

激光与光电子学进展

近红外与太赫兹双波段局域场增强结构设计

冀宝庆¹, 李香宇², 王艳红^{1*}, 武京治¹¹中北大学信息与通信工程学院, 山西 太原 030051;²中北大学仪器与电子学院, 山西 太原 030051

摘要 设计了一种近红外与太赫兹双波段局域场增强结构,由微米级矩形槽结构与纳米级双圆盘结构构成。利用微米级矩形槽结构实现太赫兹共振增强,同时将纳米级双圆盘结构与其相结合实现在近红外波段的光学捕获,并采用时域有限差分法对结构进行仿真分析。研究结果表明:双波段局域场增强结构在 0.63 THz 处有谐振峰同时具有强的局域场增强,最大电场增强 1800;在近红外波段入射光强为 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 时,势阱深度达到 $30k_B T$,可以实现粒子的稳定捕获。该研究结果对生物大分子太赫兹振动谱探测具有一定的参考意义。

关键词 光谱学; 双波段局域场增强结构; 光学捕获; 时域有限差分法

中图分类号 O441.4

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP222443

Structure Design of Near-Infrared and Terahertz Dual-Band Local Field Enhancement

Ji Baoqing¹, Li Xiangyu², Wang Yanhong^{1*}, Wu Jingzhi¹¹School of Information and Communication Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, Shanxi, China;²School of Instrument and Electronics, North University of China, Taiyuan 030051, Shanxi, China

Abstract A local field enhancement structure with dual-band of near infrared and terahertz is designed, which consists of a micron-scale rectangular groove structure and a nano-scale double disk structure. The terahertz resonance enhancement is realized by using the micron-scale rectangular groove structure, and the nanoscale double disk structure is combined with it to achieve optical capture in the near infrared band. The structure is simulated and analyzed by the finite difference time domain method. Research results show that the dual-band local field enhancement structure has a resonance peak at 0.63 THz and strong local field enhancement, and the maximum electric field enhancement is 1800. When the incident light intensity in the near infrared band is $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$, the depth of the potential well reaches $30 k_B T$, which can achieve stable trapping of particles. The results have a certain reference significance for the detection of THz vibration spectrum of biological macromolecules.

Key words spectroscopy; dual-band local field enhancement structure; optical capture; finite difference time domain

1 引言

纳米结构中电磁波的局部场增强和限制对于生物分子的应用至关重要,如单分子检测^[1-2]、光学捕获^[3-4]等。蛋白质等生物分子的动力学特性体现了分子结构与功能的关系,其低频振动模式($<300 \text{ GHz}$)与蛋白质折叠、聚集等重要的三维构象变化和生物能量传输密切相关^[5],是决定其生物功能的关键因素^[6-7]。目前,

蛋白质分子振动谱测量主要针对高频频率($5000\sim 300 \text{ cm}^{-1}$),如红外光谱技术^[8]、拉曼光谱技术^[9]和太赫兹时域光谱^[5,10]等,由于蛋白质分子微观运动(皮秒到纳秒范围内)和溶液分子间相互作用等影响,导致蛋白质低频振动频谱分布($<10 \text{ THz}$)尚缺乏高精度的实验测量方法,因此,蛋白质分子低频振动在其分子生物活性和生物学功能研究领域的应用受到了限制。Yu 等^[11]通过矩形槽阵列结构以及电俘获的方式分析了粒

收稿日期: 2022-08-02; 修回日期: 2022-09-09; 录用日期: 2022-09-23; 网络首发日期: 2022-10-08

基金项目: 国防科技创新特区(02-ZT-008)

通信作者: *amyw0919@163.com

子在溶液中动力学特性,为溶液中太赫兹信号的分析提供了一种可能。Wheaton 等^[12-13]利用双激光拍频的方式激励生物分子产生谐振,测量了两种球蛋白分子在 $0.1\sim 10\text{ cm}^{-1}$ 范围内的低频振动。由于双激光拍频直接激励生物分子的方式可以避免水溶液对太赫兹信号的吸收,为水溶液中探测生物分子太赫兹信号提供了一种可能,但是其所探测的谐振信号很微弱,使得后续数据处理以及特性研究存在一定困难。因此本文设计了一种近红外波段与太赫兹波段双波段局域场增强结构,可以通过双激光拍频的方式在近红外波段实现对生物分子的稳定捕获,同时增强生物分子太赫兹谐振,为生物大分子太赫兹振动谱探测提供一定参考意义。

2 结构与方法

为了在太赫兹波段实现电磁场的局域增强,本文采用如图 1 所示矩形槽结构,金膜上有尺寸为 $a \times b$ ($a \gg b$) 的矩形槽,该金膜位于折射率为 n 的介质基板上。当 x 偏振光垂直照射到矩形槽结构时,由于光与金属狭缝结构的电容耦合,透射传输增强,同时矩形槽结构与光发生共振导致电磁场的局域增强。理论上,谐振频率 $f_{\text{res}} = c_0 / \left[a \sqrt{2(n_{\text{sub}}^2 + n_{\text{med}}^2)} \right]$, 其中 c_0 为光速, n_{sub} 为介质基板折射率, n_{med} 为矩形槽中介质折射率。为了实现在 $0.5\sim 1\text{ THz}$ 的谐振增强,将矩形槽长度 a 设计为 $150\ \mu\text{m}$, 宽度 $b=200\ \text{nm}$ 。同时,如图 1 所示,本文在矩形槽结构中设计双圆盘结构实现在近红外波段对生物分子的捕获,双圆盘结构半径 $r=65\ \text{nm}$, 中心距 $D_{\text{gap}}=20\ \text{nm}$ 。

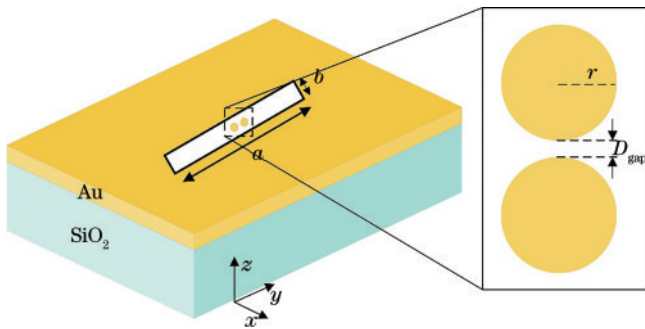


图 1 双波段局域场增强结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of dual-band local field enhancement structure

为了优化结构设计,采用时域有限差分(FDTD)法分别在 THz 波段和近红外波段对结构进行仿真计算。其中金膜厚度为 $150\ \text{nm}$, 基底材料为 SiO_2 , 由于在 THz 波段金属材料可以近似为完美电导体(PEC), 因此在 THz 波段金膜材料采用 PEC 材料。为了保证数值精度,将矩形槽结构以及双圆盘结构区域内的网格尺寸设为 $2\ \text{nm}$, 其他区域采用自动分级网格,同时

整个仿真区域周围设置完美匹配层边界条件。考虑到实际加工过程中对纳米结构精度的限制,需要尽量将纳米结构尺寸变大,因此在仿真过程中,近红外波段选用 y 方向偏振的高斯光束激发,数值孔径为 0.65 , 太赫兹波段采用 x 方向偏振平面波激发。

3 分析与讨论

图 2 为双波段局域场增强结构的场分布及透射特性曲线,如图 2(a)、(c) 所示, $150\ \mu\text{m}$ 长、 $200\ \text{nm}$ 宽矩形槽结构在 $0.63\ \text{THz}$ 处有谐振峰的出现,与理论值一致,同时在谐振波长处电场局域在矩形槽结构狭缝处,最大电场增强为 1800 。根据矩形槽太赫兹天线共振理论^[15]可知,太赫兹局域场增强与矩形槽结构宽度成反比,由于本文需要在矩形槽结构中设计纳米结构同时实现粒子捕获以及太赫兹场的增强,因此矩形槽结构宽度为 $200\ \text{nm}$ 。图 2(b)、(d) 分别为近红外波段纳米结构的透射特性曲线以及 XY 方向电场分布,由于在外加光激励作用下,金属结构表面的电子产生共振,表面等离子体极化激元^[16](SPPs)的波矢远大于真空中波矢, SPPs 沿金属表面方向上的波矢分量增大,而在垂直于表面方向上的波矢分量减小,同时与结构发生谐振,因此在 $850\ \text{nm}$ 处有谐振峰的出现以及在两个圆盘纳米间隙处实现了对电磁场的局域场增强。

由于水溶液在 $850\ \text{nm}$ 附近具有较低的吸收峰^[17], 因此本文采用两个波长为 $850\ \text{nm}$ 附近激光器作为激光光源,两束激光相互作用产生可调太赫兹拍频信号,太赫兹拍频信号作用于捕获位置的生物分子,从而激发生物分子的太赫兹谐振。为了在 $850\ \text{nm}$ 附近对粒子进行捕获,分别改变 r 、 D_{gap} 对结构进行优化分析,其他参数不变。从图 3(a) 可以看出,随着 D_{gap} 减小,透射曲线谐振峰值变小且发生红移。从图 3(b) 可以看出,两个圆盘间隙在 $20\ \text{nm}$ 的情况下,随着圆盘半径的增大,两个圆盘与矩形槽边缘发生共振耦合,透射曲线谐振峰值逐渐增大并且发生红移。考虑到所采用激光器波长以及工艺加工的可行性,本文后续讨论均采用 $D_{\text{gap}}=20\ \text{nm}$ 、半径 $r=65\ \text{nm}$ 的双圆盘结构。

为了证明双圆盘结构能够实现对生物分子的稳定捕获,通过麦克斯韦应力张量(MST)的方法计算了距离结构表面上方 $10\ \text{nm}$ 处半径为 $20\ \text{nm}$ 的纳米介质微球 ($n=1.6$) 表面的光学梯度力和相应的势阱分布^[18-19]。光学梯度力表示为

$$\langle F \rangle = \left\langle \oint_S \mathbf{T}_M \cdot \mathbf{n} dS \right\rangle, \quad (1)$$

式中:积分区域为一个围绕粒子的闭合表面; \mathbf{n} 是垂直于积分面积 dS 的单位法线; \mathbf{T}_M 是麦克斯韦应力张量。 \mathbf{T}_M 表示为

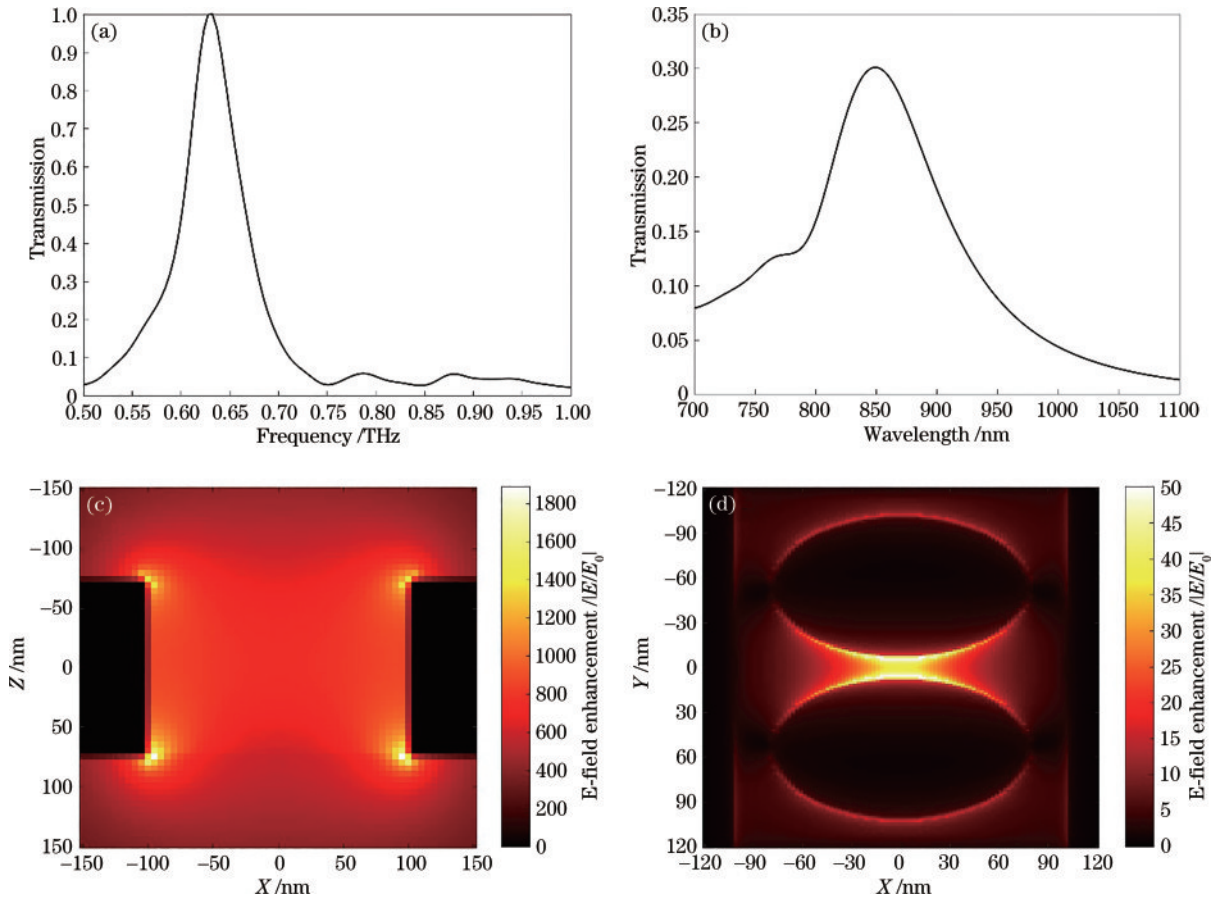


图 2 双波段局域场增强结构场分布及透射特性曲线。(a) (c)太赫兹波段透射特性曲线及XZ方向电场分布；(b) (d) 近红外波段透射特性曲线及XY方向电场分布

Fig. 2 Field distribution and transmission characteristic curve of dual-band local field enhanced structure. (a)(c) Transmission characteristic curve of terahertz band and electric field distribution in XZ direction; (b)(d) transmission characteristic curve in near-infrared band and electric field distribution in XY direction

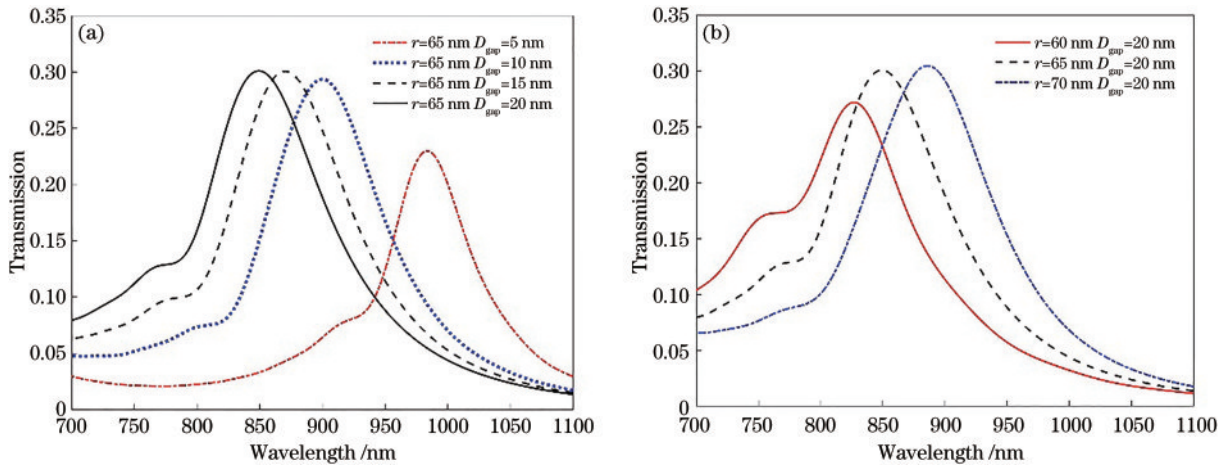


图 3 不同条件透射特性曲线。(a) 不同圆盘间隙；(b) 不同圆盘半径

Fig. 3 Transmission characteristic curves under different conditions. (a) Different disc gaps; (b) different disc radii

$$T_M = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\epsilon \mathbf{E} \mathbf{E}^* + \mu \mathbf{H} \mathbf{H}^* - \frac{1}{2} (\epsilon |\mathbf{E}|^2 + \mu |\mathbf{H}|^2) \mathbf{I} \right], \quad (2)$$

式中： $\mathbf{E} \mathbf{E}^*$ 和 $\mathbf{H} \mathbf{H}^*$ 为电磁场的输出量； \mathbf{I} 为单位矩阵； ϵ 和 μ 分别表示介质的介电常数和磁导率。

本文利用 Lumerical FDTD 在微球表面建立 MST 分析组来计算粒子所受力大小。为了进一步研究双圆盘结构在满足稳定捕获时所需的入射光强条件,对结果进行归一化处理,并将微球的受力分布利用 Matlab 进行积分,得到结构中的势阱分布情况,势阱表

达式为

$$U(r_0) = - \int_{\infty}^{r_0} \mathbf{F}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3)$$

式中： $U(r_0)$ 是位置 r_0 处势阱的深度。通常来说，一个粒子是否能够稳定俘获，需要满足两个条件^[20-21]：一是粒子所受到的光学力能够将粒子推至捕获点，该点受力为0且两侧的光学力方向发生突变；二是为了实现稳定捕获，该点的势阱深度应该大于 $10k_B T$ (k_B 为玻尔兹曼常数， T 为绝对温度300 K)以补偿粒子由于其布朗运动而离开光学势阱。图4(a)和(b)为在 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 入射光强下 $y=0$ 处不同 x 的取值所对应的光捕获力及其势阱分布。由于结构的对称性，其表面的光捕获力分布

也具有对称性。当微球在 x 方向沿着 $y=0$ 直线运动时， F_y 始终趋于0，而 x 方向的受力与结构表面的电磁场分布梯度相关。在 $x < 0$ 时，微球所受力的大小为正数，表示正作用力 F_x 将微球推向势阱中心，而当微球跨过坐标原点后，受力方向发生突变，微球受力大小为负数，表示负作用力 F_x 将微球拉向势阱中心。因此，通过微球受力分析可知，在正作用力 $F_x(x < 0)$ 和负作用力 $F_x(x > 0)$ 两种力的作用下，微球会被推至坐标原点处即捕获位置中心。从图4(b)可以看出，在 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 入射光强下的最大势阱深度为 $30k_B T$ ，可以实现微球的稳定捕获。

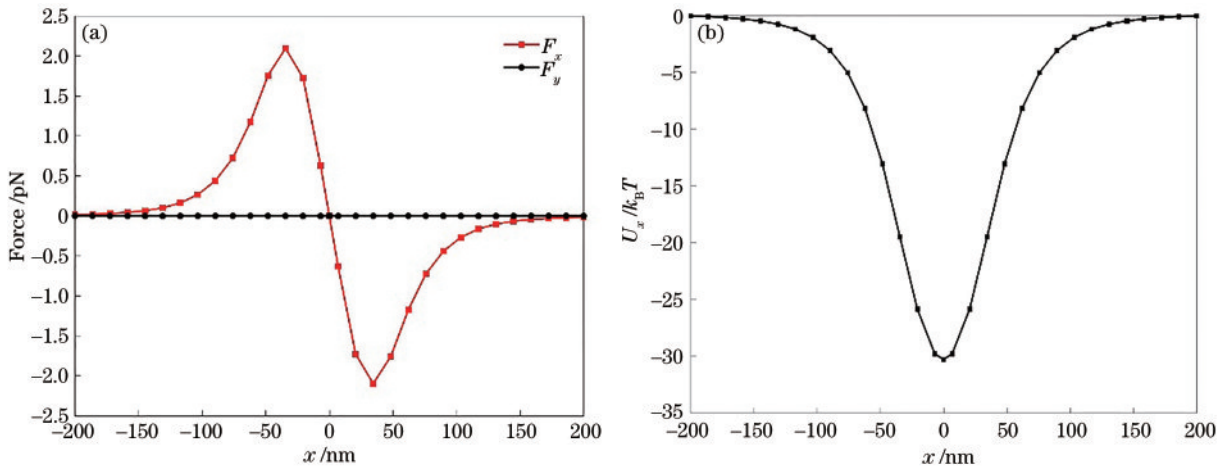


图4 在 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 入射光强下 $y=0$ 处的光捕获力和势阱分布。(a)光捕获力；(b)势阱分布

Fig. 4 Optical force and trapping energy distribution at $y=0$ under $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ incident light intensity. (a) Optical forces; (b) trapping energy distribution

为了进一步研究微球是否能在结构中被稳定捕获，通过改变微球的运动路径，计算其在 $x=0$ 处不同 y 取值运动时的受力情况，如图5(a)所示。当微球沿着 $x=0$ 运动时， F_x 始终趋于0；当微球沿着 y 方向从 -200 nm 向结构中心运动时，由于双圆盘结构的边缘

有一定的场分布，在 150 nm 附近力的方向发生突变，但是其无法使微球在此处稳定捕获；当 $y > 0$ 时， F_y 方向发生突变，并且如图5(b)所示，其在 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 光强下能产生的最大势能约为 $26k_B T$ ，能够将微球稳定捕获在结构中心。综合 x 方向、 y 方向对光捕获力和势能

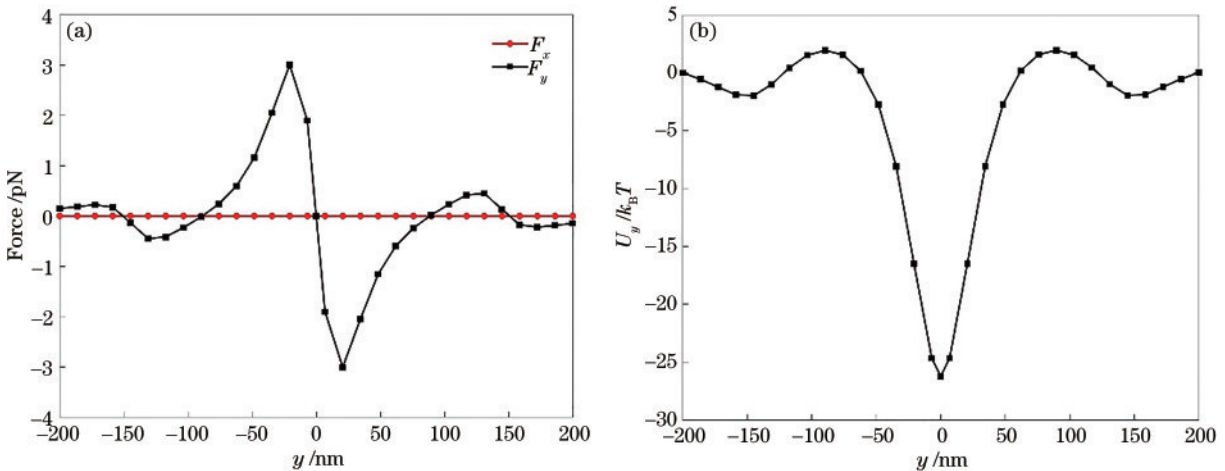


图5 在 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 入射光强下 $x=0$ 处的光捕获力和势阱分布。(a)光捕获力；(b)势阱分布

Fig. 5 Optical force and trapping energy distribution at $x=0$ under $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ incident light intensity. (a) Optical forces; (b) trapping energy distribution

分布曲线的分析可得,在入射光强为 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 的情况下,双圆盘结构在结构中心的最大势阱深度大于 $10 k_B T$,可以实现微球在结构中心处的稳定捕获。

4 结 论

本文提出了一种近红外波段与太赫兹波段局域场增强结构,利用 FDTD 分别计算了在近红外波段与太赫兹波段的透射特性曲线以及其场分布,进一步研究了结构在近红外波段对微球的光学俘获性能。结果表明,该双波段局域场增强结构可以在 0.63 THz 处实现局域场增强,最大电场增强为 1800,并且在近红外波段入射光强为 $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ 时,势阱深度达到 $30 k_B T$,可以实现粒子的稳定捕获。该研究结果有望应用于通过激光稳定捕获生物分子,同时增强生物分子太赫兹谐振信号,实现生物分子的太赫兹信号探测。

参 考 文 献

- [1] Taylor A B, Zijlstra P. Single-molecule plasmon sensing: current status and future prospects[J]. ACS Sensors, 2017, 2(8): 1103-1122.
- [2] Karim F, Smith T B, Zhao C L. Review of optical detection of single molecules beyond the diffraction and diffusion limit using plasmonic nanostructures[J]. Journal of Nanophotonics, 2017, 12(1): 012504.
- [3] Jia P X, Shi H Y, Niu Y F, et al. Enhanced optical forces and tunable LSPR of Ag triangular nanoplates for plasmonic tweezers[J]. Plasmonics, 2022, 17(2): 551-558.
- [4] 荣升, 刘洪双, 钟莹, 等. 基于光力捕获金纳米立方体的拉曼光谱增强[J]. 光学学报, 2021, 41(17): 1730003.
Rong S, Liu H S, Zhong Y, et al. Enhancement of Raman spectra based on optical trapping of gold nanocubes [J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(17): 1730003.
- [5] Turton D A, Senn H M, Harwood T, et al. Terahertz underdamped vibrational motion governs protein-ligand binding in solution[J]. Nature Communications, 2014, 5: 3999.
- [6] González-Jiménez M, Ramakrishnan G, Tukachev N V, et al. Low-frequency vibrational modes in G-quadruplexes reveal the mechanical properties of nucleic acids[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2021, 23(23): 13250-13260.
- [7] Niessen K A, Xu M Y, Paciaroni A, et al. Moving in the right direction: protein vibrations steering function[J]. Biophysical Journal, 2017, 112(5): 933-942.
- [8] Calabrò E, Magazù S. Resonant interaction between electromagnetic fields and proteins: a possible starting point for the treatment of cancer[J]. Electromagnetic Biology and Medicine, 2018, 37(3): 155-168.
- [9] 白鹤轩, 杨峰, 李丹阳, 等. 基于表面增强拉曼光谱的多组分物质分类识别[J]. 光学学报, 2021, 41(20): 2024001.
Bai H X, Yang F, Li D Y, et al. Multi-component substance classification and recognition based on surface-enhanced Raman spectroscopy[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(20): 2024001.
- [10] Acbas G, Niessen K A, Snell E H, et al. Optical measurements of long-range protein vibrations[J]. Nature Communications, 2014, 5: 3076.
- [11] Yu E S, Lee S H, Lee G, et al. Nanoscale terahertz monitoring on multiphase dynamic assembly of nanoparticles under aqueous environment[J]. Advanced Science, 2021, 8(11): 2004826.
- [12] Wheaton S, Gelfand R M, Gordon R. Probing the Raman-active acoustic vibrations of nanoparticles with extraordinary spectral resolution[J]. Nature Photonics, 2015, 9(1): 68-72.
- [13] Burkhartsmeier J, Wang Y H, Wong K S, et al. Optical trapping, sizing, and probing acoustic modes of a small virus[J]. Applied Sciences, 2020, 10(1): 394.
- [14] Choe J H, Kang J H, Kim D S, et al. Slot antenna as a bound charge oscillator[J]. Optics Express, 2012, 20(6): 6521-6526.
- [15] Kang J H, Park Q H. Local enhancement of terahertz waves in structured metals[J]. IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, 2016, 6(3): 371-381.
- [16] 徐厚祥, 徐彬, 熊吉川, 等. 表面等离子体共振和局域表面等离子体共振技术在病毒检测领域的研究进展[J]. 中国激光, 2022, 49(15): 1507401.
Xu H X, Xu B, Xiong J C, et al. Research progress of surface plasmon resonance and local surface plasmon resonance in virus detection[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(15): 1507401.
- [17] 樊梦丽, 赵越, 刘言, 等. 近红外光谱水光谱组学[J]. 化学进展, 2015, 27(2/3): 242-250.
Fan M L, Zhao Y, Liu Y, et al. Aquaphotomics of near infrared spectroscopy[J]. Progress in Chemistry, 2015, 27(2/3): 242-250.
- [18] 申泽, 成煜, 邓洪昌, 等. 鸟喙形环纤芯光纤光镊粒子捕获受力分析[J]. 光学学报, 2021, 41(18): 1808001.
Shen Z, Cheng Y, Deng H C, et al. Analysis of trapping force of beak-shaped optical tweezers with annular core fibers for particles[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(18): 1808001.
- [19] Ji A, Raziman T V, Butet J, et al. Optical forces and torques on realistic plasmonic nanostructures: a surface integral approach[J]. Optics Letters, 2014, 39(16): 4699-4702.
- [20] Amendola V, Pilot R, Frascioni M, et al. Surface plasmon resonance in gold nanoparticles: a review[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2017, 29(20): 203002.
- [21] Ashkin A, Dziedzic J M, Bjorkholm J E, et al. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles[J]. Optics Letters, 1986, 11(5): 288-290.