第40卷，第11期
2020年11月

光谱学与光谱分析
Spectroscopy and Spectral Analysis

Vol. 40, No. 11, pp3394-3398
November, 2020

入射角度和偏振对锥形硅纳米线光谱行为的影响

仝　杰[1]，雷煜卿[1]，李英峰[2*]，李美成[2]，张明皓[1]，高中亮[2]

1. 中国电力科学研究院有限公司，北京　100192
2. 新能源电力系统国家重点实验室，华北电力大学新能源学院，北京　102206

摘　要　硅纳米线的消光截面在特定波段可以达到其几何截面的数百倍，这意味着其可以将数百倍于其几何截面范围内的光收集起来。因此，硅纳米线被广泛应用于太阳电池、传感器和光催化等光电子领域。硅纳米线主要有圆柱形(C-SiNW)和锥形(T-SiNW)两种形貌。其中，T-SiNW在更宽的波段范围具有大的消光系数，因而具有更好的广谱光收集能力。然而，当光从顶端入射时T-SiNW的吸收系数的数值却很小，严重限制了其实际应用。因此亟需研究入射角度对T-SiNW光谱行为的影响。此外，光的偏振也将影响T-SiNW的光谱行为。基于离散偶极近似方法，详细研究了入射角度和偏振对T-SiNW的消光谱、吸收光谱和散射性质的影响。建立了长度1 μm、上底直径20 nm、下底直径120 nm的T-SiNW模型；入射角度在0～180°范围内以30°间隔递增；偏振包括平行于入射面和垂直于入射面两种情况。首先，研究了入射角度和偏振影响T-SiNW的消光、吸收谱和吸收/消光比的规律；并借助近场分析探讨了T-SiNW光谱行为的机制。然后，分析了入射角度和偏振对T-SiNW散射光角度分布的影响。结果表明，倒置T-SiNW的消光谱与正置情况完全相同，但其吸收谱数值却大的多：在0.3～0.55 μm波段范围内的平均吸收/消光比超过70%。水平放置的T-SiNW消光谱数值最大、吸收谱数值最小，因此具有最强的光收集能力和最小的光吸收占比；同时，还可以将垂直入射光在近似水平的方向上散射出去。与对垂直偏振光相比，T-SiNW对平行偏振光的吸收系数更大，但吸收/消光占比更小。

关键词　锥形硅纳米线；光谱行为；入射角度；偏振
中图分类号：O436.2　　**文献标识码**：A　　**DOI**：10.3964/j.issn.1000-0593(2020)11-3394-05

引　言

某些特定波段，圆柱形硅纳米线(C-SiNW)和锥形硅纳米线(T-SiNW)的消光截面可以达到其几何截面的几百倍[1-2]。因此，它们在传感、太阳电池、光催化和发光等领域具有广泛的应用前景[3-7]。其中，T-SiNW具有更好的广谱光收集能力[8-9]，其原因是：光收集能力源自硅纳米线与特定波长入射光之间的共振；T-SiNW具有连续变化的直径因而具有连续变化的共振波长。然而，T-SiNW的吸收谱数值却小于C-SiNW[10]。这意味着T-SiNW不适合被用作光吸收结构，严重限制了其在径向结太阳能电池等领域中的应用[11]。

T-SiNW吸收谱数值小的原因是：长波共振发生在T-SiNW底部，因而其收集的光在顶端入射情况下没有足够的吸收距离[10]。据此不难推测，倒置T-SiNW的收集的长波光将拥有很长的吸收距离；同时，其光收集能力也应该与正置的完全相同——其投影尺寸与正置情况完全相同，因而共振模式与正置情况完全相同。即倒置T-SiNW应同时具备良好的光收集和光吸收能力。此外，因倾斜T-SiNW在入射光电场方向的投影尺寸与其倾斜角度及入射光的偏振均有关，其光谱行为将同时受到入射角度和偏振的影响。

本文研究了光的入射角度和偏振影响T-SiNW的消光、吸收谱和吸收/消光比的规律；并借助近场分析，探讨了T-SiNW光谱行为的物理机制。分析了T-SiNW散射光角度分布受入射角度和偏振的影响。所有研究均采用离散偶极近似(DDA)方法基于程序包DDSCAT 7.3[12-13]完成。

1　实验部分

图1是T-SiNW模型、光入射角度θ及偏振设置。

收稿日期：2019-10-28，**修订日期**：2020-02-20
基金项目：国家自然科学基金项目(51402106，91333122，11504107，51372082)资助
作者简介：仝　杰，1983年生，中国电力科学研究院有限公司高级工程师　　e-mail：tongjie1@epri.sgcc.com.cn
*通讯联系人　　e-mail：liyingfeng@ncepu.edu.cn

T-SiNW长 1 μm、上底直径 20 nm、下底直径 120 nm；θ 在 0～180°范围内以 30°间隔递增；入射光包括平行于入射面(pol1)和垂直于入射面(pol2)两种偏振。入射光强设置为 1；T-SiNW 被划分为边长 $d=3.3$ nm 的立方体；采用了体硅材料的复介电常数[14]。采用迭代方法求解 T-SiNW 对入射光的电磁散射。两次迭代之间的误差容忍度 h 设置为 1.0×10^{-5}。以上参数设置均经过了严格的测试计算。

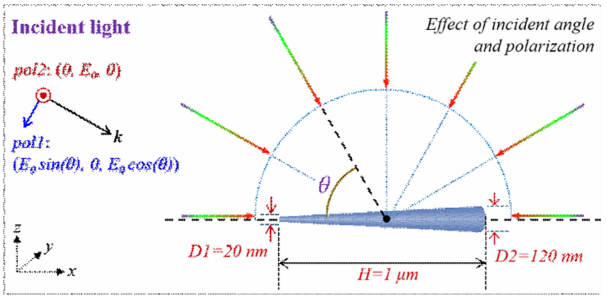


图 1　T-SiNW 模型、光的入射角度及偏振的示意图

Fig. 1　T-SiNW under irradiation with various incident angles and polarization states

获得了 T-SiNW 的消光效率 $Q_{ext}(\lambda)$谱和吸收效率 $Q_{abs}(\lambda)$谱。它们的定义为 $Q_{ext}=C_{ext}/\pi r^2$，$Q_{abs}=C_{abs}/\pi r^2$；其中 C_{ext} 和 C_{abs} 分别为消光和吸收截面；r 为有效半径，$r=\sqrt[3]{3V/4\pi}$。消光效率 Q_{ext} 和吸收效率 Q_{abs} 分别反映了 T-SiNW 对光的收集和吸收能力。获得了 T-SiNW 的近场光分布，光强数值为电场强度的模方。

2　结果与讨论

2.1　入射角度和偏振对 T-SiNW 消光谱和吸收光谱的影响

入射角度对 T-SiNW 消光谱的影响。图 2(a)给出了 T-SiNW 对 pol1 和 pol2 偏振光的消光谱平均值。当入射角互补时(0°和 180°，30°和 150°，60°和 120°)，T-SiNW 的消光谱完全重合。这验证了前面的预测：倒置和正置 T-SiNW 的光收集能力相同。随 θ 从 0°增大到 90°，T-SiNW 的消光效率在整个可见光谱范围内显著增加(短波段增大约 3 倍，长波段超过 10 倍)。表明越接近水平放置(θ 接近 90°)，T-SiNW 的广谱光收集能力越强且越平均。

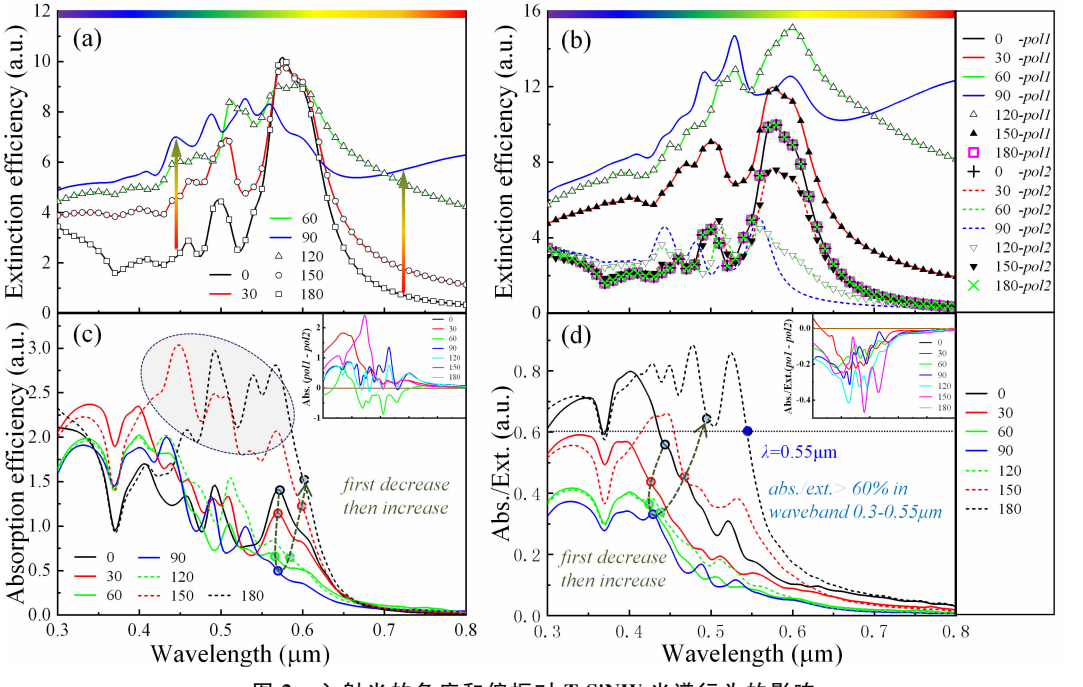


图 2　入射光的角度和偏振对 T-SiNW 光谱行为的影响

(a)：T-SiNW 对 pol1 和 pol2 偏振光的平均消光谱；(b)：T-SiNW 对不同偏振光的消光谱；(c)：T-SiNW 对 pol1 和 pol2 偏振光的平均吸收谱及其差值(插图)；(d)：T-SiNW 对 pol1 和 pol2 偏振光的平均吸收/消光比及其差值(插图)

Fig. 2　Impacts of angle and polarization of incident light on the spectral behaviors of T-SiNW

(a)：Averaged extinction spectra for pol1 and pol2 light；(b)：Extinction spectra for incident light with distinguished polarizations；(c)：Averaged absorption spectra for pol1 and pol2 light，and their difference (inset)；(d)：Averaged Abs. /Ext. ratio for pol1 and pol2 light，and their difference (inset)

除 $\theta=0°$和 180°两种情况，偏振对 T-SiNW 的消光谱影响显著。如图 2(b)，对于 pol1 偏振光，随着 θ 从 0°增加到 90°，T-SiNW 的共振数目和波长变化，消光效率也显著增加；而对于 pol2 偏振光，T-SiNW 的消光谱在不同入射角度下几乎重叠。这意味着入射光与 T-SiNW 之间的共振本质上取决于其电场“感受”到的 T-SiNW 的几何尺寸：pol1 偏振光的电场方向与 T-SiNW 对称轴在同一平面内，因此其感受到的 T-SiNW 的尺寸随 θ 而变化；pol2 偏振光的电场方向与 T-SiNW 对称轴垂

直，因此其感受到的 T-SiNW 的尺寸与 θ 无关。

T-SiNW 的消光特性可以由近场分布直观给出。例如，T-SiNW 对 $\lambda=0.44$ μm 的 pol2 光的消光效率随 θ 增加(0°～90°)而变大的原因是产生了更多的共振：如图 3(a)所示，$\theta=0°$时入射光仅与 T-SiNW 中 1 个位置产生共振；$\theta=60°$和 90°时，则分别与 2 个和 5 个位置产生了共振。共振数的增加来自于入射光电场“感受”到了更多的“相同”尺寸：耀斑在移向 T-SiNW 底面的同时慢慢向受光面移近。T-SiNW 对 pol1 光的消光效率随 θ 显著提升的原因是入射光电场在 T-SiNW 中感受到更大的尺寸进而产生了更多的共振波长：如图 3(b)所示，$\theta=60°$时 $\lambda=0.45$，0.54 和 0.60 μm 的光分别与不同位置处的倾斜尺寸产生了共振；$\theta=90°$时 $\lambda=0.80$ μm 的光与平行于对称轴的尺寸(侧面与底面间)产生了共振，这由横截面图中黄色虚线所指示的闭合的电场线可以证实。

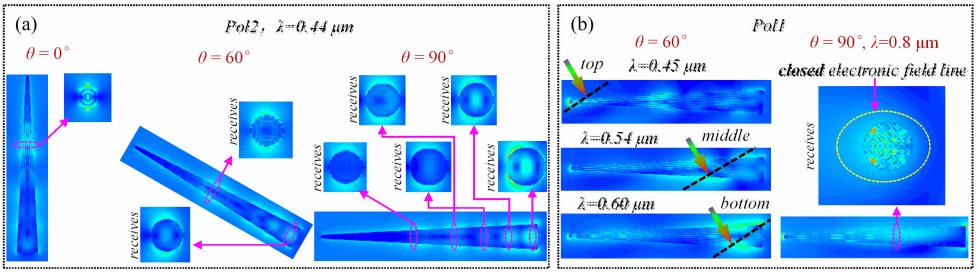


图 3 T-SiNW 的近场分布

(a)：pol2 偏振时 $\lambda=0.44$ μm 的各种角度的入射光与 T-SiNW 的共振；(b)：pol1 偏振时 $\lambda=0.45$，0.54 和 0.60 μm 的 $\theta=60°$的入射光与 T-SiNW 的共振，$\lambda=0.8$ μm 的 $\theta=90°$的入射光与 T-SiNW 的共振

Fig. 3 Near-field mappings for T-SiNW

(a)：Resonance at $\lambda=0.44$ μm under pol2 light with various θ；(b)：Resonances at $\lambda=0.45$，0.54，and 0.60 μm，under pol1 light with $\theta=60°$；and at $\lambda=0.8$ μm under pol1 light with $\theta=90°$

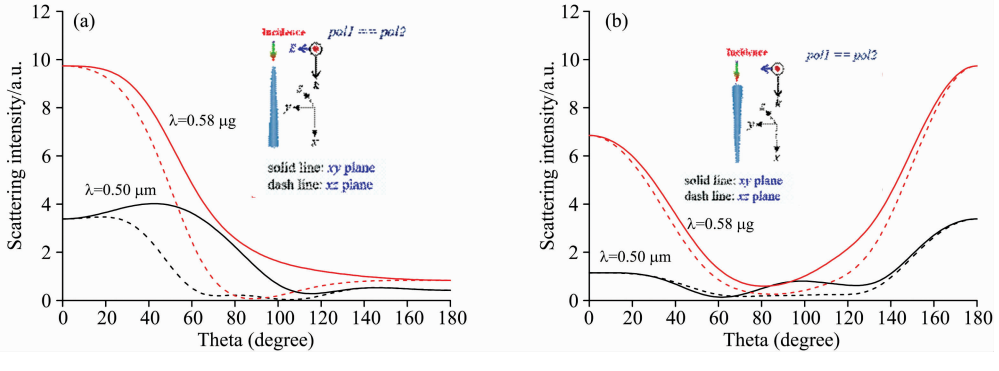
入射角度对 T-SiNW 吸收谱的影响。图 2(c)中给出了 T-SiNW 对 pol1 和 pol2 偏振光的吸收效率的平均值。$\theta=150°$和 180°时 T-SiNW 的吸收效率比 $\theta=0°$时要大的多，证实倒置 T-SiNW 具有更好的光吸收。吸收效率随 θ 增加先降低然后再升高。这是因为当 θ 从 0°增加到 90°时，光在 T-SiNW 中的传输距离逐渐缩短；而当 θ 从 90°增加到 180°时，传输距离又逐渐变大。当 θ 接近 180°时，T-SiNW 底部收集的长波光还可以被锥形壁面反射获得更长的吸收路径。

图 2(d)给出了 T-SiNW 对 pol1 和 pol2 偏振光的平均吸收/消光比(Abs. /Ext.)。与吸收谱的情况相同，Abs. /Ext. 随着 θ 增加先减小后增大。$\theta=180°$时，T-SiNW 在 0.3～0.55 μm 波段的 Abs. /Ext. 均大于 60%；平均值大于 70%；峰值达 88%。该波段包含了太阳光谱中最强的光子流密度；因此，倒置 SiNW 具有优秀的太阳光吸收能力。此外，结合图 2(a)和(d)的结果可以得出结论：水平 T-SiNW 同时具有最大的消光系数和最小的 Abs. /Ext. ，非常适合用来捕获太阳光。

图 2(c)的插图显示 T-SiNW 对 pol1 偏振光的吸收明显强于对 pol2 偏振光的吸收。主要原因是 T-SiNW 对 pol1 偏振光的消光系数比对 pol2 偏振光大的多。图 2(d)的插图表明 T-SiNW 对 pol1 偏振光的 Abs. /Ext. 显著小于对 pol2 偏振光的 Abs. /Ext. 。原因是尽管 T-SiNW 对 pol1 偏振光的消光系数大，但共振位置的形状不对称致使收集的大部分光被很快的散射出去。

2.2 入射角度和偏振对 T-SiNW 散射光角度分布的影响

图 4(a)和(b)显示，正置 T-SiNW 的散射光主要分布在 0°到 90°之间，即正向散射为主；而倒置 T-SiNW 的背向散射超过了 50%。这与 Zhu 等发现的 T-SiNW 阵列的光吸收比例随 θ 从 0°增大到 90°而由～100%降至～25%的测量结果吻合[15]。倒置 T-SiNW 中的背向散射来自于光在向前传播的过程中不断被锥形壁面向后反射。对于水平放置的 T-SiNW，图 4(c)和(d)显示：入射光为 pol1 偏振时，散射光主要分布在 70°～140°；入射光为 pol2 偏振时，散射光主要分布在 60°～130°。再考虑到水平 T-SiNW 具有最强的广谱光收集和最小的 Abs. /Ext. ，非常适用于对可见光的高效、低损耗捕获。T-SiNW被倾斜放置时，图4(e)和(f)显示：$\theta=60°$时，散射



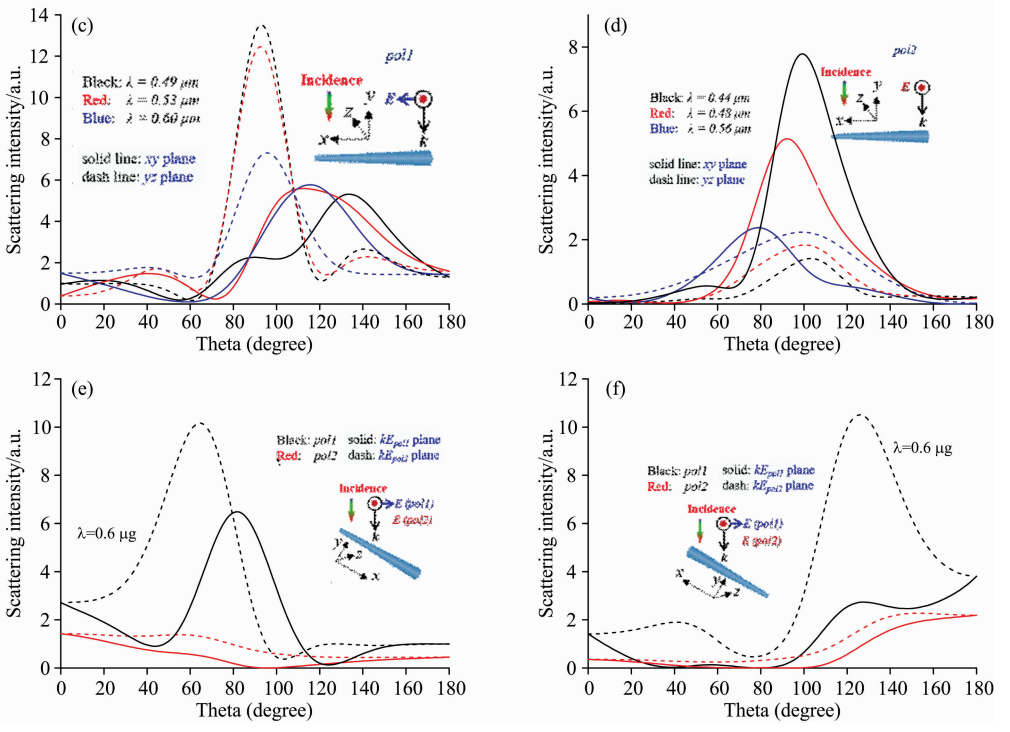


图 4　T-SiNW 的散射光角分布

(a)：完全正置的散射角度分布；(b)：完全倒置 T-SiNW 的散射角度分布；(c)：水平 T-SiNW 对 pol1 光的散射角度分布；(d)：水平 T-SiNW 对 pol2 光的散射角度分布；(e)：$\theta=60°$时 T-SiNW 的散射光角度分布；(f)：$\theta=120°$时 T-SiNW 的散射光角度分布

Fig. 4　Angular distribution of scattered light by T-SiNW

Scattered light by (a) a fully upright and (b) a fully inverted T-SiNW; a flat-laid T-SiNW under irradiation of (c) pol1 and (d) pol2; T-SiNW under irradiation with (e) $\theta=60°$ and (f) $\theta=120°$

光主要分布在 40°～100°；$\theta=120°$时，散射光主要分布在 110°～160°。结合前面结果可以得出结论：T-SiNW 越接近正置，其前向散射就越强；而越接近倒置，其背向散射就越强。

3　结　论

倒置 T-SiNW 的消光谱与正置情况完全相同，但其吸收谱数值却大的多：其吸收/消光比在 0.3～0.55 μm 波段的平均值可超过 70%。证实完全倒置的 T-SiNW 同时具有优异的光收集和光吸收能力。水平放置的 T-SiNW 在整个可见光谱范围内消光谱数值最大、吸收谱数值最小，具有最佳的广谱光收集能力和最小的光吸收占比；并且可以将垂直入射的光转变为水平传播。T-SiNW 对 pol1 偏振光的吸收量比对 pol2 偏振光的数值大，但对 pol1 偏振光的吸收/消光占比更小。

References

[1] Paniagua-Dominguez R, Grzela G, Rivas J G, et al. Nanoscale, 2013, 5: 10582.
[2] Li Yingfeng, Li Meicheng, Song Dandan, et al. Nano Energy, 2015, 11: 756.
[3] Singh R R, Priye V. IEEE Photonics Technology Letters, 2018, 30: 1123.
[4] Yoon S S, Khang D Y. Advanced Energy Materials, 2018, 8: 1702655.
[5] Coridan R H, Arpin K A, Brunschwig B S, et al. Nano Letters, 2014, 14: 2310.
[6] YANG Rui-chen, GENG Xiao-pei, FAN Zhi-dong, et al(杨瑞臣，耿小丕，范志东，等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2019, 39(3): 682.
[7] Chen B, Wu H, Xin C, et al. Nature Communications, 2017, 8: 20.
[8] Fountaine K T, Kendall C G, Atwater H A. Optics Express, 2014, 22: A930.
[9] Hua B, Wang B, Yu M, et al. Nano Energy, 2013, 2: 951.
[10] Li Yingfeng, Li Meicheng, Fu Pengfei, et al. Scientific Reports, 2015, 5: 11532.
[11] Yu L, Misra S, Wang J, et al. Scientific Reports, 2014, 4: 4357.
[12] Draine B T, Flatau P J. Journal of the Optical Society of America A, 1994, 11(4): 1491.
[13] Flatau P, Draine B. Optics Express, 2012, 20: 1247.

[14] Palik, Edward D, ed. Handbook of Optical Constants of Solids, Vol. 3. Academic Press, 1998.
[15] Zhu J, Yu Z, Burkhard G F, et al. Nano Letters, 2008, 9: 279.

Influence of Incident Angle and Polarization on Spectral Behaviors of Tapered Silicon Nanowire

TONG Jie[1], LEI Yu-qing[1], LI Ying-feng[2*], LI Mei-cheng[2], ZHANG Ming-hao[1], GAO Zhong-liang[2]
1. China Electric Power Research Institute, Beijing 100192, China
2. State Key Laboratory of Alternate Electrical Power System with Renewable Energy Sources, North China Electric Power University, Beijing 102206, China

Abstract The extinction section of a silicon nanowire can reach hundreds of times its geometric cross-sectional area at a given wavelength, meaning it can collect light in the area a scope hundreds of times of its geometrical cross-sectional area. Therefore, silicon nanowire has been widely used in many optoelectronic fields like solar cells, sensors, and photocatalysis devices. Cylindrical silicon nanowire (C-SiNW) and tapered silicon nanowire (T-SiNW) are the two most important silicon nanowire structures. Between them, the extinction efficiency of T-SiNW has a wider waveband with a large extinction efficiency, so it shows better ability to collect broad-spectrum light. Nevertheless, when under top irradiation, the absorption efficiency of T-SiNW is quite small, which severely limits its practical applications. It is urgent to find out the law that the incident angle affects the spectral behaviors of T-SiNW. Besides, the polarization of incident light will also influence the spectral behaviors of T-SiNW. In this work, the influence of angle and polarization of incident light on the extinction, absorption spectra and scattering properties of T-SiNW was carefully studied, using the discrete dipole approximation method. T-SiNW was modeled with the length of 1 μm, top-diameter of 20 nm, and bottom-diameter of 120 nm; the angle of incident light increases from 0° to 180° with an interval of 30 °; and two polarization states, parallel and vertical to the incident plane, were considered. First, impacts of the incident angle and polarization on the extinction, absorption spectra, and the ratio of the absorbed light (Abs. /Ext.) of T-SiNW were studied. Meanwhile, the mechanisms for the spectral behaviors of T-SiNW were discussed by means of analyzing the near-field distribution mappings. Then, the influence of the angle and polarization on the scattering angle distribution of T-SiNW was analyzed. The results show that the fully inverted T-SiNW has the same extinction spectrum as the upright one, but its absorption spectrum increases significantly: the average Abs. /Ext. ratio exceeds 70% in waveband ranging from 0.3 to 0.55 μm. The horizontally placed T-SiNW has the largest extinction spectral value and the smallest absorption spectral value, so it shows the strongest light collection ability whereas the smallest light absorption ratio. Meanwhile, it can scatter the vertical incident light in approximate horizontal directions. In addition, T-SiNW shows larger absorption spectral values for parallel-polarized light than vertical-polarized light, but smaller Abs. /Ext. ratio.

Keywords Tapered silicon nanowire; Spectral behavior; Angle of incident light; Polarization

(Received Oct. 28, 2019; accepted Feb. 20, 2020)

* Corresponding author