

# 激光与光电子学进展

## 近红外吸收增强银纳米凹坑-硅栅组合结构模拟

孙国斌, 张锦\*, 蒋世磊, 杨柳

西安工业大学光电工程学院, 陕西 西安 710021

**摘要** 针对二维硅光栅微结构在近红外光吸收率极低的特点,提出了一种利用等离激元增强金属 Ag 纳米凹坑-硅栅近红外光吸收的微纳组合结构,基于时域有限差分法研究了该组合结构在 0.78~2.5  $\mu\text{m}$  宽波段的吸收率,分析了光栅结构与 Ag 纳米凹坑对光吸收效率的影响变化。模拟研究结果表明,当在周期为 0.2  $\mu\text{m}$ 、占空比为 0.5 的光栅间隙和栅柱表面均嵌入直径为 0.1  $\mu\text{m}$  的 Ag 纳米凹坑时,该组合微结构在近红外宽波段吸收率均在 23% 以上,平均吸收率理论上可达到 52.3%;当光栅表面增加  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层时,宽波段吸收率均在 41.3% 以上,平均吸收率提高到 65.1%,最终在近红外宽波长范围内提高了吸收效率。该研究为光电探测器、太阳能电池、光通信、雷达隐身、生物医疗等领域增强光吸收提供了一种新的方法。

**关键词** 光栅; 光吸收增强; Ag 纳米凹坑; 硅光栅结构; 等离激元

中图分类号 O436

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202259.0524001

## Simulation of Ag Nano Pit-Silicon Grating Composite Microstructures Used for with Near Infrared Absorption Enhancement

Sun Guobin, Zhang Jin\*, Jiang Shilei, Yang Liu

School of Optoelectronic Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an, Shaanxi 710021, China

**Abstract** Aiming at the characteristics of two-dimensional silicon grating microstructure in the near infrared light absorption rate is extremely low, a micro-nano composite structure is proposed to enhance the near infrared absorption of Ag nano-pit and silicon grating by using isolators. The absorption rate of the composite structure in the wavelength range from 0.78  $\mu\text{m}$  to 2.5  $\mu\text{m}$  is studied based on the finite-difference time-domain method. The influence of the grating structure and Ag nano-pits on the light absorption efficiency is analyzed. The simulation results show that when Ag nano pits with a diameter of 0.1  $\mu\text{m}$  are embedded in the grating gap with a period of 0.2  $\mu\text{m}$  and a duty cycle of 0.5 and on the surface of the grid column, the absorptivity of the composite microstructure is above 23% in the near infrared wide band, and the average absorptivity is up to 52.3%, theoretically. When  $\text{Al}_2\text{O}_3$  dielectric layer is added on the grating surface, the absorption rate of wide band is above 41.3%, and the average absorption rate is increased to 65.1%. Finally, the absorption efficiency is improved in the wide wavelength range of near infrared, which provides a new method to enhance optical absorption in photodetector, solar cell, optical communication, radar stealth, biomedical and so on.

**Key words** gratings; enhanced optical absorption; Ag nano-pit; silicon grating structure; plasmon polariton

收稿日期: 2021-05-18; 修回日期: 2021-05-25; 录用日期: 2021-06-02

基金项目: 陕西省教育厅重点实验室科研计划(18JS053)、陕西省科技厅重点实验室项目(2013SZS14-P01)

通信作者: \*zhangjin@xatu.edu.cn

## 1 引言

目前,硅材料因为具备性能优越、稳定性高、原料丰富且安全无毒的优点,已成为光通信、光电探测、新能源等领域不可替代的材料,其中基于硅材料构建的光栅结构,一方面具有微型化、可灵活设计结构参数且直接在基底刻蚀的优势,另一方面稳定性高,可以代替光学薄膜应用于光学元件中,应用范围很广。然而硅是一种间接带隙材料<sup>[1]</sup>,可以通过限制硅在近红外的本征吸收,达到缩小硅材料在近红外波段内的应用范围的目的。因此对微纳硅基光学器件表面微结构进行一定的优化,从而提高该结构对近红外宽波段光吸收效率无疑是很有必要的。

多年来,研究人员为提高光吸收效率提出了不同的方法。其中,利用微纳尺度的结构设计为太阳能电池的发展提供了一种可行的方法,比如,高折射率材料光栅陷光,Wang等<sup>[2]</sup>利用高折射率材料光栅陷光的方法设计了带有上下不等周期圆锥形光栅,然而在 $1.1\ \mu\text{m}$ 以上的光吸收效率仍然几乎接近于0。近年来,利用金属纳米结构的表面等离子共振特性来实现光电转换效率的提高是微纳光学领域的主要研究热点之一,此共振特性将引起金属纳米粒子周围局域场的大幅增加,是一种提高吸收效率的有效方法。比如说级联型金属光栅结构<sup>[3]</sup>、Ag纳米粒子阵列结构-硅基底-Ag反射膜<sup>[4]</sup>、金属矩形纳米凹坑阵列与双层金属矩形纳米凹坑阵列<sup>[5]</sup>等结构,通过利用各种夹层式的复合金属结构使可见光不同波长范围内的吸收增强;也有学者利用金属的独特性质在红外波段实现了吸收增强的效果,如在近红外波段提出了金属银球-硅组合结构实现了46.3%的宽波段平均吸收率<sup>[6]</sup>,金属-绝缘体-金属夹层(MIM)式的宽带红外超表面吸收器<sup>[7]</sup>在 $6.3\sim 14.8\ \mu\text{m}$ 范围内平均吸收率超过90%,布拉格光栅/石墨烯/金属薄膜光学结构<sup>[8]</sup>实现了单层石墨烯的近红外光吸收率约增大36倍,但硅基光学器件在近红外波段实现吸收增强的报道却很少。因此,硅光栅微纳结构较低的材料成本和金属独特的物理特征,为近红外宽波段实现增强吸收效果,从而提高转换效率具有重要的研究意义。

本文提出了在微纳硅光栅间隙处嵌入金属Ag纳米凹坑结构,其特点是利用光栅结构的陷光性能以及金属Ag纳米凹坑的等离子激元效应,通过微结

构和金属Ag纳米凹坑之间的耦合作用增强入射光的吸收,解决了硅基器件在近红外几乎零吸收的问题。相比传统的结构,该微纳组合结构具有易于设计、结构简单、制备方便等优点,可广泛应用在光电探测器、太阳能电池、光通信等众多新兴领域中。

## 2 基本原理

### 2.1 表面等离子激元效应

一般情况下,当入射光照射到金属表面并与其自由电子气团的振动发生共振,即金属表面等离子共振(SPR)时,其共振过程中所产生的一种电磁模式称为表面等离子激元<sup>[9]</sup>(SPPs)。当入射光照射在金属表面时,只有当入射光频率与金属自由振荡粒子频率一致时,金属表面的电子吸收入射光的能量才会发生集体共振的现象。根据SPPs色散关系求解近似边界条件下的麦克斯韦方程得到<sup>[10]</sup>,

$$\mathbf{k}_{\text{sp}} = \mathbf{k}_0 \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m}}, \quad (1)$$

式中: $\epsilon_d$ 为电介质的介电常数; $\epsilon_m$ 为金属的介电常数; $\mathbf{k}_{\text{sp}}$ 为SPPs的动量; $\mathbf{k}_0$ 为自由空间内动量, $\mathbf{k}_0 = \omega/c$ , $\omega$ 表示角频率, $c$ 代表光速。一般情况下,对于相同的电磁波角频率 $\omega$ ,SPPs的波矢 $\mathbf{k}_{\text{sp}}$ 大于普通介质中的波矢 $\mathbf{k}_0$ ,故需要引入一些特殊的结构,用来达到波矢匹配,这样才能激发出SPPs模式,常用的激发方式有棱镜耦合、光栅耦合、缺陷散射耦合、近场耦合等<sup>[11]</sup>。

另外,由于SPPs的波矢 $\mathbf{k}_{\text{sp}}$ 大于普通介质中的波矢 $\mathbf{k}_0$ ,根据波矢的大小(即空间角频率) $k=2\pi/\lambda$ 则激发的SPPs波长要比其入射波长小,SPPs波长计算公式为

$$\lambda_{\text{sp}} = \frac{2\pi}{\mathbf{k}_{\text{sp}}} = \lambda_0 \sqrt{\frac{\epsilon_d + \epsilon_m}{\epsilon_d \epsilon_m}}. \quad (2)$$

本文利用金属Ag纳米凹坑散射耦合的方法,当入射光照射到缺陷或者凹坑时形成的波矢变化方式来实现普通介质中的波矢 $\mathbf{k}_0$ 与SPPs的波矢 $\mathbf{k}_{\text{sp}}$ 匹配,从而达到光吸收增强的效果。该等离子激元增强金属Ag纳米凹坑-硅栅组合结构是基于亚波长范围内的光学结构,最终将电磁场局限在该结构内部从而实现了光近场的增强作用。考虑到纳米半球凹坑的制备较易实现,故本文仅考虑半球凹坑阵列结构,下文所提纳米凹坑均特指纳米半球凹坑。

## 2.2 金属 Ag 纳米凹坑-硅栅组合微结构

图 1 是 Ag 纳米凹坑-硅栅组合微结构示意图, 图 1(a) 是在硅栅间隙嵌入 Ag 纳米凹坑组合微结构三维结构, 图 1(b) 是在硅栅间隙和栅柱表面均嵌入 Ag 纳米凹坑的三维结构, 图 1(c) 是在硅栅间隙嵌入的三维结构俯视图, 主要由具有陷光效应的硅光栅结构(高度为  $H$ , 矩形硅栅长宽均为  $L$ )、直径为  $D$  的

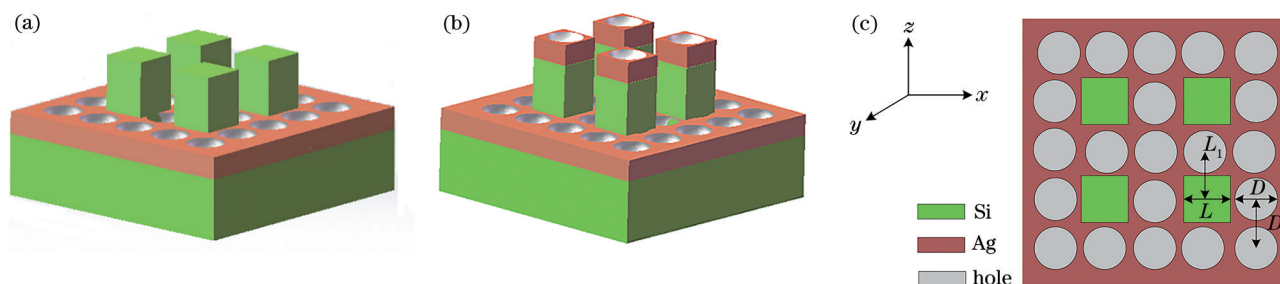


图 1 Ag 纳米凹坑-硅栅组合微结构示意图。(a) 硅栅间隙嵌入 Ag 纳米凹坑; (b) 硅栅间隙和栅柱表面均嵌入 Ag 纳米凹坑; (c) 硅栅间隙嵌入 Ag 纳米凹坑的三维结构俯视图

Fig. 1 Schematic of Ag nano pit-silicon grating composite microstructure. (a) Ag nano-pit embedded in silicon grating gap; (b) Ag nano-pit embedded in silicon grating gap and grating column surface; (c) three-dimensional structure view of Ag nano-pit embedded in silicon grating gap

本文采用数值模拟计算方法, 即时域有限差分法(FDTD), 可以在时域范围内直接求解麦克斯韦方程, 通过设定光栅和 Ag 粒子的结构参数, 设定自动近似满足多种复杂的边界条件, 最终解算出整个空间域内的数值解。使用该方法对硅基微纳结构中嵌入 Ag 纳米凹坑后提高组合结构的光吸收进行数值模拟, 因为在  $x$  方向和  $y$  方向的周期及占空比是各向同性的, 根据等效介质理论可知其与偏振状态无关, 所以在振动方向垂直于入射面的 TE 波( $s$  偏振)和平行于入射面的 TM 波( $p$  偏振)下的光吸收是完全一致的, 故本文将考虑一束 TE 平面波从光栅垂直入射至硅基底的情况。其中由于设计模型的周期性和对称性, 模拟区域是光栅的一个周期, 且在计算区域的上方和下方均采用吸收边界条件(完全匹配层, PML), 在  $x$  方向和  $y$  方向应用周期边界条件, 计算得到微纳组合结构的反射率  $R$  和透射率  $T$ , 从而进一步得到吸收率  $A=1-R-T$ 。

通过将具有特定功能的两种微/纳米结构单元进行有效地复合, 可以利用该微纳组合结构的优异性能以及多元化功能, 产生单个纳米结构所不具备的新颖性能, 在近红外宽波段实现明显的吸收增强。考虑到该组合结构的实验制备方法, 对该微纳 Ag 凹坑-硅栅结构的可加工性进行了论证, 可先用反应离子刻蚀制备硅光栅阵列结构, 然后利用自组装的方

具有激发等离子激元共振的 Ag 纳米凹坑阵列以及硅基底三部分组成, 圆凹坑间距  $D_1$  与圆凹坑直径  $D$  相等, 光栅周期为  $L+D$ 。其中这些矩形阵列光栅结构相互之间的间隙会形成陷光腔结构, 使得入射光在经过 Ag 纳米凹坑表面反射后进入光栅硅柱上, 以增加光程长度从而提高光吸收率。

法制作纳米球模板, 在微球模板上镀膜并同时将球去除后会嵌入形成这种金属薄膜上带有的纳米凹坑阵列<sup>[11]</sup>, 最终得到该微组合结构的特征形貌。

## 3 分析与讨论

作为对比, 本文分别模拟分析了以下三种情况: 纯硅光栅结构、硅光栅结构间隙嵌入 Ag 纳米凹坑、硅光栅结构间隙和栅柱表面均嵌入 Ag 纳米凹坑对光的吸收增强作用。计算该组合结构在近红外宽波段的吸收率, 同时考虑到纳米凹坑还会受到介质环境的影响, 故在组合结构表面增加  $Al_2O_3$  介质层, 一方面可以模拟得到该介质层对金属-硅栅组合结构的吸收率的影响, 另一方面可以作为折射率匹配材料减少光的反射损失。

### 3.1 硅光栅结构在近红外波段的光谱特性

裸硅材料因本身独特的光电特性, 在可见光波段应用范围很广泛, 如硅基太阳能电池已成为光伏发电的核心组件, 然而根据其材料特性及仿真得到裸硅材料在近红外波段吸收几乎接近于 0, 反射率大于 30%, 在波长大于  $1.0 \mu m$  时, 入射光进入硅材料后 65% 以上都被透射出去, 如图 2 所示, 此时光电转换效率极低, 考虑到硅光栅结构具有减反射的效果, 通过改变其结构参数如周期、占空比、高度等去获得裸硅材料无法实现的减反射效果, 图 3 展示

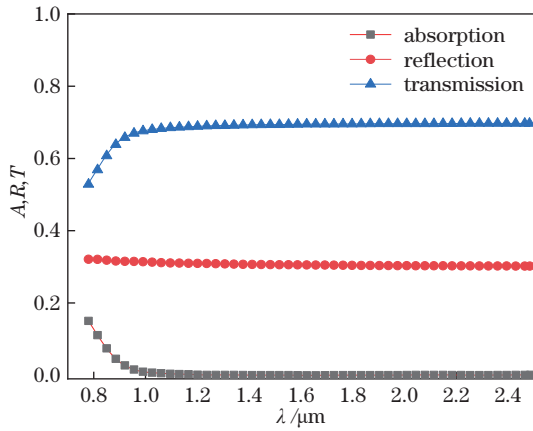


图2 裸硅材料在近红外波段的光谱特性

Fig. 2 Spectral characteristics of bare silicon materials in near infrared band

了在中心波长  $1.55 \mu\text{m}$  处,光栅结构高度  $H$  变化范围  $0.1 \sim 3 \mu\text{m}$ ,光栅周期  $(L+D)$  变化范围为  $0.1 \sim 3 \mu\text{m}$ , 占空比  $f=L/(L+D)=0.5$  时光栅结构的吸收率、反射率和透射率,根据计算结果可知吸收率在结构参数改变时有些许提高,从裸硅材料原本几乎没有吸收率的情况下最高提高到  $1.5\%$ 。图 4 展示了在近红外中心波长为  $1.55 \mu\text{m}$  处,当周期和高

度不变  $(L+D=1.5 \mu\text{m}, H=1 \mu\text{m})$  时,改变占空比  $f$  对光谱特性的影响,然而此时吸收率提高并不明显。

为了验证模拟仿真结果的准确性,这里引入了理论计算方法——严格耦合波分析(RCWA)方法<sup>[12]</sup>,对于二维周期性光栅结构,采用 RCWA 方法通过电磁波理论、基于麦克斯韦方程组将具有周期结构的光栅区的介电常数按照傅里叶级数展开,得到矩阵方程组进行求解分析,最终通过电磁场的边界条件进一步求出各衍射波振幅和衍射效率。对于二维衍射光栅,其反射、透射衍射效率可以表达为

$$\begin{cases} \eta_{Rmn} = \text{Re} \frac{\mathbf{k}_{1,zmn}}{k_0 n_i \cos \theta} R_{mn}^2 \\ \eta_{Tmn} = \text{Re} \frac{\mathbf{k}_{3,zmn}}{k_0 n_i \cos \theta} T_{mn}^2 \end{cases}, \quad (3)$$

式中:  $R_{mn}$ 、 $T_{mn}$  分别指反射波、透射波的振幅强度,可由本征矩阵方程组和边界条件求得;  $\mathbf{k}_{1,zmn}$  是在入射介质区的波矢量;  $\mathbf{k}_{3,zmn}$  是在基底透射区的波矢量;  $n_i$  表示入射区的介质折射率;入射光波与  $z$  轴之间的夹角为  $\theta$ 。

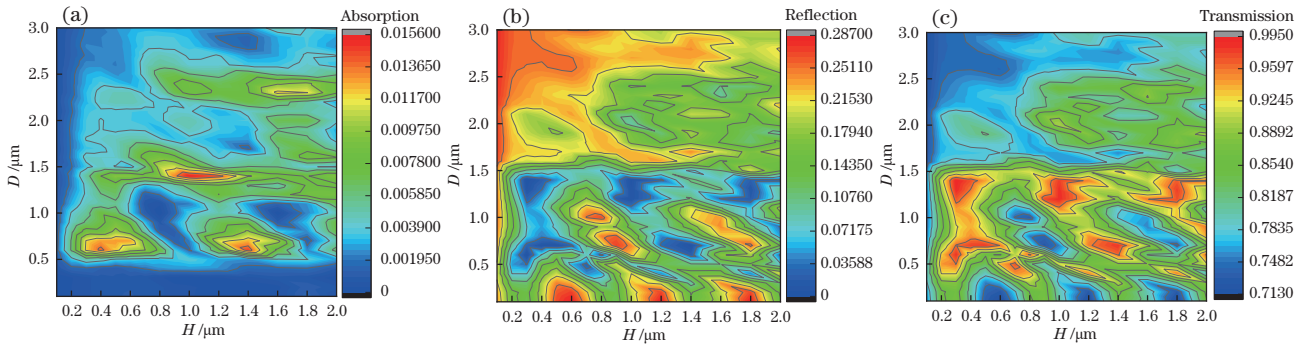


图3 周期、高度同时改变时硅栅结构的光谱特性。(a)吸收率;(b)反射率;(c)透射率

Fig. 3 Spectral characteristics of silicon grating structure when cycle and height change simultaneously. (a) Absorption; (b) reflection; (c) transmission

图 4 中虚线是根据理论 RCWA 方法同时利用 MATLAB 计算得到的理论分析结果,实线是利用 FDTD 仿真计算的结果,此时该二维光栅结构在占空比改变的情况下变化趋势与结果基本趋于一致。然而此时吸收率提高并不明显,实现了减反射的效果但也同时增加了透射,这种情况下并不能实现吸收增强,如何通过设计结构减少反射和透射来增强光吸收很关键,故本文提出了一种利用金属的等离激元效应实现金属凹坑-硅栅组合微结构的吸收方法。

### 3.2 硅光栅结构中嵌入 Ag 纳米凹坑时的近红外吸收特性

在硅光栅结构中嵌入 Ag 纳米凹坑时,构成的组合微结构的光谱特性主要受到硅光栅周期和 Ag 纳米凹坑直径的共同影响,考虑到制备工艺的可行性,在硅光栅间隙和栅柱表面均可能嵌入银凹坑结构,故分析了硅栅间隙加入 Ag 纳米凹坑和硅栅间隙与栅柱表面均嵌入 Ag 纳米凹坑两种组合结构的吸收特性。模拟计算的组合结构均固定光栅高度  $H=1 \mu\text{m}$ ,硅栅宽度  $L$  与 Ag 纳米凹坑直径  $D$  比例为

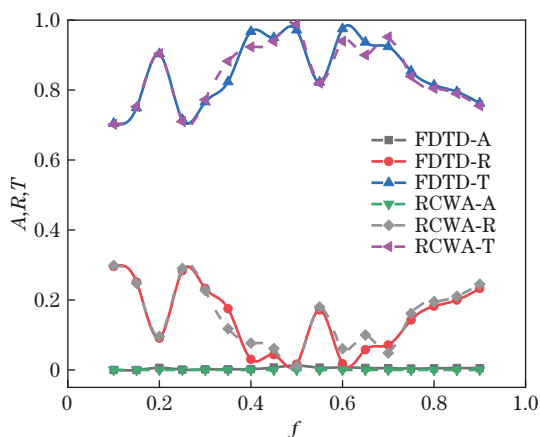


图4 硅栅结构占空比改变时的光谱特性

Fig. 4 Spectral characteristics of silicon grating structure when duty cycle changes

1:1(占空比为0.5),即在光栅间隙处仅存在一个直径为  $D$  的银凹坑阵列,此时金属 Ag 纳米凹坑在光栅间隙完全刻蚀,通过改变金属 Ag 纳米凹坑的直径 ( $D=0.1\sim 0.5\ \mu\text{m}$ ) 分析得到凹坑大小对组合微结构的吸收影响。图5展示了硅光栅结构、硅栅间隙嵌入 Ag 纳米凹坑、在硅栅间隙与栅柱表面均嵌

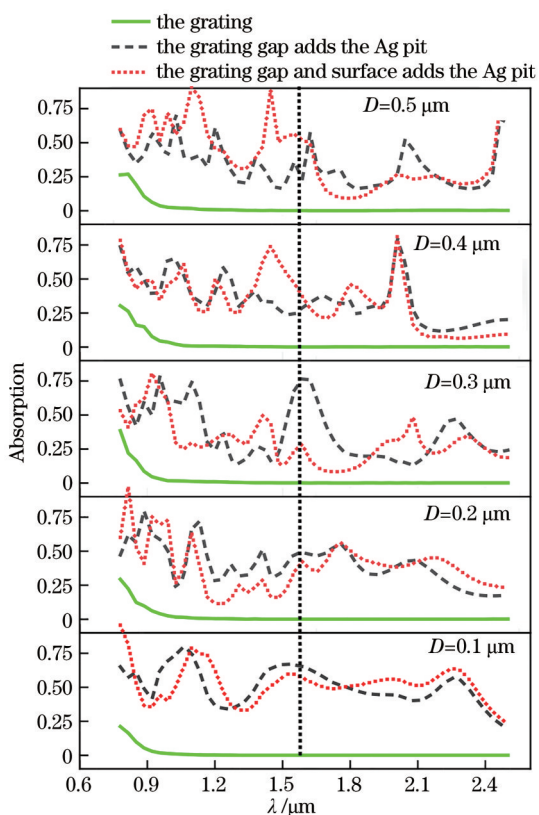


图5 嵌入 Ag 纳米凹坑的硅光栅组合结构近红外吸收率变化  
Fig. 5 Changes of near-infrared absorptivity of silicon grating embedded in Ag nano-pit

入 Ag 纳米凹坑三种情况下在近红外宽波段吸收率的变化。首先可以看出,硅光栅结构嵌入 Ag 纳米凹坑后,吸收率在整个  $0.78\sim 2.5\ \mu\text{m}$  宽波段均实现了明显的增强,且均达到了10%以上,此时平均吸收率均大于30%,当纳米凹坑直径为  $0.1\ \mu\text{m}$  时,整体吸收增强效果更明显,吸收率均在19.6%以上,平均吸收率可以达到50.7%;在硅栅间隙与栅柱表面均嵌入 Ag 纳米凹坑,当凹坑直径为  $0.1\ \mu\text{m}$  和  $0.5\ \mu\text{m}$  时增强吸收效果有一定的提升,最高平均吸收率可以达到52.3%,与未加 Ag 纳米凹坑硅栅微结构相比吸收率实现了明显的增加。当两种不同组合微结构的周期与直径改变时在不同波长处存在不同的峰值吸收率。从总体来看,当光栅间隙和栅柱表面均嵌入直径为  $0.1\ \mu\text{m}$  的 Ag 纳米凹坑时,该组合微结构在近红外宽波段的吸收率最好、最稳定,其中最低吸收率可达到23%,最高可达到95.6%,平均吸收率可实现52.3%的增强,最终在近红外宽波段范围内实现了明显的吸收增强效果。

两种组合结构出现吸收增强现象是由于在光栅微结构中嵌入 Ag 纳米凹坑,当受到光的激发时, Ag 纳米凹坑产生的表面等离激元对入射光场的局域增强作用使得自由电子和光子相互作用形成了电磁振荡,光场产生了局域增强作用,导致入射的电磁波能量局域在硅柱间隙附近, Ag 纳米凹坑和空气界面激发的表面等离激元在传播过程中直接被金属 Ag 纳米凹坑吸收,还有部分入射光直接透射在 Ag 纳米凹坑和硅界面间产生表面等离激元,而且在 Ag 纳米凹坑和硅界面处近红外入射光谱激发的表面等离激元波的部分光波长小于  $1.1\ \mu\text{m}$ , 如

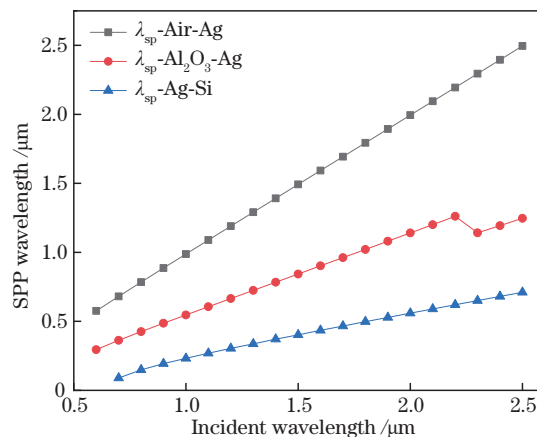


图6 硅光栅组合结构不同界面间激发的 SPP 波长  
Fig. 6 SPP wavelength excited by different interfaces of silicon grating composite structure

图 6 所示的硅光栅组合结构不同界面间激发的 SPP 波长与入射波长的对应曲线,即高于  $1.1 \mu\text{m}$  的红外入射光会有一部分激发表面等离子激元转化为小于  $1.1 \mu\text{m}$  的电磁波能量被硅吸收,因此,经 Ag 纳米凹坑直接透射在 Ag 纳米凹坑和硅界面间产生的表面等离子激元经界面分别纵向和横向传播至硅基底和硅柱侧面并透射吸收,从而整体提高组合微结构在近红外宽波段的增强吸收。

### 3.3 增加 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 介质层时硅光栅组合结构的近红外吸收特性

考虑到 Ag 纳米凹坑-硅栅组合结构也会受到光栅表面介质层的影响,故在光栅表面增加  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层,增加  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层后的  $x-z$  截面图如图 7 所示,其中  $\text{Al}_2\text{O}_3$  和硅在近红外波段的折射率分别为 1.75、3.5,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的折射率接近理想近红外减反射材料的折射率,具有较好的减反射效果,模拟计算了在硅栅间隙与栅柱表面均嵌入 Ag 纳米凹坑且直径  $D=0.1 \mu\text{m}$  下,在硅栅间隙与栅柱表面均覆盖高度为  $0.05 \mu\text{m}$ 、 $0.1 \mu\text{m}$ 、 $0.15 \mu\text{m}$  的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层时组合微结构的吸收率,如图 8 所示,该组合微结构受到  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层的影响,近红外吸收的吸收率发生了显著的变化,当介质高度为  $0.15 \mu\text{m}$  时产生的吸收效果更明显,该 Ag 纳米凹坑-硅栅组合结构在近红外宽波段范围内吸收率最小值提高到了 41.3% 以上,平均吸收率提高到 65.1%,在  $1.2\sim 2.5 \mu\text{m}$  波段吸收率均有不同程度的显著提升,在中心波长  $1.55 \mu\text{m}$  处吸收率可以达到 71.5%,实现了明显的吸收增强的效果,此时该 Ag 纳米凹坑-硅栅- $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质组合结构的吸收特性受到金属 Ag 纳米凹坑和  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层的共同影响,Ag 纳米凹坑产生的表面等离子

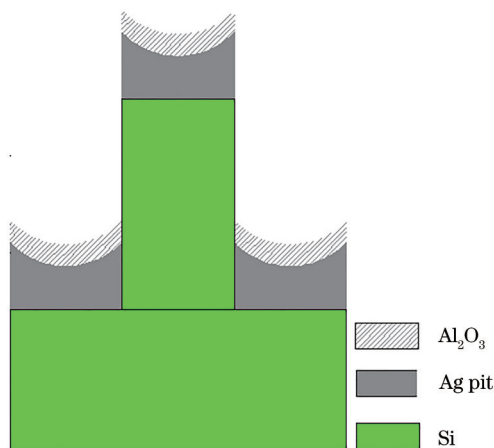


图 7 增加  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层的  $x-z$  截面图

Fig. 7  $x-z$  cross-sectional view of adding  $\text{Al}_2\text{O}_3$  dielectric layer

元对入射光场具有局域增强作用,而  $\text{Al}_2\text{O}_3$  作为折射率匹配材料减少了光的反射损失,导致光场的局域增强作用更加明显,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜在近红外波段透过率较高,近红外入射光在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  和 Ag 纳米凹坑界面处产生的表面等离子激元经界面分别通过纵向和横向传播至 Ag 纳米凹坑和硅柱侧面并透射吸收,而且还有部分入射光经  $\text{Al}_2\text{O}_3$  和 Ag 纳米凹坑直接透射后在 Ag 纳米凹坑和硅界面间也产生表面等离子激元传播至硅基底和硅柱侧面并透射吸收,最终使得组合微结构的整体吸收率得到显著提高。

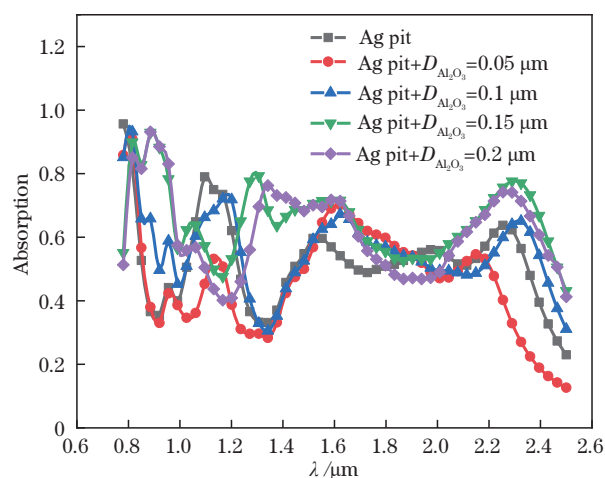


图 8  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质层对 Ag 纳米凹坑-硅栅组合结构近红外吸收率影响

Fig. 8 Effect of dielectric environment on near-infrared absorptivity of Ag nano pit-silicon grating composite structure

### 3.4 中心波长 $1.55 \mu\text{m}$ 时硅光栅组合微结构截面光强分布

图 9 展示了中心波长  $1.55 \mu\text{m}$  的光正入射进入硅光栅、硅栅间隙嵌入 Ag 纳米凹坑、硅栅间隙与栅柱表面均嵌入 Ag 纳米凹坑后在  $x-z$  截面的相对光强分布图(凹坑直径为  $0.1 \mu\text{m}$ )。从图 9(a)中可以看出,在光栅硅柱微结构上一部分光被硅光栅反射出去,一部分光则沿着光栅基底向下传播,在光栅内部几乎没有光强存在,基本被透射到空气中,故光栅微结构在近红外波段吸收率基本接近于零;在图 9(b)和 9(c)中,光强在 Ag 纳米凹坑处明显增强,这是由于金属 Ag 纳米凹坑与硅界面处激发的表面等离子激元效应引起的,当入射光照射到 Ag 纳米凹坑的表面时,一部分入射光通过激发的表面等离子激元经界面纵向传播至 Ag 纳米凹坑薄膜内部并透射吸收,一部分入射光经 Ag 纳米凹坑直接透射,而透

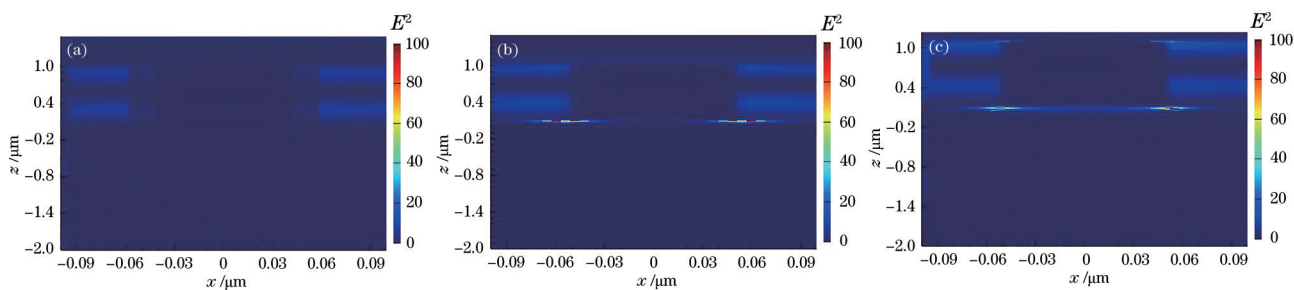


图9 不同结构表面的相对光强分布。(a)硅光栅;(b)硅栅间隙嵌入Ag纳米凹坑;(c)硅栅间隙与栅柱表面均嵌入Ag纳米凹坑  
Fig.9 Intensity distribution on different structure surfaces. (a) Silicon grating gap; (b) Ag nano-pit embedded in silicon grating gap; (c) Ag nano-pit embedded in silicon grating gap and column surface

射光在纳米凹坑和硅界面间会产生小于  $1.1 \mu\text{m}$  的表面等离子激元波一部分经界面横向传播至硅柱侧面并透射吸收,一部分纵向传播至硅基底透射吸收,因此光强在Ag纳米凹坑与硅基底和硅柱侧面处均产生有效的吸收增强,存在一定的能量吸收到硅材料内部,实现了整个组合微结构的吸收增强。

## 4 结 论

本文提出了一种增强金属Ag纳米凹坑-硅栅近红外宽波段光吸收的组合结构,其中利用硅光栅微结构的陷光特性、金属Ag纳米凹坑的表面等离子激元共振特性,将两种结构结合弥补了硅器件光吸收能力的不足,从而增强了入射光吸收。基于时域有限差分法利用FDTD软件模拟研究了Ag纳米凹坑-硅栅组合结构形式的近红外吸收率,分析了光栅结构与Ag纳米凹坑对光吸收效率的影响。模拟研究表明,当硅栅宽度 $L$ 与Ag纳米凹坑直径 $D$ 比例为1:1,即占空比为0.5,且在栅柱间隙与硅柱表面均嵌入直径为 $0.1 \mu\text{m}$ 的Ag纳米凹坑时,该组合微结构在近红外宽波段的吸收率最好、最稳定,最低吸收率可达到23%,最高可达到95.6%,平均吸收率可实现52.3%的增强;同时增加 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 介质层,平均吸收率提高了12.8%,在波长 $1.55 \mu\text{m}$ 处吸收率可以达到71.5%。此时该金属Ag纳米凹坑-硅栅以及介质的组合结构良好的吸收性能主要取决于硅栅间隙中嵌入的金属纳米凹坑和匹配介质层,在波矢与频率相匹配的前提下,受表面等离子激元的激发,最终使组合微结构在近红外波段减少了透过损失及反射损耗,吸收率得到了显著的提高。利用简单的组合微结构可以提高近红外宽光谱吸收率,对于光学吸收器件和光敏器件的设计有很大的应用价值。

## 参 考 文 献

- [1] Liu Y L. Enhanced infrared absorption of Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> quantum well APD[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2018.  
刘燕玲. Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>量子阱APD增强红外吸收的研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2018.
- [2] Wang K X Z, Yu Z F, Liu V, et al. Nearly total solar absorption in ultrathin nanostructured iron oxide for efficient photoelectrochemical water splitting[J]. ACS Photonics, 2014, 1(3): 235-240.
- [3] Wang D, Liu X, Yang Y B, et al. Broadband absorption enhancement of organic solar cells based on cascaded metallic gratings[J]. Journal of Optoelectronics·Laser, 2019, 30(6): 580-587.  
王丹, 刘欣, 杨毅彪, 等. 基于级联金属光栅结构的有机太阳能电池宽谱吸收增强[J]. 光电子·激光, 2019, 30(6): 580-587.
- [4] Jiang X, Su W A, Yin C. Enhancement of absorption of solar cells by plasmon resonance based on Ag nanoparticle[J]. Electro-Optic Technology Application, 2020, 35(1): 20-26, 69.  
蒋旭, 苏未安, 殷超. Ag纳米粒子等离子体共振增强太阳能电池吸收[J]. 光电技术应用, 2020, 35(1): 20-26, 69.
- [5] Yuan L. The properties of surface plasmon resonance in metal nanohole arrays and potential applications [D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2014.  
袁力. 金属纳米孔阵列的表面等离子体性质和应用[D]. 西安: 西北工业大学, 2014.
- [6] Yang L, Jiang S L, Sun G B, et al. Plasmonic enhanced near-infrared absorption of metal-silicon composite microstructure[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(21): 2124003.  
杨柳, 蒋世磊, 孙国斌, 等. 等离子激元增强金属-硅组

- 合微结构近红外吸收[J]. 光学学报, 2020, 40(21): 2124003.
- [7] Luo Y. The research of design of long wavelength infrared metasurface absorber based on sandwich structure[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2019.
- 罗奕. 基于夹层结构的长波红外超表面吸收器设计研究[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2019.
- [8] Li Z W, Lu H, Li Y W, et al. Near-infrared light absorption enhancement in graphene induced by the Tamm state in optical thin films[J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(1): 0131001.
- 黎志文, 陆华, 李扬武, 等. 光学薄膜塔姆态诱导石墨烯近红外光吸收增强[J]. 光学学报, 2019, 39(1): 0131001.
- [9] Li Q. Research on the super absorption of nano structure based on surface plasmons[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2018.
- 李强. 基于表面等离子体激元的纳米结构超吸收特性研究[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2018.
- [10] Wang Y. Research and application of light enhanced transmission of metal nanostructure based on surface plasmons[D]. Lanzhou: Northwest Normal University, 2020.
- 王月. 基于表面等离子激元的金属纳米结构光增强透射研究及应用[D]. 兰州: 西北师范大学, 2020.
- [11] Wang K. Study on enhancing light absorption of polymer-based organic thin film solar cells by employing micro-nano structure[D]. Quanzhou: Huaqiao University, 2019.
- 王康. 基于微纳米结构增强有机聚合物薄膜太阳能电池光吸收的研究[D]. 泉州: 华侨大学, 2019.
- [12] Yan S H. Design of diffractive micro-optics[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2011: 199-206.
- 颜树华. 衍射微光学设计[M]. 北京: 国防工业出版社, 2011: 199-206.