

超高温金属纳米结构增强吸收特性的仿真研究

杨舒涵, 康宇晨, 王艳红, 武京治, 李仰军

(中北大学 电子测试技术重点实验室, 山西 太原 030051)

摘要: 利用表面等离子体改变材料吸收光谱特性越来越受到关注。为了增强超高温金属纳米结构的吸收特性, 设计了超高温金属-金属以及膜层-金属-金属表面等离子体周期纳米结构, 仿真分析其在波长 200~4 000 nm 光谱范围内, 不同参数对材料吸收谱特性的影响。仿真分析表明, 不同参数的吸收光谱中均会出现吸收峰, 且吸收率达 93% 以上。而介电材料、金属纳米结构的周期、尺寸和深度是影响吸收率的主要因素。同时, 介电材料和周期还会对吸收峰出现的位置产生影响。该仿真结果为超高温表面等离子体材料的吸收特性应用的研究提供了理论基础。

关键词: 表面等离子体; 超高温; 纳米结构; 吸收谱

中图分类号: O433 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201645.1216001

Simulation research on absorption enhancement characteristics of ultra-high temperature metal nanostructures

Yang Shuhan, Kang Yuchen, Wang Yanhong, Wu Jingzhi, Li Yangjun

(Science and Technology on Electronic Test and Measurement Laboratory, North University of China, Taiyuan 030051, China)

Abstract: The selectivity of absorption spectrum by using surface plasmonics have attracted more and more research attentions. In this paper, the periodical surface plasmonic nanostructures were presented, which consist of metal nanostructures on metallic substrate, to enhance absorption rate of ultra-high temperature metal nanostructures. The characteristics of materials' absorption have been simulated and analyzed by changing different parameters in the range of wavelength 200–4000 nm. The simulation results indicate that there always appear absorption peaks and they reach over 93% at absorption spectrum with all different parameters. The dielectric material, period, depth and size of nanostructure are the main factors for the absorption spectrum. Further, the dielectric material and period of nanostructure also have obvious selectivity characteristics on the position of absorption peak. The study results can provide theoretical foundation for ultra-high temperature surface plasmonic materials absorption characteristics.

Key words: surface plasmonics; ultra-high temperature; nanostructure; absorption spectrum

收稿日期: 2016-04-17; 修订日期: 2016-05-20

基金项目: 国家青年科学基金(11304289); 电子测试技术国防重点实验室基金

作者简介: 杨舒涵(1992-), 女, 硕士生, 主要从事表面等离子体增强效应方面的研究。Email: 476381307@qq.com

导师简介: 李仰军(1967-), 男, 教授, 主要从事光电精密仪器、光电探测理论与技术方面的研究。Email: liyangjunnuc@163.com

0 引言

材料的微纳结构^[1]能够产生很多独特的光学特性,如负折射率、完美吸收和透射,这些特性是自然界材料所不具备的,被称为超材料^[2]。1968年,Veselago就对在某一特定频率,具有负介电常数和磁导率的材料进行了理论上的研究^[2]。在 Veselago 研究的基础上,Pendry、Smith 等几位科学家也对这种具有特殊性质的材料进行了研究^[2]。由于表面等离子体材料能够明显地提高对电磁波的吸收率,未来它可以被广泛地应用于医疗、军事、航空航天、太阳能电池、生活等各种领域,为科学的发展和生活质量的提高带来便利^[3-6]。目前对超材料的研究越来越引起人们的注意。国内外对这种材料的研究已经取得了一定的进展:设计出了金属-膜层-金属周期纳米结构^[7],实现了超材料在 THz、GHz、红外及可见光范围内的完美吸收^[8]。

目前研究中所采用的金属材料还存在一定的缺陷,如易氧化、硬度低等,在众多的金属材料中,试图选用一种在实现较高吸收率的同时具有“耐高温、抗腐蚀、强度大、易加工”等优良特性的金属材料^[9]。比较常用的耐高温金属材料有钨和钽,钨的物理特性非常强,熔点最高,同时具有防腐性,可广泛应用于航空等领域和高温环境下^[10]。钽的熔点较高,富有延展性和较强的韧性,易加工,成本低,常被用作飞机发动机燃烧室的结构材料。

对超材料吸收体的研究已成为目前科学研究和发展的一个新方向,综合考虑钨和钽的物理特性和化学特性,由于钨的熔点比钽更高,因此在这篇文章中,用基于有限时域差分(FDTD)算法进行理论仿真,选用金属钨作为基底材料,设计出了周期纳米结构体,在波长 200~4 000 nm 的光谱范围内,分析纳米结构的周期、深度以及金属材料的尺寸等因素对光谱吸收峰位置及大小的影响。

1 超高温周期纳米结构吸收体

文中设计的周期纳米结构吸收体由两层金属结构叠放而组成,结构示意图如图 1 所示。顶层选用条状的金属结构钨,它的作用是通过与入射区域的阻抗匹配来减小反射,使反射最小化;底层选用无穷大

的相同金属材料钨作为基底,作用是避免光穿透金属底层^[11]。 h 和 w 分别是金属结构的高度和宽度, p 是结构体的周期。用一束波长范围 λ 是 200~4 000 nm 的平面光从结构体的上方垂直照射金属,通过监测器去监测光谱的反射率 R 和透射率 T ,从而根据公式 $A=1-R-T$ 便可计算出光谱吸收率^[11]。通过仿真进行研究,改变结构体的周期、金属尺寸和深度。除此之外,还可以增加一层介电材料作为保护膜,为了简化,在二维尺度上讨论了这些因素对吸收率和吸收峰位置的影响。

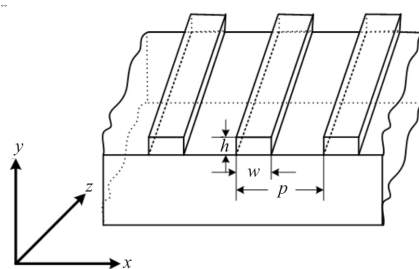


图 1 周期纳米结构

Fig.1 Periodical nanostructure

1.1 结构周期对吸收率的影响

不同尺度的纳米结构会影响光谱吸收率、吸收峰的位置、吸收谱宽度。为了更详细地分析各结构参数对吸收光谱特性的影响,首先对周期参数采用 FDTD 方法进行仿真计算。设置结构体的周期 p 范围为 500~1 500 nm,每隔 10 nm,根据吸收率公式进行一次计算,得到吸收谱与波长的关系,然后根据公式 $\lambda=c/f$ (λ 是波长, c 是光速, f 是频率)可以得到不同周期的吸收谱与频率的关系,将其用图像表示出来,如图 2 所示。当 $f=323$ THz、 $p=900$ nm 时,光谱吸

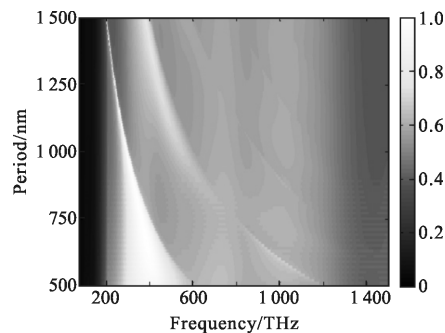
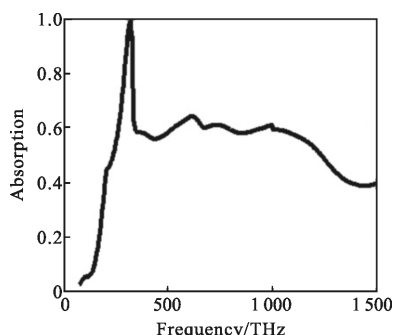


图 2 不同周期的吸收谱

Fig.2 Absorption spectrum with different periods

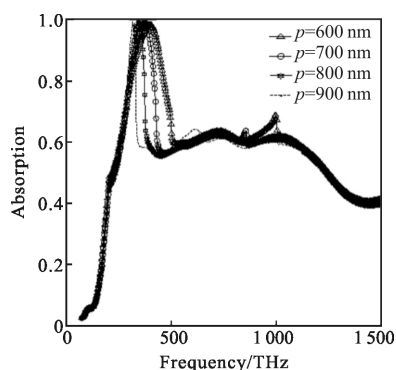
收率高达 99%,如图 3(a)所示,且周期会对吸收峰的

位置产生影响,随着周期的增大,吸收峰所对应的频率越来越小,即波长越来越大,而带宽逐渐减小,如图 3(b)所示。此外,在大于吸收峰的频率范围内,随着周期的增大,吸收率逐渐减小。图 3(c)是周期 $p=900$ nm、频率 $f=323$ THz 所对应的电场分布图,在自由空间与金属表面的交界处,由于入射光波与表面等离子激元耦合激发产生等离子体共振,表现为界面场强的明显增强,因此在该频率出现吸收峰。



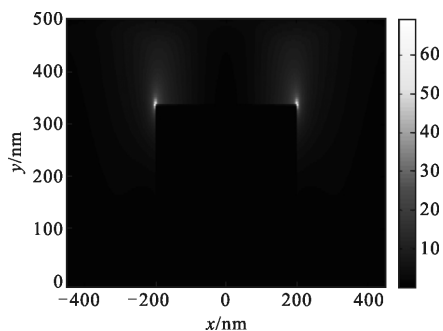
(a) 周期是 $p=900$ nm 的光谱吸收图

(a) Absorption spectrum with the period of 900 nm



(b) 周期分别是 $p=600$ 、 700 、 800 、 900 nm 的吸收谱对比图

(b) Absorption spectra with the period of 600, 700, 800, 900 nm



(c) 周期是 $p=900$ nm 的电场分布图

(c) E-field with the period of 900 nm

图 3 基于频率的吸收光谱

Fig.3 Absorption spectra based on frequency

1.2 金属纳米结构宽度对吸收率的影响

在验证了周期与吸收谱的关系后,选取了最优化的周期 $p=900$ nm。为了进一步优化纳米结构吸收体,提高电磁波的吸收率,进一步分析金属结构的宽度对吸收率大小及吸收峰位置产生的影响,取金属纳米结构的宽度 $w=200\sim 850$ nm,每隔 10 nm 进行一次计算,用上述同样的方法得到不同宽度的吸收谱与频率的关系,如图 4 所示。在吸收比较强的范围内选取几个不同的宽度 $w=350$ 、 400 、 450 、 500 、 550 nm,将其绘制成曲线图,如图 5 所示,进行比较。仿真结果表明:宽度的改变对吸收峰的位置并不会产生明显的变化,几乎都是在 $f=317$ THz 的位置,当宽度 $w=400$ nm 时,吸收峰值达到最大,超过 99%。在小于吸收峰频率的范围内,随着宽度的增大,吸收率逐渐增大。在纳米结构周期的基础上又一次对金属结构的宽度进行了优化,得到了一个吸收效果非常好的结构参数。

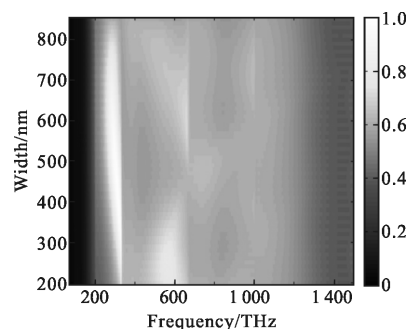


图 4 不同宽度的吸收谱

Fig.4 Absorption spectra with different width

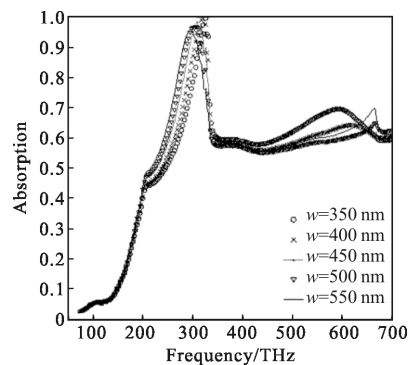


图 5 宽度分别是 $w=350$ 、 400 、 450 、 500 、 550 nm 的吸收谱

Fig.5 Absorption spectra with the width of 350, 400, 450, 500, 550 nm

1.3 金属纳米结构深度对吸收率的影响

在前面数值计算基础上,选取合适的周期和宽

度,进一步对金属结构的深度 h 进行优化。选取高度范围 $h=50\sim 500\text{ nm}$,每隔 10 nm 进行一次计算,得到不同深度的吸收谱与频率的关系,如图 6 所示。在吸收较强的地方,选取几个不同的深度 $h=110、120、130、140、150\text{ nm}$ 将其绘制成吸收曲线图,便于比较,如图 7 所示。 $f=303\text{ THz}$ 、 $h=120\text{ nm}$ 时,吸收谱达到最大值高于 99%。在小于吸收峰的频率范围内,随着深度的增大,吸收率也逐渐增大。此外,深度的改变对吸收峰位置的影响非常小,在一定范围内,随着深度的增加,吸收峰所对应的频率略微增大,而这种微小的变化可以忽略。

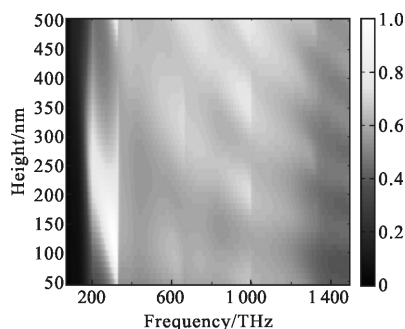


图 6 不同高度的吸收谱

Fig.6 Absorption spectra with different height

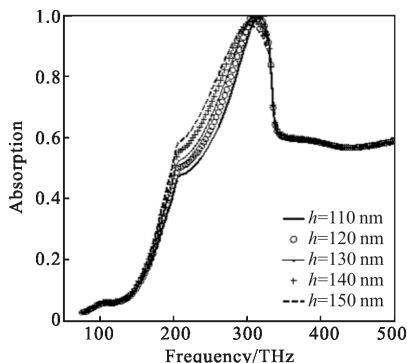


图 7 高度分别为 $h=110、120、130、140、150\text{ nm}$ 的吸收光谱图

Fig.7 Absorption spectra with the height of 110, 120, 130, 140, 150 nm

1.4 纳米结构完美吸收体

经过 3 次参数优化,分别找到了能完美提高吸收峰值的金属结构宽度 $w=400\text{ nm}$ 、深度 $h=120\text{ nm}$ 及结构周期 $p=900\text{ nm}$,从而得到了二维尺度上纳米结构完美吸收体。认为该结构的吸收机理有两个:第一个是顶层的金属纳米周期结构能够在谐振波长处产生表面等离子体效应,使得光场被限制在结构附近并增强,增加了金属对光的吸收率;第二个是当光

源照射在结构上,金属表面原子的振动频率与光源的频率相同就会引起共振,分子吸收能量由原来的基态跃迁到较高能量的低激发态,该频率处的光就被金属表面吸收^[1]。绘制出该结构下金属表面的电场分布图,如图 8 所示。从图中可以看出,自由空间和金属交界的界面处电场明显增强,因此,该结构能够实现较完美的超吸收。

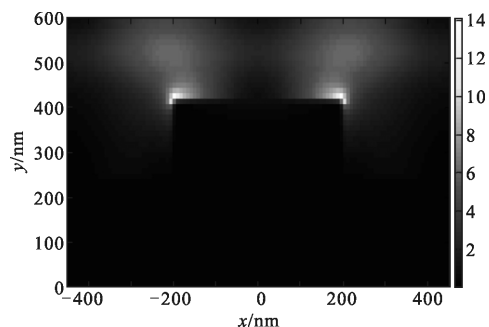


图 8 优化结构的电场分布图

Fig.8 E-field of the optimization structure

1.5 介电材料对吸收光谱的影响

考虑到实际应用中,金属在高温环境下容易被氧化,因此在加工的过程中,为了防止氧化,可以在金属表面镀一层很薄的抗氧化介电材料 Al_2O_3 。下面将分析介电材料是否会对结构体的吸收产生影响。图 9 是镀膜后的吸收谱与没有镀膜的吸收谱的对比。从图中可以看出,镀 Al_2O_3 膜层的结构,当膜层厚度 $n=30\text{ nm}$ 时,在波长 $\lambda=283\text{ nm}$ 和 $\lambda=1\ 059\text{ nm}$ 处,光谱吸收率分别达到 96.4% 和 99.8%,当膜层厚度 $n=40\text{ nm}$ 时,在波长 $\lambda=344\text{ nm}$ 和 $\lambda=1\ 100\text{ nm}$ 处,光谱吸收率分别达到 93.5% 和 99.7%,当膜层厚度 $n=50\text{ nm}$ 时,在波长 $\lambda=454\text{ nm}$ 和 $\lambda=1\ 139\text{ nm}$ 处,光谱吸收率分别达到 90.9% 和 99.6%,随着膜层厚度的增加,光谱吸收率也产生了规律性变化,吸收峰值发生红移;而没有镀膜的结构在波长 $\lambda=961\text{ nm}$ 处光谱吸收率达到 99.9%,这个变化是非常明显的。分析产生这种变化的原因,镀膜结构每种膜层厚度对应的短波处的吸收峰是由基本的磁共振所引起的,长波处的吸收峰是入射光波与表面等离激元耦合激发产生等离子体共振作用的结果^[1]。当膜层厚度 $n=40\text{ nm}$ 时,两个吸收峰对应的波长处的电场分布图如图 10 所示。从图中可以看出,自由空间与金属界面的交界处产生了很强的电场,但电场在金属表面的分布不

均匀,边缘处的场强最强,这就是表面等离子效应对光场限制和增强的结果。

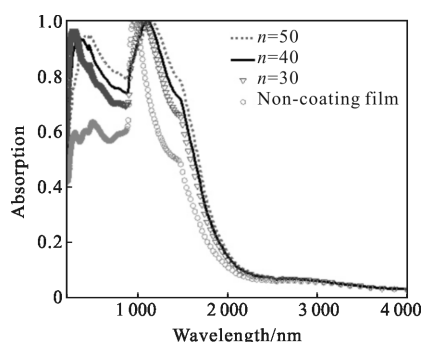
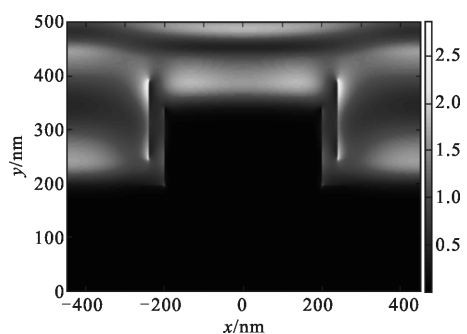


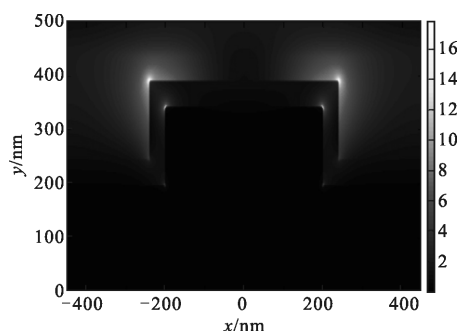
图 9 镀膜与非镀膜吸收谱对比图

Fig.9 Absorption spectra of coating film and non-coating film



(a) $\lambda=344$ nm 电场分布图

(a) E-field with the wavelength of 344 nm



(b) $\lambda=1100$ nm 电场分布图

(b) E-field with the wavelength of 1100 nm

图 10 镀膜结构 $n=40$ nm 电场分布图

Fig.10 E-field of coating film structure with $n=40$ nm

2 结论

等离子体纳米结构作为吸收体,用来吸收金属表面的电磁波,将吸收的能量转化成热能。经过研究,验证了带有亚波长特性的周期表面等离子体纳米结构能够产生独特的增强吸收特性,且对光谱的吸收峰值及位置具有选择性,通过设计不同结构和

尺寸的纳米结构可以改变光谱吸收特性。该超高温表面等离子体纳米结构的光谱特性,充分说明了在光热转换过程中,利用超材料进行有效能量捕获的可行性。该结构的研究对于微波加热、飞机表面电磁波的吸收、太阳能电池、光热捕获、热能循环以及真空中的热量释放等具有参考价值。

参考文献:

- [1] Li Zhiyuan, Li Jiafang. Recent progress in engineering and application of surface plasmon resonance in metal nanostructures[J]. *Chinese Sci Bull (Chinese Ver)*, 2011, 56(32): 2631-2661. (in Chinese)
- [2] Young Joon Yoo, Sanghyun Ju, Sang Yoon Park, et al. Metamaterial absorber for electromagnetic waves in periodic water droplets[J]. *Scientific Reports*, 2015, 5(10): 1-8.
- [3] Koray Aydin, Vivian E Ferry, Ryan M Briggs, et al. Broadband polarization-independent resonant light absorption using ultrathin plasmonic super absorbers [J]. *Nature Communications*, 2011, 2(1): 193-198.
- [4] Ren Fanghui, Wang Xiangyu, Wang Alan X. Thermo-optic modulation of plasmonic bandgap on metallic photonic crystal slab[J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102(18): 1-5.
- [5] Gustav Edman Jonsson, Vladimir Miljkovic, Alexandre Dmitriev. Nanoplasmon-enabled macroscopic thermal management[J]. *Scientific Reports*, 2014, 4(22): 5111-5115.
- [6] Ji Dengxin, Song Haomin, Zeng Xie, et al. Broadband absorption engineering of hyperbolic metafilm patterns [J]. *Scientific Report*, 2014, 4(3): 1-2.
- [7] Mo Lei, Yang Liu, Lee El Hang, et al. High-efficiency plasmonic metamaterial selective emitter based on an optimized spherical core-shell nanostructure for planar solar thermophotovoltaics[J]. *Plasmonics*, 2015, 10: 529-538.
- [8] Rhee J Y, Yoo Y J, Kim K W, et al. Metamaterial-based perfect absorbers[J]. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 2014, 28(13): 1541-1580.
- [9] Chen Xuegang, Ye Ying, Cheng Jipeng. Recent progress in electromagnetic wave absorbers [J]. *Journal of Inorganic Materials*, 2011, 26(5): 449-457. (in Chinese)
- [10] Zhang Peng, Zhu Qiang, Qin Heyong, et al. Recent process of high temperature materials for aero-engines [J]. *Materials Review A*, 2014, 28(6): 27-37. (in Chinese)
- [11] Yoo Young Joon, Kim Young Ju, Lee Young Pak. Perfect absorbers for electromagnetic wave, based on metamaterials [J]. *Journal of the Korean Physical Society*, 2015, 67(7): 1095-1109.