

Surface Plasmon Resonance Studies on Optical Propagation Properties of Metallic Nano-Gratings

Haiying Li, Xuesong Duan

School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin
Email: lihaiying123@139.com

Received: Aug. 15th, 2017; accepted: Aug. 29th, 2017; published: Sep. 4th, 2017

Abstract

Optical propagation properties of metallic nano-gratings (MNG) with several classic groove shapes are analyzed. Influences of grating shape parameters and incident wavelength on reflectivity and transmission are calculated by means of multiple multipole program (MMP). Our results demonstrate that there are two resonant modes on the surface of MNG, surface plasmon resonance (SPR) and localized surface plasmon resonance (LSPR), respectively. LSPR presents a kind of broad band spectral response mechanism, whose resonant wavelength strongly depends on groove shapes, groove depth and groove width parameters. SPR presents a kind of narrow band spectral response mechanism, and its resonant wavelength is more dependent on grating period parameters. The different characteristics of the two resonant modes increase our knowledge about optical propagation properties of MNG. This investigation can be used as a guideline in designing metallic nano-gratings for certain applications.

Keywords

Metallic Nano-Gratings, Surface Plasmon Resonance, Localized, Shape

金属纳米光栅表面等离子体共振光学传播特性

李海颖, 段雪松

河北工业大学理学院, 天津
Email: lihaiying123@139.com

收稿日期: 2017年8月15日; 录用日期: 2017年8月29日; 发布日期: 2017年9月4日

摘要

本文分析了几种典型沟槽形状的金属纳米光栅(MNG)的光波传播特性。利用多重多级子程序法(MMP)计算了光栅形状和入射光波长对反射率和透射率的影响。结果显示,金属纳米光栅存在表面等离子体共振(SPR)和局域化表面等离子体共振(LSPR)两种共振模式。LSPR共振波长强烈依赖于光栅的沟槽形状、槽深、槽宽等结构参数,呈现宽带光谱响应机制,而SPR更多的依赖于光栅周期大小,呈现窄带光谱响应机制。两种共振模式的不同特性拓展了我们对金属纳米光栅的光学传播特性的认识,这对根据需要合理设计金属纳米光栅有重要的指导意义。

关键词

金属纳米光栅, 表面等离子体共振, 局域化, 形状

Copyright © 2017 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

近年来,随着纳米结构制造技术的发展,金属纳米结构的表面等离子体共振(surface plasmon resonance, SPR)现象并由此引发的许多奇特的纳米光学性质,受到了不同领域研究者的广泛关注[1] [2] [3] [4] [5]。SPR是指当光与金属纳米结构相互作用时在金属表面的一种由自由电子和光子形成的混合激发态[6] [7]。在这种相互作用中,自由电子在与其共振频率一致的光波照射下发生集体振荡。

金属纳米光栅(MNG)是一种光波激发 SPR 的器件,其光学性质可由改变纳米光栅的周期、槽深槽宽、入射光波长等加以操控,因此其结构参数与入射光参数的选择都是十分关键的。H. Raether 详细研究了正弦型金属光栅的振幅、周期以及入射光波长和角度等对 SPR 光学特性的影响[8]。H. Hori 等人研究了双面矩形和等腰梯形槽深及等腰梯形底角对 SPR 的影响[9]。本文作者也曾研究过几种高斯面型光栅的 SPR 光学特性并分析了其传感性能[10] [11] [12]。

然而光栅形状各式各样,如何实现与入射参数最佳耦合更需要对多种面形光栅的光学传播特性进行比较分析,并研究总结 SPR 共振模式及变化规律。本文基于此计算了几种常见形状的金属纳米光栅近场光强分布及反射率透射率,并分析了结构参数对 SPR 的影响规律,为根据需要设计金属纳米光栅提供支持和依据。

2. 几种典型沟槽形状 MNG 的光学传播特性

我们考虑了几种典型沟槽形状的 MNG 的光学特性,结构示意图见图 1。因为银是在可见光波段性能最好的金属,可以将等离子体激元沿表面传播 100 微米[13],因此我们选用的模型为上表面刻有周期分布的沟槽的银纳米薄膜。其纳米褶皱剖面分别为高斯形、矩形、圆形和三角形,银的介电常数参考文献[14]的实验测量值。其中,光栅周期为 p ,光栅未刻透的深度为 t ,槽宽为 w (半宽值),槽深为 H ,入射光波长 λ 。

为了方便比较分析,我们将几种结构的光栅参数尽量设成一致,这里,银膜周围均为空气,其相对折射率 $n = 1.006$ 。在 TE 偏振下,因电场矢量 \vec{E} 沿边界连续,不能激发表面等离子体共振[15],因此文中

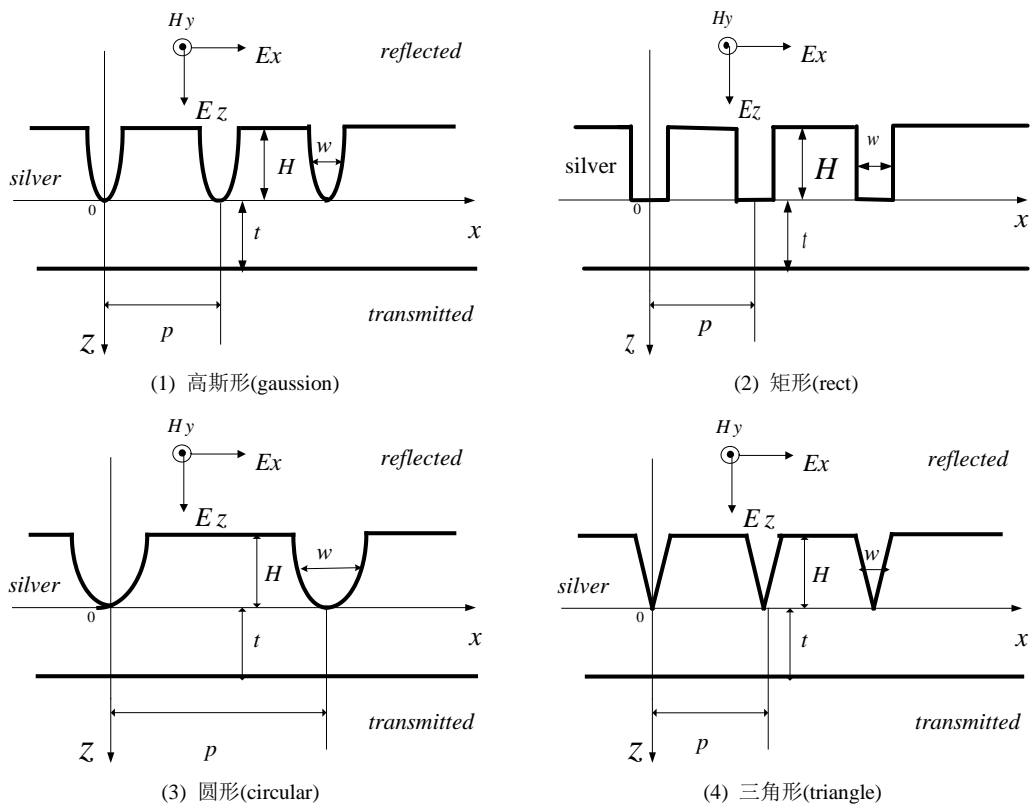


Figure 1. Schematic models of MNG with several classic groove shapes
图 1. 几种不同沟槽形状截面 MNG 结构示意图

入射光为 TM 偏振态平面波垂直入射。采用多重多级子程序法(MMP)求解麦克斯韦方程。MMP 是 20 世纪 80 年代初期由瑞士皇家技术学院的 hafner 及其合作者开创的一种进行电磁场计算的数值技术, 适用于求解电磁场各领域的问题[16] [17]。MMP 是一种边界法, 它的基本思想是首先对求解区域中各个子域的界面进行多极子离散, 子区域内部的场可以展开为一组由 N 个已知解析解的函数的线性叠加, 利用区域间分界面处的边界条件, 最后形成多级子函数方程组供求解计算。MMP 的这一特征在数值计算中是极其重要的, 它可以大大减少存储空间, 降低计算量, 从而极大地提高求解效率。MMP 法和其他数值解法最大的不同点是模拟电磁场时的灵活性, 因为模拟场可以自由选取本征函数。MMP 法还可以衡量解的误差, 于是不再需要考虑费时的收敛问题。

为了比较几种结构的光学传播特性的不同, 我们把计算得到的透射率随入射波长的变化关系放在同一个图中, 见图 2(a)。把反射率随入射波长的变化关系放在同一个图中, 见图 2(b)。当入射光波长处于 300 nm 到 800 nm 之间时, 表面等离子体激元穿透深度约为 $\delta \approx 0.5c/\omega_p$, 这里 ω_p 为表面等离子体共振角频率, 对于银 Ag, $\omega_p = 1.3463 \times 10^{16}$ rad/s, $\delta \approx 11$ nm。所以当薄膜未刻透厚度 t 大于 11 nm 时, 透射率应该是非常小的。然而, 由于金属光栅的 SPR 引发了光隧道效应, 进而出现了光的异常透射现象。

从图 2 的结果可以看出, 每种光栅结构在入射光为 300 nm 到 800 nm 之间, 有两个主要的透射峰值和反射低谷值。峰值 1 的波长位置几乎不随光栅形状而改变。我们知道, 对于光栅的 SPR 而言, 可以用下式表达其中的关系

$$k_{sp} = k_0 \sin \theta_0 + n \cdot \frac{2\pi}{P} \approx \sqrt{\frac{\epsilon_m \cdot \epsilon_d}{(\epsilon_m + \epsilon_d)}} k_0 \quad (1)$$

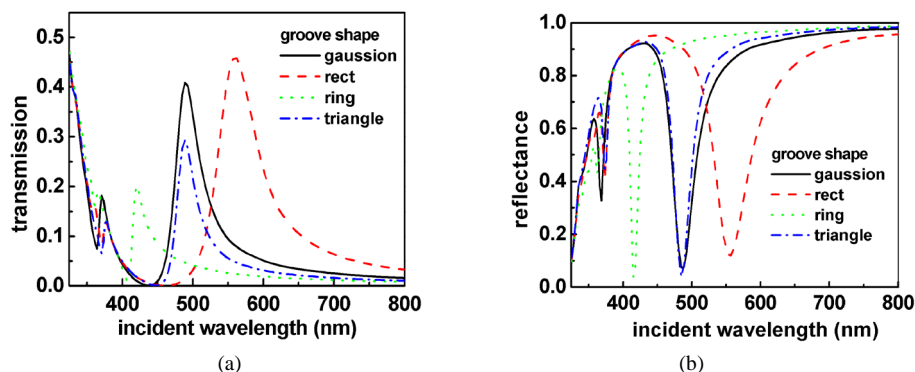


Figure 2. Transmission (a) and reflectivity (b) as functions of incident wavelength; (Structure parameters of MNG are $P = 300$ nm, $t = 15$ nm, $H = 40$ nm, $w = 30$ nm)

图 2. 几种形状下的(a) 透射率和(b) 反射率随波长的变化关系。(MNG 的结构参数 $P = 300$ nm, $t = 15$ nm, $H = 40$ nm, $w = 30$ nm)

其中 k_0 为入射波矢, θ_0 为入射角, P 为光栅周期, k_{sp} 为表面等离子体波矢。 ε_m 为银介电函数, ε_d 为光栅上表面介质的介电常数。共振峰的波长位置依赖于结构周期和入射横向波矢。前面为垂直入射, 因此 θ_0 为 0, 所以共振波长影响因素是光栅周期, 和沟槽形状基本没有关系。因此我们判断第一个峰值为 SPR, 它的光谱响应频带相对较窄的, 只有几纳米到十几纳米之间。同时, 我们也能看出峰值 2 却随着光栅形状的改变出现了明显的频移, 下面我们分析一下第二个峰值反应的物理本质。

为此, 我们模拟了矩形金属纳米光栅中两种共振下的近场磁场分布, 光栅剖面结构参数设置与图 2 一致, 结果如图 3 所示。图中, 黄色框图代表了光栅中的一个周期, 而中间白色部分是沟槽形状为矩形的银薄膜区域。其中图 3(a)和图 3(b)分别对应着第一个窄带透射峰值的共振模式和第二个宽带透射峰值的共振模式。从图中的近场磁矢量近场分布可以看出, 第一个共振处的光场分布在银薄膜的上下表面, 这说明当光从上表面入射时, 引发了上表面的等离子体产生共振进而引发下表面的等离子体产生共振, 也正是由于 SPR 导致了光的隧穿效应, 使得矩形 MNG 出现了特殊的光学响应。而第二个共振处的光场有绝大部分都集中在沟槽内部, 这说明光从上表面入射时, 引发矩形沟槽表面的等离子体产生共振并和入射光子耦合, 进而引起了强烈的光近场局域增强, 这种效应类似于金属纳米粒子的 SPR 效应, 也就是局域化表面等离子体共振(LSPR)效应。从图 2 中, 我们可以看到 LSPR 有相对较宽(约几十纳米)的光谱响应。这时的透射率约 0.5, 而反射率小于 0.1, 说明 LSPR 伴随着强烈的光的吸收。

公式(1)描述了 SPR 波矢 k_{sp} 和光栅结构周期之间的关系, 在平面波垂直入射的情况下, 光栅周期越大, k_{sp} 越小, 因此共振波长也越大。下面我们主要以矩形 MNG 为例, 进一步讨论光栅的槽深槽宽等结构参数对 SPR 和 LSPR 两种共振模式的影响。

3. 矩形 MNG 的光学传播特性

矩形剖面 MNG 的结构示意图见前面图 1(2), 其中槽深为 H , 槽宽为 w 。

3.1. 槽深对 MNG 光学特性的影响

图 4 给出了矩形沟槽银纳米光栅在槽深 H 从 20 nm 到 100 nm 变化下的透射率、反射率和入射光波长的对应关系。从计算结果可以看出, 在入射波长约 373 nm 处, 出现了第一个反射低谷值和透射峰值, 此处为 SPR, 共振峰值波长几乎不随光栅槽深 H 的变化而变化, 但透射率随着槽深 H 的增大而减小。第二个透射峰为 LSPR, 共振峰值波长随着沟槽深度的增大而增大, 到 $H = 100$ nm 时, 其透射峰值甚至超出了 800 nm, 透射率也随着槽深 H 的增大而减小。

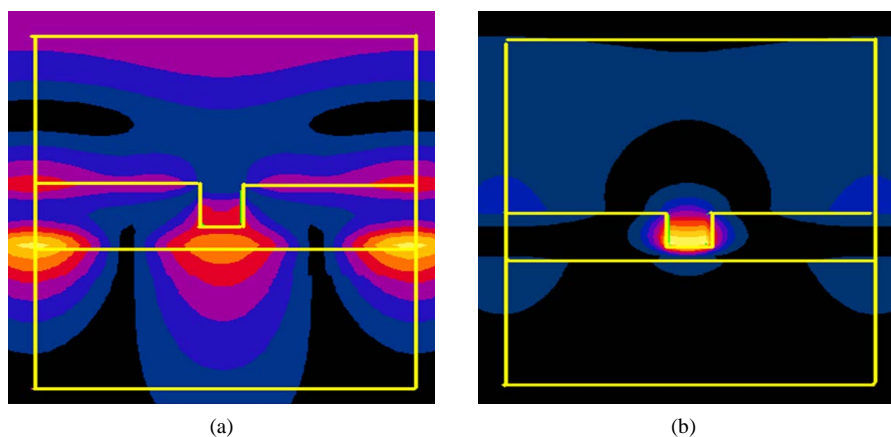


Figure 3. The magnetic near field distribution of MNG with rectangle groove shapes; (a) $\lambda_1 = 373$ nm, (b) $\lambda_2 = 556$ nm ($P = 300$ nm, $t = 15$ nm, $w = 30$ nm, $H = 40$ nm)

图 3. 矩形沟槽 MNG 的磁场的近场分布特性。(a) $\lambda_1 = 373$ nm, (b) $\lambda_2 = 556$ nm ($P = 300$ nm, $t = 15$ nm, $w = 30$ nm, $H = 40$ nm)

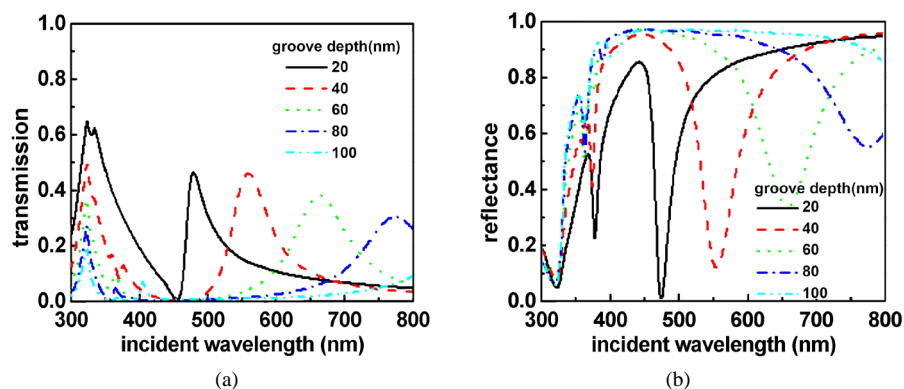


Figure 4. Transmission (a) and reflectivity (b) as functions of incident wavelength with different groove depths ($P = 300$ nm, $w = 30$ nm, $t = 15$ nm)

图 4. 不同槽深 H 下的透射率(a)和反射率(b)随波长的变化关系($P = 300$ nm, $w = 30$ nm, $t = 15$ nm)

3.2. 槽宽对 MNG 光学特性的影响

矩形沟槽银纳米光栅在不同槽宽 w 下的透射率、反射率和入射光波长的对应关系见图 5。从计算结果同样可以看到有两个明显的共振透射峰，每个峰值处对应着反射低谷值。第一个 SPR 共振峰值波长约 373 nm，基本不随光栅槽宽的变化而变化，而且从图 5(a)可以看出，透射率随着槽宽的增大而缓慢增大。第二个 LSPR 透射峰值显示随着沟槽宽度 w 的增加，对应的共振透射波长向短波长方向移动。和前面槽深变化相类似的情况是，SPR 透射曲线相比 LSPR 透射曲线呈现相对窄的光谱响应。再根据图 4 和图 5 的分析，说明 LSPR 对光栅的槽深槽宽变化非常敏感，随着槽深由 20 nm 增加至 100 nm，共振峰向长波方向大幅移动(红移约 300 nm)，随槽宽由 15 nm 增加至 250 nm，共振峰向短波方向大幅移动(蓝移约 200 nm)。

4. 结论

利用多重多级子程序法计算了高斯形、三角形、圆形和矩形等几种典型沟槽形状的金属纳米光栅的光波传播特性。分析了光栅形状、槽宽、槽深、入射光波长等相关参数对光透反射率的影响。结果说明，

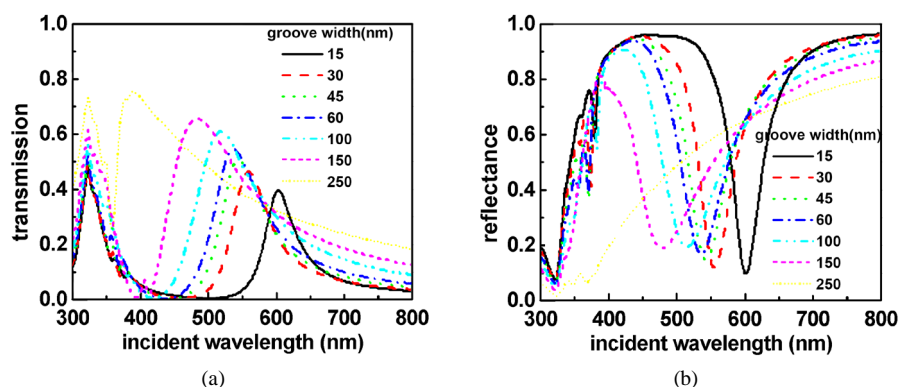


Figure 5. Transmission (a) and reflectivity (b) as functions of incident wavelength with different groove widths. ($P = 300$ nm, $H = 40$ nm, $t = 15$ nm)

图 5. 不同槽宽 w 下的透射率(a)和反射率(b)随波长的变化关系($P = 300$ nm, $H = 40$ nm, $t = 15$ nm)

在平面波垂直入射的情况下, 金属纳米光栅存在表面等离子体共振和局域化表面等离子体共振两种共振模式, 并由此引发了光的异常透射。SPR 透射峰值波长随光栅槽深和槽宽的变化都很大, 并呈现窄光谱响应机制。LSPR 能将主要的光能量局域在光栅沟槽内部, 在较宽的光谱区域都能响应。LSPR 峰值波长强烈依赖于槽深和槽宽的大小, 随槽深增加而红移, 随槽宽增加而蓝移。分析总结金属纳米光栅结构参数对其表面等离子体共振模式的影响规律有助于实现光栅与入射光的更有效的耦合, 为根据实际需要合理地设计金属纳米光栅提供相应的支持和依据。

基金项目

河北省科技计划项目(15210917)。

参考文献 (References)

- [1] Ebbesen, T.W., Lezec, H.J., Ghaemi, H.F., Thio, T. and Wolff, P.A. (1998) Surface Plasmons Enhance Optical Transmission through Subwavelength Holes. *Nature*, **391**, 667. <https://doi.org/10.1038/35570>
- [2] Pendry, J.B., Martin-Moreno, L. and Garcia-Vidal, F.J. (2004) Mimicking Surface Plasmons with Structured Surface. *Science*, **305**, 847-848. <https://doi.org/10.1126/science.1098999>
- [3] 顾本源. 表面等离子体亚波长光学原理和新型效应[J]. 物理, 2007, 36(4): 280-287.
- [4] 马文英, 杨欢, 刘娟意, 等. 金属纳米结构的形状对其消光特性的影响研究[J]. 光学学报, 2010, 30(9): 2629-2633.
- [5] Maurya, J.B., Prajapati, Y.K., Singh, V., Saini, J.P. and Tripathi, R. (2016) Improved Performance of the Surface Plasmon Resonance Biosensor Based on Graphene or MoS₂ Using Silicon. *Optics Communications*, **359**, 426-434. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2015.10.010>
- [6] 汪国平. 表面等离子体激元纳米集成光子器件[J]. 物理, 2006, 35(6): 502-507.
- [7] Martin-Moreno, L., Garcia-Vidal, F.J., et al. (2001) Theory of Extraordinary Optical Transmission through Subwavelength Hole Arrays. *Physical Review Letters*, **86**, 1114. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.1114>
- [8] Raether, H. (1988) Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings. *Springer*, **111**, 91-116. <https://doi.org/10.1007/BFb0048323>
- [9] Hori, H., Tawa, K., et al. (2009) Influence of Groove Depth and Surface Profile on Fluorescence Enhancement by Grating-Coupled Surface Plasmon Resonance. *Optical Review*, **16**, 216-221. <https://doi.org/10.1007/s10043-009-0040-5>
- [10] Li, H., Luo, X., Du, C., Chen, X. and Fu, Y. (2008) Analysis of Sensing Performance of Gaussian-Shaped Metallic Nano-Gratings. *Journal of Nanophotonics*, **2**, 023508. <https://doi.org/10.1117/1.2973901>
- [11] Li, H., Du, C., Luo, X. and Chen, X. (2007) Propagation Properties of Gaussian-Shaped and Double Sides Unsymme-

trical Metallic Nano-Corrugations. *Chinese Physics Letters*, **24**, 2870-2872.

<https://doi.org/10.1088/0256-307X/24/10/044>

- [12] Li, H., Zhang, Z., Luo, X., Chen, X. and Fu, Y. (2010) Design of Gaussian-Shaped and Double Sides Flanked Metallic Nano-Grating Surface Plasma Resonance Biosensors. <https://doi.org/10.1109/SOPO.2010.5504056>
- [13] Hecht, J. 表面等离子激元能突破传统光学器件的极限[J]. 闫利芬, 译. 激光世界, 2005(8): 26-28.
- [14] Johnson, P.B. and Christy, R.W. (1972) Optical Constants of the Noble Metals. *Physical Review B*, **6**, 4370-4379. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>
- [15] Tan, W.-C., Preist, T.W. and Sambles, J.R. (2000) Resonant Tunneling of Light through Thin Metal Films via Strongly Localized Surface Plasmons. *Physical Review B*, **62**, 134-138.
- [16] Hafner, Ch. (1999) The Multiple Multipole Program (MMP) and the Generalized Multipole Technique (GMT). Elsevier, Amsterdam.
- [17] Moreno, E. and Hafner, C. (2002) Multiple Multipole Method with Automatic Multipole Setting Applied to the Simulation of Surface Plasmons in Metallic Nanostructures. *Journal of the Optical Society of America*, **19**, 101-111. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.19.000101>

期刊投稿者将享受如下服务:

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: ojs@hanspub.org