

一种新型介质结构的超传输电磁特性研究

王娟娟 黄志祥 方明 张亚光 吴先良

Study on the super transmission in a typical dielectric structure

Wang Juan-Juan Huang Zhi-Xiang Fang Ming Zhang Ya-Guang Wu Xian-Liang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 110201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.110201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.110201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I11>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于压缩感知的一维海面与二维舰船复合后向电磁散射快速算法研究

A new fast algorithm based on compressive sensing for composite electromagnetic back scattering from a 2D ship located on a 1D rough sea surface

物理学报.2015, 64(6): 060301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.060301>

导电导磁管道外任意放置线圈激励下脉冲涡流场时域解析解

Analytical solutions to pulsed eddy current field excited by a differently oriented probe coil outside a conducting ferromagnetic pipe

物理学报.2014, 63(24): 240301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.240301>

基于压缩感知的目标频空电磁散射特性快速分析

Fast analysis of electromagnetic scattering characteristics in spatial and frequency domains based on compressive sensing

物理学报.2014, 63(17): 170301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.170301>

有限元/边界积分方法在海面及其上方弹体目标电磁散射中的应用

Electromagnetic scattering from missile target above sea surface with finite element/boundary integral method

物理学报.2013, 62(17): 170301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.170301>

部分 Bessel 形电磁波

Partial Bessel electromagnetic wave

物理学报.2013, 62(3): 030301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.030301>

一种新型介质结构的超传输电磁特性研究*

王娟娟¹⁾ 黄志祥^{1)†} 方明¹⁾ 张亚光¹⁾ 吴先良¹⁾²⁾

1) (安徽大学电子信息工程学院, 计算智能与信号处理实验室, 合肥 230039)

2) (合肥师范学院电子信息工程学院, 合肥 230061)

(2014年10月17日收到; 2014年12月25日收到修改稿)

光入射到不同折射率材料的分界面时会很自然地产生反射现象. 在很多的工业应用中, 例如太阳能电池, 衬底的引入会在其表面产生反射损耗. 至今为止, 人们提出很多方法用来克服这一问题, 比较常见的有介质涂层、表面纹理、绝热折射率匹配和散射等离激元纳米粒子. 本文利用二维周期排布的亚波长级硅纳米圆柱阵列来降低衬底表面的反射. 结合辅助微分方程和时域有限差分法对该结构的散射特性进行系统研究, 结果发现, 纳米圆柱粒子能够产生类似于在金属表面发生的超传输现象, 这种现象的发生基于介质衬底耦合 Mie 共振机理, 该机理能在整个紫外到近红外光谱范围内将能量耦合到衬底中, 从而降低衬底表面的反射; 同时当散射结构被放置在具有高光学态密度的高折射率衬底附近时, 会产生较强的前向散射, 也能有效的减少后向散射即反射的发生. 基于降低衬底表面反射这一目的而言, 我们设计的结构可为实际太阳能电池及光学天线的设计提供参考.

关键词: 辅助位方程, 时域有限差分法, Mie 共振, 超传输**PACS:** 02.70.Bf, 03.50.De, 03.65.Db, 42.25.Bs**DOI:** 10.7498/aps.64.110201

1 引言

在工业应用领域, 衬底的引入是一个必不可少的环节, 衬底表面的反射损耗也会相应地产生, 这种现象在追求转化效率的工业应用中, 是不希望发生的. 一直以来, 人们研究各种方法来减少衬底表面的反射, 电磁超材料^[1]、表面纹理、绝热折射率匹配和散射等离激元纳米粒子等方法都被广泛使用, 最常用的就是在衬底上覆盖增透的介质涂层^[2,3]. 通常, 在某一特定的波长上, 入射波和反射波之间会产生相消干涉^[4], 从而得到完全的光学阻抗匹配, 此种特点也被用来减少反射. 某些结构由于其构成的特殊性, 也可用来克服反射的问题, 例如利用微米尺度的锥体表面纹理特性制作的晶体硅太阳能电池^[5,6]. 在过去的几十年中, 由于纳米粒子

拥有维持 Mie 共振的能力, 受到大众的重视. 例如, 核 (Ag)-壳 (Si 或者 GaAs) 型纳米粒子^[7], 它所具备的简并电磁偶极子共振特性能够保证当光或波入射到该结构时, 前向散射很大且后向散射为零. 由于纳米粒子良好的散射特征, 在很多领域 (比如光学天线^[8]、太阳能电池^[9]) 的应用中都能找到它们的身影. 研究发现, 当纳米粒子与高折射率的衬底 (例如硅基板) 相连接时, 衬底表面的散射特性会发生很大的转变^[10]. 金属纳米粒子阵列分布在硅衬底上时, 能够在可见光范围内有效的减少衬底表面的反射损耗, 这些纳米粒子在与衬底的接触面激发出了等离激元 (SPPs)^[11,12], 产生几近完全的阻抗匹配, 使得太阳光全部耦合到衬底中.

对于太阳能应用而言, 相比较金属纳米粒子, 介质纳米粒子拥有更多的优势, 其中最重要的就

* 国家自然科学基金 (批准号: 61471001, 61101064, 51277001)、安徽省杰出青年基金 (批准号: 1108085J01)、教育部新世纪优秀人才基金 (批准号: NCET-12-0596)、安徽省高校自然科学基金 (批准号: KJ2011A002, KJ2011A242, KJ2012A013) 和教育部博士点基金 (批准号: 20123401110009) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn

是在可见光^[13]范围内介质比金属的热损耗要小很多。很多研究者对于金属纳米粒子是如何影响衬底的散射特性以及影响多少的问题都阐述了自己的观点^[10,14-17],但是关于介质纳米粒子对衬底的影响却鲜少有人问津。近期研究者^[18]提到一种基于硅纳米线的太阳能电池,这种电池的基底是玻璃板,表明硅纳米线所具有的Mie共振机理,可以增强自身对于太阳光的吸收;但只考虑到纳米线的吸收问题。本文则进一步提出,由于纳米粒子具有Mie共振机理,不仅可以增强自身对于能量的吸收,某些特殊结构的纳米粒子还能将Mie共振时储存在自身的能量耦合到衬底当中去。基于Mie共振,从耦合的观点出发,我们降低反射的方法与以往其他论文中介绍的是完全不同的。首先,我们提出了一个新的结构,即周期性排布在衬底上的介质纳米圆柱,所选衬底可以是任何具有高折射率的材料。这里纳米圆柱和衬底均选用硅,没有金属,既减少了成本的投入,且硅的储存量很大,更加增加了工业可行性;其次,为了能更好的表明该结构良好的散射特性,本文结合时域有限差分(FDTD)^[19,20]方法以及辅助微分方程(ADE)^[21]对该结构进行各种散射变量的数值计算。数值计算分为两步:其一,计算三种不同结构(球、球-衬底、圆柱-衬底)归一到几何截面^[22,23]的散射截面及电场分布,通过对比,可以得到圆柱-衬底这一结构由于具有Mie共振机理,可以将能量耦合到衬底,增加传输,减少反射;其二,对周期分布的圆柱阵列加衬底这一结构进行反射和吸收的模拟,定量地展示了其能够有效克服反射的特征。

2 FDTD理论

2.1 基本理论

通常情况下, FDTD法的数值计算中, 介质色散材料的介电常数可以用Drude-Lorentz模型进行模拟。本文所使用的材料硅就是用三阶Lorentz模型^[24]的叠加进行近似的, 其表达式如下:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_{j=1}^3 \frac{\Delta\varepsilon_j \omega_j^2}{\omega_j^2 - 2i\omega\gamma_j - \omega^2}, \quad (1)$$

其中, ε_{∞} 高频部分的介电常数, $\Delta\varepsilon_j$ 是谐振强度, ω_j 是谐振频率, γ_j 是阻尼常数, ω_j 和 γ_j 单位为 μm^{-1} , 各参数值如表1所示。

表1 Lorentz模型参数
Table 1. Parameters of Lorentz module.

$\varepsilon_{\infty} = 1$					
$\Delta\varepsilon_1$	8	ω_1	3.64	γ_1	0
$\Delta\varepsilon_2$	2.85	ω_2	2.76	γ_2	0.063
$\Delta\varepsilon_3$	-0.107	ω_3	1.73	γ_3	2.5

FDTD方法的主旨是在时间和空间上对麦克斯韦(Maxwell)方程组进行中心差分近似。首先, 我们从原始的时域Maxwell方程组和其本构关系着手, 表达式如下:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (2a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2b)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (2c)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (2d)$$

推导出电场的表达式。将(2c)式和(1)式代入(2a)式后对(2a)式进行傅里叶变换, 得到

$$-i\omega\varepsilon_0\varepsilon_{\infty}\mathbf{E}(\mathbf{k},\omega) + \sum_j \mathbf{J}_{Lj}(\mathbf{k},\omega) = i\mathbf{k} \times \mathbf{H}(\mathbf{k},\omega), \quad (3a)$$

其中,

$$\mathbf{J}_{Lj}(\mathbf{k},\omega) = -i\omega\varepsilon_0 \frac{\Delta\varepsilon_{Lj}\omega_{Lj}^2}{\omega_{Lj}^2 - \omega(\omega + i2\gamma_{Lj})} \times \mathbf{E}(\mathbf{k},\omega), \quad (3b)$$

式中, $\mathbf{k}$ 为位置矢量。对它做傅里叶逆变换, 转换成时域的偏微分方程

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{J}_{Lj}(t) + 2\gamma_{Lj} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{J}_{Lj}(t) + \omega_{Lj}^2 \mathbf{J}_{Lj}(t) = \varepsilon_0 \Delta\varepsilon_{Lj} \omega_{Lj}^2 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(t). \quad (4)$$

注意到(4)式被称为辅助微分方程(ADE), 对其做中心差分, 得到 $\mathbf{J}_{Lj}$ 的迭代表达式如下:

$$\mathbf{J}_{Lj}^{n+1} = \alpha_{Lj} \mathbf{J}_{Lj}^n + \varepsilon_{Lj} \mathbf{J}_{Lj}^{n-1} + \eta_{Lj} \frac{\mathbf{E}^{n+1} - \mathbf{E}^{n-1}}{2\Delta t}, \quad (5a)$$

其中,

$$\alpha_{Lj} = \frac{2 - \omega_{Lj}^2 \Delta t^2}{1 + \gamma_{Lj} \Delta t}, \quad (5b)$$

$$\varepsilon_{Lj} = -\frac{1 - \gamma_{Lj} \Delta t}{1 + \gamma_{Lj} \Delta t}, \quad (5c)$$

$$\eta_{Lj} = \frac{\varepsilon_0 \Delta\varepsilon_{Lj} \omega_{Lj}^2 \Delta t^2}{1 + \gamma_{Lj} \Delta t}. \quad (5d)$$

(3a) 式做傅里叶逆变换处理并进行差分变化, 得到

$$\varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{\mathbf{E}^{n+1} - \mathbf{E}^n}{\Delta t} + \sum_j \mathbf{J}_{Lj}^{n+1/2} = \nabla \times \mathbf{H}^{n+1/2}. \quad (6)$$

将式中 $\mathbf{J}_{Lj}$ 的迭代表达式组 (5) 代入到 (6) 式, 就可以得到电场在时间上的具体迭代:

$$\mathbf{E}^{n+1} = \frac{1}{\zeta_1 + \zeta_2} [\zeta_1 \mathbf{E}^n + \zeta_2 \mathbf{E}^{n-1} + \nabla \times \mathbf{H}^{n+1/2} - \mathbf{J}_T^{n,n-1}], \quad (7a)$$

其中,

$$\zeta_1 = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty}{\Delta t}, \quad (7b)$$

$$\zeta_2 = \frac{1}{4\Delta t} \sum_j \eta_{Lj}, \quad (7c)$$

$$\mathbf{J}_T^{n,n-1} = \frac{1}{2} \sum_j [(\alpha_{Lj} + 1) \mathbf{J}_{Lj}^n + \varepsilon_{Lj} \mathbf{J}_{Lj}^{n-1}]. \quad (7d)$$

最后, 利用 Maxwell 方程组, 我们就可以得到磁场的迭代表达式

$$\mathbf{H}^{n+1/2} = \mathbf{H}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}^n. \quad (8)$$

所以, 当将电场计算问题在时间上进行迭代后, 就可以得到任意时刻所需的电场和磁场.

2.2 边界处理

2.2.1 吸收边界 (PML)

FDTD 中, 频域的完全匹配层 (perfect matched layer, PML) 时谐 Maxwell 方程组, 需要用一个泛化张量 [25] 来替换其中的介电常数 ε 和磁导率 μ , 张量表达式为

$$\bar{\mathbf{s}} = \frac{\mathbf{J} \varepsilon \mathbf{J}^T}{\det \mathbf{J}}, \quad (9)$$

式中, $\mathbf{J} = \text{diag}(s_x^{-1}, s_y^{-1}, s_z^{-1})$ 为坐标拉伸的 Jacobian 矩阵. 张量的对角元由下式给出:

$$S_p = \kappa_p + \frac{i\sigma_p}{\omega}, \quad (10)$$

其中 p 为 x, y, z , ω 是频率, σ_p 为 PML 电导率. 考虑到计算时对于 ε 和 μ 处理是相似的, 且方程中的两个旋度方程存在对偶性, 故这里只给出其中一个旋度方程的变化过程. 为不失一般性, 将 (2a) 式重写为如下表达式:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \sigma_D \mathbf{D},$$

令 $\mathbf{P} = \chi(\omega) \mathbf{E}$, $\mathbf{D} = \varepsilon_\infty \mathbf{E} + \mathbf{P}$, 在 PML 吸收边界中, 其频域形式的表达式变化为

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} = & -i\omega s_x s_y s_z \left(1 + \frac{i\sigma_D}{\omega}\right) \\ & \times \begin{pmatrix} s_x^{-1} & & \\ & s_y^{-1} & \\ & & s_z^{-1} \end{pmatrix} [\varepsilon_\infty + \chi_E(\omega)] \\ & \times \begin{pmatrix} s_x^{-1} & & \\ & s_y^{-1} & \\ & & s_z^{-1} \end{pmatrix} \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (11)$$

为书写方便, 令 $\mathbf{K} = \nabla \times \mathbf{H}$.

在 FDTD 中我们需要将 (11) 式变化到时域进行差分求解, 从信号处理的角度, 频率相关项变换到时域会增加卷积计算, 此时就需要找到一个匹配的递归卷积 [26] (CPML: 卷积 PML) 以减小内存和计算量. 即在变换到时域之前, 需要将 (11) 式进行分解, 利用下式:

$$\begin{aligned} & s_x s_y s_z \begin{pmatrix} s_x^{-1} & & \\ & s_y^{-1} & \\ & & s_z^{-1} \end{pmatrix} \\ = & \begin{pmatrix} s_y & & \\ & s_z & \\ & & s_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_z & & \\ & s_x & \\ & & s_y \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

并定义辅助场 $\mathbf{C}$, $\mathbf{U}$ 和 $\mathbf{W}$, 即可将 (11) 式分解为

$$\mathbf{K} = -i\omega \left(1 + \frac{i\sigma_D}{\omega}\right) \mathbf{C},$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} s_y^{-1} & & \\ & s_z^{-1} & \\ & & s_x^{-1} \end{pmatrix} \mathbf{C},$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} s_z^{-1} & & \\ & s_x^{-1} & \\ & & s_y^{-1} \end{pmatrix} \mathbf{U},$$

$$\mathbf{W} = \varepsilon_\infty^{-1} (\mathbf{D} - \mathbf{P}),$$

$$\mathbf{P} = \chi_E(\omega) \mathbf{W},$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} s_x & & \\ & s_y & \\ & & s_z \end{pmatrix} \mathbf{W}.$$

以上 CPML 适用于截断任意媒质 (色散、各向异性等), 本文截断的是空气, 故取 κ_p 为 1, 计算空间的电导率 σ_D 和色散量 $\chi_E(\omega)$ 都取 0.

用于截断 FDTD 网格时, 以 x 方向为例, 假设 PML 层厚度为 d_{pml} , PML 的两个界面位于 $x = 0$ 和 $x = d_{pml}$ 处, 渐变 PML 层的电导率为 $\sigma_x(x)$, 则有反射率为

$$R(\theta) = e^{-2\eta \cos \theta \int_0^{d_{pml}} \sigma_x(x) dx}, \quad (12)$$

其中,

$$\sigma_x(x) = \left(\frac{x}{d_{pml}} \right)^b \sigma_{x,\max}. \quad (13)$$

将 (13) 式代入到 (12) 式中

$$\begin{aligned} R(\theta) &= e^{-2\eta \cos \theta \int_0^{d_{pml}} \sigma_x(x) dx} \\ &= e^{-2\eta \sigma_{x,\max} d_{pml} \cos \theta (b+1)}. \end{aligned}$$

给定 b , d 和期望的反射误差 $R(0)$, 很容易得到 PML 参数:

$$\sigma_{x,\max} = -\frac{(b+1) \ln [R(0)]}{2\eta d_{pml}}. \quad (14)$$

2.2.2 周期边界 (Bloch-Periodic)

文中所述问题在 y 方向设置 PML, x 和 z 方向设置周期边界, 设入射平面波为

$$E = E_0 \exp[i(\omega t - k_x x - k_y y - k_z z)],$$

k_x , k_y , k_z 分别是 x , y , z 方向的波数, 则空间沿 x 方向相距为 m 个周期, 沿 z 方向相距 n 个周期的两点之间的场可表示为 [27]

$$\begin{aligned} &\tilde{\psi}(x + mp_x, z + np_z, \omega) \\ &= \tilde{\psi}(x, z, \omega) \exp(-imk_x p_x - ink_z p_z), \end{aligned} \quad (15)$$

式中 $\tilde{\psi}$ 为电磁场 (频域) 的某一分量, m 和 n 为整数, p_x 和 p_z 分别为 x , z 方向的周期长度. (15) 式为 Bloch 定理的频域表示方式. 取 $m = n = 1$, 只考虑一个周期, 则 (15) 式的时域形式为

$$\begin{aligned} &\psi(x + p_x, z + p_z, t) \\ &= \psi\left(x, y, t - \frac{p_x}{V_{phx}} - \frac{p_z}{V_{phz}}\right), \end{aligned} \quad (16)$$

式中 $V_{phx} = v \sin \theta_i \cos \varphi_i$, $V_{phz} = v \sin \theta_i \sin \varphi_i$ 分别为沿 x , z 方向的相速, 这里 v 的值为真空中的波速 c .

以 x 方向为例, 沿着 x 轴相距为 p_x 的两点 A, B, 即 $x_B = x_A + p_x$, 由 (15) 式有

$$\tilde{\psi}(x_B, z, \omega) = \tilde{\psi}(x_A, z, \omega) \exp(-i\Phi_x), \quad (17a)$$

其中,

$$\Phi_x = k_x p_x = \frac{2\pi p_x}{\lambda} \sin \theta_i \cos \varphi_i. \quad (17b)$$

由 (16) 式可以得到两点时域场值之间的转换关系, 即为

$$\psi(x_A, z, t) = \psi\left(x_B, z, t + \frac{p_x}{V_{phx}}\right), \quad (18a)$$

$$\psi(x_B, z, t) = \psi\left(x_A, z, t - \frac{p_x}{V_{phx}}\right). \quad (18b)$$

下面说明周期边界上的 FDTD 迭代问题, 以三维空间中 FDTD 电场 E_x 为例, 其时间迭代公式为

$$\begin{aligned} &E_x^{n+1}(i + 1/2, j, k) \\ &= CA(a) \cdot E_x^n(i + 1/2, j, k) + CB(a) \\ &\quad \times \left\{ \left[H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, k + 1/2) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, k - 1/2) \right] \times \Delta z^{-1} \right. \\ &\quad \left. - \left[H_z^{n+1/2}(i + 1/2, j + 1/2, k) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - H_z^{n+1/2}(i + 1/2, j - 1/2, k) \right] \right. \\ &\quad \left. \times \Delta y^{-1} \right\}, \end{aligned} \quad (19a)$$

式中,

$$CA(a) = \frac{\frac{\varepsilon(a)}{\Delta t} - \frac{\sigma(a)}{2}}{\frac{\varepsilon(a)}{\Delta t} + \frac{\sigma(a)}{2}} = \frac{1 - \frac{\sigma(a) \Delta t}{2\varepsilon(a)}}{1 + \frac{\sigma(a) \Delta t}{2\varepsilon(a)}}, \quad (19b)$$

$$CB(a) = \frac{1}{\frac{\varepsilon(a)}{\Delta t} + \frac{\sigma(a)}{2}} = \frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon(a)}}{1 + \frac{\sigma(a) \Delta t}{2\varepsilon(a)}}. \quad (19c)$$

上式中标号 $a = (i + 1/2, j, k)$. 由 (19a) 式可知, 在计算 $k = 1$, $k = N$ 边界上 $t = n + 1$ 时刻的 E_x 时需要分别涉及到周期边界外的 $H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, 1 - 1/2)$ 以及 $H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, N + 1/2)$ 节点, 此时需要用到 Bloch 定理, 以垂直入射为例, 根据 (18) 式可以得到

$$\begin{aligned} &H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, 1 - 1/2) \\ &= H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, N - 1/2), \end{aligned} \quad (20a)$$

$$\begin{aligned} &H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, N + 1/2) \\ &= H_y^{n+1/2}(i + 1/2, j, 1 + 1/2). \end{aligned} \quad (20b)$$

同理在计算 E_y , E_z 的值时, 涉及到边界外的节点时, 利用 Bloch 周期场变换关系做类似的处理即可, 关于斜入射的操作细节可参见文献 [27].

3 仿真、结果和讨论

3.1 仿真

本文中所有仿真的空间步长满足 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 5 \text{ nm}$, Courant 稳定性条件为 0.5. 不同于以往所使用的总场/散射场技术, 本文采用纯总场技术, 即整个仿真区域只有总场没有散射场. 该技术下, 需要将程序分为有结构和无结构运行两次, 其时间步数分别设置为 20000 和 2000, 以确保电场衰减到零, 两次运行分别得到的总场和入射场之差即为散射场. 仿真分为两种情况, 其一是研究三种单个纳米粒子与衬底组合的散射特性, 具体组成如图 1 所示, 分别为: (a) 球, (b) 球-衬底, (c) 圆柱-衬底. 图 2 给出在进行 FDTD 数值仿真时, 第三种情况下源、边界等具体设置的截面图. 其二是对周期分布在衬底上的纳米圆柱进行散射特性分析, 图 3 为其仿真设置截面图.

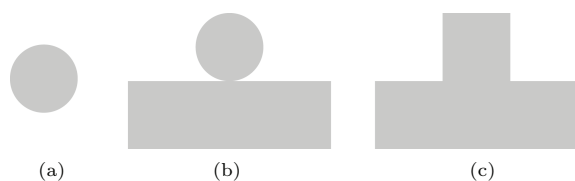


图 1 仿真结构 (a) 球; (b) 球衬底; (c) 圆柱衬底

Fig. 1. Simulation structure (a) Sphere; (b) Sphere-substrate; (c) Cylinder-substrate.

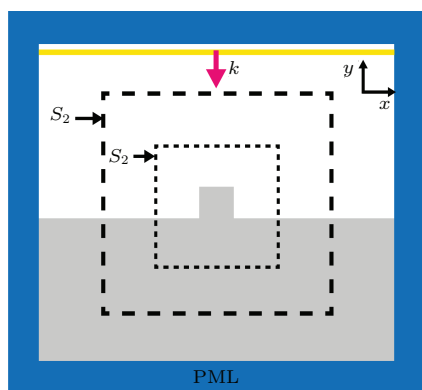


图 2 圆柱衬底的 FDTD 仿真设置

Fig. 2. FDTD simulation of cylinder-substrate.

所有仿真实例中的入射波源均选用沿 y 轴负方向垂直入射的平面波. 如图 2 (仿真一) 的 x, y, z 方向上的边界设置为 CPML, 本文取阶数 $b = 2$, 反射误差 $R(0)$ 为 10^{-15} , PML 匹配空气的波阻抗为

377Ω , 厚度 d_{pml} 为 100 nm . 纳米球的直径为 150 nm , 纳米圆柱的尺寸为直径 150 nm , 高 150 nm , 此种尺寸选择可以使得硅纳米结构拥有电和磁偶极子共振 (Mie 共振), 保证该结构在红外^[28] 和可见光^[29–31] 范围内有强散射. 由于需要三种结构组合的散射谱和电场分布来研究其散射特性, 因此设置了可以在频域内高精度监测到能量流信息的监测器组 S_1 和 S_2 . 其中 S_1 包含一个 $z = 0$ 位置且与 xoy 面平行的监测器, 尺寸为 $300 \text{ nm} \times 300 \text{ nm}$, 用来收集电场分布信息; S_2 包含六个监测器组成一个闭合面用来收集散射能量信息, 尺寸均为 $152 \text{ nm} \times 152 \text{ nm}$, 六个面接收到的能量信息相叠加再比上入射光强即得到散射截面.

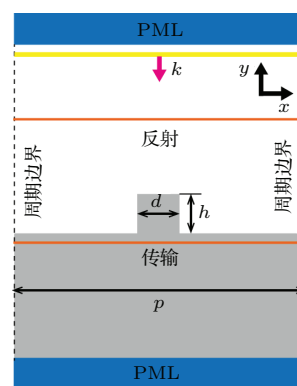


图 3 纳米圆柱阵列仿真设置

Fig. 3. FDTD simulation of cylinder-substrate.

对周期分布的硅纳米圆柱阵列进行反射、吸收等方面进行研究, 可以更直观地看到该结构大幅降低反射促进耦合的特点^[32]. 图 3 (仿真二) 即周期分布的硅纳米圆柱阵列仿真时设置的截面图. y 方向设置为 PML, 而 x 和 z 方向上均设置为周期边界. d 和 h 分别代表圆柱的直径和高度, p 为圆柱之间的空间间隔即周期. 监测器 (反射和传输) 用来监测反射能量和传输能量.

3.2 结果和讨论

3.2.1 单个纳米粒子与衬底组合的散射特性分析

图 4 (a) 显示的是图 1 所示三种结构的归一化到几何截面的散射截面随频率变化的曲线. 图 4 (a) 插图 of 硅的介电常数 ((1) 式给出). 从图 4 (a) 可以看出: 1) 单个球的散射截面曲线有两个明显的谐振峰, 对应着两个 Mie 模式, 其中 600 nm 谐振点时

的散射截面比几何截面的九倍还要多, 说明散射很强, 同时也说明, 对于光来说, 单个的硅球扮演着谐振腔的角色, 使得光被束缚在球中; 2) 当球被放置在衬底上时, 也能看到两个类似于单个球的谐振峰, 只是峰值相对要弱一些, 说明该种情况下在谐振点被束缚在球中的能量有很微弱的一部分耦合到了衬底当中; 3) 但是, 当球被圆柱取代后, 产生了奇特的变化, 两个谐振峰重叠且展宽. 这种现象产生的原因, 简单来说就是圆柱这种结构的引入, 给本应该束缚在球中的光提供了一个渗漏通道, 使能量耦合到了衬底当中, 发生了超传输.

图 4(b)–(g) 提供了球 ((b), (e)), 球-衬底 ((c), (f)), 圆柱-衬底 ((d), (g)) 在两个谐振点的电场增强分布图. 可以更直观的看出图 4(a) 已经说明过的问题, 即无论衬底是否存在, 如果几何结构是球, 那么入射的光在谐振模式下几乎全部被束缚在纳米球中, 基本不受衬底的影响. 一旦球被置换成圆柱, 其 Mie 谐振点的场增强分布与衬底有清晰的重叠, 既有纳米粒子的近场吸收, 也有辐射到衬底当中的能量, 这两种机理都为降低衬底表面的反射提供着支持, 从而出现图 4(a) 中散射截面曲线谐振峰拓宽的现象.

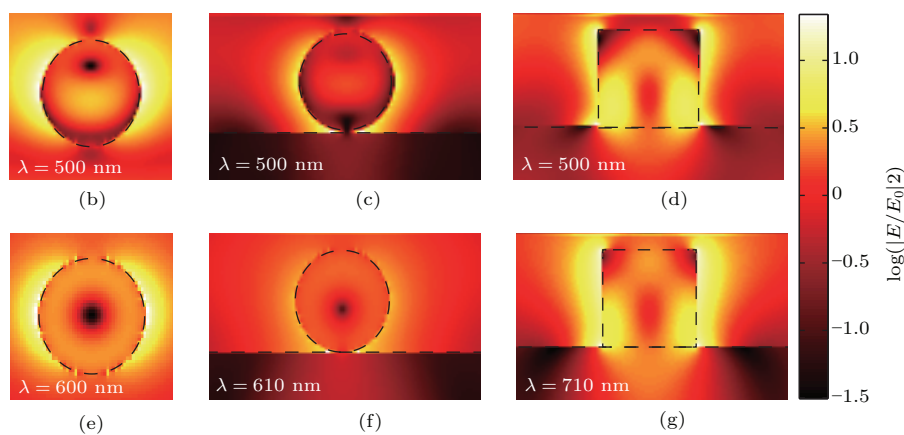
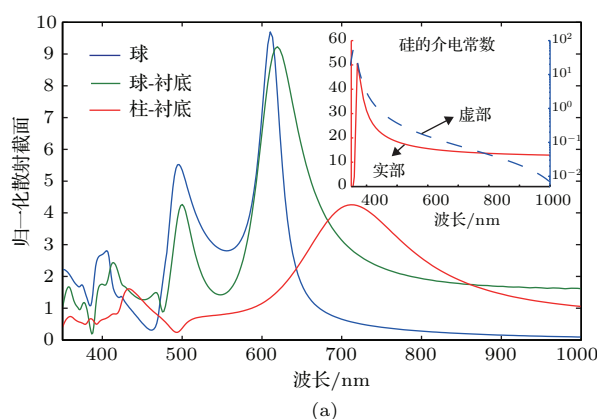


图 4 (网刊彩色) 仿真结果 (a) 归一化散射截面; (b)–(g) 场增强

Fig. 4. (color online) Simulation results. (a) Normalized scattering cross section; (b)–(g) electric field enhancement.

3.2.2 周期分布在衬底上的纳米圆柱散射特性分析

图 5(a) 给出了高 150 nm, 直径分别为 150 nm, 200 nm 以及 250 nm 的纳米柱阵列的反射系数, 同时给出了平板硅的反射系数作为对比. 从对比结果来看, 整个频谱范围内纳米柱阵列可以明显的减少衬底表面的反射, 并且随着直径的增大, 分别在波

长为 700 nm, 830 nm, 1000 nm 处观察到很宽的反射倾角. 究其原因, Mie 共振起着关键性的作用. 波长为 500 nm 即波长等于周期时, 反射系数急剧下降, 是由于纳米粒子规则排列时形成光栅, 而光栅会有瑞利异常^[33]现象所导致的. 图 5(b) 所示的是不同间隔纳米柱阵列的吸收系数, 它反映的是纳米柱内部吸收能量的效率. 由图中可以看到, 在波长

等于间距的地方, 有很清晰的峰值出现, 这是因为入射光在柱体的行进过程中伴随着面内动量(瑞利异常), 因此圆柱阵列内部有很强的吸收. 值得注意的是, 在波长700—1000 nm 范围内, 也就是Mie共振发生的地方, 吸收很低, 说明相对于圆柱阵列的吸收, 有更强的散射从阵列中发出, 但是由图5(a)又可以看出, 在这一频谱范围内衬底反射量很低, 说明纳米粒子的前向散射很强, 能量都被耦合到衬底中去了.

图5(c)所示的是周期为500 nm下, 直径为150 nm的阵列硅球以及直径为150 nm, 高为100 nm的阵列金^[15]圆柱、硅圆柱和半无限大硅平板的反射系数对比结果. 可以看出, 三种结构都能够从不同程度上减少衬底表面的反射, 由于瑞利异常现象的影响, 在波长等于周期即500 nm处, 三种结构的反射系数都急剧下降. 由于两阶Mie共振的发生, 分别在500 nm和600 nm处阵列硅球有两个较窄的反射倾角, 阵列金柱由于激发出了等离子体激元, 有一个较宽的反射倾角出现在560 nm处, 两种结构的反射系数在该频带内相比于阵列硅柱要小一些. 但是自650 nm至近红外光谱, 阵列硅柱的优

势立显, 特别是当在700 nm处阵列硅柱发生Mie共振时, 其反射系数要远远小于阵列金柱和阵列硅球. 三种结构相比较, 阵列金柱应用带宽有限, 960 nm以后, 其反射系数大于平板硅, 已不能用来减少衬底表面的反射; 虽然阵列硅球可以在整个研究频带内降低反射, 但是其Mie共振的带宽较窄, 降低反射量有限; 只有本文所研究的阵列硅圆柱不仅能够大幅减小衬底表面的反射, 且能够适用整个紫外到近红外光谱范围. 由此可以推出, 我们研究介质结构由于发生了超传输, 能够有效减少反射损耗. 图5(d)描述的是一个高为150 nm, 直径为250 nm的圆柱阵列的消光、散射、吸收截面. 观察到, 在Mie共振发生的地方即波长为830 nm处, 吸收截面几乎为零, 散射截面等于消光截面, 散射截面比八倍的几何截面还要大, 入射能量几乎全部传输到衬底中. 虽然纳米柱只覆盖了衬底表面30%的区域, 却几乎与全部的入射波都发生了作用. 这一切都归功于高折射率硅衬底所具有的高光学密度模式^[34], 使得在发生强耦合共振时, 纳米柱附加衬底这种结构随之发生了超透射现象.

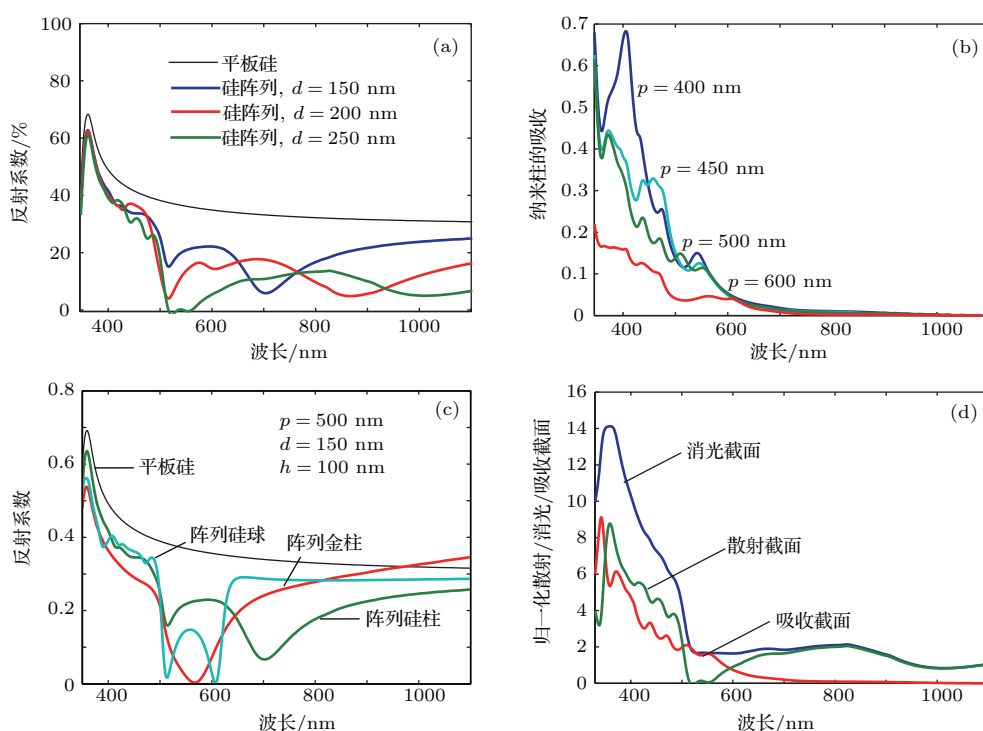


图5 (网刊彩色) 周期结构仿真结果 (a) 反射系数; (b) 纳米柱中的吸收系数; (c) 不同结构的反射系数对比; (d) 归一化散射、消光和吸收截面

Fig. 5. (color online) The results of periodical structure: (a) reflectance; (b) absorption coefficient in nano-cylinder; (c) the reflectance comparison of different structure; (d) normalized scattering, extinction and absorption cross section.

4 结 论

不同于以往加增透膜来减少衬底表面反射的方法, 本文提出在衬底表面放置硅纳米圆柱这种特殊的结构组合, 利用介质纳米圆柱粒子的 Mie 共振机理, 可以在很宽的频带内降低衬底表面的反射损耗. 从仿真结果来看: 在 Mie 谐振模式下, 圆柱结构与入射光相互作用, 具有很大的散射截面, 即散射较强; 它不仅自身吸收光, 还为能量提供了一个渗漏通道, 将能量耦合到衬底中去, 增大光的传输. 同时由于高折射率衬底基板具有很高的模式密度, 这些模式使能量耦合至所述衬底时伴随发生超传输. 入射到该结构上的光要么被吸收, 要么发生超传输进入衬底, 而被衬底表面反射到空气中的几乎微乎其微, 这种良好的散射特性可以很大程度上降低衬底表面的反射, 增大吸收. 我们设计的结构及其对应的物理机理可为实际太阳能电池及光学天线的设计提供参考依据.

参考文献

- [1] Ding M, Xue H, Wu B, Sun B B, Liu Z, Huang Z X, Wu X L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 044218 (in Chinese) [丁敏, 薛辉, 吴博, 孙兵兵, 刘政, 黄志祥, 吴先良 2013 物理学报 **62** 044218]
- [2] Zhang J C, Xiong L M, Fang M, He H B 2013 *Chin. Phys. B* **22** 044201
- [3] He S X, Yu G J, Zhu Z Y 2012 *International Conference on Solid State Device and Materials* Los Angeles, Elsevier, April 1–2, 2012 p854
- [4] Macleod H A 2001 *Thin-Film Optical Filters* (3rd) (Florida: CRC Press) p668
- [5] Lamers M W P E 2012 *Prog. Photovolt* **20** 62
- [6] Southwell W H 1991 *J. Opt. Soc. Am.* **8** 549
- [7] Liu W, Miroshnichenko A E, Neshev D N, Kivshar Y S 2012 *ACS Nano*. **6** 5489
- [8] Pellegrini G, Mazzoldi P, Mattei G 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 21536
- [9] Catchpole K R, Polman A 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 191113
- [10] Knight M W, Wu Y, Lassiter J B, Nordlander P, Halas N J 2009 *Nano Lett.* **9** 2188
- [11] Spinelli P, Hebbink M, Waele R, Black L, Lenzmann F, Polman A 2011 *Nano Lett.* **11** 1760
- [12] Atwater H A, Polman A 2010 *Nat. Mater* **9** 205
- [13] Catchpole K R, Polman A 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 191113
- [14] Vernon K C, Funston A M, Novo C, Gómez D E, Mulvaney P, Davis T J 2010 *Nano Lett.* **10** 2080
- [15] Chen H J, Ming T, Zhang S R, Jin Z, Yang B C, Wang J F 2011 *ACS Nano* **5** 4865
- [16] Chen H J, Shao L, Ming T, Woo K C, Man Y C, Wang J F, Lin H Q 2011 *ACS Nano*. **5** 6754
- [17] Wu Y, Nordlander P 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 7302
- [18] Cao L, Fan P, Vasudev A P, White J S, Yu Z, Cai W, Schuller J A, Fan S, Brongersma M L 2010 *Nano Lett.* **10** 439
- [19] Ren X G, Huang Z X, Wu X L, Lu S L, Wang H, Wu L, Li S 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 1192
- [20] Wang H, Wu B, Huang Z X, Wu X L 2013 *Comput. Phys. Commun.* **185** 862
- [21] Wang H, Huang Z X, Wu X L, Ren X G, Wu B 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 070203 (in Chinese) [王辉, 黄志祥, 吴先良, 任信刚, 吴博 2014 物理学报 **63** 070203]
- [22] Mie G 1908 *Ann. Phys.* **330** 377
- [23] Bohren C F, Huffman D R 1998 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Heppenheim:Wiley-VCH) p83
- [24] Deinega A, Valnev I, Potapkin B, Lozovik Y 2011 *J. Opt. Am. A* **28** 770
- [25] Taflov A, Hagness S G 2000 *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-domain Method* (2nd) (London: Artech House Publishers) p235
- [26] Hu Q F, Xu H, Liu J, Zhuo H B, Chi L H, Jiang J, Yan Y H 2009 *Comput. Eng. Sci.* **31** 188 (in Chinese) [胡庆丰, 徐涵, 刘杰, 卓红斌, 迟利华, 蒋杰, 晏益慧 2009 计算机工程与科学 **31** 188]
- [27] Lu S L, Wu X L, Ren X G, Mei Y S, Shen J, Huang Z X 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 194701 (in Chinese) [鲁思龙, 吴先良, 任信刚, 梅诣偲, 沈晶, 黄志祥 2012 物理学报 **61** 194701]
- [28] Ginn J C, Brener I, Peters D W, Wendt J R, Stevens J O, Hines P F, Basilio L I, Warne L K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 097402
- [29] Miroshnichenko A E, Kivshar Y S 2012 *Nano Lett.* **12** 6459
- [30] Evlyukhin A B, Novikov S M, Zywiets U, Eriksen R L, Reinhardt C, Bozhevolnyi S I, Chichkov B N 2012 *Nano Lett.* **12** 3749
- [31] García-Etxarri A, Gómez-Medina R, Froufe-Pérez L S, López C, Chantada L, Scheffold F, Aizpurua J, Nieto-Vesperinas M, Sáenz J J 2011 *Opt. Express* **19** 4815
- [32] Huang Z, Koschny T, Soukoulis C M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 187402
- [33] Rayleigh J W S 1907 *Philos. Mag.* **14** 60
- [34] Kippenberg T J, Tchebotareva A L, Kalkman J, Polman A, Vahala K J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 027

Study on the super transmission in a typical dielectric structure^{*}

Wang Juan-Juan¹⁾ Huang Zhi-Xiang^{1)†} Fang Ming¹⁾
Zhang Ya-Guang¹⁾ Wu Xian-Liang¹⁾²⁾

1) (Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing, Anhui University, Hefei 230039, China)

2) (Electronics and Information Engineering of Hefei Normal University, Hefei 230061, China)

(Received 17 October 2014; revised manuscript received 25 December 2014)

Abstract

Reflection is a natural phenomenon that occurs when light passes the interface between materials with different refractive index. In many applications, such as solar cells, introduction of a substrate will result in an increase in reflection. There are many ways to reduce the reflection from a substrate, which have been investigated so far, including dielectric interference coatings, surface texturing, adiabatic index matching, and scattering from plasmonic nanoparticles etc. Here we present an entirely new concept to eliminate reflection from a silicon wafer, which makes use of much simpler method than the ones reported before, and can be applied to any high-index material. Finite-difference-time-domain (FDTD) method and auxiliary differential equations are used in this paper to simulate a new structure that can suppress the reflection of light from a silicon surface over a broad spectral range. A two-dimensional periodic array of subwavelength silicon nanocylinders is designed, which possesses a phenomenon strongly substrate-coupled to the Mie resonances, and which can produce an extraordinary transmission phenomenon similar to the metal surface plasmon that yields almost zero total reflectance over the entire spectral range from ultraviolet to near-infrared. This new antireflection concept relies on the strong forward scattering that occurs when a scattering structure is placed in close proximity to a high-index substrate with a high optical density of states. For a detailed description of the problem, we have carried out some simulations. From the results, one can see that although nano-pillar covers only 30% of the substrate surface area, it can reduce the reflection from the surface from 30% to under 10% at the Mie resonance. For the purpose of reducing reflection from the substrate, this new structure designed may provide a reference for the actual solar cells and optical antenna design.

Keywords: auxiliary differential equation, finite-difference time-domain method, Mie resonances, extraordinary transmission

PACS: 02.70.Bf, 03.50.De, 03.65.Db, 42.25.Bs

DOI: 10.7498/aps.64.110201

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61471001, 61101064, 51277001), the Science Fund for Distinguished Young Scholars of Anhui Province, China (Grant No. 1108085J01), the Program for New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education of China (Grant No. NCET-12-0596), the Natural Science Foundation of the Higher Education Institutions of Anhui Province, China (Grant Nos. KJ2011A002, KJ2011A242, KJ2012A013), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20123401110009).

[†] Corresponding author. E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn