

激光与光电子学进展

基于局域表面等离子激元效应的石墨烯光电探测器光吸收性能的研究

徐琦霖¹, 孙科学^{1,2*}¹南京邮电大学电子与光学工程学院、柔性电子(未来技术)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 为了解决硅纳米线光电探测器光吸收率较低的问题,构造了一种六边形硅纳米线结构的光电探测器,并在该结构上覆盖零带隙的石墨烯,同时加入 Au 光栅,最后利用 COMSOL 软件对器件结构进行建模分析。研究表明,在 0.5~1.5 μm 光波段范围内,石墨烯的覆盖和 Au 光栅的加入能有效提升器件的光吸收性能,并且石墨烯与 Au 光栅的厚度均对该器件性能有所影响。

关键词 纳米线光电探测器; 光吸收率; 石墨烯; LSPR 效应; COMSOL 软件

中图分类号 O436

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP230761

Light Absorption Performance of Graphene Photodetector Based on Localized Surface Plasmon Resonance Effect

Xu Qilin¹, Sun Kexue^{1,2*}¹College of Electronic and Optical Engineering & College of Flexible Electronics (Future Technology), Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, Jiangsu, China;²Nation and Local Joint Engineering Laboratory of RF Integration & Micro-Assembly Technology, Nanjing 210023, Jiangsu, China

Abstract In order to solve the problem of low light absorption of silicon nanowire photodetector, we construct a hexagonal silicon nanowire structure of photodetector. We cover the structure with zero-bandgap graphene and add Au grating at the same time, and finally use COMSOL software to model and analyze the structure. It is shown that in the optical band range between 0.5 μm and 1.5 μm , the graphene coverage and the Au grating can effectively enhance the light absorption performance of the device. What is more, the thickness of both graphene and Au grating has an effect on the performance of the device.

Key words nanowire photodetectors; light absorption; graphene; LSPR effect; COMSOL software

1 引言

光电探测器是将光信号转换为电信号的重要器件^[1]。现代纳米技术的发展使得零维材料纳米点 (quantum dot)、一维材料纳米线 (nanowire) 以及一维材料纳米棒 (nanorod)^[2] 等被广泛应用在光电探测器一类的设备中。但纳米结构的光电探测器,因其本身的条件,通常面临着光吸收能力有限的问题。纳米阵

列结构^[3]将单个纳米结构排成阵列,通过增加纳米结构个数来增强纳米器件性能。

二维材料石墨烯具有优良的光学性能和电学性能,其光吸收波段宽、载流子迁移率高、功函数可调^[4]。对于以硅纳米线为代表的纳米器件而言,通过引入石墨烯层,能够增强器件的光吸收性能^[5],从而在一定程度上提升器件的光电转换效率。但石墨烯层对器件光吸收性能的改善是有一定局限的,原因在于单层石墨

收稿日期: 2023-03-02; 修回日期: 2023-03-25; 录用日期: 2023-04-03; 网络首发日期: 2023-04-13

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

通信作者: *sunkx@njupt.edu.cn

烯在可见光波段的光吸收率仅有 2.3%^[6]。利用局域表面等离子激元(LSPR)^[7-8]可以进一步提升光电探测器的性能。LSPR是表面等离子激元效应的一种,是由金属中电子与入射光光子发生集体振荡产生的,能够在金属表面与介质交界面上实现电磁场的增强^[9]。常用来激发 LSPR 效应的金属有 Au、Ag、Al 等^[10-11]。

2018年,Oumekloul等^[12]将制成的六边形 Au 纳米线埋在电介质中,以横磁(TM)波激发 Au/电介质界面的 LSPR 效应,从而提高传感器的灵敏度和性能。2019年,Li等^[13]将 Au 光栅与石墨烯光电探测器结合,利用金属层的 LSPR 效应和光栅凹槽中的法布里-珀罗共振的耦合,大大提高了探测器的光吸收率。2020年,Wang等^[14]将 Au 光栅与 Ge 纳米线结合形成 Ge 基等离子体光电探测器,利用 Au/Ge 界面产生的等离子体共振现象增强了器件在红外波段的光吸收性能。

本文构造了一种六边形硅纳米线结构的光电探测器,利用石墨烯的宽光谱吸收效应和纳米金属光栅的 LSPR 效应,增强了该光电探测器的光吸收能力。研究表明,石墨烯与 Au 光栅的厚度对器件的吸收能力影响较大。器件模型的建立与结果的计算均通过 COMSOL 软件进行。

2 器件结构与仿真

构建的六边形硅纳米线光电探测器的三维(3D)模型结构如图 1(a)所示,长方体部分为二氧化硅,六边形棱柱部分为硅纳米线。由于硅纳米线的长度比直径大得多,从 COMSOL 软件的计算量来看,该 3D 模型在计算过程中占用的资源多、计算时间过长,因此,将该 3D 模型简化为图 1(b)的二维(2D)模型。

在研究过程中,需要构建 3 组模型,其示意图如图 2 所示。3 组模型中标注出了空气、Si、SiO₂、石墨烯和 Au 光栅。所提模型利用 COMSOL 软件中的电磁波/频域(ewfd)模块构建,其中入射光通过端口(port)

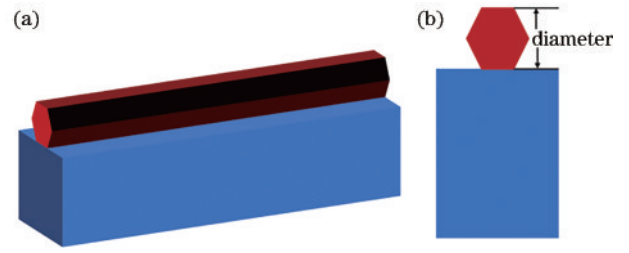


图 1 硅纳米线模型。(a) 3D 模型;(b)简化的 2D 模型
Fig. 1 Model of Si nanowires. (a) 3D model; (b) simplified 2D model

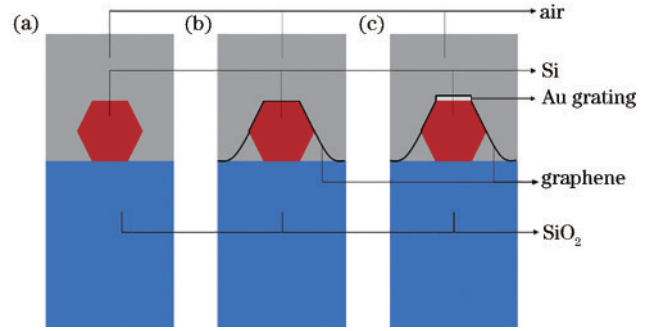


图 2 2D 模型示意图。(a)硅纳米线;(b)覆盖石墨烯;(c)加入 Au 光栅

Fig. 2 Schematic diagram of 2D model. (a) Si nanowire; (b) covering graphene; (c) adding Au grating

边界条件分别在上下边界加入,入射光设置为 TM 偏振光;模型两侧边界设置为周期性条件(PBC)以仿真硅纳米线阵列。查阅文献后发现,由于石墨烯厚度较薄(单层石墨烯厚度仅为 0.34 nm),在进行仿真时可以采用过渡边界条件(TBC)来代替石墨烯材料的物理建模。

2009年,Bruna等^[15]通过数学计算得到石墨烯在可见光范围内的复折射率,并将计算结果与实验结果进行比较,验证了计算结果的准确性。2013年,Andryieuski等^[16]研究了石墨烯的电导率,并将其描述为

$$\begin{cases} \sigma_s = \sigma_s^{\text{int,ra}} + \sigma_s^{\text{int,er}} \\ \sigma_s^{\text{int,ra}} = 2k_B T e^2 / (\pi \hbar^2) \cdot \ln \left\{ 2 \cosh \left[E_F / (2k_B T) \right] \right\} \cdot i / (\omega + i\tau^{-1}) \\ \sigma_s^{\text{int,er}} = \frac{e^2}{4\hbar} \cdot \left[H(\omega/2) + i \frac{4\omega}{\pi} \cdot \int_0^\infty \frac{H(\Omega) - H(\omega/2)}{\omega^2 - 4\Omega^2} d\Omega \right] \end{cases}, \quad (1)$$

式中: σ_s 为有效电导率; $\sigma_s^{\text{int,ra}}$ 为电子带内跃迁贡献的电导率; $\sigma_s^{\text{int,er}}$ 为电子带间跃迁贡献的电导率; k_B 为玻尔兹曼常数; T 为温度; \hbar 为约化普朗克常数; E_F 为费米能级; ω 为电磁波的角频率; τ 为电子弛豫时间; $H(\Omega) = \sinh\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right) / \left[\cosh\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right) + \cosh\left(\frac{E_F}{k_B T}\right) \right]$, Ω 为角频率。考虑到涉及的波长范围,在 COMSOL 软件中利用 TBC 对石墨烯进行建模时,将式(1)作为石墨烯电导率模型。

3 仿真结果分析与讨论

3.1 石墨烯对光电探测器性能的影响

首先,研究无石墨烯覆盖的硅纳米线光电探测器的光吸收能力。所建立的模型如图 2(a)所示,从上到下依次是空气、Si、SiO₂。当硅纳米线的直径以 10 nm 的步长从 80 nm 增加到 140 nm 时,加入波长范围为 0.5~1.5 μm 的光照条件,得到器件的吸收率曲线如图 3(a)所示。此时,分析石墨烯对器件光吸收能力的

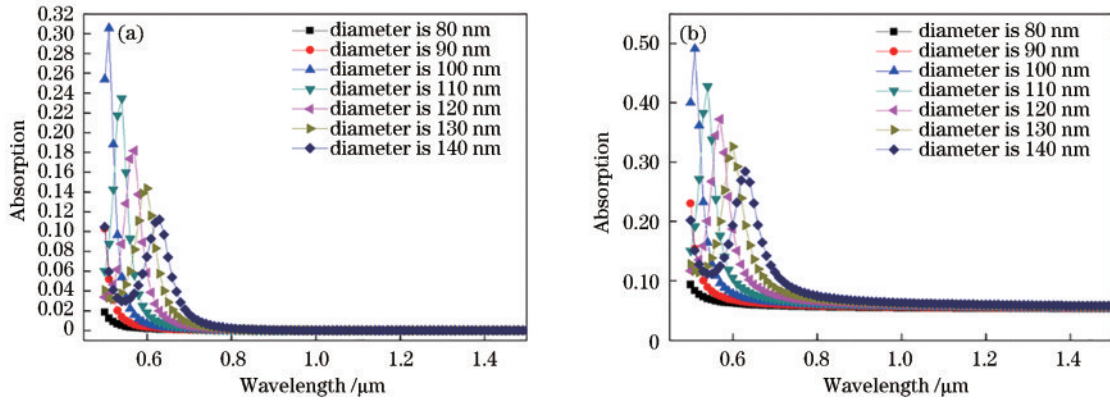


图3 器件光吸收率曲线。(a)无石墨烯覆盖;(b)有石墨烯覆盖

Fig. 3 Light absorption curves of device. (a) No covering graphene; (b) covering graphene

影响,保持其他条件不变,仅在硅纳米线上加入10层厚(3.40 nm)的石墨烯,所建立的模型如图2(b)所示,从上到下依次是空气、石墨烯、Si、SiO₂。计算得到该器件的吸收率曲线如图3(b)所示。

图3(a)中,器件在0.50~0.75 μm的较短波长范围内表现出光吸收能力,但在其余大部分波长范围内的吸收率为零。而加入石墨烯后[图3(b)],器件的吸收率较无石墨烯覆盖时得到极大的提高。直径为100 nm的器件的最高吸收率从约0.31提高至约0.50,提高了近60%。在无石墨烯覆盖的器件吸收率为零的光波长范围内,加入石墨烯后器件的光吸收率提高至约0.05,这充分说明在0.5~1.5 μm光波段范围内,石墨烯的加入有利于光电探测器光吸收能力的增强。

为了更加直观地看出石墨烯的加入对器件光吸收能力的影响,单独画出直径为120 nm的硅纳米线在两种情况下的吸收率曲线,如图4所示。可以看出,器件在0.5~1.5 μm波段范围内的光吸收率都有了极大的提高,尤其是在波峰处,器件的吸收率从约0.18提高

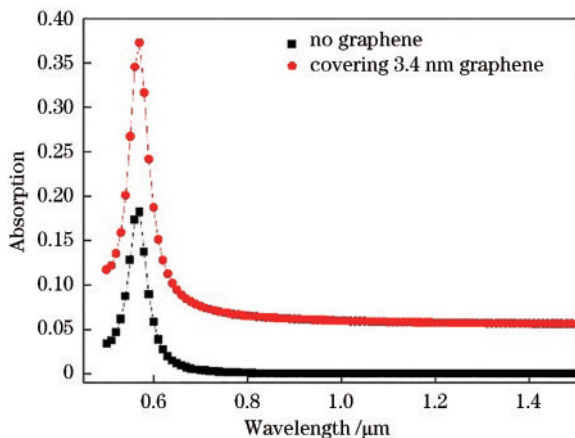


图4 直径为120 nm的硅纳米线加入石墨烯前后吸收率曲线对比

Fig. 4 Comparison of absorption curves of silicon nanowires with diameter of 120 nm with or without graphene

到约0.37,提高了近一倍。

3.2 石墨烯厚度对光电探测器性能的影响

石墨烯的厚度对光电探测器性能影响较大^[17-18]。以直径为120 nm的硅纳米线光电探测器为研究对象,研究6种不同石墨烯厚度对器件光吸收率的影响。单层石墨烯厚度约为0.34 nm,将这6种石墨烯厚度分别设置为0.34、1.00、2.00、3.40、4.00、5.00 nm,仿真得到的器件光吸收率曲线如图5所示。

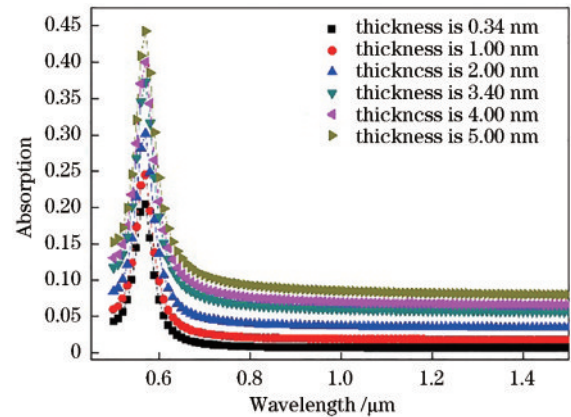


图5 不同石墨烯厚度下器件的吸收率曲线

Fig. 5 Absorption curves of device with different graphene thicknesses

分析图5可知,石墨烯厚度越厚,器件吸收率越高,但吸收峰的位置几乎没有变化,这与El等^[19]的实验结果一致。在El等的实验中,他们将不同厚度的石墨烯覆盖在SiO₂/AuNPs上,结果表明该器件的吸收率随着石墨烯厚度的增加而提高。

与石墨烯厚度从0.34 nm增加到3.40 nm所引起的器件吸收率增幅相比,石墨烯厚度从3.40 nm增加到5.00 nm时,器件吸收率增幅明显降低。由于石墨烯的性质与石墨烯的层数密切相关,一般认为层数超过10的石墨烯性质将会发生极大的变化,因此将10层及以上厚度的石墨烯称为石墨^[20],这是该现象出现的主要原因。另外,在大于0.75 μm的光波段范围内,即

使覆盖 5.00 nm 厚的石墨烯,器件吸收率也仅在 0.1 左右,与吸收峰处约 0.45 的吸收率差距较大,这意味着器件的光吸收能力仅局限在一个狭窄的光波段范围内,光电探测器的性能还需进一步提升。

3.3 Au 光栅厚度对光电探测器性能的影响

为了进一步提升器件的性能,将 Au 光栅引入有石墨烯覆盖的硅纳米线光电探测器中。当一定波长的光入射时,金属与介质之间能够引发 LSPR 效应,这种效应能够将光入射引发的电磁场局限在 Au/介质界面

上,从而使器件的光吸收能力得到增强。因此,建立了如图 2(c)所示的仿真模型。

该模型从上到下依次为空气、石墨烯、Au 光栅、Si、SiO₂。其中:石墨烯为 10 层厚,即 3.40 nm;Au 光栅用 Au 的 Drude-Lorentz 模型进行描述,具体参数参考文献[21];硅纳米线直径仍然以步长 10 nm 从 80 nm 增加到 140 nm。为研究 Au 光栅的厚度对器件光吸收性能的影响,将 Au 光栅厚度分别设置为 5 nm 和 10 nm,仿真得到两组光吸收率曲线,如图 6 所示。

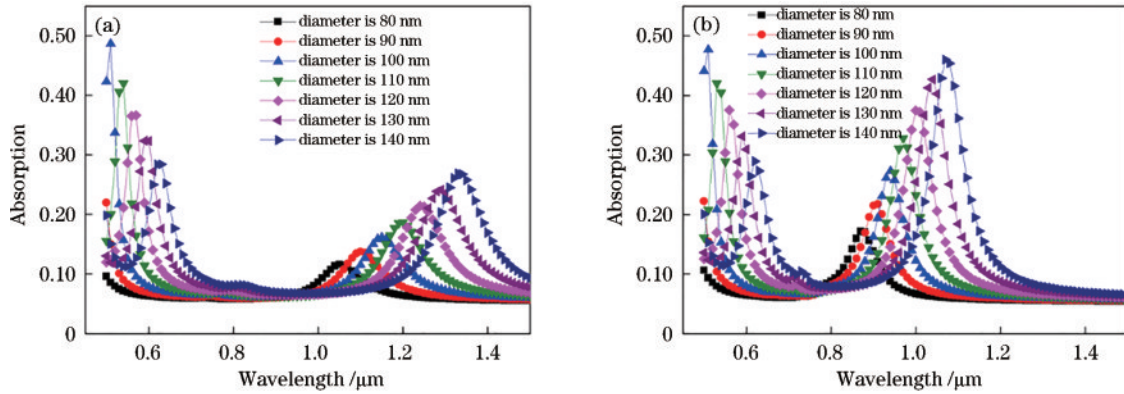


图 6 不同 Au 光栅厚度器件的吸收率曲线图。(a) Au 光栅厚度为 5 nm; (b) Au 光栅厚度为 10 nm

Fig. 6 Curves of device absorption with different thicknesses of Au grating. (a) Au grating thickness is 5 nm; (b) Au grating thickness is 10 nm

总体而言,图 6 的光吸收率曲线与图 3(b)对比明显,在未加入 Au 光栅时,1.0 μm 左右的光波段器件的光吸收率比较低,没有出现吸收峰,而 Au 光栅加入使吸收率曲线在原本平缓处出现了明显的吸收峰。

图 6(a)为当 Au 光栅厚度为 5 nm 时,不同直径的硅纳米线光电探测器的吸收率。当硅纳米线直径从 80 nm 增加到 140 nm 时,由 LSPR 效应引起的吸收峰所对应的波长变长,出现红移现象,且吸收率略有提高,直径为 140 nm 时吸收率峰值提高到近 0.30。图 6(b)为同等情况下,当 Au 光栅厚度为 10 nm 时器件的吸收率曲线。与前者相比,当 Au 光栅厚度为 10 nm 时,器件的光吸收能力更强,直径为 140 nm 的器件吸收峰值接近 0.50,但该吸收峰所对应的波长较前者更短,发生蓝移现象,整条吸收率曲线变得更“高”更“瘦”。

图 7 为在硅纳米线直径为 120 nm 情况下,分别加入 5、10 nm 的 Au 光栅后,由 LSPR 效应引起的吸收峰峰值处的电场分布图。从图 7 中可以明显地看出电场强度在 Au 光栅附近变大,形成了强烈的 LSPR 效应,从而使器件的吸收率得到明显提升。图 7(a)中电场强度最大值与最小值分别为 3.02×10^5 , 1.14×10^3 V/m, 而图 7(b)中电场强度最大值和最小值分别为 3.8×10^5 , 6.3×10^3 V/m, 因此,当 Au 光栅厚度为 10 nm 时,周围电场的电场强度比 Au 光栅厚度为 5 nm 时强很多,

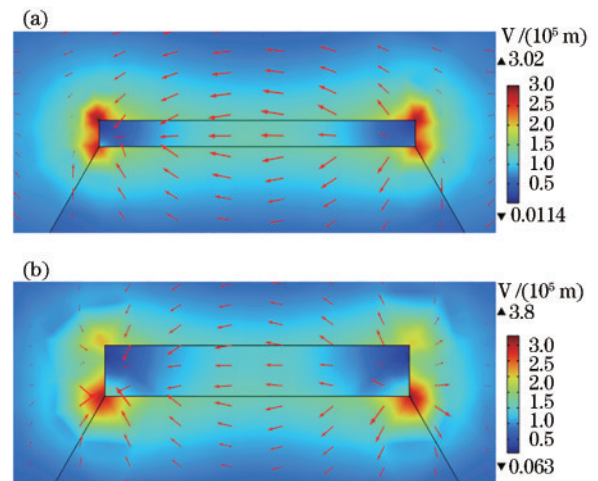


图 7 直径为 120 nm 的器件在吸收率曲线峰值处的电场强度图。(a) Au 光栅厚度为 5 nm; (b) Au 光栅厚度为 10 nm

Fig. 7 Electric field intensity at the peak of absorption curves for devices with a diameter of 120 nm. (a) Au grating thickness is 5 nm; (b) Au grating thickness is 10 nm

推断光吸收能力也会强很多,这与吸收率曲线上反映的现象一致。

3.4 石墨烯厚度对光电探测器中 LSPR 效应的影响

由于 LSPR 效应是由电子的集体共振产生的电磁场增强,它与周围介质的折射率密切相关,而相关研究表明,石墨烯的折射率会随着波长的变化而变化^[20]。因此,研究不同石墨烯厚度对加入 Au 光栅后的光电探

测器光吸收能力的影响。

这里,石墨烯厚度取3个典型值,即单层(0.34 nm)、1.00 nm、10层(3.40 nm),仿真结果如图8所示。考虑加入 Au 光栅后引起吸收率增强的波段,由图8可知,在 Au 光栅上覆盖的石墨烯越厚,器件的峰值吸收率越低,但出现的吸收峰越宽。Au 光栅厚度为 5 nm 和

10 nm 时,吸收率曲线的峰值均出现在石墨烯厚度为 0.34 nm 的器件,即最薄的器件上面。这表明石墨烯厚度对器件的 LSPR 效应有一定影响,从而对器件的光吸收能力有一定的影响。虽然吸收峰的峰值出现在由最薄的石墨烯覆盖的器件上,但是对于器件整体吸收率而言,更厚的石墨烯覆盖的器件性能是更优的。

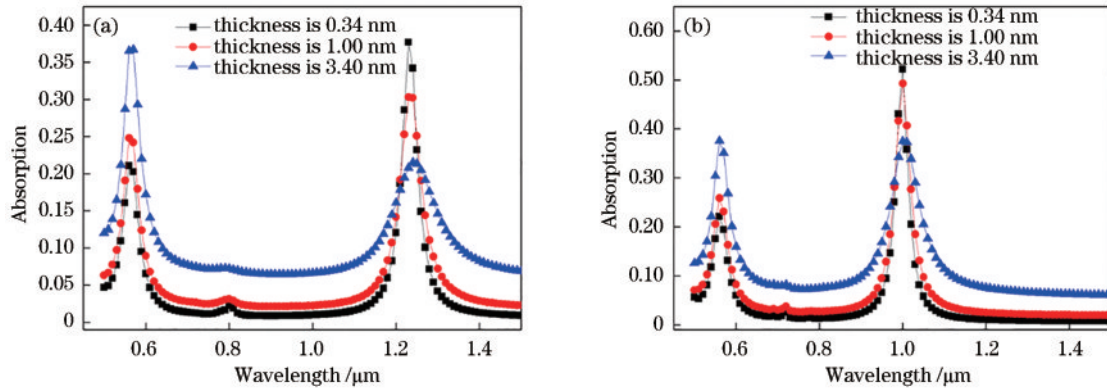


图8 不同石墨烯厚度以及不同 Au 光栅厚度下器件吸收率曲线图。(a) Au 光栅厚度为 5 nm; (b) Au 光栅厚度为 10 nm

Fig. 8 Curves of device absorption with different thicknesses of graphene and Au grating. (a) Au grating thickness is 5 nm; (b) Au grating thickness is 10 nm

4 结 论

研究了一种六边形硅纳米线结构的光电探测器,借助 COMSOL 软件建立了 3 类模型,并对 3 类模型的计算结果进行了对比分析,提出了能够提升光电探测器光吸收能力的具体措施。研究表明,通过加入石墨烯来提高硅纳米线器件的光吸收率是一个可行的方案。对于不同直径的硅纳米线光电探测器,石墨烯厚度最大时器件的光吸收率提高的最多,但该方案存在性能提升有限的缺陷。为进一步提升器件的性能,在加入石墨烯的光电探测器中再加入 Au 光栅,通过引入的 Au 光栅与介质表面激发的 LSPR 效应,极大地提高了器件的光吸收率。具体而言, Au 光栅越厚,由 LSPR 效应引起的吸收率的提高效果越好,但吸收峰峰值对应的波长会有所蓝移。另外,石墨烯的厚度对 LSPR 效应有一定的影响,当固定 Au 光栅厚度不变时,器件上覆盖的石墨烯越薄,由 LSPR 效应引起的器件光吸收率的峰值越高。

本文的不足之处在于仅对六边形的硅纳米线光电探测器的光吸收性能进行了研究,并且只研究了 Au 光栅对器件光吸收性能的提升,并未涉及到其他能引起 LSPR 效应的金属。这些内容均有待进一步的研究。

参 考 文 献

- [1] Chen H Y, Su L X, Jiang M M, et al. Highly desirable photodetectors derived from versatile plasmonic nanostructures[J]. *Advanced Functional Materials*, 2017, 27(45): 1704181.
- [2] Li Z Y, Allen J, Allen M, et al. Review on III-V

semiconductor single nanowire-based room temperature infrared photodetectors[J]. *Materials*, 2020, 13(6): 1400.

- [3] Zuo X R, Li Z Y, Wong W W, et al. Design of InAs nanosheet arrays with ultrawide polarization-independent high absorption for infrared photodetection[J]. *Applied Physics Letters*, 2022, 120(7): 071109.
- [4] Avouris P. Graphene: electronic and photonic properties and devices[J]. *Nano Letters*, 2010, 10(11): 4285-4294.
- [5] Jiang H, Wei J X, Sun F Y, et al. Enhanced photogating effect in graphene photodetectors via potential fluctuation engineering[J]. *ACS Nano*, 2022, 16(3): 4458-4466.
- [6] Nair R R, Blake P, Grigorenko A N, et al. Fine structure constant defines visual transparency of graphene [J]. *Science*, 2008, 320(5881): 1308.
- [7] Zhou H, Zhang L, Tong J C, et al. Surface plasmon enhanced GeSn photodetectors operating at 2 μm[J]. *Optics Express*, 2021, 29(6): 8498-8509.
- [8] 王军, 何美誉, 韩兴伟, 等. 局域场增强石墨烯近红外光电探测器(特邀)[J]. *红外与激光工程*, 2022, 51(1): 20210823.
Wang J, He M Y, Han X W, et al. Localized field enhanced graphene-based near-infrared photodetector (Invited)[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2022, 51(1): 20210823.
- [9] 吴培培, 付永启, 杨俊. 基于表面等离子激元的石墨烯光电探测器研究进展[J]. *激光与光电子学进展*, 2021, 58(7): 0700002.
Wu P P, Fu Y Q, Yang J. Graphene photodetectors based on surface plasmons[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2021, 58(7): 0700002.
- [10] Takemura K. Surface plasmon resonance (SPR) - and localized SPR (LSPR) -based virus sensing systems: optical vibration of nano- and micro-metallic materials for

- the development of next-generation virus detection technology[J]. *Biosensors*, 2021, 11(8): 250.
- [11] Jian C C, Zhang J Q, He W M, et al. Au-Al intermetallic compounds: a series of more efficient LSPR materials for hot carriers-based applications than noble metal Au[J]. *Nano Energy*, 2021, 82: 105763.
- [12] Oumekloul Z, Lahlali S, Mir A, et al. Evolution of LSPR of gold nanowire chain embedded in dielectric multilayers[J]. *Optical Materials*, 2018, 86: 343-351.
- [13] Li J F, Zhao C, Liu B Y, et al. Metamaterial grating-integrated graphene photodetector with broadband high responsivity[J]. *Applied Surface Science*, 2019, 473: 633-640.
- [14] Wang L M, Zhang Y C, Wang B, et al. High-performance infrared Ge-based plasmonic photodetector enhanced by dual absorption mechanism[J]. *APL Photonics*, 2020, 5(9): 096104.
- [15] Bruna M, Borini S. Optical constants of graphene layers in the visible range[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(3): 031901.
- [16] Andryieuski A, Lavrinenko A V. Graphene metamaterials based tunable terahertz absorber: effective surface conductivity approach[J]. *Optics Express*, 2013, 21(7): 9144-9155.
- [17] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
- [18] Yu Y J, Zhao Y, Ryu S, et al. Tuning the graphene work function by electric field effect[J]. *Nano Letters*, 2009, 9(10): 3430-3434.
- [19] El barghouti M, Akjouj A, Mir A. Effect of graphene layer on the localized surface plasmon resonance (LSPR) and the sensitivity in periodic nanostructure[J]. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 2018, 31: 107-114.
- [20] Hibino H, Kageshima H, Kotsugi M, et al. Dependence of electronic properties of epitaxial few-layer graphene on the number of layers investigated by photoelectron emission microscopy[J]. *Physical Review B*, 2009, 79(12): 125437.
- [21] 李江霖, 孙科学. 基于纳米金属修饰的石墨烯光电探测器光吸收特性研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2022, 59(21): 2124003.
- Li J L, Sun K X. Study on optical absorption characteristics of graphene photodetector based on nano-metal modification[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2022, 59(21): 2124003.