

# 基于散射矩阵方法的金属光子晶体薄膜 异常光学透射研究

袁晓东 刘 肯\* 叶卫民 张检发 曾 淳

(国防科学技术大学光电科学与工程学院光子技术教研室, 湖南 长沙 410073)

**摘要** 散射矩阵方法是一种基于频域的研究方法。将散射矩阵方法用于亚波长周期性金属小孔结构的透射特性研究。以金属铜薄板为研究对象,薄板刻蚀方格子光子晶体空气圆孔;用洛伦兹-德鲁德(Lorentz-Drude)模型来表征铜的介电常数 $\epsilon$ ;对不同的薄板厚度、周期大小和空气孔孔径的结构进行透射谱分析。并与时域有限差分方法计算所得结果相对照,二者吻合较好。仿真结果表明,如果在金属薄板上刻蚀亚波长周期性空气孔,原本不能透射光波的金属薄板将会出现异常透射现象。这是由周期性金属小孔中表面等离子波子共振导致的结果。用散射矩阵方法与时域有限差分方法分别基于频域和时域进行仿真,二者相互验证,从而可以有效地检验结果的正确性,进而减少以实验来验证时域有限差分仿真结果的成本,增强仿真能力。

**关键词** 散射矩阵;金属薄膜异常透射;时域有限差分

**中图分类号** O431.1 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.0131001

## Study on Extraordinary Optical Transmission through Arrays of Holes Metal Films Based on Scattering Matrix Method

Yuan Xiaodong Liu Ken Ye Weimin Zhang Jianfa Zeng Chun

(*Photonic Laboratory, College of Optoelectronic Science and Technology, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China*)

**Abstract** Scattering matrix method is a research method in frequency domain. Transmission spectra of metal films with periodic air holes is studied based on this method. Copper slabs etched with periodic square lattice of air holes are used. Lorentz-Drude model is used to describe permittivity  $\epsilon$  of copper. Transmission spectra are obtained for different thicknesses of copper slabs, different lattice constants and different radii of air holes. The results agree well with the results obtained by finite-difference time-domain method (FDTD). It is shown that while light cannot be transmitted through metal slabs, extraordinary optical transmissions can be observed if metal slabs are drilled with periodic air holes. This is mainly caused by surface plasmon resonance in the metal photonic crystal slabs. Results can be verified by comparing them obtained from the scattering matrix method in frequency domain and the FDTD method in time domain. Thus it can reduce the cost to verify the results experimentally and enhance the ability of simulation.

**Key words** scattering matrix; extraordinary optical transmission of metal films; finite-difference time-domain method (FDTD)

**OCIS codes** 310.6628; 050.1755; 050.5298; 050.6624

## 1 引 言

对于较大的金属网孔的透射分析,始于 1962 年<sup>[1]</sup>。随着纳米科技的进步,在金属上刻蚀小于可见光波长的小孔已经成为现实。1998 年, Ebbesen

等<sup>[2]</sup>报道了各种亚波长金属小孔结构的异常透过现象。此后,这一现象引起了研究人员的广泛关注,大量的实验及理论研究也随之开展<sup>[3,4]</sup>。亚波长金属小孔的异常透过性质可应用于宽频的光滤波器、偏

收稿日期: 2009-12-09; 收到修改稿日期: 2010-05-11

作者简介: 袁晓东(1964—),男,硕士,教授,主要从事纳米光子学方面的研究。E-mail: x. d. yuan@163. com

\* 通信联系人。E-mail: liukener@163. com

振器和传感器等器件设计。而对异常透过现象的物理本质的理论研究包括对不同的膜厚、空气孔形状和格矢的排列等透射谱的研究。其中在数值模拟方面,许多研究都是基于时域有限差分(FDTD)方法。FDTD具有很多显而易见的优点,如直观、一次模拟可以计算很宽的频谱范围和有很多现成的计算软件等。然而,FDTD是一种时域方法,当所要求的频率分辨率较高时,FDTD的计算量会显著增加。

本文采用散射矩阵法在频域对金属光子晶体的透射率进行研究,相对于模拟光在色散与非色散介质中传播行为的FOTD方法,散射矩阵法在进行仿真时有自己的独特优势:如计算量小、计算快等特点;另外薄板厚度不会对计算量产生影响,因而很适合极薄及有一定厚度的薄板的仿真;并且可以与FDTD方法所得的计算结果进行相互验证,增强仿真能力。

## 2 散射矩阵法的基本原理

在频域方面,传输矩阵和散射矩阵都可以用来对光波的传输进行分析。散射矩阵法的主要特点是将入射波、反射波和透射波的振幅直接由一个散射矩阵联系起来,其收敛性与传输矩阵相比更好,对平面波展开的个数不多的情况下,结果不会发生畸变。此前的研究多应用于无损耗的介质薄板<sup>[6,7]</sup>。研究结果表明,也可将其应用于金属薄板这种色散材料的研究中。薄板可以是单层,也可以是多层。对于确定的入射光和金属薄板,其散射矩阵也是确定的,这样可以计算光波入射到薄板的反射率和透射率。图1为其简要理论模型。

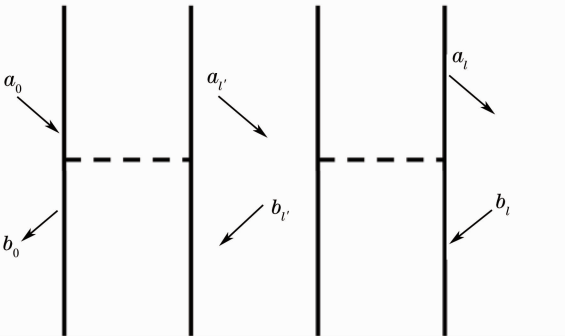


图1 散射矩阵示意图

Fig.1 Schematic of scattering matrix method

假设场的时间谐波分量为  $\exp(-i\omega t)$ ,由标度不变性原理,用  $\omega$  代替  $\omega/c$ ,用  $\mathbf{E}$  代替  $\omega\epsilon_0 \mathbf{E}$  将麦克斯韦(Maxwell)方程重新处理,可以得到

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{H} = -i\epsilon \mathbf{E} \\ \nabla \times \mathbf{E} = i\omega^2 \mathbf{H} \end{cases}, \quad (1)$$

式中  $\mathbf{H}$  和  $\mathbf{E}$  分别为重新处理后的磁场和电场, $\epsilon$  为相对介电常数。

由于所研究结构在  $x$ - $y$  平面为周期性结构,可以将  $\mathbf{H}, \epsilon$  分别在  $x$ - $y$  平面用布洛赫(Bloch)波展开

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}, z) &= \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{H}_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}, z) \exp[i(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}] \\ \epsilon(\mathbf{G}) &= \frac{1}{S} \int_{\text{unitcell}} \epsilon(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2)$$

式中  $\mathbf{r}$  为  $x$ - $y$  平面内的矢量, $\mathbf{K}$  为布洛赫波波矢, $\mathbf{G}$  为晶格的倒格矢; $S$  是整个原胞的面积, $\epsilon$  的展开是对周期性结构中的整个原胞进行积分;由于所研究的薄板为金属薄板, $\epsilon$  为复数。

将麦克斯韦的矢量场分解为标量分量表达:

$$\begin{cases} ik_y h_z(z) - h'_y(z) = -i\epsilon e_x(z) \\ h'_x(z) - ik_x h_z(z) = -i\epsilon e_y(z) \\ ik_x h_y(z) - ik_y h_x(z) = -i\epsilon e_z(z) \end{cases}, \quad (3)$$

和

$$\begin{cases} ik_y e_z(z) - e'_y(z) = i\omega^2 h_x(z) \\ e'_x(z) - ik_x e_z(z) = i\omega^2 h_y(z) \\ ik_x e_y(z) - ik_y e_x(z) = i\omega^2 h_z(z) \end{cases}. \quad (4)$$

式中  $\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y$  是对角矩阵,可表示为:  $(\mathbf{k}_x)_{\alpha\alpha} = (k_x + G_x), (\mathbf{k}_y)_{\alpha\alpha} = (k_y + G_y)$ 。在求解方程时,由于要满足方程:  $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$ ,得到磁场关于  $z$  向分量:

$$h(z) = \left\{ \phi_x \hat{x} + \phi_y \hat{y} - \frac{1}{q} (\mathbf{k}_x \phi_x + \mathbf{k}_y \phi_y) \hat{z} \right\} \exp(iqz), \quad (5)$$

式中  $\phi_x$  和  $\phi_y$  分别为磁场的展开系数。

电场  $z$  向分量可以写作

$$\begin{aligned} e(z) &= \frac{1}{q} \{ [k_x k_y \phi_x + (q^2 + k_y k_y) \phi_y] \hat{x} - \\ & [k_x k_y \phi_y + (q^2 + k_x k_x) \phi_x] \hat{y} + \\ & q [k_y \phi_x - k_x \phi_y] \hat{z} \} \exp(iqz), \end{aligned} \quad (6)$$

将电场和磁场代入(3),(4)式,可以得到矩阵形式:

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{bmatrix} \boldsymbol{\eta} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\eta} \end{bmatrix} \left[ q^2 + \begin{bmatrix} \mathbf{k}_x \mathbf{k}_x & \mathbf{k}_y \mathbf{k}_x \\ \mathbf{k}_x \mathbf{k}_y & \mathbf{k}_y \mathbf{k}_y \end{bmatrix} \right] + \right. \\ & \left. \begin{bmatrix} \mathbf{k}_x \boldsymbol{\eta} \mathbf{k}_x & -\mathbf{k}_y \boldsymbol{\eta} \mathbf{k}_x \\ -\mathbf{k}_x \boldsymbol{\eta} \mathbf{k}_y & \mathbf{k}_y \boldsymbol{\eta} \mathbf{k}_y \end{bmatrix} \right\} \times \begin{bmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix} = \omega^2 \begin{bmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (7)$$

式中  $\boldsymbol{\eta} = 1/\epsilon, \boldsymbol{\eta}$  为对角矩阵。

令

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{\eta} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\eta} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_x \mathbf{k}_x & \mathbf{k}_y \mathbf{k}_x \\ \mathbf{k}_x \mathbf{k}_y & \mathbf{k}_y \mathbf{k}_y \end{bmatrix}, \\ \mathbf{K}' &= \begin{bmatrix} \mathbf{k}_x \boldsymbol{\eta} \mathbf{k}_x \\ -\mathbf{k}_y \boldsymbol{\eta} \mathbf{k}_x \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\phi} = \begin{bmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (8)$$

(7)式可以写做

$$[\mathbf{H}(q^2 + \mathbf{K}) + \mathbf{K}']\boldsymbol{\phi} = \omega^2\boldsymbol{\phi}, \quad (9)$$

或者

$$[\epsilon(\omega^2 - \mathbf{K}') - \mathbf{K}]\boldsymbol{\phi} = q^2\boldsymbol{\phi}. \quad (10)$$

这是一个求解本征值  $q$  的方程,对于任何一个金属二维光子晶体薄板,总可以求出本征值  $q$  和对应的本征矢,将它们作为一组基,薄板中的场可以用这组基展开。同时,薄板中的磁场和电场可以看作是前向波和后向波的叠加。对于不同层薄板前向波和后向波的振幅可以用散射矩阵联系起来:

$$\begin{bmatrix} a_l \\ b_l \end{bmatrix} = \mathbf{S}(l, l') \begin{bmatrix} a_{l'} \\ b_{l'} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{l'} \\ b_{l'} \end{bmatrix}, \quad (11)$$

式中  $\mathbf{S}$  是散射矩阵,如图 1 所示,  $l$  和  $l'$  代表第  $l$  和  $l'$  层介质,  $a_l$  和  $b_l$  分别是第  $l$  层的前向波和后向波的振幅。散射矩阵将  $a_l, b_l$  和  $a_{l'}, b_{l'}$  联系起来,而传输矩阵将  $a_l, a_{l'}$  和  $b_l, b_{l'}$  联系起来,所以散射矩阵法的数值稳定性要比传输矩阵法好得多。

前向波和后向波的振幅有以下关系:

$$\begin{bmatrix} \hat{f}_l a_l \\ b_l \end{bmatrix} = \mathbf{I}(l, l+1) \begin{bmatrix} a_{l+1} \\ \hat{f}_{l+1} b_{l+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{l+1} \\ \hat{f}_{l+1} b_{l+1} \end{bmatrix}, \quad (12)$$

其中相位因子:

$$\hat{f}_l = \hat{f}_l(d_l) = \exp(iq_l d), \quad (13)$$

式中  $\mathbf{I}(l, l+1)$  为界面矩阵(interface matrix),它可由场在边界的连续性得到。 $\mathbf{S}$  由下式给出:

$$\begin{aligned} S_{11}(l', l+1) &= [I_{11} - \hat{f}_l S_{12}(l', l) I_{21}]^{-1} \hat{f}_l S_{11}(l', l) \\ S_{12}(l', l+1) &= [I_{11} - \hat{f}_l S_{12}(l', l) I_{21}]^{-1} \times \\ &\quad [\hat{f}_l S_{12}(l', l) I_{22} - I_{12}] \hat{f}_{l+1} \\ S_{21}(l', l+1) &= S_{22}(l', l) I_{21} S_{11}(l', l+1) + \\ &\quad S_{21}(l', l) \\ S_{22}(l', l+1) &= S_{22}(l', l) I_{21} S_{12}(l', l+1) + \\ &\quad S_{22}(l', l) I_{22} \hat{f}_{l+1}. \end{aligned} \quad (14)$$

### 3 二维周期性空气孔结构金属薄板的透射率分析

对于二维带周期性空气孔金属薄板的情况,薄板材料为金属铜,上下为空气,中间为空气孔。空气孔的排列构成周期性方格子结构。这里使用洛伦兹-德鲁德(Lorentz-Drude)模型来描述  $\epsilon$ ,因为洛伦兹-德鲁德模型更接近于实际参数。用洛伦兹-德鲁德模型来描述金属的折射率:

$$\epsilon_r = \epsilon_{r,\infty} + \sum_m \frac{G_m \omega_m^2}{\omega_m^2 - \omega^2 + i\omega\Gamma_m}, \quad (15)$$

式中  $\epsilon_{r,\infty}$  是频率为无穷时金属的介电常数,取  $\epsilon_{r,\infty} = 1.0$ ;  $\omega_m$  是等离子体共振频率;  $\Gamma_m$  是衰减因子;  $G_m$  是德鲁德模型的系数。

金属铜的折射率参数由参考文献[8]给出,包括折射率的实部  $n$  和虚部  $k$ 。而折射率与复数介电常数  $\epsilon_r$  的关系为

$$\epsilon_r = \tilde{n}^2 = (n + ik)^2 = n^2 - k^2 + 2ink. \quad (16)$$

令(15)式与(16)式实部与虚部相等就可以求出复数介电常数。另外在计算中,利用麦克斯韦方程的标度不变性原理,以  $1 \mu\text{m}$  为单位 1,对所计算的结构进行归一化处理,  $\omega_m, \Gamma_m, G_m$  也进行相应的归一化处理,其结果在表 1 中给出。

表 1 洛伦兹-德鲁德模型中参数  $G_m, \omega_m$  和  $\Gamma_m$  的值  
Table 1  $G_m, \omega_m$  and  $\Gamma_m$  in the Lorentz-Drude model

$G_m$	$\omega_m$	$\Gamma_m$
$0.4358 \times 10^{14}$	$1 \times 10^{-6}$	0.02415
83.979	0.2346	0.305
1.387	2.385	0.8494
3.001	4.274	2.591
0.616	9.014	3.471

在表 1 给定的参数下,图 2(a)为使用散射矩阵方法计算光垂直于金属铜薄板入射时的透射率。金属铜薄板的晶格周期是  $400 \text{ nm}$ ,空气孔半径  $100 \text{ nm}$ ,厚度  $100 \text{ nm}$ 。由图 2 可见,二维金属光子晶体薄板的透射率与金属薄膜的透射率相差很多。对于厚度相同,即同是  $100 \text{ nm}$  的均匀金属铜板,其透射率几乎为零。而刻蚀周期性的空气孔后,当光波长与晶格常数可比拟时,二维金属光子晶体薄板并非对光全部吸收,而有部分被透射。这是因为当光入射至二维金属光子晶体薄板时,将激励起金属薄板内的表面等离子体激元<sup>[9~11]</sup>,从而将能量传递至表面等离子体激元,而表面等离子体激元又将能量耦合到透射光中,从而使得二维金属光子晶体薄板的透射率增加。而当入射光波长变长时,金属铜薄板中空气孔不再对透射起到作用,此时的光子晶体薄板与均匀金属薄铜板对光的透射作用相同。

为了对散射矩阵所得结果进行验证,图 2(b)给出了相同结构使用 FDTD 仿真得到的透射率谱线。从图 2(b)可见,二者符合得较好。

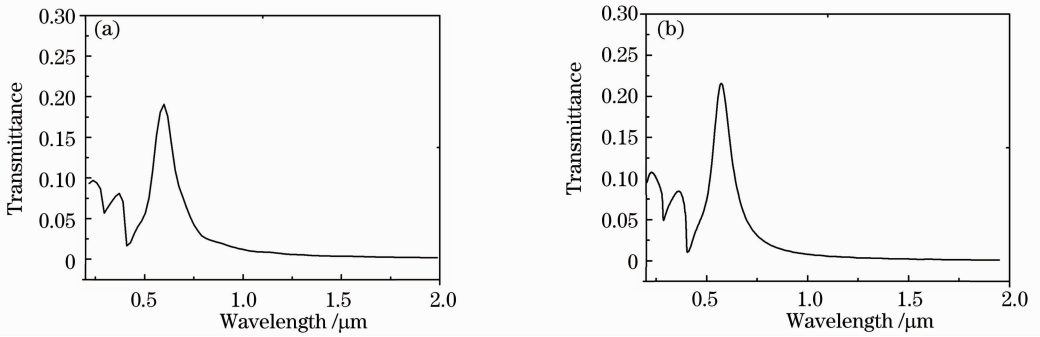


图2 具有周期性空气孔的二维铜薄板的透射谱。(a)由散射矩阵计算的结果,(b)由FDTD方法计算的结果  
Fig. 2 Transmittance of 2-dimensional copper slab with periodic air holes. (a) results obtained from scattering matrix method, (b) results obtained from FDTD method

对金属薄板透射率的计算是一个三维问题。采用FDTD方法计算分析金属结构时,计算空间网格须足够细、而计算时间步长须足够短以满足数值稳定性条件。可是对于FDTD,计算所需内存和计算量随计算网格数以三次方量级增加,普通的计算机无法胜任此工作。而对于散射矩阵方法,由前面的分析可知,它在计算中,所采用的是以二维光子晶体中的布洛赫波作为基,因此它将金属薄板透射率这样一个三维问题转换成了二维问题,计算所需内存和计算量随平面波展开个数以二次方量级增加,且散射矩阵方法收敛性好,对于要计算的结构,可以用较少平面波展开进行,在得到有用的初始信息下,进一步增加平面波展开个数,得到所需精确结果,极大地降低了对计算机的要求。

另外,对于FDTD,得到如图2(b)的结果,需要频域极宽,即时域极短的脉冲作为激励源,单位频率中所包含能量减少,将时域结果进行傅里叶变换到频域时,会带来较大误差。

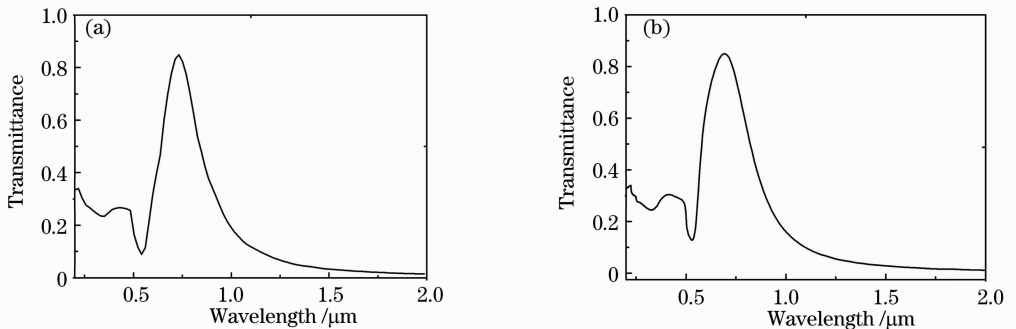


图3 具有周期性空气孔的二维铜薄板的透射谱。(a)由散射矩阵计算的结果,(b)由FDTD方法计算的结果  
Fig. 3 Transmittance of 2-dimensional copper slab with periodic air holes. (a) results obtained from scattering matrix method, (b) results obtained from FDTD method

## 4 结 论

给出了频域内分析亚波长周期性金属小孔结构

还有一点就是,对于FDTD,如果金属薄板变厚,例如变到 $1\ \mu\text{m}$ 厚,将极大地增加空间体积,必然导致计算量增加;如果金属薄板变薄,例如变成 $10\ \text{nm}$ 厚,为了能够模拟出薄板的形状,则FDTD中必须将空间网格的间距减小至 $1\ \text{nm}$ 以下,而完全匹配层(PML)吸收边界的厚度不应改变,这将使得空间网格数急剧增加,无法计算。而对于散射矩阵方法,由(13)式可见,薄板的厚度对散射矩阵的计算量没有任何影响,这也是散射矩阵方法的一个优势。

图3为薄板厚度 $0.2\ \mu\text{m}$ ,周期 $0.5\ \mu\text{m}$ ,空气孔的半径为 $0.2\ \mu\text{m}$ 是散射矩阵方法和FDTD方法计算所得金属光子晶体薄板透射率。由图3可见由于空气孔半径变大,透射谱的峰值出现较大增长,约接近 $0.9$ 。而且高透射率的波长范围很宽。当入射光波长变长时,与均匀铜板的作用相同,光不能够透射。这样的薄板可以实现很多设计用途,例如宽频滤波器等。

异常透射现象的一种计算方法:散射矩阵方法;利用该方法对二维光子晶体薄铜板的透射率进行了研

究,发现亚波长周期性金属小孔结构具有异常透射现象,这是周期性金属小孔中表面等离子波共振导致的结果;并该结果与FDTD方法计算的结果对比,二者吻合得较好;相对于FDTD方法,散射矩阵方法具有计算量小,计算快的特点;可以与FDTD的计算结果相互验证,提高对金属结构进行计算的光学仿真能力。

### 参 考 文 献

- 1 K. F. Renk, L. Genzel. Interference filters and Fabry-Perot interferometers for the far infrared [J]. *Appl. Opt.*, 1962, **1**(5): 643~648
- 2 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
- 3 N. Garcia, E. V. Ponizovskaya, Zhu Hao *et al.*. Wide photonic band gaps at the visible in metallic nanowire arrays embedded in a dielectric matrix [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2003, **82**(19): 3147~3149
- 4 C. Genet, T. W. Ebbesen. Light in tiny holes [J]. *Nature*, 2007, **445**(5350): 39~46
- 5 Liu Wei, Hou Jing, Lu Qisheng *et al.*. Anti-resonant reflecting optical waveguide model for metallic photonic crystal fibers[J]. *Chinese J. Lasers*, 2009, **36**(s1): 369~372
- 刘 伟, 侯 静, 陆启生等. 金属光子晶体光纤的反共振反射光学波导模型[J]. *中国激光*, 2009, **36**(s1): 369~372
- 6 D. M. Whittaker, I. S. Culshaw. Scattering-matrix treatment of patterned multilayer photonic structures [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**(4): 2610~2618
- 7 Guo Chucai, Ye Weimin, Yuan Xiaodong *et al.*. Research on reflection characteristics of sub-wavelength gratings [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(12): 3272~3276
- 郭楚才, 叶卫民, 袁晓东等. 亚波长光栅反射特性研究[J]. *光学学报*, 2009, **29**(12): 3272~3276
- 8 P. B. Johnson, R. W. Christy. Optical constants of the noble metals [J]. *Phys. Rev. B*, 1972, **6**(12): 4370~4379
- 9 Zhao Chengqiang, Xu Wendong, Hong Xiaogang *et al.*. Probe inducing surface plasmon resonance nanolithographic system [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(2): 473~477
- 赵成强, 徐文东, 洪小刚等. 探针诱导表面等离子体共振纳米光刻系统[J]. *光学学报*, 2009, **29**(2): 473~477
- 10 Cao Di, Zhang Huifang, Tao Feng. Theoretical study on properties of surface plasmon polaritons at interfaces of metamaterials with three-layered asymmetric structures [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(8): 1601~1610
- 曹 迪, 张惠芳, 陶 峰. 三层不对称人工电磁材料界面处表面等离子体激元的理论研究 [J]. *光学学报*, 2008, **28**(8): 1601~1610
- 11 Zhou Lin, Zhu Yongyuan. Propagation characteristics of surface plasmon polaritons in a metal heterowaveguide array [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(6): 1047~1050
- 周 林, 朱永元. 金属异质波导阵列中的表面等离子体激元传播特性 [J]. *光学学报*, 2008, **28**(6): 1047~1050