

周期性鱼形孔阵列金属微纳结构的增强光透射特性

易陈林 刘 珺 刘 辉 陈志勇 郭 玮 朱卫华 王新林

(南华大学电气工程学院, 湖南 衡阳 421001)

摘要 利用三维时域有限差分(3D-FDTD)方法,研究了具有周期性亚波长鱼形孔阵列金属膜的光学透射特性,探讨了单元尺寸和孔的形状对这种结构的基于透射的光学滤波特性的影响。结果显示鱼形孔阵列金属微结构具有较高的透射效率,并且具有较高的滤波品质因子。通过分析电场分布图,揭示了这种透射的两种不同物理机制:局域波导共振模式和表面等离子体共振模式。两种共振模式在鱼形孔区域的不同位置、不同时刻以不同形式出现。

关键词 薄膜;透射特性;局域波导共振;表面等离子体共振;鱼形孔结构

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP50.053101

Enhanced Optical Transmission through the Periodic Arrays of Fish-Shaped Metallic Nano Structure

Yi Chenlin Liu Jun Liu Hui Chen Zhiyong Guo Wei Zhu Weihua Wang Xinlin

(School of Electric Engineering, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China)

Abstract We numerically studied the enhancement of optical transmission through the periodic arrays of fish-shaped nano structure metallic arrays by using the three-dimensional finite-difference time-domain (3D-FDTD) method, and investigate the influence of lattice constant and hole shape on the optical filtering properties, which is based on transmission. Results show that fish-shaped metallic nano structure has the properties of high transmission efficiency and high filtering quality factor. It is revealed by analyzing the maps of electric-field distribution that optical transmission originates from two different physical mechanisms: localized waveguide resonance mode and surface plasmon resonance mode. Two resonance modes arise in different places in fish-shaped hole region at different time with different forms.

Key words thin films; transmission property; localized waveguide resonance; surface plasmon resonance; fish-shaped hole structure

OCIS codes 310.6628;310.6860;350.4238

1 引言

光透射增强现象自1998年由Ebbesen等^[1]在实验中发现以来,已引起国内外学者广泛关注,相关实验和理论结果已被大量报道^[2~8]。由此引发的对其物理机制的讨论一直是研究热点。被普遍接受的理论模型是Ctistis等^[2,3]提出的表面等离子体共振模型,他们认为是由于入射光与金属表面自由电子的电荷密度耦合形成的表面等离子体共振导致超强透射现象。目前比较成熟的理论模型有局域波导共振模型^[8]、复合衍射隐失波模型和准柱面波模型^[9]。因为新颖的纳米结构体系导致了许多的新现象,超强透射效应在诸多领域具有巨大的应用前景,所以研究各种结构和形状^[8,10,11]的光学透射特性具有很高价值。大量研究聚焦在对称形状孔的超强透射效应上,例如圆形、方形和狭缝等。在Koerkamp等^[4]研究了孔的形状对透射产生的强烈影响后,关于非对称形状孔阵列的超强透射的研究大量展开,例如C形孔^[10]与Y形孔^[12]。对所研究的大部

收稿日期: 2013-01-15; **收到修改稿日期**: 2013-02-24; **网络出版日期**: 2013-04-28

基金项目: 国家自然科学基金(11174119)资助课题。

作者简介: 易陈林(1986—),男,硕士研究生,主要从事激光与光电子技术及应用等方面的研究。

E-mail: yichenlin199@sina.cn

导师简介: 王新林(1970—),男,博士,教授,硕士生导师,主要从事高功率激光、超快激光与物质相互作用以及激光制备新型功能材料与器件等方面的研究。E-mail: wxl_ly000@yahoo.com.cn(通信联系人)

分孔来说,会存在一定的对称性,而对于完全不对称孔形的研究还很少。本文利用三维时域有限差分方法(3D-FDTD)模拟周期性非对称鱼形孔阵列的超强透射增强特性。因其孔形状为太极图(阴阳鱼图)的一半,所以我们称为鱼形图。通过研究结构参数对透射效率的影响,观察电场分布图,具体分析了表面等离子子共振和局域波导共振在亚波长周期性金属结构的超强透射中分别所起的作用。

2 模拟方法

周期性鱼形孔阵列的结构如图 1 所示,图 1(a)为金属膜阵列结构示意图,图中白色部分为空气,灰色部分为金(Au);图 1(b)为鱼形孔单元尺寸。为了方便比较周期变化对透射率的影响,引入参量 a ,单元尺寸周期 $P = a = 750$ nm,把鱼形孔的截面积设为与参考文献[13]中矩形孔截面积一样,大圆直径 $D = 0.5958 a$,圆尾“鱼头”端圆弧直径 $D_h = D/2$,尖尾“鱼尾”端圆弧直径 $D_t = D/2$,金膜厚 320 nm。

运用 3D-FDTD 求解光波传播过程中的电磁场,数值模拟的网格尺寸为 5 nm。金属膜置于空气中,光源为沿着 z 方向偏振,沿着 y 方向传播,中心波长为 1150 nm 的垂直入射平面波源, x 与 z 方向则是周期性边界条件,平行于两金属面的方向为吸收边界条件。金属色散模型采用修正 Drude 模型^[14]。在金属膜的 y 方向设置一个观察面,观察面距离金属膜表面 110 nm,使用下式计算归一化透射率^[8]:

$$T_{\text{norm}}(\lambda) = \frac{T(\lambda)}{S_{\text{hole}}/S_{\text{cell}}} = \frac{P_{\text{out}}(\lambda)S_{\text{cell}}}{P_{\text{in}}(\lambda)S_{\text{hole}}}, \quad (1)$$

式中 $P_{\text{in(out)}}$ 是有金属膜和无金属膜的观察面电磁场功率流密度, S_{hole} 是一个单元尺寸内孔在 $x-z$ 面上的截面积大小, S_{cell} 是一个单元尺寸在 $x-z$ 面上的截面积大小。透射峰的品质因子用 $Q = \lambda_0/\Delta\lambda$ 表示, λ_0 是共振峰的波长, $\Delta\lambda$ 是半峰全宽(FWHM)。

为了分析比较孔的形状对金属膜透射率的影响,对比研究了金属膜上所打孔的面积相等、周期 P 相等(即金的面积填充率一样)但形状不同的圆形与矩形孔阵列所对应的光透射特性。

3 结果与分析

Koerkamp 等^[4]论述了矩形孔和圆形孔对透射增强的影响,认为孔的形状对透射增强有较大影响。Li 等^[13]通过对单层金膜和双层金膜的 FDTD 数值模拟,得到了很好的滤波效果。

图 2 为经过 FDTD 模拟得到的矩形孔、圆孔和鱼形孔阵列的归一化透射谱。圆形孔在 794 nm 和 828 nm 处存在两处峰值,归一化峰值分别为 7.71 和 9.55,计算结果与 Koerkamp 等^[4]的结论一致;矩形孔在 962 nm 和 1500 nm 处存在两处峰值,归一化峰值分别为 0.79 和 0.87,矩阵孔的归一化透射率和 Li 等^[13]的单层金膜的归一化透射率共振峰位置相同。调节入射光偏振及矩形孔长宽比,可以使得矩形孔阵列有类似于圆形孔阵列的归一化峰值。鱼形孔在 780 nm 处存在一处峰值,归一化峰值为 24.97。共振峰的半峰全宽为 60.09 nm,品质因子达到 11.12。由此可见,非对称的鱼形孔阵列相比于对称结构的矩形与圆形孔阵列有更高的透射峰值,且品质因子更高,滤波特性更好。在图 1(b)所示的结构参数条件下,周期性矩形孔、圆孔和鱼形孔阵列不能达到最佳的共振效果。

模拟结果还显示,调节鱼形孔阵列的周期尺寸,可以得到更高的透射峰值与品质因子,如图 3 所示,当调节单元尺寸 P 的大小至 $P = 1.3 a$ 时,鱼形孔归一化透射谱在 715 nm 和 1013 nm 存在 2 处透射峰,第一个尤其值得关注,峰值达到 53,另外一个峰值为 7.61,第一个共振峰的半峰全宽为 16 nm,品质因子达到 44。

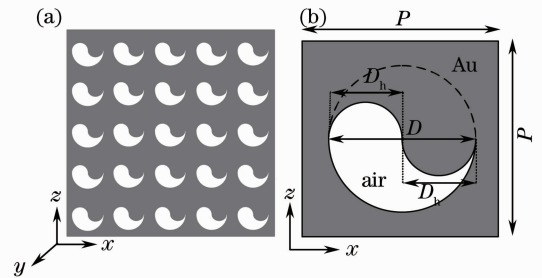


图 1 (a) 具有鱼形孔阵列周期性结构的金膜二维图形; (b) 一个单元尺寸的金膜在 $x-z$ 平面的截面图
Fig. 1 (a) Two-dimensional diagram of fish-shaped periodic Au film hole array; (b) cross section diagram of a Au film unit cell at $x-z$ plane

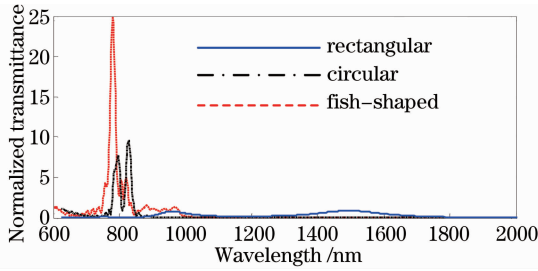


图2 矩形孔、圆形孔和鱼形孔金膜阵列的归一化透射谱

Fig. 2 Normalized transmission spectra with rectangular, circular and fish-shaped Au film hole arrays

分析比较了三种孔内区域 $x-z$ 截面的电场强度分布,如图4所示,图4(a)~(c)分别代表矩形、圆形和鱼形孔在 19230 as 时刻的切向电场分量 E_z 在金膜中间处的电场分布图。由图4(a)可知这种狭缝宽度只有 125 nm 的电荷密度耦合很强,但是因为光源沿着 z 方向偏振,导致其透射率不是很高。由图4(b)可知 E_z 与 z 轴有一定的夹角。图4(c)显示在鱼形图中 E_z 分别指向“鱼尾”和“鱼头”。“鱼尾”沿着 x 轴方向越来越狭窄,在鱼形孔最末端出现了矩形孔的强电荷密度耦合现象。

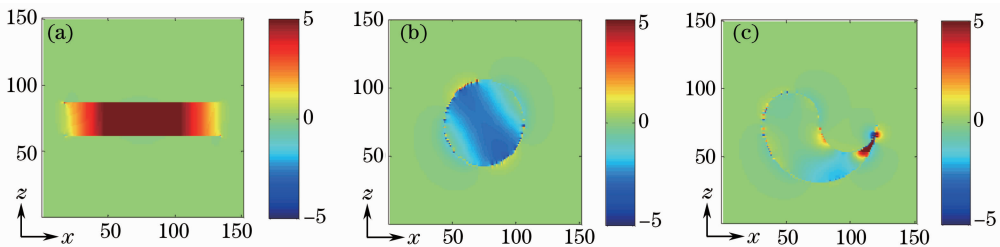
图4 矩形孔、圆形孔和鱼形孔阵列在 19230 as 时刻的 $x-z$ 平面电场分量 E_z 分布图

Fig. 4 Distribution of the electric field component E_z at the $x-z$ cross section evaluated with (a) rectangular, (b) circular and (c) fish-shaped Au film hole arrays at 19230 as

如此强烈的透射说明不只照射在孔上的光产生透射,部分照射在金属膜表面的光也经过转换发生了透射,并在鱼尾处发生了很强的电荷密度耦合。鱼形孔的归一化透射谱基本只有一个主峰值,而且透射峰窄,峰值很大,这说明鱼形孔表现出更好的滤波效果。这对设计性能良好的滤波器具有积极的指导意义。另一个现象是图2与图3共振峰的位置都在红光光谱范围。

为了进一步探究鱼形孔阵列在可见光范围内的透射增强作用,由于可见光波的波长比红外光波的波长短,提高了 FDTD 数值模拟的网格精度,网格大小为 3 nm。如图5所示,当设定计算模型中的 $P = 600$ nm, $D = 348$ nm。鱼形孔阵列归一化透射率谱在 660 nm 存在透射峰,归一化峰值为 26.2。和红外波段的滤波相比,可见光光谱内的透射峰的副峰比较大。当周期和孔面积缩小的时候,峰值会出现蓝移。

鱼形孔阵列具有高的归一化透射率,在图3中所设定的结构单元尺寸条件下,其归一化透射率为 4.37,在共振波长 715 nm 附近区域,其电磁场功率流密度值会增强 4 倍多。根据 Ruan 等^[8]关于金属微纳结构阵列透射共振增强的结论,我们认为鱼形孔阵列中有两种透射共振增强机制。Ruan 等^[8]得出结论:较长波长的透射峰归结于局域波导共振,共振峰受孔的大小和形状影响较大;较短波长的透射峰归因于表面等离子子共振,共振峰受单元尺寸的周期影响较大。

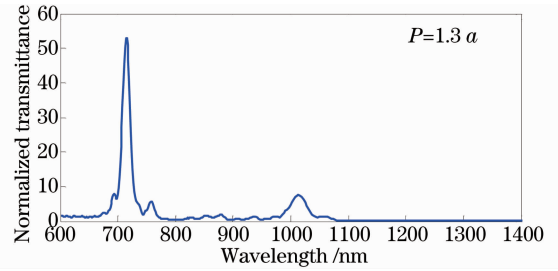


图3 鱼形孔金膜的归一化透射谱

Fig. 3 Normalized transmission spectra with fish-shaped of Au film hole array

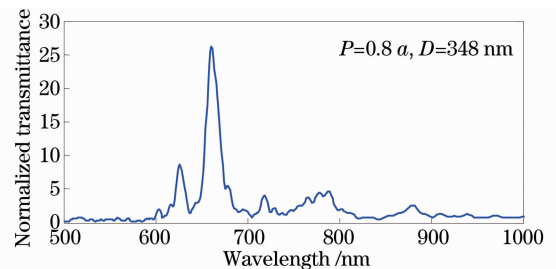


图5 鱼形孔金膜阵列的归一化透射谱

Fig. 5 Normalized transmission spectra with fish-shaped Au film hole array

为了进一步探究鱼形孔超强透射的物理机制,计算了 18938 as 时刻的瞬时电场分布图(共振波长为 780 nm,单元尺寸 $P=1.0a$,横纵坐标为单元尺寸的网格数),结果如图 6 所示。图 6(a)和(b)表示金属孔结构在 $y-z$ 平面上,鱼形孔“鱼头(圆尾)”的垂直电场分量 $E_y(0,y,z)$ 和切向电场分量 $E_z(0,y,z)$;图 6(c)和(d)表示金属孔结构在 $y-z$ 平面上,鱼形孔“鱼尾(尖尾)”的垂直电场分量 $E_y(0,y,z)$ 和切向电场分量 $E_z(0,y,z)$;图 6(e)为入光处 $x-z$ 切向电场分量 $E_z(0,y,z)$ 。根据边界条件 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{E} = \delta/\epsilon_0$,其中 δ 为表面电荷密度,在垂直方向有 $\mathbf{n} = n\mathbf{z}$,可以通过探测垂直电场分量 E_y 的大小来确定表面电荷的大小(正负电荷密度标记为 + 和 -)。由图 6(a)可以看出电荷密度趋向于集中在孔两端的金属边缘。电性相反的表面电荷形成周期性分布,并在孔中形成了共振的驻波(标记为:“→”和“←”),电荷密度在金属两表面大小不一样,这与“鱼尾”在 $x-z$ 平面的弧度有关,并导致了图 6(b)中的出光面形成的驻波比较小。局域电荷偶极振荡也可以观察切向电场分量 E_z 得出, E_z 主要集中在孔内,并且强度向孔外沿着一 y 和 y 方向衰减[如图 6(b)所示]。这种共振模可以被解释为局域波导共振^[13],即使金属薄膜非常薄,局域波导共振依然存在,这可以用法布里-珀罗(FP)效应解释^[8,15]。由图 6(c)~(e)可知垂直电场分量 E_y 在入射面周期处与出光面孔上端的金属边缘有很强的电场存在,这与鱼形孔的细“尖尾”有很大关系。

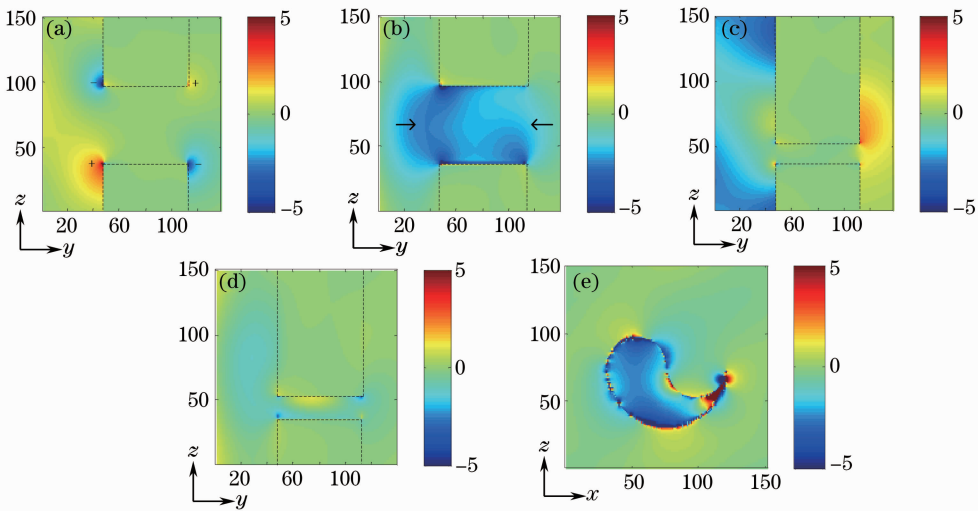


图 6 在 18938 as 时刻的 $y-z$ 、 $x-z$ 平面电场分布图

Fig. 6 Distribution of the electric-field components at the $y-z$ and $x-z$ cross sections evaluated at 18938 as

图 7 为 25484 as 时的瞬时电场分布图,除时间参数不一样,其余参数均和图 6 一样。从图 7(a)和(c)可以看到:和图 6(a)一样,表面电荷呈周期性分布,这些电荷集中在鱼形孔两端的金属边缘处,只是在入光面和出光面的鱼形孔两端电荷电性相同。表面电荷的周期性分布与局域电荷偶极振荡一致,这些偶极子受到两种相反电性的表面电荷的相互作用,在鱼形孔中沿 z 方向形成了一个驻波(标记为“→”和“←”),如图 7(b)、(d)所示。在图 7(b)、(d)中, E_z 在入光面孔区域为正,在出光面的孔区域为负。也就是说 E_z 分量是驻波,切向电场 E_z 被限制在孔内区域。这表明此时的共振模是由表面结构的周期性形成的,对单元结构周期的修改会引起共振峰的移动。图 7 中(a)、(b)与(c)、(d)比较也可以看出“鱼头”的表面等离子波子共振比“鱼尾”弱,且上下表面电荷密度大小不一样。由于“鱼尾”处的金属狭缝的宽度很窄,两弯曲曲面的表面等离子波子会发生耦合,并且在通道内以波导模形式向前传输。由图 7(e)能清楚的看见“鱼尾”处的电荷密度耦合比“鱼头”处强。复传播常数 β 可由下式描述^[16]:

$$\tanh(\sqrt{\beta^2 - k_0^2 \epsilon_d} w/2) = \frac{-\epsilon_d \sqrt{\beta^2 - k_0^2 \epsilon_m}}{\epsilon_m \sqrt{\beta^2 - k_0^2 \epsilon_d}}, \quad (2)$$

式中 k_0 为光在自由空间传播的波数, ϵ_d 和 ϵ_m 为狭缝中电介质和金属的相对介电常数, w 为狭缝宽度。从(2)式得出:复传播常数的实部和虚部随着狭缝宽度的减小而增大,揭示表面等离子激元在“鱼尾”处存在很强的电荷密度耦合。当“鱼尾”处狭缝宽度非常小的时候,复传播常数增加得非常快^[17]。

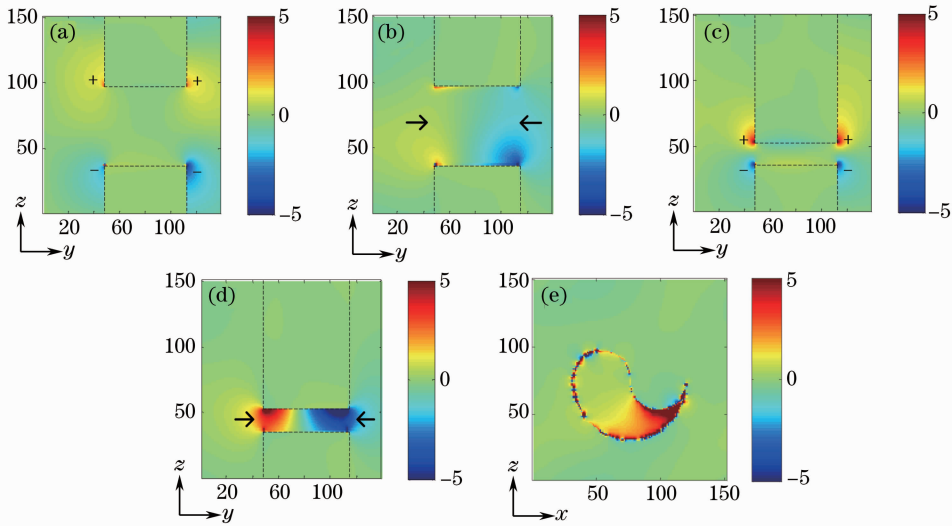


图 7 在 25484 as 时刻的 $y-z$ 、 $x-z$ 平面电场分布图

Fig. 7 Distribution of the electric-field components at the $y-z$ and $x-z$ cross sections evaluated at 25484 as

通过对计算过程可视化场的动态观察,光波与周期性金属鱼形结构相互作用时,会在“鱼尾”区域内发生相对于“鱼头”区域内更强烈的电荷密度耦合,随后在“鱼头”区域内会形成局域波导共振,然后再转化为表面等离子波子共振,经过一段时间,又会转化为局域波导共振,如此循环往复,只是每一次的转化都会导致其强度的减弱。与“鱼头”区域内相比,在“鱼尾”区域内以表面等离子波子共振为表现形式。

4 结 论

运用 3D-FDTD 方法,研究了具有周期性亚波长鱼形孔结构的金属膜的光学透射特性。通过动态观察整个可视化场,超强透射的主要原因可以归结为局域波导共振和表面等离子波子共振,并且在鱼形孔中存在两种共振机制的相互转换。该结构在可见光和红外光范围良好的滤波特性,在微纳光学滤波器中有潜在的应用前景。

参 考 文 献

- 1 T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi *et al.*. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays[J]. *Nature*, 1998, **391**(6668): 667~669
- 2 G. Ctistis, P. Patoka, X. Wang *et al.*. Optical transmission through hexagonal arrays of subwavelength holes in thin metal films[J]. *Nano Lett.*, 2007, **7**(9): 2926~2930
- 3 W. Barnes, W. Murray, J. Dintinger *et al.*. Surface plasmon polaritons and their role in the enhanced transmission of light through periodic arrays of subwavelength holes in a metal film[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, **92**(10): 107401
- 4 K. Koerkamp, S. Enoch, F. Segerink *et al.*. Strong influence of hole shape on extraordinary transmission through periodic arrays of subwavelength holes[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, **92**(18): 183901
- 5 X. Shou, A. Agrawal, A. Nahata. Role of metal film thickness on the enhanced transmission properties of a periodic array of subwavelength apertures[J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(24): 9834~9840
- 6 A. Degiron, H. Lezec, W. Barnes *et al.*. Effects of hole depth on enhanced light transmission through subwavelength hole arrays[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2002, **81**(23): 4327~4329
- 7 Suxia Xie, Hongjian Li, Haiqing Xu *et al.*. The extraordinary optical transmission through double-layer gold slit arrays[J]. *Opt. Commun.*, 2010, **283**(20): 4017~4024
- 8 Zhichao Ruan, Min Qiu. Enhanced transmission through periodic arrays of subwavelength holes: the role of localized waveguide resonances[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, **96**(23): 233901~233904
- 9 Frerik van Beijnum, Chris Retif, Chris B. Smiet *et al.*. Quasi-cylindrical wave contribution in experiments on extraordinary optical transmission[J]. *Nature*, 2012, **492**(7429): 411~414
- 10 J. W. Lee, M. A. Seo, D. S. Kim *et al.*. Polarization dependent transmission through asymmetric C-shaped holes[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, **94**(8): 081102
- 11 Zhimin Liu, Hongjian Li, Suxia Xie *et al.*. Tunable phase resonances in a compound metallic grating with perpendicular bumps and cuts[J]. *Opt. Express*, 2011, **19**(5): 4217~4222

- 12 Hongtao Gao, Haofei Shi, Changtao Wang *et al.*. Surface plasmon polariton propagation and combination in Y-shaped metallic channels[J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(26): 10795~10800
- 13 Hongjian Li, Suxia Xie, Renlong Zhou *et al.*. Two different transmission tunnels of light through double-layer gold nanohole arrays[J]. *J. Phys. : Condens. Matter*, 2008, **20**(41): 415223
- 14 M. Besbes, J. P. Hugonin, P. Lalanne *et al.*. Numerical analysis of a slit-groove diffraction problem[J]. *J. European Optical Society Rapid Publications*, 2007, **2**: 07022
- 15 X. Jiao, P. Wang, L. Tang *et al.*. Fabry-Perot-like phenomenon in the surface plasmons resonant transmission of metallic gratings with very narrow slits[J]. *Appl. Phys. B*, 2005, **80**(3): 301~305
- 16 Reuven Gordon, Alexandre G. Brolo. Increased cut-off wavelength for a subwavelength hole in a real metal[J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(6): 1933~1938
- 17 Haofei Shi, Changtao Wang, Chunlei Du *et al.*. Beam manipulating by metallic nano-slits with variant widths[J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(18): 6815~6820