

利用 Ag@SiO₂ 纳米粒子等离子体共振增强发光二极管辐射功率的数值研究

贾博仑 邓玲玲 陈若曦 张雅男 房旭民

Numerical research of emission properties of localized surface plasmon resonance enhanced light-emitting diodes based on Ag@SiO₂ nanoparticles

Jia Bo-Lun Deng Ling-Ling Chen Ruo-Xi Zhang Ya-Nan Fang Xu-Min

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 237801 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.237801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.237801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

熔石英中过氧缺陷及中性氧空位缺陷的几何结构、电子结构和吸收光谱的准粒子计算

Quasi-particle calculations on electronic and optical properties of the peroxy linkage and neutral oxygen vacancy defects in amorphous silica

物理学报.2016, 65(2): 027801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.027801>

铁电体中极化长程涨落的光子关联谱实验研究

Experimental study of photon correlation spectroscopy for the long-range fluctuation of polarization in ferroelectrics

物理学报.2015, 64(14): 147801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147801>

不同粒径沙地表面双向反射特性研究

Bidirectional reflectance of sandy land surface with different particle sizes

物理学报.2014, 63(18): 187801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.187801>

基于改进维纳逆滤波的衍射成像光谱仪数据误差分析与重构

Error analysis and reconstruction for diffractive optic imaging spectrometer using the multiple iterations

物理学报.2014, 63(17): 177801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.177801>

激光陶瓷晶体最佳掺杂浓度的理论研究

Theoretical study of optimal doping concentration in laser ceramics

物理学报.2014, 63(8): 087801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.087801>

利用 Ag@SiO₂ 纳米粒子等离子体共振增强 发光二极管辐射功率的数值研究*

贾博仑¹⁾ 邓玲玲^{1)†} 陈若曦¹⁾ 张雅男²⁾ 房旭民^{3)‡}

1)(南京邮电大学光电工程学院, 南京 210023)

2)(南京信息工程大学物理与光电工程学院, 南京 210044)

3)(近地面探测与感知技术重点实验室, 无锡 214035)

(2017年7月29日收到; 2017年8月31日收到修改稿)

金属纳米粒子利用其局域表面等离子体共振效应(LSPR), 可以增强附近荧光分子的自发辐射速率, 因而在光学传感、光电器件等领域中具有潜在的应用价值. 金属纳米粒子的LSPR与其自身的材料、形状、尺寸以及周围环境介质密切相关, 这影响着纳米粒子在具体器件中的应用. 本文利用三维时域有限差分法, 研究了相同体积的球形、椭球形、立方形与三棱柱形银纳米粒子对薄膜发光二极管辐射功率的影响; 计算了不同形状银纳米粒子对偶极子光源辐射功率和薄膜器件光出射强度的增强, 并结合LSPR效应讨论了辐射功率变化的物理机理. 研究表明: 银纳米粒子自身形状尖锐程度的增加有利于提高LSPR的共振强度; 同时纳米粒子的形状影响了LSPR共振电场与薄膜器件中偶极子辐射电场之间的耦合作用, 其中立方形纳米粒子因为能够实现最强的耦合作用而对器件的辐射功率增强最大. 在此基础上进一步讨论了不同薄膜材料对LSPR共振及光源辐射功率的影响, 发现较高的材料折射率有利于增强金属纳米粒子的LSPR与器件的耦合作用, 从而改善发光二极管性能.

关键词: 金属纳米粒子, 局域表面等离子体共振, 发光二极管, 辐射功率

PACS: 78.20.Bh, 78.40.Kc, 78.67.Bf

DOI: 10.7498/aps.66.237801

1 引言

发光二极管(light emitting diode, LED), 包括有机发光二极管(organic LED, OLED), 自被发明并取得技术突破以来, 凭借其全固态器件、宽视角、响应快、易于实现柔性器件等特点被广泛应用于照明和显示领域^[1-4], 但目前仍面临着内量子效率较低、光提取效率低等问题^[5,6]. 纳米技术的快速发展使得人们可以成熟地制备多种纳米结构, 以调控各类发光器件中的光学和电学过程^[7]. 其中, 金属纳米粒子(metal nanoparticle, MNP)因其与常规块状金属不同的电学、光学特性, 尤其是当受到

特定波长的光照射时其表面产生的强烈局域表面电磁场, 即局域表面等离子共振效应(local surface plasmon resonance, LSPR)^[8,9]而备受关注. 有研究发现, 将纳米粒子引入发光二极管内, 可以明显增强荧光分子的自发辐射速率, 提高内量子效率. 因此, 利用金属纳米粒子提高发光器件的性能, 已经成为光电器件领域的一个研究热点^[10-13].

利用金属纳米粒子LSPR改善发光器件性能的一个重要条件是其共振波长与发光波长相匹配^[14]. 而金属纳米粒子的LSPR特性与粒子的形状、尺寸、环境介质等因素密切相关^[15-17]. 米氏理论(Mie)从理论上严格求出了球形纳米粒子的共

* 国家自然科学基金(批准号: 61505086)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dengll@njupt.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: fangxm57006@163.com

振波长表达式^[15,16],但是无法用于对其他形状纳米粒子的讨论. Huang等^[18]用形状参数 L 表征纳米结构的不同形状,并将 L 引入LSPR共振波长表达式,但在通常情况下仅知球形粒子 L 为 $1/3$,仍无法确定其他形状纳米粒子的 L 值^[19].目前,对不同形状纳米粒子LSPR特性的研究主要采用数值仿真的方法,比如时域有限差分法(finite difference time domain, FDTD)^[20],离散偶极子近似法(discrete dipole approximation, DDA)等^[21].此外,将纳米粒子引入发光器件后,纳米粒子周围的介质同样会影响纳米粒子的LSPR特性,而目前此方向的研究成果与报道仍较少^[20,22].本文采用三维时域有限差分法,首先仿真计算了目前实验上较易制得的球、椭球、立方与三棱柱体Ag纳米粒子(silver nanoparticle, SNP)的LSPR光谱和共振电场分布;然后计算了将Ag纳米粒子引入发光二极管后,偶极子光源辐射功率和器件光出射强度的增强,讨论了纳米粒子的形状对器件发光性能的影响,并从LSPR效应角度探讨不同形状纳米粒子改善发光性能的作用机理;最后,进一步讨论了器件结构中所用材料的折射率对LSPR效应的影响.

2 模型设置与理论计算

本文中的仿真采用加拿大Lumerical公司的FDTD Solution软件进行,采用Palik公司的金属Ag数据进行计算.纳米粒子模型以球体为基准,设置了与其体积相同的纳米椭球、纳米立方和纳米三棱柱,粒子形状如图1所示,各自的结构参数如表1所列.考虑到实际器件中通常采用包裹绝缘层来增强单纯金属纳米粒子的稳定性以及陷阱效应对器件带来的负面影响,在每个粒子外围均设置了一个厚度为13 nm的二氧化硅包裹层^[10,14,23],从而形成一个SNP@SiO₂核壳结构.在仿真模型中,将纳米粒子核壳结构与器件中的介质膜层相结合,形成图1(a)所示的纳米球-器件结构,用于计算其对器件性能的影响.采用可以较好地描述发光器件中点光源的偶极子光源,光源的偏振方向如图中光源附近的浅蓝色箭头所示沿 X 轴平行于结构中的膜层界面.光源的偏振方向对计算结果有一定的影响,选用其中最有代表性的 X 方向的偏振来进行仿真计算.器件膜层常用的半导体材料GaN,其折射率为2.46,光源距纳米粒子表面70 nm.这

里,光源的位置是根据计算结果优化得到的,可以在450—470 nm的蓝光波段内利用金属纳米粒子实现高的光源辐射功率增强和光提取效率增强.通过完美匹配层(PML)边界条件来消除边界处的反射光对仿真结果的影响,以达到模拟无穷大空间的目的;通过设置在光源外围的输出功率分析组得到偶极子的总辐射功率,通过设置在结构上方的光强监视器(T监视器)得到结构出射光的强度.利用分别设置在粒子表面与中央的电场监视器获取粒子内部、表面以及粒子-器件结构的电场分布情况.

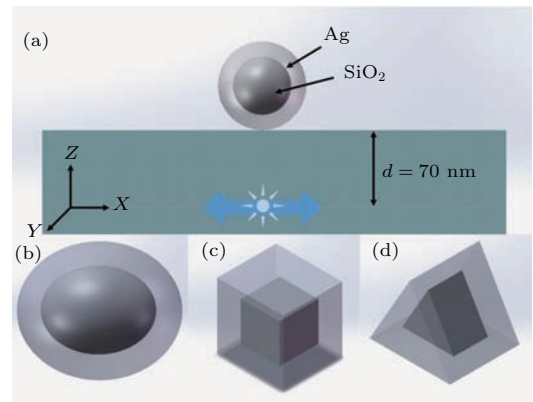


图1 仿真结构示意图

Fig. 1. Schematic cross section of simulation model.

通过在模型中计算光源总辐射功率和结构的出射光强度分别表征光源的自发发射速率 v_{SE} 和结构的光提取效率 η_{LEE} ^[23],以讨论引入金属纳米粒子后对器件发光效率的影响.在本文中,用 η_0 , β_0 和 η_{MNP} , β_{MNP} 分别表示引入纳米粒子前后器件中的光源总辐射功率与结构的出射光强度.因此,加入纳米粒子后,器件的光源总辐射功率的增强可以用 $v_{SE} = \eta_{MNP}/\eta_0$ 表示,我们称之为器件的SE曲线,器件出射光强度的增强用 $\eta_{LEE} = \beta_{MNP}/\beta_0$ 表示,我们称之为器件的LEE曲线. v_{SE} , η_{LEE} 的值大于1,表明相比于没有粒子的情况,引入粒子的器件性能有所提升. v_{SE} 越高,表明粒子对光源的自发发射速率提升程度越大,电子与空穴复合的速率越大.在发射速率相同的情况下, η_{LEE} 越高表明从器件内部提取出的光越多,器件的总发光强度越高.

文献^[24]中提到的面形状参数 S_{11} 可以较好地表示粒子形状的尖锐程度,但其仅与粒子截面的面积和周长有关,对于本文所研究的纳米粒子,不能准确地反映粒子形状的尖锐程度.因此,定义粒子

的体形状参数 α . 其计算公式为

$$\alpha = \frac{1}{S} \left[4 \sqrt[3]{\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4} V \right)^2} \right], \quad (1)$$

式中 V 为粒子的体积, S 为粒子的表面积. 根据 (1) 式, 可以求得球的体形状参数为 1. 在本文所讨论的各粒子体积相同的情况下, α 越小, 表明粒子表面积越大, 粒子形貌越尖锐. 本文讨论的几种纳米粒子的体形状参数也列在表 1 中, 可以看出纳米三棱柱的 α 最小, 表明其形状最尖锐.

表 1 纳米粒子的结构参数和体形状参数
Table 1. Structure parameters and shape factors of the SNPs.

粒子形状	结构参数	体形状参数 α
纳米球	$r = 25 \text{ nm}$	1.000
纳米椭球	$a = 30 \text{ nm}, b = 23 \text{ nm}$	0.982
纳米立方	$l = 40 \text{ nm}$	0.806
纳米三棱柱	$d = 60 \text{ nm}, h = 40 \text{ nm}$	0.737

注: r 为纳米球半径; a, b 分别为纳米椭球的长轴半径和短轴半径; l 为纳米立方的棱边; d, h 分别为纳米三棱柱的底边和高.

3 结果与讨论

3.1 Ag 纳米粒子的等离子体共振吸收特性

研究纳米粒子的 LSPR 特性, 利用总场散射场光源和吸收、散射截面分析组计算吸收和散射光谱. 计算了不同形状 Ag 纳米粒子的吸收光谱, 如

图 2 所示. 比较各个纳米粒子的吸收光谱, 可以看出, 由 Ag 纳米球至 Ag 纳米三棱柱, 粒子的体形状参数逐渐减小, 其形状尖锐程度提高, 使吸收光谱的峰值发生了红移. 为了解释吸收光谱峰值随纳米粒子尖锐程度发生变化的规律, 仿真计算了吸收峰处纳米粒子表面的电场分布, 如图 3 所示. 比较不同形貌纳米粒子的表面电场分布可以看出, 随着纳米粒子体形状参数的减小, 其尖锐程度逐渐增加, 电场越发集中于偏振方向上粒子的尖端部位. 表面电场增强表明表面电荷集中分布在尖端处, 这增强了电荷分离, 并因此减弱电子发生振荡需要的回复力, 从而使激发纳米粒子 LSPR 所需的能量降低, 相应的共振波长发生红移 [21,25]. 纳米粒子的形状也影响了共振吸收峰的强度, 纳米椭球的吸收峰

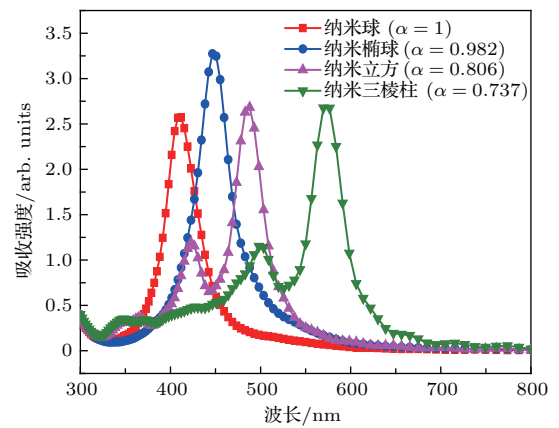


图 2 (网刊彩色) 不同形状 Ag 纳米粒子的吸收光谱
Fig. 2. (color online) Absorption spectra of SNPs with different shapes.

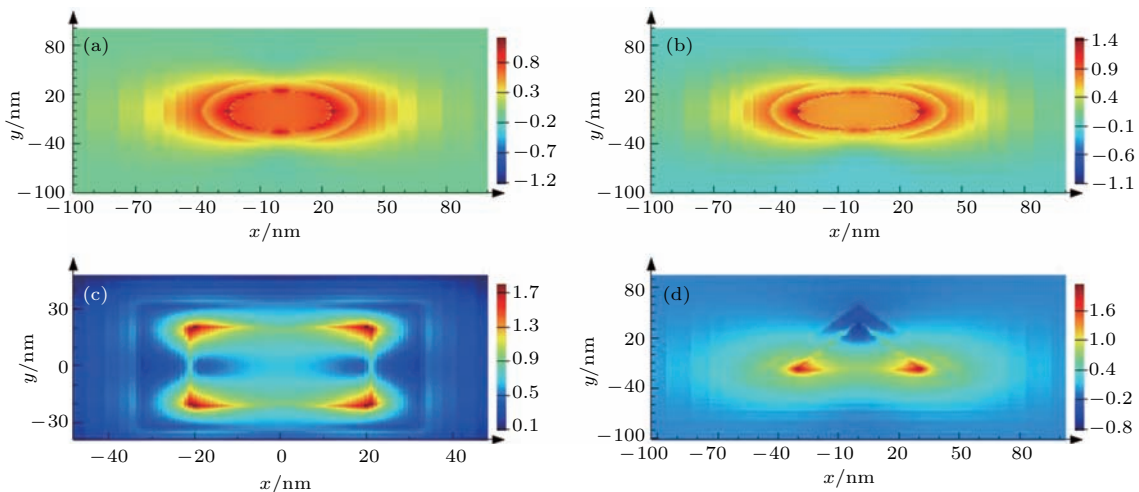


图 3 (网刊彩色) (a) Ag 纳米球, (b) Ag 纳米椭球, (c) Ag 纳米立方, (d) Ag 纳米三棱柱在各自吸收峰处的表面电场分布图
Fig. 3. (color online) Surface electric field distribution of silver (a) nano sphere, (b) nanoellipsoid, (c) nano cube, and (d) nano triangular prism at their absorption peaks.

强度明显强于其他三种粒子. 从图 3 中的表面电场分布可以看出, 在纳米球中, 电场均匀分布在球的表面, 而在纳米椭球中, 电场集中在平行于光偏振方向的长轴两端, 因此纳米椭球共振峰强度强于纳米球. 对于纳米立方和纳米三棱柱, 电场不仅分布在结构的顶点, 还分布在突出的棱边上, 因此顶点处的总电场弱于纳米椭球. 此外, 从图 2 中还可看到在 Ag 纳米立方、纳米三棱柱的吸收光谱中, 在主峰左侧有一个明显的小峰, 这是由粒子的四极子共振引起的 [20].

3.2 Ag 纳米粒子对光源辐射功率的影响

为了研究将纳米粒子引入发光器件后对器件性能的影响, 利用图 1 (a) 所示的仿真模型分别将不同形状的纳米粒子引入器件进行仿真, 计算了各种形状 Ag 纳米粒子对半导体介质层中的偶极子光源辐射功率的影响. 计算得到如图 4 所示的含有不同纳米粒子器件的 SE 曲线, 可以看到, 不同形状纳米粒子的 SE 曲线在 400—500 nm 波长附近均表现出较为明显的下降, 且波谷随着粒子体形状参数的减小逐渐红移. 这是由 Ag 纳米粒子自身对光的吸收引起的. 将 Ag 纳米粒子放置在发光偶极子附近, 相当于为偶极子引入了一个非辐射通道. 偶极子辐射的能量通过这个非辐射通道被 Ag 纳米粒子吸收, 因此偶极子辐射总能量降低. 另外, 比较纳米粒子的吸收光谱和偶极子 SE 曲线 (图 2 和图 4) 也可以看到, 同一形状的纳米粒子吸收峰与其引入器件后的偶极子自发辐射速率最小位置对应的波长接近, 这也表明了图 4 中 400—500 nm 波长区域内自发辐射速率的减小是由于附近金属纳米粒子的吸收导致的.

从图 4 中还可以看到在波谷之后, 各个纳米粒子的 SE 曲线均有一个明显的增强峰, 且增强峰的位置随粒子体形状参数的减小而红移. 这里, SE 速率的提升是由于金属表面激发的 LSPR 电场与偶极子辐射电场发生了耦合. 共振耦合的强度既决定于金属纳米粒子自身 LSPR 的强度, 也受到 LSPR 电场与偶极子辐射电场之间的耦合程度的影响. 比较纳米球和纳米椭球的 SE 曲线, 可以看到纳米椭球对偶极子辐射功率的增强更明显, 主要原因是纳米椭球自身的 LSPR 强于纳米球. 几种纳米粒子中, Ag 纳米立方对偶极子辐射功率的增强最大, 明显强于 Ag 纳米立方表现出来的光吸收能力 (见

图 2). 为了解释这一现象, 计算 SE 曲线增强峰值处介质膜层附近各种纳米粒子内部中央剖面上的电场分布, 如图 5 (a)—(d) 左列所示. 这个剖面垂直于器件膜层的表面, 可以反映出器件膜层对纳米粒子 LSPR 电场分布的影响. 同时也给出了没有膜层时, 单独纳米粒子在该剖面上的电场分布情况作为比较, 如图 5 右列所示.

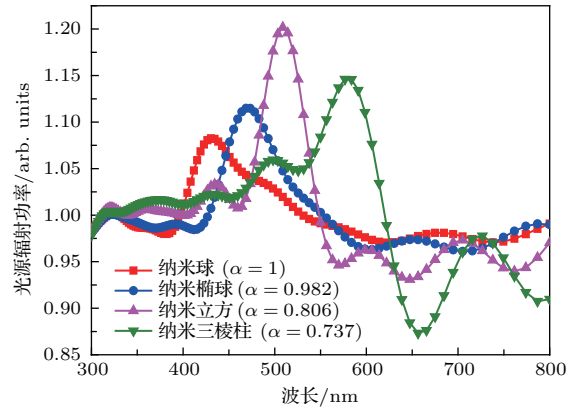


图 4 (网刊彩色) 引入不同形状 Ag 纳米粒子的发光二极管 SE 曲线

Fig. 4. (color online) SE curves of light-emitting diodes with different SNPs.

由图 5 可以看出, 与单独纳米粒子对称分布的电场不同, 将纳米粒子与器件结合之后, 电场不再对称分布于纳米粒子的尖锐部分, 而是集中于纳米粒子与器件之间的区域. 这是因为介质层的引入, 改变了金属纳米粒子周围的介电常数分布的对称性, 从而导致了电场分布的变化. 比较不同形状纳米粒子的电场分布情况, 发现由于纳米立方和纳米三棱柱具有平面结构, 其表面与器件膜层的接触面积较大, 所以表面电荷集中的区域与膜层更加接近, 使得电场明显集中于纳米粒子与膜层之间. 所以纳米立方对偶极子辐射功率增强最大的原因是介质膜层的引入使 LSPR 电场更加集中于器件附近, 因此与偶极子之间的距离更近, 增强了 LSPR 电场与偶极子辐射电场之间的耦合, 从而提高了偶极子的自发发射速率.

此外, 随着纳米粒子体形状参数的减小, 金属纳米粒子利用其 LSPR 增强偶极子光源辐射功率的同时, 400—500 nm 波长区域内的非辐射能量损失相对减少. 同时, 在各自增强峰后的长波长区 (图 4 中 600—800 nm 波长区域), 各粒子器件的 SE 曲线出现了明显的波动, 这是由于光源的直接辐射光与粒子的散射光间的共振引起的 [23].

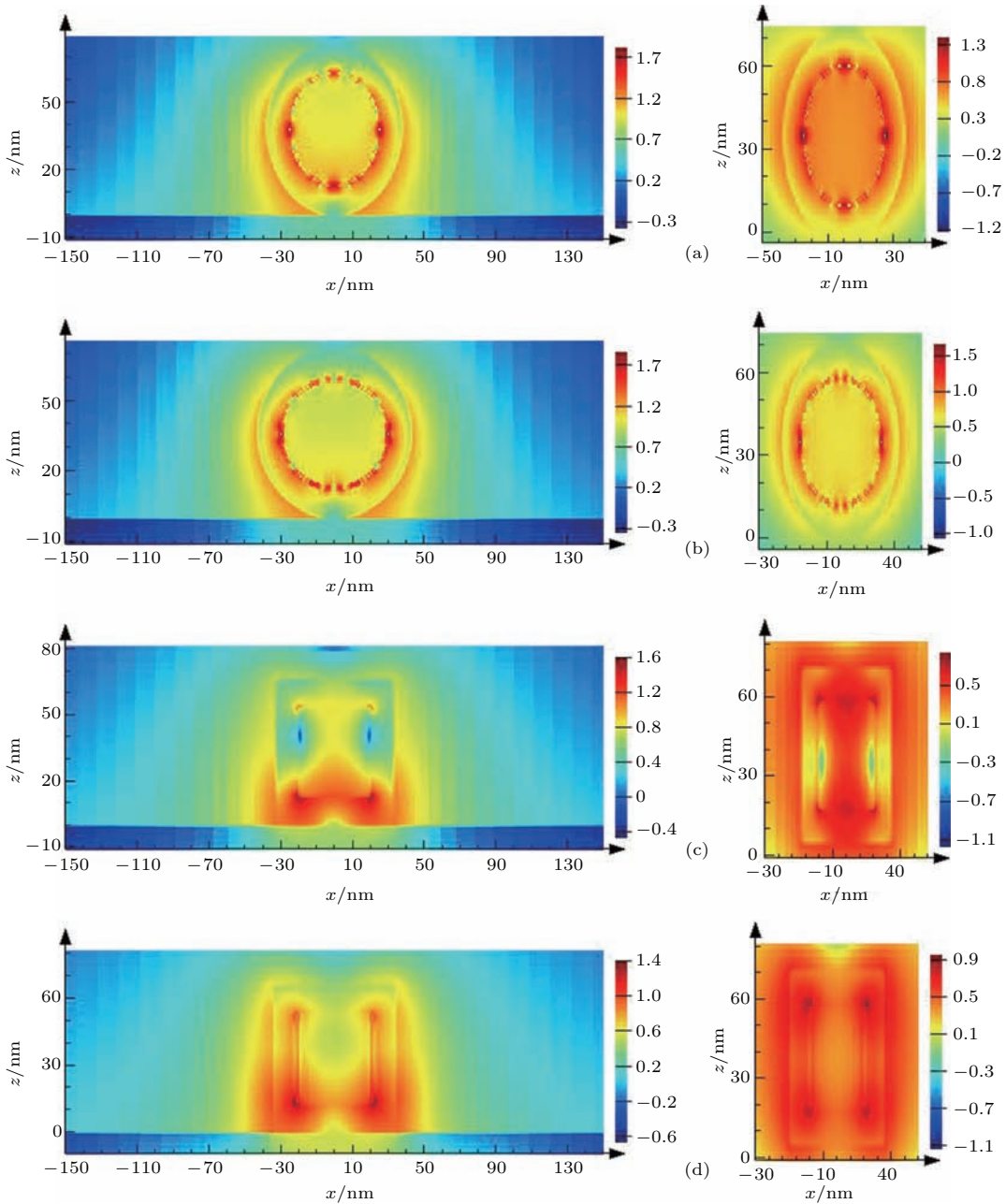


图5 (网刊彩色) (a) Ag 纳米球, (b) Ag 纳米椭球, (c) Ag 纳米立方, (d) Ag 纳米三棱柱在 SE 峰值处的中心剖面电场分布图, 右侧插图为单独纳米粒子在 LSPR 峰值处的电场分布

Fig. 5. (color online) Electric field distribution at the central sections of silver (a) nano sphere, (b) nano ellipsoid, (c) nano cube, and (d) nano triangular prism at their SE peaks. Insets in the right column are the electric field of SNPs at their LSPR peaks.

3.3 Ag 纳米粒子对器件出射光强度的影响

为了研究纳米粒子的引入对器件总出射光强度的影响, 计算不同形貌纳米粒子与器件膜层相结合后各器件的 LEE 曲线, 如图 6 所示.

从图 6 中可以看到, 在金属纳米粒子的共振波长附近, 同样观察到 LEE 的降低, 且随着纳米粒子体形状参数的减小, LEE 最低值对应的波长逐渐红

移. 这一变化规律与 SE 的变化规律基本一致, 表明引起这一变化的主要原因仍是金属纳米粒子吸收引起的偶极子辐射能量的损失.

随着波长增加, 在 LEE 曲线波谷之后的波段, 可以看到纳米粒子的引入很显著地提高了器件的出射光强度, 而且提高的程度要明显大于光源辐射功率的提升. LEE 提升强度增加的一部分原因是, 在该波段, 金属纳米粒子的 LSPR 电场与偶极子辐

射电场相耦合, 提高了偶极子的辐射功率(如 3.2 小节所述); 另一部分原因则是由于纳米粒子对光的散射作用. 图 6 的插图中给出了不同形状纳米粒子的散射光谱. 比较各个粒子的散射强度可以发现, 纳米球、纳米椭球的散射作用明显强于纳米立方和纳米三棱柱. 所以, 纳米球和椭球的 LEE 增强强于它们的 SE 增强. 在所有粒子中, 纳米椭球的散射光谱最强, 所以相比于 SE 曲线, 其出射光强度的增强程度最大. 但由于粒子-器件之间电场能量的集中以及其与器件的耦合作用仍是改善器件性能的主要原因, 而纳米椭球对偶极子辐射功率的增强较小, 所以纳米椭球的 LEE 提升程度低于纳米立方. 同样, 纳米三棱柱的散射是最弱的, 因此其对器件 LEE 的增强效果并不好.

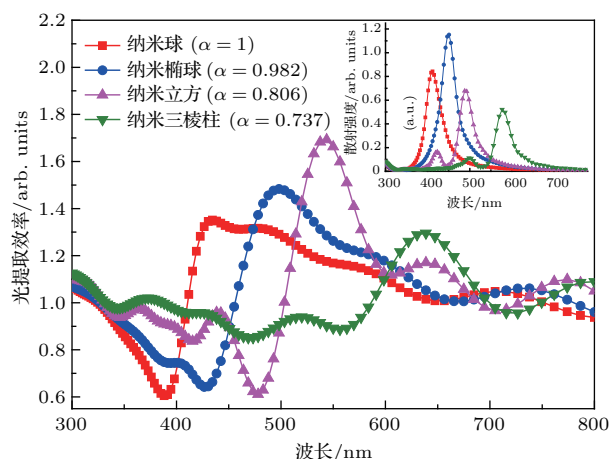


图 6 (网刊彩色) 引入不同形状 Ag 纳米粒子的发光二极管 LEE 曲线, 插图为 Ag 纳米粒子的散射光谱

Fig. 6. (color online) LEE curves of light-emitting diodes with different SNPs. Inset is the scattering spectra.

3.4 器件中膜层介质折射率对等离子体共振效应的影响

由前面的讨论结果可以看到, 实际器件中介质膜层能够在很大程度上影响金属纳米粒子 LSPR 的电场分布, 进而影响偶极子光源的辐射功率和光提取功率. 因此, 进一步计算不同膜层介质折射率对金属纳米粒子 LSPR 效应的影响. 采用耦合作用最强的 Ag 纳米立方, 计算了对应器件的 SE 曲线, 结果如图 7 所示.

从图 7 中可以看出, 在折射率较小时 ($n = 1.5$), 粒子对光源总辐射功率的增强作用很弱. 随着材料折射率的逐渐增加, 器件的 SE 曲线出现了明显的

增强, 且材料折射率越高, SE 增强的程度越大, 同时增强峰位置红移. 导致这一变化的原因主要是随着膜层材料折射率的增大, 粒子 LSPR 共振电场越发集中于粒子-膜层区间, 使电场更加靠近器件一侧, 从而加强了粒子与器件之间的耦合作用. 当器件膜层介质折射率为 2.3 时, 光源辐射功率达到最大. 因此, 具有较高折射率的介质膜层能够更好地促进 LSPR 电场与光源进行耦合, 带来器件辐射功率的明显改善.

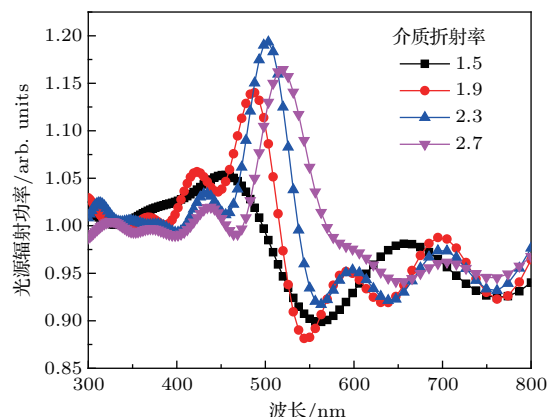


图 7 (网刊彩色) 具有不同介质折射率的发光二极管 SE 曲线

Fig. 7. (color online) SE curves of light-emitting diodes with different material refractive indices.

4 结 论

仿真计算了具有不同体形状参数的 Ag 纳米球、纳米椭球、纳米立方体与纳米三棱柱的 LSPR 特性, 以及将其引入发光器件后对光源辐射功率和器件出射光强度的影响. 分析发现, 随着纳米粒子体形状参数减小, 其形状尖锐程度增加, 使得尖端处集中的表面电荷数量随之增加, 粒子共振波长发生红移. 在将纳米粒子引入器件后, 介质膜层使纳米粒子的 LSPR 共振电场集中在膜层表面, 增强了 LSPR 电场与光源辐射电场的耦合, 增强了光源的辐射功率和器件的出射光强度. 对于不同形状的纳米粒子, 其表面与器件膜层表面的接触面积决定了耦合作用的强弱, 计算结果表明银纳米立方对发光器件的 LSPR 增强效果最明显. 我们研究了器件中不同膜层介质折射率对金属纳米粒子 LSPR 效应的影响, 结果表明, 高折射率的膜层介质有助于集中电场分布、增强耦合作用并改善器件性能.

参考文献

- [1] Muller C D, Reckefuss N, Rudati P S, *et al.* 2004 *Proc. SPIE Bellingham* **5214** 21
- [2] Schilinsky P, Waldauf C, Brabec C J 2006 *Adv. Funct. Mater.* **16** 1669
- [3] Crawford M H 2009 *IEEE J. Select. Topics Quantum Electron.* **15** 1028
- [4] Zhang Y N, Wang J F 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 097801 (in Chinese) [张雅男, 王俊峰 2015 物理学报 **64** 097801]
- [5] Yagi T, Satoh R, Yamada Y, Kang H, Miyao H, Sawa K 2012 *J. Soc. Inf. Display* **20** 526
- [6] Ji W Y, Zhang L T, Xie W F 2012 *Opt. Lett.* **37** 2019
- [7] Li C 2015 *M. S. Thesis* (Shanghai: East China Normal University)(in Chinese) [李朝 2015 硕士学位论文 (上海: 华东师范大学)]
- [8] Margueritat J, Gonzalo J, Afonso C N, Mlayah A, Murray D B, Saviot L 2006 *Nano Lett.* **6** 2037
- [9] Gao H W, Henzie J, Odom T W 2006 *Nano Lett.* **6** 2104
- [10] Liu F, Nunzi J M 2012 *Proc. SPIE Brussels* **8424** 84243E
- [11] Fujiki A, Uemura T, Zettsu N 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 043307
- [12] Xiao Y, Yang J P, Cheng P P, Zhu J J 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 013308
- [13] Xie W F, Xu K, Li Y, Wen X M, Zhang L T 2013 *Chin. J. Lumin.* **34** 535
- [14] Tanaka T, Totoki Y, Fujiki A, Zettsu N, Miyake Y 2011 *Appl. Phys. Exp.* **4** 032105
- [15] Ma W Y, Yang H, Liu J Y, Ni Z G, Tang D S, Yao J 2010 *Acta Opt. Sin.* **30** 2629
- [16] Lin Y, Liu X Q, Wang T, Chen C, Wu H, Liao L, Liu C 2013 *Nature Nanotech.* **24** 125705
- [17] Mock J J, Oldenburg S J, Smith D R 2002 *Nano Lett.* **2** 465
- [18] Huang P, Fu Y Q, Du J L, Zhuo C X, Luo X G 2009 *J. Light Scat.* **21** 157(in Chinese)[黄鹏, 付永启, 杜惊雷, 周崇喜, 罗先刚 2009 光散射学报 **21** 157]
- [19] Pang Z, Wan L Y, Huang J Q, Ouyang Y F 2014 *J. Light Scat.* **26** 307(in Chinese)[庞智, 万玲玉, 黄继钦, 欧阳义芳 2014 光散射学报 **26** 307]
- [20] Sherry L J, Chang S H, Schatz G C, Richard P, van Duynne R P, Wiley B J, Xia Y 2005 *Nano Lett.* **5** 2034
- [21] Benjamin J W, Sang H I, Li Z Y, Joeseeph M L, Andrew S, Xia Y N 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 15666
- [22] Jeffrey M M, Wang Y M, Leif J S, Richard P V D, Laurence D M, Stephen K G, George C S 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 2731
- [23] Moon S K, Yang J K 2014 *J. Opt. Soc. Korea* **18** 582
- [24] Tu X B, Wang S J 2006 *Chin. J. Geotech. Eng.* **26** 659(in Chinese)[涂新斌, 王思敬 2004 岩土工程学报 **26** 659]
- [25] Aizpurua J, Bryant G W, Richter L J, de Abajo F J G, Kelley B K, Mallouk T 2005 *Phys. Rev. B* **71** 235420

Numerical research of emission properties of localized surface plasmon resonance enhanced light-emitting diodes based on Ag@SiO₂ nanoparticles*

Jia Bo-Lun¹⁾ Deng Ling-Ling^{1)†} Chen Ruo-Xi¹⁾ Zhang Ya-Nan²⁾ Fang Xu-Min^{3)‡}

1) (School of Optoelectronic Engineering, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, China)

2) (School of Physics and Optoelectronic Engineering, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China)

3) (Science of Technology on Near-Surface Detection Laboratory, Wuxi 214035, China)

(Received 29 July 2017; revised manuscript received 31 August 2017)

Abstract

Metal nanoparticles have potential applications in the fields of optical sensing and optoelectronic devices, due to the localized surface plasmon resonance (LSPR) which enhances the spontaneous emission rate of nearby fluorescent molecules. The LSPR of metal nanoparticles is closely related to its material, shape, size and ambient medium, which affects the applications of nanoparticles in specific devices. In this paper, the LSPR effect of silver nanoparticles (SNPs) with different shapes of sphere, ellipsoid, cube, and triangular-prism, is investigated by using a three-dimensional finite difference time domain. The absorption and scattering spectra of the individual SNPs are first calculated. The resonance peaks are red shifted and enhanced with sharpness increasing from the nano-sphere to the nano-triangular-prism because the surface charges accumulate in the sharp corners. Then the effects of SNPs on the radiation power of the dipole source and light extraction efficiency of the light-emitting diodes (LEDs) are studied. The dipole radiation power decreases near the resonance wavelength due to the absorptions of SNPs, while increases after the resonance wavelength because of the coupling between the SNP LSPR and the dipole radiation. The calculated electric field distribution shows that the LSPR electric field of the SNPs concentrate near the surface of the dielectric film because of the interaction between the SNPs and the film. The concentrated electric field helps to improve the coupling between the LSPR and the dipole, which enhances the dipole radiation power in the LED. In the several kinds of SNPs, nano-cube SNP shows the most significant improvement on the dipole radiation power because of the strongest interaction with the dielectric film. In addition, the scattering effect of the SNP reduces the internal total reflection of light and improves the light extraction efficiency of the LED. Nano-ellipsoid SNP significantly enhances the light extraction because of its strongest scattering intensity. Further, the influence of the refractive index of the dielectric film on the dipole radiation power is studied. It is found that a higher refractive index of dielectric film helps to enhance the interaction between the SNPs and the film and improves the dipole radiation power. The optimized value of refractive index is acquired through detailed calculation.

Keywords: metal nanoparticle, localized surface plasmon resonance, light-emitting diode, emission power

PACS: 78.20.Bh, 78.40.Kc, 78.67.Bf

DOI: 10.7498/aps.66.237801

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61505086).

† Corresponding author. E-mail: dengll@njupt.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: fangxm57006@163.com