

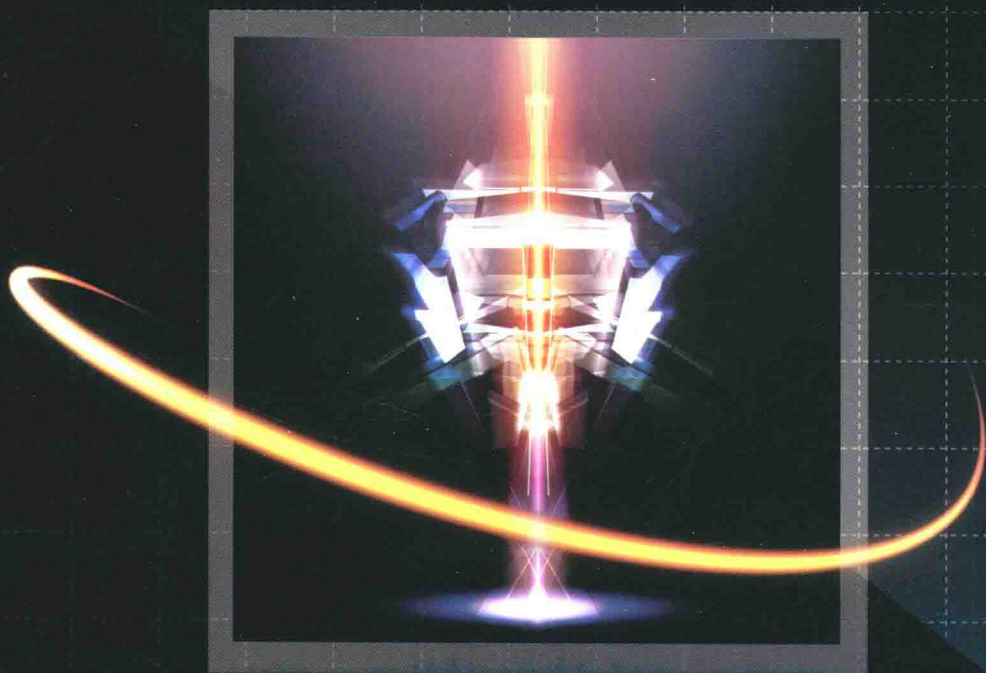


高端科技专著丛书

# 新型激光器件与 LIBS 技术

New Lasers and LIBS Technology

◆ 乌日娜 宁日波 岱 钦 徐送宁 著



中国工信出版集团



电子工业出版社  
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY  
<http://www.phei.com.cn>

高端科技专著丛书

# 新型激光器件与 LIBS 技术

乌日娜 宁日波 岱 钦 徐送宁 著

電子工業出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

## 内 容 简 介

本书包括两篇。第1篇为新型激光器件。阐述了光子晶体、液晶的分类和结构,计算得出了一维光子晶体和胆甾相液晶的光子禁带特性;论述了胆甾相液晶激光器和聚合物分散液晶薄膜激光器的实验方法和结果;阐明了激光产生、运行及波长调谐输出的机理。第2篇为激光诱导击穿光谱分析技术。实验测得了LIBS自吸和空间约束增强特性;论述了LIBS定量分析样品微区均匀性检验方法,得出了微区不均匀性判定的理论临界值;阐明了LIBS标准样品研制方法。

本书理论与实践相结合,配有大量图表和实验数据,适合从事激光器件和LIBS分析等应用研究的工程技术人员、大专院校师生和实验人员参考。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。  
版权所有,侵权必究。

## 图书在版编目(CIP)数据

新型激光器件与 LIBS 技术 / 乌日娜等著. —北京: 电子工业出版社, 2016. 11  
(高端科技专著丛书)

ISBN 978-7-121-30408-8

I. ①新… II. ①乌… III. ①激光器件 ②光谱分析 IV. ①TN365 ②O433.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 280641 号

策划编辑: 曲 昕

责任编辑: 夏平飞

印 刷: 三河市鑫金马印装有限公司

装 订: 三河市鑫金马印装有限公司

出版发行: 电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

开 本: 787 × 1 092 1/16 印张: 12 字数: 306 千字

版 次: 2016 年 11 月第 1 版

印 次: 2016 年 11 月第 1 次印刷

定 价: 58.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题, 请向购买书店调换。若书店售缺, 请与本社发行部联系, 联系及邮购电话: (010)88254888, 88258888。

质量投诉请发邮件至 [zlt@phei.com.cn](mailto:zlt@phei.com.cn), 盗版侵权举报请发邮件至 [dbqq@phei.com.cn](mailto:dbqq@phei.com.cn)。

本书咨询联系方式: [quxin@phei.com.cn](mailto:quxin@phei.com.cn)。

# 前 言

本书是我们研究团队多年研究工作的总结。本书内容分为两篇：第1篇，新型激光器件；第2篇，激光诱导击穿光谱分析技术。

从1960年第一台激光器问世至今，激光技术已经渗透到几乎所有学科，并在多种领域中扮演着不可替代的角色。液晶激光器是一种将激光染料掺杂到液晶中，并利用光子禁带或多重散射提供光反馈的新型激光器。与传统激光器相比，液晶激光器的反馈直接分布于增益介质中，不需要额外加装谐振腔，容易实现微型化和光学系统集成化。当选用不同的激光染料时，其输出激光波长范围涵盖了紫外、可见、红外区域。液晶材料对外界温度、电磁场和应力变化非常敏感，液晶分子能改变其分子排列对外部条件做出迅速响应。通过改变外界温度、电磁场和外界压力等因素可以实现对液晶激光器输出波长的调谐。由于其特殊的结构和激发机制，液晶激光器具有可调谐、窄线宽、激发阈值低和尺寸微小等优点，这些优势使得液晶激光器在光学集成、激光显示、医学和光通信等领域具有巨大的应用前景。液晶激光器的研究是液晶研究领域的新方向，目前还未见到有关书籍。

第1篇为新型激光器件。第1章简介光子晶体、液晶以及研究光子禁带理论的研究方法。第2章、第3章、第4章详细论述液晶激光器的实验研究方法以及实验成果，并基于光子态密度理论和环形腔理论进行了深入分析，包括胆甾相液晶激光器、聚合物分散液晶薄膜激光器以及光子晶体光纤为载体的液晶随机激光器。第4章为大能量固体激光器研究，这是本书第1篇和第2篇的承上启下部分。

LIBS技术诞生得较早，它是随着20世纪60年代初激光器的发明而产生的，是激光技术和光谱分析技术的集成创新成果。LIBS分析技术是一种将（脉冲）激光聚焦于样品表面，当激光的强度高于样品的击穿阈值时即可产生等离子体光频辐射，利用光谱仪采集原子发射光谱（简称AES）信号，通过分析AES中元素对应的特征谱线的波长和强度从而确定样品的元素组成（定性分析）以及元素质量分数（定量分析）的光谱分析技术。LIBS技术在AES分析技术中能够使用单个脉冲激光实现对各种形态样品的取样、原子化和激发三个步骤的一次完成，因此相比于其他仪器分析方法具有以下技术优势：①分析速度快（无须进行处理样品）；②可进行接近无损的微区分析；③适合各种物态；④远程分析和原位分析。该技术从诞生至20世纪90年代中期，发展缓慢，LIBS的早期背景辐射较高、对样品的激发效果不佳、元素间效应较严重，表现为定量分析方法的精密度和准确度都较差。随着（微）电子技术的进步，在20世纪90年代中后期，特别是进入21世纪以来，各种电子感光元件的应用得到了推广，电子感光元件替代了感光板，光谱记录实现了实时采集和时间分辨光谱技术，时间分辨光谱技术使得LIBS的早期背景辐射对分析结果的影响大大降低，在一定程度上提高了LIBS定量分析水平，使得LIBS技术迅速地应用在多种领域。虽然LIBS技术有了较大的进步，但是相比于现有的成熟的AES分析技术还有一定差距：①现有的激光器对样品的激发效果仍然欠佳、光谱线自吸（和自蚀）仍然较严重，其光谱灵敏度仍有待

增强、光谱自吸（和自蚀）仍须改善；②现有的 LIBS 定量分析方法的精密度和准确度仍然较差。目前 LIBS 技术研究方面主要集中在对各种领域的多种样品的 LIBS 常规分析和提高 LIBS 灵敏度及精密度方面。提高灵敏度方面的研究文献都集中在 LIBS 的各种增强方法，提高精密度方面的文献都集中在 LIBS 数据的处理方法。对于标准样品和被分析样品的微区不均匀性对分析结果精密度的影响鲜有研究报道，目前国内也没有适合于 LIBS 微区定量分析的国家级（或行业级）标准样品。针对目前的 LIBS 定量分析技术弱点，本书第 2 篇分别从 LIBS 自吸收效应和 LIBS 增强方法等方面开展实验研究；对于 LIBS 样品均匀性对分析结果精密度的影响问题，开展样品均匀性判断标准的理论和实验研究，开展 LIBS 微区分析标准样品研制方法研究。

第 2 篇主要论述了 LIBS 技术的基本原理、LIBS 特性、定量分析方法、样品均匀性判定方法和标准样品研制方法。第 5 章阐述了 LIBS 定量分析技术，简述了 LIBS 分析现状、激光与样品的作用过程、LIBS 等离子体性质及其影响因素；重点阐明了 LIBS 定量分析校准曲线的拟合方法、改进的标准加入法和光谱线背景较高时的背景内标法。第 6 章简述了 LIBS 自吸收效应，实验研究了紫外激光击穿铜合金光谱自吸收特性和可见激光击穿铜合金光谱自吸收特性。第 7 章简述了 LIBS 增强方法，实验研究了空间约束增强效应，重点研究了简便易行的自体空间约束增强效应、激光熔穴 LIBS 增强效应和单脉冲长脉宽激光 LIBS 增强效应。第 8 章阐明了标准样品对于 LIBS 定量分析准确度和精密度的影响；针对 LIBS 定量分析标准样品的均匀性检验方法进行了较详细的理论研究和实验研究；阐述了 ASTM（American Society for Testing and Materials，美国材料与试验协会）的材料均匀性检验方法，并对其进行了较详细的评论；详细地阐明了单因素方差分析的均匀性检验方法，并从理论上提出了样品局部不均匀的判定依据，建立了样品局部不均匀的统计判定临界值的计算方法，并计算出了常见实验条件下的临界值表；最后阐明了 LIBS 标准样品的研制方法和应该遵循的通用规则。

本书作者的分工情况：第 1 章、第 2 章、第 3 章由乌日娜副教授撰写；第 4 章由岱钦教授撰写；第 5 章由徐送宁教授和宁日波教授撰写；第 6 章、第 7 章和第 8 章由宁日波教授撰写。

本书在撰写过程中得到了研究团队中的其他成员李业秋、吴杰、李勇、邬晓娇、李漫、李倩、姜冉、李传祥等人的大力协助，在此表示衷心的感谢！由于我们的水平有限，书中难免出现遗漏和错误，敬请读者不吝赐教。

# 目 录

## 第 1 篇 新型激光器件

|                           |    |
|---------------------------|----|
| 第 1 章 光子晶体概论              | 1  |
| 1.1 光子晶体简介                | 1  |
| 1.1.1 光子晶体的分类与结构          | 2  |
| 1.1.2 光子晶体的特性             | 3  |
| 1.1.3 光子晶体的理论研究方法         | 4  |
| 1.2 光子晶体光子禁带的数值模拟         | 6  |
| 1.2.1 一维光子晶体中光传输矩阵        | 6  |
| 1.2.2 一维光子晶体的色散曲线         | 9  |
| 1.2.3 不同介质材料对光子禁带的影响      | 9  |
| 1.2.4 介质材料厚度比对光子禁带的影响     | 10 |
| 1.2.5 入射角对光子禁带的影响         | 11 |
| 1.2.6 周期数对光子禁带的影响         | 11 |
| 1.3 液晶简介                  | 12 |
| 1.3.1 液晶的概念               | 12 |
| 1.3.2 液晶的分类               | 13 |
| 1.3.3 液晶的特性               | 16 |
| 1.4 胆甾相液晶光子禁带的数值模拟        | 22 |
| 第 2 章 胆甾相液晶激光器            | 27 |
| 2.1 激光的产生                 | 27 |
| 2.2 染料掺杂液晶激光器             | 29 |
| 2.3 温度调谐胆甾相液晶激光器实验研究      | 30 |
| 2.3.1 正性液晶温度调谐胆甾相液晶激光器    | 30 |
| 2.3.2 负性液晶温度调谐胆甾相液晶激光器    | 35 |
| 2.4 电场调谐胆甾相液晶激光器实验研究      | 39 |
| 2.4.1 器件结构设计及制作           | 39 |
| 2.4.2 器件激光辐射特性测试分析        | 40 |
| 2.5 空间位置调谐胆甾相液晶激光器实验研究    | 43 |
| 2.5.1 楔形盒胆甾相液晶激光器         | 44 |
| 2.5.2 楔形盒胆甾相液晶激光器优化       | 46 |
| 2.6 光子态密度理论               | 49 |
| 2.6.1 胆甾相液晶激光器光子态密度分布数值模拟 | 50 |

|       |                           |    |
|-------|---------------------------|----|
| 2.6.2 | 温度调谐胆甾相液晶激光器光子态密度分布数值模拟   | 51 |
| 2.6.3 | 空间位置调谐胆甾相液晶激光器光子态密度分布数值模拟 | 52 |
| 2.7   | 薄膜型液晶激光实验研究               | 53 |
| 2.7.1 | 构建于聚合物分散液晶薄膜的禁带末端激光辐射     | 53 |
| 2.7.2 | 器件的设计及制作                  | 54 |
| 2.7.3 | 器件辐射特性测试分析                | 55 |
| 第3章   | 液晶随机激光器                   | 58 |
| 3.1   | 随机激光理论简介                  | 58 |
| 3.2   | 光子晶体光纤中液晶随机激光辐射实验研究       | 60 |
| 3.2.1 | 全反射型光子晶体光纤                | 60 |
| 3.2.2 | 光子晶体光纤中液晶随机激光辐射           | 61 |
| 3.3   | 构建于聚合物分散液晶膜的随机激光辐射实验研究    | 64 |
| 3.3.1 | 聚合物分散液晶膜的制备               | 64 |
| 3.3.2 | 随机激光阈值特性                  | 66 |
| 3.3.3 | 温度对随机激光辐射特性的影响            | 67 |
| 3.3.4 | 宽波段随机激光辐射的实现              | 69 |
| 第4章   | 光谱激发大能量固体激光器              | 72 |
| 4.1   | 灯泵浦大能量固体激光器               | 72 |
| 4.1.1 | 2焦耳高光束质量脉冲激光器             | 73 |
| 4.1.2 | 脉宽可调固体激光器                 | 74 |
| 4.2   | LD 脉冲泵浦被动调 Q 大能量全固态激光器    | 76 |
| 4.3   | 高功率深紫外固体激光器               | 79 |
| 参考文献  |                           | 82 |

## 第2篇 激光诱导击穿光谱分析技术

|       |                    |     |
|-------|--------------------|-----|
| 第5章   | 激光诱导击穿光谱分析技术概述     | 87  |
| 5.1   | 激光诱导击穿光谱分析简介       | 87  |
| 5.2   | LIBS 分析基础          | 90  |
| 5.2.1 | LIBS 分析系统组成及分析方法概述 | 90  |
| 5.2.2 | 激光与物质作用过程          | 91  |
| 5.2.3 | 激光诱导等离子体及其性质       | 95  |
| 5.2.4 | 发射谱线强度及其加宽         | 97  |
| 5.2.5 | LIBS 的影响因素         | 103 |
| 5.3   | LIBS 定量分析          | 106 |
| 5.3.1 | LIBS 定量分析方法简介      | 107 |
| 5.3.2 | 定量分析方法及其改进         | 108 |
| 第6章   | LIBS 自吸收效应         | 122 |
| 6.1   | LIBS 自吸收效应简介       | 122 |
| 6.2   | 紫外激光击穿铜合金光谱自吸收特性   | 123 |

|                                                |     |
|------------------------------------------------|-----|
| 6.3 可见激光击穿铜合金光谱自吸收特性 .....                     | 125 |
| <b>第7章 LIBS 增强方法</b> .....                     | 131 |
| 7.1 空间约束增强 .....                               | 131 |
| 7.1.1 自体空间约束增强 .....                           | 132 |
| 7.1.2 激光熔穴 LIBS 增强 .....                       | 136 |
| 7.2 长脉宽激光 LIBS 增强 .....                        | 140 |
| <b>第8章 LIBS 定量分析标准样品</b> .....                 | 146 |
| 8.1 标准样品 .....                                 | 147 |
| 8.2 标准样品均匀性检验方法 .....                          | 150 |
| 8.2.1 ASTM 的材料均匀性检验方法 .....                    | 150 |
| 8.2.2 单因素方差分析的均匀性检验方法 .....                    | 154 |
| 8.3 标准样品的研制 .....                              | 160 |
| 8.3.1 样品制作 .....                               | 160 |
| 8.3.2 均匀性检验 .....                              | 161 |
| 8.3.3 定值分析方法 .....                             | 161 |
| 8.3.4 标准值及其不确定度 .....                          | 162 |
| 参考文献 .....                                     | 164 |
| <b>附录 A 部分元素灵敏线表</b> .....                     | 171 |
| <b>附录 B 单因素方差分析 <math>F</math> 值下限值表</b> ..... | 176 |

# 第 1 篇 新型激光器件

## 第 1 章 光子晶体概论

1987 年 E. Yablonovitch<sup>[1]</sup> 和 S. John<sup>[2]</sup> 在研究周期性电介质结构对材料中光传播行为的影响时几乎同时分别独立地提出了光子晶体的物理概念。Yablonovitch 主要研究控制材料的自发辐射性质，而 John 则着眼于研究无序介质对光局域化的影响，两人都提出了介电函数作周期性变化的结构能影响材料中光子的状态模式，因而可以设计出能影响光子性质的材料。

### 1.1 光子晶体简介

光子晶体是一个新名词，大多数光子晶体都是人工设计制造出来的，对光子晶体有所认识的今天，人们不禁惊讶地发现，其实自然界早已存在着许多光子晶体的实例<sup>[3]</sup>。

#### 1. 甲虫

在澳洲森林发现的甲虫，如图 1.1 所示，外壳分布着和蛋白石一样的光子晶体结构的类似物，从任何方向看都有可见的金属色泽。

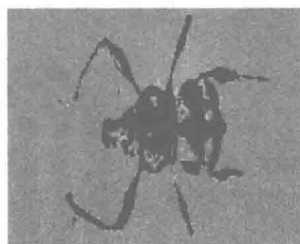
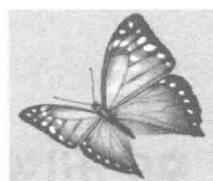


图 1.1 甲虫

#### 2. 蝴蝶翅

研究非洲燕尾蝶时科学家发现其翅膀上的鳞状覆盖物与发光二极管之间有很多相似之处。这些覆盖物包含着一些光子晶体的微小结构，与发光二极管的微孔作用机制类似，如图 1.2 所示，其缤纷的色彩是鳞粉上整齐排列的次微米结构选择反射太阳光造成的。



(a) 非洲蝴蝶



(b) 翅膀上的微结构

图 1.2 蝴蝶及其微结构

### 3. 蛋白石

盛产于澳洲的一种宝石——蛋白石，是由  $\text{SiO}_2$  纳米球沉积而成，绚丽的色彩是因为其结构上的周期性使它具有光子能带结构而形成的，与本身的色素无关，不同的光落在相应的能隙上产生不同的颜色，如图 1.3 所示。

### 4. 海老鼠

一种蠕虫——海老鼠，身长约 15 ~ 20cm，身宽 5cm，其毛发具有六脚晶格的结构，具有光子晶体光纤一样的物理属性，这种刺毛能捕捉光线且只反射某些波长的光，因而色彩鲜明，如图 1.4 所示。

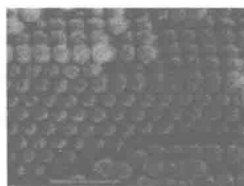


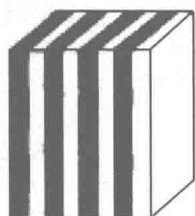
图 1.3 蛋白石



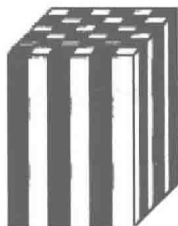
图 1.4 海老鼠毛发微结构

#### 1.1.1 光子晶体的分类与结构

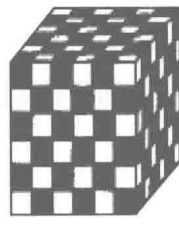
按照组成光子晶体的介质排列方式及电介质空间周期性分布的规律的不同，光子晶体分为一维、二维和三维光子晶体，如图 1.5 所示。



(a) 一维



(b) 二维



(c) 三维

图 1.5 一维、二维和三维光子晶体

一维光子晶体是指仅仅在一个方向上具有周期结构，其他方向是均匀的，如图 1.5 (a) 所示。一维光子晶体通常是由两种不同介电常数的介质薄膜交替排列构成的，与波动光学中的多层介质膜有根本的区别。

二维光子晶体是指介质在某两个方向上具有周期结构而在第三个方向上是均匀的,如图 1.5 (b) 所示,一般为圆形或方形。二维光子晶体可在器件的平面内以任意角度阻挡某些波长的光,甚至可在第三维阻挡某些角度入射的光,也因此而成为很多应用的选择。

三维光子晶体则是指介质在三维方向上都具有周期性结构,如图 1.5 (c) 所示。三维光子晶体应产生全反射的光子带隙,也就是说任何方向的光在光子带隙中都是被禁止传播的。第一个具有全方位光子禁带的人工光子晶体是 Yablonovitch 等制作的,频率带隙为 10 ~ 13GHz。

光子晶体的另一种分类是根据构成材料的非线性性质不同,将其分为线性光子晶体和非线性光子晶体。对于非线性光子晶体,其能带随入射光强的改变而改变,这有利于动态控制基于光子晶体结构的光学器件,为全光器件和全光网络的实现提供了有效的手段。

### 1.1.2 光子晶体的特性

光子晶体实质上是指具有光子禁带、光子局域和奇特的调节光的传播状态的一种新型光子材料。与半导体材料相类似,当电磁波或光波通过光子晶体时会因周期性变化的介电常数而发生布拉格散射,形成光子能带 (Photonic Band), 能带与能带之间存在光子带隙 (Photonic Band Gap, PBG; 也称为光子禁带)。

光子晶体的能带结构特性决定了光子晶体具有不同于其他介质材料的特性。

#### 1. 光子禁带 (带隙)

光子禁带是光子晶体最根本的特性,指的是不管传播方向如何,只要电磁波的频率落在禁带中就被禁止传播的。光子带隙的宽度和位置与光子晶体的晶格结构、介质材料的厚度、折射率及形状、入射角有密切的关系。光子晶体结构的对称性越差就越容易产生光子禁带,也就是说构成光子晶体的介质材料的折射率越大越可能产生光子禁带。光子带隙有完全光子带隙与不完全光子带隙之分,完全光子带隙是指一定频率范围内的光子无论其以什么角度入射或哪个偏振方向都被禁止传播的带隙,不完全光子带隙是指一定频率范围内的光子以特定入射角入射时被禁止传播的带隙。美国的 K. M. Ho 等人首次在理论上提出了具有全带隙的三维光子晶体结构<sup>[4]</sup>,而第一个具有完全光子带隙的三维光子晶体则是由美国贝尔通信研究所的 E. Yablonovitch 等人制造出来的<sup>[5]</sup>。

#### 2. 光子局域性

光子局域性对光子晶体来说是另外一个重要的特性。早在 1987 年 John 就提出:在按照特别要求设计的介电材料超晶格(现在看来就是光子晶体)中,光子表现出极强的局域性。与半导体类似,完美的光子晶体对于实际应用并没有多大用处,但将某种程度的缺陷引入到光子晶体当中,光子晶体原有的周期性结构就被破坏了,这样就会有一个频率极窄的缺陷态出现在光子禁带中,如果光子的频率与缺陷态频率吻合,那么这样的光子就可以被局限在缺陷位,光子的频率偏离缺陷态频率光强就会急剧衰减,这种现象为人们提供了控制或“俘获”光的一种方法。在光子晶体中引入的缺陷种类有:点缺陷、线缺陷和面缺陷。光子晶体局域态由缺陷的属性决定:对于点缺陷,光就像是被全反射墙完全给包裹起来了,光无法从这个位置向任意一个方向传播,这样就把光“俘获”在这个位置,点缺陷对原有的空间

对称性有微扰作用,从而形成一个能量密度共振场——微腔,满足特定条件时光子晶体波导和微腔发生耦合致使微腔共振频率附近的光波能量被“下载”到微腔里面,同时表明光子晶体具有滤波特性;对于线缺陷,其行为类似于波导管,光仅仅沿线缺陷的方向传播,也就是说对光子禁带不透明的某些光可以沿着线缺陷方向传播,与波导或光纤相比,这种局域更彻底;对于面缺陷,其类似于镜面,利用面缺陷可以制作高性能的全反射镜。滤波器窗口的工作频率唯一地由缺陷态频率决定,而缺陷态频率又与缺陷层的厚度、折射率有关,显然,改变缺陷层的折射率或厚度就可以实现调谐滤波。在实际应用中,也确实利用光子晶体的光子局域性制作了很多光学器件,比如光波导、滤波器等。

### 3. 抑制自发辐射

自发辐射是物质与场相互作用的结果,而不是物质的固有属性,这一观点直到光子晶体的概念提出之后才纠正过来。把自发辐射频率落在光子带隙范围内的自发辐射原子放入光子晶体中,此时光子带隙中自发辐射频率的态密度为零,然而自发辐射概率与态密度成正比例关系,于是自发辐射概率也为零,可见自发辐射被光子晶体抑制了,如图 1.6 (a) 所示。相反,在光子晶体中引入缺陷,品质因子很高的缺陷态就会在光子带隙中出现,由于其态密度很大,自发辐射概率也由此变大,如图 1.6 (b) 所示,这样的现象称为 purecell 效应。

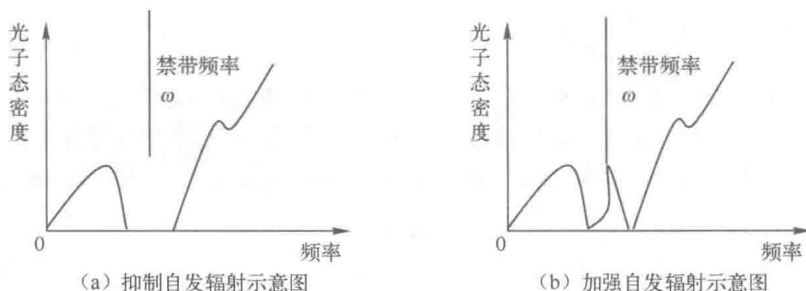


图 1.6 光子晶体对原子自发辐射的影响

### 4. 偏振性

假设二维光子晶体的周期平面为  $(x, y)$ , 对于 in-plane 传播, 如果电场方向与  $z$  轴方向平行, 则称为 p 偏振态 (TM 模); 如果磁场方向与  $z$  轴方向平行, 则称为 s 偏振态 (TE 模), 这两个偏振模式是独立传播的。

在一维光子晶体中还有一些奇异的现象, 如超折射现象 (对入射光束展宽和分光等效应)、超强双折射光学现象、负折射现象、时间延迟效应、非线性光学效应等<sup>[6]</sup>。

#### 1.1.3 光子晶体的理论研究方法

光子晶体的理论源自于 Schrodinger 方程与 Maxwell 方程及光子和电子的类比, 自 20 世纪 90 年代以来已取得了突飞猛进的进展, 为光子晶体的制作与实验打下了坚实的根基。目前常用的方法总结如下。

### 1. 平面波展开法

光子晶体能带研究中应用最早而且最广的便是平面波展开法,实质上是利用晶格周期性计算带隙结构。在倒格矢空间把电磁波以平面波叠加的形式展开,并且把麦克斯韦方程转化为一本征方程,本征值就是光子的本征频率,而本征频率的集合就是光子能带。这种方法的优点是:思路清晰,对于不同的结构仅仅是介电常数倒数的傅里叶变换不同而已,容易计算机编程;缺点是:如果光子晶体结构复杂或者处理有缺陷的体系,可能会由于计算能力的限制不能计算或者计算结果不准确,更重要的是如果介电常数是随频率变化的变量就没有一个确定的本征方程导致根本无法求解。平面波展开法常用的有紧束法<sup>[7]</sup>、缀加平面波法<sup>[8]</sup>、修正平面波法<sup>[9]</sup>。

值得注意的是,正交函数展开法与平面波展开法相似,将模式分布和中间折射率缺陷部分都用 Hermite - Gauss 函数展开,空气孔网格用周期性余弦函数表示。此方法不但可以用矢量法还可以用标量法对模场进行求解,能够较为准确地分析光子晶体光纤的模式特征、色散特性以及偏振特性等,算法求解相对简单且效率较高。

### 2. 传输矩阵法

传输矩阵法是由 Pendy J B<sup>[10]</sup>等人于1992年提出的,将磁场在空间的格点位置展开,这样麦克斯韦方程组就转化成了转移矩阵形式,所求问题变成求解本征值问题,在这里的传输矩阵表示相邻层格点间的场强关系。利用 Maxwell 方程组将场从一个位置延伸到整个晶体空间的前提条件是构成光子晶体空间中同一格点层有相同的态和相同的频率。传输矩阵法的优点是:传输矩阵小,矩阵元少,计算量与平面波法相比大大降低,精确度非常好,能计算透射系数和反射系数;缺点是:用传输矩阵法求解电磁场的分布比较麻烦,且效率不高。总的来说,在理论研究光子晶体时用传输矩阵法相对简单,特别是对介电常量随频率变化的金属系统非常有效。

### 3. 时域有限差分法

时域有限差分方法(简称 FD - TD)是1966由 Yee 提出的<sup>[11]</sup>,这种方法首先将 Maxwell 方程转化成差分方程形式,然后利用初始条件和特殊的边界条件研究在不同介质中电磁场的问题。目前,时域有限差分法已日趋成熟,能够计算一些较为复杂的电磁兼容问题,有人用它来计算移动电话对人脑的辐射场<sup>[12]</sup>。现今,已经广泛应用该方法分析光子晶体中的电磁波问题。时域有限差分方法的优点是:可以计算任意结构的光子晶体,易于编程实现,综合性能较好,对求解色散介质和非线性介质等一些复杂问题有广泛的适用性,对一些特殊的光子晶体中光学性质的计算比较简便;缺点是:数值计算量大,对于计算光子晶体能带结构时不如平面波展开法精确可靠。

### 4. 多重散射法

多重散射法将光子晶体作为一个散射体来研究,空间的辐射边界条件不需要像 FD - TD 那样人为的设置而是自然满足,对于计算光子晶体是一种非常有效的方法。多重散射法的优点是:占用计算机资源少,收敛快,精确度高,在分析二维柱状波导光子晶体方面有明显的

优势；缺点是：该方法一般用于处理同种介质，不易处理非线性等复杂的问题。

## 5. 格林函数法

格林函数法是 Korringa J<sup>[13]</sup> 和 Kohn W. Rostoker N<sup>[14]</sup> 各自独立提出的，来自于固体物理中半导体电子带隙的经典计算过程。格林函数法最早应用于研究电子半导体和晶格振动系统的杂质模，后来应用到研究磁系统中单个磁杂质，如今又应用于研究光子晶体中的杂质能级<sup>[15] - [17]</sup>。

用于光子晶体计算的方法除了以上还有一些，如超原胞方法、有限元方法以及局域模的正交函数展开法等，计算和设计光子晶体及其器件的专业软件也很多，利用它们可以方便地设计和计算各种光子晶体结构及其器件。

## 1.2 光子晶体光子禁带的数值模拟

对于光子晶体的理论研究，最基本的工作就是研究光在光子晶体内的传播规律。研究的方法有好多种，上一节已经介绍过，本文采用传输矩阵法，具体推导过程及数值模拟如下。

### 1.2.1 一维光子晶体中光传输矩阵

一维光子晶体是指介质仅仅在一个方向上具有周期性结构，在另外两个方向是均匀的，如图 1.7 所示，因此可以把整个光子晶体看作一个膜系，应用薄膜光学理论进行处理。

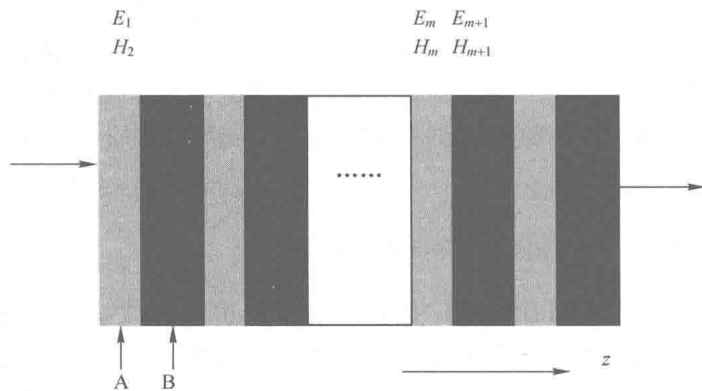


图 1.7 一维光子晶体模型

假设入射光波垂直入射，一维光子晶体介质材料沿  $z$  方向周期排列， $x-y$  平面为均匀介质，其中，介质  $A$  的几何厚度为  $a$ ，介质  $B$  的几何厚度为  $b$ ，设一维光子晶体的周期厚度为  $L = a + b$ ，则其折射率可写为

$$n(z) = \begin{cases} n_A, & 0 < z < a \\ n_B, & a < z < L \end{cases}, n(z) = n(z + kL) \quad (1.1)$$

其中， $k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ ， $n_A$  和  $n_B$  分别对应为两种介质的折射率。由电磁场的边界条件可以把每一层介质中的电场与磁场联系起来，求得电磁场分布。为了简便清晰，将一个周期内两种介质的分界面记为 I，两个周期之间的界面记为 II。在光子晶体的第  $k$  个周期中，厚

度为  $a$  的介质层的电场和磁场可以写为  $\vec{E}_k^{(A)} \vec{H}_k^{(A)}$  厚度为  $b$  的介质层的电场和磁场可以写为  $\vec{E}_k^{(B)} \vec{H}_k^{(B)}$ ，在同一介质层中的电场和磁场可表示为入射波和反射波之和，即

$$\vec{E}_k^{(A)} = \vec{E}_k^{(A)}(+)+\vec{E}_k^{(A)}(-) \quad (1.2)$$

$$\vec{H}_k^{(A)} = \vec{H}_k^{(A)}(+)+\vec{H}_k^{(A)}(-) \quad (1.3)$$

其中， $(+)$ 、 $(-)$  分别表示的是沿  $z$  轴正向和反向传播的电磁波。由于电磁场从界面 I 穿过介质 B 到达界面 II，因此有

$$\vec{E}_k^{(B)}(\text{I}) = \vec{E}_k^{(B)}(\text{II})(+)+e^{-i\delta_B}\vec{E}_k^{(B)}(\text{II})(-)e^{i\delta_B} \quad (1.4)$$

$$\vec{H}_k^{(B)}(\text{I}) = \vec{H}_k^{(B)}(\text{II})(+)+e^{-i\delta_B}\vec{H}_k^{(B)}(\text{II})(-)e^{i\delta_B} \quad (1.5)$$

上两式中  $\delta_B = 2\pi n_B b/\lambda$  为位相差。利用介质表面电磁场传播的边界条件可以得到

$$\begin{bmatrix} E_k^{(A)}(\text{I}) \\ H_k^{(A)}(\text{I}) \end{bmatrix} = M' \begin{bmatrix} E_k^{(B)}(\text{II}) \\ H_k^{(B)}(\text{II}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m'_{11} & m'_{12} \\ m'_{21} & m'_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_k^{(B)}(\text{II}) \\ H_k^{(B)}(\text{II}) \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

式 (1.6) 当中， $m'_{11} = m'_{22} = \cos\delta_B m'_{12} = -i\sin\delta_B/\eta_B m'_{21} = -i\eta_B \sin\delta_B$ ，在这里  $\eta_B = \sqrt{\epsilon_0/\mu_0} n_B$ 。利用相似的过程，可以得到

$$\begin{bmatrix} E_{k-1}^{(B)}(\text{II}) \\ H_{k-1}^{(B)}(\text{II}) \end{bmatrix} = M'' \begin{bmatrix} E_k^{(A)}(\text{I}) \\ H_k^{(A)}(\text{I}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m''_{11} & m''_{12} \\ m''_{21} & m''_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_k^{(A)}(\text{I}) \\ H_k^{(A)}(\text{I}) \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

其中， $m''_{11} = m''_{22} = \cos\delta_A$ 、 $m''_{12} = -i\sin\delta_A/\eta_A$ 、 $m''_{21} = -i\eta_A \sin\delta_A$ 、 $\eta_A = \sqrt{\epsilon_0/\mu_0} n_A$ 。至此我们就能够得到第  $k$  个周期与  $(k+1)$  周期之间电磁场的关系式

$$\begin{bmatrix} E_k \\ H_k \end{bmatrix} = M' M'' \begin{bmatrix} E_{k+1} \\ H_{k+1} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E_{k+1} \\ H_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{k+1} \\ H_{k+1} \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

其中，

$$m_{11} = \cos\delta_B \cos\delta_A - \frac{n_B}{n_A} \sin\delta_B \sin\delta_A \quad (1.9a)$$

$$m_{12} = -i \left( \frac{1}{\eta_A} \cos\delta_B \sin\delta_A - \frac{1}{\eta_B} \sin\delta_B \cos\delta_A \right) \quad (1.9b)$$

$$m_{21} = -i (\eta_B \sin\delta_B \cos\delta_A + \eta_A \cos\delta_B \sin\delta_A) \quad (1.9c)$$

$$m_{22} = \cos\delta_B \cos\delta_A - \frac{n_A}{n_B} \sin\delta_B \sin\delta_A \quad (1.9d)$$

这样一维光子晶体从入射面与出射面的电场和磁场的关系可以写为

$$\begin{bmatrix} E_1 \\ H_1 \end{bmatrix} = M \times M \cdots M \begin{bmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{bmatrix} = M^N \begin{bmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{bmatrix} \quad (1.10)$$

于是，我们便可以得到入射光波垂直入射到一维光子晶体的透射系数和反射系数

$$t = \frac{2\eta_1}{\eta_1(M_{11} + \eta_{N+1}M_{12}) + M_{21} + \eta_{N+1}M_{22}} \quad (1.11)$$

$$r = \frac{\eta_1(M_{11} + \eta_{N+1}M_{12}) - M_{21} - \eta_{N+1}M_{22}}{\eta_1(M_{11} + \eta_{N+1}M_{12}) + M_{21} + \eta_{N+1}M_{22}} \quad (1.12)$$

入射光波斜入射到一维光子晶体时，如图 1.8 所示。

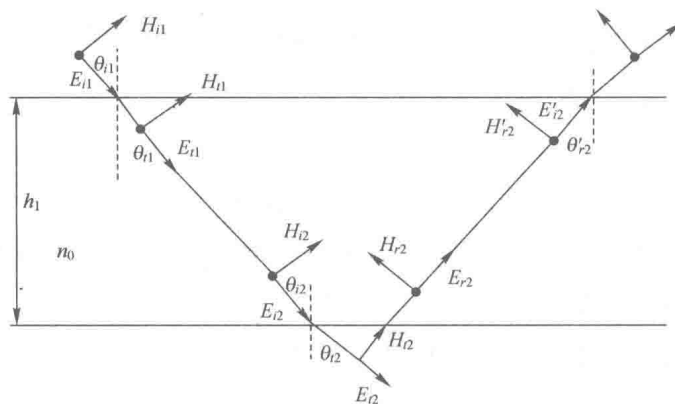


图 1.8 光波斜入射

与入射光波垂直入射类似，根据电磁场在电介质交界面上的边界条件可得到

$$E_1 = E_{i1} + E_{r1} = E_{t1} + E'_{t2} \quad (1.13a)$$

$$H_1 = H_{i1} \cos \theta_{i1} - H_{r1} \cos \theta_{i1} = H_{t1} \cos \theta_{t1} - H'_{t2} \cos \theta_{t2} \quad (1.13b)$$

$$E_2 = E_{t2} + E_{r2} \quad (1.13c)$$

$$H_2 = H_{t2} \cos \theta_{t2} - H_{r2} \cos \theta_{t2} \quad (1.13d)$$

由图 1.8 可知， $E_{t2} = E_{t1} e^{i\delta_1}$ 、 $E_{i1} = E_{t2} e^{-i\delta_1}$ 、 $E'_{t2} = E_{t1} e^{i\delta_1}$ 。

在这里  $\delta_1 = 2\pi n_1 h_1 \cos \theta_{t2} / \lambda$  为介质前后两个面的位相差，于是可以得到

$$E_1 = E_2 \cos \delta_1 + H_2 (-i \sin \delta_1 / \eta_1)$$

$$H_1 = E_2 (-i \eta_1 \sin \delta_1) + H_2 \cos \delta_1$$

此时， $\eta_1 = \sqrt{\epsilon_0 / \mu_0} n_1 \cos \theta_{t2}$ ，因此就可得到

$$\begin{bmatrix} E_1 \\ H_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & -i \sin \delta_1 / \eta_1 \\ -i \eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_2 \\ H_2 \end{bmatrix} \quad (1.14)$$

入射光波斜入射与垂直入射相比，参数  $\eta$  由  $\eta = \sqrt{\epsilon_0 / \mu_0} n$  变为  $\eta_1 = \sqrt{\epsilon_0 / \mu_0} n_1 \cos \theta_{t2}$ 。方程 (1.14) 即是入射光波斜入射时 TE 模相邻介质之间电场与磁场的关系，效仿光波垂直入射的情况便可得到光波斜入射时 TE 模的透射系数和反射系数。

光波斜入射时的 TM 模完全可以效仿 TE 模的推导过程，只是参数  $\eta$  变为  $\eta_1 = \sqrt{\epsilon_0 / \mu_0} n_1 / \cos \theta_{t2}$ ，其透射系数和反射系数也可以参照 TE 模导出。

光波无论是垂直入射还是斜入射到一维光子晶体，如果求得透射系数  $t$  和反射系数  $r$ ，那么反射率为

$$R = rr^* \quad (1.15)$$

当一维光子晶体对入射光波无吸收时，则透过率为

$$T = 1 - R \quad (1.16)$$

对于理想的无限周期一维光子晶体，其光波场应满足 Bloch 定理<sup>[18]</sup>，交界面处的场矢量应该满足

$$\begin{bmatrix} E_{m+2} \\ H_{m+2} \end{bmatrix} = e^{ikd} \begin{bmatrix} E_m \\ H_m \end{bmatrix} \quad (1.17)$$

这里  $k$  为 Bloch 波矢, 由定解条件  $\det(M_A M_B - e^{-ikd}) = 0$  便可得到一维光子晶体的色散方程。

### 1.2.2 一维光子晶体的色散曲线

构成一维光子晶体的介质材料选取  $\text{SiO}_2$  和  $\text{TiO}_2$ , 其折射率分别为 2.35 和 1.46, 数值模拟得到的色散曲线如图 1.9 所示。随着入射角的增加, 一维光子晶体的光子禁带向短波方向移动, 且禁带宽度变化不太明显。

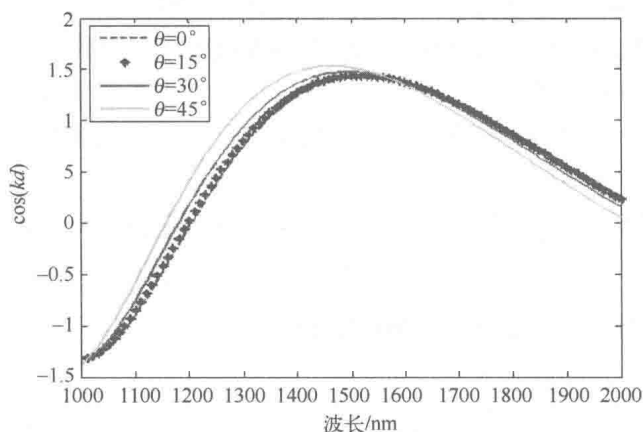


图 1.9 一维光子晶体的色散曲线

### 1.2.3 不同介质材料对光子禁带的影响

选取一维光子晶体的结构为  $\lambda/4$  结构, 光子禁带的中心波长为 1550nm, 入射光波均垂直入射到介质材料, 在周期数相同的情况下, 通过改变一维二元光子晶体的两种介质折射率比 ( $n_H$  代表高折射率,  $n_L$  代表低折射率), 数值模拟得到的一维光子晶体透射谱如图 1.10 所示。本书中所有的透过率都按电场振幅透过率来计算。

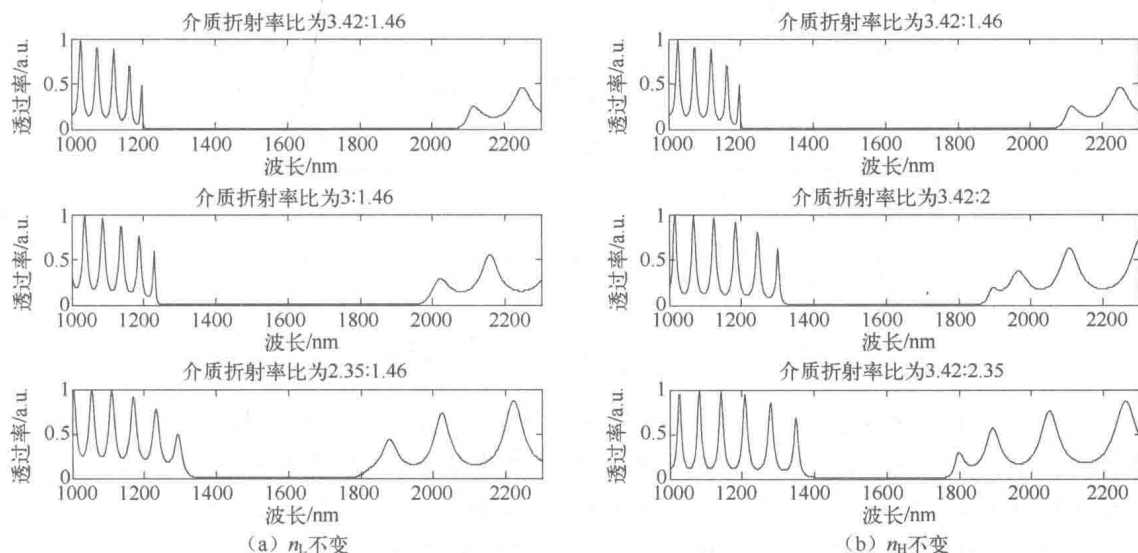


图 1.10 不同介质折射率比的一维光子晶体透射谱