

# 亚波长金属光栅的光耦合增强效应 及透射局域化的模拟研究<sup>\*</sup>

白文理<sup>1)</sup> 郭宝山<sup>1)</sup> 蔡利康<sup>1)</sup> 甘巧强<sup>2)</sup> 宋国峰<sup>1)†</sup>

1) 中国科学院半导体研究所, 北京 100083)

2) 美国里海大学电子工程系, 伯利恒 18015)

(2009 年 1 月 19 日收到, 2009 年 3 月 18 日收到修改稿)

介质层上的亚波长金属光栅产生的表面等离子体(surface plasmons, SPs)可以极大地增强光栅下介质层内的透射光强, 增强作用从 500 nm 延续到近红外区域. 在波长 610 nm 附近有接近 110% 的增强, 在波长 700 nm 及 740 nm 处也有 180% 左右的增强. 而这个波长范围与薄膜太阳能电池的吸收谱很相近, 因此这种结构有望大幅度提高薄膜太阳能电池及不同波长光探测器等光电转换器件的光耦合效率.

关键词: 表面等离子体, 亚波长光栅, 薄膜太阳能电池, 透射增强

PACC: 7865

## 1. 引言

表面等离子体(surface plasmons, SPs)被定义为强度与金属表面距离指数衰减的电磁波与金属表面自由电子的混合体<sup>[1,2]</sup>. 由于光子与电子的共振, 金属表面附近光场特性被改变, 纳米尺度金属结构的透射光可以得到增强<sup>[3]</sup>, 这使得表面等离子体可以应用于很多领域<sup>[4,5]</sup>, 例如, 提高太阳能电池和光探测器的效率<sup>[6-11]</sup>就是众多研究热点的其中之一. 通常情况下, 光能量不能有效的在数百纳米至微米量级的尺度内被吸收, 如果能将入射光局域在数百纳米<sup>[12]</sup>厚的光吸收转换层内, 并增强光场强度, 就可以提高用于光电转换的吸收材料的利用率, 同时可以满足对光能高效利用的需求. 这样的光吸收转换层的材料特性可由介电常数  $\epsilon = (n + ik)^2$  来表示,  $n$  为折射率的实部,  $k$  为折射率的虚部即材料的消光系数. 本文提出了一种金属纳米结构并对这种金属结构的透射特性进行了模拟计算和分析, 证明了这种金属结构可以增强介质层内的光场强度, 为了简化分析计算, 本文选择  $\text{SiO}_2$  介质进行数值模拟, 并将材料的消光系数暂时忽略.

## 2. 一维光栅 SPs 理论

金属表面等离子体波可以通过金属光栅激发产生. 但入射光耦合成为周期性纳米结构金属表面的 SPs 需要使入射光波矢与 SPs 波矢相匹配<sup>[1]</sup>. 采用一维纳米光栅的方法可以实现波矢匹配, 这种办法被很多研究者证明可以有效的达到动量匹配并将入射光耦合激发 SPs<sup>[13-18]</sup>. 在金属与不同介质的界面产生的 SPs 波矢可以简单的表示为<sup>[1]</sup>

$$k_{\text{sp}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}},$$

其中  $k_{\text{sp}}$  为 SPs 波矢,  $\omega$  为光场角频率,  $c$  为光速,  $\epsilon_m$  和  $\epsilon_d$  分别为金属与电介质材料的介电常数, 而  $\omega/c$  可以表示为  $k_0$ . 在入射光垂直入射一维光栅的情况, 为满足动量匹配而引入的  $\Delta k$  则由光栅的衍射产生, 即

$$\Delta k^{(n)} = \frac{2\pi n}{T},$$

在光栅表面产生的 SPs 波矢可以表示为

$$k_{\text{sp}} = k_0 + \frac{2\pi n}{T},$$

其中  $n$  为整数,  $T$  为光栅的周期. 根据 Collin 等人的

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号 60677045)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: sgf@semi.ac.cn

研究<sup>[13,14]</sup>,对于以矩形金属为单元的金属光栅表面存在的 SPs 共振模式存在两种,一种是水平表面等离子体共振 HSPR (horizontal surface-plasmon resonance) 存在于金属上下水平表面,是一种水平周期结构引发的共振模式;另一种为垂直表面等离子体共振 VSPR (vertical surface-plasmon resonance) 存在于金属左右垂直表面,是一种 Fabry-Perot 共振模式.被耦合进入金属表面的入射光以 SPs 形态沿矩形金属四个表面分别向两端传播,且其强度随与表面的距离呈指数衰减.当周期结构适当时,在一定波长范围内,下表面(即金属/SiO<sub>2</sub>( $\epsilon_d = 2.13$ )界面)的 SPs 强度远大于上表面(即金属/空气( $\epsilon_d = 1$ )界面)的 SPs 强度.

本文的模拟研究中,金属材料选择 Ag,因为金属 Ag 纳米结构在可见光波段有较强的透射增强<sup>[19]</sup>.由于 Ag 的介电常数  $\epsilon$  随波长变化,而且在部分可见光波段难以用单一模型表示,所以对文献报道的 Ag 的数据<sup>[20]</sup>在 300 nm 到 1200 nm 范围进行了 10 nm 步长的三次样条法插值,以取得 Ag 金属的介电常数  $\epsilon$  的近连续的插值数据,如图 1 所示.

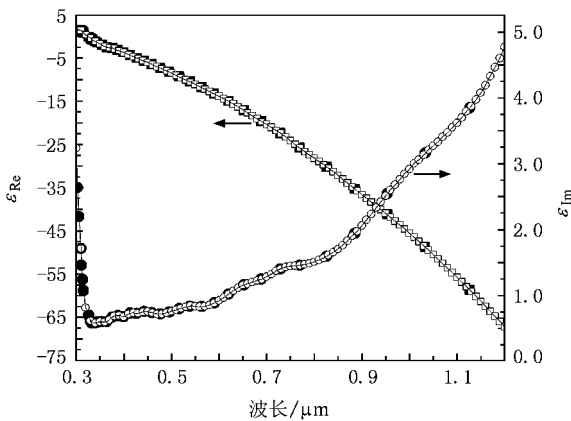


图 1 金属银  $\epsilon$  随波长变化插值结果

### 3. 模拟设计

我们利用二维结构时域有限差分 (finite-difference time-domain, FDTD) 算法进行数值模拟计算.模拟中,设定 SiO<sub>2</sub>( $\epsilon_d = 2.13$ )衬底的厚度为 200 nm,为简单起见先将表面上金属 Ag 光栅的尺寸定义为宽度 = 厚度,并且以此为变量,周期( $T$ )首先选择在 450 nm 以得出同一周期不同尺寸光栅的结果,随后的模拟中周期( $T$ )设置为变量,以观察同一尺

寸不同周期的结果.如图 2 所示,模拟区域为  $6 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m}$  的  $X-Z$  平面.为了确保数值计算的准确我们设定计算网格单元为  $5 \text{ nm} \times 5 \text{ nm}$ ,并在外围设置理想吸收边界(perfectly matched layer absorber, PML),入射光为沿  $Z$  方向传播的 P 偏振平面波( $E_x, E_z, H_y$ )即电场分量  $E_x$  垂直于纳米金属条.由于太阳能电池及光探测器的材料光跃迁速率与电场振幅的平方成正比,我们分别监测 SiO<sub>2</sub> 衬底中不同深度(50 nm, 100 nm, 150 nm)的透射电场强度(可以代表由 SPs 耦合出的电场增强),并监测透过 SiO<sub>2</sub> 衬底的透射电场强度.

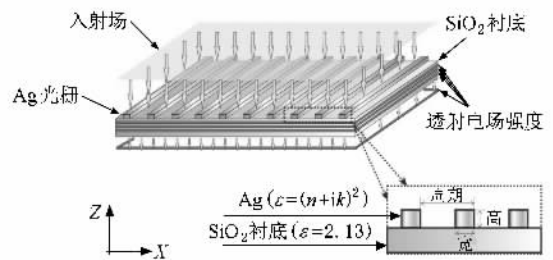


图 2 模拟结构详细示意图

模拟中扫描波长范围从 300 nm 到 1200 nm,覆盖整个可见光波段及大部分近红外波段.我们同样进行了没有 Ag 光栅时单一 SiO<sub>2</sub> 衬底的模拟计算用来作为比较,并把该值作为归一化过程中的标准,由公式

$$E_{\text{Normalized}}(\lambda) = \frac{E_{\text{withAg}}(\lambda)}{E_{\text{withoutAg}}(\lambda)}$$

得出归一的  $\lambda - E_{\text{Normalized}}(\lambda)$  谱线,如图 3 所示.

### 4. 模拟结果与讨论

图 3 所示的为不同尺寸的 Ag 光栅在周期( $T$ )为 450 nm 时 SiO<sub>2</sub> 层内 50 nm 深处的扫描结果用上述归一化方法处理后的曲线.

从图 3 中可以直观的看出周期 450 nm 时,不同尺寸的 Ag 光栅在波长 500 nm 以下时均小于参考值(参考值为 1),这主要是由于金属银在比 500 nm 更短波长处接近 SPs 产生的截至频率,难以激发 SPs,而且金属银对该波长的光吸收导致了较大的损耗.而当波长大于 500 nm 时相对参考值在 500 nm 至 1200 nm 波长范围内均有增强,这是因为 Ag 纳米结构上较长的波长比较容易被激发耦合为 SPs,这个机理对透射光的增强起主导作用.从图 3 上可以看

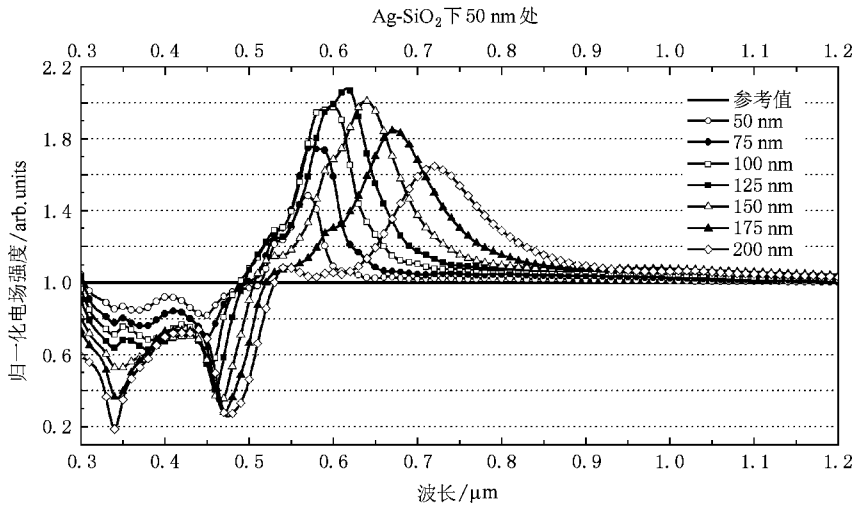


图 3  $T = 450 \text{ nm}$  不同尺寸 Ag 的 50 nm 深归一化扫描谱线

到  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  尺寸的 Ag 光栅的增强作用已经在  $570 \text{ nm}$  波长处达到了 50% 左右,随着尺寸增大,增强的峰的强度也继续增大,并出现明显红移.当尺寸增大到  $125 \text{ nm} \times 125 \text{ nm}$  时,我们给出了更详细的不同位置计算值的扫描图,并将不同位置的计算值按各自的参考值进行归一化,如图 4(a)所示.整个透射增强范围从  $500 \text{ nm}$  一直延伸至  $1200 \text{ nm}$ .处在波长  $610 \text{ nm}$  附近的增强峰的强度达到了最大, $\text{SiO}_2$  层内  $50 \text{ nm}$  处相对参考值而言有近 110% 的增强,100

$\text{nm}$  处和  $150 \text{ nm}$  处也分别有 55% 和 30% 的增强,随着与  $\text{Ag-SiO}_2$  界面距离的增大,增强值减弱.这是由于 SPs 本身仅局限在  $\text{Ag-SiO}_2$  界面处,而其透射增强的作用也仅作用于数百纳米的近场,这与传统超透射光栅的研究有所区别<sup>[3]</sup>,是表面等离子体太阳能电池和光探测器研究需要特别注意的研究点.图 4(a)中的空心圆曲线为透过  $\text{SiO}_2$  层下的透射光强度,从图中我们观察到波长小于  $500 \text{ nm}$  时四个不同位置的谱线具有几乎相同的测量值和完全相同的变

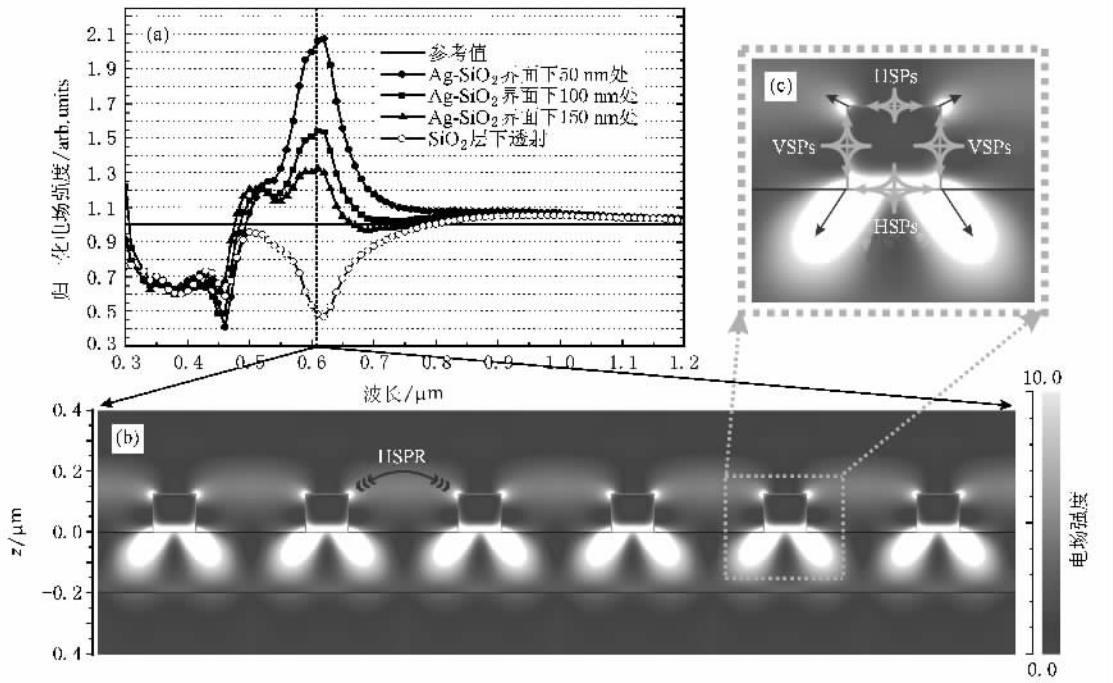


图 4 (a)  $125 \text{ nm} \times 125 \text{ nm}$  Ag 光栅不同位置光场强度对比 (b)  $610 \text{ nm}$  波长稳态电场分布图 (c) 单一金属银条表面 HSPs 与 VSPs 耦合输出增强光场示意图

化趋势.这是因为在本文模拟工作中  $\text{SiO}_2$  层本身没有任何吸收,而且在这个波段内金属银的吸收导致了不同位置的光场强度都低于参考值.当波长大于 500 nm 时由于 SPs 的作用,产生空间局域性的近场光场强度的增强,导致  $\text{SiO}_2$  层下光场强度与  $\text{SiO}_2$  层内的光场强度变化趋势相反,在波长 610 nm 附近降低为参考值的 45% 左右.说明了该结构有效的增强了 500—750 nm 波段的入射光并将其空间局域化在数百纳米的介质层内.

图 4(b) 给出了该波长处的稳态电场强度分布,  $Z=0$  处的水平线为  $\text{SiO}_2$  的上表面,  $Z=-0.2$  处的水平线为  $\text{SiO}_2$  的下表面,灰色矩形为银金属条.根据上面叙述过的 HSPs 与 VSPs 在 Ag 四个表面分别传播导致顶角处汇聚耦合输出为增强光场,如图 4(c) 所示,图中灰色箭头表示 SPs 传播方向,灰色曲线表示 SPs 的强度随着与表面距离呈指数衰减,黑色箭头即表示耦合输出的增强光场方向.上表面 HSPR 的强度更加明显在两个银金属条之间产生了

更强的水平共振模式,如图 4(b) 中所示.上下表面光场均分为两束成一定角度的输出光,而下表面 VSPR 的强度更强使得耦合输出的增强光场得以在  $Z$  方向传播更远的距离,但增强光场被有效的限制在了介质层内.

当光栅金属条的尺寸继续增大时,光栅的增强效果会有所减弱,峰值继续红移至 720 nm 附近(200 nm × 200 nm 尺寸 Ag 光栅).我们所模拟的以上尺寸在 570—750 nm 波段范围分别有 50% 以上的透射增强.对于波长响应峰值处在这一波段范围内的光电转换材料均有望有效提升入射光的耦合效率.当 Ag 尺寸固定在 125 nm × 125 nm 时,周期  $T$  从 450 nm 增大到 800 nm 时不同周期的扫描谱图如图 5(a) 所示.周期大于 550 nm 后随着周期的增大,增强峰出现等步长的红移,分析后得出增强峰位置偏移量与周期变量的关系由公式  $\frac{\Delta\lambda_{\text{peak}}}{\Delta T} = \frac{4}{5}$  确定.

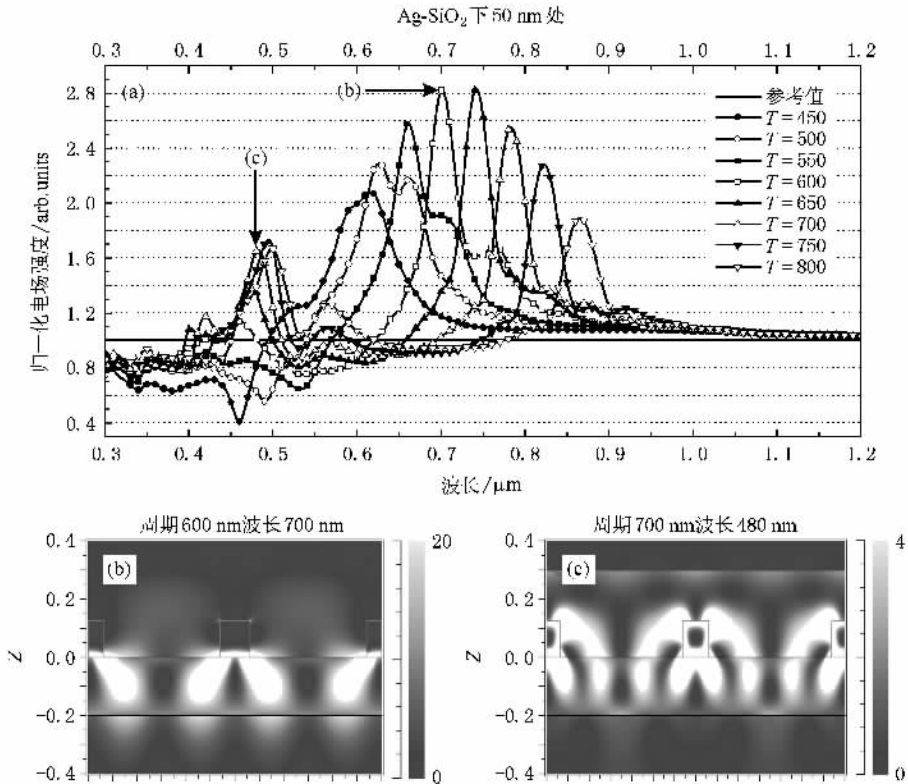


图 5 (a) 125 nm × 125 nm 尺寸 Ag 光栅不同周期扫描谱图 (b) 125 nm × 125 nm 尺寸周期 600 nm 波长 700 nm 时稳态电场分布图 (c) 125 nm × 125 nm 尺寸周期 700 nm 波长 480 nm 时稳态电场分布图

从图 5(a) 中看到  $T = 600$  nm 时增强到达了 180%, 图 5(b) 给出了该波长时的稳态电场分布图,

从图中我们发现金属银上表面几乎没有 SPs 耦合输出的光场存在而全部集中在 Ag- $\text{SiO}_2$  界面下方,所

以其透射增强达到了极值.当周期大于 650 nm 时,另一个增强峰出现在波长 480 nm 波长附近,根据 Ebbesen 等人的研究结果,这可以解释为不同阶数的透射增强效应<sup>[19]</sup>.图 5(c)为  $T = 480$  nm 时的稳态电场分布图,由于其共振阶数的改变,使得金属银表面周围电场分布产生了很大变化,上表面 SPs 由于不同阶数的共振效应而使耦合输出光场集中于金属银条之间的空气-SiO<sub>2</sub> 界面上,并同样增强了 SiO<sub>2</sub> 层内部的电场,如图 5(a)所示,其增强强度为 60% 左右.

因为金属银膜厚度在 100 nm 左右时产生 SPs 效果显著<sup>[3,4]</sup>,我们进一步模拟讨论了同一周期金属

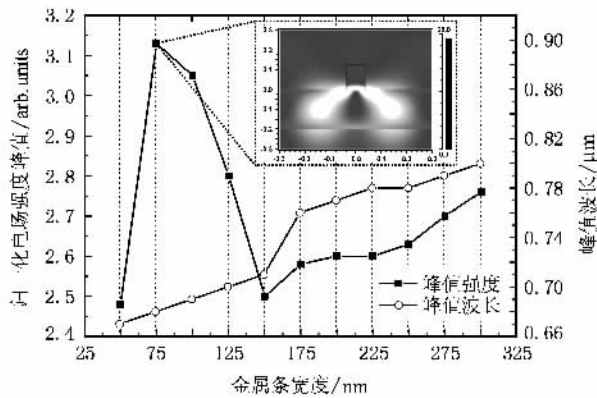


图 6 125 nm 厚不同宽度金属条条件下的透射峰值强度及峰值波长

光栅厚度固定在 125 nm 条件下不同宽度情况的增强透射,结果如图 6 所示.

可以看出宽度由 50 nm 增加到 150 nm 时,波长随之由 670 nm 移到 710 nm 处,峰值强度在宽度为 75 nm 处达到参考值的 3.1 倍以上,并在图 6 中给出了 75 nm 宽时的稳态电场分布图.150 nm 宽时峰值减弱到参考值的 2.5 倍.但宽度继续增大时,另一个峰值起于 760 nm 波长处,其强度随宽度增大而增强,并缓慢红移.

## 5. 结 论

我们进行的数值模拟得出了不同尺寸同一周期纳米金属银光栅对可见光波段的透射光增强效应.同时计算得出同一尺寸不同周期纳米金属银光栅对可见光及近红外波段的透射光增强,并给出了增强峰位置偏移量与周期变量的关系.我们模拟设计的结构可以将入射光增强并局域在数百纳米尺度的介质材料中,这对于增强类似于薄膜太阳能电池及其他光电探测器的总体效率有潜在的应用价值.在下一步设计研究中,我们将根据本文的结果,把半导体材料对太阳光的吸收特性考虑进来,进一步完善表面等离子体增强的太阳能电池或光电探测器的设计.

- [1] Raether H 1988 *Surface Plasmons* (Berlin: Springer-Verlag)
- [2] Zayats A V, Smolyaninov II, Maradudin A A 2005 *Physics Reports-Review Section of Physics Letters* **408** 131
- [3] Ebbesen T W, Lezec H J, Ghaemi H F, Thio T, Wolff P A 1998 *Nature* **391** 667
- [4] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W 2003 *Nature* **424** 824
- [5] Tan C L, Yi Y X, Wang G P 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1063 (in Chinese) [谈春雷、易永祥、汪国平 2002 *物理学报* **51** 1063]
- [6] Schaadt D M, Feng B, Yu E T 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 063106
- [7] Derkacs D, Lim S H, Matheu P, Mar W, Yu E T 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 093103
- [8] Lim S H, Mar W, Matheu P, Derkacs D, Yu E T 2007 *Appl. Phys. Lett.* **101** 104309
- [9] Catchpole K R, Pillai S 2006 *Journl of Luminescence Surface plasmons for enhanced silicon light-emitting diodes and solar cells*
- [10] Pillai S, Catchpole K R, Trupke T, Green M A 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 093105
- [11] Okamoto D, Fujikata J, Nishi, Ohashi K 2008 *Japanese Journal of Appl. Phys.* **47** 2921
- [12] Fischer D, Dubail S, Selvan J, Vaucher N P, Platz R, Hof C, Kroll U, Meier J, Torres P, Keppner H, Wyrsh N, Goetz M, Shah A, Ufert K D 1996 "The micromorph solar cell: extending a-Si:H technology towards thin film crystalline silicon," Twenty-fifth Photovolt. Spec. Conf. p. 1053
- [13] Collin S, Pardo F, Teissier R, Pelouard J L 2001 *Physical Review B* **63** 033107
- [14] Collin S, Pardo F, Teissier R, Pelouard J L 2002 *Opt. A: Pure Appl. Opt.* **4** S154
- [15] Crouse D 2005 *IEEE Trans. Electron Devices* **52** 2365
- [16] Pang Y, Genet C, Ebbesen T W 2007 *Optics Communications* **280** 10
- [17] Schider G, Krenn J R, Gotschy W, Lamprecht B, Dittlacher H, Leitner A, Aussenegg F R 2001 *Journal of Appl. Phys.* **90** 8
- [18] Garcia-Vidal F J, Martin-Moreno L 2002 *Phys. Rev. B* **66** 155412
- [19] Genet C, Ebbesen T W, Light in tiny holes 2007 *Nature* **445** 4 39
- [20] Palik E D (ed.) 1985 *Handbook of Optical Constants of Solids* (Academic Press, Orlando, FL)

# Simulation of light coupling enhancement and localization of transmission field via subwavelength metallic gratings<sup>\*</sup>

Bai Wen-Li<sup>1)</sup> Guo Bao-Shan<sup>1)</sup> Cai Li-Kang<sup>1)</sup> Gan Qiao-Qiang<sup>2)</sup> Song Guo-Feng<sup>1)†</sup>

<sup>1</sup> *Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*

<sup>2</sup> *Electrical & Computer Engineering Department, Lehigh University, Bethlehem, PA 18015*

(Received 19 January 2009; revised manuscript received 18 March 2009)

## Abstract

Surface plasmons (SPs) generated in nano metallic gratings on medium layer can greatly enhance the transmission field through the metallic gratings. The enhancement effect is achieved from  $\lambda = 500$  nm to near-infrared domain. The enhancement rate is about 110% at the wavelength of about 610 nm and about 180% at  $\lambda = 700$  nm and 740 nm where most kinds of thin film solar cells have a high spectral response. These structures should provide a promising way to increase the coupling efficiency of thin film solar cells and optical detectors of different wavelength response.

**Keywords** : surface plasmon , nano grating , thin film solar cell , transmission enhancement

**PACC** : 7865

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60677045).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail :sgf@semi.ac.cn