

# 金属纳米孔阵列透射增强的数值研究

杨文旭<sup>1</sup> 宋鸿飞<sup>1\*</sup> 雷建国<sup>2</sup>

<sup>1</sup>长春理工大学光电工程学院, 吉林 长春 130022; <sup>2</sup>长春理工大学理学院, 吉林 长春 130022

**摘要** 纳米孔阵列的透射增强现象在许多领域都具有重要的应用和前景。采用时域有限差分(FDTD)方法对金属薄膜纳米孔阵列的透射增强特性进行了模拟研究。针对圆孔半径、薄膜厚度、阵列周期以及不同材料等因素进行了分析,讨论了不同参数条件下透射增强谱线的变化规律。研究表明大的圆孔半径和薄的薄膜厚度有利于提高透射性能,另外孔阵列周期较大时不利于增强透射。探讨了不同小孔形状对透射增强的影响,并采用矩形孔阵列进行了对比。最后通过改变薄膜材料计算了相应的透射性能。

**关键词** 薄膜;透射增强;表面等离子体;纳米孔阵列;时域有限差分

**中图分类号** O484.4 **文献标识码** A **doi:** 10.3788/LOP51.033101

## Numerical Study on Transmission Enhancement of Metallic Nanohole Array

Yang Wenxu<sup>1</sup> Song Hongfei<sup>1</sup> Lei Jianguo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*School of Optoelectronic Engineering, Changchun University of Science and Technology, Changchun, Jilin 130022, China*

<sup>2</sup>*School of Science, Changchun University of Science and Technology, Changchun, Jilin 130022, China*

**Abstract** Transmission enhancement of nanohole array has very important applications and prospects in many fields. Numerical simulation on transmission enhancement of metallic nanohole array is performed with finite-difference time-domain (FDTD) method. The factors such as round hole radius, film thickness, array cycle, and different materials are analyzed, and changing trend of transmission enhancement spectrum is discussed under the conditions of different parameters. Studies show that large round hole radius and thin film are helpful to the improvement of transmission enhancement, and larger hole array cycle is not conducive to transmission enhancement. The effect of different shape of nanohole on transmission enhancement is discussed, and rectangular hole array is used for comparison. Finally by changing thin film material the corresponding transmission performance is calculated.

**Key words** thin films; transmission enhancement; surface plasmons; nanohole array; finite-difference time-domain  
**OCIS codes** 310.6628; 310.6860; 240.6680

## 1 引言

随着纳米光刻及相关技术的迅速发展,关于金属薄膜中纳米孔阵列的透射增强特性受到普遍关注<sup>[1-3]</sup>,研究发现表面等离子体激元在其中起到了重要作用<sup>[4]</sup>。表面等离子体激元是由光和金属表面自由电子的相互作用引起的一种电磁波模式<sup>[5]</sup>,它局限于金属与介质界面附近,能形成局域近场增强,在众多领域均有着重要应用<sup>[6]</sup>。早在1944年,Bethe<sup>[7]</sup>针对无限薄的圆孔的光透射情况进行了理论分析,预测透射效率 $\eta \propto (r/\lambda_0)^4$ ,其中 $\lambda_0$ 为入射波长,说明当孔的尺寸小于波长时,光的透射效率很低。而如果将金属薄膜纳米小孔组成阵列结构,由于表面等离子体激元的作用,可以产生更大的透射效率。1998年,Ebbesen等<sup>[8]</sup>发现

收稿日期: 2013-11-05; 收到修改稿日期: 2013-12-10; 网络出版日期: 2014-02-20

基金项目: 国家自然科学基金(11075026)

作者简介: 杨文旭(1989—),男,本科生,主要从事测控技术与仪器专业方面的研究。E-mail: yangwxu@163.com

\*通信联系人。E-mail: songhongfei\_cust@163.com

本文电子版彩色效果请详见中国光学期刊网 www.opticsjournal.net

光通过二维圆孔阵列时,其零阶透射谱出现多个异常的透射增强峰,在这些对应波长处,透射效率超过1,分析认为这种透射增强现象与表面等离子体激元有关。

通过不断研究发现,在特定入射波长处,在小孔的边缘处能激发表面等离子体激元模式,由于入射光与金属表面自由电子的电荷密度波发生共振耦合作用,引起边缘处的电场局域增强,能极大地提高光的透射效率,这种特性在纳米光子学、光电探测、光学滤波器<sup>[9]</sup>、新型光源<sup>[10]</sup>、传感和生物领域都有着十分重要的潜在应用,引发研究热潮<sup>[11-13]</sup>。当入射光在上表面激发产生表面等离子体时,上下表面由于倏逝波的原因可以产生增强透射,即入射光在上表面被纳米小孔散射后产生倏逝波,倏逝波通过隧穿效应将部分能量转移到下表面,而下表面纳米小孔边缘处的局域表面等离子体则可振荡形成较高的电磁场,从而产生透射增强效应<sup>[14]</sup>。本文采用时域有限差分(FDTD)方法对金属薄膜纳米孔阵列的透射增强特性进行模拟研究,分析了圆孔半径、薄膜厚度、阵列周期及不同材料对透射增强的影响。

## 2 模型设置

为了方便分析小孔的透射增强特性,采用金属材料薄膜纳米圆孔阵列模型,利用 FDTD Solutions 软件来进行模拟分析。圆孔阵列的结构模型如图 1 所示。令金薄膜厚度为  $h = 100 \text{ nm}$ , 单个圆孔半径  $r = 100 \text{ nm}$ , 圆孔阵列周期选取  $T = 400 \text{ nm}$ , 圆孔为空心, 衬底为玻璃材料, 光源入射方向为  $z$  方向, 竖直向上入射, 而且偏振方向(图中蓝色)设为沿  $x$  轴方向, 平面波光源波长为  $\lambda = 400 \sim 900 \text{ nm}$ 。由于圆孔的对称性, 所以若要分析偏振光源的影响因素则还需考虑其他的小孔结构。图 1 中只显示了 9 个纳米圆孔, 在软件模拟设置过程中, 边界条件选取  $x$ 、 $y$  方向为周期性边界条件,  $z$  方向设为完美匹配层(PML)边界条件。FDTD 区域设为  $400 \text{ nm} \times 400 \text{ nm} \times 600 \text{ nm}$  大小, 以满足金属薄膜中的圆孔阵列结构。在模拟过程中, 网格精度选为  $5 \text{ nm} \times 5 \text{ nm} \times 5 \text{ nm}$ , 以满足计算精度和提高运算速度。

孔阵列的透射率定义为

$$T = \frac{P_{\text{out}}}{P_{\text{in}}} = \left| \frac{E_{\text{tran}}}{E_{\text{in}}} \right|^2, \quad (1)$$

式中  $P_{\text{in}}$  和  $P_{\text{out}}$  分别为入射光强度和透射光强度。

当金属的介电常数与频率相关时, 金属表现出色散特性。本文模拟过程中采用的是修正的 Drude 模型:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}, \quad (2)$$

式中  $\omega_p$  为等离子体频率,  $\gamma$  为电子的碰撞频率,  $\varepsilon_{\infty}$  为频率无限大时金属的介电常数。

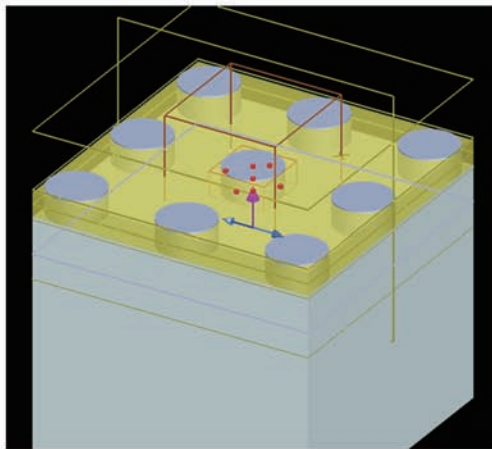


图 1 圆孔阵列的结构模型, 金薄膜厚度为 100nm, 衬底材料为玻璃

Fig.1 Structure model of circular hole array. The gold film thickness is 100nm, and substrate is glass

## 3 模拟结果及分析

一般认为影响薄膜纳米孔阵透射增强特性的因素有孔径大小<sup>[15]</sup>、形状<sup>[16-17]</sup>、阵列周期、薄膜厚度、薄膜材

料以及金属薄膜相邻的电介质等<sup>[18]</sup>。从以下几个方面对该问题展开模拟分析。

### 3.1 圆孔半径的影响

假设薄膜厚度和孔阵周期不变,改变小孔的半径来分析孔径尺寸对透射增强的影响,进一步分析透射谱峰值波长的变化情况。因此选取薄膜厚度为  $h = 100 \text{ nm}$ , 孔阵列周期为  $T = 400 \text{ nm}$ , 圆孔半径变化范围为  $60 \sim 140 \text{ nm}$ 。通过模拟分析,得到了  $r = 100 \text{ nm}$  时的反射和透射谱,如图2所示。图中红线表示  $100 \text{ nm}$  半径圆孔阵列时的透射率,可知在波长为  $700 \text{ nm}$  附近有比较强的透射峰,最大透射率约为  $0.54$ ,除以此时的圆孔和孔阵周期面积的比值,即可得到此波长附近透射效率达到了  $2.76$ 。

随着圆孔半径的变化,得到了如图3所示的透射率(左坐标轴)以及透射效率谱线(右坐标轴),其中实线代表透射率,虚线代表归一化后的透射效率。可以看出,在共振波长  $640 \text{ nm}$  附近,透射率接近于零,而且主透射峰值都随着小孔半径增加而增加,当  $r = 140 \text{ nm}$  时达到最大值,且最强透射峰的对应波长向长波长方向移动,表现出红移特征。而通过右轴坐标系的透射效率曲线来看,随着小孔半径的增加,透射效率在  $r = 100 \text{ nm}$  达到最大值,当半径继续增加时透射效率反而降低。对应于不同的半径尺寸,入射波长大于  $900 \text{ nm}$  之后,透射性能逐渐减弱,因为随着波长的继续增加,相对于现在的小孔尺寸而言,入射光与小孔耦合产生表面等离子体的效率逐渐减弱,所以透射增强效果也越来越差。

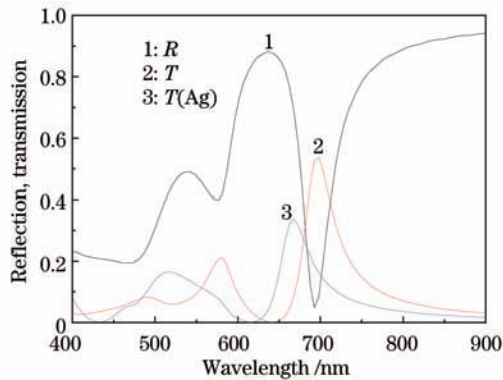


图2 半径为  $100 \text{ nm}$  时圆孔的反射和透射率

Fig.2 Reflection and transmission of circular hole as the hole radius is  $100 \text{ nm}$

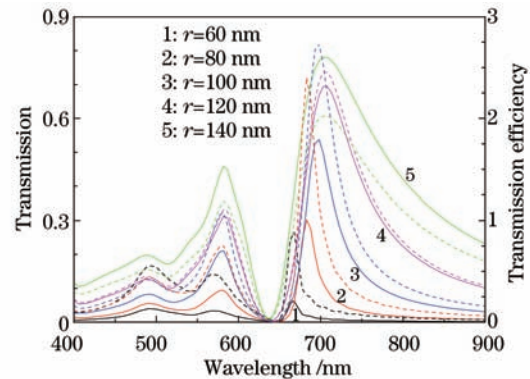


图3 圆孔半径变化时的透射率(实线)和透射效率(虚线)

Fig.3 Transmission (solid curves) and transmission efficiency (dashed curves) as radius is changed

为进一步分析圆孔上下表面以及内部的光场分布,得到了如图4所示的电场强度分布图。令入射场强度归一化为  $1$ , 图中 Color bar 最大值设置成了  $50$ , 表示的是电场强度  $E^2$  相对于入射电场强度  $E_0^2$  的比值, 图中薄膜下表面红色区域表示的是局域电场增强  $50$  倍以上的空间分布位置, 中间位置  $200 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$  区域即为半径为  $100 \text{ nm}$  的空心圆孔。图4所示电场强度分布位于  $xz$  平面,  $y = 0$  处, 入射光由  $-z$  向  $z$  方向入射, 波长范围  $\lambda = 400 \sim 900 \text{ nm}$ , 偏振方向沿  $x$  轴。从图中可以看出, 在薄膜下表面产生了比较强的局域共振电

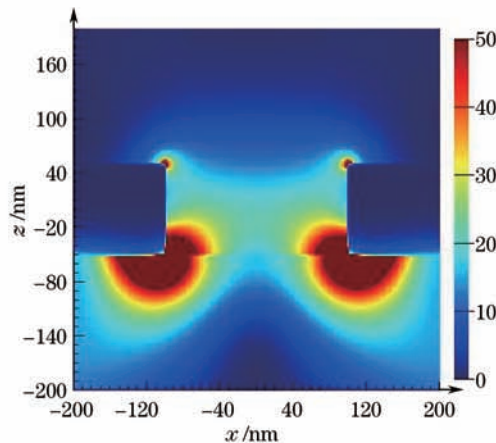


图4  $xz$  平面内 ( $y=0$  处) 空心圆孔附近的电场分布图, 光源方向沿  $z$  轴

Fig.4 Distribution of electric field in  $xz$  plane (at  $y=0$ ) near the circular hole. The light source is along the  $z$  axis

场增强,通过纳米圆孔的能量输运,在薄膜的上表面产生了透射增强的电场分布。在能量分布特点上,上表面仅在圆孔边缘处电场强度相对较大,而且由于入射光源的偏振特性,电场分布具有左右对称性。再结合图2可知,在一般情况下反射较强,但是在共振波长附近,透射率得到大大的增强。

### 3.2 薄膜厚度的影响

为分析薄膜厚度对透射增强效应的影响,将金属薄膜的厚度,即空心圆孔的高度范围设置成  $h = 40 \sim 160 \text{ nm}$ ,得到如图5所示的模拟结果,圆孔半径和阵列周期和初始模型设置一致。从图中可以看出,薄的薄膜厚度的透射率更高,随着厚度  $h$  的增加,透射率单调快速下降,而且最大透射峰值对应波长发生蓝移现象。随着薄膜厚度的减小,倏逝波能将更多的能量转移到薄膜的上表面,耦合效率更高。入射光的透射强度也会随着金属膜的厚度增加而快速衰减,而且透射峰的半峰全宽也在快速减小。当  $h = 40 \text{ nm}$  时,可以看到黑线的主透射峰值达到了0.76左右,而且在  $450 \sim 600 \text{ nm}$  波长范围内透射效果也不错。当然,现在讨论的圆孔是空心状态,如果往圆孔中填充某种介质,也会对透光性能产生较大影响<sup>[19]</sup>。

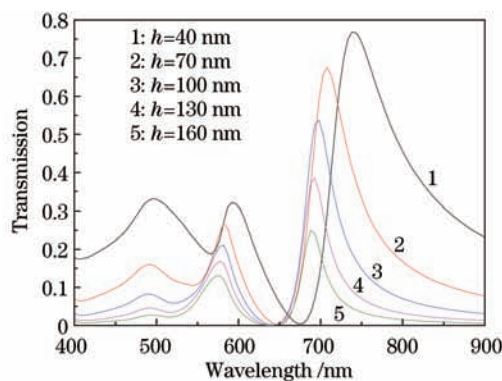


图5 薄膜厚度变化时的透射率曲线

Fig.5 Transmission curves for different film thicknesses

### 3.3 圆孔阵列周期的影响

为获得比较高的增强透射,需要将金属薄膜中的纳米小孔分布在适当位置,孔阵列的周期也会对结果造成很大影响。当其他参数不变时,模拟结果如图6所示。此时保持圆孔半径和薄膜厚度都为  $100 \text{ nm}$ ,仅改变孔阵的周期  $T$ 。图中的黑线为  $T = 300 \text{ nm}$  时的透射谱线,此时虽然最大透射率与  $T = 400 \text{ nm}$  时相当,但是黑线的谱线宽度要好得多,能让更多的入射光能量通过小孔透射。当  $T = 500 \text{ nm}$  时主透射峰更加向长波方向移动,峰值和峰宽同时快速减小,这时的透射性能明显减弱。当  $T = 600 \text{ nm}$  时,最大透射峰值小于0.1,已无明显的主透射峰,在整个入射光波长范围内透射增强效果不佳。可以看出,随着  $T$  的增加,圆孔之间的间距逐渐加大,各孔之间表面等离子体耦合效应逐渐减弱,直至相互影响可以忽略。随着薄膜下表面光场能量逐渐减弱,输运到上表面的能量也必然衰减,所以透射增强逐渐表现出单孔透射的性质。

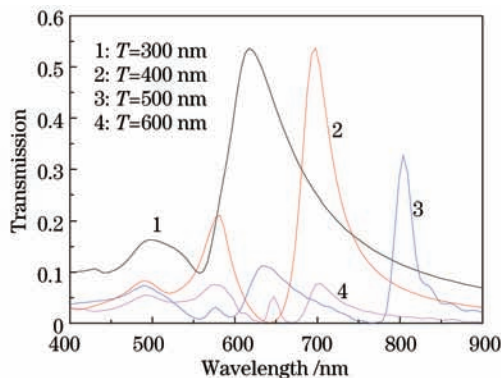


图6 圆孔阵列周期变化时的透射率曲线

Fig.6 Transmission curves for different circular array cycles

### 3.4 小孔形状的影响

在以上模拟分析的基础上,继续讨论其他小孔形状对孔阵列透射增强的影响。由于圆孔的圆对称性,

为讨论方便,我们选取矩形孔来加以分析。分别选取边长为  $160\text{ nm}\times 250\text{ nm}$ 、 $200\text{ nm}\times 200\text{ nm}$  和  $250\text{ nm}\times 160\text{ nm}$  的矩形孔阵,周期还是设定为  $400\text{ nm}$ ,薄膜厚度为  $100\text{ nm}$ ,光源入射和偏振方向不变。以上三种边长尺寸的面积相等,相当于尽量减弱了此时孔径尺寸和周期因素带来的影响,有利于讨论小孔形状对透射率的影响。模拟结果如图7所示,图中黑线表示矩形长边长沿  $y$  轴方向,短边长沿  $x$  轴,此时的透射峰值最大,峰宽也最大,透射增强效果最好,主透射峰峰值超过  $0.8$ 。而蓝线代表矩形长边长沿  $x$  轴方向,透射增强效果最差。因为对黑线而言,长边长沿  $y$  轴方向,而入射光偏振方向与前面讨论一致,导致沿  $x$  方向偏振的入射光与沿  $y$  方向的矩形长边长能产生更高的耦合效率。相对而言,在薄膜的矩形孔长边长处有更多的电子振荡来形成更强的场分布,所以导致透射增强效果更佳。类似的分析还可以针对椭圆形小孔来进行。

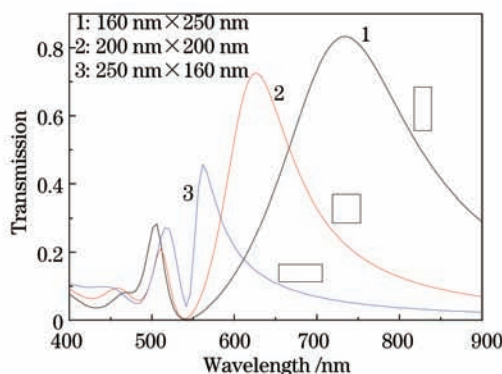


图7 不同形状矩形孔阵列的透射率曲线

Fig.7 Transmission curves for rectangular nanohole arrays with different shapes

最后对薄膜材料的影响进行了简单的分析。由于前面的模拟都是在 Au 薄膜的基础上展开讨论的,所以最后用 Ag 材料薄膜来进行对比,其他参数不变。模拟结果见图2中的蓝线。与代表 Au 材料的红线相比,在其他参数不变的情况下,Ag 的透射增强效果稍差,并且共振波长向短波长移动。

## 4 结 论

采用 FDTD 方法,对金属纳米孔阵列的透射增强效应进行了数值研究,对影响透射性能的几个影响因素分别进行了讨论,对圆孔尺寸、薄膜厚度、阵列周期、小孔形状的模拟结果进行了分析。在阵列周期不变的情况下,增强透射随圆孔半径增加而增加,主透射峰对应波长红移,峰宽变大;金属薄膜厚度小的透射增强效果好;圆孔阵列周期小时各孔之间耦合效率高,透射效果好;小孔形状对透射增强的影响也很显著。

## 参 考 文 献

- 1 Ye Yonghong, Wang Zhibing, Yurong Cao. Enhanced transmission through metal films perforated with circular and cross-dipole apertures [J]. Appl Phys Lett, 2007, 91(25): 251105.
- 2 Huajun Zhao, Dairong Yuan. Enhanced optical transmission through a nanoslit by coupling light between periodic strips and metal film [J]. Chin Opt Lett, 2010, 8(12): 1117-1119.
- 3 Wang Ning, Zhu Yong, Wei Wei, *et al.*. Characteristics of the photovoltaic device with nanohole array antireflection coating layer [J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(3): 038801.  
王 宁, 朱 永, 韦 玮, 等. 基于纳米孔阵列增透膜的光伏器件特性分析及实验研究[J]. 物理学报, 2012, 61(3): 038801.
- 4 L Martín- Moreno, F J García- Vidal, H J Lezec, *et al.*. Theory of extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays [J]. Phys Rev Lett, 2001, 86(6): 1114-1117.
- 5 Stefan A Maier. Plasmonics: Fundamentals and Applications [M]. Berlin: Springer, 2007.
- 6 Junxi Zhang, Lide Zhang, Wei Xu. Surface plasmon polaritons: physics and applications [J]. J Phys D: Appl Phys, 2012, 45(11): 113001
- 7 H A Bethe. Theory of diffraction by small holes [J]. Phys Rev, 1944, 66(7-8): 163-182.
- 8 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.
- 9 Yi Chenlin, Liu Jun, Liu Hui, *et al.*. Enhanced optical transmission through the periodic arrays of fish-shaped metallic

- nano structure[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013, 50(5): 053101.  
易陈林, 刘 珺, 刘 辉, 等. 周期性鱼形孔阵列金属微纳结构的增强光透射特性[J]. *激光与光电子学进展*, 2013, 50(5): 053101.
- 10 M W Tsai, T H Chuang, C Y Meng, *et al.*. High performance midinfrared narrow-band plasmonic thermal emitter[J]. *Appl Phys Lett*, 2006, 89(17): 173116.
- 11 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.
- 12 C Genet, T W Ebbesen. Light in tiny holes [J]. *Nature*, 2007, 445(7123): 39-46.
- 13 Xin Qianqian, Ju Li, Rong Ruifen, *et al.*. Simulation model of optical transmission of sub-wavelength holes on metal films [J]. *J Fudan University (Natural Science)*, 2010, 49(6): 757-763.  
辛骞骞, 居 臻, 戎瑞芬, 等. 金属亚波长小孔的光传输特性仿真模型[J]. *复旦学报(自然科学版)*, 2010, 49(6): 757-763.
- 14 Xiao Gongli, Yao Xiang, Ji Xinming, *et al.*. Progresses on extraordinary transmission characteristics of two-dimensional metallic subwavelength hole arrays [J]. *Semiconductor Optoelectronics*, 2009, 30(2): 161-167.  
肖功利, 姚 翔, 纪新明, 等. 二维金属亚波长孔阵列的强透射特性研究进展[J]. *半导体光电*, 2009, 30(2): 161-167.
- 15 Zhang Jianlong, Huang Ming, Hu Baojing, *et al.*. Simulation on light extraction efficiency of subwavelength hole array with FDTD method [J]. *J Yunnan University(Natural Science Edition)*, 2008, 30(5): 472-476.  
张剑龙, 黄 铭, 胡宝晶, 等. 亚波长孔阵透射增强特性的 FDTD 数值仿真[J]. *云南大学学报(自然科学版)*, 2008, 30(5): 472-476.
- 16 Ye Y H, Wang Z B, Yan D, *et al.*. Role of shape in middle-infrared transmission enhancement through periodically perforated metal films [J]. *Opt Lett*, 2007, 32(21): 3140-3142.
- 17 Cao Yurong, Ye Yonghong. Influence of aperture shape on extraordinary transmission through periodically perforated metal films [J]. *J Nanjing Normal University (Natural Science Edition)*, 2009, 32(3): 37-41.  
曹玉蓉, 叶永红. 孔阵形状对周期孔阵金属薄膜透射率的影响[J]. *南京师范大学学报(自然科学版)*, 2009, 32(3): 37-41.
- 18 Garcia-Vidal F J, Martin-Moreno L, Ebbesen T W, *et al.*. Light passing through subwavelength apertures [J]. *Rev Mod Phys*, 2010, 82(1): 729-787.
- 19 Yuegang Chen, Yanhua Wang, Yan Zhang, *et al.*. Numerical investigation of the transmission enhancement through subwavelength hole array [J]. *Opt Commun*, 2007, 274(1): 236-240.