

周期阵列微纳结构金属薄膜的透射特性

秦雪, 王燕, 阎晓娜, 张惠芳, 何英

上海大学理学院物理系, 上海 200444

摘要 选择周期阵列微纳结构金属银膜作为研究对象,用有限元方法对其透射特性进行了数值模拟。研究了孔径大小、金属膜厚度、阵列周期以及入射光的偏振状态对微纳结构透射谱线的影响。结果表明,透射谱线只对阵列周期的变化敏感。

关键词 薄膜; 透射; 微结构; 有限元方法; 金属薄膜; 阵列

中图分类号 O436 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP54.083101

Transmission Characteristics of Metal Films with Periodically Arrayed Micro-Nano Structures

Qin Xue, Wang Yan, Yan Xiaona, Zhang Huifang, He Ying

Department of Physics, College of Science, Shanghai University, Shanghai 200444, China

Abstract The silver film with a periodically arrayed micro-nano structure is chosen as the research object and its transmission characteristics are numerically simulated with the finite element method. The effects of the aperture size, the film thickness, the array period and the polarization state of the incident light on the transmission spectra of this micro-nano structure are analyzed. The results show that the transmission spectra are only sensitive to the change of the array period.

Key words thin films; transmission; microstructure; finite element method; metal film; array

OCIS codes 310.3915; 120.7000

1 引言

1944年, Bethe^[1]提出小孔衍射理论,将单个亚波长孔的透射率估计为 $(r/\lambda)^4$,其中 r 为孔的半径, λ 为入射光的波长。1998年, Ebbesen等^[2]在实验时发现,周期性圆孔阵列的金属膜的透射率远大于 Bethe 的理论估计值,这一现象被称为亚波长孔阵列的超强透射。此后,光与亚波长金属微结构的相互作用成为研究热点之一^[3-6],但一些边界条件较复杂的电磁场问题很难进行解析计算,只能采用数值方法模拟。

本文采用有限元方法模拟了金属薄膜上周期性阵列的微纳结构空气孔的传输特性,讨论了金属微纳结构的孔半径、薄膜厚度、阵列周期、入射光偏振角度及不同激发场对其透射率的影响,研究结果为调控光场以及更小物质单元提供了理论参考^[7-8]。

2 基本原理

求解麦克斯韦方程组的数值方法有:严格耦合波分析(RCWA)法^[9-13],有限元法(FEM)^[14],传输矩阵

收稿日期: 2017-03-28; **收到修改稿日期:** 2017-04-05

基金项目: 国家自然科学基金(11175045)

作者简介: 秦雪(1988—),女,硕士研究生,主要从事周期性的金属微结构透射方面的研究。

E-mail: 13120596696@163.com

导师简介: 王燕(1973—),女,博士,副教授,硕士生导师,主要从事周期性的金属微结构透射方面的研究。

E-mail: yanwang@staff.shu.edu.cn(通信联系人)

方法(TMM)^[15-16],以及时域有限差分(FDTD)方法^[17-20]等。其中有限元法具有独特的优势:1) 最终求解的线性方程组对应的稀疏矩阵是正定的;2) 适用于复杂形状物体及其边界条件的仿真;3) 能用便捷的程序语言将子程序模块化^[21]。有限元法由于其计算效率高、网格适应性强以及概念清晰直观等优点,被广泛用于电磁场计算和数值模拟^[22]。本文采用 COMSOL Multiphysics 软件对周期阵列的亚波长金属孔进行仿真模拟。在描绘电磁波传输时,网格的尺寸小于波长的五分之一,以保证网格的大小能够描绘整个场的分布。

一般材料对电磁波的响应由折射率和阻抗或者介电常数和磁导率来描述。在低频电磁波波段,金属可以近似看作完美导体^[23-24],电磁波只能穿透金属表面很薄的一部分。对于常用的贵金属,例如金、银,在红外和可见光波段,Lorentz-Drude 模型能够很好地描述金属的电磁响应特性。根据修正的 Debye 模型^[25],金属的复介电常数为

$$\hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}}{1 + i\omega\tau} + \frac{\sigma}{i\omega\epsilon_0}, \quad (1)$$

式中 $\hat{\epsilon}$ 为复相对介电常数, ω 为角频率, ϵ_{∞} 为无限频率的相对介电常数, ϵ_s 为零频率的相对介电常数, τ 为弛豫时间, σ 为电导率, ϵ_0 为自由空间的介电常数。贵金属的介电常数的实部相对于虚部是一个绝对值较大的负数^[26]。综合考虑损耗及成本,选择银作为金属薄膜材料,对应的参数^[25]为: $\epsilon_s = -9530.5$, $\epsilon_{\infty} = 3.8344$, $\sigma = 1.1486 \times 10^7 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$, $\tau = 7.35 \times 10^{-15} \text{ s}$ 。

3 周期性结构设计 with 数值模拟方法

图 1(a)所示为单元孔的俯视平面图,周期阵列结构即这种单元孔结构在金属薄膜上紧密排列, r 为孔的半径, L 为孔阵列周期。图 1(b)所示为有限元模拟软件建立的单元孔结构的立体图, z 轴方向为金属膜的厚度方向, d 为金属银膜的厚度。空气柱圆孔被金属银材料包围,顶部和底部两层蓝色区域是完美匹配层(PML)。PML为有耗介质,进入 PML 的透射波将迅速衰减,是一种常用的吸收边界^[18]。在建立周期性结构的仿真中,使用了 Floquet 周期条件:结构由具有空间周期性的散射体构成的情况下,在计算其透射率时,常常采用 Floquet 周期边界将计算区域限制在一个周期内,以节省计算时间。

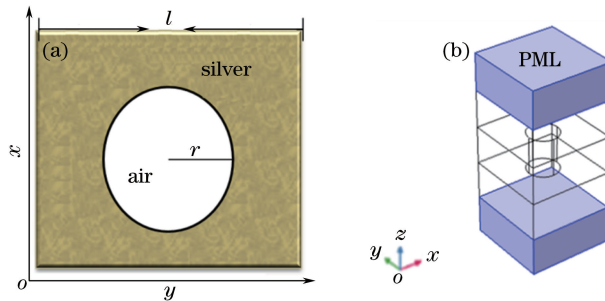


图 1 (a)单元孔二维平面图;(b)周期性三维结构数值仿真模型

Fig. 1 (a) Two-dimensional planar diagram of unit holes; (b) numerical simulation model of three-dimensional periodic structures

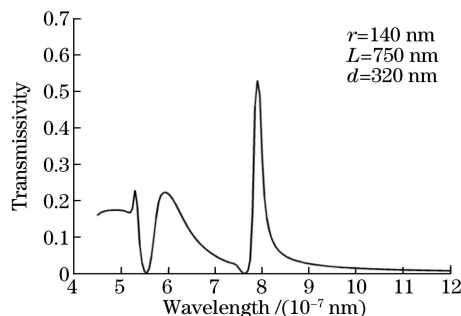


图 2 透射谱线

Fig. 2 Transmission spectrum

参考文献[27]设置图 1(b)中模型的参数,孔的半径 $r=140$ nm,阵列周期 $L=750$ nm,膜厚度 $d=320$ nm,入射光为横磁波且垂直照射在金属表面,所得透射谱线如图 2 所示,扫描波长范围为 $450\sim 1200$ nm。

比较图 2 所示透射谱线与文献[27]的实验结果可知,模拟结果与实际符合较好。从图 2 可以看出,当入射光波长为 790 nm 时,透射谱线达到峰值。图 3(a)~(c)所示分别为 x - y 平面、 y - z 平面以及 x - z 平面的电场分布。图 4(a)~(c)所示分别为 x - y 平面、 y - z 平面以及 x - z 平面的能流分布。

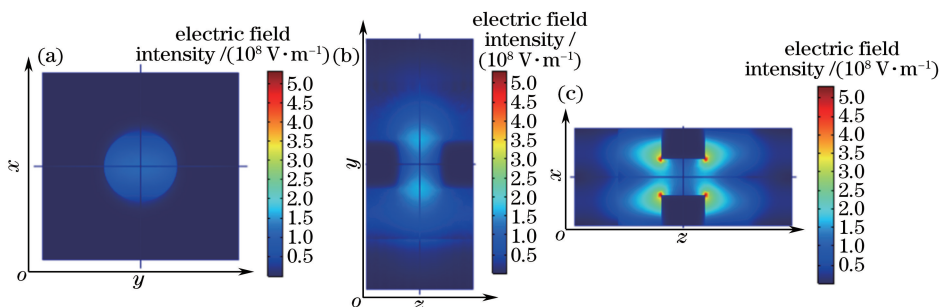


图 3 周期性结构中的电场分布图

Fig. 3 Electric field distributions in periodic structures

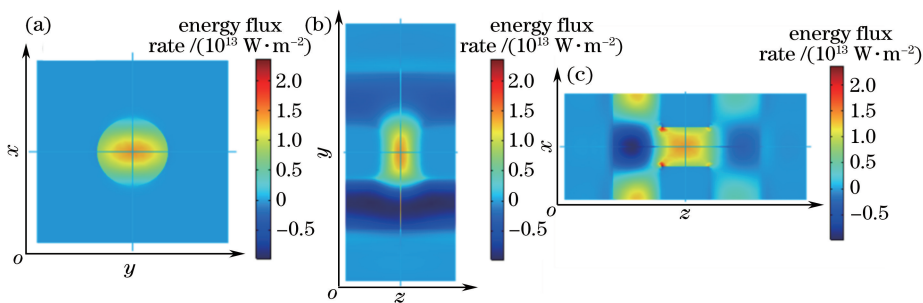


图 4 周期性结构中的能流分布图

Fig. 4 Energy flux distributions in periodic structures

从图 3、4 可知,电场主要存在于金属薄膜上的空气圆孔中,没有能量穿过金属薄膜,能量的传输主要在空气孔中进行。

4 结果与讨论

为了研究与透射率的大小以及峰值的位置有关的参数,分别采用不同的孔半径、膜厚度、阵列周期、入射光的偏振态以及入射仰角(入射光与平面法向间的夹角)进行仿真模拟计算。图 5(a)所示为周期 $L=750$ nm、膜厚度 $d=320$ nm 时,横磁波垂直照射在不同孔半径的周期性结构上所得的透射谱线;图 5(b)所示为孔半径 $r=140$ nm、周期 $L=750$ nm 时,横磁波垂直照射在不同厚度的金属膜上所得的透射谱线。

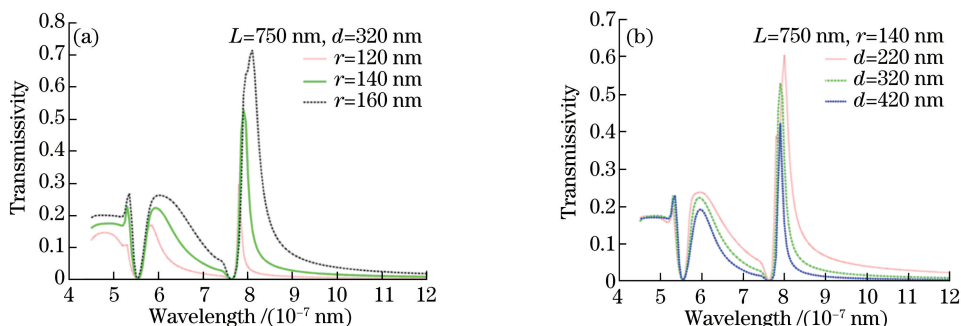


图 5 不同(a)孔半径和(b)不同膜厚度下的透射谱线

Fig. 5 Transmission spectra under different (a) hole radii and (b) film thicknesses

从图 5(a)可知,随着孔半径的改变,透射谱线的峰值位置略微移动,而峰谷的位置不变,并且透射率随着孔半径的增大而增大。这说明孔半径的改变对透射率峰值位置的影响不大,但对透射率有一定影响。从图 5(b)可知,当膜厚度变化量为 200 nm 时,透射谱线的峰、谷值位置没有明显变化,但透射率有一定变化。

图 6 所示为不同阵列周期下的透射谱线,可以看出,随着周期的增加,峰值位置向长波长方向移动,且透射率峰值逐渐减小,峰的个数也减少,这说明透射谱线对阵列周期的变化非常敏感。

图 7(a)~(c)所示为半径 $r=140$ nm,周期 $L=750$ nm,厚度 $d=320$ nm 的情况下,入射光的偏振角 θ 分别为 30° 、 45° 和 60° 时的金属膜透射谱线。

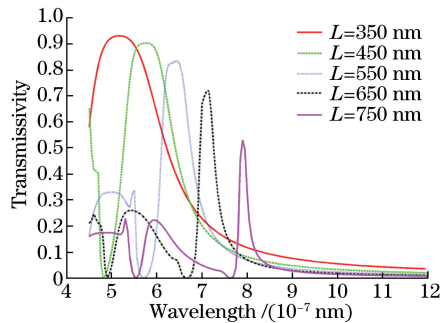


图 6 不同阵列周期下的透射谱线

Fig. 6 Transmission spectra under different array periods

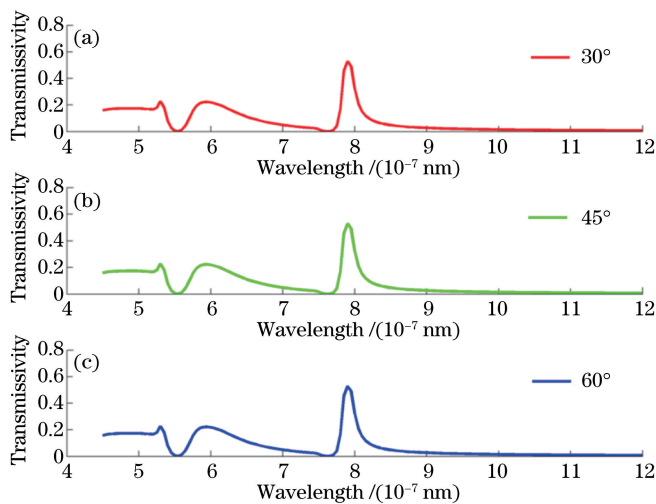


图 7 横磁波照射时,不同入射光偏振角度下的透射谱线

Fig. 7 Transmission spectra under different polarization angles of incident transverse magnetic wave

从图 7 可知,在横磁波激发下,改变入射光的偏振角度,透射曲线几乎没有改变,因此无法通过改变入射光的偏振角度来控制光场。

当入射仰角为 40° 时,分别用电场和磁场激发时的透射谱线如图 8(a)所示。从图 8(a)可知,峰值位置没有改变,但透射的强度发生了改变。当入射仰角为 80° 时,分别用电场和磁场激发时的透射谱线如图 8(b)所示,可以看到,峰值位置没有明显的变化,但透射强度变化明显,磁场激发的透射强度远大于电场激发的。这是因为在仰角较小时,p 偏振光和 s 偏振光的透射强度差别不大;而在仰角较大时,p 偏振光激发起主要作用,s 偏振光激发的作用较弱。

5 结 论

研究了不同孔径大小、阵列周期、膜厚以及激发方式对亚波长金属微纳结构的电磁场透射谱线的影响,发现金属微纳结构的透射特性主要由阵列周期决定,而孔径大小、金属膜厚度和入射光偏振状态等对透射谱线的影响不大。研究结果为亚波长光场的调控提供了依据,今后将对产生这一现象的原理作进一步研究。

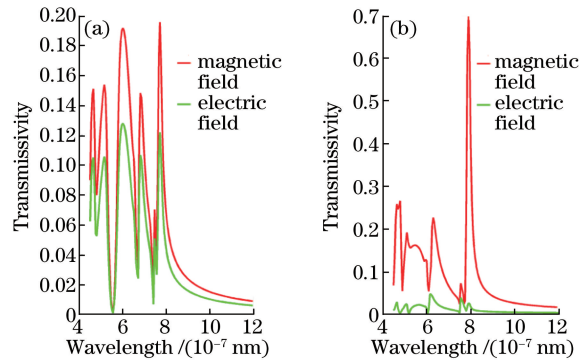


图 8 在入射仰角分别为(a) 40°和(b) 80°下,电场和磁场激发时的透射谱线

Fig. 8 Transmission spectra excited by electric fields and magnetic fields under incident elevation angles of (a) 40° and (b) 80°, respectively

致谢 感谢 COMSOL(中国)公司张凯工程师的大力帮助。

参 考 文 献

- [1] Bethe H A. Theory of diffraction by small holes[J]. Physical Review, 1944, 66(7/8): 163-182.
- [2] Ebbesen T W, Lezec H J, Ghaemi H F, *et al.* Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays [J]. Nature, 1998, 391(6668): 667-669.
- [3] Williams S M, Rodriguez K R, Teeters-Kennedy S, *et al.* Scaffolding for nanotechnology: Extraordinary infrared transmission of metal microarrays for stacked sensors and surface spectroscopy[J]. Nanotechnology, 2004, 15(10): S495-S503.
- [4] Enoch S, Popov E, Neviere M, *et al.* Enhanced light transmission by hole arrays[J]. Journal of Optics A: Pure & Applied Optics, 2002, 4(5): 83-87.
- [5] Lezec H J, Thio T. Diffracted evanescent wave model for enhanced and suppressed optical transmission through subwavelength hole arrays[J]. Optics Express, 2004, 12(16): 3629-3651.
- [6] Liu H, Lalanne P. Microscopic theory of the extraordinary optical transmission[J]. Nature, 2008, 452(7188): 728-731.
- [7] Shi Zhendong, Zhao Haifa, Liu Jianlong, *et al.* Design of a metallic waveguide all-optical switch based on surface plasmon polaritons[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(2): 0213001.
石振东, 赵海发, 刘建龙, 等. 基于表面等离子激元的金属波导全光开关设计[J]. 光学学报, 2015, 35(2): 0213001.
- [8] Chen Qin, Wang Huacun, Hu Xin, *et al.* Spatial light modulator and its applications in free-space optical communications[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(5): 050008.
陈沁, 王华村, 胡鑫, 等. 空间光调制器及其在空间光通信中的应用[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(5): 050008.
- [9] Sobnack M B, Tan W C, Wanstall N P, *et al.* Stationary surface plasmons on a zero-order metal grating[J]. Physical Review Letters, 1998, 80(25): 5667-5670.
- [10] Moharam M G, Gaylord T K. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction[J]. Journal of the Optical Society of America, 1981, 71(7): 811-818.
- [11] Hooper I R, Sambles J R. Coupled surface plasmon polaritons on thin metal slabs corrugated on both surfaces [J]. Physical Review B, 2004, 70(4): 2199-2208.
- [12] Moharam M G. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: Enhanced transmittance matrix approach[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1995, 12(5): 1077-1086.
- [13] Chen Dewei. Rigorous coupled wave analysis of the diffractive optics[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2004.
陈德伟. 衍射光学中的严格耦合波分析方法[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2004.
- [14] Hughes T J R, Taylor R L, Kanoknukulchai W. A simple and efficient finite element for plate bending [J].

- International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1977, 11(10): 1529-1543.
- [15] Pendry J B, Mackinnon A. Calculation of photon dispersion relations[J]. Physical Review Letters, 1992, 69(19): 2772.
- [16] Thompson R C. Optical waves in layered media[J]. Journal of Modern Optics, 1990, 37(1): 147-148.
- [17] Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media[J]. IEEE Transactions on Antennas & Propagation, 1966, 14(3): 302-307.
- [18] Gao Benqing. The finite difference time domain method[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1995.
高本庆. 时域有限差分法[M]. 北京: 国防工业出版社, 1995.
- [19] Taflove A, Hagness S C. Computational electrodynamics: The finite-difference time-domain method[M]. Boston: Artech House, 2005.
- [20] Ge Debiao, Yan Yubo. Finite-difference time-domain method for electromagnetic waves[M]. Xi'an: Xi'an University of Electronic Science and Technology Press, 2005.
葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005.
- [21] Lü Yinghua. The numerical of computer electromagnetism[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2006.
吕英华. 计算机电磁学的数值方法[M]. 北京: 清华大学出版社, 2006.
- [22] Jin J M. The finite element method in electromagnetics[M]. Weinheim: Wiley-IEEE Press, 2014: 39-40.
- [23] Ordal M A, Long L L, Bell R J, *et al.* Optical properties of the metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, and W in the infrared and far infrared[J]. Applied Optics, 1983, 22(7): 1099-1119.
- [24] Ordal M A, Bell R J, Alexander R W, *et al.* Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared: Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W[J]. Applied Optics, 1985, 24(24): 4493-4499.
- [25] Gai H, Wang J, Tian Q. Modified Debye model parameters of metals applicable for broadband calculations[J]. Applied Optics, 2007, 46(12): 2229-2233.
- [26] Wang Xiaoyan, Wang Yan, Qin Xue, *et al.* Sub-wavelength surface plasmon polariton waveguide based on ITO characteristics[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(5): 052401.
王晓艳, 王燕, 秦雪, 等. 基于ITO特性的亚波长表面等离子激元波导[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(5): 052401.
- [27] Martínmoreno L, Garcíavidal F J, Lezec H J, *et al.* Theory of extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays[J]. Physical Review Letters, 2001, 86(6): 1114-1117.