

基于不同液晶填充光子晶体光纤传输特性的研究

王家璐 杜木清 张伶莉 刘永军 孙伟民

Transmission characteristics of photonic crystal fibers based on filling different kinds of liquid crystals

Wang Jia-Lu Du Mu-Qing Zhang Ling-Li Liu Yong-Jun Sun Wei-Min

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 120702 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.120702

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.120702>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[分布式本征型法布里 - 珀罗传感器的研究](#)

[Research on distributed intrinsic Fabry-Perot sensors](#)

物理学报.2015, 64(5): 050704 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.050704>

[基于悬浮式双芯多孔光纤的太赫兹偏振分离器](#)

[A THz polarization splitter made from suspended dual-core porous fiber](#)

物理学报.2014, 63(11): 110706 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.110706> 基于液晶和 DSP 的强光局部

[选通智能网络摄像系统研究](#)

[Study on the partial gating smart network camera for controlling strong light intensity based on DSP and liquid crystal](#)

物理学报.2013, 62(21): 214210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.214210> 镀膜长周期光纤光栅的单峰

[宽带滤波特性](#)

[Broadband single-peak filtering characteristics of coated long-period fiber gratings](#)

物理学报.2012, 61(20): 200702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.200702> 飞秒激光刻蚀非平行壁光纤

[微腔 Mach-Zehnder 干涉仪特性及其流体传感研究](#)

[Study on characteristics and fluid sensing of unparallel wall fiber micro-cavity Mach-Zehnder interferometer fabricated by femtosecond laser micromachining](#)

物理学报.2012, 61(17): 170701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.170701>

专题: 液晶光学及应用

编者按 液晶是介于液态与固体结晶态之间的一种物质状态, 因此具备了很多独特的性质, 包括大的光折变特性、电光特性等。自发现液晶以来, 其研究已发展成为一个引人注目的学科, 同时在科学和工程应用方面也得到了发展。液晶在材料、物理、化学科学中扮演着重要的角色, 是科学家研究化学结构与物理性质关系的基础材料。在应用方面, 液晶显示已经成为超过 100 亿美元的全球巨大型产业, 入选国家战略新兴产业。本刊特组织“液晶光学及应用”专题, 从材料、光学特性、器件、应用等方面介绍该领域的发展现状和最新的研究成果。在材料和光学特性方面, 包括混合液晶分子动力学、胆甾相和蓝相液晶、新型液晶的表面等离子体效应等; 在器件和应用方面, 包括电光调制及光光调制的全息显示技术及薄膜晶体管驱动的研究; 在非显示应用方面, 则有液晶填充光子晶体光纤的报道。通过对液晶光学的深入研究, 有望在基础新材料和核心器件方面得到突破, 推动物理、化学、材料基础学科的前沿发展, 并在电子信息产业领域得到重要应用。

(客座编辑: 中国物理学会液晶分会 李树军 苏翼凯 宣丽)

基于不同液晶填充光子晶体光纤传输特性的研究*

王家璐¹⁾²⁾ 杜木清²⁾ 张伶莉³⁾ 刘永军^{1)2)†} 孙伟民²⁾

1)(哈尔滨工程大学自动化学院, 哈尔滨 150001)

2)(哈尔滨工程大学, 纤维集成光学教育部重点实验室, 哈尔滨 150001)

3)(哈尔滨工业大学物理系, 哈尔滨 150001)

(2014年12月24日收到; 2015年4月15日收到修改稿)

将5种不同折射率的液晶分别填入实芯光子晶体光纤的空气孔中, 通过改变外场条件, 研究其输出光谱的变化规律, 并进行了理论模拟分析。结果表明: 填充液晶后, 输出光谱由全通变为多个波峰的带隙式; 同时, 液晶的折射率差值越大, 其波峰位置越向长波长方向移动, 且相对光强的对比度可以达到16 dB; 温度由20 °C上升到85 °C时, 波峰向短波长方向移动, 最大调控范围可达41 nm; 调节电压从0—250 V, 输出光谱的相对光强变小, 但波峰具有较好的稳定性; 在室温下, 波峰不随入射光偏振态的变化而变化。该液晶光子晶体光纤可应用于温控可调谐滤波器或电控衰减器。

关键词: 光子晶体光纤, 液晶, 光子带隙, 传感器

PACS: 07.60.Vg, 42.70.Df, 42.81.Wg

DOI: 10.7498/aps.64.120702

1 引言

光子晶体光纤(photon crystal fibers, PCFs)是一种纤芯周围周期性排布着空气孔的微结构光

纤, 具有无截止单模、低损耗以及可进行微结构设计改造等特性^[1], 近年来备受关注^[2,3]。根据不同的传导机理可将PCF分为两类: 一类是折射率传导型, 即纤芯的折射率大于包层的有效折射率, 与传统光纤的全内反射导光机理相似; 另一类是光子

* 国家自然科学基金(批准号: 61107059, 61308052, 61077047)和教育部111引智基地项目(批准号: B13015)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: liuyj@hrbeu.edu.cn

带隙型, 即纤芯的折射率小于包层的有效折射率, 但由于包层的折射率具有规则的周期排布, 使得出现的光子带隙效应(photonic bandgap)将频率处于带隙内的光束缚在纤芯中, 进而达到光传导的目的^[4]. 但是, PCF一旦被拉制完成, 传输特性就不再变化, 这在很大程度上限制了其在传感器领域的应用. 如果将液体材料(如液晶(liquid crystals, LCs)、折射率匹配液等)填入PCF包层的空气孔中, 通过外部环境变化(如温度、压力等)就可能实现PCF对传输光谱的灵活控制^[5-7].

LCS具有折射率随外场变化的特性, 是很好的填充材料^[8]. 2010年, Mathews等^[9]制作出了基于全部填充结构的实芯液晶光子晶体光纤(photonics liquid crystal fibers, PLCFs)的电控衰减器, 并实验测得其截止率可达到40 dB. 2012年, Tefelska等^[10]制造了一种基于光子带隙型大模场面积的多模PLCF, 该PLCF对温度的变化具有较高的灵敏度. 同年, 他们又在PCF空气孔中填入了折射率低于纤芯折射率的LC, 测量了该PLCF的相关参数, 并提出了其未来发展的可行性^[11]. 2013年, Peng等^[12]选择性地将LC填入PCF最内层空气孔中, 并测量了其对温度变化的灵敏度. 在这些研究工作中, 多数侧重于PLCF输出光强度的变化关系, 尚未见关于其输出光谱传输特性的研究; 且上述研究大多是针对填充某一种LC的PLCF, 鲜见关于填充多种LC的PLCF传输特性的实验研究. 本文分别将5种不同折射率的LC填入实芯PCF中, 并对其输出特性进行了实验研究和理论模拟分析; 同时, 研究了PLCF的温度调谐、电调谐特性和偏振敏感特性.

2 LC填充及实验系统

2.1 LC填充

实验所使用PCF的横截面如图1(a)所示, 为单模无截止的实芯PCF, 材质为纯石英, 其纤芯直径为7.0 μm, 包层直径为125 μm, 空气孔直径为2 μm且呈六边形周期性排布, 空气孔间距为5.0 μm. 实验中所研究的PLCF为全填式, 即PCF的所有空气孔中全部填入LC. 将待测PCF的一端剥去涂覆层, 用光纤切割刀将端面切平, 随后将处理后的PCF插入LC中, 利用毛细现象将LC吸入PCF中. 通过改变填充温度和填充时间, 可以精确地控制填入PCF中LC的长度. 如图1(b)所示,

在偏光显微镜下可以测量出填充的LC的长度. 从图1(b)可以观察到, 没有填充LC的空PCF包层显得暗淡, 填充了LC的PCF由于LC的双折射特性, 包层较亮. 实验中所使用的待测PLCF全长皆为20 cm, 填充的LC长度约为10 cm.

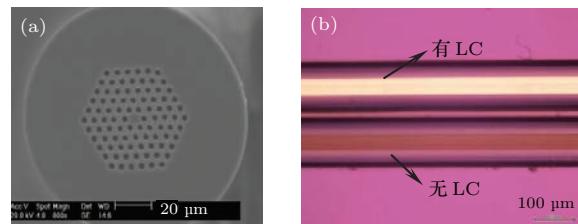


图1 PCF实物图 (a) 电子显微镜下的PCF横截面图; (b) 偏光显微镜下的PLCF对比图

Fig. 1. The picture of the actual object of PCF: (a) cross section of the PCF under the electron microscope; (b) the image of the full-filled PLCF under a polarizing microscope.

2.2 实验系统

我们采用如图2所示的实验系统研究填充不同LC的PLCF的传输光谱. 实验中所使用的光源为宽带光源, 其输出端为全内反射式PCF, 实验研究工作波长为400—1000 nm, 且输出光具有良好的稳定性. 光源所发出的光经光纤耦合器被耦合进待测PLCF中, 最后经待测PLCF输出端进入光谱分析仪进行分析. 此外, 在实验中将PLCF有LC的一端置于温控系统或电场中, 进行温度和电场的调谐特性研究.

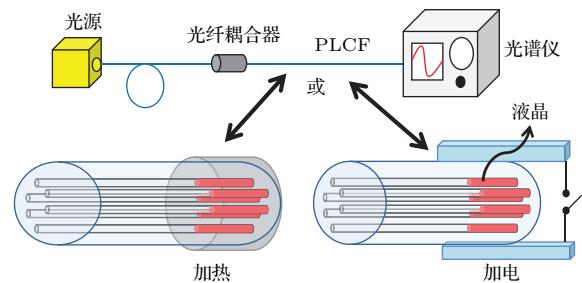


图2 实验装置示意图

Fig. 2. Schematic geometry of the full-filled PLCFs.

3 实验结果与讨论

3.1 填充不同的LC

图3为光源的输出光通过未填充LC的PCF所测得的光谱图. 在室温(20 °C)下, 分别测量了5种填充了不同参数LC的PLCF的输出光谱, 如

图4所示. 表1列出了与图4对应的最大透射波峰 λ 的位置及与之相应的研究参数.

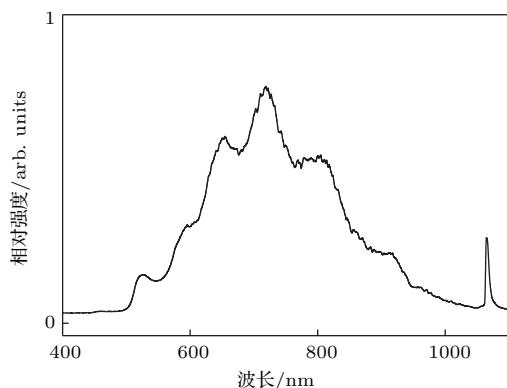


图3 空PCF输出光谱图

Fig. 3. The transmission spectrum of unprocessed PCF.

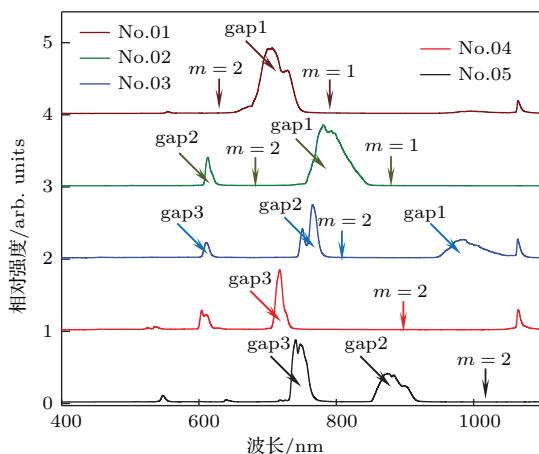


图4 5种全填式PLCF输出光谱图

Fig. 4. The transmission spectra of PLCFs filled with different kinds of LCs.

表1 不同LC对应的输出光谱参数

Table 1. The transmission parameters of PLCFs filled with different kinds of LC.

LC编号	$\Delta n(n_e - n_o)$	波长 λ/nm	$\Delta\lambda/\text{nm}$ (温调)	对比度/dB
01	$0.083(n_o = 1.483)$	706	41	16.794
02	$0.111(n_o = 1.489)$	792	24	16.425
03	$0.149(n_o = 1.508)$	765	5	15.542
04	$0.249(n_o = 1.514)$	717	40	15.495
05	$0.375(n_o = 1.501)$	741	13	16.206

对比图3和图4可以观察到, 经LC填充后的PCF输出光谱图由无截止全通转变为只有几个波峰的带隙式. 这是由于空气孔中填充的LC折射率

大于PCF的折射率, 使得包层的有效折射率大于纤芯的折射率, 其传导机理由全内反射式变为光子带隙式. 因此, 一些特定频率(或波长)的传输光被PCF包层中周期性排布的填充孔限制在折射率较低的纤芯中, 能量只能沿着PCF的轴向进行传输, 即表现为出射光谱中的波峰(即带隙). 从图4可以看出, 填充的LC参数不同, 其输出光谱中带隙(gap)的数量和位置也有所不同. 带隙的数量与位置可由Sun等[13]提出的关于PLCF分析公式决定:

$$\lambda_m = \left(1 + \frac{\Delta n}{n_o}\right) \frac{2d\sqrt{n_o^2 - n_s^2}}{m + 1/2} \quad (m = 1, 2, \dots), \quad (1)$$

其中, λ_m 为透射率最小值位置对应的波长, 其与图4中的带隙位置相间隔; Δn 为LC非寻常光折射率 n_e 与寻常光折射率 n_o 的差值(表1); n_s 为PCF材料的折射率.

根据(1)式, 若 m 最小值取1, 当 Δn 增加时, 其透射率最小值波长 λ_m 向长波方向移动. 实验中可以观察到, 随着LC的 Δn 增大, 其透射率最高的波峰gap1的中心波长也向长波长方向移动. 但是对于04和05号PLCF, 其gap1已经超出实验测量范围, 所以图4中所示为gap2, 即 m 取值为1和2之间透射率最高的波峰.

为了更直接地体现出填充LC的有效折射率与带隙之间的关系, 我们利用平面波展开法, 对填充了不同有效折射率LC的PLCF进行模拟, 结果如图5所示. 图5(a)–(c)中填充LC的有效折射率分别为1.533, 1.625和1.705(LC的折射率通常在1.5–1.7之间变化). 随着有效折射率 n 的增加, 第一带隙对应的频率逐渐减小, 即输出光谱中表现为波峰向长波长方向移动; 而且, 第一带隙的带隙宽度也随着 n 的增加而变宽, 即输出光谱中表现为波峰的半峰宽度变大; 此外, 带隙的数量也随着 n 的增加而增加, 即输出光谱中表现为波峰数量的增加.

该结构PLCF的波峰相对光强具有较高的对比度, 对比度(dB)定义为在波峰位置 $\pm 50\text{ nm}$ 范围内波峰最高值与波峰外光强最高值的比值, 可达到16 dB, 如表1所列. 并且, 通过填充不同参数的LC, 可以控制其输出波峰的位置, 控制波长可从500–1000 nm之间, 具有较高的可控性, 因此在滤波器领域有潜在的应用.

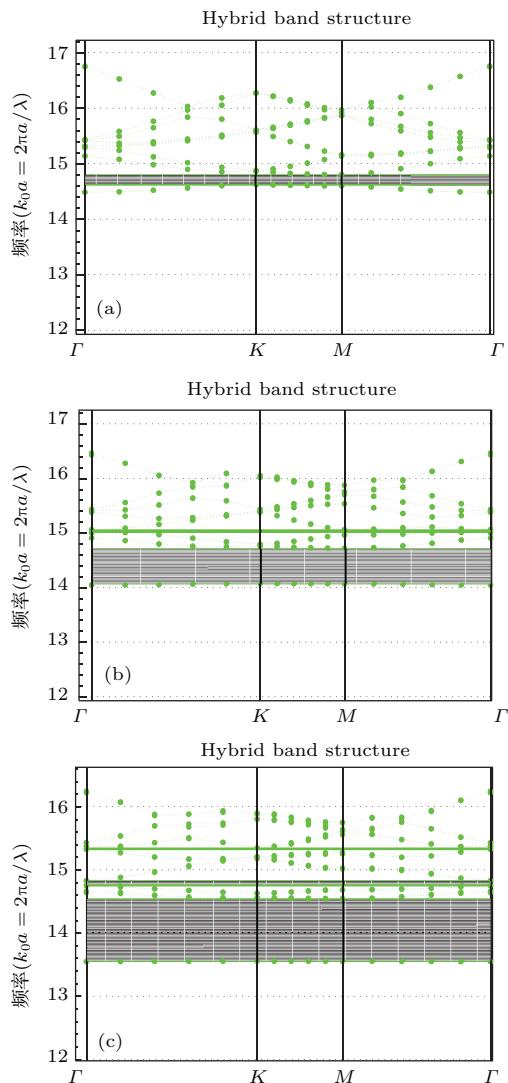


图5 填充不同LC的PLCF的带隙分布 (a) $n = 1.533$; (b) $n = 1.625$; (c) $n = 1.705$

Fig. 5. The bandgaps structure of PLCFs filled with LC of different effective refractive index: (a) $n = 1.533$; (b) $n = 1.625$; (c) $n = 1.705$.

3.2 温度调谐研究

为了进一步研究PLCF的温度调谐特性, 我们分别将5个PLCF有LC的部分放置在加热台上, 从室温20 °C逐步加热到85 °C, 并实时采集其输出光谱。表1列出5种LCs填充透射谱中最高波峰所对应的波长调谐范围 $\Delta\lambda$, 图6为填充01号LC的PLCF的温度调谐光谱。观察图6可知, 当温度升高时输出光强度有减弱的现象。这是由于LC的折射率大于纤芯的折射率, 导致部分光由纤芯中耦合到LC中, 光纤由单模传输变为多模传输, 在温度升高的过程中, 导致部分高阶模式泄漏, 因而光强有所变化。

由图6和表1可知, 随着温度的升高, 波峰向

短波长方向移动, 但是其对应的波长调谐范围 $\Delta\lambda$ 却不相同, 最大调谐量为41 nm, 最小为5 nm, 且没有严格的规律。根据LC的折射率随波长和温度变化函数^[14]:

$$\Delta n(\lambda, T) \approx \frac{3GS}{2} \frac{\lambda^2 \lambda'^2}{\lambda^2 - \lambda'^2}, \quad (2)$$

其中, λ 为入射光波长; λ' 为共振波长; G 为常数系数; S 为LC分子排布的有序度, 其与温度有关, 温度升高 S 减小, 数值在0—1之间。

在波长 λ 和 λ' 一定的情况下, Δn 是有序度 S 的函数, 因此, 随着温度的升高, 有序度 S 减小, Δn 也将减小。结合(1)式可知, 透射率极小值波长 λ_m 向短波方向移动, 当 Δn 减小为后, λ_m 基本保持不变。所以在实验中观察到波峰向短波移动。但是, 同样可以知道 Δn 随温度变化量越大, 波峰移动量也应该越大, 但实验结果并非如此。这是由于表1中列出的LC折射率为有序度 S 接近1时的测量值, 在测量LC折射率时已经给LC做了取向处理。但是, 在本实验过程中, PCF的空气孔内壁是不能做取向处理的, 所以LC分子排布的有序度小于1, 因此, 导致 Δn 的实际利用值小于表1中的理想值, 进而影响了 $\Delta\lambda$ 的大小。同时, 由于不同LC材料的分子大小及黏度系数均不同, 导致其与PCF的空气孔内壁表面的锚定作用不同, 进而LC在PCF的空气孔中的有序度 S 均不相同, 因此导致其传输光谱图随温度变化没有固定规律。

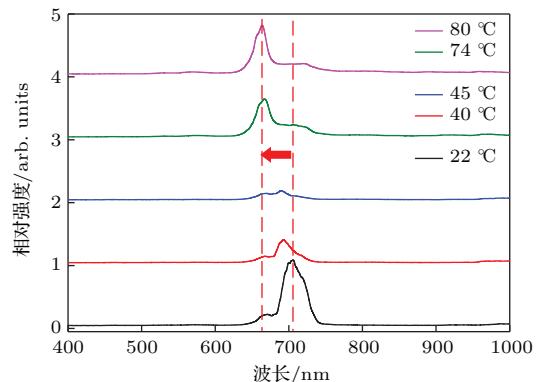


图6 编号01的PLCF在不同温度下的输出光谱图

Fig. 6. The transmission spectra of No. 01 PLCF with different temperature.

3.3 电压调谐研究

为了研究电场对PLCF输出光谱的影响, 将02号PLCF有LC端放置在如图2所示的镀有TIO电极的基板中, 通过改变基板之间的电压, 进行电场控制, 实验结果如图7所示。

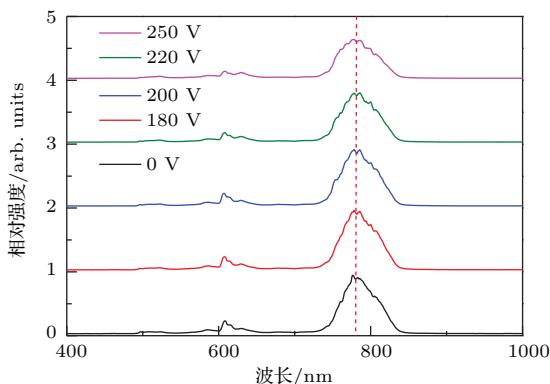


图 7 编号 02 的 PLCF 在不同电压下的输出光谱图
Fig. 7. The transmission spectra of No. 02 PLCF with different voltage.

图 7 中电压变化范围为 0—250 V。由图 7 可知, 随着外加电压的增大, 02 号 PLCF 输出光谱的波形和波峰位置基本保持不变, 但是其光强相对减弱。由于包层中二氧化硅材质孔间隔的存在, 导致驱动电压较高, 需要进一步改进电极结构以降低驱动电压。当驱动电压增加时, LC 分子会逐渐顺着电场方向排列, 在 250 V 内 LC 分子的转动并没有带来 PCF 包层有效折射率的变化, 因此光谱中的波峰没有明显的移动。施加电压的过程中光强逐渐变弱, 这也是由高阶模式泄漏造成的。据此, 其在电控窄带衰减器中可得到应用。

3.4 偏振特性研究

最后, 为了研究入射光的偏振态对 PLCF 输出光谱的影响, 室温下对 05 号 PLCF 进行了实验研究, 实验结果如图 8 所示。

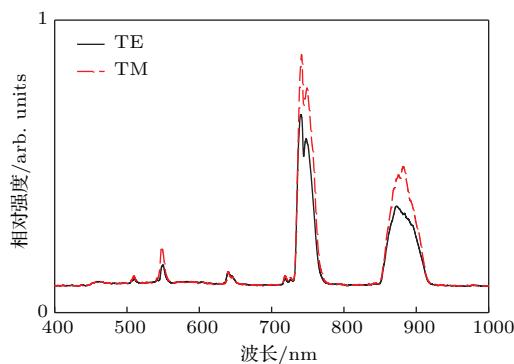


图 8 不同偏振态下编号 05 PLCF 的输出光谱图
Fig. 8. The transmission spectra for two orthogonal polarizations of No. 05 PLCF.

从图 8 可以看出, 无论入射光的偏振态为横电 (TE) 模或横磁 (TM) 模, 与无偏振片的输出光谱图相比, 05 号 PLCF 的输出峰值位置几乎不变, 其输

出光强只有原来光强的 1/2。由于包层中填充的 LC 分子未经取向处理, LC 分子不会整体偏向于径向的某个方向, 所以双折射现象不明显, 因此对在 PLCF 中传输光的偏振态是不敏感的。

4 结 论

实验研究了 5 种 LC 填充的 PCF 的传输特性, 并对结果进行了理论分析。结果表明, LC 的折射率差值越大, 其光谱的波峰越向长波方向移动。对于填充同一种 LC 的 PLCF, 当温度升高时, 波峰向短波长方向移动, 最大可达到 41 nm 的调谐范围。随着外加电场的增加, 其输出光谱的相对光强逐渐减小, 但是其波峰对应的中心波长却具有良好的稳定性。改变入射光偏振态, 其输出光谱不随偏振态的变化而变化。该结构的 PLCF 在温控可调谐滤波器及电控衰减器中有潜在的应用。

参考文献

- [1] Pang M, Xiao L M, Jin W, Arismar Cerqueira S Jr 2012 *J. Lightwave Technol.* **30** 1422
- [2] Hou J P, Ning T, Gai S L, Li P, Hao J P, Zhao J L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4732 (in Chinese) [侯建平, 宁韬, 盖双龙, 李鹏, 皓建萍, 赵建林 2010 物理学报 **59** 4732]
- [3] Zhang M Y, Li S G, Yao Y Y, Zhang L, Fu B, Yin G B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3278 (in Chinese) [张美艳, 李曙光, 姚艳艳, 张磊, 付博, 尹国冰 2010 物理学报 **59** 3278]
- [4] Cubillas A M, Unterkofer S, Euser T G, Etzold B J M, Jones A C, Sadler P J, Wasserscheid P, Russell P St J 2013 *Chem. Soc. Rev.* **42** 8629
- [5] Qian W W, Zhao C L, He S L, Dong X Y, Zhang S Q, Zhang Z X, Jin S Z, Gou J T, Wei H F 2011 *Opt. Lett.* **36** 1548
- [6] Yu C P, Liou J H 2009 *Opt. Express* **17** 8729
- [7] Kuhlmeijer B T, Eggleton B J, Wu D K C 2009 *J. Lightwave Technol.* **27** 1617
- [8] Larsen T T, Bjarklev A 2003 *Opt. Express* **11** 2589
- [9] Mathews S, Farrell G, Semenova Y 2011 *Microwave Opt. Technol. Lett.* **53** 539
- [10] Tefelska M M, Ertman S, Wolinski T R, Mergo P, Dabrowski R 2012 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **24** 631
- [11] Ertman S, Rodríguez A H, Tefelska M M, Chychłowski M S, Pysz D, Buczyński R, Nowinowski-Kruszelnicki E, Dąbrowski R, Woliński T R 2012 *J. Lightwave Technol.* **30** 1208
- [12] Peng Y, Hou J, Zhang Y, Huang Z H, Xiao R, Lu Q S 2013 *Opt. Lett.* **38** 263
- [13] Sun J, Chan C C, Ni N 2007 *Opt. Commun.* **278** 66
- [14] Li J, Wu S T 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 896

SPECIAL ISSUE—Liquid crystal photonics and applications

Transmission characteristics of photonic crystal fibers based on filling different kinds of liquid crystals*

Wang Jia-Lu^{1,2)} Du Mu-Qing²⁾ Zhang Ling-Li³⁾ Liu Yong-Jun^{1,2)†} Sun Wei-Min²⁾

1) (College of Automation, Harbin Engineering University, Harbin 150001, China)

2) (Key Lab of In-fiber Integrated Optics, Ministry Education of China, Harbin Engineering University, Harbin 150001, China)

3) (Department of Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

(Received 24 December 2014; revised manuscript received 15 April 2015)

Abstract

The transmission characteristics of full-filled photonic liquid crystal fibers (PLCFs) which are filled with five kinds of liquid crystals (LCs) are experimentally studied and theoretically analyzed. The influences of temperature and external electric field on the transmission characteristics of PLCFs are also discussed in this paper. The transmission spectra of PLCFs show obvious bandgaps, and the number and the central wavelengths of the bandgaps depend on the average value of the refractive indices of LCs. By changing the temperature from 20 °C to 80 °C, a blue shift in the bandgap is observed, and the maximum tuning range of the bandgap is 41 nm. Then, with the voltage turning from 0 V to 250 V, the output power of the transmission spectrum decreases, while the central wavelength of the bandgap is almost unchanged. Finally, the transmission spectrum keeps a good stability, even if the polarization state of the input light changes.

Keywords: photonic crystal fiber, liquid crystal, photonic bandgap, sensor

PACS: 07.60.Vg, 42.70.Df, 42.81.Wg

DOI: 10.7498/aps.64.120702

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61107059, 61308052, 61077047) and the 111 Project (B13015) to the Harbin Engineering University, China.

† Corresponding author. E-mail: liuyj@hrbeu.edu.cn

基于液晶空间光调制器的全息显示

夏军 常琛亮 雷威

Holographic display based on liquid crystal spatial light modulator

Xia Jun Chang Chen-Liang Lei Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 124213 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.124213

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.124213>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

数字显微全息重建图像的景深扩展研究

Study on extending the depth of field in reconstructed image for a micro digital hologram

物理学报.2015, 64(11): 114209 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.114209>

基于数字全息图的光纤折射率测量研究

Refractive Index Measurement Research for Optical Fiber Based on Digital Hologram

物理学报.2015, 64(6): 064204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064204>

一种液晶透镜盒间隙的测试方法

A measurement method of cell gap for liquid crystal lens

物理学报.2013, 62(17): 174210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.174210>

低压驱动液晶透镜设计的研究

A design of liquid crystal lens with low voltage driving

物理学报.2013, 62(16): 164212 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.164212>

基于人眼视觉的集成成像三维显示分辨率的比较

Comparison of the resolutions of integral imaging three-dimensional display based on human vision

物理学报.2012, 61(8): 084212 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.084212>

专题: 液晶光学及应用

基于液晶空间光调制器的全息显示*

夏军[†] 常琛亮 雷威

(东南大学电子科学与工程学院, 南京 210096)

(2015年1月19日收到; 2015年3月24日收到修改稿)

在传统的纯相位全息显示系统中, 一般基于快速傅里叶变换(FFT)算法来计算相位全息图, 在FFT的计算中需要遵循Nyquist采样定理, 因此, 重建图像的尺寸往往受限于空间光调制器的固定采样率。这个限制可以通过卷积算法或者两步菲涅耳衍射算法来解决, 但是需要使用多个FFT的计算, 导致计算量增大。鉴于此, 提出了一种基于透镜的纯相位全息图计算方法。在全息图的计算中, 通过透镜的成像原理建立一个采样率可变的虚拟全息面, 通过调节相应的距离参数使得在全息图的计算中可以任意调节原始图像的采样率, 摆脱了传统方法中液晶空间光调制器带宽对重建图像尺寸的限制, 并且这种算法只需使用一次FFT就能达到变采样率的衍射计算, 大幅提高了全息图的计算速度。数值模拟及光学实验结果证明了此方法可以在全息显示光学系统中清晰地重建不同尺寸的图像。同时该系统可以有效地消除由空间光调制器的像素化结构带来的零级衍射。

关键词: 液晶空间光调制器, 全息显示, 计算机全息图**PACS:** 42.79.Kr, 42.40.-i, 42.40.Jv**DOI:** 10.7498/aps.64.124213

1 引言

进入21世纪以来, 三维显示技术迅速成为一大热门研究领域, 在众多的三维显示技术中, 全息技术可以完整地记录和再现物体的三维信息, 因此被公认为未来实现真正三维显示的理想技术。随着计算机技术和光电器件的快速发展, 可以通过计算机模拟光在空间中的衍射来计算生成全息图, 由此生成的数字全息图可以加载到空间光调制器等设备上实现对光的调节, 从而在空间中重建出三维物体^[1,2]。因此, 目前全息显示的实现主要依赖于空间光调制器设备和全息图的计算。当前用于全息显示领域的主流空间光调制器主要是液晶材料的相位型空间光调制器, 这是因为相位型调制具有很高的衍射效率^[3], 理论上相位型调制对光的衍射效率可以达到百分之百。此外, 对于液晶空间光调制器

的相位调制特性也是一个重要的研究方向。例如, 郑华东等^[4]根据实际测量得到的曲线, 建立了新的灰度与相位映射关系的查找表, 对相位全息图进行重新编码, 来提高重建的质量。

在全息图的计算过程中, 最关键的是采用数值算法计算光从物体到全息面的菲涅耳衍射传播。菲涅耳衍射积分的计算可以简化为采用快速傅里叶变换(FFT)算法来加速计算^[5], 可以大幅提高菲涅耳衍射的计算速度。通过这种方法得到的全息图称为菲涅耳全息图。然而, 在基于FFT的菲涅耳衍射计算中, 由于物平面和全息面之间遵循Nyquist采样定理, 因此, 对于确定的全息面的像素采样率, 物平面的采样率是固定的, 即重建物体的大小尺寸是固定的。为了能够实现重建物体的缩放功能, 研究者们开发出了很多不同的算法。一种方法是采用卷积算法来计算菲涅耳衍射^[6-8], 在卷积算法中, 全息面和物平面的采样率可以任意确定, 不受

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2013CB328803)、国家自然科学基金(批准号: 61372030, 91333118)、国家高技术研究发展计划(批准号: 2012AA03A302, 2013AA013904)和江苏省普通高校研究生科研创新计划(批准号: CXZZ11_0152)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: xiajun@seu.edu.cn

Nyquist 采样定理的限制, 但是此方法需要采用三次 FFT 计算. 另一种方法是采用两步菲涅耳衍射计算方法^[9,10], 即在物平面和全息面之间建立一个虚拟的中间平面, 这样先从物平面计算一次菲涅耳衍射到中间平面, 再从中间平面计算第二次菲涅耳衍射到全息面, 虽然每次菲涅耳衍射的计算中仍然需要满足 Nyquist 定理, 但是物平面和全息面不再有直接的联系, 通过中间平面的过渡来实现物平面和全息面采样率的自由选择. 但是这种方法要计算两次菲涅耳衍射, 包括计算两次 FFT 以及多次的二次相位因子相乘.

本文提出了一种基于透镜的全息图计算方法, 通过透镜成像的原理建立一个虚拟全息面来解决全息图计算中 Nyquist 采样定理对尺寸的限制. 通过这种计算方法, 可以在固定的距离上实现物体的不同尺寸的重建, 并且这种计算方法最大的优势是只需要计算一次 FFT, 相比于传统的方法提高了全息图的计算速度.

2 基于透镜系统的变采样率全息图计算理论

2.1 变采样率菲涅耳衍射

基于透镜的全息显示系统如图 1 所示, 图中 dx 为全息面的空间采样率, dv 为位于透镜和物平面之间的虚拟全息面的空间采样率, du 为物平面的空间采样率, 全息面到物平面的重建距离为 z . 在这个系统中我们定义三个距离, 分别为全息面到透镜的距离 d_1 , 透镜到虚拟全息面的距离 d_2 以及虚拟全息面到物平面的距离 d_3 , 并且满足 $d_1 + d_2 + d_3 = z$. 透镜的焦距为 f . 虚拟全息面和全息面的位置满足透镜成像公式, 即 $1/d_1 + 1/d_2 = 1/f$. 从虚拟全息面到物平面之间为空间的菲涅耳衍射传播.

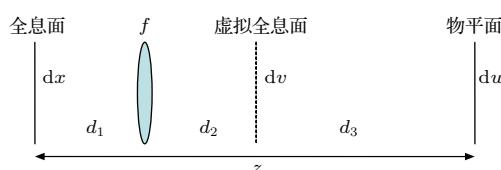


图 1 基于透镜的变采样率全息显示系统示意图

Fig. 1. Schematic diagram of variable sampling holographic display system with lens.

在此基础上可以建立全息面和物平面之间的光场传播公式. 令全息面的光场复振幅分布为 $f(x)$, 虚拟全息面的光场分布为 $f(v)$, 物平面的光场分布为 $f(u)$. 我们从全息面开始进行分析. 首先, 由于虚拟全息面和全息面之间满足透镜成像理论, 那么虚拟全息面和全息面之间的光场分布相差一个二次相位因子, 表示为

$$f(v) = f(x) \exp \left[\frac{i\pi(d_1 + d_2)x^2}{\lambda d_2^2} \right], \quad (1)$$

其中, i 为虚数单位, λ 为光的波长. 同时由于透镜的缩放作用, 光场 $f(v)$ 的采样率 dv 与光场 $f(x)$ 的采样率之间满足

$$\frac{dv}{dx} = \frac{d_2}{d_1}. \quad (2)$$

这表明, 在虚拟全息面上, 光场的强度与全息面光场强度是一样的, 只是空间采样率发生了变化. 因此, 当全息面的采样率固定时, 通过调节 d_1 和 d_2 的距离可以改变虚拟全息面上的采样率, 相当于把原来的全息面经透镜的缩放映射到了一个采样率可变的、位置可变的虚拟全息面上. 接下来虚拟全息面到物平面的传播可以用菲涅耳衍射来进行计算, 计算公式为

$$\begin{aligned} f(u) &= \int f(v) \exp \left(\frac{i\pi v^2}{\lambda d_3} + \frac{i\pi u^2}{\lambda d_3} - \frac{i2\pi uv}{\lambda d_3} \right) dv \\ &= \exp \left(\frac{i\pi u^2}{\lambda d_3} \right) \text{FFT} \left(f(v) \frac{i\pi v^2}{\lambda d_3} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

其中, d_3 为衍射距离, 符号 FFT 表示快速傅里叶变换算法. 在采用 FFT 算法进行计算的过程中, 虚拟全息面和物平面的采样率将遵循 Nyquist 采样公式 $Ndvdu = \lambda d_3$, 其中 N 表示总的采样点的数目. 根据上述两个步骤, 结合起来即可以得到全息面到物平面的传播公式. 把(1)式代入到(3)式可以得到

$$\begin{aligned} f(u) &= \exp \left(\frac{i\pi u^2}{\lambda d_3} \right) \text{FFT} \left\{ f(x) \right. \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i\pi(d_1 + d_2)x^2}{\lambda d_2^2} \right] \exp \left(\frac{i\pi d_2^2 x^2}{\lambda d_1^2 d_3} \right) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

对(4)式具体计算时需要确定其中的参数, 我们的目的是可以实现一个变采样率的计算, 即全息面的采样率 dx 和物平面的采样率 du 可以任意选取(已知). 那么根据全息显示系统中已知的物体重建距离 z 和透镜的焦距 f , 可以得到如下方程组:

$$\frac{1}{d_1} + \frac{1}{d_2} = \frac{1}{f},$$

$$\begin{aligned} N d v d u &= \lambda d_3, \\ d v d_1 &= d x d_2, \\ d_1 + d_2 + d_3 &= z. \end{aligned} \quad (5)$$

对方程组(5)进行求解之后,就可得到四个未知数 d_1, d_2, d_3 和虚拟全息面的采样率 d_v ,然后便可以利用(4)式计算全息面到物平面之间的传播.此计算的特点为全息面和物平面的采样率可以任意选取,不受采样定理的限制,我们称之为变采样率的菲涅耳衍射计算.从上面的分析中可以看出,变采样率计算的实现实际上就是通过改变图1系统中 d_1, d_2, d_3 的距离来实现采样率的可调节,此系统本质上可以看成是一个分数阶傅里叶变换系统^[11].需要指出的是,在此方法中我们固定了透镜的焦距,因此通过移动透镜来实现在固定距离的平面上投影不同采样率的重建图像.此外,还可以利用可变焦距的透镜来实现同样的想法,对于可变焦距的透镜,在方程组(5)中,距离 d_1 可以选为固定值,而焦距 f 则变成了未知数,因此透镜的位置可以固定不变.

2.2 相位全息图的计算

(4)式确定了从全息面到物平面的光场传播函数.我们采用经典的Gerchberg-Saxton(GS)迭代算法进行相位全息图的计算^[12].假设需要重建的一个二维图像位于物平面上,对其施加一个随机相位因子后根据(4)式的逆计算传播至全息面,在全息面上,保留其相位因子,用单位振幅分布来替代原有的振幅,得到一个新的纯相位分布,再采用(4)式计算回到物平面上,在物平面上,保留其相位因子,用目标图像的振幅来代替原有的振幅,至此完成一个迭代过程.这一过程不断重复直至达到一定的迭代次数或者物平面的振幅与目标图像的振幅接近为止.最终我们只取全息面上的相位因子作为需要的相位全息图.

2.3 空间光调制器的伽马校正

相位全息图需要进一步根据相位值和256阶灰度值的线性关系来编码成灰度图,才能加载到相位空间光调制器上进行显示.然而由于所用的空间光调制器本身的伽马曲线所决定的灰度与相位信息是非线性关系,并且相位调制范围超过了 2π ,由此重建所成的图像与理想情况有一定的偏差,造

成图像质量下降.我们对此进行了相应的矫正,生成了新的灰度值与所对应的电压值的关系,把新的对应关系加载到空间光调制器中,通过补偿使得输入的灰度值与最终所调节的相位值满足线性关系.图2所示为进行伽马矫正前后的相位全息图重建的对比.图2(a)为矫正前的重建图像,图2(b)为矫正之后的重建图像.可以看到经过矫正之后图像在清晰度和对比度上都有了很大的提高.

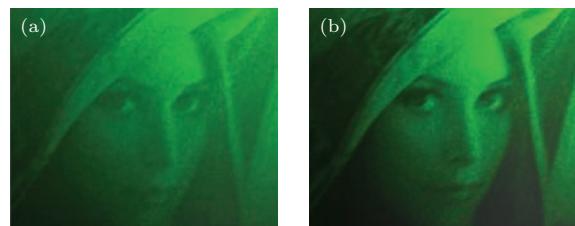


图2 伽马校正前后的重建图像对比

Fig. 2. Comparison of reconstructed images before and after applying the Gamma correction.

3 数值模拟及计算速度分析

首先通过数值模拟来验证所提出的变采样率衍射计算方法.采用 1024×1024 分辨率的二维Lena图像作为想要重建的物体,由于目前的全息显示系统中所用的液晶空间光调制器的采样率是固定的,因此在计算中我们令全息面的采样率保持不变,其采样率 $d_x = 8 \mu\text{m}$.从全息面到物平面的重建距离 $z = 0.5 \text{ m}$,所用透镜的焦距 $f = 0.3 \text{ m}$.物平面的采样率取 $40\text{--}80 \mu\text{m}$ 之间,每隔 $8 \mu\text{m}$ 取一个值.采用上述描述的GS迭代算法来计算相位型全息图,然后对每张全息图进行数值重建,采用基于卷积算法的菲涅耳衍射数值计算来对全息图进行重建,其特点是重建平面的采样率可以任意选取,具体计算过程可参见文献[6].我们设定重建平面的采样率为 $80 \mu\text{m}$,把六张全息图都通过基于卷积算法的菲涅耳衍射计算重建在尺寸为 $80 \mu\text{m} \times 1024$ 的平面上,这样就可以体现出在之前计算全息图时Lena图采样率的不同(即尺寸不同).不同采样率的原图在这个固定尺寸的平面上重建时就会有不同的大小.数值重建结果如图3所示,图中的六张图代表的实际尺寸都为 $80 \mu\text{m} \times 1024$,而红色数字则代表Lena图在计算时的采样率.通过模拟结果可以看到不同采样率的原图得到了重建,证明我们成功地计算了不同采样率的物体的全息图.



图3 基于变采样率全息图算法的数值重建

Fig. 3. Simulation reconstructions from phase-only computer generated hologram based on our method.

下面分析本文提出的变采样率菲涅耳衍射算法对于全息图计算速度的影响。传统的变采样率算法主要有卷积法和两步菲涅耳衍射法，这两种算法都可以实现变采样率的菲涅耳衍射计算。但是，卷积法的数值计算中需要使用三个FFT算法，并且为了避免频谱混叠需要对原始图像进行两倍填充，这样就增加了计算的数据量，从而增加了计算时间。而两步菲涅耳衍射计算中，从物平面到虚拟全息面以及从虚拟全息面到全息面都要分别进行菲涅耳衍射的计算，而一个菲涅耳衍射的数值计算包括一个FFT计算和两个二次相位因子相乘的计算，因此在两步菲涅耳衍射法中需要计算两次FFT以及四次的二次相位因子相乘。在本文方法中，由于只从物平面到虚拟全息面计算一次菲涅耳衍射，而从虚拟全息面到全息面的计算只是乘以一个二次相位因子，因此整个过程只计算一次FFT和三次二次相位因子相乘。因此相比于传统的方法，本文提出的变采样率算法可以通过减少FFT和二次相位因子乘法的计算次数从而提高计算速度。我们对不同的方法的计算时间进行了比较，结果如图4所示。在测试计算中，物平面和全息面的分辨率从 1000×1000 到 2000×2000 ，每次间隔 100×100 。然后分别采用不同的算法计算物平面到全息面的衍射传播。图4(a)所示为本文提出的方法所用的时

间与两步菲涅耳衍射算法所用时间的比值，图4(b)为本文提出的方法与卷积算法所用时间的比值。可

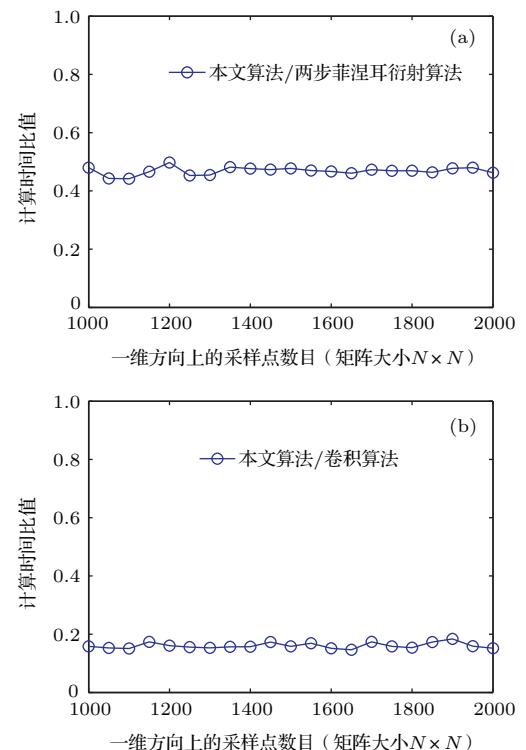


图4 全息图计算时间比较 (a) 与两步菲涅耳衍射算法的比较; (b) 与卷积算法的比较

Fig. 4. Comparison results of hologram calculation time: (a) comparison with double-step Fresnel algorithm; (b) comparison with convolution algorithm.

以看到, 本文算法所用的计算时间是两步菲涅耳衍射算法所用时间的一半左右, 而与卷积法相比, 本文算法所用的时间甚至只有卷积算法的 20%, 可见本文算法大幅提高了全息图的计算速度.

4 光学实验与分析

下面我们对基于变采样率菲涅耳衍射计算得到的相位全息图进行光学重建. 图 5 为光学重建的系统示意图. 激光器发出的单色光经过准直系统被准直成平面波, 然后照射到液晶空间光调制器上, 空间光调制器根据我们计算得到的相位全息图来对每个像素的入射光进行相应的相位调制, 经过调制的光波再通过透镜系统后重建到固定距离的成像平面上. 需要特别说明的是, 在这个系统中由空间光调制器造成的零级衍射(零级波)通过透镜后在其后焦平面上会聚成一个小亮点, 因此我们在这个平面上放置一个滤波片来阻挡掉零级波, 滤波片即一个透明胶片, 上面有一个不透光的小黑点, 因此在这个平面上零级波会聚形成的亮点被不透光的小黑点阻挡掉, 而其他光波则通过透明胶片在后面的平面上重建成像^[13].

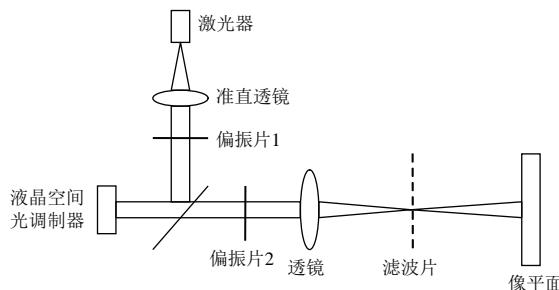


图 5 光学重建实验系统示意图

Fig. 5. Diagram of optical experiment system.

具体的实验光路结构如图 6 所示, 我们所用的液晶相位空间光调制器型号为 Holoeye Pluto 反射式空间光调制器, 激光器发出的光经过准直系统后被准直成平面波, 通过偏振片变为偏振光, 然后放置一个分光棱镜对光的入射和出射方向进行控制. 相位全息图通过计算机被加载到空间光调制器中对入射光进行相应的相位调制, 经过调制的光通过透镜和滤波片后在空间中进行重建, 在重建平面上可以放置一个接收屏幕来观察重建图像. 透镜前的偏振片放在这里有两个目的: 一是可以通过旋转偏振片来控制重建图像的亮度调节, 使亮度达到适合

人眼的观看或者相机感光的程度; 二是可以进一步分离我们需要的全息图衍射光和一些其他的杂散光, 提高重建图像的对比度. 由于单张纯相位全息图的重建图像存在严重的散斑现象, 因此我们采用高速轮流显示 20 张相位全息图的方法来消除散斑噪音^[14]. 当像平面上的 20 个重建图像处于高速刷新状态时, 由于人眼的视觉暂留效应, 可以减小散斑效果对图像质量的影响.

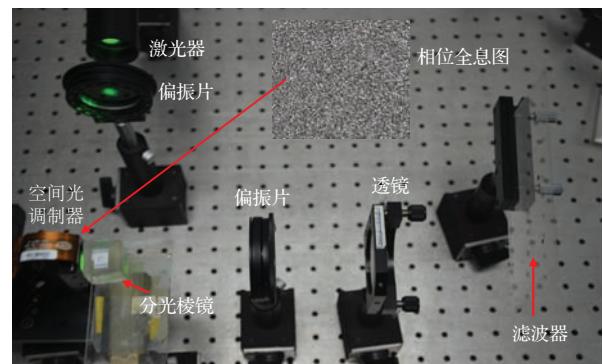


图 6 全息显示光学实验系统

Fig. 6. Optical setup for holographic display.

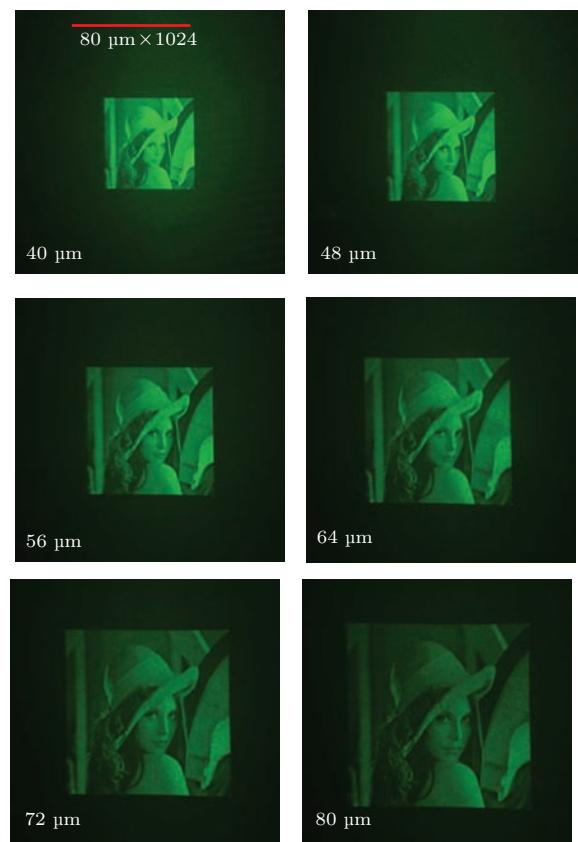


图 7 变采样率全息显示光学重建结果

Fig. 7. Optical reconstructions for scaled holographic display.

光学重建结果如图 7 所示。六张图片的尺寸大小是一样的，每张图中的红色数字为原始 Lena 图像的采样率，在第一张图片中红色实线作为标尺，其长度代表的实际尺寸为 $80 \mu\text{m} \times 1024$ (即最大的 Lena 图的尺寸)。从图 7 可以看到，不同尺寸的 Lena 图像清晰地重建在固定距离的平面上，由于零级衍射被滤掉，因此重建图像中没有零级波的影响，从而证明了本文提出的变采样率菲涅耳衍射全息图计算方法的可行性。这里需要说明的是，由于重建图像整个区域的总能量是不变的，因此图像尺寸从小到大的过程中，随着图像面积的增大，可以明显地看到图像在逐渐变暗。

5 结 论

本文提出了一种基于液晶空间光调制器的全息显示系统中全息图的计算方法，通过利用透镜的成像原理建立虚拟全息面，从而利用虚拟全息面的计算来实现全息面和物平面的采样率可调节作用。相比于传统的变采样率计算方法，本方法只需要一次 FFT 计算，从而大幅提高了计算速度。利用空间光调制器高速刷新显示多张全息图可以有效地消除重建中散斑噪声对图像质量的影响。实验结果证明了利用本文算法计算得到的相位全息图可以在空间中固定距离的平面上清晰地重建不同尺寸的图像。本文所提出的方法可简化相位型空间光调制器全息缩放对象的重建环节，显著缩短相位分布的计算时间，对基于液晶空间光调制器的全息显示系

统中的重建物体缩放调节有重要的应用意义。

参考文献

- [1] Xia J, Yin H 2009 *Opt. Eng.* **48** 020502
- [2] Haist T, Schonleber M, Tiziani H J 1997 *Opt. Commun.* **140** 299
- [3] Yu Y J, Wang T, Zheng H D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3154 (in Chinese) [于瀛洁, 王涛, 郑华东 2009 物理学报 **58** 3154]
- [4] Zheng H D, Yu Y J, Dai L M, Wang T 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6145 (in Chinese) [郑华东, 于瀛洁, 代林茂, 王涛 2010 物理学报 **59** 6145]
- [5] Shimobaba T, Weng J, Sakurai T, Okada N, Nishitsuji T, Takada N, Shiraki A, Masuda N, Ito T 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 1124
- [6] Muffoletto R P, Tyler J M, Tohline J E 2007 *Opt. Express* **15** 5631
- [7] Shimobaba T, Kakue T, Okada N, Oikawa M, Yamaguchi Y, Ito T 2013 *J. Opt.* **15** 075302
- [8] Shimobaba T, Makowski M, Kakue T, Oikawa M, Okada N, Endo Y, Hirayama R, Ito T 2013 *Opt. Express* **21** 25285
- [9] Zhang F, Yamaguchi I, Yaroslavsky L P 2004 *Opt. Lett.* **29** 1668
- [10] Okada N, Shimobaba T, Ichihashi Y, Oi R, Yamamoto K, Oikawa M, Kakue T, Masuda N, Ito T 2013 *Opt. Express* **21** 9192
- [11] Chang C, Xia J, Lei W 2012 *Opt. Commun.* **285** 24
- [12] Gerchberg R W, Saxton W O 1972 *Optik* **35** 237
- [13] Zhang H, Xie J H, Liu J, Wang Y T 2009 *Appl. Opt.* **48** 5834
- [14] Makowski M, Ducin I, Kakarenko K, Suszek J, Sypek M, Kolodziejczyki A 2012 *Opt. Express* **20** 25130

SPECIAL ISSUE—Liquid crystal photonics and applications

Holographic display based on liquid crystal spatial light modulator*

Xia Jun[†] Chang Chen-Liang Lei Wei

(School of Electronic Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China)

(Received 19 January 2015; revised manuscript received 24 March 2015)

Abstract

In conventional phase-only holographic display, the phase-only computer generated hologram is usually calculated based on the fast Fourier transform (FFT) algorithm, in which the Nyquist theory should be satisfied. However, due to the pixel structure of the liquid crystal spatial light modulator and a fixed spatial sampling rate, the size of the reconstructed image is limited by the space-bandwidth product of the liquid crystal phase modulator. The traditional solution is to use convolution algorithm or double-step Fresnel diffraction algorithm to calculate the Fresnel hologram, but FFT has to be calculated many times in both of the methods, thereby increasing the burden of hologram computation. Therefore, in this paper we propose a method to calculate the phase-only hologram based on setting a virtual hologram plane. This virtual hologram plane is set based on the principle of lens imaging. So the calculation of the hologram can be divided into two steps: the first step is to calculate the Fresnel diffraction from the object plane to the virtual hologram plane, and the second step is to calculate the hologram from the virtual hologram plane by being multiplied with a quadratic phase term. In this way, the hologram can be calculated from the original object with any sampling rate we need by adjusting the corresponding parameters of distance. By this method one can calculate the Fresnel diffraction between hologram plane and object plane with variable sampling rates, without considering the space-bandwidth product of the liquid crystal phase modulator, and this algorithm uses only one FFT calculation, which can speed up the calculation of hologram compared with the convolution based method (using three FFTs in calculation) and the double-step Fresnel method (using two FFTs in calculation). Both the computer simulation and the optical experiments demonstrate that the object can be reconstructed with different sizes in the holographic display system. In the optical experiment, the zero-order diffraction can be removed by placing a filter on the back focal plane of the imaging lens and the speckle noise can also be eliminated in order to improve the reconstruction quality by displaying multiple phase-only holograms at a high speed. The proposed method in this paper shows a potential application in zoomable liquid crystal spatial light modulator based holographic display system.

Keywords: liquid crystal spatial light modulator, holographic display, computer generated hologram

PACS: 42.79.Kr, 42.40.-i, 42.40.Jv

DOI: 10.7498/aps.64.124213

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2013CB328803), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61372030, 91333118), the National High Technology Research and Development Program of China (Grant Nos. 2012AA03A302, 2013AA013904), and the Innovation Project of Jiangsu Graduate Education, China (Grant No. CXZZ11_0152).

† Corresponding author. E-mail: xiajun@seu.edu.cn

从 plasmon 到 nanoplasmatics——近代 光子学前沿及液晶在其动态调制中的应用

杨傅子

From plasmon to nanoplasmatics---the frontiers of modern photonics and the role of liquid crystals in tuneable nanoplasmatics

Yang Fu-Zi

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 124214 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.124214

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.124214>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

角向偏振无衍射光束的传输特性及其偏振态研究

[Polarization and propagation characteristics of the azimuthally polarized non-diffracting beam](#)

物理学报.2015, 64(6): 064201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064201>

非均匀部分相干光束在自由空间中的传输

[Propagation of non-uniform partially coherent beams in free space](#)

物理学报.2015, 64(3): 034205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.034205>

离轴高斯涡旋光束的深聚焦特性

[Tight focusing properties of off-center Gaussian vortex beams](#)

物理学报.2014, 63(21): 214202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.214202>

高阶邦加球上柱矢量光束的变换

[Conversion of cylindrical vector beams on the higher-order Poincaré sphere](#)

物理学报.2014, 63(15): 154203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.154203>

梯度负折射率介质中高斯光束传输特性的研究

[Propagation properties of Gaussian beam in gradient negative index of refraction material](#)

物理学报.2014, 63(10): 104205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.104205>

专题: 液晶光学及应用

从 plasmon 到 nanoplasmatics——近代光子学前沿及液晶在其动态调制中的应用*

杨傅子†

(清华大学化学系, 北京 100084)

(2014年12月14日收到; 2015年3月30日收到修改稿)

本综述首先较为系统地介绍了近代光子学的一个重要分支——纳米等离子激元学(nanoplasmatics)中有关基础概念的物理、光学背景及推动该学科的演绎发展脉络。这包括由在平滑界面上的光学表面波(optical surface wave)从物理上导出表面等离子激元(surface plasmon polariton, SPP)的概念, 再由粗糙表面及较大金属颗粒对SPP的影响, 引出线度远小于光波长的纳米金属颗粒与光电磁波的相互作用的结果: 本地表面等离子激元(localized surface plasmon polariton)的存在, 亦即纳米等离子激元学的基础。在简介了纳米等离子激元学器件系统如何在诸多领域突破了传统光学的束缚, 演绎开辟出了近代光学研究的许多特异的新领域后, 特别关注了近期迅速发展并引起越来越多关注的可调制的纳米等离子激元学(tunable nanoplasmatics)器件的领域。液晶材料在光学响应方面特有的可调制特性, 使其在纳米等离子激元学器件的调制中成为一个具有非常实用意义的探索方向。本综述介绍了这方面研究的最新进展, 并对存在的挑战及可能的发展方向等也进行了相应的探讨。

关键词: 表面等离子激元, 纳米等离子激元学, 液晶, 可调制

PACS: 42.25.-p, 42.70.-a, 42.70.Df, 78.20.Ek

DOI: [10.7498/aps.64.124214](https://doi.org/10.7498/aps.64.124214)

1 引言

本综述主要是一个有关纳米等离子激元学(nanoplasmatics)学科发展脉络的基础讲座及液晶材料在其器件调制中应用研究的介绍和探讨。整篇综述是循下述路径展开的。

首先是所谓的等离子激元的概念。自由电子气振荡的量子表征是 plasmon^[1], 如果这个自由电子气振荡是在光电场的驱动下实现的, 那么它们的量子表征就应该是光电场的光子(photon)加上自由电子气振荡的量子(plasmon)的复合场量子, 即 photon-plasmon polariton(实际上 polariton 这个概念是由 Fano^[2]首先引入来表述在透明介质中束缚电子的振荡和光子的耦合的), 由于在英文文献

中现在人们已经约定俗成地把它简称为 plasmon polariton 或直接称为 plasmon, 所以本文就直接都用等离子激元来表述它们。

光学表面波(optical surface wave)是一个沿着两个介质界面传播的光电磁波。从光学方面来说, 由于它的光电场在传播过程中集中于此界面上, 并有向两边介质中迅速衰减的特性, 使得它对于构成此界面的介质有着特定的要求, 即一般说来, 此两介质的光学介电常数的实部应该具有相反的符号。一般情况下, 电介质的光频介电常数是正实数, 而某些金属(如金、银、铝、铜等)的光频介电常数的实部是负的, 因此由这些金属和常规电介质所构成的界面可以作为承载此光学表面波传输的载体。从物理上来说, 这些金属中的自由电子气的振荡受光电场的调制而生成的表面等离子激元(surface plas-

* 清华大学科研发展基金(批准号: 120050121)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: yangfz@tsinghua.edu.cn

mon^[3]或surface plasmon polariton, SPP^[4])则应该是生成并承载光学表面波的物理基础. 本综述先对以上两个重要的基本概念做了较为简明严格的物理及数学表述, 以使对该学科发展脉络的综述展开有一个坚实的起点.

20世纪60年代末, 由于文献[5, 6]在实验工作中成功地激励了光学表面波, 从而引起人们对SPP领域的强烈关注(实际上在20世纪初Wood^[7]在金属包覆光栅反常“鬼线”等方面发现和工作, 已经在实质上接触到了这个课题, 尽管后来才被Ritchie等^[8]证实其表面等离子激元的起源). 自那以来, 在表面光学和表面物理等诸多领域对光学表面波进行了相当大量的实验及应用研究并获得了许多成果^[9–20]. 但由于受到器件结构、信号衰减及信息量有限等因素的影响, 学科本身更广阔的发展一直受到相当的制约. 实际上, 在应用的需求和推动下, 为了增加光学表面波的传播长度和强化表面光电磁场的聚集程度, 亦即减少光学表面波的传播衰减, 对于表面粗糙度及各种尺度金属颗粒对光电磁波传播影响的理论及实验研究一直在不断地进行着, 并于近期得出了在纳米尺度局域上金属颗粒对光电磁波响应的结果——本地表面等离子激元(localized surface plasmon polariton, LSPP)的存在^[21–23]. 这就是所谓的纳米等离子激元学的根基所在, 它开拓了SPP这个学科的一个新的发展方向, 亦即在远小于(可见)光波长及SPP衰减长度(微米量级)的纳米尺度空间利用LSPP的多次相干对光信号在其明显衰减前进行调制处理的可行性. 在20世纪末所发展起来的各种纳米材料制备技术(如电子束刻蚀、离子束刻蚀及胶体化学刻蚀等)及许多强力多功能软件的合作下, 含有各种形状金属纳米颗粒阵列的超材料(metamaterials)的制备成功支撑了以纳米等离子激元为基础的器件系统在诸多领域突破传统光学的束缚, 演绎开辟出了近代光学研究的许多特异的新领域, 甚至产生了激光器(laser)的量子对等物——Spaser (surface plasmon amplification by stimulated emission of radiation)等^[24]. 本综述也在其中选择了几个有代表性的领域, 就其发展原理及物理本质加以介绍, 为下面综述的重点展开做出铺垫.

在应用的需求及强力推动下, 可调制的纳米等离子激元学器件(tunable nanoplasmatics)^[25,26]已经成为一个相当重要的且日益引起众多关注的

热点课题. 由于液晶材料在光学响应方面的诸多优势(如光学双折射率大, 折射率及空间尺度等重要光学参数易于由电、光及热等外界驱动所调制等), 所以液晶材料用于可调制的纳米等离子激元学器件中是一个具有非常实用意义的探索方向. 本综述介绍了这方面研究的最新进展, 也介绍了我们过去在微波的液晶调制方面的工作. 最后, 对于上述课题中存在的挑战及可能的继续发展方向等也进行了相应的探讨.

2 平滑界面上的SPP

2.1 平滑界面上传播的光学表面波

图1为在一个平滑界面($X-Y$)上沿 X 方向传播的光学表面波的电场分布. ϵ_1 和 ϵ_2 分别是组成界面的两个介质的光学介电常数; $\exp(\alpha_1 z)$, $\alpha_1 > 0$ 和 $\exp(-\alpha_2 z)$, $\alpha_2 > 0$ 分别表示此表面波在两个介质中的电场按指数衰减分布.

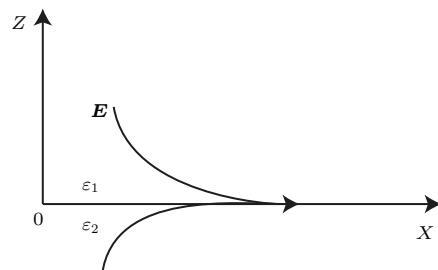


图1 在平滑界面($X-Y$)上传播的光学表面波电场分布

Fig. 1. The electrical field distribution of an optical surface wave propagating along a smooth boundary ($X-Y$).

按照光学表面波的上述定义, 则其沿垂直于界面的 Z 方向的电场分布为

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1(z) = & \left(E_{1x}^0, E_{1y}^0, \frac{i k_x}{\alpha_1} E_{1x}^0 \right) \exp(-\alpha_1 z) \\ & \times \exp[i(k_x x - \omega t)] \quad (z > 0), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_2(z) = & \left(E_{2x}^0, E_{2y}^0, \frac{-i k_x}{\alpha_2} E_{2x}^0 \right) \exp(\alpha_2 z) \\ & \times \exp[i(k_x x - \omega t)] \quad (z < 0), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\alpha_1^2 = k_x^2 - \epsilon_1(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (3)$$

$$\alpha_2^2 = k_x^2 - \epsilon_2(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (4)$$

其中, ω 是光的角频率; c 是真空中的光速; k_x 是表面波在其传播方向上的波矢, 且有 $\text{Re}\{\alpha_1\} > 0$, $\text{Re}\{\alpha_2\} > 0$ 和 $\text{Re}\{k_x\} > 0$.

将由 Maxwell 方程导出的电磁场的边界条件代入上述公式中, 可以得到光学表面波存在并传播的三要素.

1) 光学表面波是一个 p 偏振的横磁(TM) 波, 其偏振方向垂直于传播界面,

$$E_{1y}^0 = E_{2y}^0 = 0. \quad (5)$$

2) $\varepsilon_1(\omega)$ 与 $\varepsilon_2(\omega)$ 具有相反的符号,

$$\varepsilon_1(\omega)/\varepsilon_2(\omega) = -\alpha_1/\alpha_2, \quad (6)$$

即若 $\varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2(\omega), \alpha_1, \alpha_2$ 皆为实数, 则由 $\varepsilon_1(\omega) > 0$ 必有 $\varepsilon_2(\omega) < 0$ ($\alpha_1 > 0, \alpha_2 > 0$).

3) 表面波是一个“慢”波,

$$k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\varepsilon_1(\omega)\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega)}, \quad (7)$$

$k_x^2 > (\omega^2/c^2)\varepsilon_1(\omega)$, 即表面波的传播波矢量要大于平面波在均匀电介质 ε_1 中的波矢量.

上述三要素中, 1) 和 3) 分别是光表面波的偏振度和传播波矢量, 亦即对所生成的表面波的光学本征的描述, 是结果; 而 2) 则是对于组成能够生成和承载光表面波的界面的两种介质的光学本性的要求, 是源. 所以, 寻找光学介电常数(实部)为负值的介质就成了激励生成光学表面波的关键所在.

2.2 金属介质的光频介电常数

金属中含有大量的自由电子, 它们可以在外电场作用下做定向运动, 因而使金属介质具有电导率 σ . 在这种情况下, 由 Maxwell 方程导出的波动方程应该是

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\mu\varepsilon}{c^2} \ddot{\mathbf{E}} + \frac{4\pi\mu\sigma}{c^2} \dot{\mathbf{E}}, \quad (8)$$

对于角频率是 ω 的单色场, 该波动方程可以简化为

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \quad (9)$$

$$k^2 = \frac{\omega^2\mu}{c^2} \left(\varepsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right). \quad (10)$$

这意味着金属介质具有复数介电常数,

$$\varepsilon = \varepsilon_b + i \frac{4\pi\sigma}{\omega}. \quad (11)$$

显然, ε_b 来自于束缚电子的贡献, 而 σ 则来自于自由电子的贡献. 当然, 两者都是频率 ω 的函数. 下面由初等电子理论对金属的光频介电常数做一个简单的剖析 [27].

根据金属的自由电子气模型, 金属中电子的运动方程可以写为

$$m\ddot{\mathbf{r}} + m\gamma\dot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E}, \quad (12)$$

其中, m 是电子质量, e 是电子电荷, 而 γ 是单位质量的阻尼系数. 对于单色的时间谐和光电场, 上述方程的周期稳态解是

$$\mathbf{r} = -\frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}. \quad (13)$$

如果 N' 是单位体积内的电子数, 那么电流密度 \mathbf{j} 就可表示成下式:

$$\mathbf{j} = N'e\dot{\mathbf{r}} = \frac{N'e^2}{m(\gamma - i\omega)} \mathbf{E}, \quad (14)$$

再由

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad (15)$$

可以得到

$$\sigma = \frac{N'e^2}{m(\gamma - i\omega)}. \quad (16)$$

如果考虑到 $\varepsilon = \varepsilon_r + i\varepsilon_i$, 则可以得到

$$\varepsilon_r = \varepsilon_{rb} - \frac{4\pi N'e^2}{m(\omega^2 + \gamma^2)}, \quad (17)$$

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{ib} + \frac{4\pi N'e^2\gamma}{mw(\omega^2 + \gamma^2)}. \quad (18)$$

所以, 金属介质的介电常数是一个非常复杂的量. 只有在足够低的频率下, 来自束缚电子的贡献要远小于来自自由电子的贡献, 我们可以认为 $\varepsilon_{rb} \approx 1$ 及 $\varepsilon_{ib} \approx 0$. 那么, ε 的实部 ε_r 改变符号的临界频率 ω_c 就可以表述为

$$\omega_c^2 = \frac{4\pi N'e^2}{m} - \gamma^2. \quad (19)$$

如果假定 $\omega_c^2 \gg \gamma^2$, 并且仍然工作在足够高的频率 ($\omega^2 \gg \gamma^2$) 则根据上述的 (17), (18) 和 (19) 式, 简化后的金属光频介电常数实部及虚部表达式为

$$\varepsilon_r \sim 1 - (\omega_c/\omega)^2, \quad (20)$$

$$\varepsilon_i \sim \frac{\gamma}{\omega} (\omega_c/\omega)^2. \quad (21)$$

这样, 在工作频率小于临界频率时, 即 $\omega < \omega_c$, 金属的光频介电常数的实部是负数.

2.3 光学表面波的物理本质

由 2.1 和 2.2 节所述可知, 光学表面波的生成和传播需要组成界面的两种介质具有相反符号的(实部)光学介电常数, 而某些金属介质在一定的光学

频率范围内其光学介电常数的实部可为负值。这样，在由这些金属介质跟一般常规的电介质（其光频介电常数一般为正实数）所组成的界面上即可激励生成并承载传播光学表面波。由2.2节所知，金属光学介电常数实部为负值主要来自于其大量自由电子的存在。这样，由这些自由电子在光电场（photon）激励下所形成的集体振荡（plasmon）所组成的复合场量子——photon-plasmon polariton就应该是这些光学表面波的物理本质所在。

实际上，2.1节中的要素1)——光学表面波的垂直于界面的偏振就是激励金属介质中的自由电子气集合振荡的需要及结果，如图2所示。

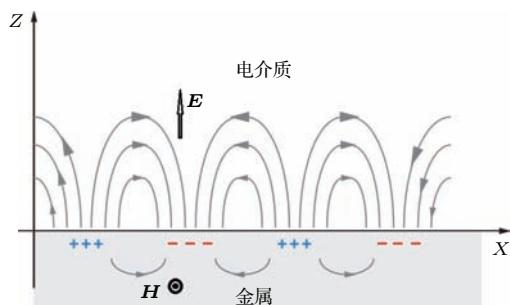


图2 由垂直偏振的光电场所激励的金属中的自由电子气集合振荡

Fig. 2. The collective oscillation of free electron gas in metallic medium excited by optical electric field with vertical polarization.

而要素3)表述的光学表面波的慢波特性的波矢则可以理解为：由于“拖曳”了较重的电子一起运动，使得表面波的传播速度较之在电介质中传播的平面波有所下降。当然，要素2)实际上是隐性地包含了本节所述的主要的光学表面波(optical surface wave)的根本——金属介质中自由电子气的存在。

2.4 光学表面波的激励耦合

按照2.1节中的要素3)光学表面波的波矢要大于在与界面相邻的电介质中传播的平面波的波矢。这种动量失配意味着我们无法直接由传播在电介质中的平面波去激励这种光学表面波。所以，在实验中某些光动量增强的激励耦合技术是需要的。下面介绍两种最常见的实验耦合手段。

2.4.1 棱镜耦合

棱镜耦合的原理是，当入射光在高折射率棱镜中以大于临界角入射时，其水平动量将大于在与金

属介质组成表面波传播界面的电介质中自由平面波的传播动量，从而使光波以迅衰波的形式传递到金属与此电介质的界面。随着光入射角的加大，当这迅衰波的水平动量与表面波所要求的波矢动量相匹配时，则激发了在此界面上传播的光学表面波，并引起了在棱镜底面全反射光强的下降，这也同时在实验上指出了此时光学表面波已被激励。所以，此手段亦被称为衰减全反射(attenuated total reflection, ATR)技术。文献[5, 6]首先在实验中引入了各自的棱镜耦合手段，实现了表面波的光学激励，如图3所示。

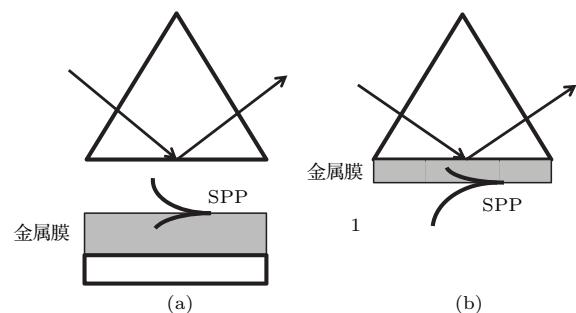


图3 表面波棱镜耦合的(a) Otto 和(b) Kretschmann 结构

Fig. 3. The coupled optical surface waves by prism: (a) Otto and (b) Kretschmann geometries.

2.4.2 光栅耦合

幅度调制或相位调制光栅都可以给入射的光辐射以额外的水平动量，从而将光学表面波耦合到由金属和电介质形成的光栅表面上。基于如图4所示的幅度调制光栅，对于一个横磁偏振(TM)的入射平面波，其横向磁场分量 H_y 可以写成

$$H_y = A \exp \left\{ i \left[(k_0 n_c \sin \theta) z - (k_0 n_c \cos \theta) x - \omega t \right] \right\}, \quad (22)$$

其中 A 是幅度系数。对于正弦分布的光栅，即在光栅的界面上 x 是 z 的函数，

$$x = \frac{g}{2} \sin \left(\frac{2\pi z}{A} \right), \quad (23)$$

则有

$$H_y = A \exp \left\{ i \left[(k_0 n_c \sin \theta) z - \left(k_0 n_c \cos \theta \frac{g}{2} \sin \frac{2\pi z}{A} \right) - \omega t \right] \right\}. \quad (24)$$

若将(24)式按Bessel函数在光栅界面上展开，则有

$$H_y = A \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m \left(-\frac{g}{2} k_0 n_c \cos \theta \right)$$

$$\times \exp \left\{ i \left[\left(k_0 n_c \sin \theta + m \frac{2\pi}{\Lambda} \right) z - \omega t \right] \right\}, \quad (25)$$

可以看到光栅引入了一系列的传播常数, 如下式所示:

$$k_{zm} = k_0 n_c \sin \theta + m \frac{2\pi}{\Lambda}. \quad (26)$$

这里 $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 是光栅的衍射级次. 显然, 如果某个 $k_{zm} = k_{sp}$, 则在光栅界面上传播的光学表面波就可以被入射的光辐射所激发, 造成光栅的此级衍射的衰减. 实际上, Wood 所发现的在金属包覆光栅表面上所出现的反常“鬼线”^[7] 的物理本质就在于此^[8].

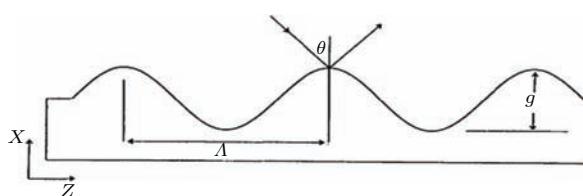


图 4 可以耦合光学表面波的幅度调制光栅示意图

Fig. 4. Amplitude modulating grating for coupling optical surface waves.

2.5 光学表面波的损耗和衰减

以上对光学表面波的理论研究及数学分析都是建立在理想的平滑界面及理想的无损耗介质的前提下. 从实用的角度出发, 我们当然希望此光学表面波能够低损耗地传播相当远的距离, 从而极大地增强集聚在界面上光电场强度及其与界面上待探测对象的有效作用长度, 以提高表面物理、表面光学探测的灵敏度. 从光学表面波的生成及传播机理和组成其传播界面的材料特性来看, 存在以下三方面的损耗机理.

一是, 由于金属的光频介电常数是复数, 其虚部的存在必然造成不可逆的吸收损耗(焦耳热损). 这除了要寻找在所研究的光频波段其介电常数虚部尽量小的金属材料(如金、银等对于可见光波段)外, 还要对样品的结构进行研究以使尽量少部分的表面波光电场进入结构的金属材料中, 如下面将要提到的长程光学表面波.

二是, 界面的粗糙度对传播中的光学表面波所造成的杂乱散射(衍射)损失. 但是, 对杂乱无序分布颗粒所形成的表面粗糙度影响的研究, 导致了对单个金属颗粒及其规则阵列对光电磁场响应的深

入探索, 进而使光学表面波这个学科进入了一个全新的发展方向, 这也是本综述的主要目的基础所在.

三是, 光学表面波的耦合激励机理也造成了再辐射损耗. 这也是较难避免的损耗衰减. 因为一般说来, 探测表面波的存在及它对传播界面上研究对象物的响应, 就不可避免地需要将光辐射与其相互作用, 即此表面波的(一部分)能量辐射出此表面波的传播界面.

2.5.1 长程光学表面波

2.5.1.1 长程表面等离子激元(long range surface plasmon polariton, LRSPP)

为了减少光学表面波的传输损耗, Sarid^[11]首先提出了在夹于两个对称电介质中的超薄金属膜界面上上传输的长程光学表面波的概念, 并在实际试验中实现. Sarid 模型的原理是, 当金属膜变得足够薄时, 在两个金属-电介质界面上所激发起来的光学表面波相互叠加, 并通过相互干涉耦合分裂成两个模式. 其中的电场反对称模式, 压缩了表面波的光电场在金属膜中的分量, 从而大幅度地减少了表面波光能量在传输中的金属焦耳热耗, 如图 5 所示. 因为在 Sarid 模型中所使用的是具有等离子激元特征的金属薄膜, 所以这种长程光学表面波称之为LRSPP. 由于 LRSPP 中的光电场在金属薄膜中被大大压缩, 所以这 LRSPP 模式的传输损耗比起一般的SPP 模式有一个数量级的减少, 相应的其传播长度亦有一个数量级的提高, 如图 6(b) 中两种模式的衰减全反射激励谱宽的数值模拟所示(图 6(a)给出了用于数值模拟的两种模式样品结构的参数).

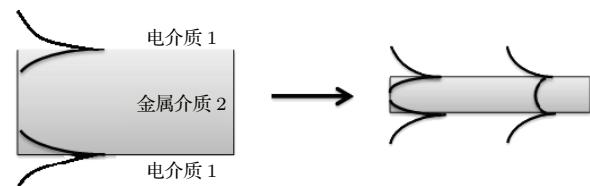


图 5 金属膜变薄时所生成的长程表面波及短程表面波在金属薄膜中的场分布

Fig. 5. The field distribution of long-range and short-range surface waves as the metallic film thins.

自从 Sarid 提出并在实验上实现了 LRSPP 之后^[11], 在这个领域展开了大量的理论研究、数值模拟及实验工作^[28–33], Berini^[34] 已经较为全面地综述了这方面的工作.

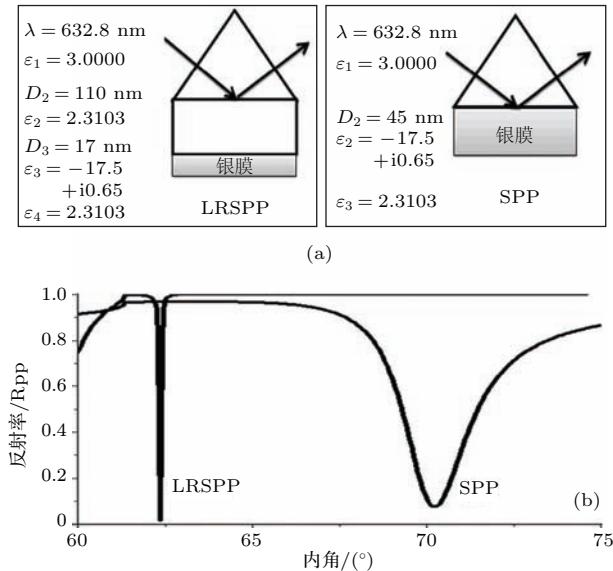


图 6 (a) 数值模拟的两种模式样品结构的参数; (b) 长程表面波 (LRSP) 和一般表面波 (SPP) 的衰减全发射激励谱

Fig. 6. (a) Structure parameters of LRSPP mode and SPP mode samples; (b) excited spectra from attenuated total reflection of LRSPP and SPP.

2.5.1.2 长程表面激子激元 (long range surface exciton polariton, LRSEP)

如上所述, 当在对称电介质中嵌入的介质薄膜越来越薄时, 在两个界面上生成并传播的两个同型的表面波会相互重叠, 并相互耦合干涉而分裂成两个不同对称的耦合模式. 就一般的普适情况而言, 如图 7 所示的夹在两个电介质中厚度为 d 的介质薄膜的三层结构(区域 1 和 2 均为纯电介质, 其光学介电常数分别为 ϵ_1 和 ϵ_3 都是正实数. 区域 2 是薄膜介质, 其光学介电常数 $\epsilon_2 = \epsilon_{2r} + i\epsilon_{2i}$, 而 $\epsilon_{2i} > 0$).

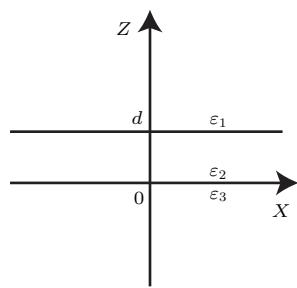


图 7 含有超薄介质薄膜的三层介质结构

Fig. 7. The three layer geometry including a very thin film.

像前面一样求解电磁场的边界条件, 则图 7 所示的三层结构的色散关系可表示为

$$\tanh(\alpha_2 d) = -\frac{\epsilon_2 \alpha_2 (\epsilon_1 \alpha_3 + \epsilon_3 \alpha_1)}{\epsilon_1 \epsilon_3 \alpha_2^2 + \epsilon_2^2 \alpha_1 \alpha_3}, \quad (27)$$

$$\alpha_j^2 = k^2 - k_0^2 \epsilon_j \quad (j = 1, 2, 3), \quad (28)$$

$$k = k_r + i k_i. \quad (29)$$

对于表面波, 当然要求 $\operatorname{Re}(\alpha_1) > 0$ 和 $\operatorname{Re}(\alpha_3) > 0$, 以使在 1, 3 两个电介质区域中光电场是离开界面而迅速衰减的. 对于对称的三层样品结构, 即 $\epsilon_3 = \epsilon_1$, 上述色散关系分裂成两支. 一支是具有反对称的 H_y 场,

$$\tanh(\alpha_2 d) = \frac{-\epsilon_1 \alpha_2}{\epsilon_2 \alpha_1}, \quad (30)$$

另一支则具有对称的 H_y 场,

$$\tanh(\alpha_2 d) = \frac{-\epsilon_2 \alpha_1}{\epsilon_1 \alpha_2}. \quad (31)$$

对于对称的 H_y 场这一支, 如果膜厚足够薄而满足 $\left| \frac{1}{2} \alpha_2 d \right| \ll 1$, 则其色散方程可简化为

$$\frac{1}{2} \alpha_2 d \cong \frac{-\epsilon_2 \alpha_1}{\epsilon_1 \alpha_2}. \quad (32)$$

按照上述 α 与 k 的关系求解此简化的复色散方程, 可得传播常数 k 的实部与虚部分别为

$$k_r \cong k_0 \epsilon_1^{1/2} \left[1 + \frac{\epsilon_1}{2} \left(\frac{\pi d}{\lambda_0} \right)^2 \times \frac{(\epsilon_{r2}^2 + \epsilon_{i2}^2 - \epsilon_1 \epsilon_{r2})^2 - \epsilon_1^2 \epsilon_{i2}^2}{(\epsilon_{r2}^2 + \epsilon_{i2}^2)^2} \right], \quad (33)$$

$$k_i \cong k_0 \epsilon_1^{1/2} \epsilon_1^2 \left(\frac{\pi d}{\lambda_0} \right)^2 \frac{\epsilon_{i2} (\epsilon_{r2}^2 + \epsilon_{i2}^2 - \epsilon_1 \epsilon_{r2})}{(\epsilon_{r2}^2 + \epsilon_{i2}^2)^2}. \quad (34)$$

对于金属介质而言, 应有 $\epsilon_{r2} < 0$ 和 ϵ_{i2} 相对很小, 从而 $|\epsilon_{r2}| \gg \epsilon_{i2}$, 则有

$$k_r \cong k_0 \epsilon_1^{1/2} \left[1 + \frac{\epsilon_1}{2} \left(\frac{\pi d}{\lambda_0} \right)^2 \left(1 - \frac{\epsilon_1}{\epsilon_{r2}} \right)^2 \right] > k_0 \epsilon_1^{1/2}, \quad (35)$$

$$k_i \cong k_0 \epsilon_1^{1/2} \epsilon_1^2 \left(\frac{\pi d}{\lambda_0} \right)^2 \frac{|\epsilon_{r2}| + \epsilon_1}{|\epsilon_{r2}|^3} \epsilon_{i2}. \quad (36)$$

由于其波矢的实部大于在电介质中的平面波的自由波矢, 所以这是一个表面波, 且其传播损耗正比于金属介电常数的虚部. 这就是上面所述的 LRSPP [11].

如果介质 2 的 $|\epsilon_{r2}|$ 相对很小 ($\cong 0$) 而 $\epsilon_{i2} > \epsilon_1$, 则其传播波矢的实部及虚部将分别成为

$$k_r \cong k_0 \epsilon_1^{1/2} \left[1 + \frac{\epsilon_1}{2} \left(\frac{\pi d}{\lambda_0} \right)^2 \frac{\epsilon_{i2}^2 - \epsilon_1^2}{\epsilon_{i2}^2} \right] > k_0 \epsilon_1^{1/2}, \quad (37)$$

$$k_i \cong k_0 \varepsilon_1^{1/2} \varepsilon_1^2 \left(\frac{\pi d}{\lambda_0} \right)^2 \varepsilon_{i2}^{-1}. \quad (38)$$

由于 $k_r > k_0 \varepsilon_1^{1/2}$, 这显然也是一个表面波, 但有点惊奇的是其传播损耗反比于此介质的介电常数的虚部! 实际上, 这是由于当薄膜介质的介电常数的实部接近于零而虚部较大时, 光电场将被排斥于该介质薄膜之外. 其介电常数的虚部越大, 光电场在薄膜中的份额就越少, 亦即虽然吸收能力越大, 但可供吸收的光电场却越少.

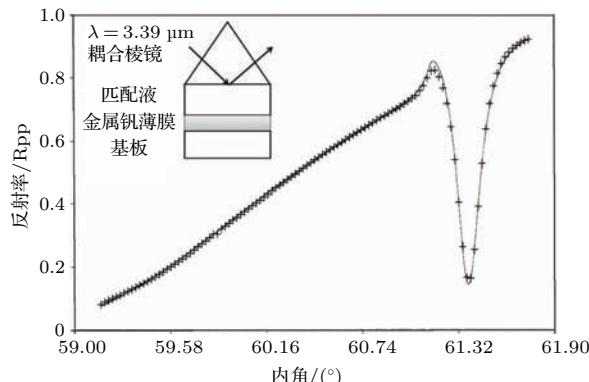


图8 在金属钒薄膜中用 $3.39 \mu\text{m}$ 波长所激发的长程表面波的ATR谱(改编自文献[36])

Fig. 8. The ATR spectrum from a long-range surface wave excited by $3.39 \mu\text{m}$ He-Ne laser in vanadium thin film. Adapted from Ref.[36].

如前所述, 金属的光学介电常数与光学频率的关系是很复杂的. 它是和具体金属原子的电子壳层结构及与之相互作用的光学频率密切相关的. 例如, 一些贵金属(如金、银等)在可见光波段呈现良好的“金属”性, 其光学介电常数具有较大的负实部及较小的正虚部, 而在紫外波段则呈现“介质”性, 其介电常数则具有较大的正实部及较小的正虚部. 而一些过渡金属, 如铁(Fe)在可见波段及钒(V)在红外波段等, 其薄膜的光学介电常数则具有很小的绝对值实部和相当大的正虚部, 正好可以符合承载上述第二种长程表面波对其样品结构中介质薄膜的要求. Kovacs^[35]首先在可见光波段($\lambda_0 = 540 \text{ nm}$)研究了夹在对称电介质中的Fe薄膜的光学模式, 测得其介电常数约为 $0 + i17$. Yang等^[36]随后在实验上于红外波段($3.39 \mu\text{m}$)用ATR技术激发了夹在对称电介质中的V薄膜中的光学表面波(如图8所示), 并得到其具有更大虚部的介电常数约为 $9 + i48$, 而且从理论上分析了该表面波的长程性及传输长度与薄膜厚度及其介电常数虚部大小的关系. 由于在电介质的激子(exciton)共

振频率处, 其介电常数具有实部为零而虚部达到很大的极值的性质(如图9所示), 所以在文献[36]及随后一系列的工作^[37-41]中, 此类光学长程表面波亦被称之为长程表面激子激元(long range surface exciton polariton, LRSEP). 文献[42]对于在两个电介质区域之间夹有一个介质薄膜的三层样品结构中所激发传播的长程光学表面波的普适情况给出了较为系统的综述.

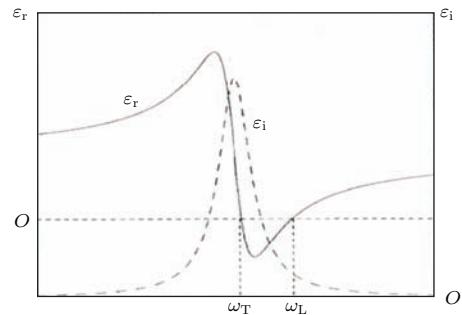


图9 激子激发频率附近电介质的光学介电常数实部 ε_r 及虚部 ε_i 与光学频率的关系

Fig. 9. The relationship between real part ε_r and imaginary part ε_i of an optical constant and frequencies around the excitation frequency of an exciton.

2.5.2 表面粗糙度对表面波造成的损耗衰减

2.5.2.1 粗糙金属表面上的光学表面波

如前所述, 光学表面波是一个将光电场能量集中于界面传播的电磁波, 所以其必然对界面的光学及几何性质非常敏感, 并受其强烈的影响. 这一方面正是光学表面波可作为灵敏的探头用于表面物理、化学及光学等表面领域学科的优越之处, 另一方面也造成了表面的几何无序状态对表面波传播的严重影响——损耗衰减. 对无序的表面(几何)粗糙度于表面波生成及传播的影响方面的工作并不多, 这主要是由于建立一个能够准确地描述实验结果的理论处理模型的困难. 在不同的光学频率下 Farias 和 Maradudin^[43]模拟计算了不同厚度的粗糙银膜与真空界面对表面波传播长度的影响, Paulick^[44]则构建了一个平滑的表面模型, 并引入表述经验粗糙度参数的等效电流去模拟研究这些表面粗糙度对表面波传播的影响. 结果当然是这些表面粗糙度引起了传播中表面波的散射损耗, 亦即将部分表面波的能量由再辐射的方式耦合到自由空间中去, 从而造成了此表面波的传播损耗衰减. 当然, 既然表面粗糙度可以将光学表面波耦合到自由空间中去, 它也就可以将自由空间中的平面波耦

合到表面波上来. 这实际上也就是如前所述的光学表面波的光栅耦合的情形.

当然, 用各种正弦轮廓分布的光栅类表面凹凸组合去描述粗糙度大大简化了理论处理的难度^[45–47], 但是, 如何得到一个与实际结果较为相符的模型组合, 却是要有相当大量的工作要做的.

2.5.2.2 岛状金属薄膜上的光学表面波

当金属薄膜的厚度减小到低于一个临界值时, 由于空洞的出现, 金属薄膜变成了不连续的岛状分布. 结果造成这种超薄金属薄膜的光学介电常数完全不同于同种体状金属的光学介电常数(如仍然把此岛状金属体处理作具有一个介电常数的均匀平行薄膜的话). 一般说来, 随着厚度的继续减小, 其介电常数的实部绝对值下降, 而虚部却不断上升, 从而, 渐远其金属性. Yang 等^[48]首先在可见波段(632.8 nm)于实验上用这种超薄银膜实现了长程表面波的激励和测试, 拟合的薄膜光学参数是 $-7.34 + i56.09$ 的等效介电常数及大约 9.0 nm 的等效厚度, 图 10 所示为实验得到的 ATR 激励谱图. 显然, 这是一种承载于等效介电常数虚部很大的薄膜上的等效的LRSEP, 尽管可能并没有真正的激子被激发. 随后文献^[49, 50]亦分别就此类超薄金属岛状薄膜承载长程光学表面波进行了理论及实验研究.

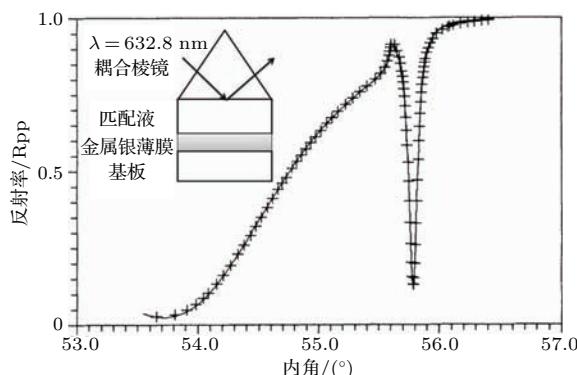


图 10 超薄银膜所承载的长程光学表面波的 ATR 激励谱图(改编自文献 [48])

Fig. 10. Excited ATR spectrum of an optical long-range surface wave supported by a very thin silver film. Adapted from Ref. [48].

因为在实验中所用的样品结构主要是由热蒸镀在玻璃基板上的岛状超薄银膜和与其接触的折射率匹配液组成, 而这匹配液是可以渗透到岛状金属颗粒的间隙中. 所以, 根据电介质和金属的(复)介电常数及估计它们各自所占的份额, 亦可以由

Maxwell Garnett^[51]提出的对于具有光波长线度的小金属颗粒无序分布于电介质中的理论, 去计算这个等效薄膜的等效复介电常数, 并与由实验所得谱图的拟合结果加以比较.

下列公式即为在文献[48]中所用于计算的 Maxwell Garnett 理论公式:

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_b}{\varepsilon_b + L(\varepsilon - \varepsilon_b)} = \frac{Q(\varepsilon_a - \varepsilon_b)}{\varepsilon_b + L(\varepsilon_a - \varepsilon_b)}, \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_r &= \varepsilon_b \left(1 + Q \left\{ (\varepsilon_{ar} - \varepsilon_b) [\varepsilon_b \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - Q)L(\varepsilon_{ar} - \varepsilon_b)] + (1 - Q)L\varepsilon_{ai}^2 \right\} \right. \\ &\quad \times \left\{ [\varepsilon_b + (1 - Q)L(\varepsilon_{ar} - \varepsilon_b)]^2 \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - Q)^2 L^2 \varepsilon_{ai}^2 \right\}^{-1} \right), \end{aligned} \quad (40)$$

$$\varepsilon_i = \frac{Q\varepsilon_{ai}\varepsilon_b^2}{[\varepsilon_b + (1 - Q)L(\varepsilon_{ar} - \varepsilon_b)]^2 + (1 - Q)^2 L^2 \varepsilon_{ai}^2}, \quad (41)$$

其中, Q 为占空因子, L 为形状因子, ε_a 为金属的复介电常数, ε_b 为匹配液的介电常数, ε 为有效薄膜的有效复介电常数.

3 金属纳米颗粒的本地表面等离子激元共振 (localized surface plasmon resonance, LSPR)

3.1 单个金属纳米颗粒的LSPR

对金属表面粗糙度与表面等离子激元波传播损耗关系的研究, 导致了对于单个金属颗粒与入射平面电磁波相互作用的深入探索. 因为这小颗粒仍然是由金属组成, 所以金属中的自由电子气在外界(光)电磁场的激励下, 还是会由这电子气和激励光子的集合振荡在某个共振频率处, 在这金属颗粒与围绕它的电介质的界面上生成等离子激元共振, 从而将部分空间的电磁场集中于颗粒近场某些区域. 但是由于这种等离子激元共振局限于小金属颗粒内部及非常临近界面的区域, 而不能传播开来, 故被称之为 LSPR. 实际上早在 20 世纪初 Mie^[52]就根据 Maxwell 方程对入射到圆球形的物质颗粒上的平面电磁波的散射、消光和吸收进行了较为系统的分析研究. 如图 11 所示, 一个半径为 a , 复介电常数为 ε_m 并处于介电常数为 ε_d 的电介质包围中的均匀导电介质(金属)球对于沿 x 方向传播并沿 z 方向偏振的平面电磁波 $\mathbf{E}^{(i)}$ 的响应在平面 p 点处(极

坐标为 r, θ 的结果, 是由(42)–(44)式表述的此相互作用的散射截面 σ_{sca} 、消光界面 σ_{ext} 和吸收界面 σ_{abs} 来描述^[53,54],

$$\sigma_{\text{sca}} = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|^2} \sum_{L=1}^{\infty} (2L+1) (|a_L|^2 + |b_L|^2), \quad (42)$$

$$\sigma_{\text{ext}} = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|^2} \sum_{L=1}^{\infty} (2L+1) [\text{Re}(a_L + b_L)], \quad (43)$$

$$\sigma_{\text{abs}} = \sigma_{\text{ext}} - \sigma_{\text{sca}}, \quad (44)$$

式中, k 是入射波的波矢; L 是整数, 表示偶极、四极或更高级的散射矩; a_L 和 b_L 是由 Riccati-Bessel 函数 ψ_L 和 χ_L 所组成的参数,

$$a_L = \frac{m\psi_L(mx)\psi'_L(x) - \psi'_L(mx)\psi_L(x)}{m\psi_L(mx)\chi'_L(x) - \psi'_L(mx)\chi_L(x)}, \quad (45)$$

$$b_L = \frac{\psi_L(mx)\psi'_L(x) - m\psi'_L(mx)\psi_L(x)}{\psi_L(mx)\chi'_L(x) - m\psi'_L(mx)\chi_L(x)}. \quad (46)$$

此处, $m = n_m/n_d$, $n_m = n_{\text{mr}} + i n_{\text{mi}}$ 是金属的复折射率, n_d 是周围介质的实折射率; $x = k_d a$, a 是(金属)颗粒的半径, $k_d = 2\pi/\lambda_d$ 是在介质中而非在真空中的波矢.

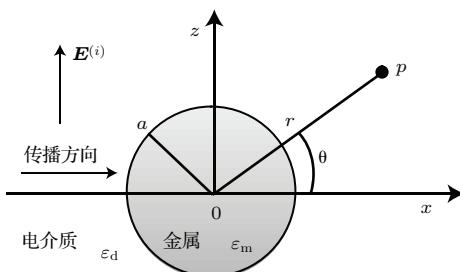


图 11 电介质中的金属球对电磁波的散射

Fig. 11. Electromagnetic wave scattering from a metallic ball surrounded by dielectrics medium.

对于颗粒线度远小于光波长 ($a \ll \lambda_d$) 的情况, 则颗粒局域内的电场可以认为是静态的, 即在准静态近似条件下^[55,56], 由于 $x \ll 1$ 则 Riccati-Bessel 函数可以由按幂级数展开的前几项来近似. 如果我们只保持到 x^3 级次的项, 则上述(45)和(46)两式可以被简化为

$$a_1 \approx -\frac{i2x^3}{3} \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}, \quad (47)$$

$$b_1 \approx 0, \quad (48)$$

其他较高级次的 a_L 和 b_L 在只保持到 x^3 级次的前提下, 都是零.

将 $m = (n_{\text{mr}} + i n_{\text{mi}})/n_d$ 代入(47)式, 则有

$$a_1 = -i \frac{2x^3}{3} \frac{n_{\text{mr}}^2 - n_{\text{mi}}^2 + i2n_{\text{mr}}n_{\text{mi}} - n_d^2}{n_{\text{mr}}^2 - n_{\text{mi}}^2 + i2n_{\text{mr}}n_{\text{mi}} + 2n_d^2}. \quad (49)$$

如果把金属的复介电常数 $\epsilon_m = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ ($\epsilon_1 = n_{\text{mr}}^2 - n_{\text{mi}}^2$, $\epsilon_2 = 2n_{\text{mr}}n_{\text{mi}}$) 和电介质的介电常数 $\epsilon_d = n_d^2$ 代入(49)式, 则有

$$a_1 = \frac{2x^3 - i\epsilon_1^2 - i\epsilon_1\epsilon_d + 3\epsilon_2\epsilon_d - i\epsilon_2^2 + i2\epsilon_d^2}{3} \frac{(1 + 2\epsilon_d)^2 + \epsilon_2^2}. \quad (50)$$

将(50)式代入(43)式并只取偶极矩项, 就可以得到被广泛引证的纳米金属颗粒的等离子激元共振, 即 LSPR 消光截面的表述式:

$$\sigma_{\text{ext}} = \frac{18\pi\epsilon_d^{3/2}V}{\lambda} \frac{\epsilon_2(\lambda)}{(\epsilon_1(\lambda) + 2\epsilon_d)^2 + \epsilon_2(\lambda)^2}, \quad (51)$$

其中 V 是金属颗粒的体积. 类似地也可以得到下面的散射截面表述式:

$$\sigma_{\text{sca}} = \frac{32\pi^4\epsilon_d^2V^2}{\lambda^4} \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_d)^2 + \epsilon_2^2}{(\epsilon_1 + 2\epsilon_d)^2 + \epsilon_2^2}. \quad (52)$$

尽管严格地讲, 上述的近似只是应用于非常小的金属颗粒(直径 < 10 nm), 但是对于一些较大的颗粒其介电灵敏性的结果还是相当精确的^[57].

当在(51)式中的分母取最小值时, 亦即 $\epsilon_1 = -2\epsilon_d$, 则消光截面变得最大. 这指出了纳米级金属球对入射平面电磁波的 LSPR 吸收峰与围绕它的电介质的介电常数的关系. 当然(51)式也指出了, 此 LSPR 还与金属球的尺寸及组成它的材质的光学参数有关. 一般说来, 金和银由于其 LSPR 位于可见光波段, 所以常被光学测量所应用. 虽然银由于具有较小的介电常数虚部, 而使其共振具有较小的损耗, 但是金的化学稳定性及其与大多数化学、生物样品的可适性, 金纳米颗粒还是经常被用于 LSPR 的实验应用中.

尽管 Mie 散射理论并不限制散射颗粒的尺寸, 却严格限于颗粒的形状必须是圆球状的. 仍然在颗粒尺度远小于入射光波长的小颗粒近似下, 对于球状和椭球状金属颗粒的消光截面可用下述的近似公式来计算^[58]:

$$\sigma_{\text{ext}} \sim \frac{18\pi\epsilon_d^{3/2}V}{\lambda \ln(10)} \left[\frac{\epsilon_2(\lambda)}{(\epsilon_1(\lambda) + \chi\epsilon_d)^2 + \epsilon_2(\lambda)^2} \right], \quad (53)$$

其中参数 $\chi = 2$ 时对应于圆球状颗粒. 可以使 χ 值高达 20 以处理具有更高的长扁度比的椭球颗粒^[59]. 但是如果颗粒的形状不是圆球或椭球, 那么就没有类似的解析解可以得到, 必须借助于下面提到的数值模拟方法来处理.

3.2 金属颗粒纳米点阵的 LSPR

同样地, Mie 散射理论主要是以处理单个圆球状颗粒对平面电磁波的散射为研究基础而展开的。在处理与大量堆积的颗粒的散射问题时, 是要求这些无序分布的颗粒之间的距离要远大于光的波长, 亦即研究区域中每一点的最终光场状况是由每个散射颗粒作为独立的子源而直接加成的。实际上, 在对可能应用于实际器件的纳米金属(点)阵列对入射平面电磁波响应的研究中, 除了单个金属纳米颗粒的 LSPR 频率及近场增强状况可以由颗粒的材质、尺寸、形状及周围电介质的光学参数而确定外(见图 12), 由于在这些金属颗粒的纳米阵列中, 这些有序或无序排列的纳米金属颗粒之间的距离也是远小于光的波长, 从而使得整个纳米金属颗粒阵列对入射平面电磁波的响应是这些单个颗粒产生的响应的相干迭加(见图 13)。

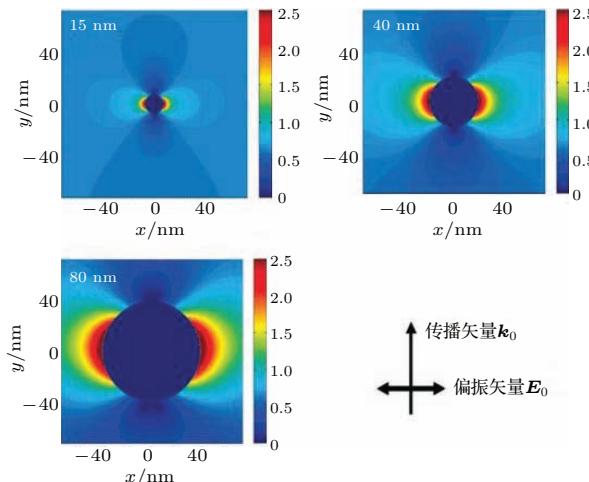


图 12 具有不同芯径 (15, 40 和 80 nm) 的银颗粒表面附近的光电场分布

Fig. 12. Optical electric field distribution near the surfaces of silver particles with 15, 40 and 80 nm diameters, respectively.

这样, 不仅取决于单个纳米金属颗粒的材质、尺寸、形状及周围电介质的光学参数, 而且同时也强烈地取决于这些颗粒之间的分布状况, 使得纳米金属颗粒阵列对入射平面电磁波的响应呈现出五彩缤纷的许多花样。不仅仅是 LSPR 的共振频率, 而且光电场在颗粒之间的增强分布等都增加了许多可能, 从而为近代纳米光子学的研究和应用提供了广阔的舞台。图 14 所示为 LSPR 在金属纳米颗粒阵列中的耦合及传递。

在理论上, 可以用最简单的偶极子模型来处理纳米金属颗粒之间的电磁耦合, 也可以用更高级的极矩近似来改进最终的结果。实际上, 已经有许多工作处理纳米金属颗粒阵列与电磁场的相互作用 [60–67]。但是, 对于以上所述的金属颗粒及其纳米阵列等复杂情形, 最终结果的解析求解当然是不可能的, 在强有力的模拟软件支持下的数值模拟则是必须的。已经有很多数值模拟方法, 包括分离偶极近似(discrete dipole approximation)、时域有限差分(finite difference time domain, FDTD) 及有限元法(finite element method) 等被开发出来以用于此领域的数值模拟 [68–73]。图 15 为采用数值模拟方法计算的在两个金属纳米颗粒间隙中所激发的 LSPR 所产生的强烈的电场增强。

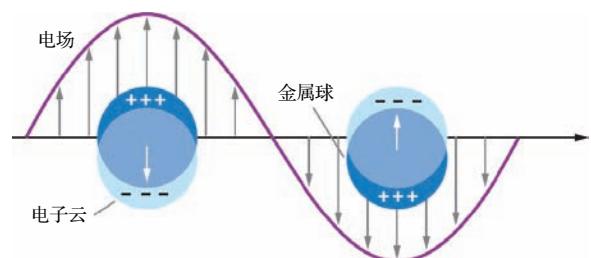


图 13 两个纳米金属颗粒间距离远小于电磁场的衰减长度时的模式干涉

Fig. 13. The mode interference between two nano-metallic particles separated by a distance far less than the attenuation length of electromagnetic field.

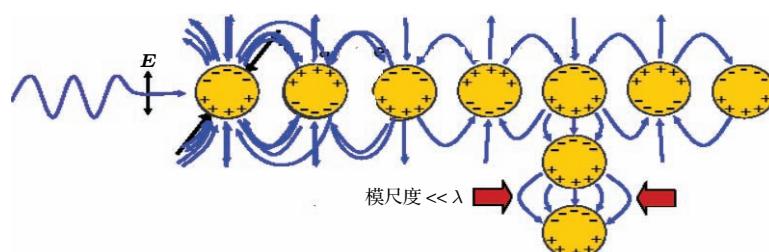


图 14 金属纳米颗粒之间的 LSPR 相互耦合及传递

Fig. 14. LSPR coupling and propagation between nano-metallic particles.

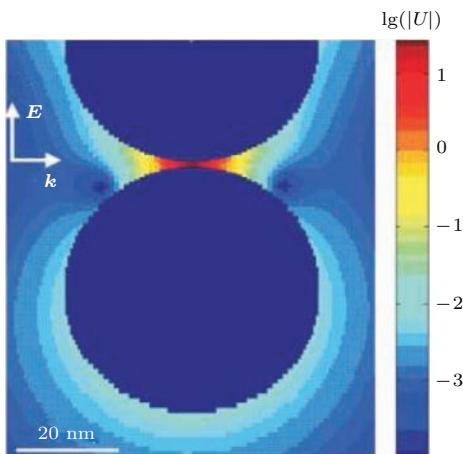


图 15 在两个金属颗粒之间的强烈的电磁场增强

Fig. 15. The strong enhancement of electromagnetic field between two metallic particles.

在所有的数值模拟软件中,都是设定各种近似模型及边界条件,用Maxwell方程去求解入射平面电磁波对金属纳米阵列的响应。所以,即使样品的尺度已经小到光波长的百分之几的程度,Maxwell方程仍然可以成功地用于平面电磁波与用宏观光学参量描述的物质微小颗粒(或其点阵)的相互作用。

从本节所述可知,尽管在光滑平面上所激发及传播的表面等离子激元共振(SPR)与在纳米金属颗粒上所激励的LSPR有着相同的物理本质,但是它们极端不同的边界条件却造成了全然不同的结果。首先是,SPR和LSPR的共振频率完全不同,按(7)式,前者是 $\text{Re}\{\varepsilon_m\} = -\varepsilon_d$,而且只取决于金属和电介质的介电常数;而按(51)式,后者却是 $\text{Re}\{\varepsilon_m\} = -2\varepsilon_d$,且不但取决于金属和电介质的介电常数,还取决于金属颗粒的大小、形状及它们在空间的点阵分布。这就给出了调制等离子激元共振频率的更多的自由选择性。再者,电场增强的分布,前者只是均匀地分布在界面上,而后者却按样品结构的各种不同条件,尤其是金属纳米颗粒的形状及分布状态,而可能更强烈地集中于颗粒的某些特定位置。这就为许多应用提供了非常优越的条件。最后,虽然LSPR局限于金属纳米颗粒近域而不能传播,但是由于点阵中颗粒之间的距离远小于光波的波长和局域增强电场的衰减长度,所以每个颗粒的LSPR可以耦合起来,并传播出去。这样,就可以对它们在明显衰减消失之前进行点点调制后,再耦合出去。这就为以LSPR为基础的光学调制器件开辟了崭新的可能性。

4 纳米等离子激元学在近代光子学中的主要突破领域举例

4.1 光学超透射(extraordinary optical transmission)

在早期的光学显微镜成像研究中Abbe^[74]于1873年就提出了所谓的“Abbe衍射极限”的概念。即一束波长为 λ 在折射率为 n 的介质中传播的光,它可以以角分辨率 θ 观察一个点的半径是 $d = \lambda/(2n \sin \theta)$ (其中 $n \sin \theta$ 称之为显微镜的数值孔径)。这样对于可见光来说,分辨率 $d \approx \lambda/2$ 。Bethe^[75]据此研究了半径为 r 的小孔对波长为 λ 的入射平面电磁波的衍射问题,得到其透射效率 $\eta_B = 64(kr)^4/(27\pi^2)$, $k = 2\pi/\lambda$,即透射强度 $T \propto (r/\lambda)^4$ 。显然,当 $r \ll \lambda$ 时,由于衍射的干扰,透射强度是非常小的。但是在1998年,Ebbesen等^[76]却用在金属(银)薄膜上刻蚀制作的纳米小孔阵列,探测到了相当高的透射强度。尽管每个小孔的半径及相邻小孔之间的间距(阵列常数)都远小于入射光波的波长,相比于常规的衍射损耗,按上述的Bethe的结果,透射强度应该是非常小的,但是,在归一化到光斑所覆盖的所有小孔的面积时,记录到几乎是1的透射强度。Ebbesen等的实验结果如图16所示,右上角的插图是样品的结构,其中小孔直径 $d = 150$ nm,小孔中心间距 $a_0 = 900$ nm,而银膜的厚度是200 nm。

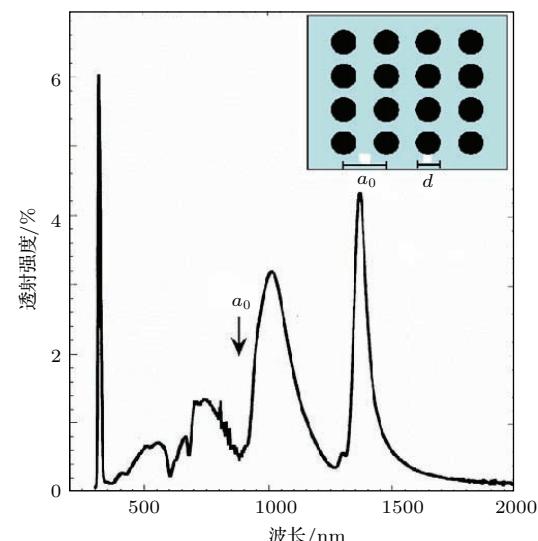
图 16 银膜纳米小孔阵列的透射强度与入射光波长的关系
(改编自文献[76])

Fig. 16. The relationship between the transmission intensity from a lattice of silver nano-holes and the wavelength of the incident beam. Adapted from Ref. [76].

随后,对于金属表面上的单个纳米级小孔的透射-衍射问题也进行了较为系统的研究^[77]. 对于图17所示的样品结构,当有纳米级尺度的同心圆沟槽刻蚀在中央小孔周围时其透过率要至少大于入射光只是直接照射在光滑平面上的单个小孔时的透过率的三倍.

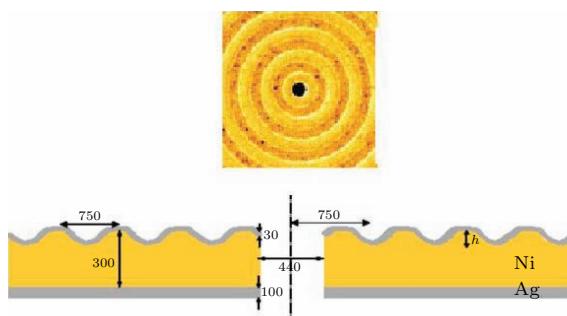


图17 纳米级同心圆刻蚀金属表面上中央小孔的样品结构(单位为nm,改编自文献[77])

Fig. 17. Sample geometry with a central small hole on an etched metallic surface with concentric circular pattern. Adopted from Ref. [77].

实际上,有关单个纳米级亚波长小孔的透射-衍射问题可以简略阐述为图18. 图18(a)是平滑金属表面上只有单个纳米级小孔,按Bethe的衍射限制,只有非常小的光透射强度,且透过去的光波是均匀衍射开来的. 图18(b)是在入射面一边有纳米级花样刻蚀围绕在小孔的周围,由于SPR

及相互作用,使得透过率明显增加,但透射一边的光波仍然是均匀衍射开来的. 图18(c)则是在透射面一边有纳米级花样刻蚀围绕在小孔的周围,使得透射波几乎无衍射的单向传播向前. 这也被称为亚波长无衍射(sub-wavelength diffraction-free)现象,它对于许多近场清晰成像器件的研制和应用起着关键的作用.

当然,这里要提到的是,所谓的“超透射”是指相对于入射光斑与其所覆盖的小孔的面积相比或由小孔的直径和入射光波长之比而按Bethe公式所计算的单个小孔的透射率相比,都有相当大的甚至是几个数量级的放大. 当然,从能量守恒出发,不可能有绝对数值超过1的透射强度. 自从Ebbesen等^[76]的开创性工作以来,已经有大量的理论及实验工作围绕这个课题展开,包括讨论在各种样品结构中可能存在的SPR和LSPR及在某些腔体结构中所可能存在的导波模式等及其相互作用等^[78-83]. 这些工作为力求更深入全面地理解这种光学超透射详细的物理机理做出了相应的诠释,金属纳米样品结构中的等离子激元振荡起着本质作用是所有工作的共识点. 在理论分析及实验研究继续深入进行的同时,光学超透射的应用开拓也在蓬勃开展中,尤其是在生物及化学等领域中有关灵敏传感技术等方面^[84-89].

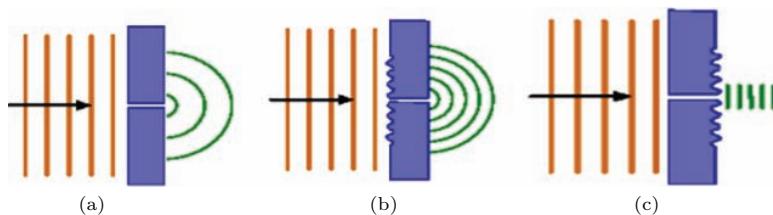


图18 三种单个纳米小孔的透射-衍射现象

Fig. 18. Three cases of transmission-diffraction from a single nano-hole.

4.2 负折射率

1968年,Veselago^[90]在并不违背基本物理框架的前提下,提出了如果一个材料同时具有负的介电常数 ϵ 和负的磁导率 μ ,则有可能形成具有真正的负折射率光学客体的观点. 这可以由图19及(54)–(56)式看出(根据能量守恒物质的介电常数及磁导率的虚部必须都是正实数).

$$\begin{aligned} \epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2, \quad 0 < \epsilon_2 \ll |\epsilon_1|; \quad \mu = \mu_1 + i\mu_2, \\ 0 < \mu_2 \ll |\mu_1|; \quad n = \pm\sqrt{\epsilon\mu}; \end{aligned} \quad (54)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_1 > 0, \mu_1 > 0; \\ n = \sqrt{(\epsilon_1\mu_1 - \epsilon_2\mu_2) + i(\epsilon_1\mu_2 + \epsilon_2\mu_1)} \\ = n_1 + in_2; \quad n_1 > 0, n_2 > 0; \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_1 < 0, \mu_1 < 0; \\ n = -\sqrt{(\epsilon_1\mu_1 - \epsilon_2\mu_2) - i(|\epsilon_1|\mu_2 + \epsilon_2|\mu_1|)} \\ = -n_1 + in_2; \quad n_1 > 0, \quad n_2 > 0. \end{aligned} \quad (56)$$

对于一般在自然界中存在的电介质来说,其介电常数 ϵ 和磁导率 μ 都是正实数. 等离子体及金属介质等由于有自由电子气,所以在一定的光频率范

围内可以具有实部为负值的复介电常数。但是，自然界中并不存在具有实部为负值的磁导率的物质，如图 20 所示。

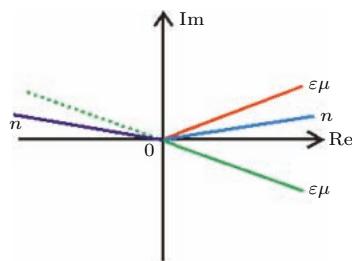


图 19 折射率 n 与介电常数 ϵ 及磁导率 μ 同为正号或负号的关系

Fig. 19. The relationship between refractive index n and permittivity ϵ and permeability μ with same sign (positive or negative) simultaneously.

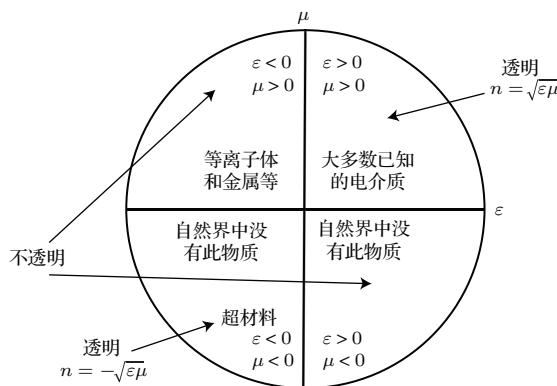


图 20 各种物质的介电常数和磁导率

Fig. 20. The permittivity and permeability of different medium.

所以在自然界中并不存在光学折射率是负值的物质。但是，如果由相当多的尺度远小于电磁波波长的、且具有相应不同光电性质的介质颗粒或结构组成的一种复合体，则在入射电磁波“看来”其响应与一块具有某种“均匀”光电性质的介质是等同的。这样，就有可能想办法构建一个对于某个光频范围具有特定光电性质（如同时具有负的介电常数与负的磁导率，从而给出负的光学折射率等）的“人造结构”，这就是所谓的超材料（metamaterials）的概念。

Pendry 等^[91]首先提出了由非磁导体组成的分裂环共振器（split ring resonator, SRR）的概念，如图 21 所示。这是由两个大小不同的带有裂口的同心的非磁导体圆环所组成。Pendry 由理论研究指出了可以用此 SRR 在较宽的范围内调制其有效磁导率 μ_{eff} ，甚至使其具有负值。随后，文献[92—95]又从理论分析及实验探索等各方面尝试用 SRR 单元和金属线结合组成超材料阵列，并

最终在实验上实现了在微波频段的负折射率效应，亦即超材料对该微波频段的电磁辐射同时具有负的介电常数和负的磁导率^[95]。

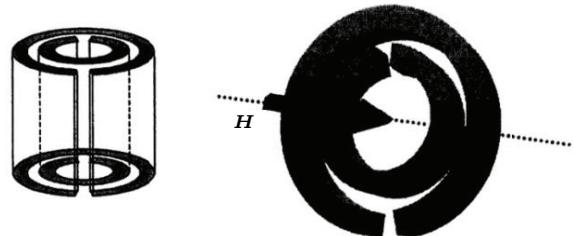


图 21 SRR 的简图^[91]

Fig. 21. The scheme of a SRR^[91].

如上所述，超材料是要求组成它的单元及其间距要远小于电磁波的工作波长。这对于工作于频率范畴为 GHz 的微波而言，由于电磁波的波长是在厘米范围内，所以这些单元及其间距是可以在毫米量级的，这还是比较容易实现的。但是，对于波长为几百个纳米的可见光来说，单元及其间距对几十个纳米尺度的要求，确是对这些单元的材料、制作工艺等都是一个挑战。甚至是否还能够采用 SRR 型式的单元结构，也需要重新考虑设计^[96]。随着材料科学及纳米制作工艺的不断发展，可以产生负折射率（即在相同的电磁波波长处，同时具有负的介电常数和负的磁导率）的超材料的工作波长逐步地从微波（GHz）^[91]、太赫兹（THz）等^[97] 电磁波段，发展到红外^[98—101] 及最近到可见光波段^[102—109]。

对于负折射率介质而言，正如 Veselago^[90] 所预言的，如果这种左手介质（left-hand medium）存在的话，其许多光学响应和行为都不同于一般在自然界存在的右手介质（right-hand materials），见图 22 所示。显然，在左手介质中 Poynting 矢量和相速度具有相反的方向，使得 Doppler 移动和 Cherenkov 辐射都产生了反转。

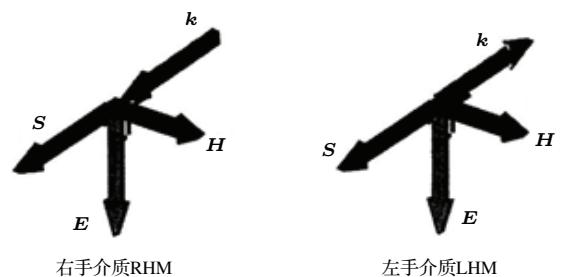


图 22 右手介质和左手介质的电场、磁场、波矢及 Poynting 矢量之间的关系

Fig. 22. The relationship between electric field, magnetic field, wave vector and Poynting vector of left-hand and right-hand medium.

在光频范围内负折射率介质的实现, 颠覆了许多常规的光学规律, 因而具有许多新奇的应用。尤其是在突破衍射极限的、具有极高光学分辨率的超透镜(super lens)方面的开拓工作中^[110], 如图23所示。

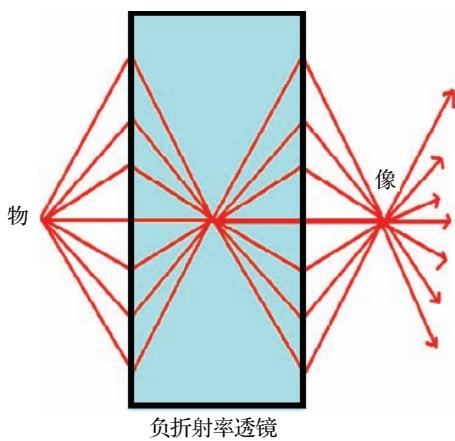


图23 具有负折射率的平板型超透镜

Fig. 23. The scheme of a planner super lens with negative refractive index.

4.3 变换光学——折射率工程和光学斗篷

2006年, Pendry等^[111]和Leonhardt^[112]同时在《科学》上撰文指出, 可以利用坐标空间变换的方法设计空间的光学参数分布特性, 使电磁波或光线沿着满足变换条件所确定的路径传播, 如图24所示。这种方法被称为变换光学(transformation optics), 并很快被推广用于设计具有各种光学性质的人工(超材料)材料或器件, 即所谓的折射率工程(index engineering)。

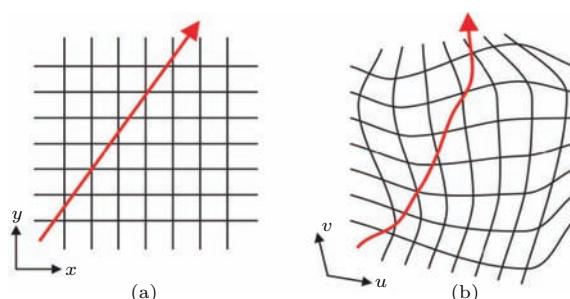


图24 变换光学中利用空间坐标变换描述光线路径变化示意图

Fig. 24. The scheme of varying beam path described by alternating space frame in transformation optics.

从原则上讲, 人工超材料可以在一定的范围内提供几乎任意数值的光学参数。这样, 按照我们所需要的(光)电磁场在空间的传播路径或分布, 可由

变换光学的方法反推出所需要的光学参数在空间的分布。如果我们有合适的材料和工艺手段在空间各处按需要制备出具有相应的光学参数的超材料, 那么当光电磁场辐射到我们所“制作”的空间时, 我们所需要的该光电磁场在空间的分布将会被复制出来。这样, 光学超材料的概念, 材料及制作工艺加上变换光学的支持, 将会使我们有能力在原则上控制光电磁场在空间的任意传输及分布。这将为古老的光学开辟出无限多的令人向往的崭新领域。其中最让人感兴趣的一个领域就是光学斗篷(optical cloak), 如图25所示。

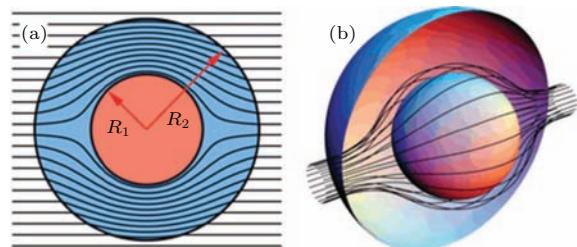


图25 二维(a)和三维(b)光学斗篷的原理示意图

Fig. 25. The scheme of the optical cloak with (a) two and (b) three dimensions.

当然, 在传输光学设计及计算支持下, 去得到一个所需要的超材料的空间分布是一回事, 具体实现一个在现实空间的光学隐身斗篷则是另一个并非容易应对的挑战。一般说来, 在光线路越是剧烈变化的区域, 越是要求此地的光学参数取极端值, 甚至是变化强烈的各向异性, 尤其是对于三维的光学斗篷来说。此时, 往往三维变换光学的坐标变换被用于去校正(各向异性)介电张量和磁导率张量的分布。

自Pendry等^[111]和Leonhardt^[112]由不尽相同的数学方法所奠定的变换光学的原理及超材料的制作提出了光学斗篷的概念后, Schurig等^[113]首先在微波领域实现了实验上的突破。发展到最近, 已经在微波波段范畴内制作出了压制散射的只有微米级厚度的隐身斗篷^[114]。如前所述, 由于超材料的空间尺度的问题, 直到最近才在光谱的近红外及可见光波段实现了光学隐身斗篷的实验验证工作, 并使三维器件具有较大的光谱响应带宽和较大的适用角度^[115–118]。

4.4 表面增强拉曼散射(surface enhanced Raman scattering, SERS)

如图26所示, 光电磁波可以在金属纳米颗粒

上激发出LSPR, 从而使得在颗粒表面某处产生局部的电场增强。如果金属纳米颗粒组成阵列, 那么在适当的点阵排布下, 颗粒之间的间隙会出现更强的电场增强, 形成所谓的“热点”。在这些“热点”处, 就会对某些强烈依赖于电场的效应产生极大的增强, 如拉曼散射等。SERS实际上就是把要探测的分子吸附在粗糙的金属表面或纳米尺度刻蚀的金属结构上, 利用这些金属纳米结构的LSPR及其耦合所产生的局域强烈电场增强去激励并大幅度放大本来十分微弱的正常拉曼散射信号。

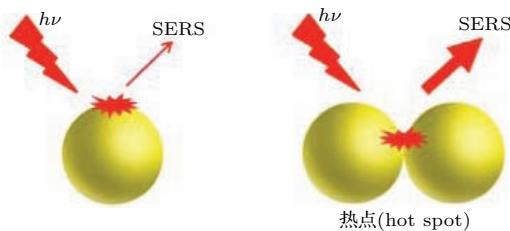


图 26 金属纳米颗粒及其点阵由 LSPR 所产生的局部电场增强

Fig. 26. The local electric field enhancement created by LSPR from a metallic nano-particle or its lattice.

拉曼散射的基本物理机理如图 27 所示。如果激光光频率和纳米颗粒的金属材质选择得当(如金、银等对于可见光波段), 而拉曼散射的光谱位移又比较小(使激光光和拉曼散射光皆位于金属纳米颗粒的LSPR频率附近), 那么最终的拉曼散射光强度将会受到入射激光及拉曼散射光的两次表面增强的迭加, 从而与入射光强的四次方成正比, 即 $\propto E^4$ [119]。这样SERS相对于无表面增强的普通拉曼散射的信号将会有最大可达 10^{14} — 10^{15} 的放大, 进而大幅度地拓展了SERS在化学、生物等领域中微弱信号探测的应用, 使其进入了可以达到“单分子”检测的水平[120—122]。

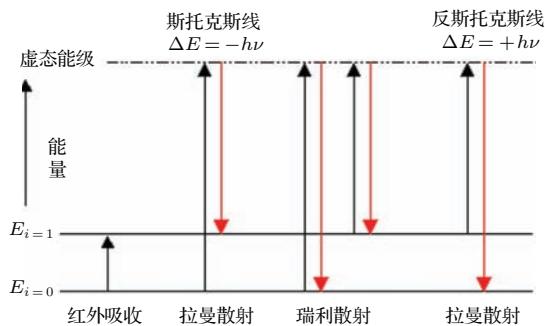


图 27 拉曼散射的基本机理

Fig. 27. The fundamental mechanism of Raman scattering.

用银纳米棒所制备的SERS基板可以用于检测低丰度生物分子的存在, 因此也能用于探测体液中的蛋白质[123—125]。分析纳米尺度混合物中组分的能力, 使得SERS基板可以被应用于环境分析、药物制备、材料科学、法医学、药品检测、食品质量分析等方面[126]。

4.5 广义光束传播及控制

4.5.1 相位不连续的光反射及折射——普适反射和折射定律[127]

如果一束光(平面波)照射到两个折射率各为 n_i 和 n_t 的电介质的界面上, 那么它们的反射及折射将会遵从熟知的Snell定律。但这只是对此界面不会对在其上面传播的平面电磁波产生附加的相位突变的情况才是正确的。如果一个平面电磁波沿此界面传播 dx 的距离后又得到附加的相位突变 $d\phi$ (图 28), 显然存在如(57)式所示的相位匹配关系, 并从中得到如(58)式所示的普适的Snell反射/折射定律,

$$[k_0 n_i \sin(\theta_i) dx + (\phi + d\phi)] - [k_0 n_t \sin(\theta_t) dx + \phi] = 0, \quad (57)$$

$$n_t \sin(\theta_t) - n_i \sin(\theta_i) = \frac{\lambda_0}{2\pi} \frac{d\phi}{dx}, \quad (58)$$

式中 $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ 。显然, 如果 $d\phi = 0$, 则(58)式即回归到一般熟知的Snell定律。

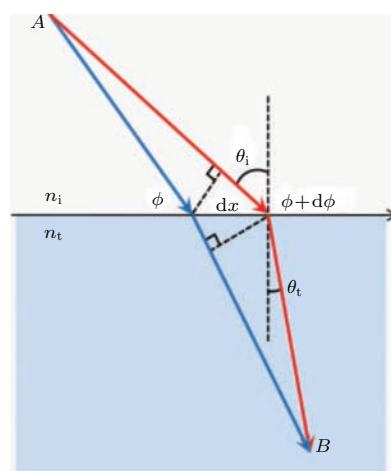


图 28 带有相位突变界面的平面电磁波反射及折射的光程示意图(改编自文献[127])

Fig. 28. The optical distance from the reflection and refraction of planar electromagnetic wave propagating along a boundary with phase disruption. Adapted from Ref. [127].

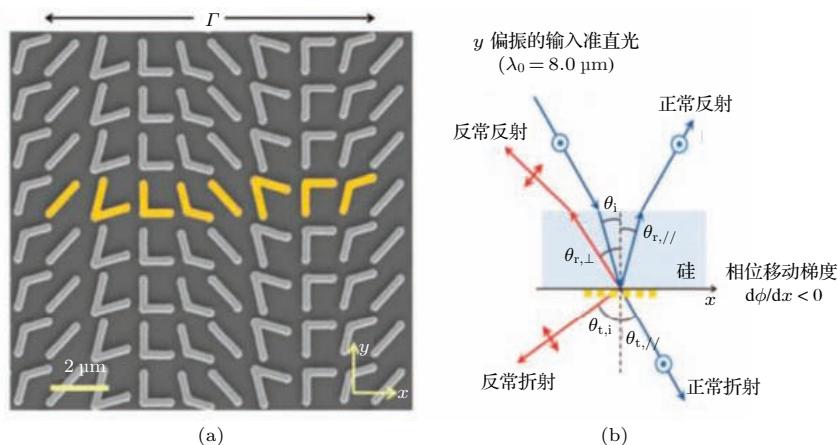


图 29 (a) 样品表面的扫描电镜照片; (b) 在 y 偏振光 (电场垂直于入射面) 激励下的实验安排简图 (改编自文献 [127])

Fig. 29. (a) Scanning electron microscope photo of the sample surface; (b) the experimental set-up for a y -polarization exciting beam (electric field is normal to the incident plane). Adapted from Ref. [127].

当然, 两个介质的界面是人工制作的以引进在光程中的相位突变. ϕ 和 $\phi + d\phi$ 是穿过界面的两束光(蓝的和红的)路径的相位移动. 图 29(a) 是在硅片上制作了金的微纳花样结构的实验样品的电镜照片, 而图 29(b) 则是实验结果的简图. 通过改变金的微纳花样构成(从而变化了相位突变 $d\phi$), 则可以得到各种不同情况的反常反射及折射.

4.5.2 通过纳米尺度吸收片的弱光-弱光相互控制 [128]

按照 Huygens 原理, 两束光在空间相遇后, 将不会有任何相互影响仍按各自原来的性质及方向传播. 因此用一束光来控制另一束光是不可能的. 这一限制只有在强激光及非线性介质出现以后, 才被打破. 强激光可以改变它所通过的非线性电介质的介电性质, 因此使得此时通过此介质的另一束光受到调制. 即所谓的强光-强光相互控制和强光控制(调制)弱光, 但前提条件是必需有强激光和非线性光学材料同时存在. 最近, Zhang 等 [128] 提出了一个不借用强激光及非线性介质来实现弱光-弱光相互控制的方法. 该方法的原理如图 30 所示.

众所周知, 当两束具有相同频率和强度的平面波对向传播相遇时, 彼此相干在其相遇空间形成驻波. 当一片厚度远小于平面波波长的超薄高吸收薄膜插入此驻波的波节处时, 由于空间此处的光电场强度为零, 所以没有任何吸收现象发生, 两束光将不受任何影响的各自向前传输, 如图 30(a) 所示. 但是, 若将此薄膜插入驻波的波腹处时, 则会对此处的光电场产生几乎全吸收, 造成每一束光都被完全吸收而止于此的现象, 如图 30(b) 所示. 这样, 只

需调整其中一束光的相位或强度, 就会控制另一束光在空间的传输状态. 这就实现了不用强光和非线性光学介质的弱光-弱光相互控制.

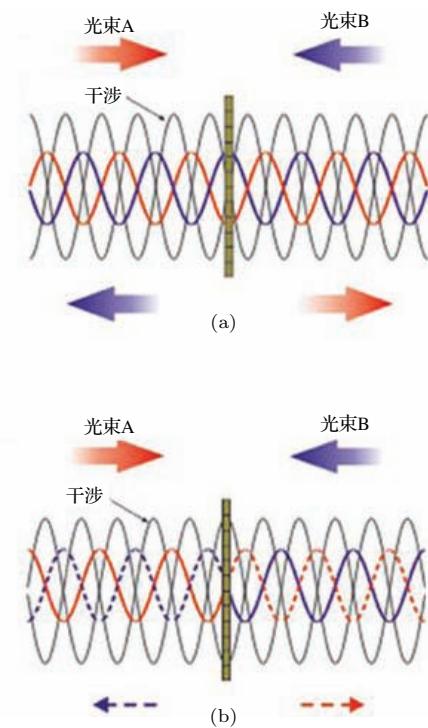


图 30 弱光-弱光相互控制的原理示意图 (改编自文献 [128])

Fig. 30. Scheme of the effects of weak beams controlling each other. Adapted from Ref. [128].

要最佳化调制效率, 此薄膜应该能够吸收通过它的每一个单光束的一半能量. 这样, 当信号 A 被变化光束 B 的相位所调制时, 100% 的光-光调制可以实现; 而当由变化光束 B 的强度所调制时, 则可实现对信号 A 的 50% 的调制效果. 所以, 要实现完全的弱光-弱光调制效果, 对每一束通过它的光束

具有50%的能量吸收能力的超薄薄膜是关键所在。按照光与介质相互作用的基础原理,对于一个无限薄的介质薄膜,最多只能吸收投射到它上面的光束的一半能量^[129,130](这正好满足上述对完全调制的需要)。但是,对于一个具有平滑界面的金属薄膜来说,50%的吸收水平是很难实现的。在大多数的光学频段,输入光能量将会被反射回去或传输过去。然而,最近的研究证实,在光谱的光学波段,超薄的具有纳米刻蚀结构的金属薄膜确可以达到对所涉及波长的大约50%吸收的目标。这种亚波长尺度周期结构的超薄金属膜被称作“平面等离子激元超材料”(planar plasmonic metamaterials, PPM)。图31所示为文献[128]所制作的PPM样品。它是由厚度为50 nm的金膜制成,工作在He-Ne激光波长(632.8 nm),其厚度只是波长的1/13,显然满足上述的需要,从而实现了许多弱光-弱光控制的实验研究。

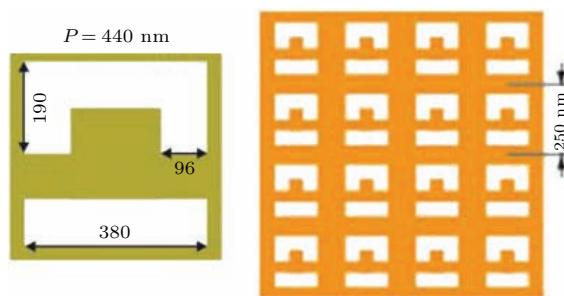


图31 一种用于弱光-弱光控制的PPM薄膜样品(改编自文献[128])

Fig. 31. One of the PPM thin film sample for weak beams controlling each other. Adapted from Ref. [128].

这种材料和技术可能被用于传感器、可变衰减器、特别的光相干滤波片以及太赫兹波段的脉冲回复器等技术领域中。

4.6 表面等离子激元的受激辐射放大 (surface plasmon amplification by stimulated emission of radiation, Spaser)

Spaser是光的受激辐射放大(laser-light amplification by stimulated emission of radiation)在纳米等离子激元领域的对应物。与一般的激光器相对比,在Spaser中等离子激元放大取代了激光器中的光放大,而其金属纳米颗粒则起着激光器中的谐振腔的作用(纳米量级的谐振腔!而在激光器中谐振腔至少要不短于半个光波长,甚至更长)。但是

与激光器类似的是,在Spaser中的放大机理的能量来源仍然是由外部激励的活性(放大)介质。当然,激励(光)场的频率可以完全不同与Spaser的运转频率。Bergman和Stockman^[131]首先在2003年描述了存在并运转Spaser的可能性。而具有如此功能的器件则于2009年被首次宣布研制出来^[132]。其基本工作原理如图32所示。

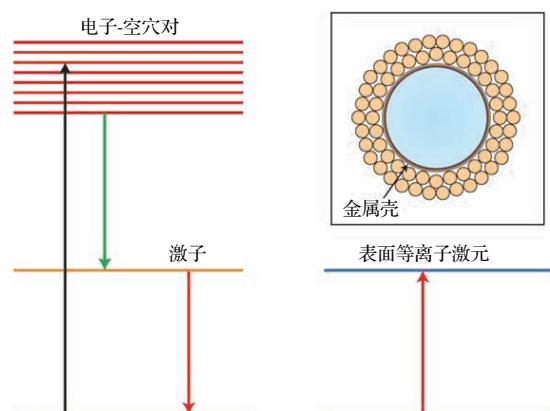


图32 表面等离子激元受激辐射放大的工作原理简图(改编自文献[132])

Fig. 32. The schematic diagram of Spaser. Adapted from Ref. [132].

在Spaser的环境中,作为活性介质的染料分子被外界激励到高能态后首先经过无辐射跃迁到激子(exciton)态。在随后的两条能量转移路径中,经无辐射能量转移而激发LSPR的概率要大于经辐射衰减发射光子的概率几个数量级。LSPR模的本地场增强又激励增益介质到激子态,从而形成正反馈机理而最终实现等离子激元的受激辐射放大,如图33所示^[131]。

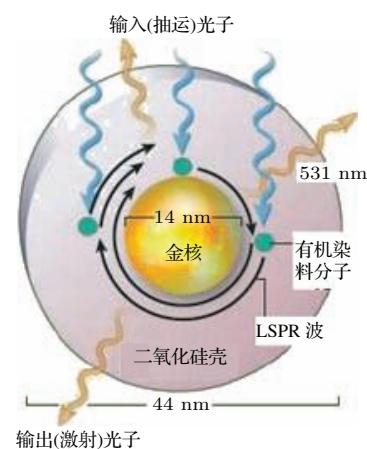


图33 Spaser的正反馈机理示意图(改编自文献[131])

Fig. 33. The scheme of the positive feedback of Spaser. Adapted from Ref. [131].

Spaser之所以能和激光器类似产生LSPR的受激辐射放大是因为它们的物理本性是相近的。首先，LSPR像光子一样，都是具有自旋的玻色子(Bosons)。第二，LSPR也是电中性的。第三，LSPR彼此之间只有非常微弱的相互作用。因此，LSPR可以被受激发射，以大量个体聚集在一个模中，这就是激光器和Spaser的物理本质相通所在^[133]。

图34给出了一个由Spaser最终实现输出光放大的例子。从图34可以看出，随着外界激励功率的加大，输出的激光强度急剧增长，这实际上就是一个纳米激光器(nanolaser)^[134]。

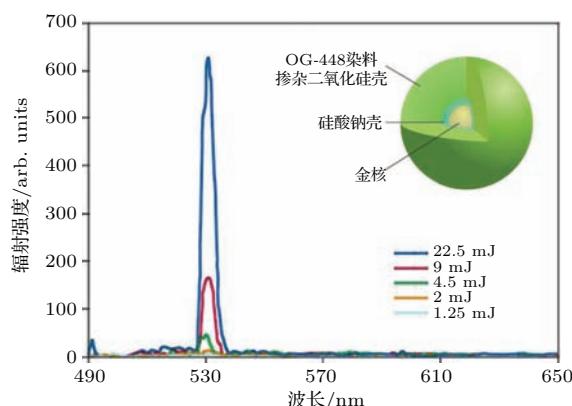


图34 由Spaser所产生的纳米激光(改编自文献[134])

Fig. 34. The nano-laser created by Spaser. Adapted from Ref. [134].

Spaser可以实际产生相干LSPR的能力，提供了用它来制备光子超材料的新机会以及发展新的纳米制作工艺的广阔前景。同时，也使得能够补偿LSPR传播损耗的主动纳米等离子激元学(active nanoplasmonics)技术成为可能^[135]。这使得Spaser已成为纳米等离子激元共振领域的一个蓬勃发展的新热点^[136]。

致力于将光能量集中于一个亚波长维度的区域(特别是在几十个纳米内)的现象及响应，纳米光子学现在正处于一个爆炸式增长的时期，几乎每天都不断有新的概念、发展及令人振奋的结果出现在各种文献中。本节所涉及的课题只是在其浩瀚展开的广阔领域中几个较为典型的例子，以说明近代纳米光子学，尤期是在纳米等离子激元学(nanoplasmonics)领域对传统光学的惊异突破而已。

同时，在这里还要进一步强调的是，近代纳米光子学中的纳米等离子激元学的崛起主要得益于以下三方面。

1) 物理概念的突破上。光学表面波实际上是作为电磁振荡的光量子(photon)和金属中自由电子气在光电场驱动下的机械振荡形成的量子(plasmon)所生成的复合场量子——SPP的电磁表现形式。这是两个量子之间的一种强扰动耦合，其行为自然是完全不同于只来自光子振荡的平面光电磁波，从而突破了对于平面电磁波在介质中传播的许多限制。

2) 近代纳米制备技术的迅猛发展——电子束刻蚀、聚焦离子束刻蚀及(胶体)化学刻蚀等奠定了样品制备的物质基础。

3) 电磁波与物质相互作用的模拟软件(FDTD, HFSS 及 COMSOL Multiphysics 等)的深入开发，为本领域研究的新方案设计及新器件研发等提供了强有力的工作。

另外，正如前面所述，LSPR的一个突出的优越之处在于，它的响应不仅仅只取决于组成纳米颗粒的金属介质和其周围环境介质的光学参数，而且还与金属颗粒的大小、形状及与其他颗粒组成的阵列的结构参数息息相关。这就提供了对其响应进行广泛调制的自由度，随之也就产生了对超材料的所有相关参数进行时空动态调制的迫切要求。显然，可调制的纳米等离子激元学(tunable nanoplasmonics)器件的无限潜力将会为本领域研究及应用的继续深入展现出更加色彩斑斓的绚丽前景。

5 可调制纳米等离子激元超材料 (tunable nanoplasmonic metamaterials)

正如前所述，纳米等离子激元学作为一个学科领域及实际应用的进一步发展，主要取决于它所赖以奠基的纳米超材料的两个重要方面。一是主动纳米超材料(active nano-metamaterials)，另一个是可调制纳米超材料(tunable nano-metamaterials)。前一个主要是解决在纳米等离子激元学器件中主要由金属介质部分所引起的传输损耗问题，目前仍然集中于用Spaser所产生的来自外界激励能量补偿来解决，如上节所简述。后一个，则主要是利用LSPR(阵列)的材料及结构参数对外界输入电磁场的响应非常敏感的优点，开发可动态调制的纳米超材料，进而极大地拓展相应器件的动态应用范围。

这两个领域已经迅速地发展成为当前纳米等离子激元学的两个重要研究前沿^[137]. 本节主要是简单地介绍一些将液晶材料应用于可调制纳米超材料研究前沿的一些进展.

尽管在早期的工作中, 有一些材料被用于由外部的电场或磁场来调制组成阵列的颗粒的间隙, 从而达到调制超材料结构参数的目的, 如某些半导体及铁磁材料等^[138,139]. 但是, 液晶材料还是比较好用及常用的调制材料, 这是由液晶材料本身的特点决定的. 因为对于光学调制来说, 不管是调制频率范围, 还是调制相位移动, 对于超材料本身都是要调制它的光程响应, 亦即折射率和传播距离的乘积. 由于液晶作为物质的第四态, 具有既是液体又是各向异性晶体的特点. 这使得液晶除了易于与其他相应介质构成纳米级超材料之外, 同时又极易在外界动态激励(电场、磁场及温度等)的影响下改变其折射率响应和空间形态. 因此使得液晶成为较为理想的调制材料^[140–144].

5.1 由热致向列相液晶(nematic liquid crystals)参与的调制

5.1.1 热致向列相液晶指向矢对外场的响应及其光学效应

热致向列相液晶在光学效应上相当于一个单轴各向异性晶体. 如图 35 所示, 其光轴 N 的方向就是该液晶的分子指向矢的平均指向, 所以, 液晶的正常折射率 n_o 垂直于其光轴, 而反常折射率 n_e 则与光轴平行. 这样, 随着入射光线的方向及其偏振取向的变化, 液晶可以给出介于 n_e 和 n_o 之间的不同的有效折射率 n'_e .

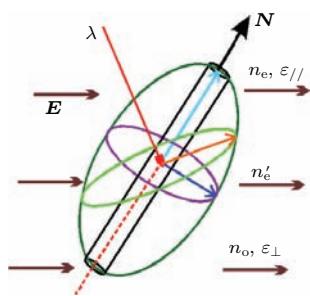


图 35 外电场和向列相液晶指向矢的示意图

Fig. 35. The external electric field and the director of nematic liquid crystals.

由于向列相液晶的光轴指向可以随着外加电场的变化在空间调制, 所以也就相当于给出了可调

制的有效折射率. 如果在液晶盒的输入及输出处皆配置适当的偏振片, 那么就可以由改变外加电场的大小来调制液晶取向矢的空间配置, 从而达到调制输出光强的目的, 如图 36 所示. 这就是液晶显示器的基本工作原理. 利用液晶对超材料进行空间折射率分布的调制也是基于这个原理.

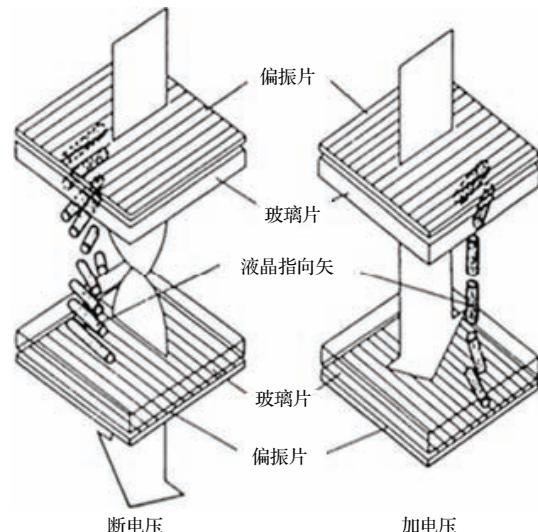


图 36 液晶指向矢偏转的电光效应

Fig. 36. Electro-optics effects of the deviation of liquid crystal directors.

5.1.2 由电驱动向列相液晶调制的纳米等离子激元器件

根据上述的调制原理, 或将向列相液晶掺入纳米结构的超材料中, 使其成为超材料的一部分, 或将液晶层置于纳米超材料的一侧, 形成超材料的环境的一部分. 利用纳米超材料的光学响应非常敏感于其中或其环境的折射率(分布)的变化的特点, 而向列相液晶的空间指向矢分布又非常敏感地随外界施加电压变化的优点, 组成了各种电驱动向列相液晶的可调制纳米等离子激元器件^[145–148]. 有些器件甚至利用了双频液晶, 即液晶的正常和反常折射率的相对大小随对其所施加的驱动电场的频率变化而翻转, 来制作具有更独特响应的调制器件^[149,150]. 有些综述工作已经较为详细地介绍了这方面的一些进展^[151,152].

作为一个例子, 在这简单地介绍一个亚波长超材料单元能够完全吸收入射电磁波能量的功能. 在相当宽的电磁波谱区域内, 都已经分别在实验上实现了这种功能^[153–155]. 由超材料实现这种功能的关键之处在于, 能够制造出具有特别的介电常数 $\epsilon(\omega)$ 和磁导率 $\mu(\omega)$ 的材料, 以使得超材料的

光学阻抗 $Z(\omega) = \sqrt{\mu(\omega)/\epsilon(\omega)}$ 与自由空间的相匹配, 从而生成零反射. 超材料的共振本性产生的很大的电场增强, 主要由介电损耗完全耗散了入射的能量^[156,157]. 尽管, 适当配置的超材料可以实现这种全吸收的功能, 但是由于其共振的本性, 效果往往局限于一个非常窄小的带宽之内, 所以发展宽带调制能力对于器件的实际应用来讲是非常必要的. 图 37 是一个等离子激元器件基本结构原理的示意图^[158], 它由电驱动液晶宽带可调制的超材料构成, 可以完全吸收入射光场的能量.

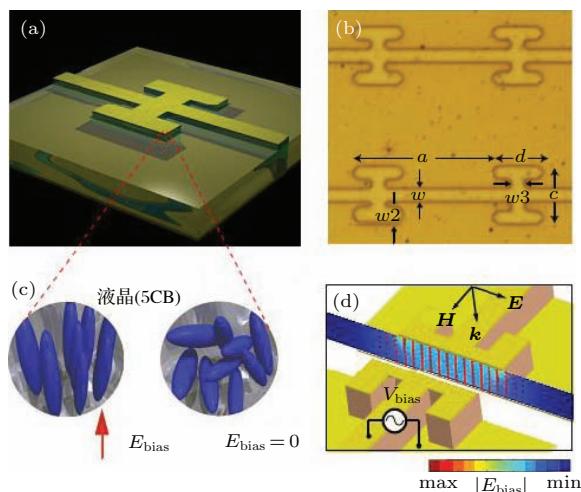


图 37 电驱动液晶调制的宽带电磁波能量全吸收等离子激元器件原理示意图(改编自文献 [158])

Fig. 37. Scheme of a SPP device that fully absorbs wide-band electromagnetic wave energy and is modulated by electric driving liquid crystals. Adapted from Ref. [158].

如图 37(a)所示, 吸收器是由两部分金属元件所构成, 中间用电介质垫片所隔开. 上层金属元件是按计算设计要求刻制成相应的结构花样, 以增强对输入电磁波的耦合吸收, 其具体尺寸如图 37(b)所示: $a = 50 \mu\text{m}$, $c = 20 \mu\text{m}$, $d = 16 \mu\text{m}$, $w = w_2 = 4.5 \mu\text{m}$, $w_3 = 5 \mu\text{m}$, 下层则是平滑的金属基片. 我们知道, 一般天然的材质对电磁波的磁场部分的耦合作用是比较微弱的, 而刻制组装成各种结构花样的超材料就是人为地增强器件与这磁场部分的耦合作用. 变化金属层的结构花样或其周围的介电环境, 就能够调制有效的材料响应参数, 从而达到几乎在任何所需要的频段实现光学阻抗匹配及增强吸收的目的^[159].

为达到调制的目的, 液晶 5CB ($4'$ -n-pentyl-4-cyanobiphenyl) 被淀积在器件的顶部并让其完全充

分地浸入由电介质垫片所支撑隔开的上下金属层之间的空腔内. 5CB 在常温下是在其向列相, 即使在 THz 频段也有着较大的双折射. 因此, 在加于上下层金属介质之间的偏置电压的驱动下(如图 37(d)所示), 其指向矢按电场方向取向偏转(如图 37(c)所示), 从而调制了结构中金属腔中的介质环境, 也就调制了此全吸收器件的频率响应. 该器件在 2.62 THz 频率处实现了 30% 的吸收强度调制及 4% 的带宽调制^[158].

这种电控的等离子激元共振吸收器件可以在传感器、成像技术、能量收集及动态布景投射等科学及技术领域有很好的应用前景.

5.1.3 由光驱动向列相液晶调制的纳米等离子激元器件

光驱动向列相液晶调制的优点是可以无接触的遥控, 而且不需要在样品中添加透明电极等附件^[160]. 近来, 对贵金属圆环孔阵列(annular aperture arrays, AAAs)这种等离子激元共轴纳米结构的理论研究^[161,162]和实验工作^[163–166]相当多. 这是因为这种共轴纳米结构能够形成 Fabry-Perot 纳米腔来承载等离子激元导波模式, 从而造成了通过窄通带的超强的光透过, 这正是彩色滤光器的特征要求. 实验结果已经证实这种 AAA 结构比起具有相同的开口面积的简单的圆孔阵列有着高得多的峰值透过率^[167], 而且, 最近已用这种共轴的 AAA 结构, 通过控制孔径的大小^[168]或深度^[169]制成了各种彩色滤光器. 但是这仍然是一些被动器件, 一旦制成功后就不能动态地加以调制. 所以对于实用目的而言, 发展一种可以随时动态调制的以 AAA 结构为基础的彩色滤光片是非常需要的. 如前所述, 显然液晶材料应该是一种比较理想的调制材料.

最近, 实验上一种由光控制液晶实时调制的以共轴 AAA 纳米结构为基础的彩色滤光片被提出^[170]. 图 38 是这种纳米彩色滤光片的样品结构及用于光谱测量的实验装置工作原理简图. 等离子激元彩色滤光片是由金制成的 AAA 结构及覆于其上的光敏液晶所组成, 在紫外光的照射下光敏的液晶分子可以在反式(类棒状形)和顺式(弯曲形)分子形式之间可逆性的光异构化, 从而干扰了液晶分子的本地序状态——从向列相到各向同相, 影响了探测光的透过度, 使系统变成可光学动态调制的.

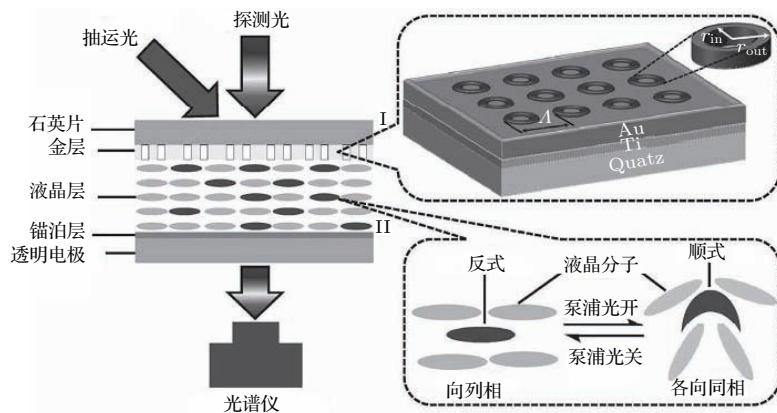


图 38 光驱动向列相液晶调制的纳米结构彩色滤光片原理简图 (改编自文献 [170])

Fig. 38. The scheme of nano-structured colour filter modulated by optical driving nematic liquid crystals. Adapted from Ref. [170].

图 39 则显示了所测量的在光敏液晶中的 BMAB(4-butyl-4-methoxyazobenzene) 反式及顺式异构体的吸收谱。从图 39 可以看出，其反式-异构体的吸收带在紫外的 350 nm 附近，而顺式-异构体的吸收峰则主要在可见的 450 nm 处。反式-异构体是热稳定的基态，能够由吸收紫外光转换到顺式-异构体。在可见光照射或热异构化下，顺式-异构体可以返回到反式-异构体的形式，这就使得彩色滤光片具有高度的翻转及可重复性。这样的光驱动的等离子激光彩色滤光片在袖珍显示系统和全光学信息处理方面具有非常广阔的应用前景。

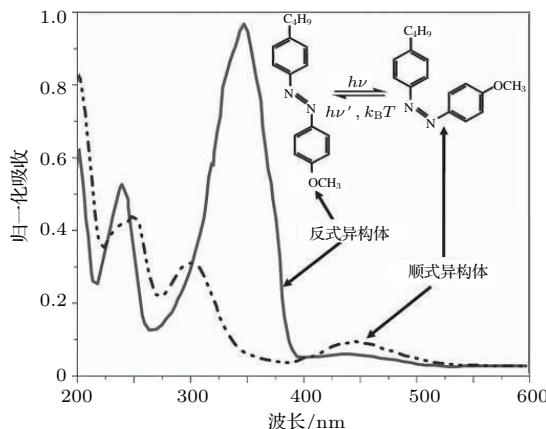


图 39 在紫外光照射下 BMAB 的反-顺异构化及其化学结构 (改编自文献 [170])

Fig. 39. Anti- and cis-isomerization and molecular structure of the BNAB under UV radiation. Adapted from Ref. [170].

5.1.4 由热致向列相液晶调制的微波器件

液晶在非常宽广的波谱区段内都有着相当的光学各向异性，这不仅在包括红外、可见及紫外等

光学频区，而且也扩展到远红外、太赫兹及微波等电磁波谱区段。所以在微波范围内液晶同样可以被用来调制相应的等离子激元器件。只不过由于微波的波长在厘米范畴内，所以其等效于可见光的纳米器件尺度，实际上将是在 100 μm 左右。

首先开发研究了一种用液晶调制的等离子激元微波频率选择器 [171]，其基本器件结构如图 40(a) 所示。器件是由厚度为 1 mm 的铝片堆积而成的，铝片之间的间隙为 75 μm，由有机薄膜垫片条在相邻铝片两端支撑。铝片之间相对应的两个表面被旋涂以聚亚酰胺 (polyimide) 并按图示摩擦方向摩擦，以使吸入间隙的液晶 (E7) 按此方向水平锚泊。电路安排是使得相邻铝片都同时被施以相同的可调制电压 (如图 40(a) 所示)，以使在所有间隙中的液晶指向矢都能在空间同步取向排列。

这种微波选频器的工作原理如图 40(b) 所示。由于被选频的微波的频率是在 50.0—75.0 GHz 之间，即波长是在 40—60 mm 之间，这实际上远远大于铝片之间狭缝的间隙 (75 μm) 和每个铝片的厚度 (1 mm)。所以上述器件对于被选频的微波来说，是标准的纳米等离子激元共振器件。垂直于铝片间隙内壁偏振的入射微波，在此间隙的两个铝-液晶界面上激发起等离子激元表面波。由于铝对于微波波段的电磁振荡的介电常数具有绝对值非常大的负实部，这两个在腔内传播的表面波在铝片内只有非常短的衰减长度，但在腔内液晶处有很慢的衰减，其相互迭加就形成了一个腔内的准平面波。此准平面波在腔内的来回传播相干，就形成了类 Fabry-Perot 效应，即取决于腔内微波偏振方向的液晶的折射率，只有某些特定频率的微波才能相干

相长地传播出去。而腔内液晶指向矢的空间分布(偏振方向的有效折射率)又受到外界施加电场的调制,这就使得微波的透过波长通过液晶受到外界

施加电场的调制而被选频。图41(a)是该种微波选频器的实验结果,即微波的透过率与其频率及所施加的外界电压的关系,选频效果是明显的。

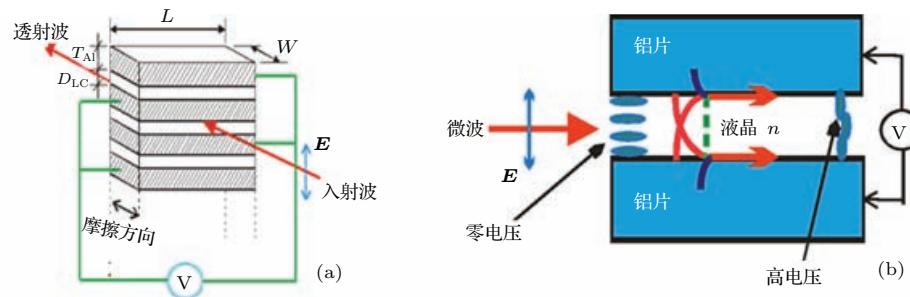


图40 液晶调制的微波频率选择器的(a)器件结构及(b)工作原理简图(图(a)改编自文献[171])
Fig. 40. Scheme of (a) the device structure and (b) working principle of microwave frequency selector modulated by liquid crystals. Panel (a) is adapted from Ref. [171].

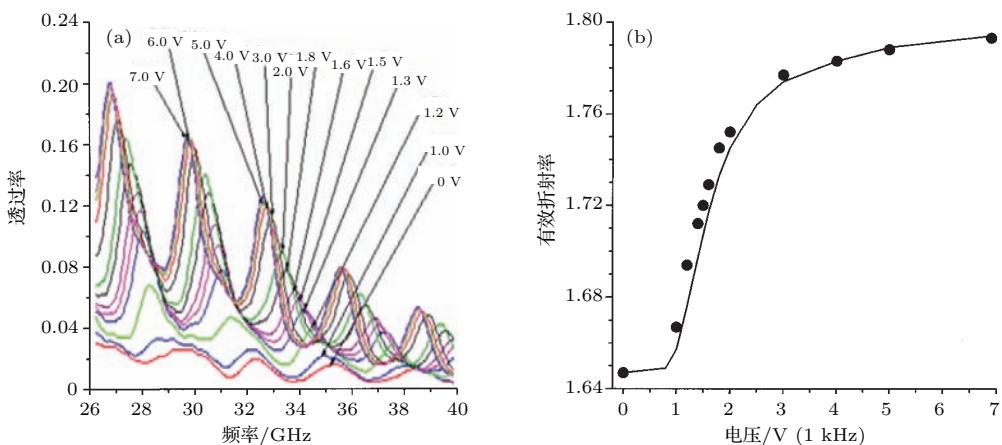


图41 (a)液晶调制微波选频器的实验结果及(b)液晶有效折射率与外加电压的关系(改编自文献[171])
Fig. 41. (a) Experimental results of microwave frequency selector modulated by liquid crystals and (b) the relationship between effective refractive index of the liquid crystals and external applied voltages. Adapted from Ref. [171].

由于在外界无电压施加时,液晶处于平行于腔内壁的锚泊状态,与微波偏振方向相应的是其正常折射率 n_o ,而在高电压施加时液晶则处于垂直于腔壁的锚泊状态,与微波偏振方向相应的则是其反常折射率 n_e ,所以由此可以得到液晶在此微波频率下的双折射。对于E7来说,由实验数据得到 $n_o = 1.65 \pm 0.01$ 和 $n_e = 1.78 \pm 0.01$ ($\Delta n \approx 0.13$)。

实际上,由文献[171]可以得到一个极其简易的测量微小量物质在微波范畴的折射率的实验手段:只用一对金属片形成一个几十微米的缝隙腔体,充入或夹入待测物质,不管是片状或粉末状固体,亦或液体甚至气体,只要能形成封闭的测量腔;然后,把此样品结构塞入一个由微波强吸收介质

围绕的小狭缝中,就可以进行相应的光学测量[172]。当然,其工作原理仍然是单缝等离子激元共振所产生的类Fabry-Perot效应[173]。其实,由于微波对金属的穿透深度极浅,不必用全金属片来构成样品腔,只要使用适当的玻璃片等材质,在其内表面镀上一层相当厚度的金属膜就可以[174]。按此原理,也曾用一个由71片1 mm厚的铝片堆积成的液晶腔集合体(分成7组,每组外加电压可以以相同的方式渐变)组成了一个液晶调制的相位光栅[175]。许多类似的工作在综述文献[176]中有所介绍。

当然,电磁波的太赫兹(THz)频段也是一个近年来非常活跃和蓬勃发展的研究领域。液晶调制的等离子激元共振器件在太赫兹范畴内的研发和

应用也是近代纳米光子学中一个非常突出的研究前沿。限于篇幅，本综述不在此处进一步展开，有兴趣的读者可以参见最近发表的一些工作，如文献[177, 178]及其引述。

5.2 由液晶弹性体(liquid crystal elastomers)参与的调制

5.2.1 液晶弹性体的调制特性

液晶弹性体是一种杂交的物质形态，它把液晶的取向有序性跟聚合物网络成分中的弹性结合起来，形成了一种单一的形态。外界驱动(热、电等)的激励，主要引起液晶弹性体所占据的空间尺度产生明显的变化^[179]，从而由器件结构空间尺度的改变调制了组成器件物质的光学参量，以达到调制器件的光学响应的目的。

5.2.2 热调制的向列相液晶弹性体(nematic liquid crystal elastomer)

如图42(a)所示，液晶的向列相(N)态与聚合物网络的类橡胶(R)弹性态结合在一起，形成了热调制的向列相液晶弹性体。在外界温度升高后，则液晶由占据空间尺度较大的向列相过渡到尺度较小的各向同性相，造成了液晶弹性体收缩的结果，如图42(b)所示。

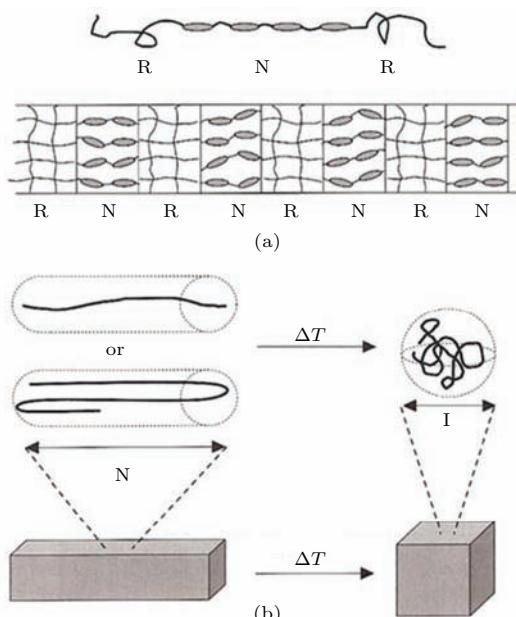


图42 热调制的液晶弹性体的工作原理简图

Fig. 42. Scheme of the working principle of liquid crystal elastomer modulated by temperature.

这种液晶弹性体的体积变化尺度比较大，但是由于是靠温度的变化来驱动的，所以空间尺度的变

化及恢复速度都较慢。不过提高其热动响应速度的工作也正在努力进行中^[180]。

5.2.3 电调制的铁电液晶弹性体(ferroelectric liquid crystal elastomer)

由近晶C*相铁电液晶和近晶C*相铁电聚合物网络所组成的铁电液晶弹性体显示了非常独特的与压电效应相似的电-动特性^[181]，如图43所示。

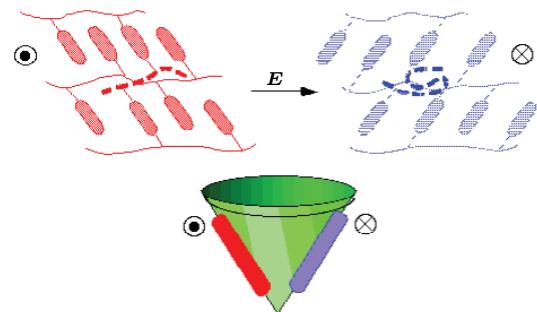


图43 电调制的铁电液晶弹性体工作原理简图

Fig. 43. Scheme of the working principle of ferroelectric liquid crystal elastomer modulated by electricity.

由于近晶C*相铁电液晶分子构型的空间不对称性，使其具有自发的电偶极矩(而向列相液晶只是在外界电场激励之下，才会产生受激电偶极矩)，故可与外界激励电场产生强烈耦合及迅速响应，从而快速地改变分子的空间取向。这种分子空间取向的改变牵动了连接它们的聚合物网络，并较为迅速地带动这种弹性体的空间尺度发生变化，如图43所示。所以，铁电液晶弹性体有响应速度快的优点，但相对而言它的调制幅度较小。

5.2.4 电热驱动液晶弹性体的结构选色器[182,183]

图44所示为一种用电热驱动液晶弹性体的结构选色器的样品制作流程。首先在玻璃基板底部涂布石墨烯层用于迅速电加热，然后均匀散布纳米量级直径的聚酯小球于玻璃基板顶面，如图44(a)所示。再盖上底面覆有PVA薄膜的玻璃基板，形成样品盒。向样品盒中注入组成液晶弹性体的液晶(MP，其分子式如图44(e)所示)及交联体的混合物，再进行聚合作用，以使进入聚酯小球堆积间隙的混合物生成需要的液晶弹性体，如图44(b)所示。移去上面的玻璃基板，并由氢氟酸洗掉聚酯小球后，最后得到由液晶弹性体交联的空洞状的纳米级光子晶体样品，如图44(c)所示。交联空洞晶体的液晶弹性体结构如图44(d)所示。

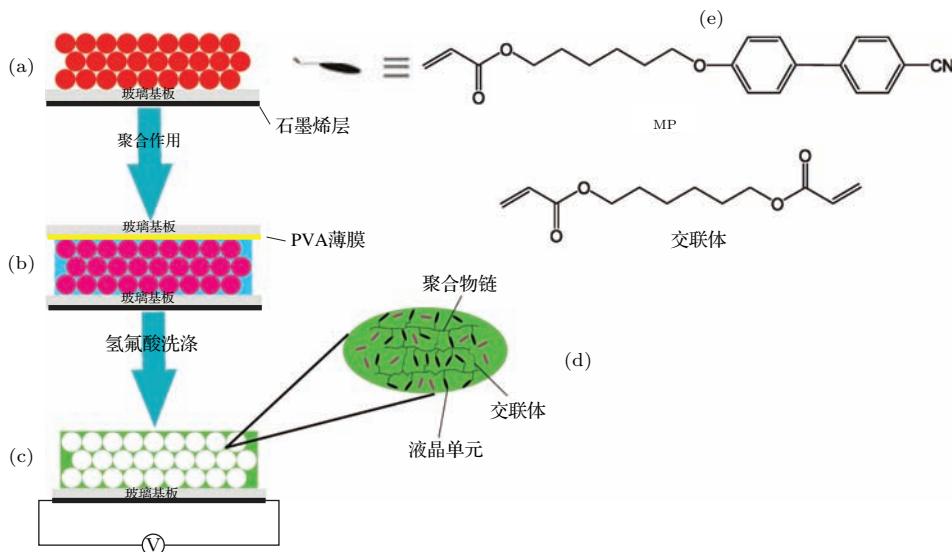


图 44 电热驱动的液晶弹性体调制的结构选色器制作流程 (改编自文献 [182])

Fig. 44. Fabrication procedure of a structured colour filter modulated by liquid crystal elastomer driven by electric-heat conversion. Adapted from Ref. [182].

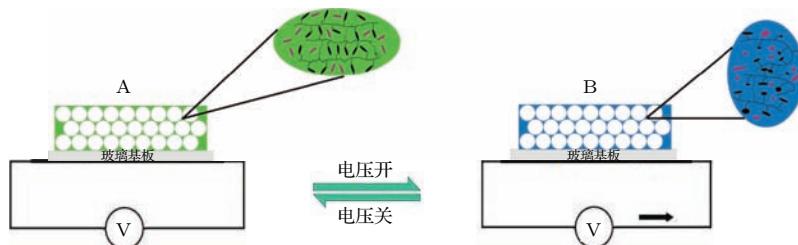


图 45 电热驱动的液晶弹性体选色器调制原理简图 (改编自文献 [183]).

Fig. 45. Scheme of a colour selector modulated by liquid crystal elastomer driven by electric-heat conversion. Adapted from Ref. [183].

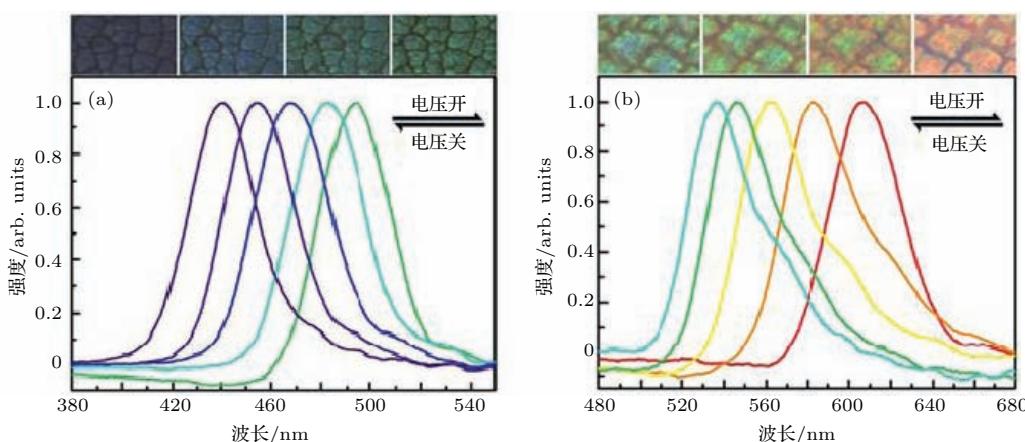


图 46 电热驱动的液晶弹性体选色器调制结果 (改编自文献 [183])

Fig. 46. The modulated results of a colour selector modulated by liquid crystal elastomer driven by electric-heat conversion. Adapted from Ref. [183].

当加电压于石墨烯薄膜上时, 迅速的电热转换使样品的温度急剧上升, 驱动液晶弹性体随之改变其占据空间的尺度, 从而引起空洞形态的变化, 调制了此光子晶体的结构参数, 如图 45 所示.

图 46 (a) 和图 46 (b) 显示了这种调制器件的选色工作结果. 其中图 46 (b) 是样品用硅油处理后得到的, 硅油处理不但可以使导热效果更好, 而且交联体的浓度也可降低. 这就使得调制速度可以由

温度变化更快及润滑效果更好这两个因素而变得更快,而且翻转也更顺畅.

液晶由于同时具有液态和晶态的特点,所以易于组装,并易于在外界条件(光、电、磁及热等)的激励下调制其平均指向矢取向及相态,即具有可流动性的、可调制的光学各向异性(双折射)的优异性能.因此,液晶对于纳米等离子激元共振器件的光学调制是一个非常优异的待选材料.自20世纪末,等离子激元共振及纳米级超材料共同掀起近代光学学的新高潮以来,液晶参与的材料组装及器件调制领域已经出现了大量的前沿突破,并继续呈方兴未艾之势.本节所介绍的几个例子,只是简单地揭示了这个领域的巨大发展潜力而已.

从应用角度来看,对于液晶参与的纳米等离子激元共振器件调制工作的进一步发展,还有下面所述的一些挑战需要面对和克服.

1)响应速度.一般说来,目前用于显示技术中的向列相液晶的响应速度是在毫秒量级,在向列相液晶弹性体中则更慢.为了满足微秒、甚至毫微秒量级的器件需要,进一步研究开发快速响应液晶,如双轴液晶、铁电液晶等,并使其进入实用阶段是十分必要的.

2)光学双折射.应该说,相比其他材料,现有液晶的光学双折射还是比较大的,且适用于相当宽阔的电磁谱段范畴.但是,对于某些领域来说,如传输光学、光学斗篷等,需要更大的光学双折射,以适应折射率工程中对于折射率变化较剧烈空间区域的要求.这当然对液晶材料化学提出了挑战.

3)锚泊材料.要想达到理想的及充分的调制效果,一般说来液晶指向矢需要预先锚泊成一定的空间分布,这就需要相应的锚泊材料或锚泊手段,否则空间无序分布的液晶指向矢的预态将会使其后的调制效果大打折扣.开发新型的锚泊材料或手段,使得既能有效地预锚泊液晶分子所需要的空间取向分布,又能大幅度减少调制阻尼,对于实用器件来说是十分需要的.另外,做到在比较大的面积(如至少几百个平方微米)上的较为均匀的预锚泊,也是一个相当大的挑战.

4)驱动安排.现在正在研发使用的调制器件,液晶材料要么是几乎无序地掺混于构成纳米级超材料的其他介质中,要么是整体位于超材料的外侧,作为环境物质.外界激励的调制都是对参与调制的液晶材料整体同时起作用的.为了实现较为精

细的调制效果,空间和时间上精细及分立的调制,类似于液晶显示器件中的TFT式的可程序化的调制安排是需要的.

6 结 论

本综述在介绍了有关纳米等离子激元这个学科的发展脉络及其在近代纳米光子学前沿中的蓬勃发展趋势的基础上,指出了可调制纳米等离子激元器件是其当前的研究前沿和热点所在.

在基础理论突破、样品制备技术精进及数值模拟软件深入发展和应用需求等的强力推动下,近代纳米光子学,尤其是其重要分支——纳米等离子激元学获得了巨大的发展动力,在近代光学研究发展前沿中各个领域不断突破,呈现了一片色彩斑斓的绚丽景象.另外,具有独特特性的液晶材料在成就了平面显示技术中的辉煌硕果并仍然继续扩展之后,正努力寻找着它的下一个发展的着力点.本综述评述了液晶材料正凭借其优异独特的性质在此发展前沿中的优势及应用前景.

可调制的纳米光子学技术,例如可调制的纳米等离子激元学等,在基础研究和应用需求的推动下,正在成长为纳米光子学研究领域中新的热点.作为物质第四态的液晶以其独有特异的物理、化学等特性,尤其是在光学响应方面的诸多优势,使其成为可调制纳米光子学领域所需材料及调控手段的强力候选者.当然,这也为液晶材料的开发及调控手段的开拓带来了新的强有力的挑战.本综述介绍了上述诸方面研究的最新进展,并对于上述课题中存在的问题及可能的继续发展方向等也进行了相应的探讨.

参考文献

- [1] Pines D 1956 *Rev. Mod. Phys.* **28** 184
- [2] Fano U 1956 *Phys. Rev.* **103** 1202
- [3] Ritchie R H 1957 *Phys. Rev.* **106** 874
- [4] Cunningham S L, Maradudin A A, Wallis R F 1974 *Phys. Rev. B* **10** 3342
- [5] Otto A 1968 *Z. Physik* **216** 398
- [6] Kretschmann E, Raether H 1968 *Z. Naturf. A* **23** 2135
- [7] Wood R E 1902 *Phil. Mag.* **4** 396
- [8] Ritchie R H, Arakawa E T, Cowan J J, Hamm R N 1968 *Phys. Rev. Lett.* **21** 1530
- [9] Abelès F, Lopez-Rios T 1974 *Opt. Commun.* **11** 89
- [10] Plotz G A, Simon H J, Tucciarone J M 1979 *J. Opt. Soc. Am.* **69** 419
- [11] Sarid D 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1927

- [12] Lévy Y, Zhang Y, Loulergue J C 1985 *Opt. Commun.* **56** 155
- [13] Sudarkin A N, Demkovich P A 1989 *Sov. Phys. Uspekhi* **34** 764
- [14] Yang F Z, Bradberry G W, Sambles J R 1989 *Opt. Commun.* **74** 1
- [15] Yang F Z, Bradberry G W, Sambles J R 1990 *J. Mod. Opt.* **37** 993
- [16] Welford K 1991 *Opt. Quantum Electron.* **23** 1
- [17] Yang F Z, Bradberry G W, Sambles J R 1991 *Thin Solid Films* **196** 35
- [18] Homola J, Ctyroky J, Skalsky M, Hradilova J, Kolarovo P A 1997 *Sens. Actuator. B* **38-39** 286
- [19] Sterkenburgh T, Franke H 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 1011
- [20] Shankaran D R, Gobi K V, Miura N 2007 *Sens. Actuator. B* **121** 158
- [21] Kreibig U, Vollmer M 1995 *Optical Properties of Metal Clusters* (Berlin: Springer-Verlag)
- [22] Underwood S, Malvancy P 1994 *Langmuir* **10** 3427
- [23] Malvancy P 1996 *Langmuir* **12** 788
- [24] Bergman D J, Stockman M I 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 027402
- [25] Pendry J B, Schurig D, Smith D R 2006 *Science* **312** 1780
- [26] Hess O, Pendry J B, Maier S A, Oulton R F, Hamm J M, Tsakmakidis K L 2012 *Nat. Mater.* **11** 573
- [27] Born M, Wolf E (translated by Huang L T, Chen X M, Chen B Q) 1981 *Principles of Optics* (Beijing: Science Press) pp832–836 (in Chinese) [玻恩 M, 沃耳夫 E 著 (黄乐天, 陈熙谋, 陈秉乾译) 1981 光学原理(下册) (北京: 科学出版社) 第 832—836 页]
- [28] Quail J C, Rako J G, Simon H J 1983 *Opt. Lett.* **8** 377
- [29] Craig A E, Olson G A, Sarid D 1985 *Appl. Opt.* **24** 61
- [30] Kuwamura Y, Fukui M, Tada O 1983 *J. Phys. Soc. Jpn.* **52** 2350
- [31] Yang F Z, Cao Z Q, Ruan L Z, Fang J X 1986 *Appl. Opt.* **25** 3903
- [32] Boaman R A, Olson G A, Sarid D 1986 *Appl. Opt.* **25** 2729
- [33] Li G, Seshadri S R 1989 *J. Appl. Phys.* **67** 555
- [34] Berini P 2009 *Adv. Opt. Photon.* **1** 484
- [35] Kovacs G J 1978 *J. Opt. Soc. Am.* **68** 1325
- [36] Yang F Z, Sambles J R, Bradberry G W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 559
- [37] Bryan-Brown G P, Yang F Z, Bradberry G W, Sambles J R 1991 *J. Opt. Soc. Am. B* **8** 765
- [38] Crook R J, Yang F Z, Sambles J R 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 237
- [39] Takabayashi M, Haraguchi M, Fukui M 1995 *J. Opt. Soc. Am. B* **12** 2406
- [40] Yang F Z, Sambles J R 1997 *J. Mod. Opt.* **44** 1155
- [41] Giannini V, Zhang Y, Forcales M, Gómez Rivas J 2008 *Opt. Express* **16** 19674
- [42] Yang F Z, Sambles J R, Bradberry G W 1991 *Phys. Rev. B* **44** 5855
- [43] Farias G A, Maradudin A A 1983 *Phys. Rev. B* **27** 7093
- [44] Paulick T C 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 1384
- [45] Agarwal G S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 3534
- [46] Dutta G S, Varada G V, Agarwal G S 1987 *Phys. Rev. B* **36** 6331
- [47] Cavalcante M G, Farias G A, Maradudin A A 1987 *J. Opt. Soc. Am. B* **4** 1372
- [48] Yang F Z, Bradberry G W, Sambles J R 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 2030
- [49] Takabayashi M, Shiba H, Haraguchi M, Fukui M 1992 *J. Phys. Soc. Jpn.* **61** 2550
- [50] Wu Z C, Arakawa E T, Inagaki T, Thundat T, Schowalter L J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 7782
- [51] Maxwell Garnett J C 1904 *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **203** 385
- [52] Mie G 1908 *Ann. Phys. (Weinheim, Ger.)* **25** 377
- [53] Mayer K M, Hafner J H 2011 *Chem. Rev.* **111** 3828
- [54] Bohren C F, Huffman D R 1998 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (2nd Ed.) (New York: Wiley-Interscience)
- [55] Kreibig U, Vollmer M 1995 *Optical Properties of Metal Clusters* (Berlin: Springer-Verlag)
- [56] Kelly K L, Coronado E, Zhao L, Schatz G C 2003 *J. Phys. Chem. B* **107** 668
- [57] Anderson L J E, Mayer K M, Fraleigh R D, Yang Y, Lee S, Hafner J H 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 11127
- [58] Bohren C F, Huffman D R 1983 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (New York: Wiley) 530
- [59] Link S, El-Sayed M A 1999 *J. Phys. Chem. B* **103** 8410
- [60] Purcell E M, Pennypacker C R 1973 *Astrophys* **186** 705
- [61] Ruppin R 1982 *Phys. Rev. B* **26** 3440
- [62] Pinchuk A, Kalsin A, Kowalcuk B, Schatz G, Grzybowski B 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 11816
- [63] Gerardy J M, Ausloos M 1982 *Phys. Rev. B* **25** 4204
- [64] Claro F 1984 *Phys. Rev. B* **30** 4989
- [65] Rojas R, Claro F 1986 *Phys. Rev. B* **34** 3730
- [66] Olivares I, Rojas R, Claro F 1987 *Phys. Rev. B* **35** 2453
- [67] Chergui M, Melikian A, Minassian H 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 6463
- [68] Draine B T, Flatau P J 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 1491
- [69] Jensen T R, Kelly K L, Lazarides A, Schatz G C 1999 *J. Cluster Sci.* **10** 295
- [70] Yang W, Schatz G C, Van Duyne R P 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 869
- [71] Novotny L, Bian R X, Xie X S 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 645
- [72] Bian R X, Dunn R C, Xie X S, Leung P T 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4772
- [73] Taflove A 1995 *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time Domain Method* (Boston: Artech House)
- [74] Abbe E 1873 *Archiv für Mikroskopische Anatomie* **9** 413
- [75] Bethe H 1944 *Phys. Rev.* **66** 163
- [76] Ebbesen T W, Lezec H J, Ghaemi H F, Thio T, Wolff P A 1998 *Nature* **391** 667
- [77] Thio T, Pellerin K M, Linke R A, Lezec H J, Ebbesen T W 2001 *Opt. Lett.* **26** 1972
- [78] Mrejen M, Israel A, Taha H, Palchan M, Lewis A 2007 *Opt. Express* **15** 9129

- [79] Beruete M, Sorolla M, Campillo I, Dolado J S, Martín-Moreno L, Bravo-Abad J, García-Vidal F J 2005 *IEEE Trans. Antenn. Propag.* **53** 1897
- [80] Martín-Moreno L, García-Vidal F J, Lezec H J, Pellerin K M, Thio T, Pendry J B, Ebbesen T W 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1114
- [81] Maqsood M W, Mehfuz R, Chau K J 2010 *Opt. Express* **18** 21669
- [82] Beruete M, Sorolla M, Campillo I 2006 *Opt. Express* **14** 5445
- [83] Wang Y, Qin Y, Zhang Z 2014 *Plasmonics* **9** 203
- [84] De Leebeck A, Kumar L K S, de Lange V, Sinton D, Gordon R, Brolo A G 2007 *Anal. Chem.* **79** 4094
- [85] Brolo A G, Gordon R, Kavanagh K L 2008 *Acc. Chem. Res.* **41** 1049
- [86] Yao J M, Stewart M E, Maria J, Lee T W, Gray S K, Rogers J A, Nuzzo R G 2008 *Angewandte Chemie-International Edition* **47** 5013
- [87] Yang J C, Ji J, Hogle J M, Larson D N 2009 *Biosens Bioelectron* **24** 2334
- [88] Ji J, O'Connell J G, Carter D J D, Larson D N 2008 *Anal. Chem.* **80** 2491
- [89] Yang J C, Ji J, Hogle J M, Larson D N 2008 *Nano Lett.* **8** 2718
- [90] Vesalago V G 1968 *Sov. Phys.* **10** 509
- [91] Pendry J B, Holden A J, Robbins D J, Stewart W J 1999 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **47** 2075
- [92] Smith D R, Padilla W J, Vier D C, Nemat-Nasser S C, Schultz S 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4184
- [93] Shelby R A, Smith D R, Nemat-Nasser S C, Schultz S 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 489
- [94] Gay-Balmaz P, Martin O J F 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 2929
- [95] Shelby R A, Smith D R, Schultz S 2001 *Science* **292** 77
- [96] Iyer A K, Kremer P C 2002 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **50** 2702
- [97] Yen T J, Padilla W J, Fang N, Vier D H, Smith D R, Pendry J B, Basov D N, Zhang X 2004 *Science* **303** 1494
- [98] Wheeler M S, Aitchison J S, Mojahedi M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045105
- [99] Zhang S, Fan W, Malloy K J, Brueck S, Panoiu N C, Osgood R M 2006 *J. Opt. Soc. Am. B* **23** 434
- [100] Kildishev A V, Cai W, Chettiar U K, Yuan H, Sarychev A K, Drachev V P, Shalaev V M 2006 *J. Opt. Soc. Am. B* **23** 423
- [101] Dolling G, Enkrich C, Wegener M, Soukoulis C M, Linden S 2006 *Science* **312** 892
- [102] Dolling G, Wegener M, Soukoulis C M, Linden S 2007 *Opt. Lett.* **32** 53
- [103] Kussow A G, Akyurtlu A, Semichaevsky A, Angkawisittpan N 2007 *Phys. Rev. B* **76** 195123
- [104] Valentine J, Zhang S, Zentgraf T, Ulin-Avila E, Genov D A, Bartal G, Zhang X 2008 *Nature* **455** 376
- [105] Cai W, Chettiar U K, Yuan H, de Silva V C, Kildishev A V, Drachev V P, Shalaev V M 2007 *Opt. Express* **15** 3333
- [106] Wu W, Kim E, Ponizovskaya E, Liu Y, Yu Z, Fang N, Shen Y R, Bratkovsky A M, Tong W, Sun C, Zhang X, Wang S Y, Williams R S 2007 *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.* **87** 143
- [107] Gundogdu T F, Katsarakis N, Kafesaki M, Penciu R S, Konstantinidis G, Kostopoulos A, Economou E N, Soukoulis C M 2008 *Opt. Express* **16** 9173
- [108] Gordon J A, Ziolkowski R W 2008 *Opt. Express* **16** 6692
- [109] Limberopoulos N, Akyurtlu A, Higginson K, Kussow A-G, Merritt C D 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 023306
- [110] Archambault A, Besbes M, Greffet J J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 097405
- [111] Pendry J B, Schurig D, Smith D R 2006 *Science* **312** 1780
- [112] Leonhardt U 2006 *Science* **312** 1777
- [113] Schurig D, Mock J J, Justice B J, Cummer S A, Pendry J B, Starr A F, Smith D R 2006 *Science* **314** 977
- [114] Soric J C, Chen P Y, Kerkhoff A, Rainwater D, Melin K, Alù A 2013 *New J. Phys.* **15** 033037
- [115] Ergin1 T, Stenger N, Brenner P, Pendry J B, Wegener M 2010 *Science* **328** 337
- [116] Gharghi M, Gladden C, Zentgraf T, Liu Y, Yin X, Valentine J, Zhang X 2011 *Nano Lett.* **11** 2825
- [117] Chen X, Luo Y, Zhang J, Jiang K, Pendry J B, Zhang S 2011 *Nat. Commun.* **2** 176
- [118] Chen H, Zheng B 2012 *Sci. Rep.* **2** 255
- [119] Moskovits M 2006 *Surface-Enhanced Raman Scattering-Physics and Applications* pp1–18
- [120] Blackie E J, Le Ru E C, Etchegoin P G 2009 *J. Am. Chem. Soc.* **131** 14466
- [121] Nie S, Emory S R 1997 *Science* **275** 1102
- [122] Le Ru E C, Meyer M, Etchegoin P G 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 1944
- [123] Yang J, Palla M, Bosco F G, Rindzevicius T, Alstrøm T S, Schmidt M S, Boisen A, Ju J, Lin Q 2013 *ACS Nano* **7** 5350
- [124] Han Y A, Ju J, Yoon Y, Kim S M 2014 *J. Nanosci. Nanotech.* **14** 3797
- [125] Li D, Feng S, Huang H, Chen W, Shi H, Liu N, Chen L, Chen W, Yu Y, Chen R 2014 *J. Nanosci. Nanotech.* **10** 478
- [126] Deng Y, Juang Y 2014 *Biosens. Bioelectron.* **53** 37
- [127] Yu N F, Genevet P, Kats M A, Aieta F, Tetienne J P, Capasso F, Gaburro Z 2011 *Science* **334** 333
- [128] Zhang J, MacDonald K F, Zheludev N I 2012 *Light Sci. Appl.* **1** e18
- [129] Hägglund C, Apell S P, Kasemo B 2010 *Nano Lett.* **10** 3135
- [130] Thongrattanasiri S, Koppens F H, García de Abajo F J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 047401
- [131] Bergman D J, Stockman M I 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 027402
- [132] Bourzac K 2009 *MIT Technology Review* August 17
- [133] Stockman M I 2008 *Nat. Photon.* **2** 327
- [134] Noginov M A, Zhu G, Belgrave A M, Bakker R, Shalaev V M, Narimanov E E, Stout S, Herz E, Suteewong T, Wiesne U 2009 *Nat. Lett.* **460** 1110

- [135] Hess O, Pendry J B, Maier S A, Oulton R F, Hamm J M, Tsakmakidis K L 2012 *Nat. Mater.* **11** 573
- [136] Berini P, de Leon I 2012 *Nat. Photon.* **6** 16
- [137] Zayats A V, Maier S A 2013 *Active Plasmonics and Tuneable Plasmonic Metamaterials* (New York: John Wiley & Sons, Inc.)
- [138] Chen H T, O'Hara J F, Azad A K, Taylor A J, Averitt R D, Shrekenhamer D B, Padilla W J 2008 *Nat. Photon.* **2** 295
- [139] Degiron A, Mock J J, Smith D R 2007 *Opt. Express* **15** 1115
- [140] Werner D H, Kwon D H, Khoo I C, Kildishev A V, Shalaev V M 2007 *Opt. Express* **15** 3342
- [141] Chettiar U K, Kildishev A V, Klar T A, Shalaev V M 2006 *Opt. Express* **14** 7872
- [142] Gorkunov M V, Osipov M A 2008 *J. Appl. Phys. Commun.* **103** 036101
- [143] Wang X, Kwon D H, Werner D H, Khoo I C, Alexander V 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 143122
- [144] De Cort W, Beeckma J, James R, Fernández F A, Baets R, Neyts K 2009 *Opt. Lett.* **34** 2054
- [145] Pratibha R, Park K, Smalyukh I I, Park W 2009 *Opt. Express* **17** 19459
- [146] Dickson W, Wurtz G A, Evans P R, Pollard R J, Zayats A V 2008 *Nano Lett.* **8** 281
- [147] Buchnev O, Ou J Y, Kaczmarek M, Zheludev N I, Fedotov V A 2013 *Opt. Express* **21** 1633
- [148] Pawlik G, Tarnowski K, Walasik W, Mitus A C, Khoo I C 2014 *Opt. Lett.* **39** 1744
- [149] Hao Q, Zhao Y, Juluri B K, Kiraly B, Liou J, Khoo I C, Huang T J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 084340
- [150] Liu Y J, Hao Q, Smalley J S T, Liou J, Khoo I C, Huang T J 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 091101
- [151] Yaghmaee P, Karabey O H, Bates B, Fumeaux C, Jakoby R 2013 *Int. J. Antenn. Propag.* **2013** Article ID 824214
- [152] Si G Y, Zhao Y H, Leong E S P, Liu Y J 2014 *Materials* **7** 1296
- [153] Landy N I, Sajuyigbe S, Mock J J, Smith D R, Padilla W J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 207402
- [154] Tao H, Landy N I, Bingham S M, Zhang X, Averitt R D, Padilla W J 2008 *Opt. Express* **16** 7181
- [155] Hao J M, Wang J, Liu X L, Padilla W J, Zhou L, Qiu M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 251104
- [156] Liu X, Starr T, Starr A F, Padilla W J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 207403
- [157] Tao H, Bingham C M, Strikwerda A C, Pilon D, Shrekenhamer D, Landy N I, Fan K, Zhang X, Padilla W J, Averitt R D 2008 *Phys. Rev. B* **78** 241103
- [158] Shrekenhamer D, Chen W C, Padilla W J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 177403
- [159] Padilla W J, Liu X 2010 *SPIE Newsroom* **10** 003137
- [160] Kang B, Woo J H, Choi E, Lee H H, Kim E S, Kim J, Hwang T J, Park Y S, Kim D H, Wu J W 2010 *Opt. Express* **18** 16492
- [161] Baida F I, Labeke D V 2003 *Phys. Rev. B* **67** 155314
- [162] Baida F I, Belkhir A, van Labeke D, Lamrouss O 2006 *Phys. Rev. B* **74** 205419
- [163] Atwater H A, Polman A 2010 *Nat. Mater.* **9** 205
- [164] de Waele R, Burgos S P, Polman A, Atwater H A 2009 *Nano Lett.* **9** 2832
- [165] Burgos S P, de Waele R, Polman A, Atwater H A 2010 *Nat. Mater.* **9** 407
- [166] de Waele R, Burgos S P, Atwater H A, Polman A 2010 *Opt. Express* **18** 12770
- [167] Fan W, Zhang S, Minhas B, Malloy K J, Brueck S R J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 033902
- [168] Si G Y, Zhao Y H, Liu H, Teo S L, Zhang M S, Huang T J, Danner A J, Teng J H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 033105
- [169] Zhang J, Ou J Y, Papasimakis N, Chen Y, MacDonald K F, Zheludev N I 2011 *Opt. Express* **19** 23279
- [170] Liu Y J, Si G Y, Leong E S P, Xiang N, Danner A J, Teng J H 2012 *Adv. Mater.* **24** OP131
- [171] Yang F Z, Sambles J R 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3717
- [172] Yang F Z, Sambles J R 2002 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35** 3049
- [173] Yang F Z, Sambles J R 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 063901
- [174] Yang F Z, Sambles J R 2003 *Liq. Cryst.* **30** 599
- [175] Yang F Z, Sambles J R 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 2041
- [176] Sambles J R, Kelly R, Yang F Z 2006 *Phil. Trans. R. Soc. A* **364** 2733
- [177] Vieweg N, Shakfa M K, Koch M 2011 *Opt. Commun.* **284** 1887
- [178] Buchnev O, Wallauer J, Walther M, Kaczmarek M, Zheludev N I, Fedotov V A 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 141904
- [179] de Jeu, Wim H (Ed.) 2012 *Liquid Crystal Elastomers: Materials and Applications, Series: Advances in Polymer Science* **250** (Berlin: Springer)
- [180] Montazamia R, Spillmannb C M, Nacirib J, Ratnab B R 2012 *Sensor. Actuat. A: Phys.* **178** 175
- [181] Gebhard E, Zentel R 2000 *Macromol. Chem. Phys.* **201** 911
- [182] Wu G, Jiang Y, Xu D, Tang H, Liang X, Li G T 2011 *Langmuir* **27** 1505
- [183] Jiang Y, Xu D, Li X, Lin C, Li W, An Q, Tao C, Tang H, Li G T 2012 *J. Mater. Chem.* **22** 11943

SPECIAL ISSUE—Liquid crystal photonics and applications

From plasmon to nanoplasmonics—the frontiers of modern photonics and the role of liquid crystals in tuneable nanoplasmonics^{*}

Yang Fu-Zi[†]

(Chemistry Department, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 14 December 2014; revised manuscript received 30 March 2015)

Abstract

This review is intended to be a fundamental lecture. It focuses on systematically introducing the reader to the physical and optical background to certain basic concepts in nanoplasmonics, before devoting attention to the many new developments at the frontiers of modern photonics, such as tuneable nanoplasmonics. There is a special discussion of the advantages and applications of liquid crystals in this area.

First, in optics according to the special requirements of an optical surface wave propagating alone a smooth boundary the concept of surface plasmon polariton (SPP) has been introduced from physics. After discussing the influences from more rough surfaces upon the SPP and the response from larger metallic particles to the optical electro-magnetic waves the results from interaction between the optical waves and metallic particles with dimensions much smaller than the wavelength of the optical waves—the exist of the local surface plasmon polariton, i.e. the base of nanoplasmonics, has been confirmed.

Secondly, this review describes many new and interesting aspects from this important branch at the frontiers of modern photonics—nanoplasmonics, which are supported by metamaterials consisting of metallic particles with various shapes and nano-scale size from modern manufacture technologies and more powerful and functional software. Many device system based upon these aspects have broken through the limitations of classical optics and developed in many special new directions, for example the quantum coincidence of lasers—Spaser (surface plasmon amplification by stimulated emission of radiation) etc.

Finally, we address tuneable nanoplasmonics, which is a very important topic that has warranted great attention. by reason of liquid crystals' many special advantages in optical responses—for example their larger optical birefringence, which can be easily modulated by applying electric and/or magnetic fields etc.—the application of liquid crystals in tuneable nanoplasmonic devices is a more practical research direction. This review introduces recent developments in this area, and also discusses various challenges and possible research topics.

Keywords: surface plasmon polariton, nanoplasmonics, liquid crystals, tuneable

PACS: 42.25.-p, 42.70.-a, 42.70.Df, 78.20.Ek

DOI: 10.7498/aps.64.124214

* Project supported by the Scientific Research Development Foundation of Tsinghua University, China (Grant No. 120050121).

† Corresponding author. E-mail: yangfz@tsinghua.edu.cn

动态全息三维显示研究最新进展

曾超 高洪跃 刘吉成 于瀛洁 姚秋香 刘攀 郑华东 曾震湘

Latest developments of dynamic holographic three-dimensional display

Zeng Chao Gao Hong-Yue Liu Ji-Cheng Yu Ying-Jie Yao Qiu-Xiang Liu Pan Zheng Hua-Dong
Zeng Zhen-Xiang

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 124215 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.124215

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.124215>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

数字显微全息重建图像的景深扩展研究

[Study on extending the depth of field in reconstructed image for a micro digital hologram](#)

物理学报.2015, 64(11): 114209 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.114209>

基于数字全息图的光纤折射率测量研究

[Refractive Index Measurement Research for Optical Fiber Based on Digital Hologram](#)

物理学报.2015, 64(6): 064204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064204>

基于菌紫质 F 状态的永久光存储研究

[F-state based permanent optical data storage in bacteriorhodopsin film](#)

物理学报.2015, 64(2): 024218 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024218>

LiNbO₃:Cu:Ce 晶体非挥发全息存储性能的理论研究

[Theoretical studies on nonvolatile holographic recording for LiNbO₃:Cu:Ce crystals](#)

物理学报.2012, 61(18): 184205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.184205>

掺杂 TiO₂ 纳米颗粒的抗缩皱光致聚合物全息特性的研究

[Study of holographic characteristics of TiO₂ nanoparticles dispersed resisting shrinkage photopolymer](#)

物理学报.2011, 60(4): 044213 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.044213>

专题: 液晶光学及应用

动态全息三维显示研究最新进展*

曾超 高洪跃[†] 刘吉成 于瀛洁 姚秋香 刘攀 郑华东 曾震湘

(上海大学机电工程与自动化学院精密机械工程系, 应用光学与测量实验室, 上海 200072)

(2015年3月9日收到; 2015年6月6日收到修改稿)

全息三维显示是真三维显示技术, 其原理是利用光学干涉记录和衍射再现将物体或场景的三维信息全部重建出来, 所以观看全息三维图像与观看真实物体或场景的效果一样. 近期全息研究领域有一些突破性的成果被报道, 将推动全息显示的应用不断走向成熟. 本文将重点介绍基于光学材料和空间光调制器为全息图承载载体的动态全息三维显示最新发展状况. 虽然动态全息三维显示研究仍然存在挑战, 但最近研究中已经利用光学材料实现了实时动态全息三维视频显示, 这为未来实现大尺寸、高分辨率、彩色全息真三维视频显示提供了可能.

关键词: 全息三维视频显示, 超快液晶膜, 实时全息显示, 真三维显示

PACS: 42.40.Ht, 42.70.Ln, 42.40.-i

DOI: 10.7498/aps.64.124215

1 引言

全息三维显示是真三维显示技术, 最近成为三维显示研究的热点之一. 当前的三维显示技术, 如戴眼镜式分光立体显示、裸眼分光立体显示和体三维显示等, 都存在一定缺陷, 使三维显示无法达到应用普及的水平. 全息技术^[1-8]可记录和再现真实物体或场景的全部信息(包括振幅信息和相位信息). 因此, 这种技术可以让观察者在裸眼的情况下观察到类似实物自然散射的光, 即所有的色彩及深度信息. 全息三维显示(也称全像三维显示)可分为静态和动态两种形式. 静态全息技术已基本成熟, 开始走向三维显示应用, 多见于展览展示、广告宣传等.

动态全息显示技术虽然不够成熟, 但应用前景非常广阔, 使其成为全息和三维显示领域的研究热点. 目前, 动态全息有两种实现形式: 基于全息材料和基于空间光调制器衍射实现全息显示. 这两种动态全息显示方式都有一些关键技术问题需要深入的科学研究予以解决. 根据两种技术的发展态

势, 基于全息材料的动态全息三维显示研究被广泛看好, 其更有望实现大尺寸、高清晰、真彩色全息三维显示. 近几年, 科学家们将目光瞄准了这一研究领域, 并有一些重要成果出现, 其有望成为未来全息真三维电视的主流技术. 本文将阐述全息三维显示发展的最新进展. 静态全息三维显示已经走向应用, 并在不断完善中. 动态全息三维显示还处于研究阶段, 但近年的一些科研突破为其真正走向应用带来很大希望. 所以本文将重点介绍动态全息三维显示的最新研究发展, 希望能为这一领域的研究人员提供参考.

2 全息三维显示原理

全息技术是利用干涉方法使三维物体表面散射光波的全部信息(振幅和相位)储存在记录介质中, 当再用同样的可见光照射全息图时, 由于衍射原理, 可以再现原始物光波, 即干涉记录, 衍射再现. 全息记录与再现原理如图1所示. 干涉场分布不仅包含物体的振幅信息(也称为色彩信息), 还包含物体的相位信息(也称为深度信息). 利用感光材

* 国家自然科学基金(批准号: 11474194, 11004037, 61101176) 和上海市自然科学基金(批准号: 14ZR1415500) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gaohylet@i.shu.edu.cn

料来记录干涉场的分布, 可以达到记录物光波信息的目的。全息再现是利用一束满足特定条件的光束再现出全息介质中的物波, 构成与原物波完全相同的新的波继续传播, 从而形成三维立体像。全息技术可以真正实现物体的三维重建, 与分光立体显示和体三维显示具有本质的区别, 如图 2 所示。分光立体显示视频内容在拍摄时取左右摄像机对的距离为固定值(在亚洲约为 6.2—6.3 cm, 在欧洲约为 6.5 cm), 而不同人的左右眼距离是不同的, 所以分光立体显示视频内容不能满足所有人的视觉习惯, 很多人看后会感到不适。体三维显示一般采用高速旋转屏, 其成像质量受屏的影响, 并且危险性很高。所以全息三维显示技术是比较理想的真三维显示技术。

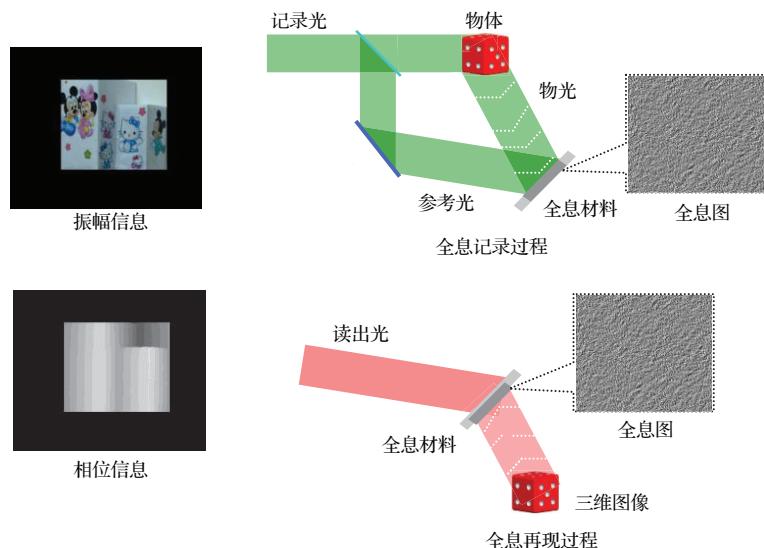


图 1 全息记录与再现

Fig. 1. Holographic recording and reconstruction.

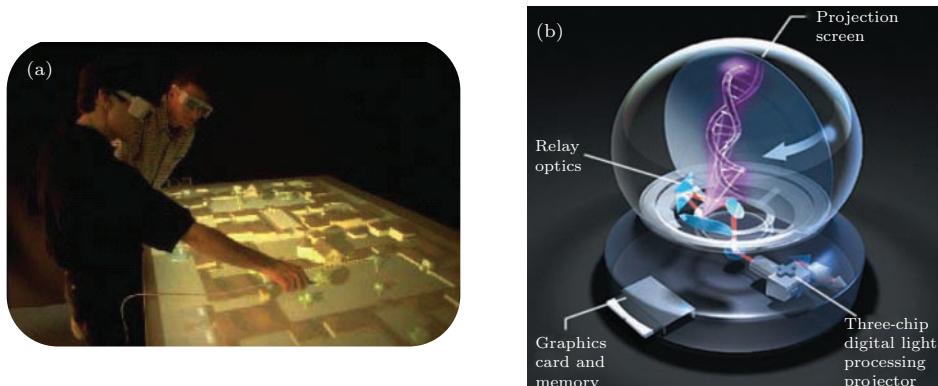


图 2 (a) 分光立体显示和(b) 体三维显示

Fig. 2. (a) Stereoscopic display and (b) volumetric three-dimensional display.

3 静态三维全息图证明全息显示的优势

静态三维全息图已经向我们展现了全息显示的神奇之处。图 3 所示为英国科学家 Hans Bjelkhaugen 等制作的一张全息图, 该图拍摄于第九届国际显示全息展览会 (ISDH2012)。图中是由左向右从不同角度拍摄的照片, 仿佛是一个真实的佛像在画

框中, 但其实这是一张厚约 2 mm 的薄板, 其中记录了一幅全息图。静态全息图是将包含物体表面的亮暗、色彩、景深等信息的全息光场记录在全息材料中, 然后利用读出光照射全息图, 经过光学衍射就从全息材料中读取出物体的全息三维立体图像。全息图只要裸眼观看就能获得大视角和大景深的三维图像, 与观看真实物体的效果非常相似。因此, 静态全息图已经引起了广泛关注, 其在三维图像显示方面具有广阔的应用。



图3 静态三维全息图(由左向右拍摄的不同角度的照片)

Fig. 3. Static holographic three-dimensional displays (different view angles of the same display).

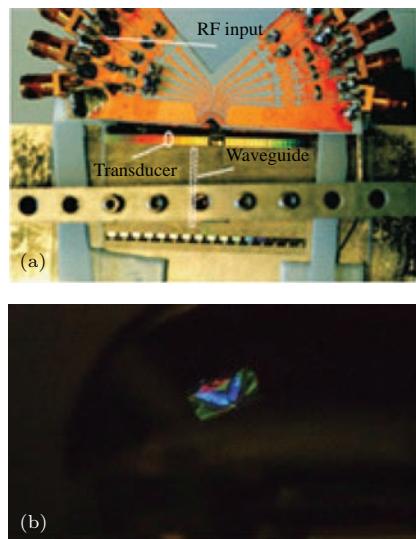
4 动态全息技术的最新研究进展

正是由于全息技术在三维显示方面的优势,越来越多的人致力于研究动态全息显示技术。其中包括两个方向:一是利用空间光调制器衍射实现的三维图像再现,如声光调制器、数字微反镜器件和液晶空间光调制器的使用;二是对新型动态全息材料的探索与研究。

4.1 基于空间光调制器实现的动态全息显示

基于空间光调制器实现全息视频显示的成果不断被报道。2004年,Qinetiq公司使用多个空间光调制器的方法实现了全息彩色视频,显示尺寸为140 mm^[9]。这一成果的另一项突破是数字全息技术与积分成像技术的结合应用。2005年,Choi等^[10]将集成技术与数字全息立体显示系统相结合,提高了数字全息显示系统的可视角度。2013年,Xu等^[11]利用多空间光调制器拼接技术实现了较大尺寸的帧率为60 Hz的全视差全息三维显示,图4所示为利用24台空间光调制器实现对角尺寸为10英寸的全息三维视频显示。同年,Smalley等^[12]开发了一种基于各向异性泄漏模式调制器的全息视频显示器,如图5所示,该成果有效降低了数字全息三维显示的成本。2014年,Sasaki等^[13]报道了基于16台空间光调制器实现对角尺寸为85 mm、水平视角为5.6°、刷新为20 fps的动态全视差全息三维显示,如图6所示。与Xu等^[11]采用空分复用技术实现彩色显示的做法不同,Sasaki等^[13]利用时分复用技术实现全息彩色显示。为了实现大尺寸全息显示的目标,基于空间光调制器的全息显示尺寸还应继续增大,三维显示分辨率有待提高,由于空间光调制器自身结构的特点,这

些也是空间光调制器研究中遇到的最大问题,有待解决。

图4 全彩色全视差全息再现图像^[11]Fig. 4. Reconstructed full-color full-parallax three-dimensional holographic image^[11].图5 (a) 各向异性的泄漏模式调制器; (b) 彩色全息图^[12]Fig. 5. (a) Anisotropic waveguide modulator and (b) color holographic display^[12].

国内的学者也展开了利用空间光调制器实现全息三维视频显示的研究,并取得一定进展。清华大学荣彰等^[14]研究了利用数字微反射镜将傅里叶变换计算全息编码图记录到全息干板上。北京理工大学Zhang等^[15]研究了基于纯相位调制硅基液晶的全息投影显示。安徽大学刘凯峰等^[16]基于新型

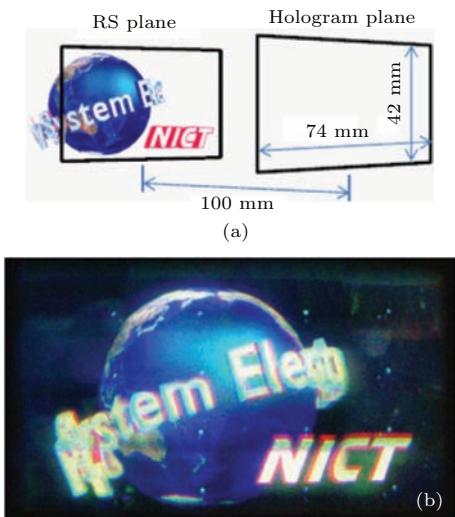


图6 (a) 重建物像参数设计; (b) 视频帧率的重建结果, 地球中心在重建平面后 27 mm 处^[13]

Fig. 6. (a) Design values of the displayed objects and (b) reconstructed three-dimensional image at video rate. The centre of the earth is 27 mm behind the reconstruction plane^[13].

空间光调制器反射型硅基液晶进行全息光电再现。沈川等^[17]分析了基于不同空间光调制器实现彩色全息的方法及系统。上海大学郑华东等研究了真彩色三维物体的计算全息光电再现方法以及彩色全息显示中液晶空间光调制器相位调制偏差的矫正方法^[18–20], 开发了基于视觉的手指与全息影像交互系统^[21], 并取得较好的交互效果。中国科学院光电研究院王皓等^[22]提出了一种扩大基于空间光调制器的计算全息再现像的方法。四川大学唐文华等^[23]研究了基于空间光调制器的时分复用方法实现真彩色全息显示。装甲兵工程学院梁浩聪等^[24]

研究了提高三维物体再现像质量的方法。浙江师范大学王辉等^[25]探讨了计算全息三维显示的信息量简化问题, 并取得一定成果。

4.2 基于全息材料实现的动态全息技术

对全息材料的研究是全息三维视频显示的另一个重要研究方向。在这方面研究中, 全息材料的可刷新速率、使用寿命、显示尺寸、分辨率、衍射效率等是实现全息三维视频显示非常重要的物理参数, 而无法在全息材料中实现视频刷新一直是一个最大的技术瓶颈。近年来, 很多专家学者针对材料开展动态全息研究。2002年, 希腊科学家Papazoglou等^[26]开发了一套利用光折变晶体实现动态全息显示的全息系统, 再现像尺寸为1 mm。然而, 光折变晶体难以生长, 从而导致大尺寸的全息显示无法实现。2010年, 《Nature》报道了美国Blanche等^[27]在光折变聚合物中实现刷新时间为2 s的近实时动态全息显示成果, 显示尺寸为4英寸×4英寸, 如图7所示。2012年, 日本Kinashi等^[28]报道了光折变聚合物材料中刷新时间为0.2 s的准实时动态(即刷新频率为5 Hz)全息显示结果, 如图8所示。同年, Ishii等^[29]利用光致变色材料作为全息介质实现动态全息刷新, 如图9所示, 但其全息图完全擦除时间需要上百毫秒, 如图9(b)所示, 实现视频刷新有图像拖尾等缺陷。上述这些成果是动态全息显示研究近年最新的进展, 但对于像全息电视这类要求实时更新全息图的显示系统, 这些材料仍需要进一步提高。

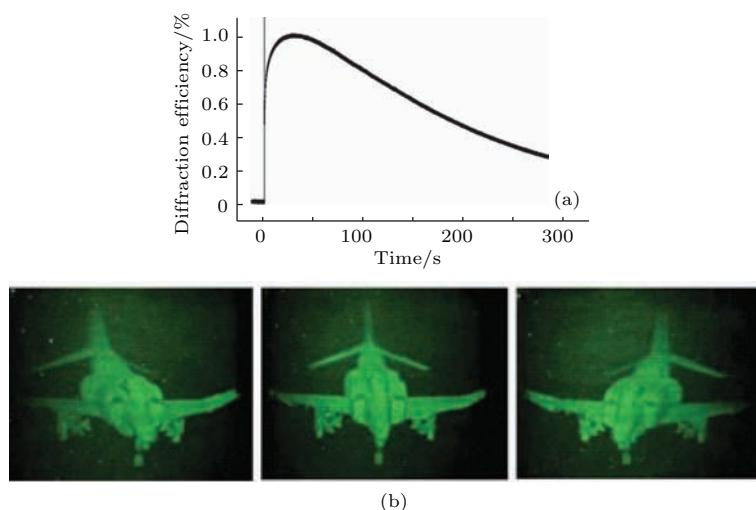


图7 (a) 纳秒脉冲写入的动态全息衍射效率曲线; (b) 拍摄的同一幅全息图左侧、正面和右侧照片^[27]

Fig. 7. Panel (a) is diffraction efficiency dynamics under single nanosecond pulse writing; panel (b) shows images from a hologram observed by the camera when pointed to the left, straight ahead, and to the right, respectively^[27].

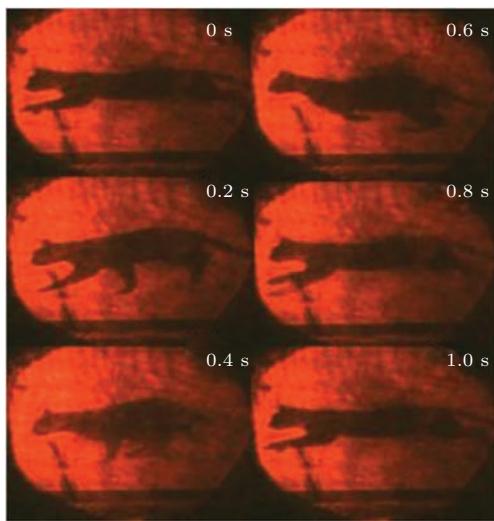


图8 光折变聚合物薄膜中的动态全息图像, 每0.2 s更新一幅图像^[28]

Fig. 8. Photographs showing dynamic holographic images via photorefractive polymeric composite film at 0.2 s intervals^[28].

在动态全息介质的研究方面, 国内学者报道的成果比较少见。上海大学高洪跃博士于2004年攻读博士期间利用超快液晶薄膜实现了全息响应时间在毫秒量级的实时动态全息显示, 突破了动态全息显示的技术瓶颈, 真正实现了无串扰的全息视频刷新^[30,31], 如图10和图11所示。此全息液晶材料中全息图的建立和自擦除时间均在1 ms左右。利用这种材料实现60 Hz全息视频显示(25 Hz及以上即为视频)时, 两幅全息图之间不会有任何串扰^[32,33]。这一突破被美国麻省理工学院的Michael Bove教授评价为是“人类向全息视频显示迈进的重要一步”, 2012年, 此成果还被国际信息显示学会(Society for Information Display)评为国际显示领域11大亮点技术之一, 并在美国著名显示杂志《Information Display》上以封面文章和特刊形式报道。这一成果为开发大尺寸、高分辨率、真三维全息视频显示器奠定了重要基础。

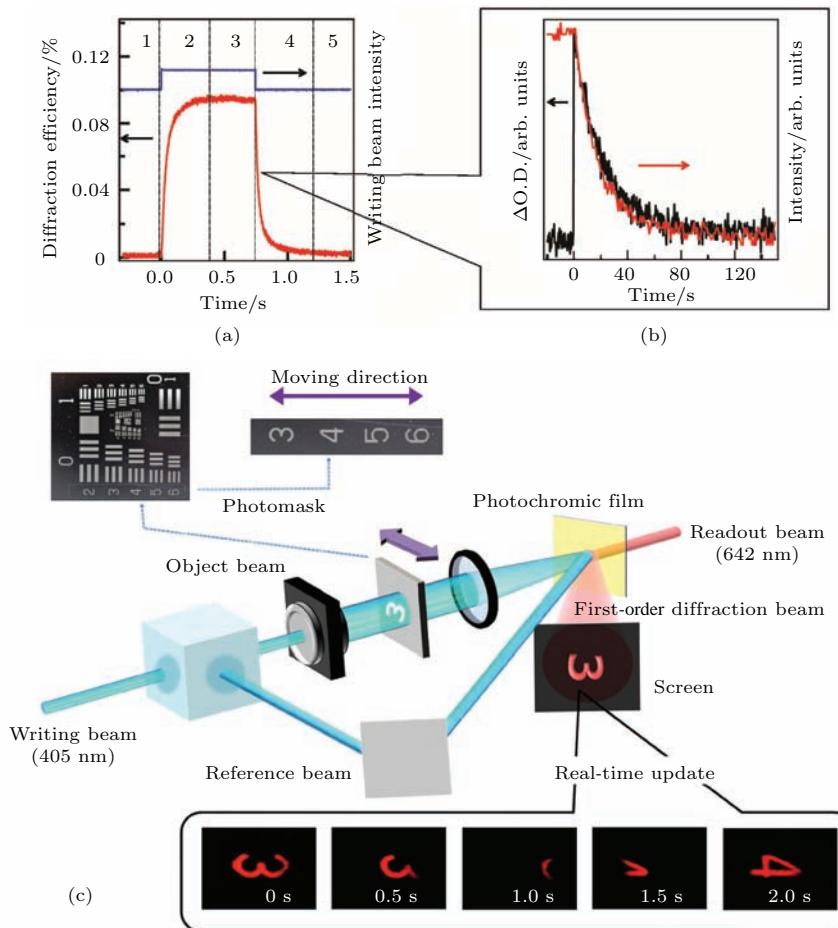


图9 (a) 衍射效率曲线; (b) 衍射光强延迟曲线(红色)和光致变色材料颜色延迟曲线(黑色); (c) 实验光路与实时全息显示二维图像^[29]

Fig. 9. (a) Real-time diffraction efficiency profiles for the first-order diffracted light; (b) decay profile of the first-order diffracted light intensity (red line) and that of the colored species of the photochromic polymer film (black line); (c) optical setup for the real-time holographic recording and the real-time development of the two-dimensional holographic images^[29].

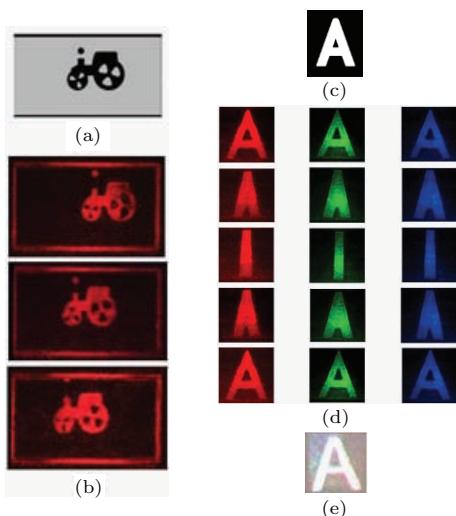


图 10 (a) 输入视频截图; (b) 超快液晶薄膜中全息衍射视频截图; (c) 入射视频截图; (d) R/G/B 单色全息视频图像; (e) RGB 模式彩色全息视频图像

Fig. 10. (a) Incident image on the computer screen; (b) snapshots from holographic video; (c) incident image on the computer screen; (d) snapshots from R/G/B holographic video displaying a moving image; (e) color holographic video.

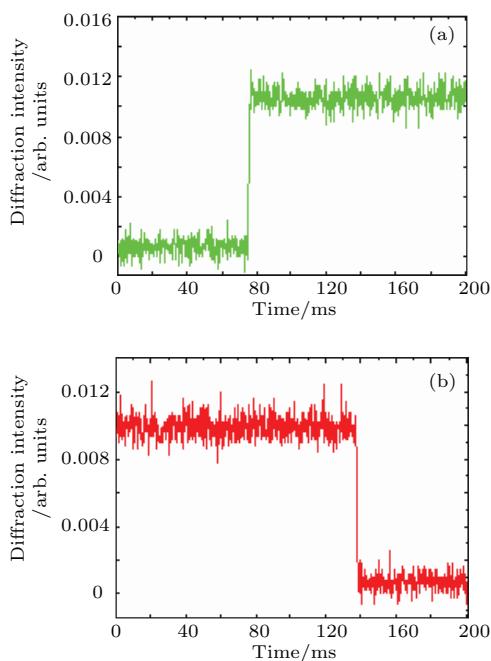


图 11 在超快速液晶膜全息图的 (a) 建立和 (b) 自擦除过程^[31]

Fig. 11. Panels (a) and (b) are the hologram formation and self-erasure processes in super-fast liquid crystal film, respectively^[31].

5 结论与展望

全息三维显示技术以其原理的优越性被认为未来的终极显示技术。目前，静态的全息三维显

示技术已经比较成熟，在某些方面得到了具体应用，但由于制作成本等因素，静态三维全息产品仍未得到大规模的应用。动态全息三维显示一直处于研究阶段，因其在视频三维显示中的巨大应用前景，近年来引起了极大关注。基于空间光调制器的动态数字全息受到器件本身及技术局限的影响，要实现大尺寸、高分辨率和低成本的显示效果具有较大难度。基于动态全息材料的光学全息显示技术受到全息材料性能的影响，主要包括材料的响应速度、衍射效率及制作成本等。光学全息被认为是最有望实现大尺寸、高清晰、全息真三维视频显示的技术。其中，全息材料的刷新速率又是决定材料能否实现全息视频显示的关键因素。这一问题研究中，我国率先在光学材料中实现了视频刷新全息显示，证明中国在实时动态光学全息显示研究方面已经走在了世界前列。目前，国内外研究人员在动态全息显示领域取得了很大进展，将会为实现全息显示技术的市场化这一愿景奠定良好的基础。总之，全息显示是一门集光学、计算科学、材料科学等交叉的技术，各个方面是相互促进与制约的关系，必须全面推进，才能最终将全息显示技术市场化。希望本文能有助于全息研究者掌握国内外最新的全息研究进展，为全息研究工作提供参考。

参考文献

- [1] Benton S A, Bove Jr V M 2008 *Holographic Imaging* (New York: Wiley-Interscience) p5
- [2] Poon T C 2006 *Digital Holography and Three-Dimensional Display* (Berlin: Springer) p16
- [3] Pan Y, Xu X, Liang X, Lum Z A, Zheng R, Lwin P P M Y 2013 *Proc. SPIE* **8644** 86440F
- [4] Gao H Y, Pu H, Gao B, Yin D, Liu J, Gan F 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 201105
- [5] Li J C, Tu H Y, Yeh W C, Gui J B, Cheng C J 2014 *Appl. Opt.* **53** G222
- [6] Gao H Y, Liu J C, Gan F, Ma B 2009 *Appl. Opt.* **48** 3014
- [7] Gao H Y, Zhou Z X 2007 *Proc. SPIE* **6595** 65950W
- [8] Ren X B, Zhai T R, Ren Z, Lin J, Zhou J, Liu D H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3208 (in Chinese) [任晓斌, 翟天瑞, 任芝, 林晶, 周静, 刘大禾 2009 物理学报 **58** 3208]
- [9] Stanley M, Smith M A G, Smith A P 2004 *Proc. SPIE* **5249** 297
- [10] Choi K, Kim J, Lim Y 2005 *Opt. Express* **13** 10494
- [11] Xu X W, Liang X N, Pan Y C, Zheng R T, Abel Lum Z M 2013 *Proc. SPIE* **8644** 864409
- [12] Smalley D E, Smithwick Q Y J, Bove Jr V M, Barabas J, Jolly S 2013 *Nature* **498** 313
- [13] Sasaki U, Yamamoto K, Wakunami K, Ichihashi Y, Oi R, Senoh T 2014 *Sci. Rep.* **4** 6177

- [14] Zhang R, Shu L, Yan H, Li T, Xu J 2010 *Semiconductor Optoelectron.* **31** 936 (in Chinese) [荣彭, 林舒, 黄严, 李滔, 徐晶 2010 半导体光电 **31** 936]
- [15] Zhang H, Xie J H, Liu J, Wang Y T 2009 *Chin. Opt. Lett.* **7** 1101
- [16] Liu K F, Shen C, Zhang C, Wei S 2014 *Acta Photon. Sin.* **43** 0509003 (in Chinese) [刘凯峰, 沈川, 张成, 韦穗 2014 光子学报 **43** 0509003]
- [17] Shen C, Wei S, Liu K F, Zhang F, Li H, Wang Y 2014 *Lasers Optoelectron. Prog.* **51** 030005 (in Chinese) [沈川, 韦穗, 刘凯峰, 张芬, 李浩, 王岳 2014 激光与光电子进展 **51** 030005]
- [18] Zheng H D, Yu Y J, Wang T, Dai L M 2009 *Chin. Opt. Lett.* **7** 1151
- [19] Zheng H D, Yu Y J, Dai L M, Wang T 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6145 (in Chinese) [郑华东, 于瀛洁, 代林茂, 王涛 2010 物理学报 **59** 6145]
- [20] Yu Y J, Dai L M, Zheng H D, Wang T 2010 *Lasers Optoelectron. Prog.* **47** 100901 (in Chinese) [于瀛洁, 代林茂, 郑华东, 王涛 2010 激光与光电子进展 **47** 100901]
- [21] Yu Y J, Li Y L, Zheng H D 2009 *Electro-opt. technol. appl.* **24** 61 (in Chinese) [于瀛洁, 李雨浪, 郑华东 2009 光电技术应用 **24** 61]
- [22] Wang H, Bi Y, Li F, Qi Y 2013 *Chin. J. Lasers* **40** 0309001 (in Chinese) [王皓, 毕勇, 李芳, 亓岩 2013 中国激光 **40** 0309001]
- [23] Tang W H, Wang D, Wang J, Wang Q H 2014 *Optoelectron. Technol.* **34** 136 (in Chinese) [唐文华, 王迪, 王军, 王琼华 2014 光电子技术 **34** 136]
- [24] Liang H C, Jiang X Y, Niu S L, Yan X P, Zhao K 2014 *Opt. Tech.* **40** 230 (in Chinese) [梁浩聪, 蒋晓瑜, 牛树来, 闫兴鹏, 赵锴 2014 光学技术 **40** 230]
- [25] Wang H, Jin H Z, Wu D Y, Li Z G 2014 *Chin. J. Lasers* **41** 0209012 (in Chinese) [王辉, 金洪震, 姚东远, 李志光 2014 中国激光 **41** 0209012]
- [26] Papazoglou D G, Loulakis M, Siganakis G, Vainos N A 2002 *Opt. Express* **10** 280
- [27] Blanche P A, Bablumian A, Voorakaranam R, Christenson C, Lin W, Gu T, Flores D, Wang P, Hsieh W Y, Kathaperumal M, Rachwal B, Siddiqui O, Thomas J, Norwood R A, Yamamoto M, Peyghambarian N 2010 *Nature* **468** 80
- [28] Kinashi K, Wang Y, Tsujimura S, Sakai W, Tsutsumi N 2012 *OSA Technical Digest JM3A.58*
- [29] Ishii N, Kato T, Abe J 2012 *Sci. Rep.* **2** 819
- [30] Gao H Y 2007 *Ph. D. Dissertation (Haerbing: Harbin Institute of Technology)* (in Chinese) [高洪跃 2007 博士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学)]
- [31] Gao H Y, Li X, He Z, Su Y, Poon T C 2013 *J. Phys.: Conf. Ser.* **415** 012052
- [32] Gao H Y, Liu J C, Poon T C 2013 *OSA Technical Digest DTh2A.1*
- [33] Gao H Y, Liu J C, Poon T C 2013 *Society for Information Display Symposium Digest of Technical Papers* **44** 1321

SPECIAL ISSUE—Liquid crystal photonics and applications

Latest developments of dynamic holographic three-dimensional display*

Zeng Chao Gao Hong-Yue[†] Liu Ji-Cheng Yu Ying-Jie Yao Qiu-Xiang
Liu Pan Zheng Hua-Dong Zeng Zhen-Xiang

(*Laboratory of Applied Optics and Metrology, Department of Precision Mechanical Engineering, School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200072, China*)

(Received 9 March 2015; revised manuscript received 6 June 2015)

Abstract

Holographic three-dimensional (3D) display is a true 3D display technique, which can provide realistic image of a real object or a scene because holography has the ability to reconstruct both the intensity and phase information, i.e., the wave front of the object or scene. Therefore, it could allow the observers to perceive the light as it is scattered by the real object itself without any special eyewear, which is quite different from other 3D display techniques, such as stereoscopic displays and volumetric 3D displays. In this paper, the achievements and developments of the latest new holographic 3D displays are presented. Holographic 3D displays can be divided into static holographic 3D displays and dynamic holographic 3D displays. Here, we briefly introduce the principle of holographic 3D display technique and static holographic 3D displays, and focus on dynamic holographic 3D displays. Large-size, high-resolution and color static holographic 3D displays have already been successfully fabricated and applied in some areas, such as holographic 3D maps and holographic 3D images. However, dynamic holographic 3D displays based on both optical materials and spatial light modulators (SLMs) are still under research, which is a challenge to their applications. Some holographic researchers study the holographic 3D displays based on the SLMs for large-size and large view angle display, but it is difficult to realize them because of limitations of SLMs and there still needs much effort to solve these problems in SLMs. Other holographic researchers work on dynamic holographic materials, such as inorganic crystals, photorefractive polymer, photochromic material etc. The response time and diffraction efficiency are key factors to these materials. Compared with other holographic media, liquid crystals with super-fast response time (about 1 ms) have been reported, which makes it possible to realize video refresh-rate holographic displays. The achievements of dynamic holography, which are helpful for holographic 3D video applications, are presented. Recently, real-time dynamic holographic display has been obtained in super-fast response liquid crystal films, which makes it possible that large-size, high-definition, color holographic 3D video displayers are developed by using these liquid crystal films in the future.

Keywords: holographic three-dimensional video display, super-fast liquid crystal film, real-time holographic display, true three-dimensional display

PACS: 42.40.Ht, 42.70.Ln, 42.40.-i

DOI: [10.7498/aps.64.124215](https://doi.org/10.7498/aps.64.124215)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11474194, 11004037, 61101176) and the Natural Science Foundation of Shanghai, China (Grant No. 14ZR1415500).

† Corresponding author. E-mail: gaohty@i.shu.edu.cn

胆甾相和蓝相液晶的透射和反射特性

窦虎 马红梅 孙玉宝

Transmittance and reflectance of cholesteric and blue phase liquid crystal

Dou Hu Ma Hong-Mei Sun Yu-Bao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 126101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.126101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于液晶和 DSP 的强光局部选通智能网络摄像系统研究

Study on the partial gating smart network camera for controlling strong light intensity based on DSP and liquid crystal

物理学报.2013, 62(21): 214210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.214210>

一种液晶透镜盒间隙的测试方法

A measurement method of cell gap for liquid crystal lens

物理学报.2013, 62(17): 174210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.174210>

低压驱动液晶透镜设计的研究

A design of liquid crystal lens with low voltage driving

物理学报.2013, 62(16): 164212 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.164212>

楔形盒染料掺杂胆甾相液晶激光器研究

Investigation of the laser action in a dye-doped cholesteric liquid crystal wedge cell

物理学报.2013, 62(4): 044219 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.044219>

基于人眼视觉的集成成像三维显示分辨率的比较

Comparison of the resolutions of integral imaging three-dimensional display based on human vision

物理学报.2012, 61(8): 084212 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.084212>

专题: 液晶光学及应用

胆甾相和蓝相液晶的透射和反射特性*

窦虎 马红梅 孙玉宝[†]

(河北工业大学应用物理系, 天津 300401)

(2014年12月24日收到; 2015年3月1日收到修改稿)

针对蓝相液晶显示器中的暗态漏光特性, 采用时域有限差分方法模拟计算了胆甾相液晶的平面态和焦锥态以及蓝相II态液晶的透射和反射特性, 得到了它们在正交和平行偏振片之间的漏光, 并提出了计算等效旋光能力的公式以比较它们的旋光能力。通过对比焦锥态和蓝相液晶的旋光能力和漏光特性发现, 采用焦锥态替代蓝相液晶而得到良好的暗态特性是一种可行的方法。通过研究它们的布拉格反射特性, 得知蓝相液晶的布拉格反射与平面态相似, 但反射强度小, 焦锥态无明显的布拉格反射特性。

关键词: 旋光能力, 蓝相液晶, 胆甾相液晶, 布拉格反射

PACS: 61.30.Mp, 42.79.Kr, 42.70.Df, 61.30.Cz

DOI: 10.7498/aps.64.126101

1 引言

蓝相液晶显示器具有亚毫秒级响应时间和宽视角特性, 解决了现有液晶显示器的难题, 被认为是下一代液晶显示技术^[1-4]。蓝相液晶显示器至今未能产业化, 其主要原因是驱动电压高、磁滞效应和暗态漏光现象, 其中驱动电压和磁滞效应可以通过设计电极的形状来降低, 甚至消除; 暗态漏光是蓝相液晶本身的双螺旋结构造成的, 要消除暗态漏光则非常困难^[5,6]。Wu Shin-Tson教授研究组^[5]提出了应用胆甾相液晶的旋光能力来解释蓝相液晶的暗态漏光特性, 但是只给出了定量的拟合公式, 没有给出蓝相液晶与胆甾相液晶之间的差别, 也未提出合适的模拟计算。相比于蓝相液晶, 胆甾相液晶的光学特性和旋光特性已经研究得比较详细^[7-10], 并且在双稳态胆甾相液晶显示器方面得到了广泛应用。2009年, 邓罗根和赵找栗^[11]应用横向电场驱动平面织构胆甾相液晶, 研究了胆甾相液晶的螺距和反射特性, 获得了电场控制的反射式彩色显示, 但是尚未在动态响应的液晶显示器中得

到应用。

本文采用时域有限差分方法研究胆甾相液晶的平面态和焦锥态以及蓝相II态液晶的光学特性, 提出了计算蓝相液晶等效旋光能力的公式来研究胆甾相液晶和蓝相液晶的光学特性, 包括正交和平行偏振片下的透光特性, 并通过对比给出蓝相液晶、焦锥态与平面态旋光能力。研究以上三种液晶态对圆偏振光的布拉格反射特性, 并讨论了焦锥态液晶应用于液晶显示器的可能。

2 胆甾相液晶的平面态、焦锥态和蓝相II态液晶的光学特性

2.1 等效旋光能力

胆甾相液晶的平面态在科学的研究和应用研发方面已有广泛的应用。由于平面态的选择性反射现象对于液晶的螺距非常敏感, 所以可以通过调节温度或电场^[10-13]来改变胆甾相液晶的螺距, 从而控制反射式胆甾相液晶器件发射不同颜色的光。当胆甾相液晶处于焦锥态时, 液晶层中形成很多小碎

* 国家自然科学基金(批准号: 61475042, 11304074, 11274088)和教育部新世纪优秀人才计划项目(批准号: NCET-11-0931)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: sun_yubao@163.com

畴, 每个液晶畴的螺旋轴是任意排列的. 当胆甾相液晶处于平面态时, 由于其周期性的排列结构, 会反射某个特定波长范围内的光, 这种现象被称为布拉格反射, 反射波带的中心波长称为布拉格中心反射波长, 波长范围宽度称为波带宽度, 满足(1)式^[14], 式中, \bar{n} 是液晶材料的平均折射率, Δn 是液晶材料的双折射, p 是胆甾相液晶的螺距. 布拉格反射现象是由于液晶层旋光能力的变化而导致的, 根据经典液晶物理理论, 平面态胆甾相液晶的旋光能力满足(2)式^[15].

$$\lambda_B = \bar{n}p, \quad \Delta\lambda = p\Delta n, \quad (1)$$

$$R_0 = \frac{\pi p}{4\lambda} \frac{(\Delta n)^2}{(\lambda^2/\lambda_B^2 - 1)}, \quad (2)$$

式中, λ_B 为布拉格中心反射波长, $\Delta\lambda$ 为布拉格反射波长波段, R_0 为胆甾相液晶层的旋光能力. 旋光能力在布拉格反射中心波长两侧分别为正负值, 代表着左旋和右旋.

如图1所示, 晶格结构为简单立方的蓝相II态液晶, 其晶格结构如图1(a)所示, 在这些圆柱内的液晶分子呈双螺旋排列^[1-3]; 整个晶格内液晶的分布如图1(b)所示, 图中的红线表示圆柱中心的分子排列.

在液晶的光学仿真模拟中常用的方法是矩阵式法, 主要有琼斯矩阵法、拓展琼斯矩阵法和 4×4 Berreman法. 矩阵式法是将液晶分子沿光的传播方向分层, 计算各层液晶对光的相位调制情况, 其实质是只考虑了光在一维方向的传播而完全忽略了光波在传播过程中的折射效应, 适合于液晶变化很简单的系统, 比如单畴液晶器件、共面转换液晶器件和多畴垂面排列液晶器件等^[16], 对蓝相液

晶这种具有复杂液晶分布的系统, 光在其中传播时存在复杂的折射过程, 因此采用传统光学计算方法难以得到精确的结果. 时域有限差分法^[17-20]是采用麦克斯韦微分方程来计算光传播过程的变化情况, 把光在介质中的传播过程分解为电场强度 \mathbf{E} 和磁场强度 \mathbf{H} 在空间上相互迭代的形式, 并在时间轴上逐步推进求解, 从而可以准确得到光波在任意时刻的衍射、散射、折射等特性. 为了将该方法引入到液晶这样的各向异性介质中, Kriezis 和 Elston^[18]提出了时域有限差分法的另一种差分迭代形式: 采用电位移矢量 \mathbf{D} 和磁场强度 \mathbf{H} 进行空间迭代, 再根据 $\mathbf{E} = \epsilon_r^{-1}\mathbf{D}$ 求出电场强度 \mathbf{E} , 其中 ϵ_r^{-1} 为相对介电常数张量, 与待计算介质系统的详细情况有关, 对于蓝相液晶或者胆甾相液晶来说, 就是它们在很小的尺度(Yee元胞)内的液晶分布情况. 我们已经研究了蓝相II态液晶中的液晶分子的分布情况^[21], 胆甾相液晶的平面态是比较简单的分层结构, 焦锥态可以从平面态结构得到, 将在下文中给出. 计算中, 把同一个液晶层夹在两正交或两平行偏振片之间, 设液晶盒的起偏器沿着 x 方向, 那么通过正交理想偏光片后的透过率就可以用 $|\mathbf{E}_y|^2 = I_y$ 来表示, 其中 \mathbf{E}_y 表示光通过液晶层后在 y 方向上的电场分量. 同理, 通过平行理想偏光片后的透过率就可以用 $|\mathbf{E}_x|^2 = I_x$ 来表示, 其中 \mathbf{E}_x 表示光通过液晶层后在 x 方向上的电场分量. 蓝相液晶分子的排列在同一个周期横截面内的不同位置上是不同的, 因此在不同的位置处透光性能也不同, 表现的旋光性能也不同. 采用上面的旋光能力公式描述时, 对于不同的位置, 旋光能力的描述也是复杂的, 并且因为每个周期的尺寸约为 $0.2 \mu\text{m}$, 在使用普通光学显微镜观察时, 不可能观察到每个

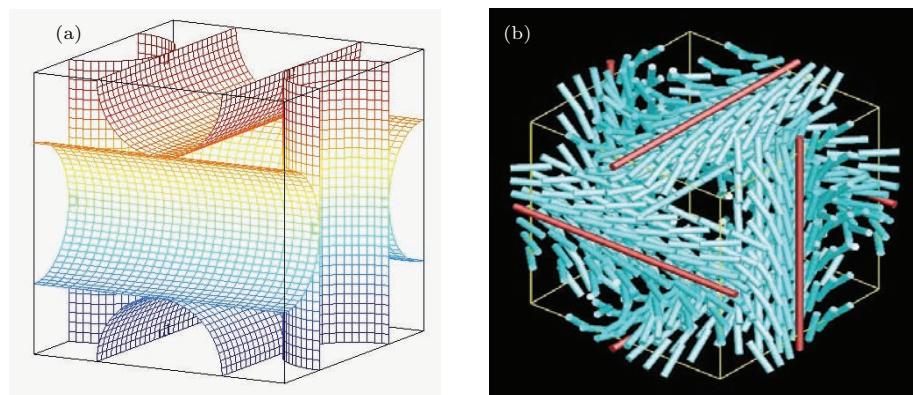


图1 (a) 蓝相II态液晶分子的晶格示意图; (b) 晶格内液晶的双螺旋分子排列

Fig. 1. (a) Schematic of blue phase liquid crystal II; (b) liquid crystal molecules arrangement in a lattice.

周期中的光学变化, 而只能观察到整体的光学透过率。因此, 我们采用等效旋光能力来描述蓝相液晶的整体旋光特性。液晶的旋光性会使通过该液晶后的偏振光发生偏振方向的变化, 在液晶层的厚度一定时这种变化的程度就是它的旋光能力。因此在偏振片正交的液晶盒中液晶的旋光能力将直接影响液晶盒的漏光量, 基于液晶的旋光能力与漏光特性的这种紧密联系, 在实验中可以利用便于测量的液晶盒的透过率来计算出液晶的旋光能力, 称为等效旋光能力。对于液晶盒横截面内旋光能力不尽相同的复杂液晶系统, 等效旋光能力是横截面内各处旋光能力的统计平均值。在计算中, 等效旋光能力可以使用透过光在 x 和 y 方向的电场分量来定义, 旋转方向可以使用检偏器的旋转来寻找, 当旋光量处于 $\pm 90^\circ$ 范围内, 液晶层的厚度为 d , 偏振光通过单位厚度的液晶层后偏振方向发生改变的角度即是这个液晶盒的等效旋光能力, 可以用(3)式表示:

$$\begin{aligned} R_0 &= \frac{1}{d} \tan^{-1} \left(\frac{E_y}{E_x} \right) \\ &= \frac{1}{d} \tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{I_y}{I_x}} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

R_0 为该液晶的旋光能力。实际测量中, 可以测量正交和平行偏光片下的平均透过率来得到旋光能力的大小。

2.2 平面态胆甾相液晶的透光特性和旋光能力

在模拟计算中, 平面态胆甾相液晶的螺旋轴垂直于基板, 在平行于基板的平面内的液晶分子处于相同的排列状态, 因此在采用时域有限差分方法的 Yee 元胞分割时, 只考虑液晶层厚方向的液晶分子排列状态的变化。液晶层厚度为 $9 \mu\text{m}$, 液晶材料的寻常折射率 $n_o = 1.55$, 异常折射率 $n_e = 1.65$, 螺距 $p = 270 \text{ nm}$ 。在光的传播方向使用完全匹配层来终止计算空间和吸收反射波, 在 x 和 y 方向上, 使用周期性边界条件来模拟液晶的周期结构。Yee 元胞的大小为 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 10 \text{ nm}$, 计算中采用的时间步长 $\Delta t = 1.6 \times 10^{-17} \text{ s}$, 这样在每个时间步长中, 光的传播距离小于元胞的尺寸, 从而可以保证计算的准确性 [19,20]。

平面态胆甾相液晶的透过率如图 2 所示, 图中黑线对应正交偏振片, 红线对应平行偏振片的情况。使用(3)式计算得到整个液晶盒的旋光量在 $\pm 90^\circ$ 范围内的等效旋光能力, 如图 3 中黑线所示;

作为对比, 使用(2)式计算得到的胆甾相液晶的旋光能力, 如图 3 中红线所示。从图 3 可以看出, 等效旋光能力和理论计算得到的旋光能力相符。

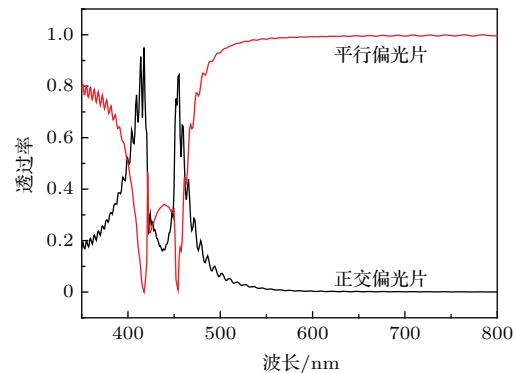


图 2 透过平面态胆甾相液晶层后的光波长和透过率的关系
Fig. 2. Transmittance versus wavelength of the light transmitting planar state cholesteric liquid crystal.

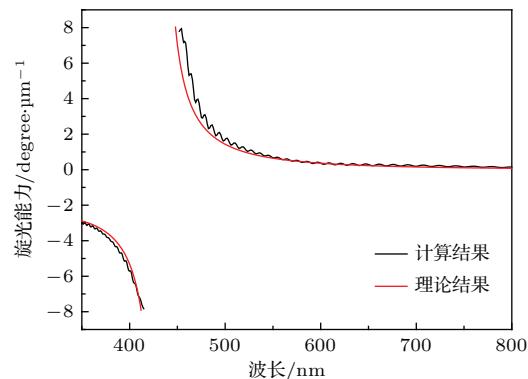


图 3 平面态胆甾相液晶的旋光能力和波长的关系
Fig. 3. Optical rotatory power of planar texture cholesteric liquid crystal versus wavelength.

2.3 蓝相II态液晶和焦锥态胆甾相液晶的透光特性和旋光能力

液晶盒中蓝相液晶结构为图 1 所示的晶格结构的堆叠; 焦锥态的建立过程为: 将平面态胆甾相液晶截断为很多小段, 每个小段尺寸约为 1 个螺距, 将每个小段在空间随机排列, 即螺旋轴方向为随机方向, 达到焦锥态结构的要求。计算中所用液晶材料参数与 2.2 节中的液晶参数相同, 正交和平行偏振片下的透光特性如图 4(a) 和图 4(b) 所示, 并采用(3)式得到蓝相 II 态液晶和焦锥态液晶的等效旋光能力。为了方便比较, 只考虑旋光能力的大小, 不分正负号, 结果如图 5 所示。与平面态胆甾相液晶相比, 蓝相液晶和焦锥态液晶在正交偏振片之间的漏光量、等效旋光能力都大幅降低。通过计算结果的对比可以得知: 在正交偏光片情况下, 蓝相液

晶有明显的漏光, 而焦锥态液晶的整体透过率小; 在平行偏光片情况下, 焦锥态在不同的波长情况下透过率都很好。如果将焦锥态每个小段的尺寸调得更小, 则各向同性特性会更好, 可以实现更好的暗态效果。

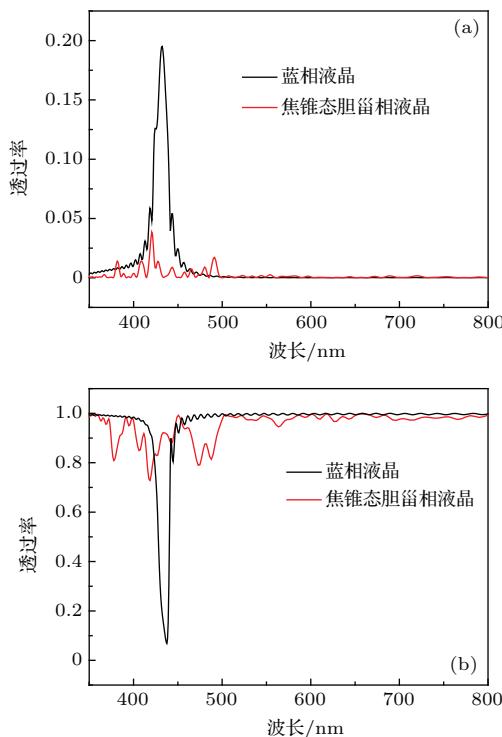


图4 蓝相液晶盒和焦锥态胆甾相液晶盒的透过率 (a) 两偏振片垂直; (b) 两偏振片平行

Fig. 4. Transmittance of blue phase and focal conic texture cholesteric liquid crystal cells: (a) the crossed polarizers; (b) the parallel polarizers.

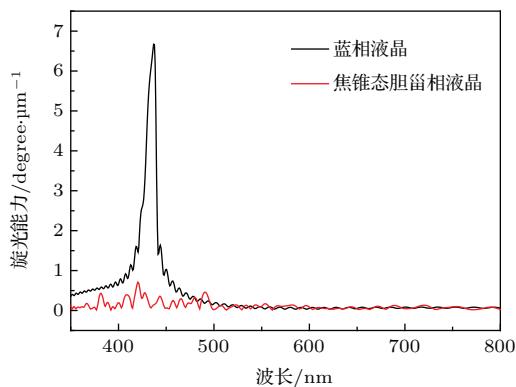


图5 蓝相液晶和焦锥态胆甾相液晶的旋光能力

Fig. 5. Optical rotatory power of blue phase and focal conic texture cholesteric liquid crystal.

2.4 布拉格反射

选择与液晶的螺旋方向相同的圆偏振光作为入射光, 计算胆甾相液晶的平面态和焦锥态以及

蓝相II态液晶的反射光强与波长之间的关系, 如图6所示。平面态和蓝相液晶都具有很明显的发射波峰和波带, 而焦锥态胆甾相液晶的反射在靠近平面态反射波峰附近有较大的反射, 其他波长处的反射都较小。平面态和蓝相液晶的选择性反射通常被称为布拉格反射, 其布拉格中心反射波长都满足(1)式, 但是因为蓝相液晶的排列结构不如平面态胆甾相液晶的整齐, 所以其反射强度也较弱, 同时反射波长的带宽也窄; 焦锥态中液晶的排列更加混乱, 因此其反射强度更弱, 同时因为螺旋轴的混乱排列, 导致在远离布拉格中心反射波长处也有较大的反射率。

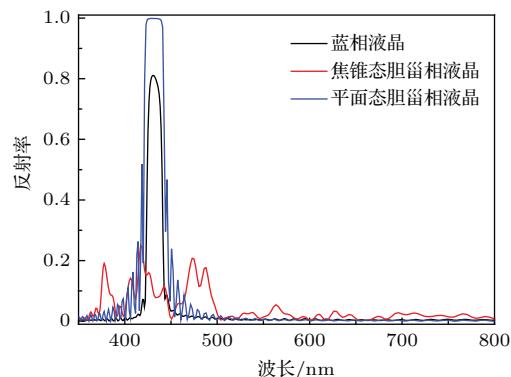


图6 圆偏振光在不同液晶层中的布拉格反射现象

Fig. 6. Bragg reflection of the circular polarized light which transmits different liquid crystal layers.

为了解释焦锥态胆甾相液晶的反射现象, 我们研究了平面态胆甾相液晶螺旋轴方向对透过率的影响。平面态胆甾相的螺旋轴都沿着 z 轴(光的传播方向), 逐渐倾斜螺旋轴, 不同倾斜角度情况下的布拉格反射现象如图7所示, θ 为胆甾相液晶的螺旋轴与 z 方向的夹角。从图7可以看出: 布拉格中心反射波长和反射带宽会随着 θ 角的增加而变大, 反射光的峰值会随着 θ 角的增加而减小; 当 $\theta = 45^\circ$ 时, 最大反射率仅有大约30%; 当 $\theta = 60^\circ$ 时, 可见光范围内已无反射光峰值。出现这种现象的主要原因: 是随着 θ 值的增加, 液晶分子在 z 轴上旋转一个周期所需要的距離会变大, 也就等效于液晶分子的螺距变大。将液晶分子在 z 轴上旋转一个周期的长度定义为 p' , 那么 p' 应该满足

$$p' = \frac{p}{\cos \theta}. \quad (4)$$

结合(1)式即可得出: θ 值的增加将导致布拉格中心反射波长和反射波段带宽增大。在焦锥态中, 胆甾相液晶的螺旋轴方向是非常混乱的, 因此在一个位置的 z 轴上会对应许多不同的 p' , 使液晶

层拥有一系列不同的布拉格中心反射波长和反射带宽, 它们的共同作用使得焦锥态胆甾相液晶的透过率相较于另外两种液晶状态波动很大, 又由于 p' 是在 p 的基础上随机倾斜螺旋轴方向得到的, 所以在波长为 p 处的透过率变化最大, p 是 $\theta = 0$ 时的 p' 值.

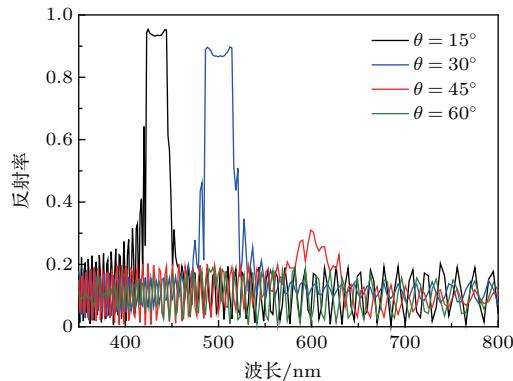


图7 螺旋轴处于不同倾斜角度下圆偏振光的布拉格反射
Fig. 7. Bragg reflection of the circular polarized light for the helix axis of cholesteric liquid crystal with different tilt angles.

3 结 论

本文研究了胆甾相液晶的平面态和焦锥态以及蓝相II态液晶的透射和反射性能. 由于蓝相液晶存在布拉格反射, 所以在设计时要避免布拉格反射发生在可见光波段. 由图4(a)可知, 正交偏振片情况下, 在布拉格中心反射波长右侧的长波侧的透过率要低于短波侧, 因此蓝相液晶显示器中使用的液晶螺距通常都要设置得小一些. 尽管采用小螺距的蓝相液晶可以获得较好的暗态, 但依然有少量漏光, 从而导致对比度下降^[6,22]. 通过对焦锥态和蓝相液晶在正交偏光片之间的漏光特性, 可知胆甾相液晶的焦锥态也具有较好的暗态, 如果存在实现焦锥态中液晶更加混乱排列的技术手段, 则可以实现更好的暗态, 就有可能制作出新型的液晶显示器.

参考文献

- [1] Ge Z, Gauza S, Jiao M, Xianyu H, Wu S T 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 101104
- [2] Chen K M, Gauza S, Xianyu H, Wu S T 2010 *J. Display Technol.* **6** 49
- [3] Li Y, Jiao M, Wu S T 2010 *Opt. Express* **18** 16486
- [4] Dupuis A, Marenduzzo D, Yeomans J M 2005 *Phys. Rev. E* **71** 011703
- [5] Liu Y, Lan Y F, Zhang H, Zhu R, Xu D, Tsai C Y, Lu J, Sugiura N, Lin Y, Wu S T 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 131102
- [6] Yan J, Luo Z, Wu S T, Shiu J W, Lai Y C, Cheng K L, Liu S H, Hsieh P J, Tsai Y C 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 011113
- [7] Yang D K, Chien L C, Doane J W 1992 *Appl. Phys. Lett.* **60** 3102
- [8] Kopp V I, Fan B, Vithana H K M, Genack A Z 1998 *Opt. Lett.* **23** 1707
- [9] Matsui T, Ozaki R, Funamoto K, Ozaki M, Yoshino K 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 3741
- [10] Shim K S, Heo J U, Jo S I, Lee Y J, Kim H R, Kim J H, Yu C J 2014 *Opt. Express* **22** 15467
- [11] Deng L G, Zhao Z L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7773 (in Chinese) [邓罗根, 赵找栗 2009 物理学报 **58** 7773]
- [12] Huang X Y, Yang D K, Bos P J, Doane J W 1995 *J. Soc. Inf. Display* **3** 165
- [13] Hashimoto K, Okada M, Nishiguchi K, Masazumi N, Yamakawa E, Taniguchi T 1998 *J. Soc. Inf. Display* **6** 239
- [14] John W S, Fritz W J, Lu Z J, Yang D K 1995 *Phys. Rev. E* **51** 1191
- [15] Korpel A 1978 *Appl. Opt.* **17** 2037
- [16] Yang D K, Wu S T 2006 *Fundamentals of Liquid Crystal Display* (Chichester: John Wiley & Sons, Ltd)
- [17] Yang P, Liou K N 1996 *J. Opt. Soc. Am. A* **13** 2072
- [18] Kriezis E E, Elston S J 1999 *Opt. Commun.* **165** 99
- [19] Kriezis E E, Elston S J 2000 *Opt. Commun.* **177** 69
- [20] Ogawa Y, Fukuda J, Yoshida H, Ozaki M 2013 *Opt. Lett.* **9** 3380
- [21] Dou H, Yu Y N, Ma H M, Sun Y B 2015 *Chin. J. Liq. Cryst. Disp.* **30** 16 (in Chinese) [窦虎, 于亚楠, 马红梅, 孙玉宝 2015 液晶与显示 **30** 16]
- [22] Lan Y F, Liu Y, Huang P J, Xu D, Tsai C Y, Lin C H, Sugiura N, Wu S T 2014 *App. Phys. Lett.* **105** 011903

SPECIAL ISSUE—Liquid crystal photonics and applications

Transmittance and reflectance of cholesteric and blue phase liquid crystal*

Dou Hu Ma Hong-Mei Sun Yu-Bao[†]

(Department of Applied Physics, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)

(Received 24 December 2014; revised manuscript received 1 March 2015)

Abstract

Blue phase liquid crystal display (BPLCD) is emerging as next-generation display, because of its fast response speed and very wide viewing angle. However, it has some weak points to be improved. The light leakage at the dark state affects the contrast ratio, and needs to be analyzed and improved. Considering the double-twist structure of blue phase liquid crystal (BPLC) and the simple twist structure of cholesteric liquid crystal (ChLC), the two twist structures are similar. The transmittances and reflectances of planar and focal conic texture of cholesteric liquid crystal and blue phase II liquid crystal are simulated by finite-difference time domain (FDTD) method. The FDTD method is based on the Maxwell's equation, and can calculate the optical rotatory power directly. The effective optical rotatory powers of the three liquid crystal states are proposed and compared using the light leakages at the cell with crossed and parallel polarizers. The results show that the transmittance of BPLC with crossed polarizers is lower than that of planar texture and larger than that of focal conic texture of ChLC. The optical rotation of BPLC is not the same at any point in one periodic cross section in the light path because the liquid crystal arrangement is complex, the effective optical rotatory power is defined as the average value of the optical rotatory powers at all points. Comparing with the optical rotatory powers of planar and focal conic textures of ChLC, the optical rotatory power of BPLC is less than that of planar texture and larger than that of focal conic texture. Moreover, the Bragg reflections are also simulated, the results show that blue phase liquid crystal is similar to planar state cholesteric liquid crystal, only the reflection intensity is smaller, and no obvious Bragg reflection appears in focal conic state cholesteric liquid crystal. Considering the optical rotation and Bragg reflection, the light leakage and reflective light of BPLCD cannot be ignored if the helix pitch is not less enough, however, these of focal conic texture of ChLC are very small compared with those of BPLC, as a result, the focal conic texture of ChLC can replace blue phase liquid crystal to obtain the good dark state and high contrast ratio.

Keywords: optical rotatory power, blue phase liquid crystal, cholesteric liquid crystal, Bragg reflection

PACS: 61.30.Mp, 42.79.Kr, 42.70.Df, 61.30.Cz

DOI: [10.7498/aps.64.126101](https://doi.org/10.7498/aps.64.126101)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61475042, 11304074, 11274088) and the Program for New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education of China (Grant No. NCET-11-0931).

† Corresponding author. E-mail: sun_yubao@163.com

基于混合液晶分子动力学模拟比较液晶分子旋转黏度大小

王启东 彭增辉 刘永刚 姚丽双 任淦 宣丽

Rotational viscosity comparison of liquid crystals based on the molecular dynamics of mixtures

Wang Qi-Dong Peng Zeng-Hui Liu Yong-Gang Yao Li-Shuang Ren Gan Xuan Li

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 126102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.126102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种自适应光学系统响应矩阵的直接计算方法

Direct computation of the interaction matrix of adaptive optical system

物理学报.2014, 63(14): 149501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.149501>

自适应光学系统倾斜校正回路的最优闭环带宽

Optimal closed-loop bandwidth of tip-tilt correction loop in adaptive optics system

物理学报.2014, 63(6): 069502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.069502>

大气湍流三维波前探测模式层析算法分析

Analysis of modal tomography for three-dimensional wavefront sensing of atmosphere turbulence

物理学报.2013, 62(16): 169501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.169501>

快速响应的硅基纯相位液晶器件对动态大气湍流波前的校正能力研究

Dynamic wavefront correction with a fast liquid-crystal on silicon device of pure phase

物理学报.2012, 61(8): 089501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.089501>

相位差波前检测方法应用于平移误差检测的实验研究

Experimental study on phase diversity wavefront sensing technology in piston error detection

物理学报.2012, 61(6): 069501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.069501>

专题: 液晶光学及应用

基于混合液晶分子动力学模拟比较液晶分子旋转黏度大小^{*}

王启东¹⁾²⁾ 彭增辉¹⁾ 刘永刚¹⁾ 姚丽双¹⁾ 任淦³⁾ 宣丽^{1)†}

1)(中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 应用光学国家重点实验室, 长春 130022)

2)(中国科学院大学, 北京 100039)

3)(中国科学院理论物理研究所, 理论物理国家重点实验室, 北京 100190)

(2015年1月19日收到; 2015年5月5日收到修改稿)

提高液晶波前校正器的响应速度是增加液晶自适应光学系统校正带宽的关键, 而研究设计低旋转黏度的液晶分子是提高液晶波前校正器响应速度的根本方法。利用原子水平上的分子动力学方法获得了目标分子的液相、向列相以及近晶相, 给出了理论计算液晶分子序参数以及旋转黏度的方法。与此同时, 结合实验方法, 提出利用混合液晶分子动力学模拟来比较液晶分子旋转黏度的大小, 通过多次模拟、多起始点数据处理最大限度消除了因边界尺寸效应带来的数据波动, 最后给出了两种高性能液晶分子的具体比较结果。这种分子动力学模拟方法能够探查分子结构细微差别对液晶相态以及旋转黏度的影响, 为设计低旋转黏度的液晶分子提供了理论支持, 必将为快速响应液晶材料的设计提供帮助。

关键词: 液晶, 响应速度, 分子动力学模拟, 旋转黏度**PACS:** 61.30.Cz, 95.75.Qr, 02.70.Ns, 51.20.+d**DOI:** 10.7498/aps.64.126102

1 引言

液晶波前校正器是液晶自适应光学系统的关键器件之一, 它的响应速度往往能够决定整个液晶自适应光学系统的动态性能^[1-3]。尽管人们提出了很多办法来提高液晶波前校正器的响应速度, 比如过压驱动法^[4]、最佳盒厚法等^[5,6], 但是通过改进液晶材料的性能来提高液晶波前校正器的响应速度是最根本的方法之一。从液晶波前校正器响应时间的简单公式 $\tau_{\text{off}} = \gamma_1 d^2 / (\pi^2 K)$ ^[7] 可以看出, 想要提高液晶波前校正器的响应速度, 计算并设计出常温下具有低旋转黏度的液晶分子是一项重要的内容。

微观看来, 液晶分子通过自组装实现了有序排列, 分子结构的细微差别往往带来宏观相态

以及旋转黏度的巨大差异, 探究这种微观结构影响宏观状态的过程往往能够帮助研究人员设计出目标分子, 而液晶分子动力学模拟就能很好地做到这一点。相应的点阵模型(lattice based models)^[8]、粗粒度模型(coarse-grained models)^[9]以及原子级模型(atomistic resolution models)^[10]相继被提出。尽管点阵模型以及粗粒度模型能够定性说明液晶的一些性质, 但是它们都很难用来探究分子结构细微差别对宏观性质的影响, 而显然, 原子级模型能够达到这一目的。Wilson 和 Allen^[11]首次尝试利用全原子势模拟液晶分子CCH5(trans-4-cyclohexylcarbonitrile)的性质, 随后Cook 和 Wilson^[12]实现了上千个PCH5(4-(trans-4-n-pentylcyclohexyl) benzonitrile)液晶分子的全原子模拟, Berardi等^[13]利用全原子模拟

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 61205021, 61475152, 61377032, 61378075, 61405194)资助的课题。[†] 通信作者。E-mail: lc_ciomp@163.com

验证了实验上的奇偶效应, Cheung 等^[14]利用原子模拟计算了向列相液晶的挠曲电系数, 文献[15, 16]也都通过模拟呈现了液晶分子的各个相态。然而, 他们都未能进一步给出向列相下液晶分子旋转黏度计算的方法。文献[17—19]虽然较为细致的研究了液晶分子的旋转黏度, 也推导出了计算公式, 但他们未能考虑液晶分子的相态, 而实际大多数液晶波前校正器都必须利用向列相液晶。从实验来看, 对于高性能(高双折射率、低黏度)液晶分子来说, 常温附近它们都呈现出近晶相, 或者呈现不同的相态^[20—22], 这样我们就无法直接通过计算比较它们的旋转黏度, 即便是在同一温度(中温段或者高温段)下分别获得了它们的旋转黏度, 将它们放到常温下比较也是没有多大实际意义的。针对以上问题, 本文提出了利用混合液晶分子动力学模拟来比较液晶分子旋转黏度大小的方法, 即将常温下为近晶相的高性能液晶分子以一定比例掺入到常温下为向列相的液晶分子中, 通过计算混合后的向列相液晶的旋转黏度来比较掺入的含近晶相液晶的旋转黏度大小。

2 模型与方法

2.1 势能模型

势能模型(力场)是分子力学的基石, AMBER 以及 GAFF^[23] (a general AMBER force field) 全原子力场能够很好地模拟蛋白质、核酸以及大部分有机分子的性质。因此本文采用两者相结合的方式来描述原子之间的相互作用:

$$\begin{aligned} V = & \sum_{\text{bond}} \frac{1}{2} K_l (l - l_0)^2 + \sum_{\text{angle}} \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 \\ & + \sum_{\text{dihedrals}} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)] \\ & + \sum_{i,j} \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_o} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \\ & + \sum_{i,j} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right], \end{aligned} \quad (1)$$

式中, l , θ 以及 ϕ 分别为键长、键角和二面角, 下标 0 代表它们在平衡位置的值; K_l , K_θ 以及 V_n 分别为键长伸缩、键角弯曲以及二面角扭转时的力常数; n 为多重度; γ 为相位角。⁽¹⁾ 式中的原子电荷 q 采用的是限制性拟合静电势电荷(restrained electrostatic potential charge)。

2.2 计算细节

对任何一种液晶分子的模拟, 不论是单体还是混合物, 都应将其分为两部分内容: 退火(annealing)寻找到合适的液晶相态和在指定相态下进行模拟计算。因此, 本文首先是在气相密度下构建具有完美晶体结构的液晶盒子, 该盒子包含了 200 个单体液晶分子或者混合液晶分子; 接着, 我们利用 1000 bar (1 bar = 10⁵ Pa) 的压强将其密度压缩到 1 g/cm³ 左右; 然后让其在 600 K 的高温下运行大概 10 ns, 当我们确信盒子内液晶分子已经处于完全混乱状态时, 我们就把它作为初始的盒子来进行退火。在整个分子动力学模拟中, 静电作用的长程受力部分采用 PME (particle mesh Ewald) 方法计算, 短程范德华力采用截断(cut-off) 处理, 其截断半径都设定为 1 nm, 温度以及压力都利用 Berendsen 控制, 为了克服边界效应的影响, 还采用了立方周期性边界条件, 模拟主要利用了 Gromacs 的并行版本^[24, 25]。

2.3 旋转黏度 γ_1 的计算

根据线性响应理论, 液晶分子的旋转黏度可以利用下面公式计算:

$$\gamma_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{2k_B T t}{V \langle |n(t) - n(0)|^2 \rangle}, \quad (2)$$

式中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度, V 为液晶盒体积, $\langle |n(t) - n(0)|^2 \rangle$ 为指向矢均方根位移。当模拟时间足够长时, 指向矢均方根位移随时间会呈现出线性变化, 所以只要求出指向矢均方根位移随时间变化的斜率就可以得到旋转黏度 γ_1 。

为了求出(2)式中的指向矢均方根位移, 必须先求出在每一时刻下的指向矢, 因此我们首先计算了每一时刻下的序参数张量 Q :

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{3}{2} a_{j\alpha} a_{j\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta}, \quad (3)$$

式中, N 为液晶分子的数目; a_j 为分子 j 的长轴; 下标 α 以及 β 代表坐标轴 x , y 和 z ; 这里的分子长轴取的是液晶分子的转动惯量主轴。序参数张量对角化之后最大本征值即为有序度 S , 而其对应的本征矢即为指向矢 n 。

整个理论计算过程可以概括为: 利用(1)式描述的分子力学参数, 通过 Gromacs 软件进行分子动

力学模拟, 在这个过程中记录下每个原子位置随时间的变化; 接着利用(3)式求出每个时刻下200个液晶分子的指向矢及有序度, 从而可以求出指向矢均方根位移随时间的变化; 最终通过(2)式就能计算出液晶分子的旋转黏度.

3 结果与讨论

3.1 液晶分子的相态

图1是两种比较典型的液晶分子, 不同的颜色代表了不同的带电电荷, 它们的中心基团都为联苯, 极性基团为异硫氰酸酯基($-NCS$), 侧链都为氢原子, 唯一不同是, 第一个分子DPP的柔性尾链

为饱和烷基链($-C_2H_5$), 而第二个分子XPP的柔性尾链为烯基($-C_2H_3$).

经过上述的模拟退火之后, 我们分别获得了这两种液晶分子的各向同性相(也即液相)、向列相和近晶相, 如图2所示. 从图2可以明显看出: 高温段时液晶分子混乱排列, 没有出现一致的取向; 当温度降低时, 液晶分子的长轴会大致沿一个方向排列, 这时液晶分子呈现一维有序, 即出现了向列相; 当温度接近常温时, 液晶分子出现了层结构, 每一层的分子长轴方向基本相互平行, 且此长轴的方向或垂直于层平面、或有一倾斜角, 这时便是液晶分子的近晶相.

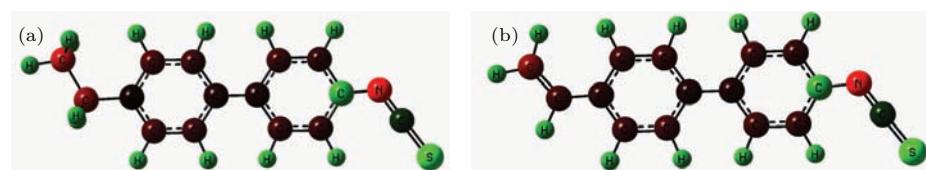


图1 液晶分子结构 (a) 液晶分子DPP; (b) 液晶分子XPP

Fig. 1. Optimized geometries of liquid crystals: (a) the molecular structure of DPP; (b) the molecular structure of XPP.

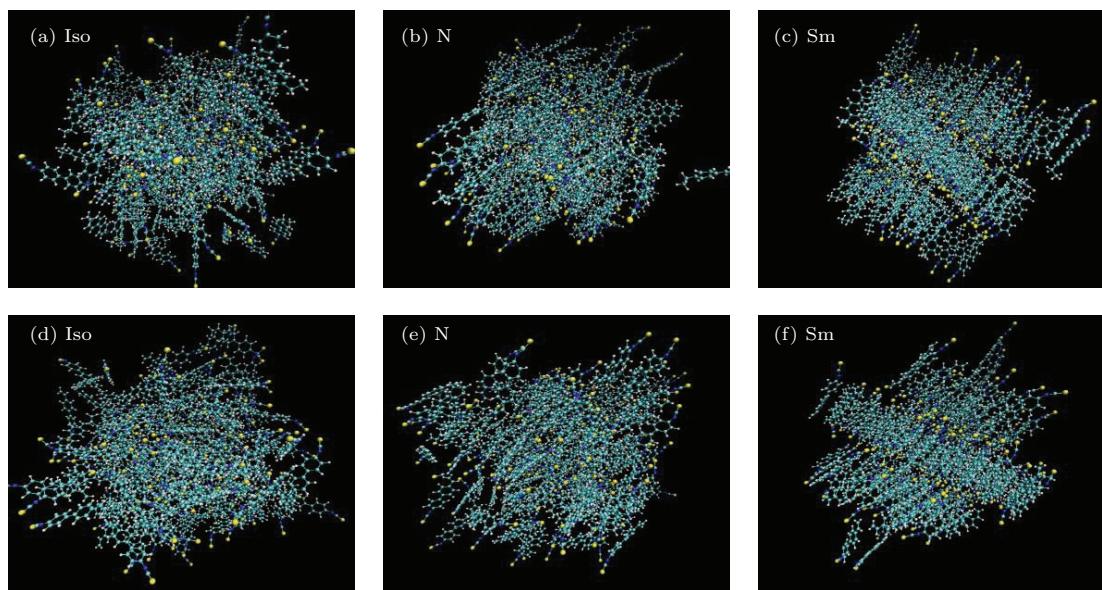


图2 液晶分子DPP以及XPP的各种相态 (a) DPP, 同性相; (b) DPP, 向列相; (c) DPP, 近晶相; (d) XPP, 同性相; (e) XPP, 向列相; (f) XPP, 近晶相

Fig. 2. The various states of DPP and XPP: (a) DPP, a liquid state; (b) DPP, a nematic state; (c) DPP, a smectic state; (d) XPP, a liquid state; (e) XPP, a nematic state; (f) XPP, a smectic state.

有序度是最能体现液晶性质的参数, 图3给出了两种液晶分子有序度随模拟时间(即温度)的变化. 从图3可以看出: 高温段液晶分子处于液相时有序度很小, 接近于零; 而当液晶处于向列相时, 有序度在0.4—0.8范围内变动, 温度越低, 有序度

越高; 近晶相时, 液晶分子的有序度就处于0.9左右, 接近于1. 特别需要指出的是, 尽管两种液晶分子在结构上差别不大, 但从模拟结果可以看出, 液晶分子XPP的向列相温度范围较宽, 而DPP分子的向列相温度范围特别窄, 本文模拟方法成功

地将这种微观细小差别对宏观性质的影响呈现出来,为设计宽向列相温度范围的液晶分子提供了理论支持.

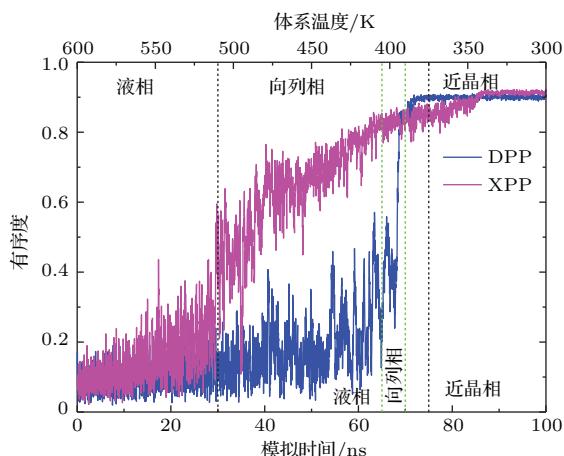


图3 液晶分子DPP以及XPP有序度随时间(温度)的变化,两种液晶从左到右依次出现各向同性相、向列相以及近晶相

Fig. 3. Time (temperature) evolution of the instantaneous liquid crystal order parameters during the growth of a liquid state, a nematic state and a Sm state from the isotropic phase.

另外,从图3可以更清晰地看到,对于像DPP,XPP这样的液晶分子,常温下它们都处于近晶相,无法直接计算比较它们的旋转黏度,因为液晶波

前校正器工作时要求所用的液晶材料必须为向列相.即便是在两种液晶都处于向列相的中温段(约400 K)获得了它们的旋转黏度,由于我们不知道旋转黏度随温度变化的确切关系,所以也无法比较两者常温下的旋转黏度大小.正是基于以上问题,本文提出了利用混合液晶分子动力学模拟来比较液晶分子旋转黏度的方法.

3.2 混合液晶比较旋转黏度

为了与文献结论对比,我们选择了两种实验室所用液晶分子2FP,2FT进行计算.如图4所示,液晶分子2FP是三联苯结构,而液晶分子2FT是苯-二苯乙炔结构,极性端基都为异硫氰酸酯基,末端都为烷基链,侧链都为双氟取代,图中颜色代表了原子电荷的大小.我们将这两种液晶按质量分数20%(参照实验)的比例掺到常见商用液晶5CB(4-Cyano-4'-pentylbiphenyl,见图4(c))中,掺杂的分子数列于表1,总分子数为200.

对这两种混合液晶进行10次模拟,退火温度是从600 K降到了313 K,图5显示了其中一次典型的结果,图中5CB_2FP(5CB_2FT)代表的是5CB和2FP(2FT)的混合物,5CB[2FP]或者5CB[2FT]

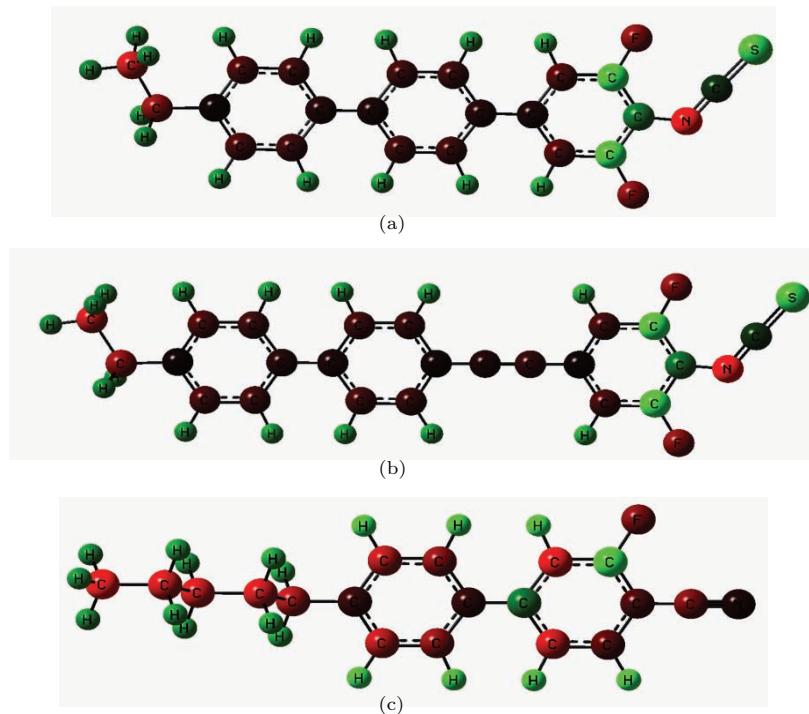


图4 液晶分子结构 (a) 液晶分子2FP; (b) 液晶分子2FT; (c) 液晶分子5CB

Fig. 4. Optimized geometries of liquid crystals: (a) the molecular structure of 2FP; (b) the molecular structure of 2FT; (c) the molecular structure of 5CB.

表 1 混合液晶各项参数的计算结果

Table 1. The related calculation results of various parameters of liquid crystal mixtures.

液晶分子	分子数	指向矢均方根位移斜率/ 10^{-5}	旋转黏度/mPa·s	$\gamma_1, \eta/\text{mPa}\cdot\text{s}^{(a)}$
5CB[2FT]	172	9.39	1117.73	
5CB_2FT	200	7.51	1397.53	1467.48, 1.66 ^(a)
5CB[2FP]	170	9.40	1101.28	
5CB_2FP	200	8.75	1183.09	1203.54, 1.25 ^(a)

注: (a) 这里给出的动力学黏度 η ^[26,27] 分别是联苯以及二苯乙炔的数值, 旨在说明趋势, 逗号前的数值是推导得到的 2FP 或 2FT 旋转黏度的大小.

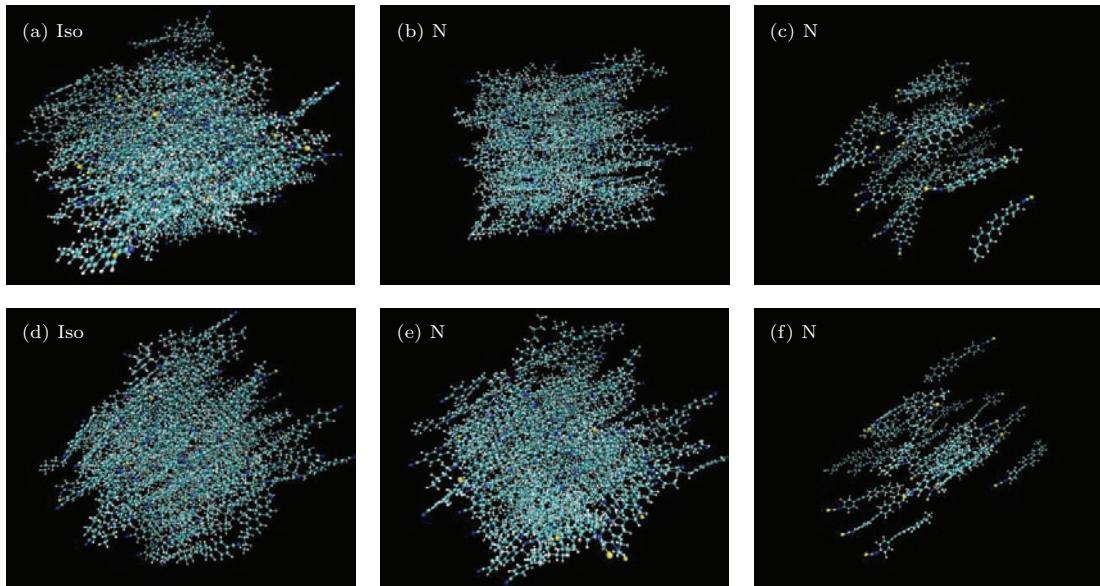


图 5 混合液晶 5CB_2FP 以及 5CB_2FT 的向列相 (a) 混合液晶 5CB_2FP; (b) 5CB; (c) 2FP; (d) 混合液晶 5CB_2FT; (e) 5CB; (f) 2FT

Fig. 5. The nematic states of 5CB_2FP and 5CB_2FT: (a) liquid crystal mixtures 5CB_2FP; (b) 5CB; (c) 2FP; (d) liquid crystal mixtures 5CB_2FT; (e) 5CB; (f) 2FT.

代表的是 5CB 单体, 而不包括 2FP 或者 2FT. 从图 5 可以清楚看到, 无论是混合液晶还是 5CB 单体都未出现近晶相, 且两者实现了充分混合, 这就符合了本文计算对相态的要求. 图 6 给出了混合液晶 5CB_2FP 以及 5CB_2FT 有序度随时间(温度)的变化, 可以看出, 低温段混合液晶的有序度 S 约为 0.7, 且基本没有再发生变化, 这进一步验证了 313 K 时混合液晶处于最低能量状态-向列相的结论.

在每次退火之后, 继续在 313 K 下运行 100 ns 的平衡分子动力学并取值分析. 图 7 给出了某一次平衡过程液晶分子有序度随时间的变化, 图中分别显示的是混合液晶有序度以及 5CB 单体的有序度变化过程. 从图 7 可以看出, 液晶分子在平衡动力学模拟过程中有序度基本不会发生太大波动, 5CB_2FP 混合液晶的有序度维持在 0.75 左右,

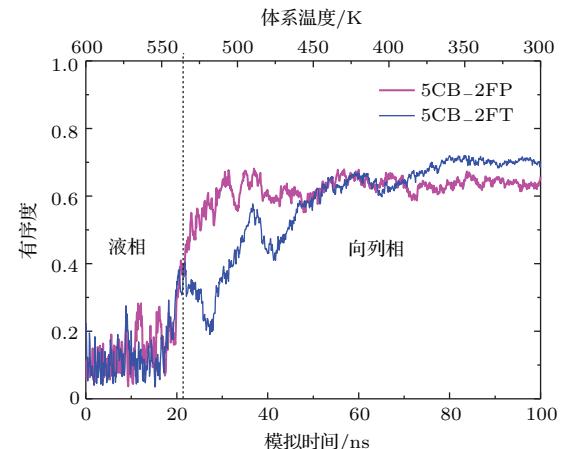


图 6 混合液晶 5CB_2FP 以及 5CB_2FT 有序度随时间(温度)的变化, 两种混合液晶从左到右依次出现各向同性相和向列相

Fig. 6. Time (temperature) evolution of the instantaneous liquid crystal order parameters during the growth of a liquid state and a nematic state from the isotropic phase.

5CB_2FT 混合液晶的有序度维持在 0.8 左右, 且还可以看出, 2FP 以及 2FT 液晶分子的掺入并没有增加液晶分子 5CB 的有序度。在计算液晶指向矢均方根位移时, 每次模拟我们都取了不同的起始时间(每隔 5 ns)、相同的时间间隔(20 ns)进行计算, 即多起始点计算方法, 然后 17 组数据进行平均得到此次模拟最终的指向矢均方根位移。图 8 显示的是混合液晶以及 5CB 单体指向矢均方根位移随时间的变化, 左边两幅图分别是混合液晶以及 5CB 单体的 17 组数据图, 右边的图是平均之后的曲线。从图 8 我们至少可以看出两点: 一是指向矢均方根位移随着时间的增加大致呈线性关系, 这符合前面理论公式的要求; 二是无论是 2FP 还是 2FT 液晶分子, 当它们掺入到液晶分子 5CB 中后都会使整个体系的指向矢均方根位移斜率降低, 根据前面(2)式分析来看, 这意味着 2FP 以及 2FT 单体掺入

到 5CB 中后使得整个体系的旋转黏度增加, 也可以说, 2FP 以及 2FT 单体的旋转黏度要大于液晶分子 5CB 的旋转黏度, 这符合我们模拟前的期望。

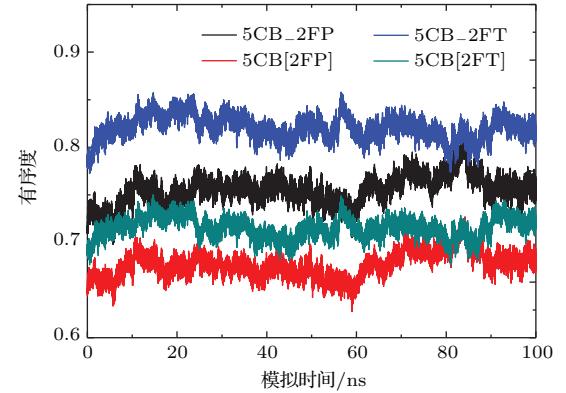


图 7 平衡状态下, 液晶分子有序度随时间的变化

Fig. 7. Time evolution of the instantaneous liquid crystal order parameter during the equilibrium molecular dynamics at $T = 313$ K.

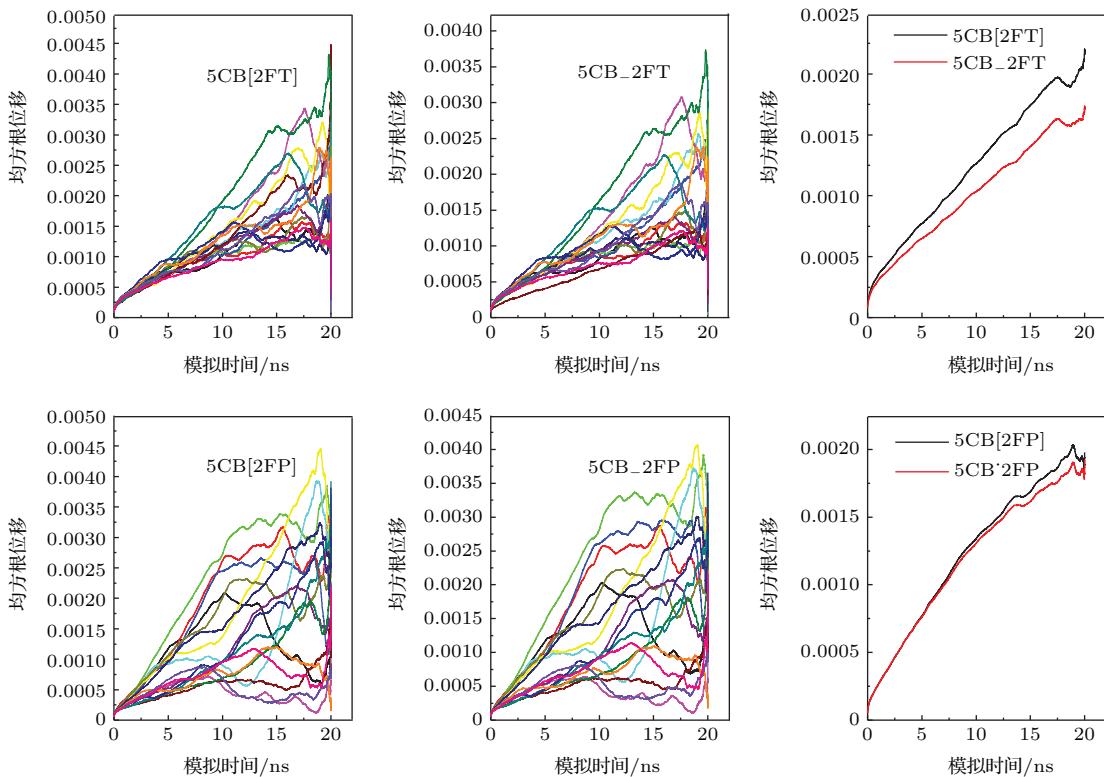


图 8 混合液晶指向矢均方根位移随时间的变化

Fig. 8. Time evolution of the director mean squared displacement of liquid crystals.

当我们将 5CB[2FT], 5CB_2FT, 5CB[2FP] 以及 5CB_2FP 的指向矢均方根位移曲线放到同一张图(图 9)中后发现, 尽管模拟采用的分子数不够多, 但是平均之后得到的 5CB 的指向矢均方根位移曲线基本重合, 这为进一步推导获得

2FT 以及 2FP 单体的旋转黏度奠定了基础。直线拟合后, 这四种液晶的指向矢均方根位移斜率分别为 9.39×10^{-5} , 7.51×10^{-5} , 9.40×10^{-5} , 8.75×10^{-5} , 最终得到的旋转黏度分别为 1117.73, 1397.53, 1101.28, 1183.09 mPa·s。利用简单的线

性叠加公式 $\gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2 = \gamma$ 计算, 2FT 和 2FP 液晶单体在 313 K 下的旋转黏度分别为 1467.48 和 1203.54 mPa·s (表 1). 文献 [26, 27] 中曾分析二苯乙炔结构的旋转黏度要大于联苯结构的旋转黏度, 这与本文计算得到的结论一致, 且利用上述方法得到的旋转黏度大小也与我们实验测得的黏弹系数的结果一致, 说明利用这种混合液晶分子动力学模拟比较旋转黏度大小的方法是切实可行的.

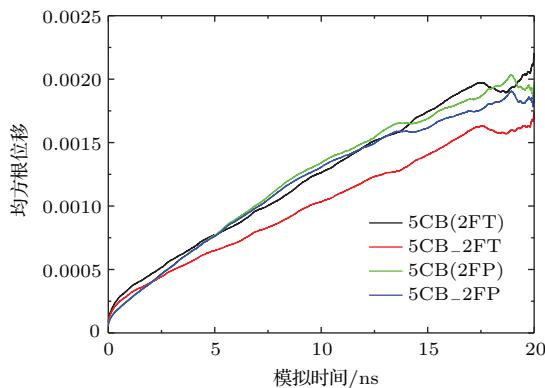


图 9 混合液晶指向矢均方根位移随时间的变化

Fig. 9. Time evolution of the director mean squared displacement of liquid crystals.

4 结 论

本文利用液晶分子 DPP 以及 XPP 详细阐述了液晶分子各种相态的模拟, 指出通过分子力学中的退火算法可以分别获得液晶分子的液相、向列相以及近晶相. 进一步明确了液晶分子序参数以及旋转黏度的计算, 指出了在实际比较液晶分子旋转黏度时存在着相态的问题, 针对以上问题首次提出了利用混合液晶分子动力学模拟方法来比较液晶分子旋转黏度的大小. 通过对液晶分子 2FP_5CB 以及 2FT_5CB 模拟分析, 最终计算出了 2FP 以及 2FT 液晶分子的旋转黏度, 与文献以及实验结果对比发现, 两种分子旋转黏度大小的趋势是一致的, 证明了上述方法的可行性, 为设计低旋转黏度的液晶分子提供了理论支持, 必将进一步促进液晶波前校正器响应速度的提高. 当然, 由于尺寸效应、力场参数限制等因素, 上述方法的可靠性可能还需要进一步验证, 加之实验测试液晶分子旋转黏度精确性等因素, 利用上述模拟方法精确定量化液晶分子旋转黏度需要更深入的工作.

参考文献

- [1] Kotova S P, Kvashnin M Y, Rakhmatulin M A, Zayakin O A, Guralnik I R, Klimov N A, Clark P, Love G D, Naumov A F, Saunter C D, Loktev M Y, Vdovin G V, Toporkova L V 2002 *Opt. Express* **10** 1258
- [2] Cao Z L, Mu Q Q, Hu L F, Liu Y G, Xuan L 2010 *Opt. Commun.* **283** 946
- [3] Zhang Z, You Z, Chu D 2014 *Light-Sci. Appl.* **3** 213
- [4] Hu H B, Hu L F, Peng Z H, Mu Q Q, Zhang X Y, Liu C, Xuan L 2012 *Opt. Lett.* **37** 3324
- [5] Wang Q D, Peng Z H, Fang Q Q, Li X P, Qi M J, Liu Y G, Yao L S, Cao Z L, Mu Q Q, Xuan L 2013 *Opt. Commun.* **305** 236
- [6] Peng Z H, Liu Y G, Yao L S, Cao Z L, Mu Q Q, Hu L F, Xuan L 2011 *Opt. Lett.* **36** 3608
- [7] Wu S T, Wu C S 1988 *Appl. Phys. Lett.* **53** 1794
- [8] Lebwohl P A, Lasher G 1971 *Phys. Rev. A* **6** 426
- [9] Yan F, Hixson C, Earl D 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 157801
- [10] Wilson M R 2007 *Chem. Soc. Rev.* **36** 1881
- [11] Wilson M R, Allen M P 1992 *Liq. Cryst.* **12** 157
- [12] Cook M J, Wilson M R 2001 *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **363** 181
- [13] Berardi R, Muccioli L, Zannoni C 2004 *Chem. Phys. Chem.* **5** 104
- [14] Cheung D L, Clark S J, Wilson M R 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 9131
- [15] Lansac Y, Glaser M A, Clark N A, Lavrentovich O D 1999 *Nature* **398** 54
- [16] Cacelli I, De Gaetani L, Prampolini G, Tani A 2007 *J. Phys. Chem. B* **111** 2130
- [17] Zakharov A, Komolkin A, Maliniak A 1999 *Phys. Rev. E* **59** 6802
- [18] Ilk Capar M, Cebe E 2005 *Chem. Phys. Lett.* **407** 454
- [19] Zhang R, He J, Peng Z H, Xuan L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5560 (in Chinese) [张然, 何军, 彭增辉, 宣丽 2009 物理学报 **58** 5560]
- [20] Gauza S, Li J, Wu S T, Spadlo A, Dabrowski R, Tzeng Y N, Cheng K L 2005 *Liq. Cryst.* **32** 1077
- [21] Gauza S, Wen C H, Wu B, Wu S T, Spadlo A, Dabrowski R 2006 *Liq. Cryst.* **33** 705
- [22] Peng Z H, Yao L S, Mu Q Q, Zhao J L, Liu Y G, Li D Y, Yan D M 2013 *Chin. J. Liq. Cryst.* **28** 479 (in Chinese) [彭增辉, 姚丽双, 穆全全, 赵晶丽, 刘永刚, 李大禹, 闫冬梅 2013 液晶与显示 **28** 479]
- [23] Wang J, Wolf R M, Caldwell J W, Kollman P A, Case D A 2004 *J. Comput. Chem.* **25** 1157
- [24] Van Der Spoel D, Lindahl E, Hess B, Groenhof G, Mark A E, Berendsen H J C 2005 *J. Comput. Chem.* **26** 1701
- [25] Hess B, Kutzner C, van der Spoel D, Lindahl E 2008 *J. Chem. Theory Comput.* **4** 435
- [26] Matsushita T, Koseki S 2005 *J. Chem. Phys. B* **109** 13493
- [27] Zhang R 2009 *Ph. D. Dissertation* (Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences) (in Chinese) [张然 2009 博士学位论文 (长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所)]

SPECIAL ISSUE—Liquid crystal photonics and applications

Rotational viscosity comparison of liquid crystals based on the molecular dynamics of mixtures*

Wang Qi-Dong¹⁾²⁾ Peng Zeng-Hui¹⁾ Liu Yong-Gang¹⁾ Yao Li-Shuang¹⁾
Ren Gan³⁾ Xuan Li^{1)†}

1) (State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022, China)

2) (University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

3) (State Key Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(Received 19 January 2015; revised manuscript received 5 May 2015)

Abstract

It is critical to improve the response speed of a liquid crystal wavefront corrector in order to increase the bandwidth of a liquid crystal adaptive optics system. The design of liquid crystal molecules with small rotational viscosity becomes a basic method of increasing the response speed of a liquid crystal wavefront corrector. Various phases of liquid crystal from molecular dynamics simulation are given in this paper, and the detailed computational methods of order parameter and rotational viscosity are also presented. Rotational viscosities of liquid crystals are compared based on the molecular dynamics of mixtures. The data fluctuation is reduced effectively through several simulations and the multiple analysis of original data. A detailed process of molecular dynamics of mixtures is given in this paper and the result is greatly satisfactory. We believe that one can perform a better molecular design using this process and obtain a better understanding of molecular interactions of LCs.

Keywords: liquid crystal, response speed, molecular dynamics simulation, rotational viscosity

PACS: 61.30.Cz, 95.75.Qr, 02.70.Ns, 51.20.+d

DOI: [10.7498/aps.64.126102](https://doi.org/10.7498/aps.64.126102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61205021, 61475152, 61377032, 61378075, 61405194).

† Corresponding author. E-mail: lc_ciomp@163.com

铜-钼源漏电极对非晶氧化铟镓锌薄膜晶体管性能的改善

宁洪龙 胡诗犇 朱峰 姚日晖 徐苗 邹建华 陶洪 徐瑞霞 徐华 王磊 兰林锋 彭俊彪

Improved performance of the amorphous indium-gallium-zinc oxide thin film transistor with Cu-Mo source/drain electrode

Ning Hong-Long Hu Shi-Ben Zhu Feng Yao Ri-Hui Xu Miao Zou Jian-Hua Tao Hong Xu Rui-Xia Xu Hua Wang Lei Lan Lin-Feng Peng Jun-Biao

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 126103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.126103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[不同退火方式对 Ni/SiC 接触界面性质的影响](#)

[Effect of different annealing treatment methods on the Ni/SiC contact interface properties](#)

[物理学报.2015, 64\(6\): 067303 http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.067303](#)

[金属与半导体 Ge 欧姆接触制备、性质及其机理分析](#)

[Properties and mechanism analysis of metal/Ge ohmic contact](#)

[物理学报.2013, 62\(16\): 167304 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.167304](#)

[微晶硅锗太阳电池本征层纵向结构的优化](#)

[Optimization of the longitudinal structure of intrinsic layer in microcrystalline silicon germanium solar cell](#)

[物理学报.2013, 62\(3\): 036102 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.036102](#)

[1 at% Ag 替代 \$Zr_{57}Cu_{20}Al_{10}Ni_8Ti_5\$ 金属玻璃中各组元对玻璃形成能力及热稳定性的作用分析](#)

[On glass forming ability and thermal stability of \$Zr_{57}Cu_{20}Al_{10}Ni_8Ti_5\$ bulk metallic glass by substituting each component with 1 at% Ag](#)

[物理学报.2013, 62\(1\): 016101 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.016101](#)

专题: 液晶光学及应用

铜-钼源漏电极对非晶氧化铟镓锌薄膜晶体管性能的改善*

宁洪龙¹⁾³⁾ 胡诗犇¹⁾ 朱峰¹⁾ 姚日晖^{1)†} 徐苗¹⁾ 邹建华¹⁾ 陶洪¹⁾
徐瑞霞²⁾ 徐华¹⁾ 王磊¹⁾ 兰林锋¹⁾ 彭俊彪¹⁾

1)(华南理工大学材料科学与工程学院, 高分子光电材料与器件研究所, 发光材料与器件国家重点实验室, 广州 510640)

2)(新视界光电技术有限公司, 广州 510530)

3)(中国科学院红外物理国家重点实验室, 上海 200083)

(2014年12月24日收到; 2015年4月18日收到修改稿)

在铜(Cu)和非晶铟镓锌氧化物(a-IGZO)之间插入30 nm厚的钼(Mo)接触层, 制备了具有Cu-Mo源漏电极的a-IGZO薄膜晶体管(TFT)。Mo接触层不仅能够抑制Cu与a-IGZO有源层之间的扩散, 而且提高了Cu电极与玻璃基底以及栅极绝缘层的结合强度。制备的Cu-Mo结构TFT与纯Cu结构TFT相比, 具有较高的迁移率($\sim 9.26 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)、更短的电流传输长度($\sim 0.2 \mu\text{m}$)、更低的接触电阻($\sim 1072 \Omega$)和有效接触电阻率($\sim 1 \times 10^{-4} \Omega \cdot \text{cm}^2$), 能够满足TFT阵列高导互联的要求。

关键词: 高导互联, 非晶氧化铟镓锌, 薄膜晶体管, 铜-钼源漏电极

PACS: 61.43.Dq, 73.40.Cg, 85.30.Tv

DOI: [10.7498/aps.64.126103](https://doi.org/10.7498/aps.64.126103)

1 引言

近年来, 新型显示面板朝着大尺寸、高分辨率、高刷新率方向发展^[1], 对薄膜晶体管(thin film transistor, TFT)的性能提出了更高的要求: 高迁移率和低阻抗延迟^[2,3]。非晶氧化铟镓锌(amorphous indium-gallium-zinc oxide, a-IGZO)因为其高迁移率、均匀性好、低温制备的特点, 在显示领域得到了广泛的应用^[4,5]。高导布线是获得器件低阻抗延迟的最直接方法^[6,7], 由于在TFT制程中, 布线与源漏电极使用同种材料, 同时制作, 因此使用电阻率较低的铜($1.68 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{m}$)来取代传统的铝($2.7 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{m}$)作为电极材料成为目前的研究热点^[8,9]。

以往的研究表明, 铜容易向氧化物中扩散, 导致接触电阻和寄生电容增大, 阈值电压漂移, 稳定性下降, 器件性能劣化^[10–13]; 另一方面, Cu与玻璃和栅极绝缘层(如SiO₂)等材料的结合强度较差, 不适合直接作为布线材料^[14–16]。为了解决这一问题, 通常使用Ti, Mn薄膜作为接触层(interlayer), 改善与基底的结合强度, 以及阻止Cu的扩散, 但是Ti, Mn容易和a-IGZO发生界面反应, 生成TiO_x, MnO_x界面层, 从而增加接触电阻^[3,7]。而钼(Mo)电极与氧化物半导体有着良好的接触性能^[17,18], 因此本文使用Mo作为接触层来提高铜布线器件性能, 制备了Cu-Mo源漏电极的高导布线氧化物TFT器件, 对其接触界面的性质进行了研究。通过X射线光电子能谱(X-ray photoelectrical spectrum, XPS)和透射电子显微镜(transmission elec-

* 广东省引进创新科研团队计划(批准号: 201101C0105067115)、中国科学院红外物理国家重点实验室开放课题(批准号: M201406)、国家自然科学基金(批准号: 61036007, 51173049, 61306099, 61401156, 61204089)、中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: 2014ZZ0028)和广州市科技计划(批准号: 2013Y2-00114)资助的课题。

† 通信作者. E-mail: yaorihui@scut.edu.cn

tron microscope, TEM) 的分析, 发现 Mo 能有效抑制 Cu 和氧化物半导体之间的扩散。此外, 本文还使用传输线法 (transmission line method, TLM)^[19] 研究了 Cu-Mo 电极的接触电阻, 结果表明 Cu-Mo 电极与纯 Cu 电极相比具有更低的接触电阻。最后使用胶带法^[20] 对 Cu 和 Cu-Mo 电极与不同基底结合进行了分析, 发现 Cu-Mo 电极与玻璃基底和 SiO₂ 具有良好的附着力。

2 实验方法

本文以 Cu 和 Cu-Mo 为源漏电极制备了具有底栅结构的 a-IGZO TFT 器件, 如图 1 所示。首先在玻璃基底上直流溅射沉积并湿法刻蚀 300 nm 的铝合金薄膜作为底栅极; 然后采用阳极氧化形成一层 200 nm 厚的氧化铝栅极绝缘层^[21]; 在室温下通过射频磁控溅射 50 nm 厚的 a-IGZO 薄膜作为沟道层并湿法刻蚀图形化; 在 300 °C 空气气氛中退火 30 min 后, 用剥离 (lift-off) 工艺制备 Cu 和 Cu-Mo 源漏电极, 其中 Cu, Mo 薄膜的厚度分别为 200, 30 nm; 最后, 使用等离子体增强化学气相沉积 (plasma-enhanced chemical vapor deposition, PECVD) 300 nm SiO₂ 对器件进行了钝化处理, 并在 350 °C N₂ 气氛保护下对器件进行 1 h 的退火。在室温黑暗条件下, 使用半导体参数分析仪 (Agilent B1500A) 测试器件电气特性。采用 XPS 和 TEM 对 Cu-Mo/a-IGZO 以及 Cu/a-IGZO 界面进行分析, 利用胶带法评估了 Cu 和 Cu-Mo 薄膜与玻璃基底和 SiO₂ 的结合强度。

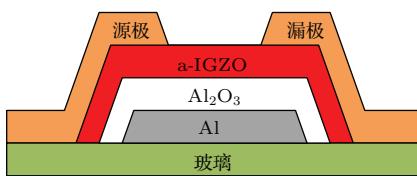


图 1 测试用 TFT 结构示意图

Fig. 1. Schematic of the test TFT structure.

3 结果与分析

分别测量了采用纯 Cu 和 Cu-Mo 源漏电极两种器件的转移特性曲线, 结果如图 2 所示, 其沟道宽长比 $W/L = 100/10$, 测试的源漏电压 $V_{DS} = 5.1$ V, 栅极电压 V_{GS} 从 -10 V 到 +10 V。

器件电学性能如表 1 所列, 可以看到与 Cu-Mo 电极器件相比, 纯 Cu 电极器件开启电压 V_{on} 正漂, 饱和迁移率 μ_{sat} 较低。纯 Cu 电极与有源层直接接触, 在溅射时部分扩散进入有源层, 由于 Cu 在 a-IGZO 中作为 p 型受主, 吸收可自由移动的电子, 引起有源层中氧空位减少^[22], 导致器件需要更高电压才能开启, 同时在接触区域形成了一定势垒, 抑制载流子的传输, 降低迁移率。Cu-Mo 电极器件由于 Mo 接触层的阻挡作用, 有效保护了有源层区域的载流子浓度。经过钝化和退火处理后, 由 PECVD 工艺沉积 SiO₂ 的过程中引入了较多的松散氧杂质, 作为受主型陷阱引起两种器件的亚阈值摆幅 SS 均增大, 导致器件性能下降。但是与 Cu-Mo 电极器件相比, 纯 Cu 源漏电极的开启电压 V_{on} 正向漂移明显, 同时迁移率显著下降, 这是由于退火加剧了 Cu 向 a-IGZO 中的扩散。此外, 无钝化层器件的亚阈值摆幅 SS 很低 (~ 0.11 V/decade), 说明源漏极与氧化物半导体界面、半导体与绝缘层界面的缺陷密度很低, 薄膜沉积质量很好。

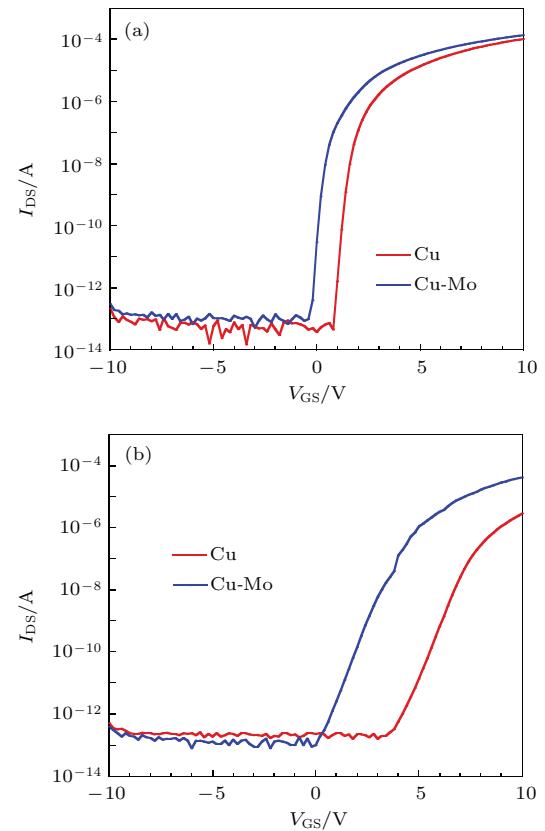


图 2 纯 Cu 和 Cu-Mo 源漏电极的转移特性曲线 ($V_{DS} = 5.1$ V) (a) 无钝化层; (b) 有 SiO₂ 钝化层

Fig. 2. Transfer characteristics of pure Cu and Cu-Mo S/D electrode ($V_{DS} = 5.1$ V): (a) without passivation layer; (b) with SiO₂ passivation layer.

表 1 不同源漏电极 a-IGZO TFT 的电学性能参数

Table 1. Electrical performance of different S/D electrode a-IGZO TFT.

源漏 电极	钝化 退火	饱和迁移率 $\mu_{\text{sat}}/\text{cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$	开启电压 V_{on}/V	亚阈值摆幅 $SS/\text{V}\cdot\text{decade}^{-1}$
Cu	否	8.43	0.8	0.12
Cu-Mo	否	9.26	-0.6	0.11
Cu	是	1.84	3.4	0.58
Cu-Mo	是	6.38	-0.2	0.57

我们进一步分析了纯 Cu 电极和 Cu-Mo 电极 TFT 器件的接触性能, 使用不同沟道宽长比的样品(沟道宽为 100 μm , 长为 5—50 μm), 采用 TLM 计算了不同源漏电极的接触电阻, 具体计算公式为

$$R_T = V_{\text{DS}}/I_{\text{DS}} = r_{\text{ch}}L + R_{\text{DS}} \\ = r_{\text{ch}}(L_{\text{eff}} - 2L_T) + R_{\text{DS}}, \quad (1)$$

$$L_T = \frac{R_{\text{DS}}}{2r_{\text{ch}}}, \quad (2)$$

$$R_{\text{c-eff}} = (R_{\text{DS}}L_T W)/2, \quad (3)$$

其中, R_T 为器件总电阻; R_{DS} 为源漏极接触电阻之和; r_{ch} 为 a-IGZO 单位长度沟道电阻; L_T 为电流传

输长度 (current transfer length), 即电流从半导体中向电极中传输的长度, L_{eff} 为有效沟道长度, 如图 3 所示; $R_{\text{c-eff}}$ 为能够表征整个有效接触区域性能的有效接触电阻率.

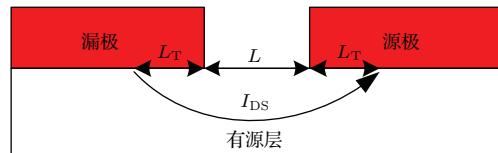


图 3 源漏电极与有源层的接触区域和电流传输长度 L_T 示意图

Fig. 3. Schematic of contact area of S/D electrode and active layer, and current transfer length L_T .

图 4 为测得的 Cu 和 Cu-Mo 源漏电极结构 TFT 器件的接触电阻、单位长度沟道电阻、有效接触电阻率和电流传输长度对比. 从图 4 可以看出, 在 $V_{\text{GS}} = 10 \text{ V}$ 处, Cu-Mo 结构与纯 Cu 结构相比, R_{DS} 从 4892Ω 下降到 1072Ω , L_T 从 $0.87 \mu\text{m}$ 下降到 $0.20 \mu\text{m}$, $R_{\text{c-eff}}$ 从 $2.14 \times 10^{-3} \Omega\cdot\text{cm}^2$ 下降到 $1.09 \times 10^{-4} \Omega\cdot\text{cm}^2$, 而 r_{ch} 从 $2794 \Omega/\mu\text{m}$ 下降到 $2632 \Omega/\mu\text{m}$. 这和前述 Cu-Mo 电极器件具有更高迁移率对应.

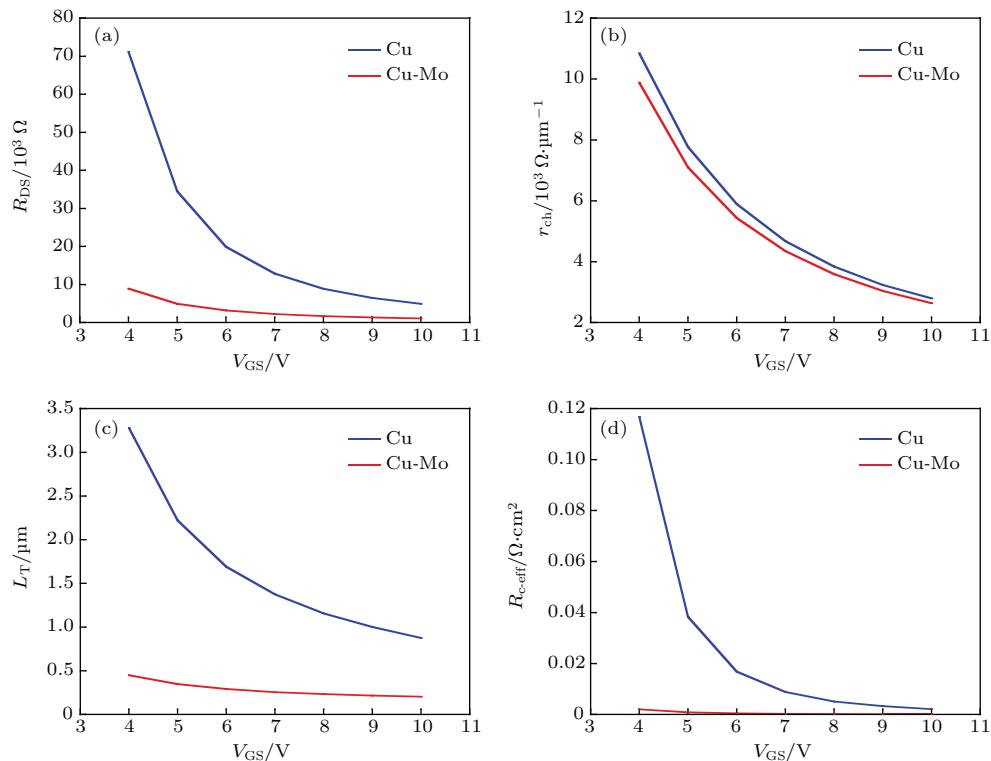


图 4 不同源漏电极器件的接触性能 (a) 源漏电极接触电阻 R_{DS} ; (b) 单位长度沟道电阻 r_{ch} ; (c) 电流传输长度 L_T ; (d) 有效接触电阻率 $R_{\text{c-eff}}$.

Fig. 4. Contact performance of different S/D electrode: (a) contact resistance of S/D electrode R_{DS} ; (b) channel resistance per unit channel length r_{ch} ; (c) current transfer length L_T ; (d) effective contact resistivity $R_{\text{c-eff}}$.

为进一步分析不同源漏电极与 a-IGZO 有源层的接触界面, 我们使用 XPS 和 TEM 对 Cu/a-IGZO 和 Cu/Mo/a-IGZO 的界面进行了表征。图 5(a) 和图 5(b) 分别为 Cu 和 Cu-Mo 电极与 a-IGZO 界面处的 TEM 照片, 可见 Cu 和 Mo 均为多晶结构, 各膜层结构紧密, 与 a-IGZO 界面结合良好, 没有形成明显的氧化物界面层结构。这有利于减少界面缺陷, 提高稳定性, 与之前 SS 较小的测试结果是一致的。另外, 可以看到 Cu-Mo 的结晶性较纯 Cu 有所提高, 有利于减少晶界散射, 提高导电性能。

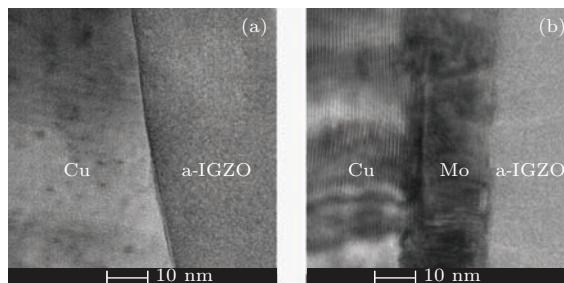


图 5 (a) 纯 Cu 和 (b) Cu-Mo 源漏电极/a-IGZO 界面 TEM 照片

Fig. 5. Cross-sectional, HR-TEM images of interfacial micro-structures between a-IGZO and the metal electrode: (a) pure Cu; (b) Cu-Mo.

图 6 是 XPS 分析不同样品热处理前后的元素深度分布。热处理条件为 $300\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{N}_2$ 保护/30 min。从图 6 可以看到, 在 a-IGZO 薄膜内部, Cu-Mo 样品

中的 Cu 含量退火前后分别为 1.3% 和 1.6%, 比纯 Cu 样品的 6.3% 和 15.18% 要低, 说明 Mo 接触层不仅能够抑制 Cu/a-IGZO 在室温下的界面扩散, 而且可以在高温下起作用, 这对需要热处理提高性能的金属氧化物半导体器件尤为重要。图 7 为样品的 a-IGZO 与源漏电极界面处的 O 1s XPS 图, 对其高斯拟合分析, 氧空位的具体数据见表 2。其中 M-O 代表金属氧化物的拟合曲线, Vo 代表氧空位的拟合曲线。从图 7 和表 2 可以发现, Cu-Mo 样品退火前后的氧空位浓度分别为 32.7%, 32.0%, 比纯 Cu 样品界面的氧空位含量(28.9%, 26.3%)高, 这表明 Cu 向 a-IGZO 中的扩散减少了氧空位浓度。氧空位是 a-IGZO 的载流子的主要来源^[23], 氧空位的减少会导致载流子的减少, 器件需要更高的 V_{GS} 才能开启, 会增加器件功耗。因此, 纯 Cu 电极的开启电压较大。

在实际生产的 TFT 阵列中, 由于源漏电极和布线会与绝缘层或玻璃大面积接触, 因此需要保证源漏电极与绝缘层和玻璃基底有较高的结合强度, 才能保证后续钝化层的沉积质量。因此我们使用胶带法对纯 Cu 和 Cu-Mo 电极与不同基底的结合强度进行了对比。如图 8 所示, 纯 Cu 电极的脱落率较高、结合强度低, 而引入 Mo 接触层后, 其脱落率大幅降低, 这表明 Mo 接触层的引入能够有效提高 Cu 与玻璃和 SiO_2 衬底的结合强度。

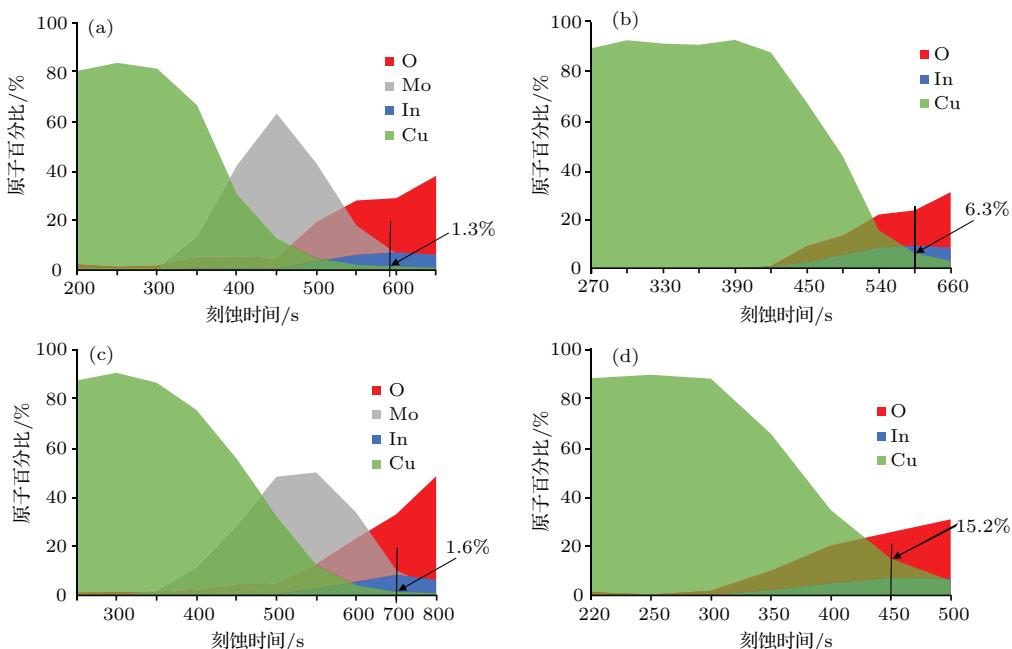


图 6 不同样品的 XPS 中 O, In, Cu, Mo 元素成分深度分析 (a) Cu/Mo/a-IGZO; (b) 纯 Cu/a-IGZO; (c) Cu/Mo/a-IGZO 退火; (d) 纯 Cu/a-IGZO 退火

Fig. 6. XPS depth profiles of O, In, Cu, Mo elements in different samples: (a) Cu/Mo/a-IGZO; (b) pure Cu/a-IGZO; (c) Cu/Mo/a-IGZO annealed; (d) pure Cu/a-IGZO annealed.

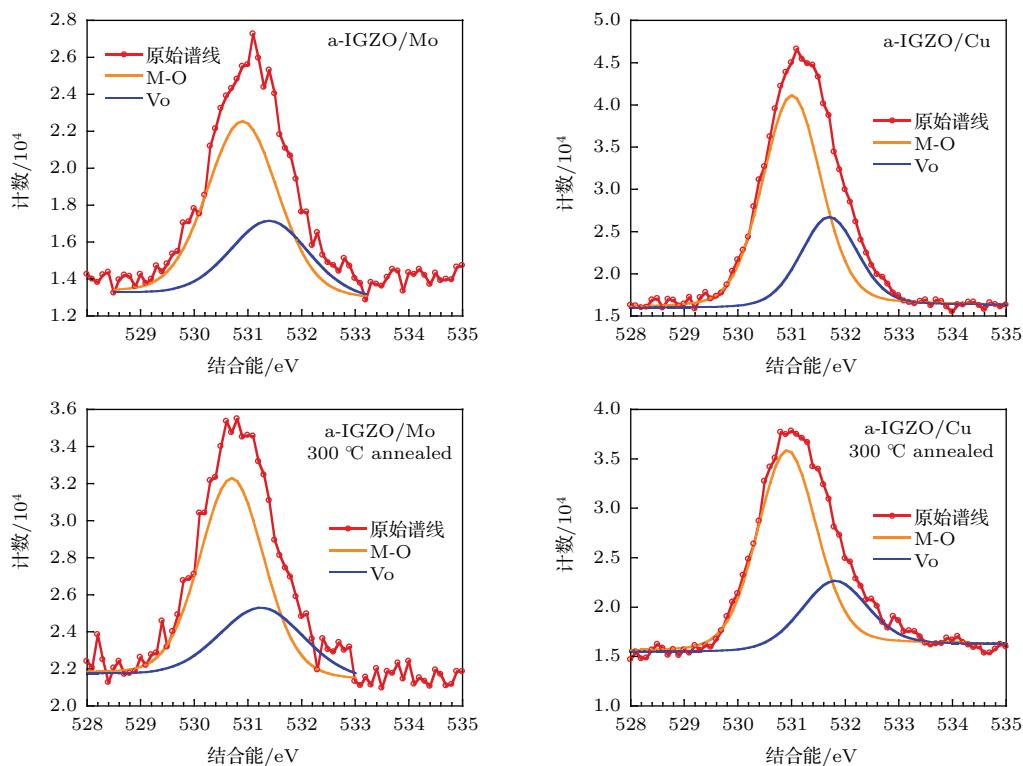


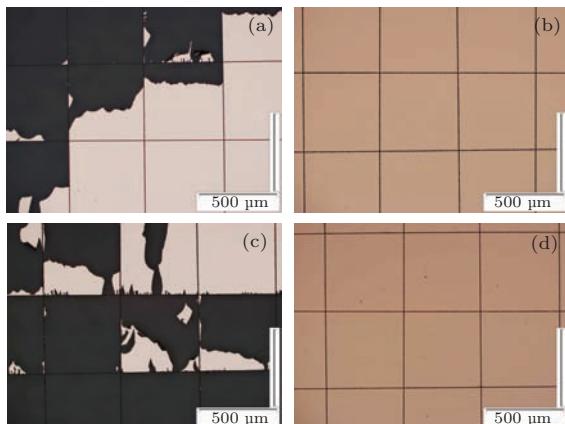
图 7 a-IGZO 与不同金属电极界面处 O 1s 的 XPS 图

Fig. 7. The XPS of O 1s in the interface of a-IGZO and metal electrode.

表 2 不同样品界面氧空位浓度

Table 2. Oxygen vacancies concentration.

样品 编号	成分及 厚度/nm	退火	界面氧空位 浓度/%
1	Cu(50)/Mo(30)/a-IGZO(50)	否	32.7
2	Cu(50)/a-IGZO(50)	否	28.9
3	Cu(50)/Mo(20)/a-IGZO(50)	是	32
4	Cu(50)/a-IGZO(50)	是	26.3

图 8 Cu 和 Cu-Mo 的脱落率光学照片 (a) 玻璃/Cu; (b) 玻璃/Mo/Cu; (c) 玻璃/SiO₂/Cu; (d) 玻璃/SiO₂/Mo/CuFig. 8. Photos of Cu and Cu-Mo after tape test: (a) glass/Cu; (b) glass/Mo/Cu; (c) glass/SiO₂/Cu; (d) glass/SiO₂/Mo/Cu.

4 结 论

本文制备了 Cu 和 Cu-Mo 源漏电极结构的高导布线氧化物半导体薄膜晶体管, 对不同电极结构的器件性能进行了研究。结果表明, 采用 Cu-Mo 电极结构的氧化物薄膜晶体管具有较高的迁移率 ($\sim 9.26 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)、更低的接触电阻 ($\sim 1072 \Omega$) 和更好的热稳定性。通过 TEM 和 XPS 的进一步分析发现, 这是因为 Mo 接触层能够阻止 Cu/a-IGZO 的界面扩散, 从而防止了由 Cu 扩散导致的 a-IGZO 和源漏电极界面的氧空位减少, 保证了有源层的载流子浓度。此外, Mo 接触层的引入还能够有效增加 Cu 与玻璃和 SiO₂ 的结合强度, 从而提高高导互联结构阵列的可靠性, 在显示领域中有着很好的应用前景。

参考文献

- [1] Liao Y, Shao X, Du Y, Song Y, Hu W, Zhang Z, Chen Y, Wang Y, Ma Q, Yoon D, Wang D, Yuan J, Wu H, Guo Z, Hao Z, Zhang J, Lü J 2014 *J. Inf. Display* **15** 77
- [2] Arai T, Sasaoka T 2011 *SID Symposium Digest of Technical Papers* **42** 710

- [3] Yun P S, Koike J 2011 *J. Electrochem. Soc.* **158** H1034
- [4] Li S S, Liang C X, Wang X X, Li Y H, Song S M, Xin Y Q, Yang T L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 077302 (in Chinese) [李帅帅, 梁朝旭, 王雪霞, 李延辉, 宋淑梅, 辛艳青, 杨田林 2013 物理学报 **62** 077302]
- [5] Li X F, Xin E L, Shi J F, Chen L L, Li C Y, Zhang J H 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 108503 (in Chinese) [李喜峰, 信恩龙, 石继锋, 陈龙龙, 李春亚, 张建华 2013 物理学报 **62** 108503]
- [6] Yu Z, Ren R, Xue J, Yao Q, Li Z, Hui G, Xue W 2015 *Appl. Surf. Sci.* **328** 374
- [7] Lee Y W, Kim S, Lee S, Lee W, Yoon K, Park J, Kwon J, Han M 2012 *Electrochem. Solid-State Lett.* **15** H126
- [8] Gong N, Park C, Lee J, Jeong I, Han H, Hwang J, Park J, Park K, Jeong H, Ha Y, Hwang Y 2012 *SID Symposium Digest of Technical Papers* **43** 784
- [9] Zhao M, Xu M, Ning H, Xu R, Zou J, Tao H, Wang L, Peng J 2015 *IEEE Electron Device Lett.* **36** 342
- [10] Tai Y, Chiu H, Chou L 2012 *J. Electrochem. Soc.* **159** J200
- [11] Yim J R, Jung S Y, Yeon H W, Kwon J Y, Lee Y J, Lee J H, Joo Y C 2012 *Jpn. J. Appl. Phys.* **51** 011401
- [12] Wu C W, Yoo S Y, Ning C, Yang W, Shang G L, Wang K, Liu C H, Liu X, Yuan G C, Chen J, Xu Y, Lee W, Yu J W, Lee D H 2013 *SID Symposium Digest of Technical Papers* **44** 97
- [13] Liu X, Wang L L, Ning C, Hu H, Yang W, Wang K, Yoo S Y, Zhang S 2014 *IEEE Trans. Electron Dev.* **61** 4299
- [14] Nagao K, Neaton J B, Ashcroft N W 2003 *Phys. Rev. B* **68** 125403
- [15] Hino A, Okuno H, Kugimiya T 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 174902
- [16] Kriese M D, Moody N R, Gerberich W W 1998 *Acta Mater.* **46** 6623
- [17] Xu H, Lan L F, Li M, Luo D X, Xiao P, Lin Z G, Ning H L, Peng J B 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 038501 (in Chinese) [徐华, 兰林锋, 李民, 罗东向, 肖鹏, 林振国, 宁洪龙, 彭俊彪 2014 物理学报 **63** 038501]
- [18] Hu W, Peterson R L 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 192105
- [19] Chiang C S, Martin S, Kanicki J, Ugai Y, Yukawa T, Takeuchi S 1998 *Jpn. J. Appl. Phys.* **37** 5914
- [20] Miki A, Kugimiya T, Terao Y 2013 *US Patent* 13 810949
- [21] Lan L, Peng J 2011 *IEEE Trans. Electron Dev.* **58** 1452
- [22] Kim S I, Park J, Kim C J, Park J C, Song I, Park Y S 2009 *J. Electrochem. Soc.* **156** H184
- [23] Jianke Y, Ningsheng X, Shaozhi D, Jun C, Juncong S, Shieh H D, Po-Tsun L, Yi-Pai H 2011 *IEEE Trans. Electron Dev.* **58** 1121

SPECIAL ISSUE—Liquid crystal photonics and applications

Improved performance of the amorphous indium-gallium-zinc oxide thin film transistor with Cu-Mo source/drain electrode*

Ning Hong-Long¹⁾³⁾ Hu Shi-Ben¹⁾ Zhu Feng¹⁾ Yao Ri-Hui^{1)†} Xu Miao¹⁾ Zou Jian-Hua¹⁾
Tao Hong¹⁾ Xu Rui-Xia²⁾ Xu Hua¹⁾ Wang Lei¹⁾ Lan Lin-Feng¹⁾ Peng Jun-Biao¹⁾

1) (Institute of Polymer Optoelectronic Materials and Devices, State Key Laboratory of Luminescent Materials and Devices, Department of Materials Science and Engineering School, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

2) (New Vision Opto-Electronic Technology Co., Ltd, Guangzhou 510530, China)

3) (National Laboratory for Infrared Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

(Received 24 December 2014; revised manuscript received 18 April 2015)

Abstract

Copper is an alternative material for aluminum electrode to meet the stringent requirement for high mobility and low resistance-capacitance (RC) delay of amorphous indium-gallium-zinc oxide (a-IGZO) thin film transistor (TFT) for next generation of display technology due to its intrinsic high conductivity. However, low bonding strength between copper layer and insulator/glass and easy diffusion into active layer restrict its application in the field of TFT. In this work, a 30 nm thin film of molybdenum is introduced into copper electrode to form a copper-molybdenum source/drain electrode of a-IGZO TFT, which not only inhibits the diffusion of copper, but also enhances the interfacial adhesion between electrode and substrate. The obtained Cu-Mo TFT possesses a high mobility of $\sim 9.26 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ and a low subthreshold swing of 0.11 V/Decade. Moreover, it has shorter current transfer length ($\sim 0.2 \mu\text{m}$), lower contact resistance ($\sim 1072 \Omega$), and effective contact resistance ($\sim 1 \times 10^{-4} \Omega \cdot \text{cm}^2$) than the pure copper electrode. Cu-Mo electrode with low contact resistance and high adhesion to substrates paves the way to the application of copper in high conductivity interconnection of a-IGZO TFT.

Keywords: high conductivity interconnection, amorphous indium-gallium-zinc oxide, thin film transistor, Cu-Mo source/drain electrode

PACS: 61.43.Dq, 73.40.Cg, 85.30.Tv

DOI: [10.7498/aps.64.126103](https://doi.org/10.7498/aps.64.126103)

* Project supported by the Guangdong Innovative Research Team Program, China (Grant No. 201101C0105067115), the National Laboratory for Infrared Physics Open Project, Chinese Academy of Sciences (Grant No. M201406), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61036007, 51173049, 61306099, 61401156, 61204089), the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. 2014ZZ0028), and the Guangzhou Science and Technology Plan, China (Grant No. 2013Y2-00114).

† Corresponding author. E-mail: yaorihui@scut.edu.cn