

激光与光电子学进展

基于纳米金属修饰的石墨烯光电探测器
光吸收特性研究李江霖¹, 孙科学^{1,2*}¹南京邮电大学电子与光学工程学院、微电子学院, 江苏 南京 210023;²射频集成与微组装技术国家地方联合工程实验室, 江苏 南京 210023

摘要 可见光及红外波段的光电探测器是光通信、深空探测、生物医学成像等重要领域不可缺少的一部分。为进一步提升光电探测器性能,在石墨烯薄层上引入金属纳米结构,利用有限元仿真软件 COMSOL 建立多组模型进行仿真对比。结果表明:周期 $P=250\text{ nm}$, 纳米颗粒直径 $D=112.5\text{ nm}$ 时,金字塔纳米金属颗粒与三角形截面光栅的加入,实现了石墨烯光电探测器在可见光和近红外波段光吸收的增强。波长在 $0.5\sim 5\text{ }\mu\text{m}$ 范围内,纳米颗粒光栅结构可进一步提升器件的吸收性能,且颗粒覆盖率是影响光吸收效率的关键因素。

关键词 表面等离子激元; 光吸收效率; 光电探测器; COMSOL; 光电效应

中图分类号 O436

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP202259.2124003

Light Absorption Characteristics of a Graphene Photodetector Based on
Nano-Metal ModificationLi Jianglin¹, Sun Kexue^{1,2*}¹College of Electronic and Optical Engineering, Nanjing University of Posts and Telecommunications,
Nanjing 210023, Jiangsu, China;²Nation-Local Joint Project Engineering Laboratory of RF Integration & Micropackage,
Nanjing 210023, Jiangsu, China

Abstract Photodetectors operating in the visible and near-infrared bands are an indispensable part of various applications, such as optical communications, deep space exploration, and biomedical imaging. We introduce metal nanostructures on a thin layer of graphene to improve the performance of photodetectors. We use COMSOL to establish multiple sets of models for simulation comparison. The results show that at a period (P) of 250 nm and particle diameter (D) of 112.5 nm , the addition of pyramid nano-metal particles and a triangular cross-section grating enhances the light absorption of the graphene photodetector in the visible and near-infrared bands. In the wavelength range of $0.5\sim 5\text{ }\mu\text{m}$, the nanoparticle grating structure can further improve the absorption performance of the device. The results indicate that particle coverage is the key factor affecting the light absorption efficiency.

Key words localized surface plasmons; light absorption efficiency; photoelectric detector; COMSOL; photoelectric effect

1 引言

光电探测器是一种利用光电转换将光信号转换为电信号的器件,其能够在可见光及红外波段工作,是光通信、生物医学成像、航空航天、安全监控以及环境监测必不可少的一部分^[1-5]。普通 Si 基光电探测器由于

Si 具有间接带隙特性,对入射到器件的光吸收效率较低,且其 1.1 eV 的禁带宽度也使得普通 Si 基探测器在中远红外以及太赫兹波段的应用大大受限^[6]。如何更进一步拓宽光电探测器的应用波段,并提升光电探测器的性能成为科学研究的主题。

石墨烯作为一种二维材料,具有较好的光学性能。

收稿日期: 2021-09-30; 修回日期: 2021-10-24; 录用日期: 2021-11-08

基金项目: 国家自然科学基金(11304160)、江苏省研究生实践创新计划(SJCX21_0279)、南京邮电大学国自孵化项目(NY220013)

通信作者: *sunkx@njupt.edu.cn

单层的石墨烯对垂直入射光的吸收率达 2.3%^[7],且透射率大于 90%,其同时具有较宽波段的吸收,除在可见光波段外,红外光范围内也有吸收。同时,石墨烯具备良好的光电特性,具有高载流子迁移率。因此,将石墨烯应用在光电探测器中,可以拓宽探测器的探测波长范围,提升器件性能。因石墨烯的仿真已较为成熟,针对有限元计算有表面电流法、薄层法等^[8]。石墨烯的加入在一定程度上提高了光电探测器件的性能,但其厚度有限,对光吸收的调节能力不能无止尽地增强。若想进一步提升光电探测器件的响应度,可引入金属纳米结构的局域表面等离子激元^[9](Localized surface plasmon resonance, LSPR)。当分子处于局部强电磁场时,分子的红外光谱响应会得到增强^[10-13]。等离子激元使得外界电磁场和金属表面自由电子相互作用,光场集中在纳米结构附近,产生局域场增强效应^[14-15]。

2015年,Miao等^[16]制作了金纳米颗粒阵列修饰的光电导型 MoS₂ 光电探测器,利用等离子激元效应增强了光电探测器对光的吸收,使光电流提高 2 倍。2018年,Wu等^[17]对石英包裹的 Ag 纳米球阵列和 Au 薄膜的几何位置进行调控,在二者之间激发 gap-mode,并将单层 MoS₂ 置于 2 种 LSPR 结构之间,极大地提高了电场强度。2019年,Muench等^[18]设计了波导集成等离子体增强石墨烯光电探测器,该探测器通过光热电效应直接产生光电压,单层石墨烯通道和等离子激元波导之间产生了较大的信号,即利用等离子激元增强了单层石墨烯对光的吸收能力。2020年,Li等^[19]设计了纳米颗粒光栅阵列的光电探测器,其由 2 种直径不同的金纳

米球排布组成,该结构不仅使用了纳米颗粒的局域场增强效应,也利用了光栅的耦合效应,与普通金纳米颗粒阵列相比较,吸收率增加了 1 倍。2021年,AlAloul等^[20]提出了氮化钛等离子体增强的石墨烯光电探测器,该探测器利用金属氮化物替代传统的 Au、Ag 等金属,但其仍有类似于金属的等离激元特性。

本文提出了一种基于纳米金属修饰表面等离子体共振增强的石墨烯光电探测器,采用常用的有限元仿真软件 COMSOL 进行器件性能模拟。纳米金属引入等离激元效应,石墨烯的加入实现了高吸收率的宽带光响应。仿真过程中,重点分析了纳米金属颗粒与光栅截面的形状、大小及纳米颗粒光栅结构等对光电探测器吸收性能的影响。

2 器件结构与仿真

纳米金属修饰的石墨烯光电探测器器件结构如图 1 所示,由下至上依次为:SiO₂ 介质层、石墨烯层及金属纳米颗粒阵列(光栅)层。

以金属纳米颗粒修饰的光电探测器为例,如图 1(b) 所示为球型颗粒截面,其中周期 P 定义为球心间距离; H_{SiO_2} 为 SiO₂ 介质层厚度; D 为金属纳米颗粒的直径(锥形纳米颗粒取其底面圆直径作为 D),由于金字塔型颗粒没有直径,故用 D 表示其底面正方形边长(金字塔型颗粒高度 H 始终与边长 D 保持一致); $w = P - D$,即金属纳米颗粒最近点之间的距离。同理,对于金属纳米光栅修饰的光电探测器,用 d 表示截面直径, $w = P - d$ 。

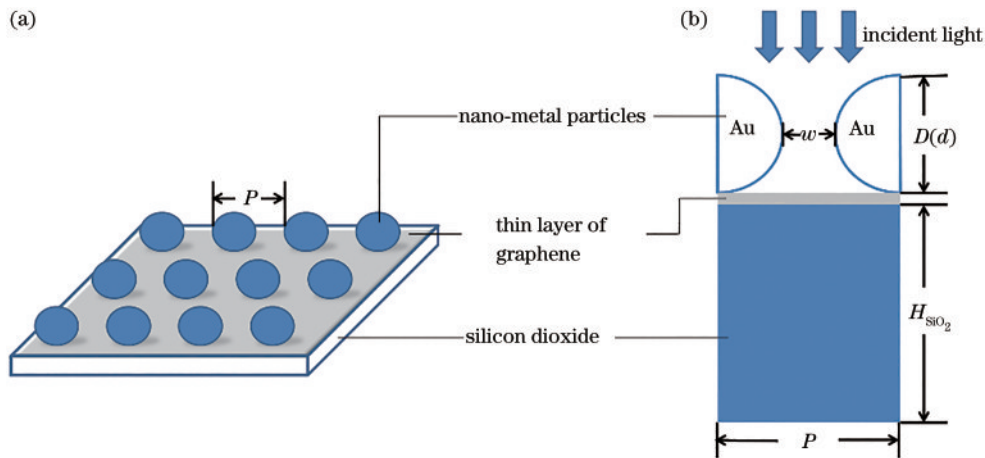


图 1 二维仿真结构示意图(图示为光从空气界面垂直入射到器件表面)。(a) 金属纳米颗粒周期性阵列;(b) 单个周期截面示意图
Fig. 1 Schematic of two-dimensional simulation structure (the figure shows the light incidents vertically on the device surface from the air interface). (a) Periodic array of metal nanoparticles; (b) schematic of single cycle section

采用 COMSOL 仿真软件对器件结构进行模拟,COMSOL 仿真模型 xz 平面视图如图 2 所示(以金属纳米球颗粒修饰的光电探测器为例)。

在使用 COMSOL 进行模型设置时,物理场选择电磁波/频域(EWFD)模块,以过渡边界条件表示薄

层石墨烯,入射光波长设定为 500 nm~5 μm 。为简化模型,界面模型四周(即 x 轴方向和 y 轴方向)设为周期性边界条件(Periodic boundary conditions, PBC),表示在横轴方向光电探测器的结构对称无限。

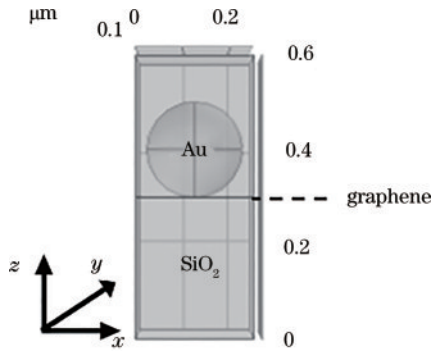


图 2 COMSOL 仿真模型 xz 平面视图
Fig. 2 COMSOL simulation model xz view

3 仿真结果及讨论

在相同的光波长下,相比于金属-空气界面,Au-Gra-SiO₂ (结构从上至下依次为纳米 Au、graphene 薄

层、SiO₂衬底)界面所激发的等离激元具有较大的波矢 k 及较大的态密度,从而也具有较高的能量,对吸收率等性能的增强起重要作用^[19]。故在使用 COMSOL 进行仿真研究时,着重处理与表面等离激元相关部分,即研究颗粒间距 w 、阵列周期 P 及颗粒直径 $D(d)$ 对器件吸收性能的影响,达到器件性能增强的目的。

3.1 石墨烯对光电探测器性能的影响

为探究石墨烯对光电探测器性能的影响,首先构建如图 3(a)所示的一般结构。在同一模型下,无石墨烯时,光吸收效率较低,波长在 1~5 μm 的范围内,吸收率不到 1%,在 772 nm 波峰处,吸收率仅为 6.74%;加入石墨烯后,光电探测器展现出了良好的吸收性能,波长在 1~5 μm 的范围内,吸收率大于 10%,光吸收效率增加了至少 10 倍,且波峰处吸收效率可达 44.02%,与无石墨烯相比提升了 6.5 倍。由此证明,石墨烯可实现可见光和近红外波段光吸收的增强。

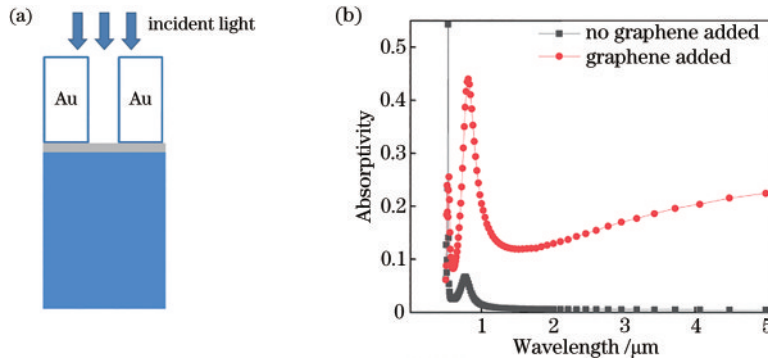


图 3 初始模型的吸收率。(a) 初始模型示意图;(b) 石墨烯加入前后的吸收率
Fig. 3 Absorptivity of initial model. (a) Schematic of initial model; (b) absorptivities before and after graphene addition

3.2 纳米颗粒形状、排布等对光电探测器性能的影响

首先,为比较不同颗粒形状对光电探测器性能的影响,在 COMSOL 的射频 (RF) 模块下建立 3 种不同的模型。初始结构定为 $w=300$ nm, $H_{SiO_2}=300$ nm, 纳米颗粒直径 D 分别取 $w/2$ 、 $2w/3$ 及 $5w/6$ 。各探测器模型仿真结果如图 4 所示,电场局域在纳米颗粒和薄膜界面处,表现出表面等离子体共振效应 (SPP) 现象,即纳米颗粒的加入,使得其周围电磁场显著增强,结构附

近的光吸收得以提高。

图 5 为不同颗粒半径下,光吸收效率随波长的变化情况。同一形状颗粒修饰的光电探测器,随颗粒半径由小到大,整体上吸收率也增加。仿真过程中,阵列周期 P 为定值,故粒径越大,即 SiO₂ 衬底表面的颗粒覆盖度较高时,表面等离激元对 Si 衬底光吸收的贡献越大,吸收率越大。对不同形状的纳米颗粒,锥体颗粒、金字塔颗粒及半球颗粒随颗粒半径由小到大,探测器

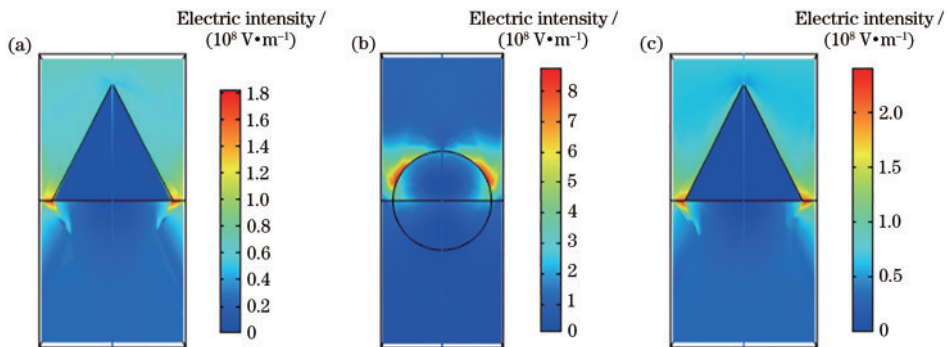


图 4 电场强度分布图。(a) 金字塔颗粒;(b) 半球颗粒;(c) 锥体颗粒

Fig. 4 Electric intensity distribution diagrams. (a) Pyramidal nanoparticles; (b) hemispherical nanoparticles; (c) subuliform nanoparticles

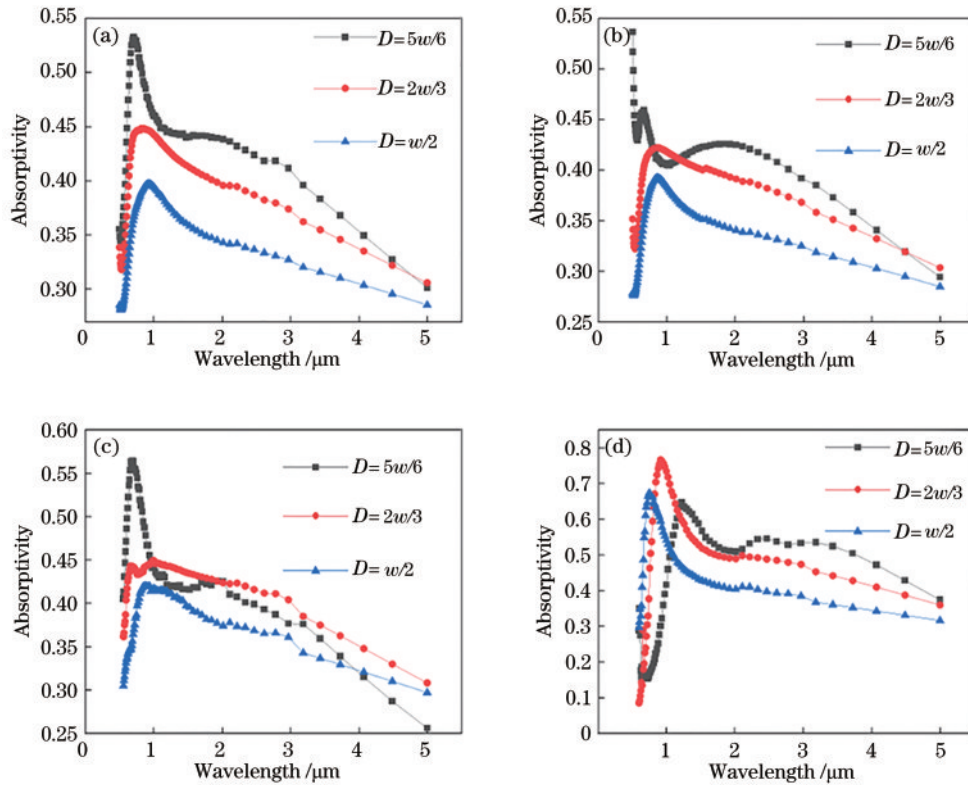


图 5 不同颗粒半径下光吸收效率随波长的变化情况。(a) 锥体颗粒;(b) 金字塔颗粒;(c) 半球颗粒;(d) 正方体颗粒
Fig. 5 Change of light absorption efficiency with wavelength under different particle radii. (a) Subuliform nanoparticles;
(b) pyramidal nanoparticles; (c) hemispherical nanoparticles; (d) cube nanoparticles

吸收谱峰值仅产生微小的位移,其中锥体颗粒峰值基本在同一波长处;而正方体颗粒在颗粒半径由小到大变化的过程中,产生了较为明显的红移,且吸收率与粒径不成正比单调关系,故后续的分析对比中不使用正方体金属纳米颗粒。

为进一步分析出适合用于光电探测器的纳米金属颗粒形状,通过仿真得到不同颗粒下光吸收效率随波长的变化情况。

仿真全波长在 0.5~5 μm 范围内,金字塔颗粒光吸收效率远优于半球颗粒,如图 6 所示。波长小于 0.7 μm 时,锥体与金字塔颗粒的吸收效率基本持平;

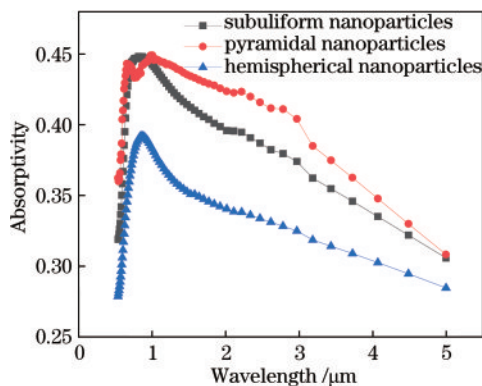


图 6 不同颗粒形状下光吸收效率随波长变化图
Fig. 6 Variation of light absorption efficiency with wavelength under different particle shapes

波长在 0.7~1.1 μm 小范围内,锥体颗粒吸收率略高;而波长在 1~5 μm 的范围内,金字塔颗粒吸收率明显优于锥体颗粒。综合前述仿真结果的讨论,金字塔颗粒更适合用于光电探测器的设计中。

3.3 不同内壁形状、排布的周期性金属光栅等对光电探测器性能的影响

在光栅周期一定的情况下,初始结构定为 $H_{SiO_2} = 300 \text{ nm}$, $w = 250 \text{ nm}$,光栅截面直径 d 分别取 $0.35w$ 、 $0.4w$ 及 $0.45w$ 。图 7 展示了在同一条件下光谱吸收随截面半径大小变化的情况。

图 7 为建模仿真得到的结果,给出了在不同半径大小的纳米金属颗粒下,光吸收效率随波长的变化情况。由图 7 可知,波长在 1~5 μm 范围内,光电探测器光吸收效率随波长单调递增,且在相同截面形状中,同一波长下,光吸收效率随截面半径的增加而增加,即截面半径越大,光电探测器性能越佳。

为进一步比较出光电探测器的最优截面形状,取相同 d ,分析不同截面形状下光吸收效率随波长的变化情况。相比其他截面,三角截面显示出较好的吸收效率,如图 8 所示。

3.4 纳米颗粒光栅阵列结构对光电探测器性能的影响

经文献调研,纳米颗粒光栅阵列结构可以进一步提升光电探测器性能,图 9 为纳米颗粒光栅阵列结构及其

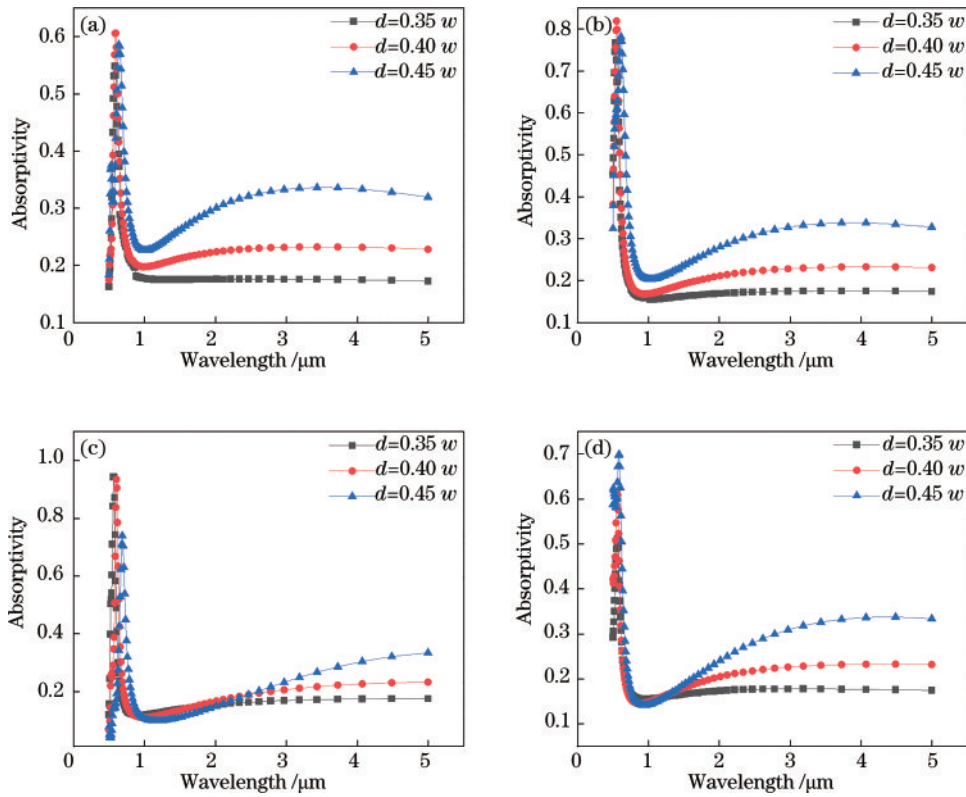


图 7 不同截面半径下,光吸收效率随波长的变化情况。(a)三角形;(b)梯形;(c)矩形;(d)半球形
Fig. 7 Change of light absorption efficiency with wavelength under different section radii. (a) Triangle; (b) trapezoid; (c) rectangle; (d) hemisphere

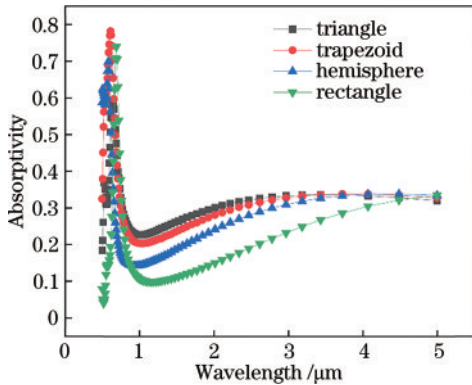


图 8 不同截面形状下光吸收效率随波长的变化情况
Fig. 8 Variation of light absorption efficiency with wavelength under different cross-section shapes

电场强度局部分布示意图。结合仿真结果,提出基于金字塔型纳米颗粒的纳米颗粒光栅光电探测器结构。

光电探测器吸收率如图 10 所示。图 10(a)为 $D=5w/6$ 的均匀纳米颗粒光电探测器(简称为器件 I)与纳米颗粒光栅结构光电探测器(简称为器件 III)的吸收率结果。从仿真结果可知,波长在 $0.5\sim 2.1\ \mu\text{m}$ 范围内,器件 III 的吸收率优于器件 I,且在波峰 $1.425\ \mu\text{m}$ 处,器件 III 较器件 I 吸收率提升了 2.41 倍。同理,图 10(b)为 $D=5w/12$ 的均匀纳米颗粒光电探测器(简称为器件 II)与器件 III 的吸收率结果。可以看出,波长在 $1.5\sim 5\ \mu\text{m}$ 范围内,纳米粒子光栅结构的光吸收增加了 1 倍,在波峰 $1.425\ \mu\text{m}$ 处,器件 III 较器件 II 吸收率提升了 1.87 倍。故纳米颗粒光栅结构光电探测器

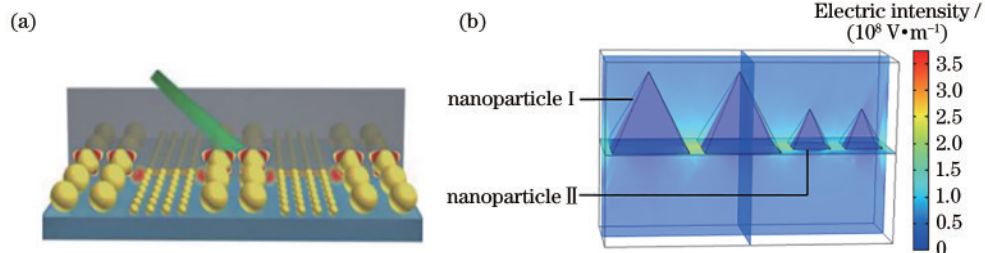


图 9 纳米颗粒光栅阵列结构。(a) 纳米颗粒光栅结构光电探测器示意图^[21]; (b) 金字塔型纳米颗粒光栅光电探测器电场强度局部分布图

Fig. 9 Structure of nanoparticle grating array. (a) Schematic diagram of photodetector with nano particle grating structure^[21]; (b) local distribution diagram of electric field intensity of pyramid type nano particle grating photodetector

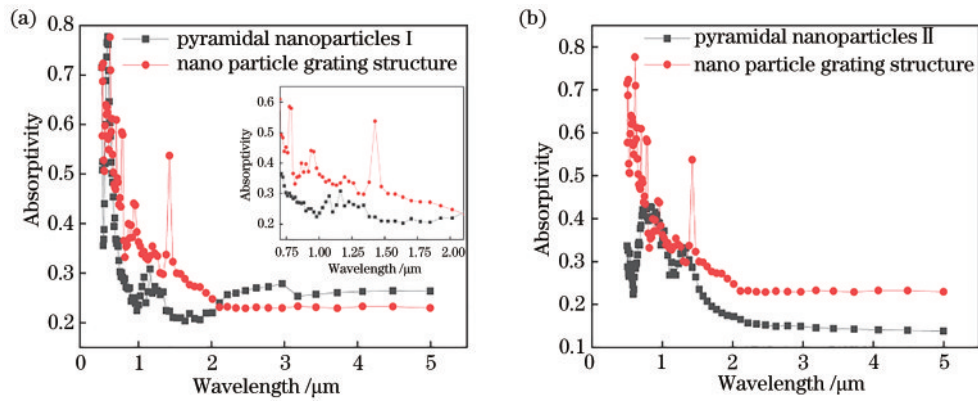


图 10 金字塔颗粒与纳米颗粒光栅结构光吸收效率随波长的变化情况。(a) 器件 I 与器件 III (插图为 0.5~2.1 μm 波长范围); (b) 器件 II 与器件 III

Fig. 10 Changes of light absorption efficiency of pyramid particle and nano particle grating structure with wavelength. (a) Device I and device III (illustrations are 0.5~2.1 μm wavelength range); (b) device II and device III

展现出了良好的吸收效率,提高了器件的响应度,其器件响应度和性能都得以提升。

4 结 论

基于 SiO₂ 基底的普通光电探测器,提出了利用纳米金属引入等离激元效应,并在光电探测器中加入石墨烯。为提高光电探测器的吸收性能提出了一系列方案,建立多组模型进行仿真对比。结果表明,石墨烯的加入,使得光电探测器光吸收效率增加了至少 10 倍,展现出了良好的吸收性能,且波峰处吸收效率与无石墨烯时相比可提升 6.5 倍。在金属颗粒的选择中,金字塔型纳米金属颗粒呈现出了较好的吸收性能,峰值基本不随粒径的变化而红移;且在阵列周期不变的情况下,颗粒半径越大,即光电探测器表面颗粒覆盖度越大时,器件吸收效率越高,覆盖度与吸收效率成正比。同理,三角截面的光栅相较于其他形状光栅更适合用于光电探测器的设计使用中。最后基于前述仿真结果,提出纳米颗粒光栅结构光电探测器,该结构与普通纳米颗粒修饰的探测器件相比,实现了高效的光电转换。这里仅对光吸收效率进行相关研究,未涉及其他特性,后续工作中仍需做进一步研究。

参 考 文 献

- [1] 何伟迪, 苏丹, 王善江, 等. 表面等离激元纳米结构增效的光电探测器进展(特邀)[J]. 红外与激光工程, 2021, 50(1): 20211014.
He W D, Su D, Wang S J, et al. Progress of surface plasmon nanostructure enhanced photodetector(Invited)[J]. Infrared and Laser Engineering, 2021, 50(1): 20211014.
- [2] Polat E O, Mercier G, Nikitskiy I, et al. Flexible graphene photodetectors for wearable fitness monitoring [J]. Science Advances, 2019, 5(9): eaaw7846.
- [3] Bao C X, Yang J, Bai S, et al. High performance and stable all-inorganic metal halide perovskite-based photodetectors for optical communication applications[J]. Advanced Materials, 2018, 30(38): 1803422.
- [4] Lin C N, Lu Y J, Yang X, et al. Diamond-based all-carbon photodetectors for solar-blind imaging[J]. Advanced Optical Materials, 2018, 6(15): 1800068.
- [5] 尚慧明, 戴明金, 高峰, 等. 无机紫外光电探测器 [J]. 中国材料进展, 2019, 38(9): 875-886.
Shang H M, Dai M J, Gao F, et al. Progress in inorganic ultraviolet photoelectric materials[J]. Materials China, 2019, 38(9): 875-886.
- [6] Sano N, Yoshii A. Impact-ionization theory consistent with a realistic band structure of silicon[J]. Physical Review. B, Condensed Matter, 1992, 45(8): 4171-4180.
- [7] Wood J. Graphene lights up a fundamental truth[J]. Materials Today, 2008, 11(6): 10.
- [8] 刘雨晴, 张嘉芮, 韩冬冬, 等. 激光加工石墨烯传感器和执行器研究进展 [J]. 中国激光, 2021, 48(15): 1502003.
Liu Y Q, Zhang J R, Han D D, et al. Recent progress in laser-processed graphene for sensors and actuators[J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(15): 1502003.
- [9] 张明恩, 姜美玲, 冯紫薇, 等. 等离激元纳米材料超快激光光热形变原理及应用[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(11): 111401.
Zhang M S, Jiang M L, Feng Z W, et al. Fundamentals and applications of ultrafast laser induced photothermal reshaping of plasmonic nanomaterials[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(11): 111401.
- [10] Yuan H T, Liu X G, Afshinmanesh F, et al. Polarization-sensitive broadband photodetector using a black phosphorus vertical p-n junction[J]. Nature Nanotechnology, 2015, 10(8): 707-713.
- [11] Zhang B Y, Liu T, Meng B, et al. Broadband high photoresponse from pure monolayer graphene photodetector [J]. Nature Communications, 2013, 4: 1811.
- [12] Huang J N, Luo L B. Low-dimensional plasmonic photodetectors: recent progress and future opportunities [J]. Advanced Optical Materials, 2018, 6(8): 1701282.
- [13] Li W, Valentine J G. Harvesting the loss: surface plasmon-based hot electron photodetection[J]. Nanophotonics,

- 2017, 6(1): 177-191.
- [14] Wang P W, Tang C J, Yan Z D, et al. Graphene-based superlens for subwavelength optical imaging by graphene plasmon resonances[J]. Plasmonics, 2016, 11(2): 515-522.
- [15] Guo J S, Li J, Liu C Y, et al. High-performance silicon-graphene hybrid plasmonic waveguide photodetectors beyond 1.55 μm [J]. Light: Science & Applications, 2020, 9: 29.
- [16] Miao J S, Hu W D, Jing Y L, et al. Surface plasmon-enhanced photodetection in few layer MoS_2 phototransistors with Au nanostructure arrays[J]. Small, 2015, 11(20): 2392-2398.
- [17] Wu Z Q, Yang J L, Manjunath N K, et al. Gap-mode surface-plasmon-enhanced photoluminescence and photoresponse of MoS_2 [J]. Advanced Materials, 2018, 30(27): 1706527.
- [18] Muench J E, Ruocco A, Giambra M A, et al. Waveguide-integrated, plasmonic enhanced graphene photodetectors[J]. Nano Letters, 2019, 19(11): 7632-7644.
- [19] Li J L, Nie C B, Sun F Y, et al. Enhancement of the photoresponse of monolayer MoS_2 photodetectors induced by a nanoparticle grating[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2020, 12(7): 8429-8436.
- [20] AlAloul M, Rasras M. Plasmon-enhanced graphene photodetector with CMOS-compatible titanium nitride[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2021, 38(2): 602-610.
- [21] 白文理, 郭宝山, 蔡利康, 等. 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[J]. 物理学报, 2009, 58(11): 8021-8026.
- Bai W L, Guo B S, Cai L K, et al. Simulation of light coupling enhancement and localization of transmission field via subwavelength metallic gratings[J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(11): 8021-8026.