

复合周期双层金属膜光栅的多特性融合研究

崔文丽1*,彭伟2

¹中北大学理学院,山西太原 030051; ²大连理工大学物理学院,辽宁大连 116024

摘要 设计了一种性能优异的多频带、多特性融合的复合周期双层金属膜纳米光栅结构。通过运用有限元法进行 仿真,发现该结构在 65°底部 TM 模式偏振光斜入射下,能够在波长 760、904、1028、1216 nm 处出现高吸收,其吸收 强度分别为 98.73%、92.84%、97.57%、99.11%。进一步模拟发现,多频带吸收峰还兼具窄带偏振滤波以及折射 率传感特性,其最大折射率灵敏度为 2080 nm/RIU,最大品质因数为 92.1 RIU⁻¹。另外,通过周期调制,该结构还 实现了在近红外波段从 944~1206 nm 宽波段范围的窄带偏振滤波可调谐功能。通过对电磁场、表面电流、表面电 荷的分布分析,给出了该结构多频带、多特性融合的物理激发机制。该复合周期双层金属膜光栅结构在微型化与 高度集成化的多光谱红外探测、光谱成像以及生物传感等领域具有广阔的应用前景。

关键词 光学器件;表面等离激元;微纳光栅;多特性融合 中图分类号 O436.3 文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202242.0824002

Multi-Characteristic Integration of Double-Layer Metal Film Grating with Composite Periodic Structure

Cui Wenli^{1*}, Peng Wei²

¹ School of Science, North University of China, Taiyuan, Shanxi 030051, China; ² School of Physics, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning 116024, China

Abstract A double-layer metal film grating with a composite periodic structure is designed, which features multiple frequency bands, multi-characteristic integration. The simulation by a finite element method, and we find that this structure can achieve high absorption at resonant wavelengths of 760, 904, 1028, and 1216 nm under transverse-magnetic (TM) polarized illumination on the bottom of the nanograting at an incident angle of 65°. Its absorptivity can be up to 98.73%, 92.84%, 97.57%, and 99.11%, respectively. Further simulation reveals that multiband absorption peaks also possess the characteristics of narrowband polarization filtering and refractive index sensing. Its maximum refractive index sensitivity is 2080 nm/RIU and the maximum figure of merit (FOM) is 92.1 RIU⁻¹. In addition, period modulation enables the tunability of narrowband polarization filtering in a wide near-infrared wavelength range from 944 nm to 1206 nm. We explore the underlying integration mechanism by analyzing the distributions of the surface electromagnetic field, surface current, and surface electric charges. The results show that the designed double-layer metal film grating with a composite periodic structure has a broad application perspective in miniaturized and highly integrated multispectral infrared detection, spectral imaging, and biosensing. **Key words** optical devices; surface plasmon polaritons; micro-nano grating; multi-characteristic integration

收稿日期: 2021-08-30; **修回日期**: 2021-10-08; 录用日期: 2021-11-08 **基金项目**:山西省青年科技研究基金项目(201901D211230) 通信作者: *xcuiwenli@163.com

1 引 言

随着微纳光学研究的不断深入,对各种结构亚 波长光学器件的研究备受关注。亚波长光栅作为一 种经典的一维周期性结构,由于其小尺寸、易集成, 工艺实施相对稳定,现已成为声光学、集成光学、全 息光学、光信息存储、光谱学等应用领域的关键基础 器件^[1-5]。并且,伴随着集成光电子学发展所带来的 光学器件向微纳尺寸快速迈进,亚波长光栅的应用 范围也随之得到迅猛拓展。比如,在偏振分束器中, 亚波长光栅可以提高分束器的消光比^[6-7];在窄带滤 波器中,亚波长光栅可以抑制旁带和实现衍射谱的 对称性^[8-9];在生物传感器中,亚波长光栅可以实现 荧光发射增强,提高探测灵敏度^[10-11];在窄带电磁波 吸收器中,亚波长光栅可以产生光热效应,增强选择 性热发射^[12-13]等。

目前就亚波长光栅设计所表现出的优异特性, 研究者们已开发出工作在各种不同频段的亚波长光 学器件^[14-16],但结合已有报道,对单一或两种光学特 性讨论或性能提升的居多,对单频带、双频带或三频 带的性能讨论居多,对四频带或更多频带的光学性



能进行全面系统、多角度讨论的甚少。为此,本文展 开了对所设计亚波长光栅结构的多频带、多特性融 合性能的研究,这对拓宽亚波长光栅的应用范围、实 用性以及实现功能性器件的小型化和集成化都具有 重要意义。

2 计算模型与方法

本文设计的复合周期双层金属膜光栅结构如图 1 所示,所用金属材料为金(Au),中间夹层材料为 硅(Si),基底材料为 BK7。该结构的参数取值如下: 周期 P = 200 nm, 双层金属膜的上、下层膜厚分别 $为 <math>T_1$ 、 T_3 ,且 $T_1 = T_3 = 60 \text{ nm}$,中间介质夹层厚度 为 $T_2 = 200 \text{ nm}$,光栅狭缝宽度 m = 5 nm,较宽处 Au-Si-Au 光栅脊宽度 $W_1 = 130 \text{ nm}$,较窄处 Au-Si-Au 光栅脊宽度 $W_2 = 60 \text{ nm}$,介质夹层、基底材料折 射率分别为: $n_{\text{Si}} = 3.48$, $n_{\text{BK7}} = 1.513$ 。现 TM 偏振 光(电场方向平行 y 方向)以 65° 入射角从光栅基底 入射,入射光波长范围为 $600 \sim 1500 \text{ nm}$ 。现设定结 构在 x 轴向是无限的,在 z 轴方向,光栅所处介质 与基底半无限。





Fig. 1 Schematic of double layer metal film grating with composite periodic structure. (a) Three-dimensional diagram of the designed structure; (b) cross-section of the designed structure

本文采用有限元方法进行建模分析。在单元结构的 y 方向设定周期性边界条件;在 z 方向,设定 完美匹配边界层条件,将结构反射和透射光完全吸收,以消除其对金属光栅光学特性参数仿真计算结 果造成的影响。同时为提高仿真精度,最大网格设 置为 15 nm,最小网格设置为 1 nm,保证计算结果 的完美收敛。根据 Lorentz-Drude 色散模型^[17]估计 Au 的色散系数:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{m}(\boldsymbol{\omega}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{r} - \frac{\boldsymbol{\omega}_{p_{0}}^{2}}{\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega} + \mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}_{0})} - \frac{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{0}\boldsymbol{\Omega}_{0}^{2}}{\boldsymbol{\omega}^{2} - \boldsymbol{\Omega}_{0}^{2} + \mathrm{i}\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\Gamma}_{0}} ,$$
(1)

式中, ω 为入射光的角频率, ε_r 表征金属带间跃迁对 介电常数的贡献, ω_{ρ_0} 为等离子体频率, γ_0 为阻尼系 数, Ω_0 为振子强度, $\Delta \varepsilon_0$ 为加权因子, Γ_0 为洛伦兹 频谱宽度。其具体取值如下: $\varepsilon_r = 5.9$, $\omega_{\rho_0} = 1.33 \times 10^{16}$ rad/s, $\gamma_0 = 9.87 \times 10^{13}$ rad/s, $\Omega_0 = 4.07 \times 10^{15}$ rad/s, $\Delta \varepsilon_0 = 1.09$, $\Gamma_0 = 6.58 \times 10^{14}$ rad/s.

3 结果与讨论

3.1 复合周期双层金属膜光栅的光学特性分析

如图 2(a)给出了复合周期双层金属膜光栅的特征光谱,分别是反射谱、吸收谱与透射谱。将图 2(a)的反射谱与吸收谱分别与图 2(b)、图 2(c) 在 P=65 nm (仅有较窄处 Au-Si-Au 光栅脊 W_2) 与P=135 nm (仅有较宽处 Au-Si-Au 光栅脊 W_1) 单周期取值下的反射谱与吸收谱进行对比,结果发



图 2 几种结构的特征光谱图。(a)复合周期双层金属膜光栅的反射、吸收、透射谱;(b)与非复合周期双层金属 膜光栅反射谱的对比;(c)与非复合周期双层金属膜光栅吸收谱的对比

Fig. 2 Characteristic spectra of several structures. (a) Calculated spectra of reflection, absorption and transmission for the designed structure; (b) comparison of reflection spectra for non-composite and composite periodic structures;
 (c) comparison of absorption spectra for non-composite and composite periodic structures

现:该结构具有四通道性能优异的近零反射特性、近 完美吸收特性和窄带滤波特性。进一步进行光谱折 射率响应特征的考查后发现:结构的四通道特性受 折射率调制,随着金属-介质-金属光栅结构周围介 质折射率从 1.330 变至 1.350,反射谱四通道最低 点均表现了如图 3(a) 所示不同程度的红移特征,且 共振波长随折射率改变的定量关系已由图 3(b) 给





图 3 复合周期双层金属光栅的传感特性。(a)反射谱的折射率响应;(b)反射谷处的折射率与共振波长关系; (c)反射谷处的品质因数;(d)反射强度对折射率的响应

Fig. 3 Sensing performances for the designed structure. (a) Simulated reflection spectra with various refractive indexes;(b) relations between resonance wavelengths at reflected dips and different refractive indexes;(c) figure of merit(FOM) of resonant dips;(d) intensity responses of new dip and the third dip with various refractive indexes

研究论文

性能较第一、第二、第四反射谷的更优越。图 3(d) 揭示了第三反射谷所表现的除波长调制传感特性以 外的另一特征,即强度调制传感特性(黑实线所示), 而且具有这一特性的反射谷不止这一个,在折射率 调制过程中,在第一反射谷与第二反射谷间新增的 一反射谷也同样具有强度调制传感特性(红虚线所 示)。因此,该复合周期双层金属膜光栅能集四通道 高吸、窄带偏振滤波、波长调制与强度调制传感多特 性于一体,这可为下一步开展性能优异的微型多频 带、多功用、高集成微纳光学器件的研究提供一定的 参考。

3.2 多特性融合物理机制分析

为了探究复合周期双层金属膜光栅多特性融合 现象的物理机制,图 4(a)~(d)分别给出了四通道 共振波长 $\lambda = 760 \text{ nm}, \lambda = 904 \text{ nm}, \lambda = 1028 \text{ nm} 及$ $\lambda = 1216 \text{ nm} 处的磁场分布。如图 4(a) 所示,强烈$ 的磁场主要局域在了靠近基底的金属膜与相邻金属 膜的狭缝内,借助图 4(a)狭缝的局部放大图 4(a1) (表面电流密度矢量图)和图 4(a2)(电荷分布图)可 以看到,有磁共振效应的激发(产生了反向平行电 流)。另外,图 4(a)也显示了 Au-Si-Au 结构的 Au 膜与中间介质夹层 Si 交界面处的较强场局域,依据 金属/介质表面 SPP 的共振激发条件^[18]

第 42 卷 第 8 期/2022 年 4 月/光学学报

$$\frac{2\pi}{\lambda}n\sin\theta - m \;\frac{2\pi}{P} = -\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{\frac{\varepsilon_m(\omega)n^2}{\varepsilon_m(\omega) + n^2}} = k_{\rm spp},$$
(2)

式中,P 代表光栅周期,m 代表级数,k_{SPP} 代表 SPP 波矢的大小。计算可得 Au 膜与中间介质夹层 Si 交界面处激发 SPP 的理论共振波长 λ = 758 nm,与 模拟值 760 nm 基本吻合,表明此处应有表面等离 激元共振的激发。另外,从图 4(b)、4(c)、4(d)的磁 场局域特征来看,这三个波长处也应该有 SPP 共振 的激发,其差别主要在共振激发的具体位置以及场 增强强度上。



图 4 在不同共振波长 (a)第一反射谷,(b)第二反射谷,(c)第三反射谷,(d)第四反射谷处的磁场分布; 其中,(a1)代表靠近基底处狭缝内的表面电流密度矢量,(a2)代表该处的表面电荷分布

Fig. 4 Magnetic field distributions at different resonance wavelengths for (a) the first reflection dip, (b) the second reflection dip, (c) the third reflection dip and (d) the forth reflection dip. Here, (a1) depicts the direction and intensity of surface current density and (a2) depicts surface charge distribution at the slit of the nearest substrate for the first reflection dip

对4个共振波长处的电场分布也进行了模拟,结 果如图5(a)~(d)所示。从这些结果可以看出,狭长 的缝内均存在强烈的场局域,区别也主要在场局域的 具体位置以及场增强的强度上。进一步比较发现,最 强场局域出现在图5(d)所示的共振波长1216 nm 处。究其物理形成机制,可认为是类 F-P 共振效应 所致,依据类 F-P 腔共振关系式^[19]

$$\frac{4\pi}{\lambda_{\text{F-P}}}nh + \Delta\varphi = 2m\pi, \quad m = 0, 1, 2, \cdots, N, \quad (3)$$

式中,m代表级数,n代表介质的等效折射率,Δφ代 表相位差,h代表腔长。这里,腔长由Au-Si-Au结构 的高度即狭缝高度充当,腔宽由狭缝宽度充当,当F-P腔匹配条件满足时,在纳米级腔内即可发生等离子 振荡而导致共振增强。其他三个波长处的场局域增 强机制与此处类似。综上,4个反射窄带谷或4个近 完美吸收峰的形成受制于磁共振效应、SPP共振效应 以及类 F-P 共振效应。



图 5 在不同共振波长(a)第一反射谷;(b)第二反射谷;(c)第三反射谷;(d)第四反射谷处的电场分布 Fig. 5 Electric field distributions at different resonance wavelengths. (a) The first reflection dip; (b) the second reflection dip; (c) the third reflection dip; (d) the forth reflection dip

3.3 结构尺寸对光谱调谐性的分析

图 6(a)给出了狭缝宽度 m 的变化对反射谱的 影响。如图所示,将 m 从 5 nm 增大到 11 nm,结果 发现 4 个反射谷均出现不同程度的蓝移。分析其机 理,增大缝宽,即相当于增大 F-P 腔宽度,有利于等效折射率的减小^[20],引发蓝移。其中,第四反射谷 蓝移最大,对应于该波长处场增强最强[图 5(d)]; 第三反射谷蓝移程度较第一反射谷的小,归因于狭



图 6 各参数调节对反射谱的影响。(a)狭缝宽度 m_{i} (b)介质夹层厚度 T_{2}_{i} ;(c)上下金属层厚度 T_{1} 和 T_{3} ;(d)光栅脊宽度 W_{2}_{i} ;(e)光栅周期 P



研究论文

缝内发生 F-P 共振时,其低阶模式的弱于高阶模式 的[图 5(a)二阶模式,图 5(c)一阶模式]。图 6(b)给 出了中间介质层厚度 T_2 从 180 nm 增加到 240 nm 时反射谱的变化。其中,第一、三反射谷的波长移动 微乎其微,而第二、四反射谷则红移明显,究其因,主 要与中间介质夹层内有无类 F-P 共振效应的激发 有关;结合(3)式进一步看到,中间介质夹层厚度的 增加等效于增加腔长,可引发红移,红移程度与腔内 发生共振时场增强程度密切相关。图 6(c)描述了 同时调节上下金属层厚度 T_1 、 T_3 对光谱的影响。 结果表明,各反射谷的红移均与等效腔长的增加有 关,只是红移程度要受制于腔内场增强程度与共振 阶次的共同调制。

图 6(d)给出了在维持周期 P 不变情形下,改变 较窄处 Au-Si-Au 光栅脊宽度 W₂ 对反射谱的影响。 随着 W₂ 的增加,第二、三反射谷反射率受 W₂ 的调 制影响最大,对第一反射谷影响最小,而第四反射谷 第 42 卷 第 8 期/2022 年 4 月/光学学报

的蓝移特征最明显。此外,该结构的四通道低反、窄 带偏振滤波特性会随 W_2 的增加缩减为二通道,意 即在宽、窄 Au-Si-Au 光栅脊宽度差逐渐减小过程 中,该结构所呈现的四通道、多特性融合特性会大幅 减低,而使得模拟结果向图 2(b)的单周期双层金属 膜光栅谱图特征逼近,这也恰恰反映了该复合周期 双层膜结构设计上的内在优势。图 6(e)所揭示的 在维持占空比不变情况下增大周期 P 所引发的反 射谷移动规律吻合于(2)式。当 P 在 180~240 nm 变化时,第三反射谷从 944 nm 移至 1206 nm,方便 地实现了在红外较宽波段范围内的窄带偏振滤波调 控功用。

表1展示了所设计结构与已报道的参考文献中 一些纳米结构的性能参数对比。可以明显看到,本 研究所设计结构具有更多频带的高性能、多特性融 合特征,能将波长、强度传感特性,窄带滤波、高吸特 性集于一体,且窄带偏振滤波可调谐范围更宽。

表 1 几种纳米结构的性能参数比较

Table 1	Comparison of	analytical	parameters of	several	nano-structures
---------	---------------	------------	---------------	---------	-----------------

	Band number	Wavelength modulation		Intensity modulation Tuable		Marinum
Design		Maximum	Maximum	Maximum	wavelength range	
		S /(nm/RIU)	FOM /(RIU ^{-1})	$S / (RIU^{-1})$	as a filter /nm	absorption / 70
Ref. [21]	Single-band	1500	750	/	100	99.99
Ref. [22]	Single-band	1820	293.5	/	127	99.95
Ref. [23]	Dual-band	757.58	50.5	/	200	98.49
Ref. [24]	Tri-band	1194	28.9	/	/	99.80
Ref. [25]	Four-band	249	22.6	/	/	99.86
Proposed	Four-band	2080	92.1	17.85	262	99.11

4 结 论

主要研究了复合周期双层金属膜光栅结构在可 见-近红外光谱范围的多频带、多特性融合特性。研 究结果表明该结构具有四通道窄带偏振滤波、近完 美吸收以及波长、强度调制传感多特性,其最大折射 率灵敏度为 2080 nm/RIU,最大品质因数为 92.1 RIU⁻¹,窄带偏振滤波可调谐范围达 262 nm。 研究结果表明,磁共振效应、SPP 共振效应以及类 F-P 共振效应是其主要激发机制。该复合周期双层 金属膜光栅结构可为后续设计开发小型、多功用、高 性能集成的微纳光学器件提供一定的思路。

参考文献

[1] Chen Y, Zhou X D, Xu Y M, et al. Fano resonance sensing based on coupling of a sub-wavelength grating and an all-dielectric multilayer film under angle modulation [J]. Applied Optics, 2021, 60 (10): 2902-2906.

- [2] Bian Y S, Ren Q, Kang L, et al. Efficient cross-talk reduction of nanophotonic circuits enabled by fabrication friendly periodic silicon strip arrays [J]. Scientific Reports, 2017, 7(1): 15827.
- [3] Li T, Chen J, Zhu S N. Manipulating surface plasmon propagation: from beam modulation to near-field holography [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(5):050002.
 李涛,陈绩,祝世宁.表面等离激元的传播操控:从 波束调制到近场全息[J].激光与光电子学进展, 2017, 54(5):050002.
- [4] Jiang X W, Guan B L. Polarization research of VCSEL based on sub-wavelength grating[J]. Chinese Journal of Luminescence, 2017, 38(6): 729-734.
 江孝伟,关宝璐. 基于亚波长光栅的 VCSEL 偏振控 制研究[J]. 发光学报, 2017, 38(6): 729-734.
- [5] Zhou G R, Duan X F, Huang Y Q, et al. Design of polarization-insensitive broadband spectrum high-

第 42 卷 第 8 期/2022 年 4 月/光学学报

研究论文

reflectivity mirror based on 2D subwavelength grating [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54 (3): 032301.

周顾人,段晓峰,黄永清,等.基于二维亚波长光栅的偏振不敏感宽光谱高反镜的设计[J].激光与光电子学进展,2017,54(3):032301.

[6] Li K, Hu F R, Shen R, et al. Design and analysis of GaN-based sub-wavelength grating polarizing beam splitter[J]. Study on Optical Communications, 2018 (1): 31-32, 78.
李坤,胡芳仁,沈瑞,等. 氮化镓亚波长光栅偏振分

束器的设计与分析[J]. 光通信研究, 2018(1): 31-32, 78.

- [7] Che W K, Kong W J, Zhang Y L, et al. Design of interlayer embedded metal grating polarization beam splitter[J]. Journal of Qingdao University (Natural Science Edition), 2018, 31(3): 12-16, 21.
 车卫康,孔伟金,张晔岚,等.夹层嵌入式金属光栅 偏振分束器的设计[J].青岛大学学报(自然科学 版), 2018, 31(3): 12-16, 21.
- [8] Wang Z Y, Zhang R J, Guo J P. Quadrupole mode plasmon resonance enabled subwavelength metaldielectric grating optical reflection filters[J]. Optics Express, 2018, 26(1): 496-504.
- [9] Liu W N, Chen R, Shi W Y, et al. Narrowfrequency sharp-angular filters using all-dielectric cascaded meta-gratings[J]. Nanophotonics, 2020, 9 (10): 3443-3450.
- [10] Menon S H G, Krishna A S L, Raghunathan V. Silicon nitride based medium contrast gratings for doubly resonant fluorescence enhancement[J]. IEEE Photonics Journal, 2019, 11(4): 1-11.
- [11] Wang F, Kang G. Highly directive plasmonic structure with double resonance at excitation and emission for molecule-enhanced fluorescence [J]. Applied Optics, 2018, 57(2): 237-241.
- [12] Gupta M C, Ungaro C, Foley J J I, et al. Optical nanostructures design, fabrication, and applications for solar/thermal energy conversion [J]. Solar Energy, 2018, 165: 100-114.
- [13] Huang W L, Hsiao H H, Lin C Y, et al. Waveguide resonances with selectable polarization in an infrared thermal emitter [J]. AIP Advances, 2017, 7(8): 085122.
- [14] Lochbaum A, Fedoryshyn Y, Dorodnyy A, et al.

On-chip narrowband thermal emitter for mid-IR optical gas sensing [J]. ACS Photonics, 2017, 4(6): 1371-1380.

- [15] Kim H K, Lee D, Lim S. A fluidically tunable metasurface absorber for flexible large-scale wireless ethanol sensor applications [J]. Sensors, 2016, 16 (8): 1246.
- [16] Ni B, Wang Z Y, Zhao R S, et al. Realisation of a humidity sensor based on perfect metamaterial absorber [J]. Optical and Quantum Electronics, 2017, 49(1): 33.
- [17] Rodrigo S G, García-Vidal F J, Martín-Moreno L. Influence of material properties on extraordinary optical transmission through hole arrays[J]. Physical Review B, 2008, 77(7): 075401.
- [18] Maier S A. Plasmonics: fundamentals and applications[M]. New York: Springer, 2007.
- [19] Ye J, Van Dorpe P. Improvement of figure of merit for gold nanobar array plasmonic sensors [J]. Plasmonics, 2011, 6(4): 665-671.
- [20] Cui W L, Chu S W, Yu L, et al. Extraordinary optical transmission performances of nanosandwiched grating for wideband multi-function integration [J]. Plasmonics, 2017, 12(5): 1281-1288.
- [21] Huang X, Wang T, Yan R Q, et al. Ultranarrowband near-infrared tunable two-dimensional perfect absorber for refractive index sensing [J]. Applied Optics, 2021, 60(14): 4113-4119.
- [22] Zeng L W, Chen M, Yan W, et al. Si-gratingassisted SPR sensor with high figure of merit based on Fabry-Pérot cavity [J]. Optics Communications, 2020, 457: 124641.
- [23] Chau Y F C, Chou Chao C T, Lim C M, et al. Depolying tunable metal-shell/dielectric core nanorod arrays as the virtually perfect absorber in the nearinfrared regime[J]. ACS Omega, 2018, 3(7): 7508-7516.
- [24] Cheng Y Z, Luo H, Chen F, et al. Triple narrowband plasmonic perfect absorber for refractive index sensing applications of optical frequency [J]. OSA Continuum, 2019, 2(7): 2113-2122.
- [25] Shi L L, Shang J S, Liu Z Q, et al. Ultra-narrow multi-band polarization-insensitive plasmonic perfect absorber for sensing [J]. Nanotechnology, 2020, 31 (46): 465501.