

doi:10.3788/gzxb20184705.0516006

基于时域有限差分法的 Au 纳米天线增强 消光特性研究

谭伟, 杨存, 唐吉龙, 王登魁, 方铨, 王新伟, 房丹, 魏志鹏, 王晓华

(长春理工大学 高功率半导体激光国家重点实验室, 长春 130022)

摘 要: 利用时域有限差分法研究了 Au 纳米天线对 GaSb 纳米线的消光增强. 通过分析不同形状 Au 纳米阵列的电场特性和光学特性, 发现三角形为最优结构, 并具有高强度共振吸收峰和高的电场增强倍数. 分别对三角形尺寸和纳米线的间距进行调节, 结果表明: 随着尺寸由 70 nm 增加到 210 nm, 消光峰位从 783 nm 单调增加到 1 638 nm, 峰位强度和电场增强倍数逐渐增加, 尺寸为 210 nm 时的增强倍数为 70 nm 时的 6 倍; 随着间距由 80 nm 增加到 130 nm, 消光峰位从 1 655 nm 减小到 1 460 nm, 峰位强度和电场增强倍数略微减小. 因此可通过先调节间距再调节尺寸的方法来设计 Au 纳米天线结构.

关键词: 时域有限差分法; 碲化镓; 金纳米天线; 结构设计; 结构调节

中图分类号: O439

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2018)05-0516006-6

Study of Extinction Enhancement of Au Nano Antenna by Using Finite Difference Time Domain Method

TAN Wei, YANG Cun, TANG Ji-long, WANG Deng-kui, FANG Xuan, WANG Xin-wei,
FANG Dan, WEI Zhi-peng, WANG Xiao-hua

(State Key Laboratory of High Power Semiconductor Laser, Changchun University of Science and Technology,
Changchun 130022, China)

Abstract: Extinction enhancement of GaSb nanowire because of Au nano antenna is studied based on finite difference time domain method. The electric field property and optical property of Au nano antenna array with different shapes are analyzed, it is found that triangular is the best structure, which possesses the resonant absorption peak with high intensity and the electric field with high enhancement factor. Then, the engineering of size and gap with nanowire of triangular structure is performed. Adjusting the triangular size and the gap of nanowire respectively, the results show that the corresponding extinction peak increases from 783 nm to 1638 nm monotonously with the size increasing from 70 nm to 210 nm, and the intensity and enhancement factor of electric field are enhanced. The size of 200 nm is six times the enhancement factor of 70 nm; Increasing the gap from 80 nm to 130 nm, the corresponding extinction peak decreases from 1655 nm to 1460 nm, with lightly weaken intensity and enhancement factor of electric field. So the optimal approach of tuning the size after the determined gap is appeared for the design of Au nano antenna structure.

Key words: Finite difference time domain; GaSb; Au nano antenna; Structural design; Structural engineering

OCIS Codes: 160.4236; 310.6028; 190.4350

基金项目: 国家自然科学基金 (Nos. 61404009, 61704011), 吉林省科技发展计划 (No. 20170520118JH) 和长春理工大学科技创新基金 (No. XJJLG-2016-14) 资助

第一作者: 谭伟 (1992-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为半导体材料理论计算. Email: xiaoweiwei618@sina.cn

导师: 魏志鹏 (1978-), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为半导体材料及器件. Email: zpweicust@126.com

通讯作者: 唐吉龙 (1977-), 男, 副教授, 博士, 主要研究方向为半导体材料的生长. Email: jl_tangcust@163.com

收稿日期: 2017-11-06; **录用日期:** 2018-02-02

<http://www.photon.ac.cn>

0 引言

低维半导体材料具有独特的光学、电学和热学等性质,其中 III-V 族半导体纳米线在红外波段的应用受到广泛关注.GaSb 具有带隙宽度窄、电子迁移率高等优点,可用于 1.55 μm 波段光电器件领域^[1].研究者们已经制备出 GaSb 薄膜基的激光器和探测器等光电器件^[2-3],得到了优异的特性.随着对半导体器件尺寸和集成化程度要求的不断提升,纳米结构的 GaSb 基光电器件成为目前的研究热点.对于纳米线光电器件而言,当其尺寸与发光或者探测波长相近时,光与纳米线的耦合作用将极大地减弱,从而限制了器件性能的提升.

表面等离子体具有对光的选择性增强吸收和散射、增强局域电场等特性,贵金属的表面等离子体已经被广泛应用于从分子传感到光操控等各个领域^[4-5].最常用的金属表面等离子体材料有 Au、Ag、Al 等^[6-7],其表面等离子体频率在紫外到可见区域,与红外激光器、探测器并不匹配,研究者们通过设计阵列纳米天线,改变其等离子体频率,从而达到匹配的目的^[8].在各种结构中,二聚体能够将电磁场限制和局域到纳米级,使近场吸收增强几个数量级,成为增强纳米线与光耦合的重要手段^[9-11].

研究人员在金属纳米天线等离子体方面取得了许多成果.如 LI W 等通过制备 Au 纳米粒子阵列结构,发现其共振吸收峰位与单体的 Au 纳米粒子相比发生了明显的移动,从消光光谱发现其消光强度发生了明显的增强^[12];LI J 等通过制备 Au-GaAs 量子阱结构,发现其能实现表面等离子体激元的激发^[13];PALA R A 等通过制备 Ag 的纳米阵列,发现其增强了太阳能电池对光的俘获^[14].通过改变纳米粒子直径可以使其消光峰位在可见区到近红外区连续变化^[15].目前,有关球形纳米颗粒形成的纳米天线的消光特性的研究主要集中在消光特性变化的原因和消光特性的调节^[16-19],关于其它非球形结构特性的文献则较少,亟待深入研究^[20-23].由于纳米阵列的制备工艺复杂、成本较高,研究者们多借助于模拟软件进行仿真分析,其中常用的计算方法是时域有限差分法(Finite-Difference Time-Domain, FDTD).

本文通过在 GaSb 纳米线两侧分别放置不同形状 Au 纳米结构构造纳米天线,研究形状改变对 GaSb 纳米天线结构的光学特性及表面等离子体特性的影响,利用表面等离子体共振实现吸收增强.采用三维时域有限差分程序对其进行仿真计算.比较了不同结构对光吸收增强的影响,分析了多边形顶角大小对增强效果的差异.通过改变 Au 纳米结构的尺寸、间隙等参数研究三角形结构对表面等离子体性能的影响.

1 理论基础

FDTD 法可归结为在特定的边界条件下,在时域和空域中求解 Maxwell 方程组.在时域中,Maxwell 方程组为

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{J} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}^* \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = \rho^* \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (4)$$

式中, \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{D} , \mathbf{B} 分别是电场强度,磁场强度,电位移矢量,磁感应强度; \mathbf{J}^* , \mathbf{J} 分别是电流密度和磁流密度; ρ , ρ^* 分别是电荷密度和磁荷密度.Yee 提出将空间进行立方体分割,那么电磁场的六个分量在空间上的取样点分布于立方体的边沿和表面的中心上,这种场分量的配置方法允许 Maxwell 方程做中心差分近似,因此能恰当地模拟电磁波的传播.利用中心差分近似可得到电磁场分量的时域有限差分方程,通过区域中的初始电磁场为零,然后在源的激励下,时域有限差分方程进行迭代,随着时间的发展,在有限的模拟区域内分布了离散的电磁场分量,近似为连续电磁波,得到整个模拟区域内的时域电磁信息.

利用 3D FDTD 法模拟金属和光波的相互作用. 在 SiO_2 表面放置直径为 70 nm 的 GaSb 纳米线, 在纳米线周围放置不同形状的金纳米结构, 厚度为 35 nm 的金纳米结构之间的间隙为 90 nm, 入射波为全场散射场模式的平面波, 垂直入射纳米天线结构, 边界条件为单轴向各向异性完全匹配层 (Uniaxial Perfectly Matched Layer, UPML), SiO_2 、GaSb 和 Au 的折射率为系统默认, 对纳米结构之间及纳米线周围的电场进行仿真分析. 以三角形金属盘为例, 模拟结构示意图如图 1.

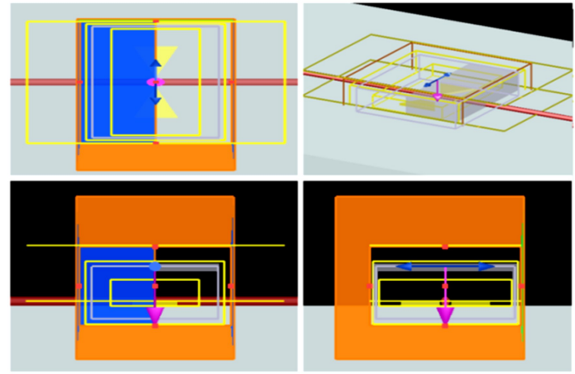


图 1 FDTD 模拟结构示意图

Fig.1 Scheme of simulated structure of FDTD

2 仿真结果及分析

2.1 不同形状 Au 纳米阵列的电场特性和光学特性

仿真中一共建立了 5 种不同形状 Au 纳米阵列, 分别是圆、正三角形、四边形、五边形、六边形. 图 2 对应各种形状的 Au 纳米阵列构成的纳米天线结构的 FDTD 电场分布. 选取 GaSb 纳米线进行仿真分析, 为了使吸收波长与禁带宽度相匹配以达到耦合增强的效果, 调节了各个形状的尺寸使其消光光谱峰位于 1 550 nm, 以此达到吸收光与 GaSb 纳米线的耦合作用的最大化. 观察波长为 1 550 nm 时, $z=35$ nm 处的电场分布, 如图 2(a)~(e) 所示, 最强电场集中在天线结构相距最近的位置, 各形状的电场分布于距离最近的顶角上. 同时, 统计的不同形状纳米天线电场增强倍数如图 2(f). 各形状的电场增强倍数分别为 26、70、60、49、43. 三角形的电场增强倍数最大, 圆形最小, 即随着多边形边数增加, 顶角角度逐渐减小, 电子在顶角处与

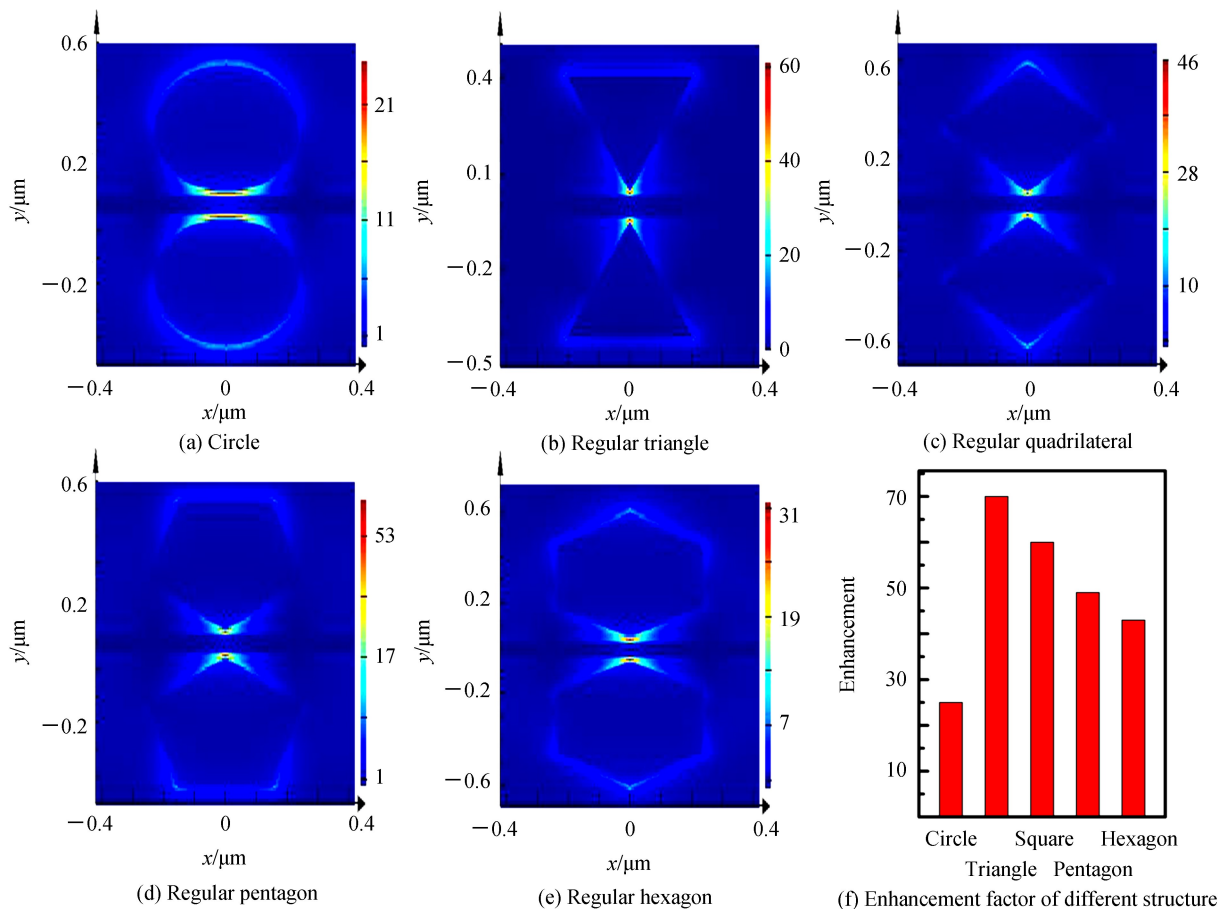


图 2 不同结构对应的电场分布和电场增强倍数

Fig.2 Distribution of electric field and enhancement factor of different structure

光的耦合增加.这是由于顶角越小使得电子在实空间的局域增强,当光入射时,光与电子的耦合增强.因此,可以通过对 Au 纳米天线阵列的结构进行设计和调节,从而有效调控近场能量,达到调控表面等离子体耦合效果的目的.

对不同形状的 Au 纳米阵列的吸收光谱和散射光谱进行研究.图 3(a)为纳米天线结构的吸收光谱.可以看到,每个结构的吸收光谱都有一个主峰位和小于主峰的新的消光峰位,主峰位都位于 1 550 nm,这是调节参数以达到吸收光与纳米线耦合作用最大化的结果,新的消光峰位主要由多极子耦合产生.值得注意的是消光主峰随着顶角角度逐渐减小,吸收强度逐渐增加,三角形结构的消光强度达到最大.同时,对各个结构下的散射光谱进行了探索,如图 3(b),形状的改变对散射强度几乎没有影响.

通过对不同形状的 Au 纳米阵列的纳米天线结构的电场特性和光学特性进行探究,发现三角形结构的电场增强倍数最大,由于其顶角角度最小,吸收光谱的主峰位强度最高,因此,三角形为最优的 Au 纳米天线结构形状.

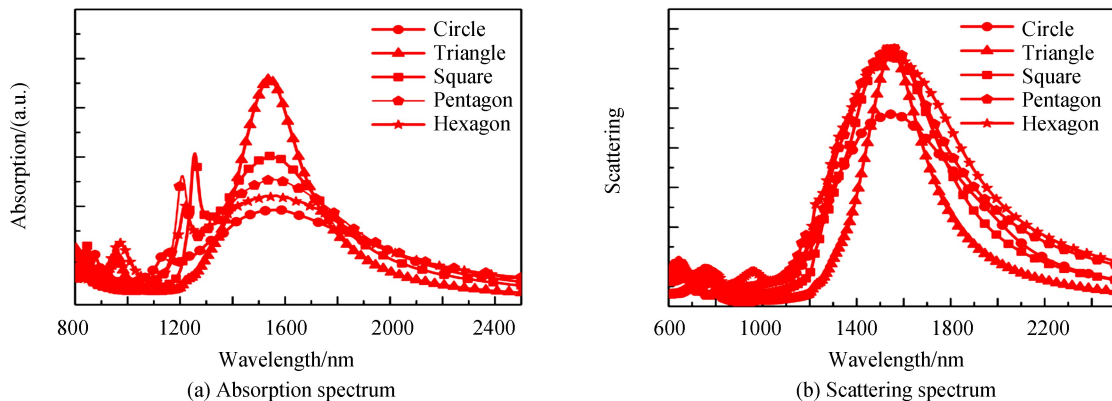


图 3 不同结构对应的光学特性
Fig.3 Optical properties of different structure

2.2 参数调节下的三角形 Au 纳米阵列的消光特性和电场特性

通过 2.1 节的分析,确定了三角形为 Au 纳米阵列的最优形状.在设计纳米天线结构时,设计出的纳米阵列的消光波长要与对应纳米线的带隙相匹配,以达到入射光与纳米线耦合作用的最大化,为此,基于三角形形状,研究了不同尺寸及与纳米线不同间距下的 Au 纳米阵列的消光谱线和电场增强倍数的变化规律.

固定间隙为 90 nm,以三角形的中心到任意顶点的距离表示三角形的尺寸,分别对尺寸为 70 nm、90 nm、110 nm、130 nm、150 nm、170 nm、190 nm、210 nm 的三角形纳米天线结构进行研究.图 4(a)展示了不同尺寸下的三角形纳米天线结构的消光光谱,尺寸由小到大,对应峰位为 783 nm、862 nm、918 nm、987 nm、1 056 nm、1 274 nm、1 436 nm、1 638 nm.此现象表明,随着三角形尺寸的增加,电子的有效区域增加,消光光谱的峰位红移,峰位强度逐渐增大.图 4(b)是不同尺寸下的三角形顶角的电场增强倍数变化曲线,可以看到,随着三角形尺寸的增加,场增强倍数逐渐变大.

选取 Au 纳米结构间距分别为 80 nm、90 nm、100 nm、110 nm、120 nm、130 nm.图 5(a)是不同间距下的三角形纳米天线结构的吸收光谱.当间距为 80 nm 时,对应消光光谱的主峰位在 1 655 nm,随着间距的增大,短波长处的峰位基本不变;长波长峰位逐渐蓝移,当间距增加到 130 nm 时,其对应消光光谱波长为 1 460 nm.电场增强的倍数变化曲线如图 5(b),随着间距的增加,电场增强倍数逐渐减小,这是由于间距逐渐增大时,天线之间的耦合作用减弱.

通过对不同尺寸、不同间距的三角形纳米天线结构的分析,可以看到在一定的间距下,通过改变三角形的尺寸能够实现消光峰位及电场增强倍数的单调变化,通过改变与纳米线的间距也能够实现消光峰位和增强倍数的单调变化,存在最优的电场增强倍数的间距.因此,可以先确定间距以实现最优电场增强倍数,然后改变尺寸,实现共振峰位的匹配.

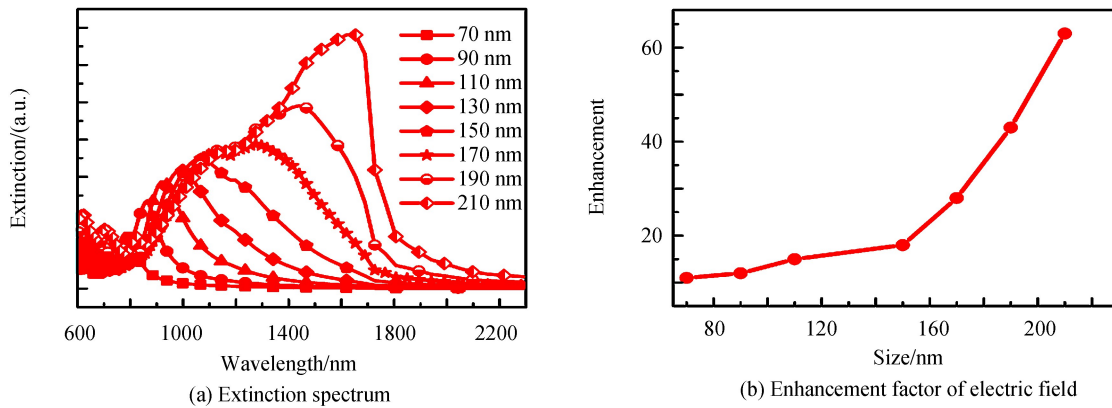


图 4 不同尺寸对应的消光特性和电场特性

Fig.4 Extinction and electric field properties of different size

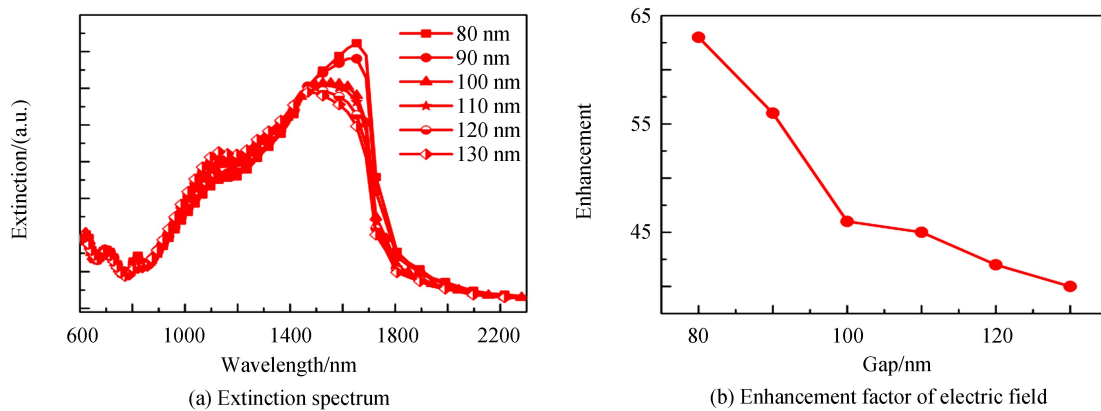


图 5 不同间距对应的消光特性和电场特性

Fig.5 Extinction and electric field properties of different gap

3 结论

本文基于 GaSb 纳米线,利用 FDTD 仿真软件,通过设计纳米天线结构有效调控了近场能量,进而研究了不同形状 Au 纳米阵列的纳米天线结构对电场特性和光学特性的影响,确定了三角形为最优的 Au 纳米天线形状.随后,调节三角形的尺寸和与纳米线的间距,发现三角形的尺寸与消光峰位和电场增强倍数呈单调变化趋势,间距与消光峰位和电场增强倍数也呈现单调趋势,同时,给出了先调节间距再调节尺寸的方法,以达到最优的结构性能.

参考文献

- [1] YONG C K, NOORI K, GAO Q, *et al.* Strong carrier lifetime enhancement in GaAs nanowires coated with semiconducting polymer[J]. *Nano Letters*, 2012, **12**(12): 6293-6301.
- [2] ALEKSEEV P A, DUNAEVSKIY M S, ULIN V P, *et al.* Nitride surface passivation of GaAs nanowires: impact on surface state density[J]. *Nano Letters*, 2015, **15**(1): 63-68.
- [3] CHANG C C, CHI C Y, YAO M Q, *et al.* Electrical and optical characterization of surface passivation in GaAs nanowires[J]. *Nano Letters*, 2012, **12**(9): 4484-4489.
- [4] ANDERSON L J, PAYNE C M, ZHEN Y R, *et al.* A tunable plasmon resonance in gold nanobelts[J]. *Nano Letters*, 2011, **11**(11): 5034-5037.
- [5] DARVILL D, CENTENO A, XIE F. Plasmonic fluorescence enhancement by metal nanostructures: shaping the future of bionanotechnology[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2013, **15**(38): 15709-15726.
- [6] UZAYISENGA V, LIN X D, LI L M, *et al.* Synthesis, characterization, and 3D-FDTD simulation of Ag@SiO₂ nanoparticles for shell-isolated nanoparticle-enhanced Raman spectroscopy[J]. *Langmuir*, 2012, **28**(24): 9140-9146.
- [7] LANGHAMMER C, SCHWIND M, KASEMO B, *et al.* Localized surface plasmon resonances in aluminum nanodisks [J]. *Nano Letters*, 2008, **8**(5): 1461-1471.
- [8] CASADEI A, PECORA E F, TREVINO J, *et al.* Photonic-plasmonic coupling of GaAs single nanowires to optical

- nanoantennas[J]. *Nano Letters*, 2014, **14**(5): 2271-2278.
- [9] FANG Z, FAN L, LIN C, *et al.* Plasmonic coupling of bow tie antennas with Ag nanowire[J]. *Nano Letters*, 2011, **11**(4): 1676-1680.
- [10] SUH J Y, KIM C H, ZHOU W, *et al.* Plasmonic bowtie nanolaser arrays[J]. *Nano Letters*, 2012, **12**(11): 5769-5774.
- [11] WARD D R, HUSER F, PAULY F, *et al.* Optical rectification and field enhancement in a plasmonic nanogap[J]. *Nature Nanotechnology*, 2010, **5**(10): 732-736.
- [12] LI W, YING Y, QIAO X, *et al.* Plasmonic metasurface for light absorption enhancement in GaAs thin film[J]. *Plasmonics*, 2016, **11**(5): 1401-1406.
- [13] LI J, WEI H, SHEN H, *et al.* Electrical source of surface plasmon polaritons based on hybrid Au-GaAs QW structures [J]. *Nanoscale*, 2013, **5**(18): 8494-8499.
- [14] PALA R A, WHITE J, BARNARD E, *et al.* Design of plasmonic thin - film solar cells with broadband absorption enhancements[J]. *Advanced Materials*, 2009, **21**(34): 3504-3509.
- [15] KOHNEPOUSHI S, ESKANDARI M, AHMADI V, *et al.* Effects of morphology, diameter and periodic distance of the Ag nanoparticle periodic arrays on the enhancement of the plasmonic field absorption in the CdSe quantum dots[J]. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 2016, **21**: 52-59.
- [16] KIM R S, ZHU J, PARK J H, *et al.* E-beam deposited Ag-nanoparticles plasmonic organic solar cell and its absorption enhancement analysis using FDTD-based cylindrical nano-particle optical model[J]. *Optics Express*, 2012, **20**(12): 12649-12657.
- [17] DRIDI M, VIAL A. FDTD modeling of gold nanoparticles in a nematic liquid crystal: quantitative and qualitative analysis of the spectral tunability[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2010, **114**(21): 9541-9545.
- [18] LEE K M, YOON S G, JEONG J R. Localized surface plasmon resonance coupling in self-assembled ag nanoparticles by using 3-dimensional FDTD simulation[J]. *Korean Journal of Materials Research*, 2014, **24**(8): 417-422.
- [19] BOUALI A, HAXHA S, ABDELMALEK F, *et al.* Tuning of plasmonic nanoparticle and surface enhanced wavelength shifting of a nanosystem sensing using 3-D-FDTD method[J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2014, **50**(8): 651-657.
- [20] YONG Z, ZHANG S, GONG C, *et al.* Narrow band perfect absorber for maximum localized magnetic and electric field enhancement and sensing applications[J]. *Scientific Reports*, 2016, **6**: 24063.
- [21] WANG T, ZHANG Z, LIAO F, *et al.* The effect of dielectric constants on noble metal/semiconductor SERS enhancement; FDTD simulation and experiment validation of Ag/Ge and Ag/Si substrates[J]. *Scientific Reports*, 2014, **4**: 4052.
- [22] ZHANG X, LIU G, HU Y, *et al.* Tunable extraordinary optical transmission in a metal film perforated with two-level subwavelength cylindrical holes[J]. *Plasmonics*, 2014, **9**(5): 1149-1153.
- [23] DE ANGELIS F, LIBERALE C, COLUCCIO M L, *et al.* Emerging fabrication techniques for 3D nano-structuring in plasmonics and single molecule studies[J]. *Nanoscale*, 2011, **3**(7): 2689-2696.