

基于Si/SiO₂一维光子晶体水质传感器的研究

谢琮昊

天津工业大学物理科学与技术学院, 天津

收稿日期: 2026年5月4日; 录用日期: 2026年6月23日; 发布日期: 2026年7月6日

摘 要

一维光子晶体是由两种或多种折射率差异显著的介质材料沿单一方向周期性排列形成的多层膜光学结构, 凭借独特的光子禁带与禁带缺陷特性, 可实现对电磁波传播的有效调控。本文基于硅和二氧化硅一维光子晶体设计了一种对水体中氯化铵浓度进行检测的传感器, 并对其性质进行全面分析。

关键词

光子晶体, 禁带缺陷, 传感器

Research on One-Dimensional Photonic Crystal Water Quality Sensor Based on Si/SiO₂

Conghao Xie

School of Physical Science and Technology, Tiangong University, Tianjin

Received: May 4, 2026; accepted: June 23, 2026; published: July 6, 2026

Abstract

One-dimensional photonic crystal is a multilayer optical structure formed by the periodic arrangement of two or more dielectric materials with distinct refractive index differences along a single direction. Relying on the unique characteristics of photonic band gap and band gap defects, it can effectively regulate the propagation of electromagnetic waves. In this paper, a sensor for detecting ammonium ion concentration in water is designed based on Si/SiO₂ one-dimensional photonic crystal, and its properties are comprehensively analyzed.

Keywords

Photonic Crystal, Band Gap Defect, Sensor



1. 引言

光子晶体是一种新型人工光学材料, 1987 年, 在半导体晶体及其电子带隙理论的基础上, Yablonovitch 和 Joannopoulos 提出了光子晶体的概念[1][2]。一维光子晶体是由两种或几种介电常数不同的介质材料在一维线性方向堆叠而成的, 电磁波经过此结构后, 某些波段的电磁波强度会因破坏性干涉而呈指数衰减, 无法在材料内传播, 相当于在透射谱上形成一段透射率为 0 的区域, 此即所谓的光子禁带结构。具有光子禁带结构的介电物质, 就称为光子晶体。此外, 若在光子晶体结构中间引入缺陷层, 例如改变其中一个周期的材料, 会产生光子局域[3]现象, 在禁带中出现一个透射峰, 这一现象也称为禁带缺陷。

随着农业生产中的农药, 饲料等工具的扩大使用, 水体污染问题日益严峻, 氮磷离子等污染物超标, 不仅导致减产, 还对生态环境和人类健康形成威胁。传统水质检测手段多存在操作复杂, 成本高, 难以实时监测等弊端, 无法满足当下水环境实时管控与快速预警的需求。因此, 研发一款高效、精准、便携的水质检测传感器, 对水环境监测治理具有重要的现实意义与应用价值。本文从解决水体质量检测这一实际问题出发, 利用一维光子晶体的光子禁带和禁带缺陷特性, 设计了 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N \text{D}(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构的一维光子晶体传感器用以检测水体中氯化铵浓度, 该传感器具有灵敏度高, 噪声和暗电流小, 结构简单可靠等优点。

2. 理论分析

对一维光子晶体透射谱的研究已有多种理论方法, 包括平面波展开法[4][5]、传输矩阵法[6]、时域有限差分法[7]、多重散射法[8]等, 本文基于 MATLAB 平台进行仿真设计, 采用传输矩阵法研究电磁波在一维层状晶体中的传播。

一维光子晶体为多层薄膜结构, 总传输矩阵由各单层介质的传输矩阵依次左乘得到。若结构依次为介质 1, 介质 2, 介质 3, 则总矩阵为 $M_{total} = M_3 \cdot M_2 \cdot M_1$ 。

对于无缺陷结构一维光子晶体, 即 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构, 设 Si 层的传输矩阵为 M_{Si} , SiO_2 层的传输矩阵为 M_{SiO_2} , 则一个周期(Si 层 + SiO_2 层)的传输矩阵为:

$$M_{period} = M_{\text{SiO}_2} \cdot M_{\text{Si}}$$

N 个周期的总传输矩阵为单周期矩阵的 N 次幂:

$$M_{total} = (M_{\text{SiO}_2} \cdot M_{\text{Si}})^N$$

对于含缺陷结构的一维光子晶体, 即 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N \text{D}(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构, 各部分矩阵定义如下:

1) 左侧 P 个周期堆(Si/ SiO_2 交替)的传输矩阵:

$$M_L = (M_{\text{SiO}_2} \cdot M_{\text{Si}})^P$$

2) 缺陷层的传输矩阵: M_d

3) 右侧 P 个周期堆(SiO_2 /Si 交替)的传输矩阵:

$$M_R = (M_{Si} \cdot M_{SiO_2})^P$$

含缺陷结构的总传输矩阵为三者的依次左乘:

$$M_{total} = M_R \cdot M_d \cdot M_L$$

$$\text{对于任意介质层的传输矩阵: } \begin{bmatrix} E_2 \\ H_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \phi & i\eta \sin \phi \\ \frac{i \sin \phi}{\eta} & \cos \phi \end{bmatrix}}_M \begin{bmatrix} E_1 \\ H_1 \end{bmatrix}$$

其中, 对于 TE 模, $\eta = \sqrt{\mu_0/\varepsilon} = \frac{\eta_0}{n \cos \theta}$ 为介质的特性阻抗, $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ 为真空特性阻抗,

$\phi = kd = \frac{2\pi}{\lambda} nd \cos \theta$ 是薄膜相位厚度。当 TM 模在晶体中传输, 特性阻抗变为 $\eta = \frac{\eta_0 \cos \theta}{n}$, 这是两种模在穿过光子晶体时的区别。

设总传输矩阵的一般形式为:

$$M_{total} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

则经整理推导得反射系数 $r = \frac{An_0 + Bn_0n_s - C - Dn_s}{An_0 + Bn_0n_s + C + Dn_s}$, 透射系数 $t = \frac{2n_0}{An_0 + Bn_0n_s + C + Dn_s}$, 其中 n_0, n_s

分别为入射空气和出射空气的折射率。则反射率 $R = |r|^2$, 透射率 $T = |t|^2$ 。

3. Si/SiO₂ 一维光子晶体传感器仿真

本章基于 MATLAB 数值仿真平台, 依靠上述理论分别对无缺陷周期结构 $(Si/SiO_2)^N$ 与含缺陷对称结构 $(Si/SiO_2)^N D (Si/SiO_2)^N$ 开展仿真计算, 系统探究结构周期数、介质层厚度、缺陷层折射率及厚度、入射角度等关键参数对传感器透射特性与禁带特征的影响规律, 明确各参数对传感器性能的调控机制。如图 1 所示, 本章涉及到的两种结构的示意图。

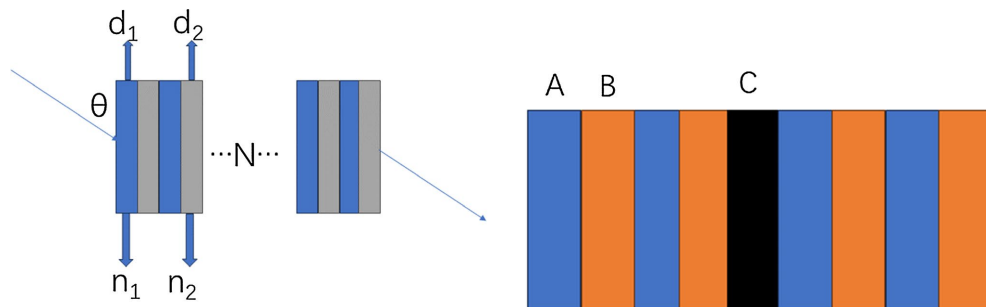


Figure 1. Structures of $(Si/SiO_2)^N$ and $(Si/SiO_2)^N D (Si/SiO_2)^N$

图 1. $(Si/SiO_2)^N$ 与 $(Si/SiO_2)^N D (Si/SiO_2)^N$ 结构

3.1. 材料模型

在本章的仿真实验当中, 我们需要考虑硅和二氧化硅两种材料的折射率和消光系数。

(1) 二氧化硅的折射率由 Sellmeier 公式描述:

$$n^2 - 1 = \frac{0.6961663\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0684043^2} + \frac{0.4079426\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1162414^2} + \frac{0.8974794\lambda^2}{\lambda^2 - 9.896161^2}$$

在 300 nm~1000 nm 波段，二氧化硅折射率变化不大， n 基本等于 1.46，变化可以忽略不计。二氧化硅在 300 nm~1000 nm 波段透明，消光系数视为 0 [9]。

(2) 关于硅的折射率与消光系数，与简单的氧化物不同，硅在 300 nm~1000 nm 波段经历了强烈的电子跃迁，因此无法用单一的 Sellmeier 方程描述。

我们在本章中使用 Green 教授在 2008 年发表的实验数据[10]。而 Green 在 2008 年的文章中并没有给出一个简短的解析代数式，而是通过物理建模结合实验测量，给出了一套基于光子能量的复折射率拟合数据。但在实际应用和程序化中，通常采用 Tauc-Lorentz (T-L)模型来表达这一时期的物理演化。在本章中，我们基于 Green 教授的实验数据在 MATLAB 进行描点作图，并使用样条插值使曲线更加平滑。

硅和二氧化硅的折射率与消光系数曲线如图 2 所示。显然，在 400 nm 以下的波长范围内，硅的折射率变化过大，且消光系数过大，因此该材料制成的传感器不适用于紫外光波。

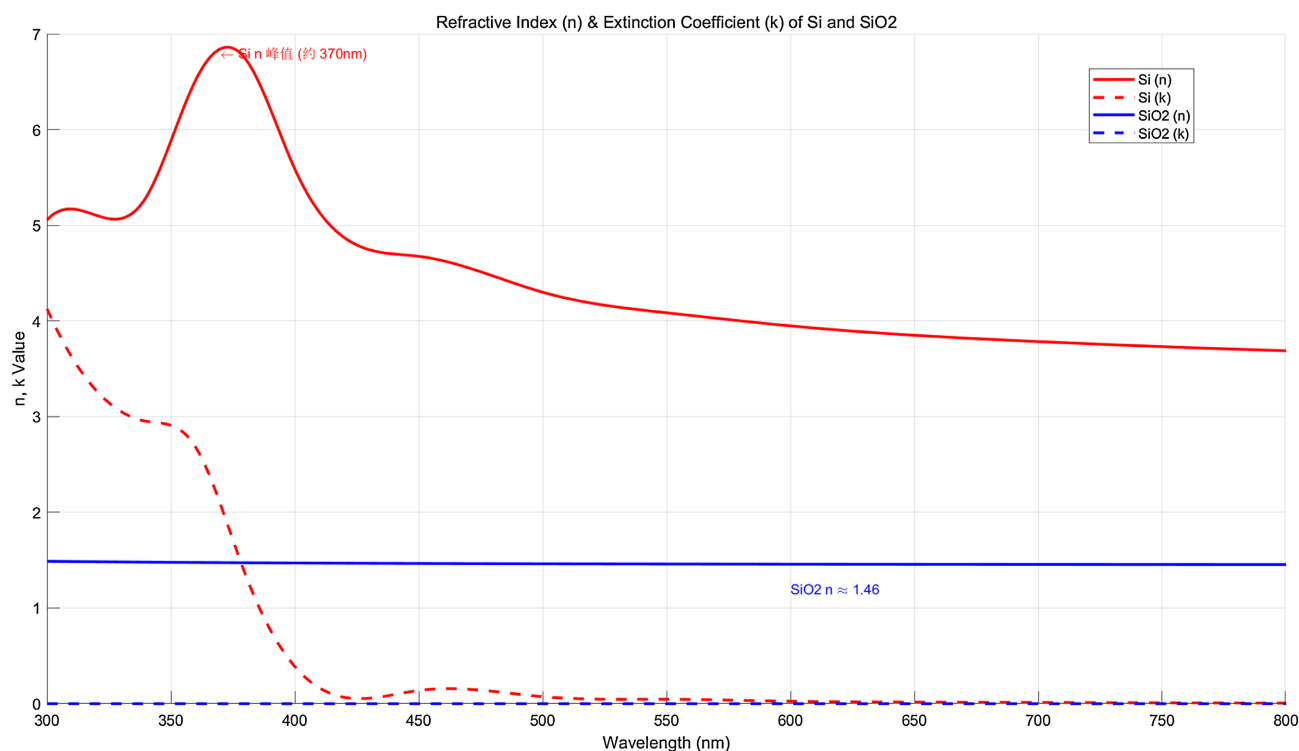


Figure 2. Refractive index and extinction coefficient of silicon and silicon dioxide

图 2. 硅和二氧化硅的折射率与消光系数

3.2. 无缺陷结构透射谱分析

首先，我们研究 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构中周期数 N 对透射谱的影响，我们将 Si 层厚度设置为 40 nm， SiO_2 层厚度设置为 80 nm，周期数依次为 6，8，10，12 次。观察到的透射谱如图 3 所示。

如图 3 所示，在此参数设置下，可以在 460 nm~720 nm 波段获得一个较为良好的禁带区域，并且周期数 N 的改变并不会明显影响禁带宽度和位置。但是，随着周期数 N 的增加，禁带边缘的衰减率变得更加明显，非禁带透射率也变得更低。

其次，我们研究 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构中两种材料的厚度对光子禁带的影响，我们将周期数 N 设置为 10，依次将 Si/SiO_2 材料的厚度设置为 40 nm/40 nm，40 nm/80 nm，40 nm/120 nm，100 nm/40 nm，80 nm/40 nm，60 nm/40 nm，也即依次保持硅层厚度为 40 nm 不变，依次改变两层的厚度比例，然后比例翻转，保持二

氧化硅层厚度为 40 nm 不变, 依次改变两层的厚度比例。观察到的透射谱如图 4 所示。

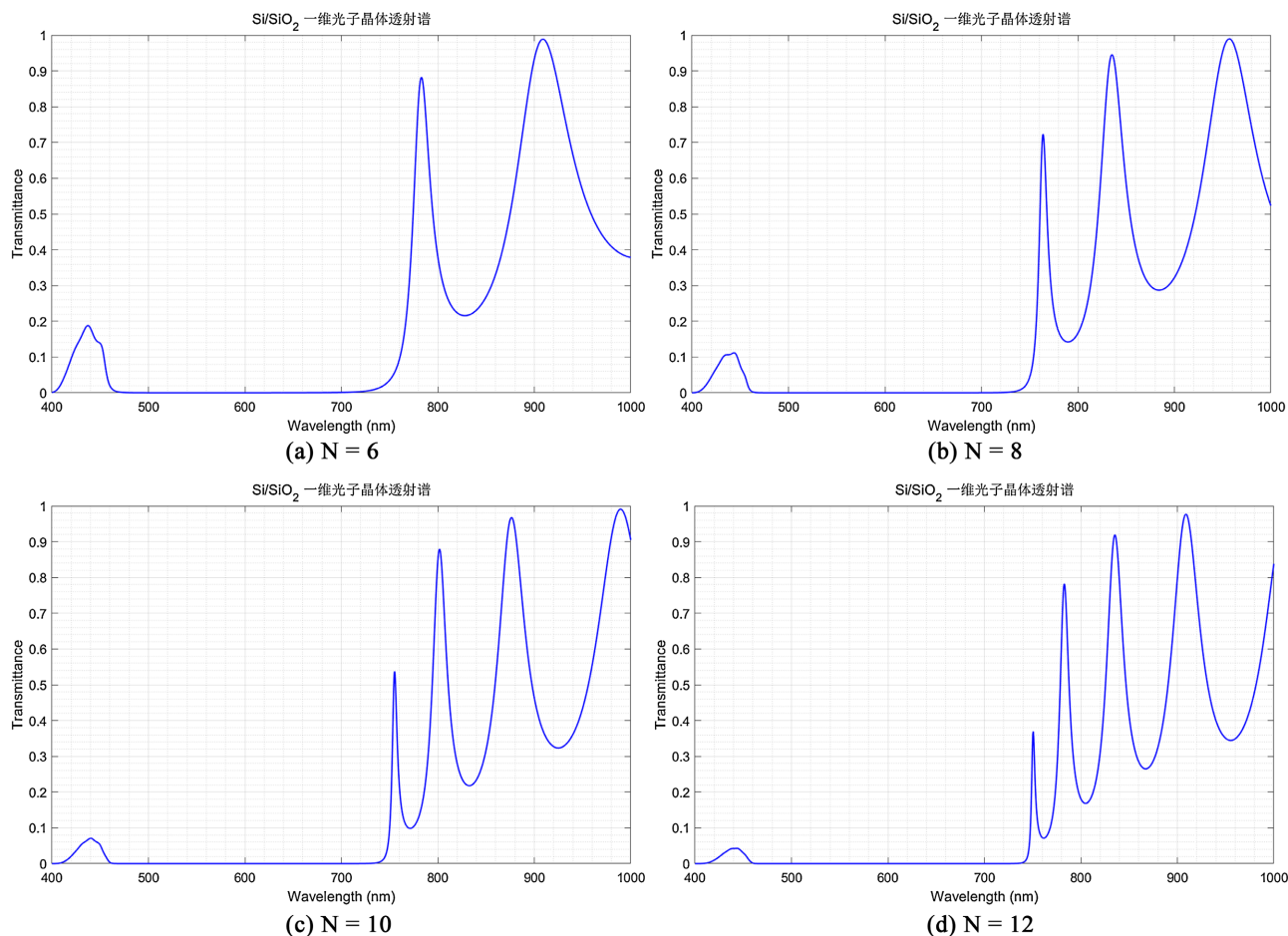


Figure 3. Influence of period number on transmission spectrum

图 3. 周期数对透射谱的影响

如图 4 所示, 显然, 当硅材料厚度不变时, 增加二氧化硅材料厚度倍数, 光子禁带出现的位置向长波方向偏移, 且禁带宽度会增大; 而当硅比二氧化硅厚度更厚时, 禁带宽度会大幅减小, 禁带位置也会随着硅的厚度增加而向长波方向移动。因此, 我们认为硅材料更薄的情况下禁带范围更好。

下面, 我们确定硅与二氧化硅的厚度比例为 1 比 2, 同时改变二者厚度, 探究透射谱的变化。依次将 Si/SiO₂ 材料的厚度设置为 40 nm/80 nm, 50 nm/100 nm, 60 nm/120 nm, 80 nm/160 nm。得出的透射谱如图 5 所示。

如图 5 所示, 当 Si/SiO₂ 材料的厚度为 40 nm/80 nm 时, 禁带范围是 460 nm~720 nm; Si/SiO₂ 材料的厚度为 50 nm/100 nm 时, 禁带范围是 540 nm~900 nm; Si/SiO₂ 材料的厚度为 60 nm/120 nm 时, 禁带范围是 620 nm~1060 nm。当 Si/SiO₂ 材料的厚度为 80 nm/160 nm 时, 一级禁带已经完全偏移至可见光之外, 并且在 525 nm~575 nm 波段内产生了一个新的二级禁带。若继续增大厚度, 二级禁带会依据上述规律继续红移并扩展。

根据以上三组仿真实验, 我们可以得出对无缺陷一维光子晶体光子禁带的调控方法。因此, 我们可以凭借这些特性明确该传感器可以在可见光及近红外光的较为广谱区域实现传感功能。

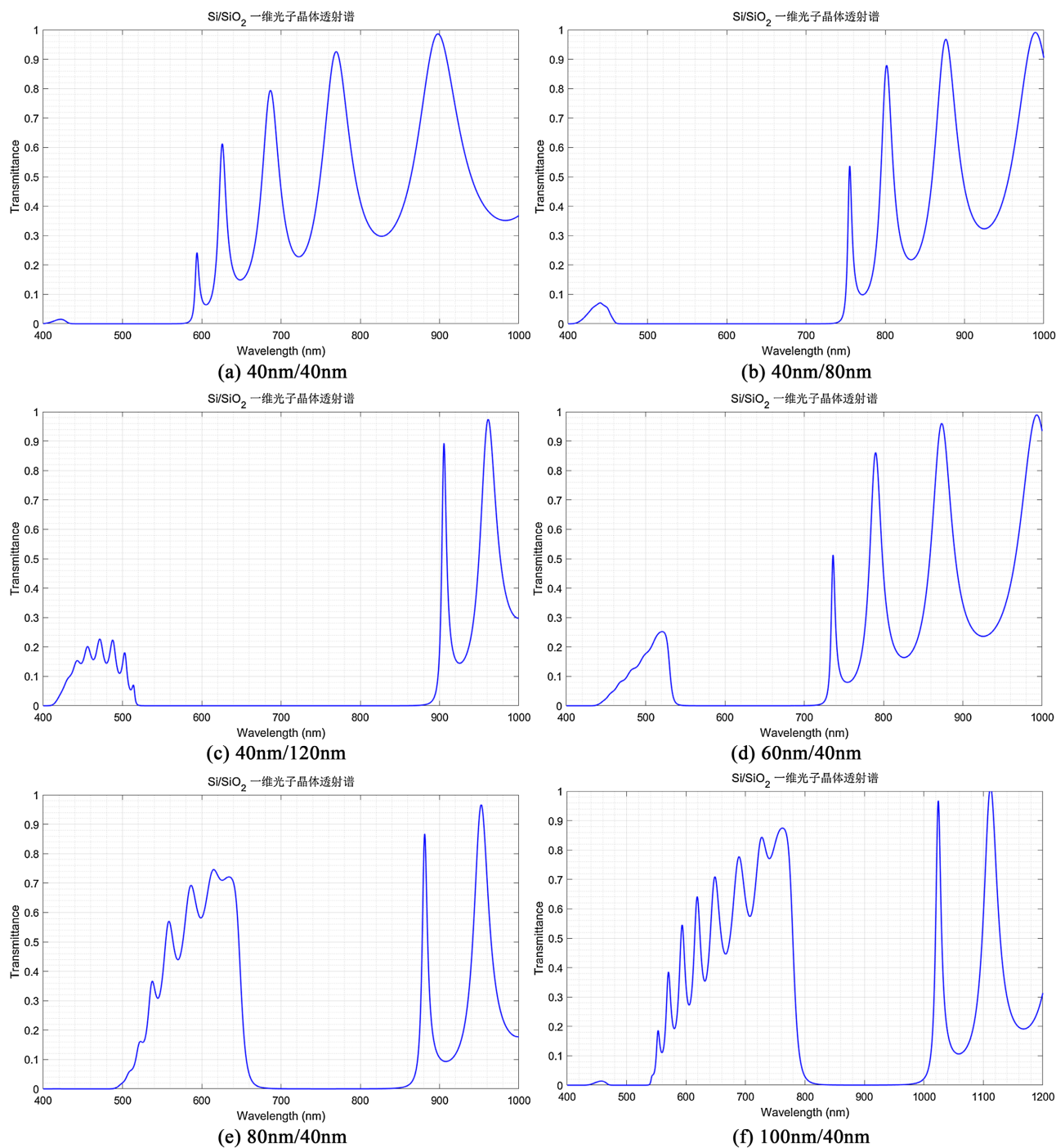


Figure 4. Influence of thickness ratio on transmission spectrum

图 4. 厚度比对透射谱的影响

3.3. 缺陷结构透射谱分析

在无缺陷结构形成的禁带基础上，引入缺陷层。由于光子晶体的禁带缺陷特性，在光子晶体中引入缺陷层，会在透射谱的禁带范围内出现透射峰，实现传感器功能。现分析透射峰位置与缺陷材料之间的关系。对于(Si/SiO₂)^ND(Si/SiO₂)^N结构，我们设置循环周期为N为3，每层Si/SiO₂介质厚度不变，设置为

50 nm/100 nm, D 层为 1.8 mol/L 的氯化铵溶液, 折射率是 1.36, 厚度为 200 nm。引入缺陷态二者对比如图 6 所示。

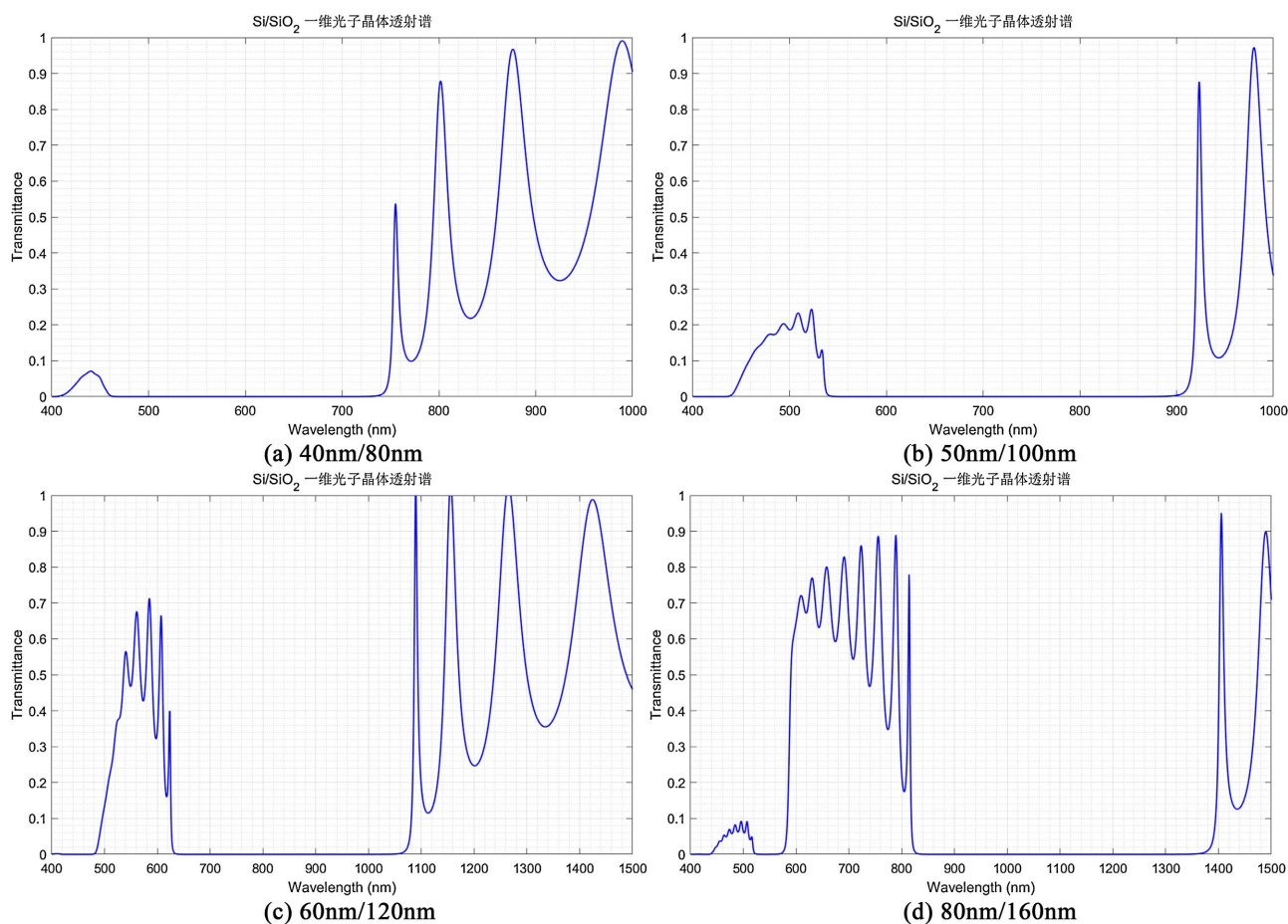


Figure 5. Influence of material thickness on transmission spectrum

图 5. 材料厚度对透射谱的影响

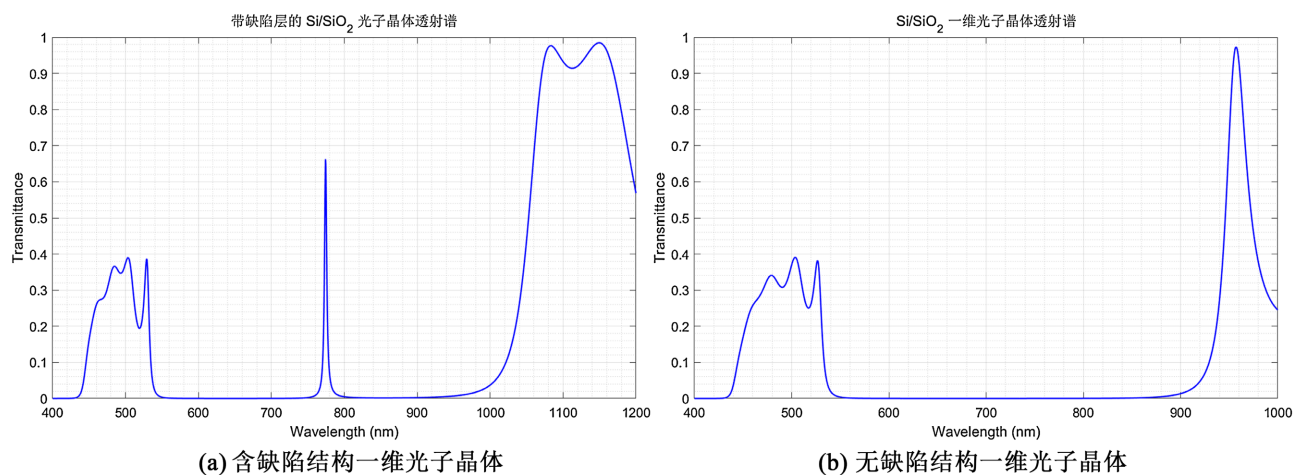


Figure 6. Transmission spectra of defective and defect-free structures

图 6. 含缺陷结构与无缺陷结构的透射谱

如图 7 所示, 随着缺陷带的引入, 禁带产生了少量的展宽, 且边缘衰减率降低。同时在 775 nm 处出现了一个透射峰, 其透射率约为 0.67。接下来, 我们将研究 D 层折射率和厚度的变化对透射峰的影响。

首先, 保持以上数据不变, 仅改变氯化铵溶液浓度。设置五组实验, 氯化铵溶液浓度分别为 0 mol/L, 0.6 mol/L, 1.2 mol/L, 1.8 mol/L, 2.4 mol/L。对应的折射率分别为 1.33, 1.34, 1.35, 1.36, 1.37。结果如图 7 所示。

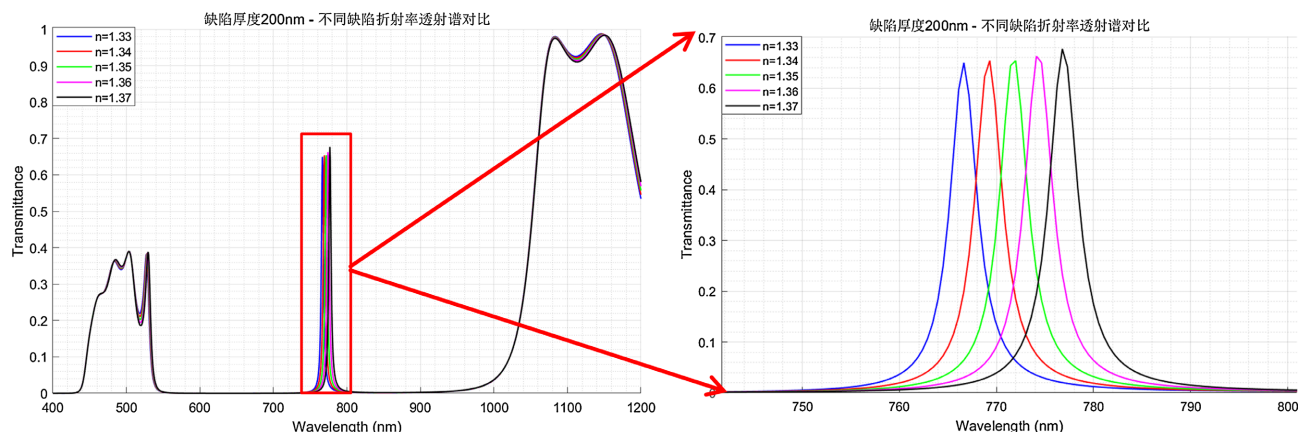


Figure 7. Influence of defect layer concentration on transmission peak

图 7. 缺陷层浓度对透射峰的影响

如图 7 所示, 当氯化铵缺陷层厚度为 200 nm 时, 将其浓度从 0 不断增加至饱和(蓝、红、绿、紫、黑对应的浓度逐渐增加), 可发现禁带中的透射峰发生红移, 从 766 nm 偏移至 778 nm, 整体移动了 12 nm。因此, 该传感器的灵敏度可以表示为 $S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n} = 300 \text{ nm/RIU}$ 。

其次, 我们取氯化铵浓度为 1.8 mol/L 不变, 改变缺陷层厚度。同样设置 5 组实验, 缺陷层厚度分别为 160 nm, 180 nm, 200 nm, 220 nm, 240 nm。结果如图 8 所示。

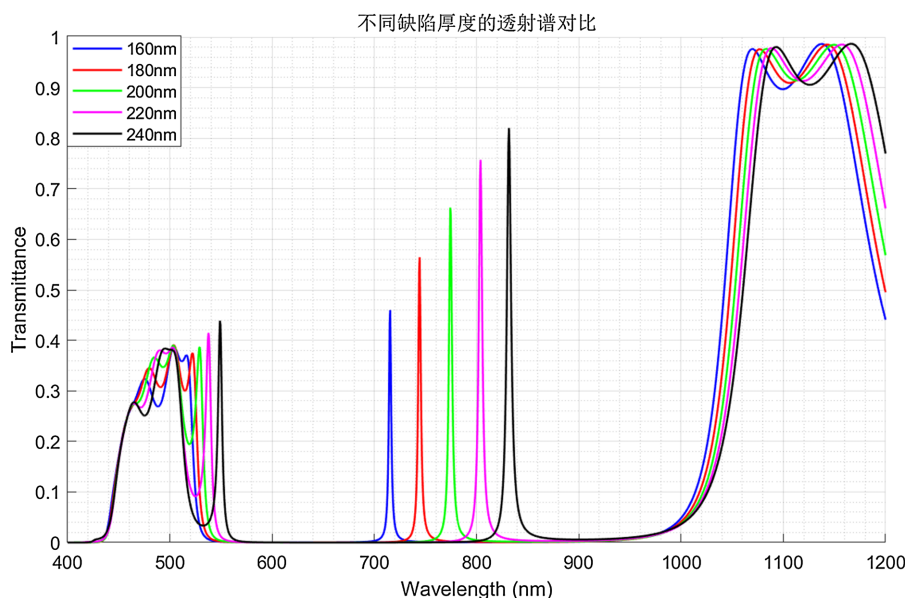


Figure 8. Influence of defect layer thickness on transmission peak

图 8. 缺陷层厚度对透射峰的影响

如图 8 所示, 当氯化铵浓度为 1.8 mol/L 时, 将其厚度不断增加(蓝、红、绿、紫、黑对应厚度依次增加), 可发现禁带中的透射峰依旧发生红移, 从 715 nm 偏移至 831 nm, 整体移动了 116 nm。相比改变氯化铵浓度而言, 该传感器对缺陷层厚度的变化更加敏感。因此, 可以通过调节厚度来控制此传感器的适用范围。

3.4. 入射角度对透射谱的影响

上文对正入射情况下的一维光子晶体传感器特性进行了全面地分析, 接下来我们进一步研究不同的入射角度对一维光子晶体传感器的影响。我们直接选用 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N \text{D}(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构进行实验, 其中 N 取 3, Si/SiO_2 的厚度取 50 nm/100 nm, 氯化铵层厚度取 200 nm, 折射率取 1.38。在此基础上设置七组实验, 入射角度分别为 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60 度。考虑到 TE 模和 TM 模在斜入射的情况下透射特性不同, 因此分别进行仿真, 透射谱如图 9 所示。

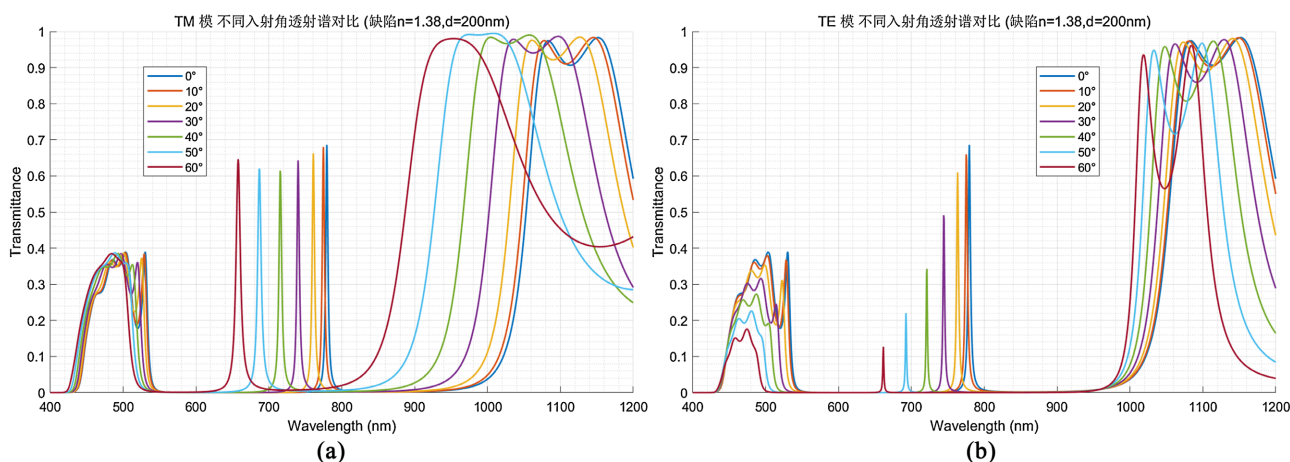


Figure 9. Oblique incidence transmission curves of TE and TM modes

图 9. TM 模与 TE 模斜入射透射曲线

如图 9 所示, 入射角发生变化时, 禁带宽度与透射峰位置均发生了较为明显的变化, 其中禁带宽度会随着入射角的增大而减小, 透射峰会随着入射角的增大发生蓝移。二者的变化幅度与入射角度并不成正比。并且在入射角大于 20 度后, 透射峰会发生明显偏移。

其次, 通过对比 TE 和 TM 两种模式我们可以发现: TM 模的禁带宽度的变化幅度要高于 TE 模。TE 模透射峰的透射率会随着角度的增大变小, 而 TM 模并没有明显的改变。

因此我们认为, 该 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N \text{D}(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 传感器应该避免光信息大角度入射, 造成结果的偏差。

4. 结语

本文基于 MATLAB 仿真平台, 首先说明了一维光子晶体传输矩阵理论基础, 其次, 分别对硅和二氧化硅两种材料的折射率和消光系数, 以及 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N \text{D}(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 和 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 两种结构的一维光子晶体进行仿真, 全面地研究了不同的参数对传感器的调控结果。研究表明:

(1) 在 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构中, 正入射时, 随着周期数增加, 禁带边缘衰减率更高, 禁带范围更加清晰; 改变两种材料的厚度比例, 会显著影响禁带的宽度; 随着厚度的增加, 禁带所在位置会向着长波方向偏移, 且禁带宽度会增加。

(2) 在 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N \text{D}(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 结构中, 正入射时, 由于 D 层的引入, 会在禁带中产生一个透射峰。透

射波长会随着 D 层的厚度和折射率的增加向长波方向移动。一维光子晶体传感器主要利用这一性质来检测水体质量, 灵敏度可达到 300 nm/RIU。

(3) 在斜入射情况下, 随着入射角的增大, TM 模禁带宽度明显减小, 但透射峰的透射率变化不大; TE 模禁带宽度变化不明显, 但透射峰的透射率明显减小。且以上参数的变化与入射角的变化均不成正比。因此, $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 和 $(\text{Si}/\text{SiO}_2)^N$ 传感器的使用应尽量控制在入射角小于 20 度的范围内。

此外, 该论文设计的一维光子晶体传感器仍然存在一定的缺陷以待改进。应用在该传感器中的硅材料, 受温度变化的影响较大。首先, 硅在 400 nm 至 1000 nm 的工作区间内, 折射率受温度变化影响较大, 现有实验数据表明, 在 400 nm 至 500 nm 波段, dn/dT 在 2.0 至 $2.3 \times 10^{-4}/^\circ\text{C}$; 在 500 nm 到 800 nm 波段, dn/dT 在 1.7 至 $1.9 \times 10^{-4}/^\circ\text{C}$; 在 800 nm 到 1000 nm 波段, dn/dT 在 1.6 至 $1.7 \times 10^{-4}/^\circ\text{C}$ [11] [12]。其次, 硅材料的体积也会随着温度的变化发生明显改变, 因此会产生厚度上的变化最终导致禁带偏移, 不过, 相较于温度对折射率的影响, 体积的变化幅度要小很多。以上因硅材料的不稳定性导致的缺陷, 在二氧化硅材料和氯化铵溶液上并不明显, 因此不作讨论。

参考文献

- [1] Yablonovitch, E. (1987) Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics. *Physical Review Letters*, **58**, 2059-2062. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.58.2059>
- [2] John, S. (1987) Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices. *Physical Review Letters*, **58**, 2486-2489. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.58.2486>
- [3] Tang, Z., Yang, X., Lu, J. and Liu, C.T. (2014) Super-Strong Photonic Localization in Symmetric Two-Segment-Connected Triangular Defect Waveguide Networks. *Optics Communications*, **331**, 53-58. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2014.05.057>
- [4] Zhang, H., Liu, S., Kong, X., Bian, B. and Zhao, H. (2012) Properties of Omnidirectional Photonic Band Gap in One-Dimensional Staggered Plasma Photonic Crystals. *Optics Communications*, **285**, 5235-5241. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2012.08.010>
- [5] Zhang, H.F., Liu, S.B. and Kong, X.K. (2013) Enlarged Omnidirectional Band Gap in One-Dimensional Plasma Photonic Crystals with Ternary Thue-Morse Aperiodic Structure. *Physica B: Condensed Matter*, **410**, 244-250. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.10.025>
- [6] Yang, B., Liang, J., Liang, Z. and Wang, W. (2012) The Band Structures of Metallic Photonic Crystals Filled with Different Mediums. *Journal of Infrared and Millimeter Waves*, **31**, 325-329. <https://doi.org/10.3724/sp.j.1010.2012.00325>
- [7] 汤炳书, 李正华, 刘丽丽, 等. 二维光子晶体异质结 Order-N 数值研究[J]. 中国激光, 2006, 33(9): 1195-1199.
- [8] Chang, T. and Wu, C. (2013) Analysis of Tuning in a Photonic Crystal Multichannel Filter Containing Coupled Defects. *Optik*, **124**, 2028-2032. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2012.06.023>
- [9] Malvern, I.H. (1965) Optical Dispersion of Fused Silica. *Journal of the Optical Society of America*, **55**, 1042-1046.
- [10] Green, M.A. (2008) Self-Consistent Optical Parameters of Intrinsic Silicon at 300K Including Temperature Coefficients. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **92**, 1305-1310. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2008.06.009>
- [11] Green, M.A. (2022) Improved Silicon Optical Parameters at 25°C, 295 K and 300 K Including Temperature Coefficients. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, **30**, 164-179. <https://doi.org/10.1002/pip.3474>
- [12] Jellison Jr., G.E. and Burke, H.H. (1986) The Temperature Dependence of the Refractive Index of Silicon at Elevated Temperatures at Several Laser Wavelengths. *Journal of Applied Physics*, **60**, 841-843. <https://doi.org/10.1063/1.337386>