

硅基微纳结构薄膜中全向光吸收效应

张晓彤,路海,张现周,沈克胜,张坤,李丽君,黄蒙

(河南师范大学 物理与材料科学学院,河南 新乡 453007)

摘要:研究了一种由硅基光子晶体与金属复合微纳结构薄膜中的全向光吸收效应。与完整的硅/金属复合薄膜进行比较研究发现,在硅薄膜厚度相同的条件下硅基微纳结构薄膜能够使吸光度提高近70%。此外,结果显示这种光吸收增强效应对入射角度的变化不敏感。在以 $0^{\circ}\sim 60^{\circ}$ 角度入射的情况下,硅微纳结构薄膜都能够具备接近100%的光吸收。通过对能带以及场构型分析可以发现,这种现象产生的原因归结于金属平板与截断光子晶体中特殊的边界陷光效应和六角晶格的全向带隙。

关键词:硅薄膜;微纳结构;陷光效应;光子晶体

中图分类号:O439

文献标志码:A

自1987年,Yablonovitch提出光子晶体概念^[1],光子晶体展现的光子禁带、非正常色散和折射特性吸引了越来越多人的兴趣。光子晶体的基本电磁特性有光子带隙特性、和光子局域特性。光子晶体与(电子)晶体类似,只不过所控制和利用的不是电子而是光子^[2]。但其与传统光电子材料(晶体)的根本区别在于后者是在分子或原子尺度内改变物质的化学结构实现对光的发射、吸收;而光子晶体是在光波长尺度上对物质进行物理结构的改造,并使该物质控制光子的行为。

在高频波段,通常材料都是含吸收的,因此吸收型光子晶体的光学特性也是人们研究的一个热点。例如,利用光子晶体带边频率具有的强电磁场局域效应,含有损耗的光子晶体可以实现带边频率光波的增强吸收^[3-9],从而来制作各种吸收型滤波器、探测器和隐身材料等。

硅材料作为现代集成电路工业的基础性材料,在自然界中储量丰富,并且是人类制备工艺最成熟,研究最深入,了解最清楚的材料之一。由于硅的折射率较高,满足完全光子带隙的光子晶体的要求,是制备光子晶体的良好材料。另一方面,由于具有高折射率的硅材料和空气之间的阻抗失配,在可见光范围内硅基材料的反射率较高,使得利用硅材料制作吸收型光子器件受到了限制。

人们可以通过将硅材料作为缺陷通过增加缺陷两边的周期结构的周期数或者增加硅基材料的吸收系数来增强吸收^[10-11],但是对含有吸收型缺陷的光子晶体。通过上面的两种方法增强吸收具有一定的局限性,很难实现缺陷模的完全吸收。当光子晶体中含有一个吸收型缺陷时,缺陷模的反射率随缺陷吸收系数的增大而逐渐增大,当缺陷吸收系数很大时,缺陷模的反射率将趋近于1。因此,这种结构的缺陷模吸收率和透过率都非常小。

为了进一步改善硅基微纳结构的吸收特性,本文提出了一种由硅基光子晶体与金属复合微纳结构薄膜,并通过数值仿真证明了在给定吸收层厚度的情况下,硅基微纳结构薄膜能够在可见光范围内显著提高全向的光吸收。

收稿日期:2016-09-14;修回日期:2016-10-09.

基金项目:国家自然科学基金(11404102);河南省重点科技攻关计划项目(152102210079);河南省教育厅科学技术研究重点项目(14A140002);先进微结构材料教育部重点实验室开放课题(5201029160008).

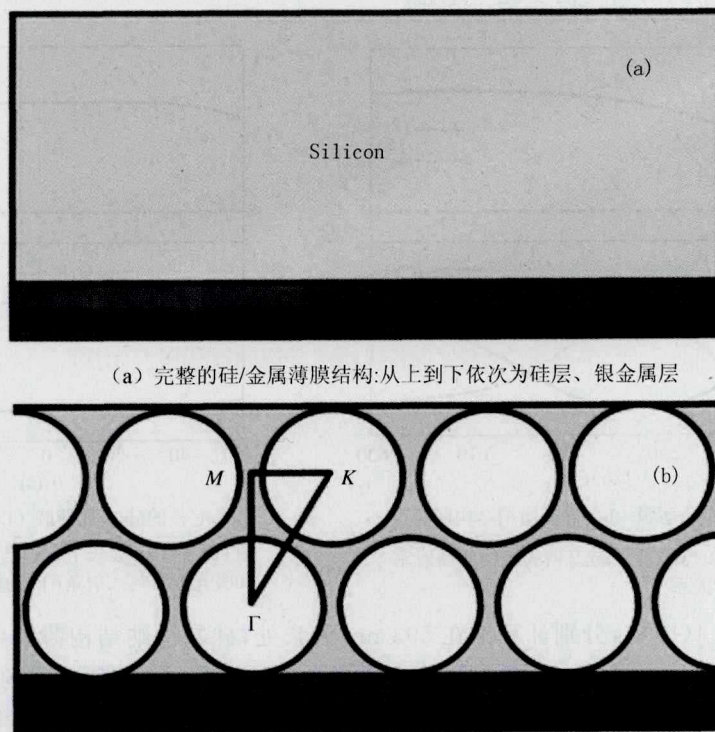
第1作者简介:张晓彤(1992-),女,河南新乡人,河南师范大学硕士研究生,研究方向为光学,E-mail:896873445@qq.com.

通信作者:路海,E-mail:luh.phy@htu.edu.cn.

1 理论模型与数值处理方法

作为对比,首先考虑完整的硅/金属复合薄膜,结构如图1(a)所示.其中,硅薄膜的厚度为435 nm,硅介电常数的实验数据出自^[12].金属薄膜为30 nm的银膜,具有一个线性介电常数 $\epsilon_{Ag}^L(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + i\gamma\omega)}$ 和 $\hbar\omega_p = 7.2 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.05 \text{ eV}$ ^[13].作为一种比较成熟的刻蚀工艺技术,在硅薄膜上周期性的刻画纳米孔阵列实现起来相对简单^[14].具有周期性纳米孔阵列的硅基微纳结构薄膜的结构示意图如图1(b)所示,纳米孔阵列排布成三角形晶格,其中晶格常数为246 nm,空气孔的半径为111 nm.作为比较,微结构硅薄膜厚度与完整的硅薄膜保持一致,并且金属薄膜厚度也均保持一致.

本文中光子微纳结构的能带图通过平面波展开法得出.平面波展开法是将电磁场在倒格矢空间中以平面波叠加的形式展开,将麦克斯韦方程组转化为一个本征方程,通过求解本征方程便可得到传播光子的本征频率,是目前计算介质型光子晶体带隙结构的主要方法^[15].此外,本文中光子微纳结构的光谱计算采用严格耦合波分析(RCWA)方法.严格处理光子微纳结构衍射的方法可以分为两类:积分方法和微分方法.积分的方法比较适合处理具有连续表面的微纳结构,而微分方法比较适合处理具有跃变表面的微纳结构.相比较起来,微分方法的数值处理实现起来在理论上更为简洁.在微分方法中,严格耦合波分析(RCWA)应用最为广泛^[16].



(a) 完整的硅/金属薄膜结构:从上到下依次为硅层、银金属层

(b) 硅基微纳结构薄膜结构:简约布里渊区(Γ -M-K- Γ)

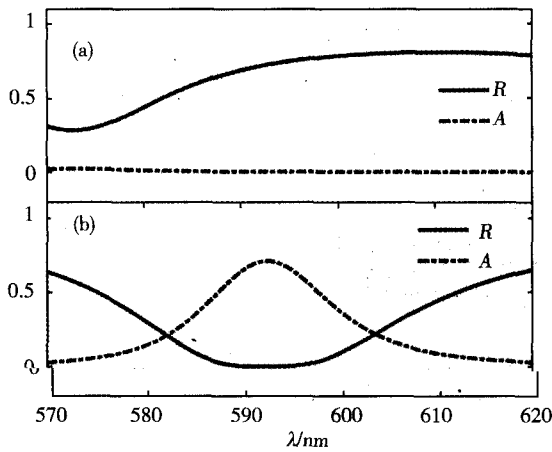
图1 复合薄膜示意图

2 结果与讨论

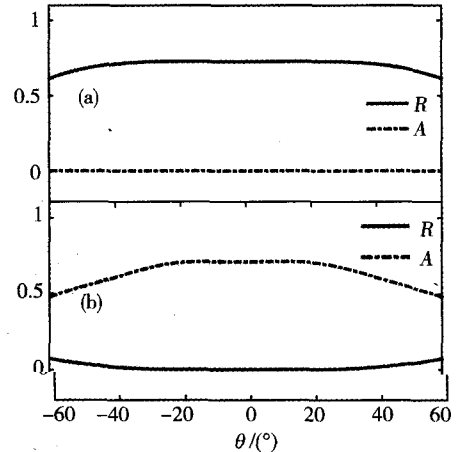
考虑 TM 偏振光(磁场平行于圆柱形空气孔)入射的情况,通过使用严格的耦合波分析方法^[16]分别计算出完整的硅/金属薄膜以及硅基微纳结构薄膜的反射率(R)和吸光度(A),计算出的反射率和吸光度随入射光波长的变化如图2所示.在图2(a)中可以看出,完整的硅/金属薄膜的反射率随波长的变化曲线.在570 nm~620 nm的区域,由于硅材料折射率较大(约为3.6),使得硅薄膜与空气之间的折射率差别较大,造

成了膜层之间严重的阻抗不匹配,因此入射光在各膜层之间的接触面不可避免会发生反射,从而无法进入硅基薄膜结构.所以,在硅薄膜的表面消除不需要的反射对于改善硅基薄膜的吸收特性而言非常重要.从图2(b)中可以看出,在可见光范围内,硅基微纳结构薄膜的吸光度相对于完整的硅/金属薄膜显著增强,在593 nm处有71%的最大值.这意味着,相对于完整的硅/金属薄膜,硅基微纳结构薄膜对光的吸收能力更强.除了在可见光范围内吸光度的提高以外,值得注意的是,硅基微纳结构薄膜的反射率曲线在593 nm处有接近0的最小值.这意味着,完整的硅/金属薄膜在可见光范围内的强反射得到了解决.由此可见,硅基微纳结构薄膜在可见光范围内不同寻常的谐振模式,可以使硅基薄膜在可见光范围内实现非常小的反射率.

对于单层减反射膜而言,当膜层的光学厚度为1/4波长时,其折射率为基片折射率 n_0 和入射介质折射率 n_1 乘积的平方根,即 $(n_0 n_1)^{1/2}$,此时两种介质表面之间的反射率将减少到零.但简单的单层或多层减反射膜仅适用于入射角在很小范围内变化的情况.为了了解硅基微纳结构薄膜的反射率以及吸光度与入射角之间的关系,在593 nm波长处,分析完整的硅/金属薄膜与硅基微纳结构薄膜在不同入射角下的线性光谱.从图3(a)中可以发现,完整的硅/金属薄膜的光谱在整个入射角度范围内均具有较高的反射率,而且几乎在所有角度入射的情况下,反射率均接近80%.换言之,光从顶层几乎被完全反射,使得电磁能量无法进入硅薄膜中.从图3(b)中可以发现,对于硅基微纳结构薄膜而言,吸光度曲线在入射角为 12° 时有71.4%的最大值.硅基微纳结构薄膜能够有效地吸收电磁能量,同时它的电磁吸收与入射角度相关.这些结果表明,硅基微纳结构薄膜从在入射角从 $-60^\circ \sim 60^\circ$ 变化范围内均有着较高的吸光度和较低的反射率,且在这个角度变化范围内,其吸光度与反射率均对角度的变化不敏感.



(a) 完整的硅/金属薄膜 (b) 硅基微纳结构薄膜
图2 在入射角为 0° 的情况下,硅基薄膜结构的反射率吸光度与波长间的关系



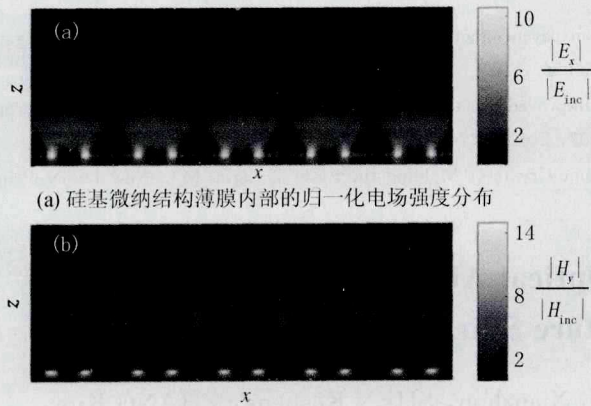
(a) 完整的硅/金属薄膜 (b) 硅基微纳结构薄膜
图3 在593 nm波长下,硅基薄膜结构反射率R和吸光度A与入射角 θ 间的关系:

此外,在图4(a)和图4(b)中,分别计算出在593 nm波长处,硅基微纳结构薄膜中的电场和磁场强度相对于入射电场和磁场强度归一化后的分布情况.可以看出,在硅基微纳结构和金属的界面周围,电场和磁场均高度局部化.硅基微纳结构薄膜中的陷光效应使得硅薄膜的吸光度得到明显提高.因此,对于图2(b)中的硅基微纳结构薄膜反射率曲线最小值的出现,至少可以给出两个物理解释.1)最小值是由于光在硅基微纳结构薄膜和金属电极表面之间发生干涉相消形成的.2)吸收光谱的峰值是由于硅基微纳结构薄膜和金属电极之间的准导模谐振模式形成的.

在硅基微纳结构薄膜中,光在所有边界的振幅反射率均由两种介质边界处的光学阻抗比率给出.在介质的折射率比相邻介质折射率低的情况下,光在界面发生反射时有 180° 的相移,反之,在介质的折射率比相邻介质折射率高的情况下,光在界面发生反射时相移为 0° .如果光在薄膜顶层和底层表面发生反射时,光波被分成两个分量,那么相对相移的幅度总和是 360° 的整数倍.

为了研究硅基微纳结构的反射情况,利用平面波展开法^[15]计算硅基微纳结构薄膜的带隙,计算结果如图5所示.考虑到结构的对称性,只需要计算硅基微纳结构薄膜中,平面内($x-z$ 平面)波矢量在简约布里渊

区变化时的带隙. 由图5可以得出,当波长范围为520~940 nm,平面内波矢量的方向变化为 30° 时,从M到K范围内,顶部和底部的间隙边缘几乎是平坦的. 考虑到布里渊区的对称性,这个间隙几乎给出了平面内波矢量的所有方向. 而且,带隙和金属的反射相移分别为 180° 和 -180° ,同时,它们的反射幅度几乎相同. 基于上述讨论,这种全向带隙能够在较宽的空间频谱范围提供合适的反射相移,因此相应的全光吸收同样能够在较宽的入射角范围内实现,正如图3(b)中所示.



(a) 硅基微纳结构薄膜内部的归一化电场强度分布

(b) 硅基微纳结构薄膜内部归一化磁场强度分布

图4 593 nm的TM偏振光入射情况下的电磁场分布;

其中, E_{inc} , H_{inc} 分布表示入射电场及磁场

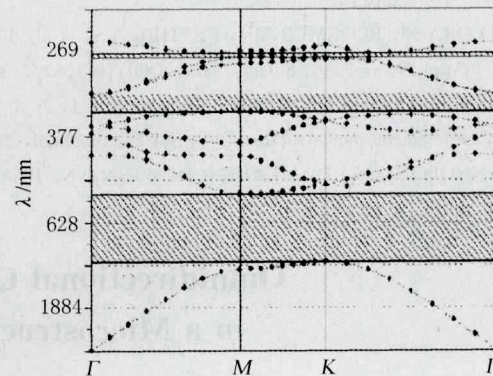


图5 当平面内波矢量在简约布里渊区变化时硅基微纳结构薄膜的带隙图

3 结论

本文通过将硅基光子晶体与金属组成复合结构薄膜,选择合适的结构参数,在硅基光子晶体与金属的界面上得到一个高局域的界面模,从而使界面模频率的光波完全进入结构,实现界面模频率的光波在入射界面的反射率为零,当局域电磁场强度非常大时,可以增强界面模频率光波的吸收. 另外,通过对比发现,通过硅基微纳结构薄膜的陷光效应,可以使硅基微纳结构薄膜的吸光度最大值达到71.4%,它能获得比完整的硅/金属薄膜更低的反射率和更高的吸光度. 此外,通过分析发现这种硅基微结构具有全向的完全带隙,能够在较宽的空间频谱范围提供合适的反射相移,使得硅基微纳结构薄膜的增强吸收效应在入射角高达 60° 的情况下依然可行.

参 考 文 献

- [1] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(20): 2059-2062. DOI:10.1103/PhysRevLett.58.2059.
- [2] YABLONOVITCH E, GMITTER T J, MEADE R D, et al. Donor and acceptor modes in photonic band structure[J]. Phys Rev Lett, 1991, 67(24): 3380-3383. DOI:10.1103/PhysRevLett.67.3380.
- [3] SANG H Y, LI Z Y, GU B Y. Engineering the structure-induced enhanced absorption in three-dimensional metallic photonic crystals[J]. Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys, 2004, 70: 066611. DOI:10.1103/PhysRevE.70.066611.
- [4] LIN S Y, FLEMING J G, LI Z Y, et al. Origin of absorption enhancement in a tungsten, three-dimensional photonic crystal[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2003, 20(7): 1538. DOI:10.1364/josab.20.001538.
- [5] LI Y, KUNITAKE T, FUJIKAWA S. Efficient fabrication and enhanced photocatalytic activities of 3D-ordered films of titania hollow spheres[J]. J Phys Chem B, 2006, 110(26): 13000-13004. DOI:10.1021/jp061979z.
- [6] PRALLE M U, MOELDERS N, MCNEAL M P, et al. Photonic crystal enhanced narrow-band infrared emitters[J]. Applied Physics Letters, 2002, 81(25): 4685. DOI:10.1063/1.1526919.
- [7] NISHIMURA S, ABRAMS N, LEWIS B A, et al. Standing wave enhancement of red absorbance and photocurrent in dye-sensitized titanium dioxide photoelectrodes coupled to photonic crystals[J]. J Am Chem Soc, 2003, 125(20): 6306-6310. DOI:10.1021/ja034650p.
- [8] FLEMING J G, LIN S Y, EL-KADY I, et al. All-metallic three-dimensional photonic crystals with a large infrared bandgap[J]. Nature, 2002, 417(6884): 52-55. DOI:10.1038/417052a.
- [9] DONG Y, FEENSTRA R M, SEMTSIV M P, et al. Cross-sectional scanning tunneling microscopy and spectroscopy of InGaP/GaAs

- heterojunctions[J]. *Applied Physics Letters*, 2004, 84(2): 227. DOI:10.1063/1.1638637.
- [10] CHEN L, ZHOU W, QIANG Z, et al. Spectral selectivity of photonic crystal infrared photodetectors[J]. *Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering*, 2006, 6370:63701I.
- [11] CHEN L, QIANG Z, ZHOU W, et al. Spectral selective absorption enhancement in photonic crystal defect cavities[J]. *Photonic Crystal Materials and Devices VI*, 2007. DOI:10.1117/12.699410.
- [12] GREEN M A, KEEVERS M J. Optical properties of intrinsic silicon at 300 K[J]. *Prog Photovolt: Res Appl*, 1995, 3(3): 189-192. DOI:10.1002/pip.4670030303.
- [13] SCALORA M, BLOEMER M J, PETHEL A S, et al. Transparent, metallo-dielectric, one-dimensional, photonic band-gap structures [J]. *J Appl Phys*, 1998, 83(5): 2377. DOI:10.1063/1.366996.
- [14] HUANG Y F, CHATTOPADHYAY S, JEN Y J, et al. Improved broadband and quasi-omnidirectional anti-reflection properties with biomimetic silicon nanostructures[J]. *Nat Nanotechnol*, 2007, 2(12): 770-774. DOI:10.1038/nnano.2007.389.
- [15] JOANNOPOULOS J D, MEADE R D, WINN J N. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*[M]. New Jersey:Princeton Univ Press, 1995.

Omnidirectional Optical Absorption Effect in a Microstructure Silicon Thin Film

ZHANG Xiaotong, LU Hai, ZHANG Xianzhou, SHEN Kesheng, ZHANG Kun,
LI Lijun, HUANG Meng

(College of Physics and Materials Science, Henan Normal University, Xixiang 453007, China)

Abstract: Omnidirectional optical absorption of a microstructure film composed of a metallic film combined with a silicon-based photonic crystal is investigated theoretically. Compared with the intact silicon/metal composite films, the silicon-based microstructure films can increase the absorbance by nearly 70% under the same silicon film thickness. In addition, the results show that this optical absorption enhancement effect is insensitive to changes in the incident angle. In the case of $0^\circ-60^\circ$ angle of the incident, the silicon microstructure film can have nearly 100% of the light absorption. By analyzing the corresponding bandgap and field distribution, it is found that the reason of this phenomenon is attributed to the special boundary trapping effect and the omnidirectional bandgap of hexagonal lattice.

Keywords: silicon thin film; micro/nano-structure; light trapping; photonic crystals