球形谐振腔表面结构对银的增强辐射性能

方俊飞,邓建平,张鹏超

(陕西理工大学 陕西省工业自动化重点实验室,陕西 汉中 723001)

摘 要:研究了球形谐振腔对单质银辐射特性的影响作用,结果表明在谐振腔的谐振波长处材料的 吸收率有所增加。对于良导体 Ag 而言,吸收率光谱呈现出窄带吸收的特性,吸收峰的位置相对于理 想导体形成谐振腔的谐振波长向长波方向偏移,这是由于趋肤深度的存在使得 Ag 构成的谐振腔等 效于一个尺寸略大的理想导体谐振腔。探讨了吸收率随球形腔体的切入深度、腔体半径、点阵周期以 及入射角和极化角等的变化关系。研究表明可以通过合理设计球形腔体的结构尺寸以获得最优的窄 带吸收效果,这为窄带辐射器的制作提供了一种简单有效的方法。

关键词:热辐射; 窄带辐射器; 谐振腔; 吸收率

中图分类号: TE09 文献标志码: A DOI: 10.3788/IRLA201645.0916001

Enhancement of radiative properties of silver by surface structure with spherical resonant cavity

Fang Junfei, Deng Jianping, Zhang Pengchao

(Shaanxi Key Laboratory of Industrial Automation, Shaanxi Sci-Tech University, Hanzhong 723001, China)

Abstract: The influence of spherical resonant cavity on the radiative characteristics of silver was studied, and the results show that the absorptance is increased in the resonance wavelength. As for a good conductor, the absorption spectrum of silver shows the feature of narrow-band absorption. The absorption peak of the resonance wavelength was shifted to the long wavelength compared to the peak of the resonance wavelength formed by a perfect conductor. Due to the presence of skin depth, the resonant cavity was equivalent to a resonant cavity formed by a perfect conductor with a slightly larger size. With computational results, the effects of structural parameters such as the depth of the resonant cavity, the radius of the cavity, the lattice period, the incident angle and the polarization angle on the absorptance of the spherical resonant cavity were discussed. The results indicate that the optimal narrow-band absorption effect can be obtained by reasonably designing the structure size of the spherical resonant cavity and this implies an effective approach for fabricating narrow-band emitter.

Key words: thermal radiation; narrow-band emitter; resonant cavity; absorptivity

陕西理工大学科研计划(SLGKYQD2-28)

作者简介:方俊飞(1982-),男,讲师,博士,主要从事微/纳尺度辐射传热方面的研究。Email:jffang@snut.edu.cn

收稿日期:2016-01-17; 修订日期:2016-02-22

基金项目:陕西省科技统筹创新工程计划(2014SZS16-K02);陕西省教育厅科研计划(15JK1115);

0 引 言

近几年许多研究者对周期性的表面结构进行了 深入的研究,因为其在从光子晶体设备到传感器的 诸多领域中具有广泛的应用前景。利用光子禁带效 应,周期性结构表面可以应用于滤波器、光开关、光 电设备等领域^[1-3]。已有研究表明将金属表面加工成 腔体结构的形式,由于表面等离子体极化^[4-7]、表面 声子极化以及空腔谐振效应等^[8-9]因素的影响,材料 的吸收率会显著增加。到目前为止,已经进行了很多 理论和实验研究以理解增强吸收的机理以及拓展它 在高效白炽灯、选择性辐射器、热光伏能量转化系统 等方面^[9-12]的应用。

许多学者对周期性微腔点阵结构的热辐射增强 作用进行了比较深入的研究。Maruyama 等人^[9]指出 方形空腔表面可以增大 Cr 的吸收率,并且计算了不 同尺寸下的 Cr 方形空腔对吸收率的影响。Jiang 等 人^[4]报道了圆柱形孔阵列的辐射增强作用并且将其 应用于等离子体热辐射器。Sai 等人^[13]将钨的表面加 工成二维光栅结构,并指出通过合理选择空腔尺寸 可以得到与 GaSb 热光伏电池相匹配的吸收率曲线。

文中利用时域有限差分 (FDTD) 方法计算了具 有周期性球形空腔点阵表面结构 Ag 的吸收率,并讨 论了腔体的切入深度、腔体半径、点阵周期等因素对 吸收率的影响。根据计算结果可以知道,具有球形空 腔点阵表面结构 Ag 的吸收率呈现窄带峰值吸收的 特性,且吸收峰的位置和相同尺寸的理想导体谐振 腔的谐振波长的位置符合地较好。

1 FDTD 方法

利用 FDTD 方法进行电磁场计算的基础是麦克 斯韦旋度方程^[14]:

$$\nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t}$$

$$D = \varepsilon E$$

$$\nabla \times E = \frac{\partial B}{\partial t}$$

$$B = \mu H$$
(1)

式中:E 为电场强度;H 为磁场强度; ε 表示复介电常数; μ 表示复磁导率。对于各向同性介质有 $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$, $\mu = \mu_0 \mu_r$,其中 ε_r 和 μ_r 分别为相对复介电常数和相对 复磁导率。

利用中心差分对麦克斯韦方程组(1)进行离散。 为了保证算法的收敛性,FDTD 离散网格和时间间 隔的确定如下: $\Delta t = \delta/(2c)$ 。其中 c 为真空光速, Δt 为 FDTD 计算时的时间间隔, δ 为 FDTD 计算时的最小 空间间隔。

确定目标区域后将目标区域网格化,再根据每 个节点所处的位置确定其是否位于目标上,并为其 赋予相应的电磁参数。如图1所示,分别在目标区域







的左右两侧设置反射和透射能量收集面。z 方向设置 为完全匹配层(PML)吸收边界条件。所谓 PML 边界 条件,即是在最靠近计算区域人为设置的几层对电 磁波无反射且快速衰减的介质层。当 PML 介质层的 电导率 σ 和导磁率 σ_m 满足如下的关系时^[14]:

$$\frac{\sigma}{\varepsilon_M} = \frac{\sigma_m}{\mu_M} \tag{2}$$

式中: ε_{M} 和 μ_{M} 为与 PML 紧密相连的媒质的介电常数和磁导率,此时 PML 的波阻抗与媒质的波阻抗完 全相同,满足阻抗匹配条件,入射波将无反射地从媒 质中进入 PML 并在 PML 中指数衰减。一般 PML 的 厚度取 7~8 个空间网格就可以保证进入其中的电磁 波完全衰减,达到很好的吸收效果。x和y方向设置 为周期性边界条件。以x方向为例,周期边界条件可 以表达为^[14]:

$$E(x+a, y, z, t) = E(x, y, z, t-a/v_{\phi x})$$
(3)

$$E(x, y, z, t) = E(x+a, y, z, t+a/v_{\phi x})$$

$$(4)$$

式中:E表示电场;t表示 FDTD 计算中的时间; v_{dx} 表示沿着 x 方向的相速;a表示沿着 x 方向的周期。对于周期边界的磁场,表达式与电场相同。

2 结果和讨论

根据基尔霍夫定律,材料的光谱吸收率等于光

谱发射率,所以可以通过研究光谱吸收率来获得光 谱发射率的特性。球形腔体表面结构模型如图2所 示,图中虚线划定部分为一个周期性元胞,各个元胞 呈正方形点阵排列,点阵周期为a:球形空腔的半径 为r,球形腔体的球心到表面的距离定义为切入深度 h:结构沿z方向的厚度为d,要求d足够厚以使得透 过率为零。定义球心的切入深度和球腔半径的比值 为g,g的大小表征了切入Ag中的球形腔体趋向于 完整球体的程度,g越接近于1腔体越接近于完整 球体。整个结构放置于空气环境中,沿 x 和 y 方向无 限延伸。图2中的坐标方位和图1中的是对应的,选 取一个周期性元胞作为图1中FDTD计算的目标区 域,即可算出整个结构的光谱特性。图中右上角部分 描述了入射波和材料界面的方位关系以及入射波本 身的极化特性。入射波矢量与界面法线的夹角为天 顶角 θ ; 波矢量在界面上的投影与x方向的夹角为 方位角 ϕ ;波矢量和界面法线构成的平面为入射面, 入射电场与入射面的夹角为极化角 φ 。下面分别讨 论吸收率特性随切入深度h、球形空腔的半径r、点 阵周期 a 以及天顶角 θ 和极化角 φ 的变化关系。Ag 的光学参数引自参考文献[15]。



图 2 球形谐振腔结构模型 Fig.2 Model of the spherical resonant cavity structure

2.1 切入深度的影响

点阵周期为 a=4.0 μm, 球腔半径 r=1.6 μm,结 构厚度 d=5.0 μm。计算了入射平面波垂直于界面入 射时的吸收率谱线随切入深度 h 的变化关系, 如图3 所示。由图可以看到,和平整表面相比,腔体表面的 吸收率有了明显的增强。当切入深度 h 小于 1.5 μm 时,随着 h 的增大吸收峰的带宽趋窄并且峰的强度 有所增强。但是当 h 进一步增大时,由于进入球形腔 中的电磁波减少峰的强度开始减弱。由理想导体构成的球形谐振腔的谐振波长可以由下式^[10]算得:

$$\Lambda_{mnp} = \frac{2\pi r}{x_{mn}} (\text{TE } \texttt{E})$$
(5)

式中: x_{np} 为第一类 m 阶球贝塞尔函数的第 p 个根; $x_{np'}$ 为第一类 m 阶球贝塞尔函数导数的第 p 个根;m和 p 均为正整数;n 为小于 m 的整数;r 表示球形腔 体的半径。 x_{np} 和 $x_{np'}$ 的取值可以通过查表得到^[16]。公 式(5)和(6)中的 TE 模和 TM 模指的是球形腔中的电 磁波的模式,而不是入射波的电磁波模式。



图 3 法向光谱吸收率随切入深度的变化关系

Fig.3 Relationship between the normal spectral absorptivity and the penetration depth

根据公式(5)和(6)算得最大的谐振波长为 3.664 µm,对应于 TM₁₀₁模式,即该波长对应的 m、 n、p的取值分别为1、0、1。由图3可以看到,在 TM₁₀₁ 模式谐振波长的附近存在着一个吸收峰。随着腔体 逐渐趋向于完整球体,吸收峰也越来越靠近谐振波 长的位置。另外,还可以观察到,由 Ag 构成的球形 腔体趋向于完整球体时虽然吸收峰的位置逐渐趋向 于谐振波长的位置,但是仍向长波方向有略微的偏 移。这是因为对于实际导体 Ag,电磁波接触到导体 壁以后要在材料中传播一段距离才会消失,表征该 效应的典型参数为趋肤深度。趋肤深度的计算公式 为: $dp=\lambda/(2k)$,其中k为材料的消光系数。可以算得 Ag 的趋肤深度约为 20~30 nm,由于趋肤深度的存 在,由 Ag 构成的谐振腔实际上相当于一个尺寸略大 的理想导体谐振腔。

2.2 球腔半径的影响

维持切入深度和球腔半径的比值g不变,这里 设定其值为0.9375,点阵周期为a=4,结构厚度d=5, 分别计算了球腔半径 r 为 1.2 μm 和 1.6 μm 时的法 向光谱吸收率,如图 4 所示。由于波长趋短时吸收峰 排列的非常密集,为了便于区分曲线,所以对于 r= 1.2 μm 和 1.6 μm 分别只计算了 3.5~6.0 μm 和 2.5~ 3.1 μm 波段的光谱吸收率。可以看出,当球腔半径变 小时,吸收峰向短波方向移动,由公式(5)、(6)知道谐 振波长和球形腔的半径成正比,半径减小以后空腔 谐振引起的吸收峰也会相应成比例地移向短波方 向,图中 TM₁₀₁模式对应的两个吸收峰的比例关系和 半径的比例相同。从图中还可以看到球腔半径减小 以后吸收峰的强度也变小,这是因为半径变小以后 球形腔部分占整个元胞的比例减小,使得入射到元 胞上的电磁波进入球腔的部分变少导致的。



图 4 不同球腔半径时的法向光谱吸收率



2.3 点阵周期的影响

设定球腔半径 r=1.2 μm, 球腔切入深度和球腔 半径的比值 g=0.9375,结构厚度 d=5 μm。分别计算 了点阵周期 a 为 3 μm 和 4 μm 时的法向光谱吸收 率,如图 5 所示。明显可以看到点阵周期减小时 TM₁₀₁模式对应的吸收峰的强度在增大。这是因为在



图 5 不同点阵周期时的法向光谱吸收率



球腔的尺寸维持不变的情况下,当点阵周期减小时, 球形腔部分占整个元胞的比例就相应地增大,这就 使得入射到元胞表面的电磁波有更多的部分进入了 球腔内,因而空腔谐振的效果就更加明显。

2.4 入射角和极化角的影响

由于结构的对称性,方位角 ϕ 的改变不会对光谱 特性产生影响,天顶角 θ 完全反映了入射角的特征, 所以这里只考虑天顶角 θ 和极化角 φ 与光谱吸收率的 变化关系。设定 $\phi=0^{\circ}$,结构参数为:点阵周期 $a=4 \mu m$, 球腔半径 $r=1.6 \mu m$,g=0.9375,结构厚度 $d=5 \mu m$ 。分 别计算了极化角为 0° (图6(a))和 90° (图6(b))时光谱



图 6 光谱吸收率随天顶角 θ 和极化角 φ 的变化关系 Fig.6 Relationship between the spectral absorptivity and the zenith angle θ and polarization angle φ

吸收率随入射角(即天顶角 θ)的变化关系。当极化角 为 0°时,从图 6(a)中可以看出随着入射角的增大,光 谱吸收率呈现整体上升的趋势,这可以用布儒斯特 角理论来解释。材料的布儒斯特角由下式^[17]求得:

$$\theta_{B} = \arctan \sqrt{\varepsilon_{1}/\varepsilon_{2}}$$
 (7)

式中: ε₁ 和 ε₁ 分别为形成界面的两种媒质的介电常数的实部,这里分别为 Ag 和空气。由公式(7)可以算得电磁波从空气中入射到 Ag 的表面时布儒斯特角约为 87°,根据布儒斯特角理论,当入射角小于 θ_B时,入射波中的 TM 分量的反射率随着入射角的增

大而减小;入射波中的 TE 分量的反射率则与布如斯 特角无关,在 0°~90°入射角范围内随着入射角的增 大而增大。从图 6(b)中可以看出当极化角等于 90°时 光谱吸收率随着入射角的增大单调地下降。所以极 化角为 0°和 90°时的光谱特性分别显示出 TM 波和 TE 波入射时的特征。从图 6 中还可以看到,极化角 为 0°时随着入射角 θ 的增大 TM₁₀₁ 模式对应的吸收 峰的强度没有明显的变化但是其位置向长波方向偏 移;极化角为 90°时随着入射角 θ 的增大 TM₁₀₁ 模式 对应的吸收峰的强度逐渐减小且移向长波方向。同时 也看到当电磁波以一个较小的角度入射时(θ<20°),吸 收峰的强度和位置的变化很小。

3 结 论

文中构建了 Ag 的正方形点阵球形腔体表面结构,并利用时域有限差分方法对吸收率特性进行了数值计算。文章中分别讨论了球形腔体切入 Ag 结构表面的深度、球形腔体的半径、正方形点阵的周期以及入射角和极化角对吸收率光谱的影响。当嵌入 Ag 中的球形空腔逐渐趋向于完整球体时,吸收峰的强度呈现先增大后减小的变化过程;吸收率光谱随球腔半径的变化关系表明,吸收峰的位置的大小与半径成正比;点阵周期对吸收率光谱的影响表明吸收峰的强度和球腔占元胞的比例有关;当电磁波在一个较小的角度内入射时吸收率的变化很小。以上计算结果表明,对于高反射率的 Ag,可以通过对其表面进行加工处理使其在某些特定波段呈现良好的高吸收特性,这为制作窄带红外辐射器提供了一种非常有效的途径。

参考文献:

- [1] Kuo C Y, Lu S Y, Chen S, et al. Stop band shift based chemical sensing with three-dimensional opal and inverse opal structures[J]. *Sensors and Actuators B Chemical*, 2007, 124(2): 452–458.
- [2] Segal N, Keren-Zur S, Hendler N, et al. Controlling light with metamaterial-based nonlinear photonic crystals [J]. *Nature Photonics*, 2015, 9(3): 180–184.
- [3] Ma Tao, Shen Yibing, Yang Guoguang. Improving diffraction efficiency of DOE in wide waveband application by multilayer micro-structure [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2008, 37(1): 119–123. (in Chinese)

- [4] Jiang Y W, Tsai M W, Ye Y H, et al. Enhancement of thermal radiation in plasmonic thermal emitter by surface plasmon resonance [C]//8th IEEE Conference on Nanotechnology, 2008: 973–983.
- [5] Melentev G A, Shalygin V A, Vorobjev L E, et al. Interaction of surface plasmon polaritons in heavily doped GaN microstructures with terahertz radiation [J]. *Journal of Applied Physics*, 2016, 119(9): 093104.
- [6] Weng B, Ma J, Wei L, et al. Mid-infrared surface-emitting photonic crystal microcavity light emitter on silicon [J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 97(23): 231103.
- [7] Tay S, Kropachev A, Araci I E, et al. Plasmonic thermal IR emitter based on nanoamorphous carhon [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(7): 071113.
- [8] Nguyen-Huu N, Pistora J, Cada M. Wavelength-selective emitters with pyramid nanogratings enhanced by multiple resonance modes[J]. *Nanotechnology*, 2016, 27(15): 155402.
- [9] Maruyama S, Kashiwa T, Yugami H, et al. Thermal radiation from two-dimensionally confined modes in microcavities [J]. *Applied Physics Letters*, 2001, 79(9): 1393–1395.
- [10] Su An. Transmission spectrum of one-dimensional photonic crystal for realizing high-performance optical transmission function [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2011, 40(6): 1101–1105. (in Chinese)
- [11] Kohiyama A, Shimizu M, Iguchi F, et al. Narrowband thermal radiation from closed-end microcavities [J]. *Journal* of Applied Physics, 2015, 118(13): 133102.
- [12] Liao Tongqing, Peng Lulu, Wu Sheng, et al. Reduce reflected light from silicon solar cells based on optical microstructure
 [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44 (1): 201 204. (in Chinese)
- Sai H, Kanamori Y, Yugami H. High-temperature resistive surface grating for spectral control of thermal radiation [J].
 Applied Physics Letters, 2003, 82(11): 1685–1687.
- [14] Ge Debiao, Yan Yubo. Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetic Waves[M]. 2nd ed. Xi'an: Xi' an Electronic and Science University Press, 2005: 11–14. (in Chinese)
- [15] Palik E D. Handbook of Optial Constants of Solids[M]. New York: Academic Press Inc, 1985: 350–357.
- [16] Zhang Keqian, Li Dejie. Electromagnetic Theory for Microwaves and Optoelectronics(Second Edition)[M]. Beijing: Electronic Industry Press, 2001: 277–279. (in Chinese)
- [17] Wang Jiali, Zhu Manzuo, Lu Hongmin. Electromagnetic Field and Electromagnetic Wave [M]. Xi'an: Xi'an Electronic and Science University Press, 2002: 193–194. (in Chinese)