



DOI:10.13364/j.issn.1672-6510.20160153

## 液态磁性光子晶体结构参数对呈色特性的影响分析

胡光强, 陈永利, 刘文霞, 王佳辉, 李龙成  
(天津科技大学包装与印刷工程学院, 天津 300222)

**摘要:** 通过光学软件 FDTD Solutions 对液态磁性光子晶体进行建模仿真, 磁性球体材料为  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , 液体介质为  $\text{H}_2\text{O}$ . 设定 4 个参数, 球体半径  $R$ 、两晶面的间距  $M$ 、同一晶面上的球间距  $F$ 、晶面层数  $C$ , 逐一分析每一个参数对光子晶体在可见光谱内的呈色性能影响, 确定光子晶体呈现颜色时的最佳结构参数组合. 分析得出的结构参数对液态磁性光子晶体的实验合成有重要的指导意义.

**关键词:** 光子晶体; 结构参数; FDTD 方法; 颜色

**中图分类号:** O734<sup>+</sup>.3      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1672-6510(2017)05-0074-05

## Effect of Parameters of Liquid Magnetic Photonic Crystal Structure on Color Characteristics

HU Guangqiang, CHEN Yongli, LIU Wenxia, WANG Jiahui, LI Longcheng

(College of Packaging and Printing Engineering, Tianjin University of Science & Technology, Tianjin 300222, China)

**Abstract:** The structure of liquid magnetic photonic crystal model was simulated by optical software FDTD Solutions.  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  was selected as magnetic sphere material and  $\text{H}_2\text{O}$  is the liquid medium. Four parameters were set:  $R$  represents the radius of the magnetic sphere,  $C$  is the structure number of layers,  $F$  means the spherical space in the same plane and  $M$  refers to the crystal space between two layers. The effect of each parameter on the coloring properties of photonic crystal was analyzed in the visible spectral range and the best combination of structural parameters was determined when photonic crystals were able to render color. The structural parameters obtained in this research play an instructive role in synthesizing liquid magnetic photonic crystal and have important theoretical significance.

**Key words:** photonic crystal; structural parameter; FDTD method; colour

液态磁性光子晶体是把磁性微球颗粒分散在液体介质中, 在外在磁场的作用下, 磁性微球颗粒能够自组装成有序的一维光子晶体结构, 改变磁场的大小可以调节晶面间距的距离, 从而能够呈现出不同的颜色. 近年来, 关于磁性液态光子晶体的制备的实验方法层出不穷, 水热法、共沉淀法、水解法等是制备磁性液态光子晶体常用方法<sup>[1]</sup>, 这些方法对制备磁性液态光子晶体实验的操作有一定的指导作用和实践意义. 但由于实验过程受很多反应条件的影响, 实验结果会不可避免地存在偏差, 难以充分全面地分析结构参数的变化对光子晶体呈色性能的影响. 本文通过光学软件 FDTD Solutions<sup>[2]</sup>对液态磁性光子晶体结

构进行分析, 通过改变各个结构参数分析液态磁性光子晶体光谱的反射比、波峰以及半波宽的变化, 得出一组参数, 使得目标颜色的反射比最大, 以及半波宽相对较窄, 这样颜色鲜明度和饱和度就会呈现出最佳的状态, 此时呈现的颜色为最佳颜色. 本文研究结果对合成具有特定颜色的磁性光子晶体具有很好的指导作用.

### 1 液态磁性光子晶体的结构模型

液态磁性光子晶体结构模型为正六方体结构<sup>[3]</sup>, 如图 1 所示. 磁性球体材料为  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , 球体半径为  $R$ ,

收稿日期: 2016-05-03; 修回日期: 2016-08-06

基金项目: 大学生创新创业训练计划资助项目(201510057018, 201610057008)

作者简介: 胡光强(1989—), 男, 湖北人, 硕士研究生; 通信作者: 陈永利, 教授, chen Yongli@tust.edu.cn

球体周围的介质为  $H_2O$ , 两晶面的间距为  $M$ , 同一晶面上的球间距为  $F$ , 晶面层数为  $C$ . 在建模仿真时, 结构在  $x$ 、 $y$  方向采用周期边界条件,  $z$  方向采用 PML

边界条件, 光源用平面波光源, 并沿着  $z$  轴负方向垂直入射.

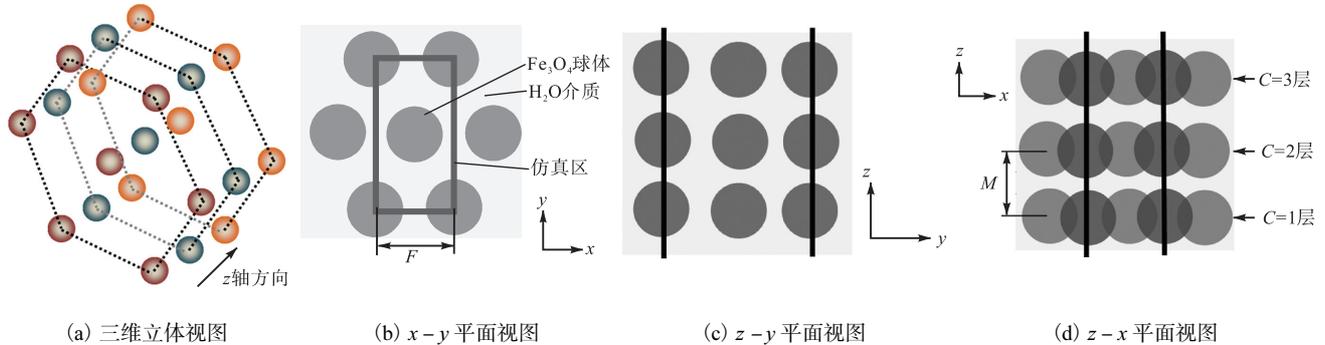


图 1 液态磁性光子晶体结构图

Fig. 1 Structure model of liquid magnetic photonic crystal

## 2 仿真参数的设置

仿真设计了 4 个动态参数, 球体半径  $R$ 、同一面上球间距  $F$ 、两面的间距  $M$ 、结构的总层数  $C$ . 为了能得到呈现各种颜色的最佳参数组合, 在仿真的过程中需要对结构参数进行优化. 一个参数变化时, 其余的参数不变为定值, 逐步改变变化的参数值直到得出最佳值. 仿真时先优化参数  $C$ , 确定结构所需要的最少层数, 然后在这个层数的基础上依次优化半径  $R$ 、球间距  $F$ 、面间距  $M$ .

## 3 仿真结果与分析

### 3.1 层数 $C$ 对结构呈色性能的影响

在分析层数对结构呈色性能的影响时, 动态参数  $C$  由 1 到 20 层逐渐变化, 其余的参数值设为固定值, 其中参数  $R$  为 20 nm, 球间距  $F$  为 40 nm, 面间距  $M$  为 210 nm, 最后用等高线图(图 2)表现层数  $C$ 、波长、反射率三者之间的关系, 等高线的数值表示反射率的大小.

由图 2 可知: 其他参数固定不变, 逐渐增加结构的层数, 反射率的值有明显的变化. 层数太少只有 1~2 层时, 结构对光的反射作用很弱, 反射率大约只有 10%~20%, 并且半波宽很大, 表现出来的颜色不是很鲜明; 随着层数的增加, 反射率也随之增大, 层数增加到 14 层时, 反射率的最大值达到了 70%, 在这个过程中波峰维持在 550~600 nm 的范围内, 半波宽逐渐减小, 颜色越来越鲜明; 但是, 层数由 15~20

层逐渐增加时, 反射率的最大值基本没变化, 光谱的形状也没什么变化, 这是因为光子晶体需要光的多次反射和干涉, 结构需要一定的层数. 这也就说明大于 14 层后, 结构中层数的变化不会对光的作用产生大的影响. 因此, 要得到一个最佳的仿真值, 结构的层数最少要在 14 层以上, 同时为了仿真的高效性, 后面在分析别的参数时, 都是把层数设置为 15 层.

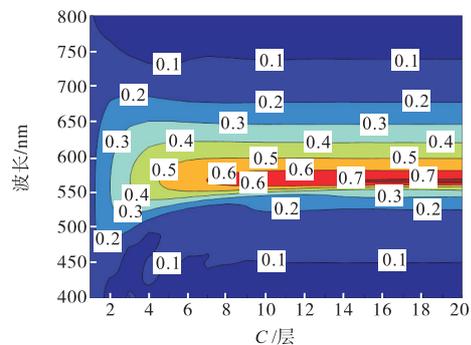


图 2 层数对呈色性能的影响

Fig. 2 Influence of the layer on coloring properties

### 3.2 球半径 $R$ 和同面球间距 $F$ 对结构呈色性能的影响

分析球半径  $R$  和球间距  $F$  对结构呈色性能的影响的过程中, 设置晶面层数为 15 层, 两面之间的面间距为 210 nm, 半径的取值范围为 20~90 nm, 步长为 10 nm, 每取一个半径值, 就得到一组关于同一面上的球间距  $F$  逐渐取值变化的光谱反射率图, 这里  $F$  的最小取值为半径的 2 倍, 此时两个球为紧挨着的, 最大取值是在最小取值的基础上加上 100 nm, 即同一面的球间距变化范围为  $2R \sim (2R + 100 \text{ nm})$ , 步长为 10 nm, 最终得到半径  $R$ 、球间距  $F$  与光谱反射率

的关系图如图 3 所示,对应的最大反射率值和波峰值见表 1.

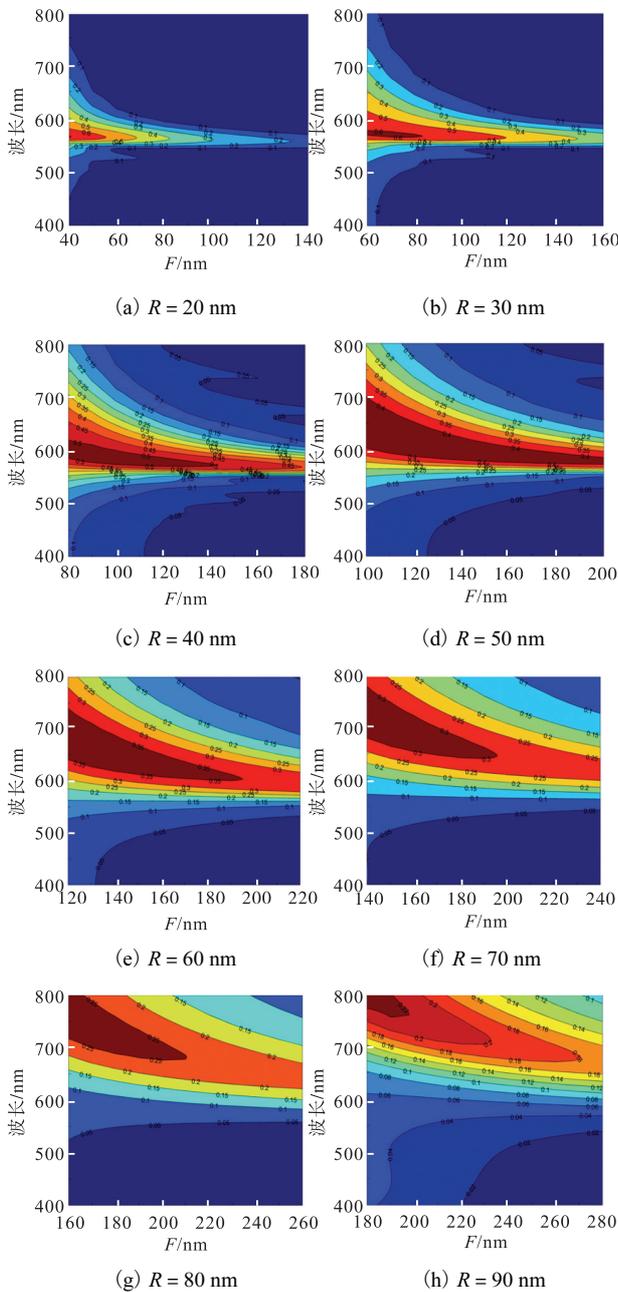


图 3 半径  $R$  和同面球间距  $F$  对结构呈色性能的影响

Fig. 3 Influence of radius  $R$  and the spherical space  $F$  in the same plane on coloring properties

从图 3 和表 1 可以看出:半径  $R$  不变时,随着同一面上两球的间距逐渐增大,光谱反射率在不断减小,半波宽有轻微减小.同时也可以发现,当球的半径  $R$  较小时,随着球间距的增大,波峰值基本上不变.例如,当  $R$  取值为 20 nm 时,波峰值基本维持在 566 nm 的位置,此时球面间距虽在变化,颜色表现为绿色. $R$  取值分别为 30 nm 和 40 nm 时,每个图中各

条光谱线的波峰值也基本没有变.但随着半径的增大,球间距的增大会导致波峰向波长大的方向偏移,即向红偏移.例如,当  $R$  取值为 80 nm,波峰值随着球间距  $F$  的增大有明显的向红偏移;半径  $R$  变化时,随着半径的变大,由球间距变化所引起的光谱反射率的最大值在不断的变小,并且最大反射率的波峰随着半径的变大逐渐向红偏移;半径  $R$  为 20 nm 时,最大反射率的值最大,为 70.52%,波峰为 566 nm,而半径  $R$  为 90 nm 时,最大反射率值最小,仅有 22.46%,波峰值为 776 nm.半径的增大导致半波宽在逐渐变大,半径  $R$  为 20 nm 时,拥有最大反射率的光谱半波宽的值大约为 100 nm,此时颜色的鲜明度较高;但半径为 90 nm 时,在可见光谱内没有半波宽的值对应,并且反射率也低,此时颜色鲜明度不高.总的来说,半径  $R$  的增大,会导致反射率的值减小,半波宽增大,波峰向红偏移;球面间距的增大会导致反射率的减小,半波宽轻微减小,半径较小时,波峰基本不变,半径较大时,波峰向红偏移.得出上面的结果是因为球半径和间距较小时,更加有利于光的干涉和衍射,半径增大时,根据布拉格衍射原理,晶面间距会增大,导致波峰向红偏移.同时,由于  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  具有复合折射率,不同尺寸的材料对光的色散以及消光作用不同,也会导致结构对光的反射效果不同.因此,如果要使得液态磁性光子晶体的颜色色彩鲜明,呈色效果最佳,球体的半径要尽量小,球面间距也要尽量小.由以上的分析可知:半径取 20 nm,球间距为 40 nm 时,结构对光的反射率最大,为 70.52%,半波宽也较窄,此时的颜色明亮且饱和度高,呈色效果最佳.

表 1 不同的  $R$  值所对应的最大反射率值和波峰值

Tab.1 Maximum reflectivity value and peak value of different  $R$  value

半径 $R/\text{nm}$	最大反射率/%	波峰/nm
20	70.52	566
30	62.73	570
40	52.58	583
50	44.86	627
60	38.93	683
70	33.06	720
80	27.54	762
90	22.46	776

### 3.3 面间距 $M$ 对结构呈色性能的影响

分析面间距  $M$  对结构呈色性能的影响时,设置晶面的层数为 15 层,球的半径  $R$  为 20 nm,同一面的球间距  $F$  为 40 nm,动态参数  $M$  的取值范围是 40 ~ 280 nm,步长为 20 nm,得到的结果如图 4 所示.由

图 4 可知: 其他参数都不变时,  $M$  从 40 nm 增加到 140 nm 时, 在可见光范围内光的反射率低于 10%, 且没有波峰, 基本上不能呈现出颜色; 间距从 140 nm 逐渐地增加到 280 nm 时, 所得到的光谱图都只有一个波峰值, 可以观察到光谱的波峰逐渐在向红偏移, 波峰处所对应的反射率都很大, 最低的都接近 60%, 并且半波宽基本上没变, 这也就说明在一定的范围内调节面间距  $M$  能够呈现出可见光谱范围内的不同颜色, 面间距的改变对光的反射率值和半波宽影响不大, 主要改变的是颜色的色相, 这与布拉格衍射原理晶格间距直接影响衍射波长相一致。

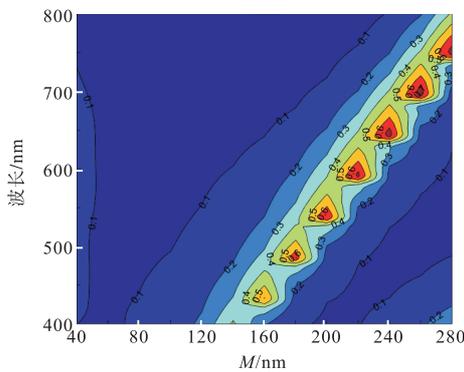


图 4 面间距  $M$  对呈色性能的影响

Fig. 4 Influence of interplanar crystal space  $M$  on coloring properties

#### 4 液态磁性光子晶体结构呈现颜色的参数设计

通过以上的分析结论, 就可以设计液态光子晶体正六方体模型呈现出各种颜色的参数组合, 各个参数见表 2, 得到的光谱图如图 5 所示, 色度坐标如图 6 所示。

表 2 参数的设置

Tab. 2 Setting of parameters

$M/\text{nm}$	$R/\text{nm}$	$F/\text{nm}$	$C/\text{层}$	波峰/ $\text{nm}$	最大反射率/%	呈现颜色
150	20	40	15	405	55.93	蓝
180	20	40	15	485	62.12	青
190	20	40	15	512	62.41	绿
200	20	40	15	539	63.05	黄
230	20	40	15	618	65.80	红

对照表 2、图 5 及图 6, 每一组结构参数都有相应的颜色与之对应, 在其他参数都优化好之后, 随着晶面间距  $M$  取值不同, 依次可得到代表蓝青绿黄红 5 个颜色的光谱, 光谱的色品坐标对应图 6 中色品坐

标系中的 5 个点  $A$ 、 $B$ 、 $C$ 、 $D$ 、 $E$ , 图中  $O$  点为照明体的色度坐标. 这五种颜色的反射比和纯度都比较高, 能够达到呈现结构色的目的. 因此, 熟悉正六方体结构液态磁性光子晶体结构参数对呈现性能的影响后, 就可依照变化的规律设计出目标颜色的结构参数, 再在严格的实验条件下依照结构参数进行合成加工并应用于实际. 当然, 实验加工或合成出来的液态磁性光子晶体想要达到与理论值基本一致, 需要对实验方法、实验条件以及实验材料进行严格地筛选把控。

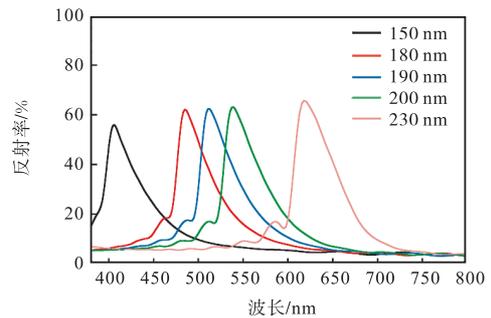


图 5 结构的反射率光谱

Fig. 5 Reflective spectra of the designed structure

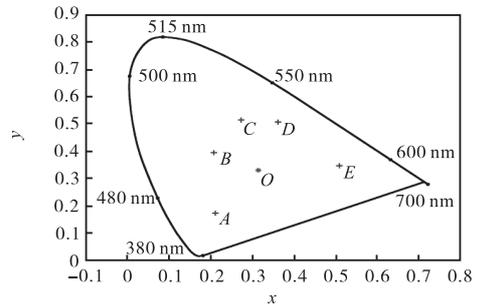


图 6 光谱色品坐标

Fig. 6 Coordinate of reflective spectra chromaticity

#### 5 结论

结构的层数  $C$ 、球半径  $R$ 、同一面上的球间距  $F$  以及两晶面的间距  $M$  对液态磁性光子晶体的呈色都有影响. 结构层数  $C$  值越大, 光子晶体对颜色的反射比越大, 呈色效果越好, 但超过一定的数值后, 对呈色效果的影响不是很明显, 将稳定在一个恒定的值; 球半径  $R$  和球间距  $F$  变化直接影响颜色的反射比、半波宽以及波峰的变化, 球半径  $R$  越小, 球间距  $F$  的距离越小, 结构的呈色效果越好; 晶面间距  $M$  直接影响波峰的变化, 当两面的间距大于一定的数值后, 间距增大, 波峰逐渐向红偏移, 并且反射比也有小范围的增加. 根据分析得出的呈色规律就可以对目标颜

色设计出相应的结构参数,呈现出可见光谱范围内的各种颜色.

参考文献:

[ 1 ] Luo W, Ma H, Mou F, et al. Steric-repulsion-based magnetically responsive photonic crystals[J]. *Advanced Materials*, 2014, 26(7) : 1058–1064.

[ 2 ] Shi X, Shi L, Li M, et al. Efficient luminescence of long persistent phosphor combined with photonic crystal[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2014, 6(9) : 6317–6321.

[ 3 ] Ge J P, Hu Y X, Zhang T R, et al. Self-assembly and field-responsive optical diffractions of superparamagnetic colloids[J]. *Langmuir*, 2008, 24(7) : 3671–3680.

[ 4 ] Jung K Y, Ju S, Teixeira F L. Application of the modal CFS-PML-FDTD to the analysis of magnetic photonic

crystal waveguides[J]. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, 2011, 21(4) : 179–181.

[ 5 ] 王明吉,张莎,孙鉴. 二维正方六边柱形光子晶体带隙结构研究[J]. *科技视界*, 2012(25) : 37–38.

[ 6 ] 李传起,范庆斌,陆叶,等. 多信道异质结构光子晶体滤波器[J]. *光学精密工程*, 2015, 23(8) : 2171–2177.

[ 7 ] 张琴,李文胜,付艳华. 一种光子晶体滤波器的设计[J]. *半导体光电*, 2014, 35(4) : 611–613.

[ 8 ] 柴什峰. 光子晶体带结构计算 FDTD 方法的 GPU 实现研究[D]. 北京:北京交通大学, 2015.

[ 9 ] 金超. 基于 FDTD 的一维光子晶体膜系结构的设计[D]. 南京:南京理工大学, 2008.

[ 10 ] 滕晨晨,周雯,庄煜阳,等. 基于磁光子晶体的低损耗窄带 THz 滤波器[J]. *物理学报*, 2016, 65(2) : 024210-1–024210-5.

责任编辑:周建军

(上接第 38 页)

[ 11 ] Andersen M D, Busk P K, Svendsen I, et al. Cytochromes P-450 from cassava (*Manihot esculenta Crantz*) catalyzing the first steps in the biosynthesis of the cyanogenic glucosides linamarin and lotaustralin. Cloning, functional expression in *Pichia pastoris*, and substrate specificity of the isolated recombinant enzymes [J]. *Journal of Biological Chemistry*, 2000, 275(3) : 1966–1975.

[ 12 ] Matsuzaki F, Wariishi H. Molecular characterization of

cytochrome P450 catalyzing hydroxylation of benzoates from the white-rot fungus *Phanerochaete chrysosporium* [J]. *Biochemical & Biophysical Research Communications*, 2005, 334(4) : 1184–1190.

[ 13 ] Kolar N W, Swart A C, Mason J I, et al. Functional expression and characterisation of human cytochrome P450 17 $\alpha$  in *Pichia pastoris* [J]. *Journal of Biotechnology*, 2007, 129(4) : 635–644.

责任编辑:郎婧

(上接第 63 页)

[ 3 ] MSC.Software Corporation. MSC. Nastran: Quick Reference Guide[M]. Santa Ana, CA: MSC.Software Corporation, 2012.

[ 4 ] 刘东明,方健,赵敬义,等. 车身板件对车内噪声的贡献量分析[J]. *噪声与振动控制*, 2011, 31(2) : 48–51.

[ 5 ] 庞剑,谌刚,何华. 汽车噪声与振动:理论与应用[M]. 北京:北京理工大学出版社, 2006.

[ 6 ] Choi K K, Shim I, Wang S. Design sensitivity analysis of structure-induced noise and vibration[J]. *Journal of Vi-*

*bration and Acoustics*, 1997, 119(2) : 173–179.

[ 7 ] 缪增华,王园,张松波,等. 某轿车噪声传递函数分析与优化[C]//中国汽车工程学会. 2013 中国汽车工程学会年会论文集. 北京:北京理工大学出版社, 2013: 1253–1258.

[ 8 ] Kim H, Yoon S. A design process using body panel beads for structure-borne noise [C]//Proceedings of SAE World Congress. Warrendale, PA, USA : SAE, 2007 : 1540–1549.

责任编辑:常涛