学及生物传感器的研究进展[J]. 化学通报, 2009, 72(4): 298-305.
- Tang Bingshu, Tang Xiaozhou, Wang Gang. Transmission spectra of two dimensional cylindrical layered complex periodic photonic crystal[J]. Infrared and Laser Engineering, 2011, 40(11): 2138-2142.  
汤炳书, 汤晓舟, 王 刚. 二维圆柱层状复周期光子晶体的透射谱[J]. 红外与激光工程, 2011, 40(11): 2138-2142.
- A Abudurexiti, P Mijit. Two dimensional photonic band structure: the square lattice[J]. Journal of Xinjiang University, 2003, 20(1): 32-35.  
阿不都热苏力, 帕尔哈提. 二维光子晶体及其光子带结构研究[J]. 新疆大学学报, 2003, 20(1): 32-35.
- P Gopinath, K T Sukanta. A novel method for measurement of concentration using two dimensional Photonic crystal structures[J]. Opt Commun, 2012, 285(10): 2765-2768.
- Yi Changshen, Zhang Peiqing, Dai Shixun, *et al.*. Research progress of large-mode area photonic crystal fibers[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2012, 49(10): 100001.  
易昌申, 张培晴, 戴世勋, 等. 大模场光子晶体光纤研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2012, 49(10): 100001.
- A Abudurexiti, Pazilaiti, M Paerhati, *et al.*. Application of plane wave expansion method in measurement of mass fraction[J]. Laser Technology, 2014, 38(1): 65-69.  
阿不都热苏力, 帕孜来提, 帕尔哈提, 等. 平面波展开法在质量分数测量上的应用研究[J]. 激光技术, 2014, 38(1): 65-69.
- Jin Chongjun, Qin Bai, Yang Sen, *et al.*. Two dimensional photonic band structure: triangular non bravais lattice[J]. Acta Optica Sinica, 1997, 17(4): 409-413.  
金崇君, 秦 柏, 杨 森, 等. 三角形复式晶格的光子带结构研究[J]. 光学学报, 1997, 17(4): 409-413.
- J B Pendry, A Mackinnon. Calculation of photon dispersion relations[J]. Phys Rev Lett, 1992, 69(19): 2772-2775.
- M Plihal, A Shambrook, A A Maradudin, *et al.*. Two-dimensional photonic band structures[J]. Opt Commun, 1991, 80(1): 199-204.
- Wang Huayong, Xu Xingsheng. Research progress of photonic crystal vertical cavity surface emitting laser[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2012, 49(9): 090003.  
王华勇, 许兴胜. 光子晶体垂直腔面发射激光器的研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2012, 49(9): 090003.
- Liu Jinchuan, Jiang Wei, Li Shuping, *et al.*. Study of photonic band gap of 2D photonic crystals used in short-wavelength LED[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(6): 0623006.  
刘金川, 姜 伟, 李书平, 等. 用于短波段发光二极管的二维光子晶体禁带研究[J]. 光学学报, 2012, 32(6): 0623006.

栏目编辑: 何卓铭