

数据论文

Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜中的
紫外波段超常透射*朱文慧¹⁾ 冯磊¹⁾ 张克雄²⁾ 朱俊^{1)†}

1) (内蒙古大学物理科学与技术学院, 呼和浩特 010021)

2) (大连理工大学集成电路学院, 大连 116620)

(2024 年 7 月 5 日收到; 2024 年 9 月 4 日收到修改稿)

采用有限差分时域算法计算 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜衬底上的周期性三角晶格 Al 纳米孔阵列的透过率, 研究不同 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 衬底的 Al 组分 x 以及 Al 纳米孔阵列的厚度、孔径和周期对其光学传输特性的影响. 数值计算结果表明, 当 $x=0$ 时, 在 263 nm 和 358 nm 波长范围处出现两个强透射峰, 随着 x 的增大, 其中位于 263 nm 处的透射峰发生轻微蓝移, 强度则先增强后下降; 358 nm 处的透射峰发生明显蓝移且不断加强. 若纳米孔阵列的周期不变, 随着空气柱孔径增大时, 紫外波段两强透射峰峰值位置分别位于 244 nm 和 347 nm 处, 两峰均先发生红移再蓝移, 透过率不断增大, 反射率减小. 随着周期扩大, 紫外波段两强透射峰分别位于 249 nm 和 336 nm 处, 两透射峰均发生明显红移, 其中 249 nm 处的透射峰红移至 304 nm, 336 nm 处的透射峰红移至 417 nm, 并且透过率不断降低. 随着 Al 厚度的增大, 位于 380 nm 处的透射峰峰值位置发生蓝移, 且透过率不断下降. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00036> 中访问获取.

关键词: $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$, Al 纳米孔阵列, 局域表面等离子体共振, 超常透射**PACS:** 78.67.Ty, 85.40.Cz, 78.47.Rb, 42.70.Qs**DOI:** 10.7498/aps.73.20240928**CSTR:** 32037.14.aps.73.20240928

1 引言

超常透射是指当入射光线穿过金属薄膜上的亚波长小孔时, 其透过率高于衍射理论的计算值的现象, 这一现象是 Ebbesen 等^[1]在 1998 年研究金属薄膜亚波长孔阵列的光学透射特性时发现的. 超常光透射峰源于表面等离子极化激元 (surface plasmon polaritons, SPPs) 和局域表面等离子体共振 (localized surface plasmon resonances, LSPRs) 之间的相互耦合^[2]. SPPs 在周期性结构中占据主导地位, 影响光与整个结构的耦合和透射, 而 LSPRs 则集中于单个结构的局部场增强效应. SPPs 和

LSPRs 两者共同作用, 使得金属结构在特定波长下透过率超常增强, 成为纳米光子学和光学传感器设计中的重要原理. 超常透射现象虽然在各波段都有其应用, 但是近年来在可见光和近红外光波段^[3-7]的相关研究较多, 对于紫外波段的研究相对较少, 因此发展潜力大.

如何有效实现紫外波段超常透射是一直以来研究的重点. 已有很多研究表明, 设计具有亚波长特征尺寸的金属薄膜或阵列, 以及嵌入或沉积特定尺寸和形貌的金属纳米颗粒, 以激发 SPPs 或 LSPRs, 从而提高紫外透过率^[8]. 因此, 薄膜阵列结构的超常透射现象与薄膜厚度、孔的周期和直径等密切相关^[9,10]. 例如, Ekinici 等^[11]通过制备大面积

* 国家自然科学基金 (批准号: 62364014, 12164031) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jiulye@126.com

Al 纳米孔阵列, 利用 SPPs 和 LSPRs 的耦合作用以及 Al 的高等离子体频率特性, 实现在紫外波段的超常透射, 通过调整纳米孔的大小和阵列的周期性, 可以调节透射峰的位置. Hu 等^[12]通过调节二氧化硅衬底上周期性三角晶格 Al 纳米孔阵列相关结构参数, 实现紫外波段的超常透射以及透射峰位置的精细调节. Zhang 等^[13]通过金薄膜周期性排列的复合三角形纳米孔阵列结构, 利用 SPPs 和 LSPRs 的耦合来实现透射增强. 综上, 设计复杂结构如金属纳米颗粒与纳米孔阵列, 通过精确控制其结构参数, 可以实现对光的透射特性的显著调控, 从而设计出具有特定透射特性的光学器件.

除了结构优化之外, 在紫外波段利用 SPPs 和 LSPRs 耦合实现超常透射还涉及金属和衬底材料的选择. 由于 Al 的等离子体频率较高, Al 在深紫外区域的介电常数实部较大, 虚部较小, 因此 Al 是深紫外区表面等离子体共振激发的良好材料^[14]. Al 暴露于空气时, 表面会自发形成 2—3 nm 的薄氧化层^[15], 而且这层很薄的 Al_2O_3 层作为钝化和保护层将阻止 Al 被进一步氧化, 不会显著干扰 Al 纳米孔阵列对紫外光的响应.

$(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 材料具有高介电常数和击穿电场、高密度二维电子气以及较高的热稳定性和化学稳定性. 作为一种宽带隙半导体材料, $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 带隙宽度可以通过调整 Al 组分 x 来调节以适应特定的紫外波段应用. 较宽的带隙有助于减少在紫外波段的本征吸收, 从而允许更多的光透过衬底, 增强超常透射效应. 因此, $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 作为衬底对增强超常透射现象有明显优势, 对于实现大功率器件的高击穿电场和深紫外光电器件的截止波长或发射波长的调制, 以及在下一代高功率和射频电子器件中具有很大的应用前景^[16–20].

本文以紫外等离激元为中心, 采用有限差分时域算法, 设计 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜结构, 通过改变 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 衬底上 Al 组分 x 的含量以及 Al 纳米孔阵列的厚度、孔径、周期, 对 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜的透射现象进行理论研究, 揭示紫外波段的超常光透射机制.

2 计算模型

图 1 给出 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 衬底上的周期性三角晶格 Al 纳米孔阵列的计算示意图. 周期性三角晶

格阵列两轴向纳米孔周期一致. 在暴露于环境空气的 Al 表面上考虑 2 nm 的 Al_2O_3 层.

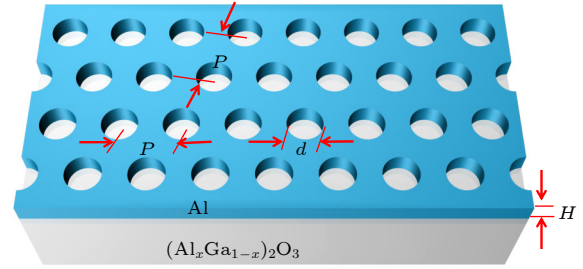


图 1 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜的结构示意图 (d 为孔径, P 为周期, H 为 Al 厚度)

Fig. 1. Schematic diagram of a Al nanopore array on a $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ thin film, here, d is the aperture, P is the period and H is the thickness of Al.

为计算 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜的透过率, 首先需要确定材料的折射率和消光系数, Al_2O_3 参数的选取来自文献^[21]. 关于 Ga_2O_3 材料参数选取, 以文献^[22]中 Ga_2O_3 致密结构薄膜的光学参数为依据进行计算.

有关 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 参数的计算, 常用的光学材料折射率柯西色散公式^[23]为

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad (1)$$

式中 $n(\lambda)$ 为光学材料在波长 λ 时的折射率, A , B 和 C 为材料折射率的柯西色散系数^[24]. 不同 Al 组分 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 折射率随波长变化曲线如图 2 所示. 由文献^[24]给出柯西色散系数分别为: 对于 Al 组分 $x = 0.2$, 有 $A = 1.88275$, $B = 3.92524 \times 10^3 \text{ nm}^2$, $C = 7.65346 \times 10^8 \text{ nm}^4$; 对于 Al

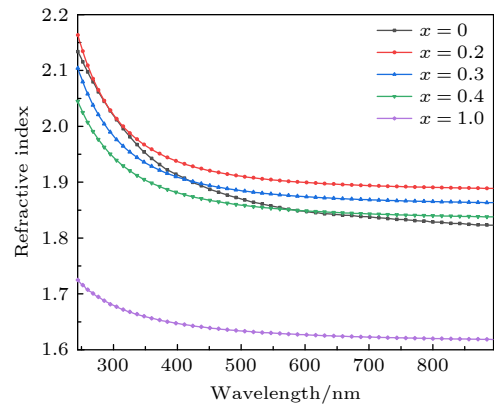


图 2 当 $x = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 1.0$ 时, $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 的折射率 $n(\lambda)$

Fig. 2. Refractive index $n(\lambda)$ of $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ with $x = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 1.0$.

组分 $x = 0.3$, 有 $A = 1.85664$, $B = 4.63855 \times 10^3 \text{ nm}^2$, $C = 6.04614 \times 10^8 \text{ nm}^4$; 对于 Al 组分 $x = 0.4$, 有 $A = 1.83052$, $B = 5.35186 \times 10^3 \text{ nm}^2$, $C = 4.43832 \times 10^8 \text{ nm}^4$. 并且, 利用光学材料折射率柯西色散公式可以得到任意波段任意 Al 组分 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 的折射率. 由于 Al_2O_3 和 Ga_2O_3 消光系数非常小^[25], 而 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 消光系数介于 Al_2O_3 和 Ga_2O_3 之间, 因此在计算中只采用了 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 的折射率而忽略了消光系数 (即复折射率的虚部).

3 分析与讨论

3.1 Al 组分变化对 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜的透射谱和平均透过率的影响

对于平均透过率的计算, 本文采用简单的算术平均, 即将所有单个透过率值相加然后除以测量点的数量. 平均透过率计算公式为

$$T_{\text{avg}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_i, \quad (2)$$

式中 T_i 表示第 i 个波长点的透过率, N 是总的波长点数量.

对于不同 Al 组分 x 的 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜衬底, 由图 3(a) 可知, 在紫外波段, Al 纳米孔阵列均出现两个强透射峰. 由于上下界面影响, 金属纳米孔阵列结构中存在两种不同的 SPPs 模式, 紫外较短波段和紫外较长波段分别对应于空气-金属界面和 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ -金属界面, 两界面 SPPs 模式的共振波长不同, 因此在紫外波段出现两个透射峰^[12].

当 $x = 0$ (薄膜衬底为纯 Ga_2O_3) 时, 紫外波段两个强透射峰分别位于 263 nm 和 358 nm 处, 峰值处透过率分别为 33.19% 和 18.46%. 随着 Al 组分的增大, Al 纳米孔阵列的一个透射峰集中在较短的波长即 263 nm 附近. 当 x 从 0 到 0.4 变化时, 随着 x 的增大, Al 纳米孔阵列透过率不断增大. 当 $x = 1$ (薄膜衬底为纯 Al_2O_3) 时, 透过率降低到 40.45%. 在紫外较短波段, 峰值位置整体几乎没有发生改变. 另一透射峰集中在较长的波长即 358 nm 附近, 透过率不断增大, 峰值位置先略微红移, 后显著蓝移, 整体呈现蓝移趋势. 此外, 在可见光区域, Al 纳米孔阵列有一个强透射峰且随着 x 增大, 透过率逐渐增大, 位置先略微红移, 后逐渐蓝移, 整体也呈现蓝移趋势. 在可见光区, 空气-金属界面和 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ -金属界面两种界面模式的共振频率相近, 因此只能观察到 1 个透射峰. Al_2O_3 的带隙大于 Ga_2O_3 , 意味着随着 x 的增大, 整个材料的带隙将向较高的能量 (即短波长) 移动. 这一变化影响了薄膜对特定波长光的吸收, 最初导致透射峰的红移, 因为较小的 Al 组分 x 可能使透射峰接近于 Ga_2O_3 的特性, 但随着 x 增大, 透射峰逐渐向短波长方向移动, 反映了整体带隙的蓝移趋势. 由图 3(b) 可知, 随着 x 的增大, 在紫外波段纳米孔阵列的平均透过率先增大, 后减小, 由 $x = 0$ 时的 21.04% 增至 $x = 0.2$ 时的 28.18%. 此后, 紫外波段纳米孔阵列的平均透过率逐渐降低到 $x = 1$ 时的 24.63%. 在可见光区域平均透过率随 x 的增大变化不显著, 由 $x = 0$ 时的 7.79% 小幅缓慢增至 $x = 1$ 时的 10.03%. 总的来说, Al 组分的变化对纳米孔阵列的平均透过率影响不明显.

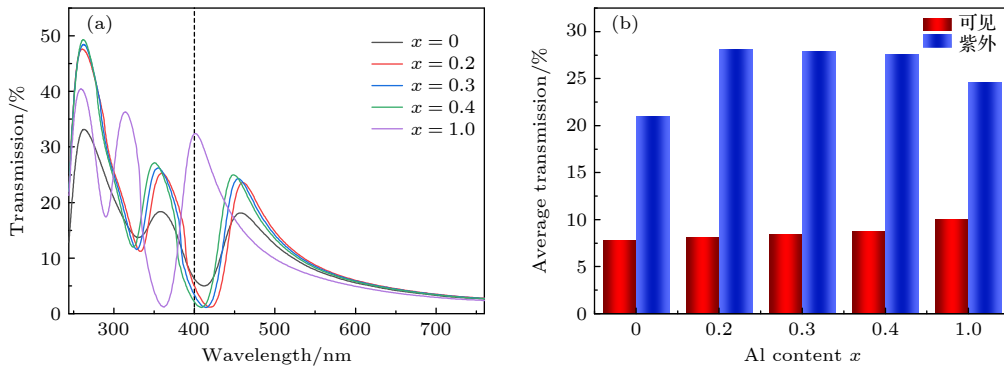


图 3 当 $d = 120 \text{ nm}$, $P = 200 \text{ nm}$, $H = 50 \text{ nm}$ (a) Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜的透射谱; (b) 平均透过率

Fig. 3. Transmission spectrum (a) and average transmission (b) of a nanopore array/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ when $d = 120 \text{ nm}$, $P = 200 \text{ nm}$, $H = 50 \text{ nm}$.

3.2 孔径变化对 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ 薄膜的透射谱和平均透过率的影响

以 Al 组分为 $x = 0.3$ 为例, 研究空气柱孔径变化对纳米孔阵列透过率的影响. 由图 4(a) 可知, 紫外波段出现了两个强透射峰, 孔径 $d = 60$ nm 时, 其中一透射峰位于 244 nm 处, 随着 d 的增大, 透过率不断增大, 由 6.28% 显著增至 59.47%, 峰值位置先红移, 后蓝移. 另外一个透射峰位于 347 nm 处, 随着 d 的增大, 透过率不断增大, 由 2.27% 显著增至 51.33%, 峰值位置也是先红移, 后蓝移. Al 表面有入射光照射时, 表面的自由电子会和入射光的光子互相作用, 在 Al 表面产生表面等离子体. 随着孔径的增大, 周期内空气孔所占面积增大, SPPs 和 LSPRs 耦合增强使得透射峰强度明显增大 [26]. 通常, 对于连续金属薄膜中的纳米孔阵列, SPPs 和 LSPRs 不可分离 [27]. SPPs, LSPRs 的相互耦合以及非 SPs 透射, 共同为最终传输做出贡献, 透过率随孔径的增大而增大. 随着孔径的增大, 截止波长和尾部的红移 (非 SPs) 最初起主导作用,

导致峰值位置的初始红移. 随后, 单个金属颗粒的 LSPRs 的蓝移起主导作用, 导致最终峰值位置的蓝移. 在可见光波段, 有一强透射峰, 随着 d 从 60 nm 到 160 nm 的改变, 透过率由 0.88% 显著增至 46.24%, 透射峰位置逐渐红移. 由图 4(b) 可知, 随着 d 的不断增大, 纳米孔阵列在紫外波段和可见光区的平均透过率均显著增强. 其中, 在紫外波段的平均透过率由 $d = 60$ nm 时的 2.11% 显著增至 $d = 160$ nm 时的 47.99%, 在可见光区域的平均透过率由 $d = 60$ nm 时的 0.32% 增至 $d = 160$ nm 时的 25.66%. 由此可见, 孔径变化对纳米孔阵列紫外波段的平均透过率影响较为显著.

3.3 阵列周期变化对 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ 薄膜的透射谱和平均透过率的影响

以 Al 组分为 $x = 0.3$ 为例, 研究阵列周期变化对纳米孔阵列透过率的影响. 由图 5(a) 可知, 阵列 $P = 180$ nm 时, 在紫外波段, 出现了两个强透

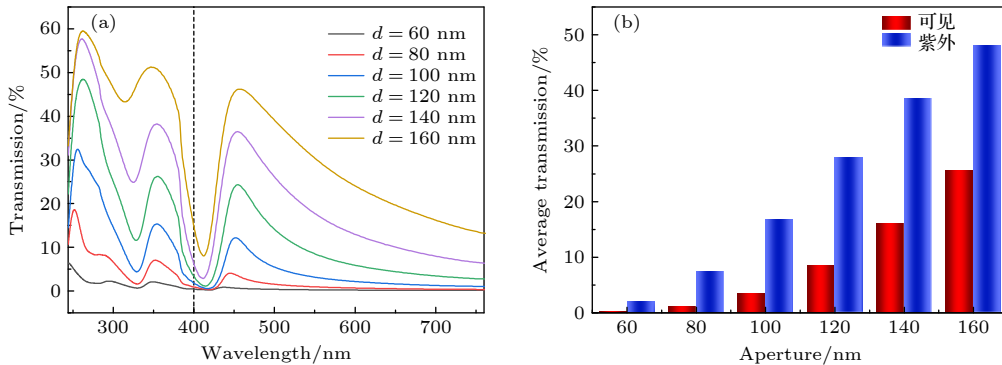


图 4 $P = 200$ nm, $H = 50$ nm, d 从 60 nm 到 160 nm 改变时 (a) Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ 的透射谱; (b) 平均透过率
Fig. 4. Transmission spectrum (a) and average transmission (b) of a Al nanopore array/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ when $P = 200$ nm, $H = 50$ nm and d changes from 60 to 160 nm.

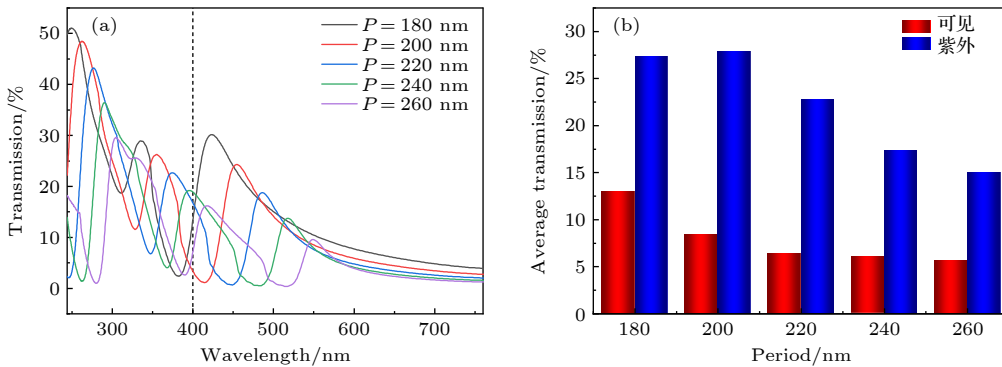


图 5 当 $d = 120$ nm, $H = 50$ nm, P 从 180 nm 到 260 nm 改变时 (a) Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ 的透射谱; (b) 平均透过率
Fig. 5. Transmission spectrum (a) and average transmission (b) of a Al nanopore array/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ when $d = 120$ nm, $H = 50$ nm and P changes from 180 nm to 260 nm.

射峰, 其中一个透射峰位于 249 nm 处, 另一个透射峰位于 336 nm 处. 随着 P 的增大, 处于紫外较短波段透射峰位置从 249 nm 明显红移至 304 nm, 处于紫外较长波段透射峰峰值位置从 336 nm 显著红移至 416 nm, 两透射峰透过率均不断下降. 在可见光区域, 出现一个强透射峰, 随着 P 不断增大, 透射峰位置由 423 nm 显著红移至 548 nm, 透过率也逐渐下降. 由图 5(b) 可知, 随着 P 不断增大, 纳米孔阵列在紫外波段与可见光区的平均透过率整体呈现降低趋势. 在紫外波段, 纳米孔阵列的平均透过率呈现非单调性变化趋势, $P = 200$ nm 时, 平均透过率达到最大, 为 27.94%, 此后, 随着 P 增大, 纳米孔阵列平均透过率逐渐降低至 $P = 260$ nm 时的 14.97%. 在可见光区, 随着 P 的不断增大, 纳米孔阵列的平均透过率由 P 为 180 nm 时的 12.96% 逐渐降低到 P 为 260 nm 时的 5.70%.

3.4 Al 纳米阵列厚度对 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ 薄膜的透射谱和平均透过率的影响

以 Al 组分 $x = 0.3$ 为例, 研究 Al 纳米孔阵列厚度 H 对透过率的影响. 由图 6(a) 可知, 紫外波段出现了两个强透射峰, H 从 20 nm 到 60 nm 变化时, 278 nm 处透射峰整体发生轻微红移, 380 nm 处透射峰发生蓝移. 首先, 对于金属纳米结构, 其 LSPRs 的共振频率通常会随着金属结构在垂直于入射光的电场方向 (即 z 方向) 上的厚度增大而发生蓝移^[28]. 其次, 紫外波段的两种透射峰的模式共振也会影响透射峰的位置. 当 Al 膜厚度小于或接近电磁场的趋肤深度^[29] (约 13 nm) 时, 由于趋肤效应, 两种模式之间的相互耦合作用较强. 随着

Al 膜厚度的增大, 两种模式的相互作用减弱, 导致它们的峰值相互靠近, 即紫外较短波段透射峰模式发生红移, 而紫外较长波段透射峰模式发生蓝移. 因此, 随着 H 的增大, 对于紫外较短波段处透射峰, 其局域表面等离子体蓝移, 而两种模式的耦合引起红移, 后者的作用更大, 导致透射峰的红移很小; 对于紫外较长波段处透射峰, 随着 H 的增大, 不仅其局域表面等离子体发生蓝移, 而且紫外波段两种透射峰模式耦合导致蓝移. 随着 H 的增大, 较长波段即 380 nm 处的透射峰峰值处透过率变化倾向远大于较短波段即 278 nm 处的透射峰. 在可见光区域的强透射峰随着 H 不断增大, 透过率逐渐下降, 透射峰位置逐渐蓝移. 由图 6(b) 可知, 随着 H 的不断增大, 纳米孔阵列在紫外波段和可见光区域的平均透过率均不断降低. 在紫外波段, 纳米孔阵列的平均透过率由 $H = 20$ nm 时的 38.63% 降低到 $H = 60$ nm 时的 24.50%. 在可见光区域, 纳米孔阵列的平均透过率由 $H = 20$ nm 时的 26.83% 降低到 $H = 60$ nm 时的 5.67%.

3.5 紫外波段透射峰中心波长随结构参数的变化

定义紫外波段两透射峰所在中心波长位置分别为 λ_1 和 λ_2 , 其中较短波段透射峰为 λ_1 , 较长波段透射峰为 λ_2 . 为揭示不同结构参数对紫外波段透射峰中心波长的影响, 图 7 分别给出了紫外波段两透射峰中心波长随结构参数 x , d , P , H 的变化. 由图 7(a) 可知, 随着 Al 组分 x 的增大, λ_2 随着 x 的增大先略微红移, 后显著蓝移, 整体呈现蓝移趋势. 由于表面等离子体的传播条件涉及周围介质的介电常数, 因此周围介质的折射率变化会导致共

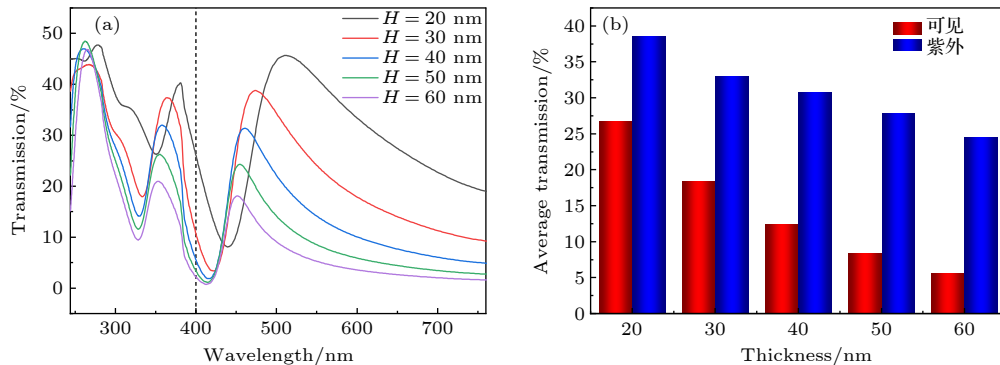


图 6 当 $d = 120$ nm, $P = 200$ nm, H 从 20 nm 到 60 nm 改变时 (a) $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3/\text{Al}$ 纳米孔阵列的透射谱; (b) 平均透过率
Fig. 6. Transmission spectrum (a) and average transmission (b) of a Al nanopore array/ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ when $d = 120$ nm, $P = 200$ nm and H changes from 20 nm to 60 nm.

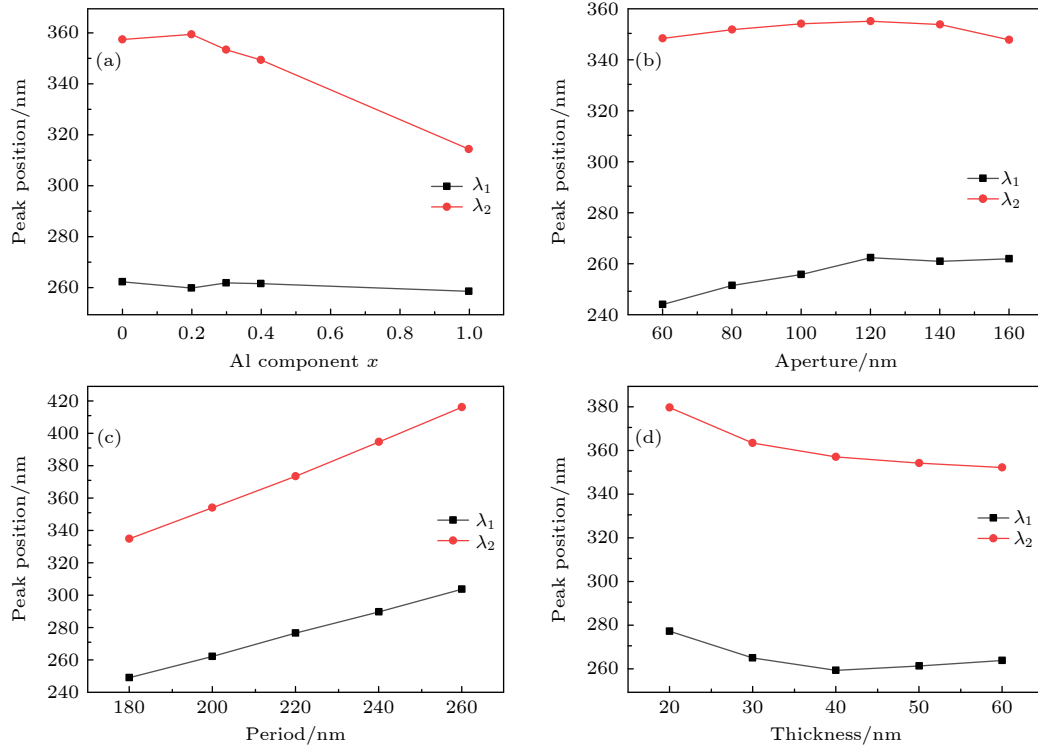


图 7 紫外波段透射峰中心波长 λ_1 和 λ_2 随结构参数 x , d , P , H 的变化 (a) 中心波长随 Al 组分 x 的演变规律; (b) 中心波长随孔径 d 的演变规律; (c) 中心波长随周期 P 的演变规律; (d) 中心波长随厚度 H 的演变规律

Fig. 7. Changes of the peak position of the transmission peaks in the ultraviolet band with structural parameters x , d , P and H : (a) Evolution of peak position with Al component x ; (b) evolution of peak position with aperture d ; (c) evolution of peak position with period P ; (d) evolution of peak position with thickness H .

振波长的位移. λ_2 的改变主要源于 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜的折射率的变化. 对于紫外较短波段, 其波长较短, 通常远离 SPRs 波长. 在这个波段, SPRs 的影响较小, 因此即使 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜的折射率发生变化, 也不会显著影响紫外较短波段的透射峰峰位. 由图 7(b) 可知, 孔径 d 的大小也影响透射峰的位置, 虽然它的影响不如周期显著. 孔径的变化会改变阵列的有效折射率, 进而影响共振条件. 由图 7(c) 可知, λ_1 和 λ_2 随着周期 P 的改变呈现线性变化, 增大周期, 两透射峰峰值位置显著红移. 周期性结构可以激发特定波长的表面等离子体共振, 使得在某些波长下透射增强. 由图 7(d) 可知, 金属薄膜厚度的变化对紫外波段两透射峰峰值位置的影响不如周期变化对其产生的影响显著.

3.6 紫外波段透射峰峰值处透过率随结构参数的变化

定义紫外波段较短波段透射峰峰值处透过率为 T_1 , 较长波段透射峰峰值处透过率为 T_2 . 为揭示不同结构参数对紫外波段透射峰峰值处透过率

的影响, 图 8 分别给出了紫外波段两透射峰峰值处透过率随结构参数 x , d , P , H 的变化. 由图 8(a) 可知, 随着 Al 组分 x 的增大, T_1 先增大后减小, 在 $x = 0.5$ 时其透过率最大, T_2 随着 x 的增大单调增大. 由图 8(b) 可知, 孔径的改变对紫外波段透射峰峰值处透过率影响显著, 随着孔径 d 的增大, T_1 和 T_2 显著增大. 由图 8(c) 可知, T_1 和 T_2 随着周期 P 的改变呈线性变化, 随着 P 的增大, 两透射峰峰值处透过率单调减小, 但其对透过率的影响相对来说没有孔径对透过率影响显著. 当孔径大小固定时, 孔与孔之间的距离加大, 相邻孔边缘产生的局域电磁场之间的相互作用减弱, 耦合效应降低, 导致透射效率下降, 因此透过率降低. 由图 8(d) 可知, Al 纳米孔阵列厚度对 T_1 的影响不明显, 对 T_2 影响较为明显, 随着 H 的增大, T_2 明显降低. 当金属薄膜很薄时, 经典的非 SPs 透过率相对较高, 并伴有明显的红移. 因此, 对于紫外较长波段透射峰模式, 更薄的金属薄膜导致更高的透过率. 紫外较短波段模式的峰值波长远小于截止波长, 因此受非 SPs 传输的影响小的多. 因此, Al 膜厚度对紫外

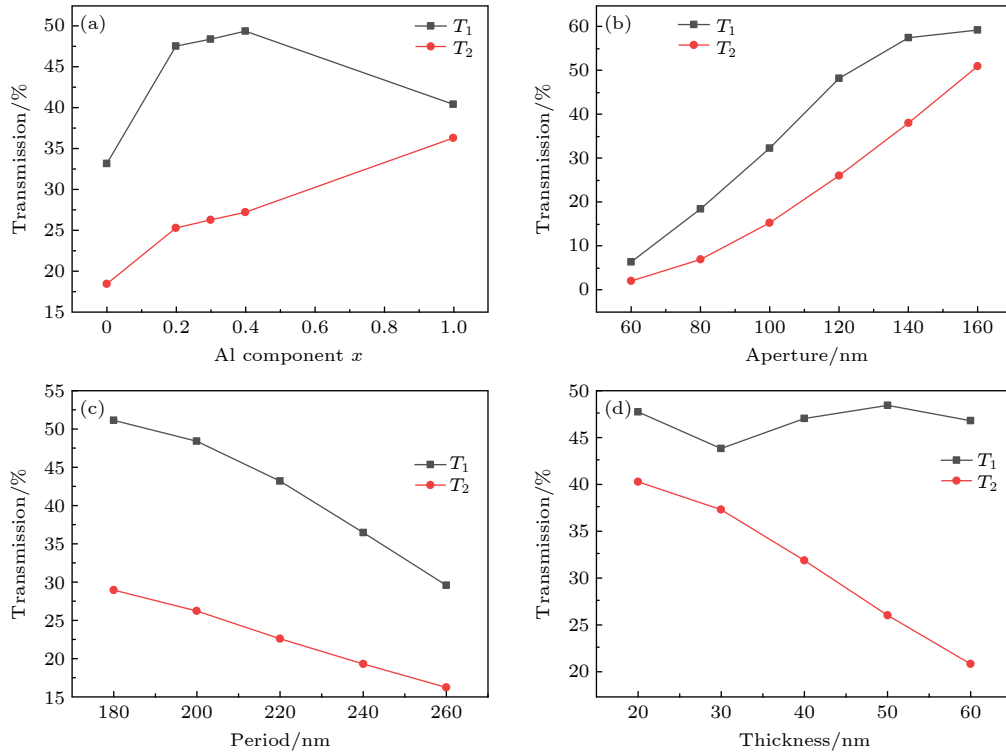


图8 紫外波段透射峰峰值处透过率 T_1 和 T_2 随结构参数 x , d , P , H 的变化 (a) 峰值处透过率随 Al 组分 x 的演变规律; (b) 峰值处透过率随孔径 d 的演变规律; (c) 峰值处透过率随周期 P 的演变规律; (d) 峰值处透过率随厚度 H 的演变规律

Fig. 8. Changes of peak transmission in the ultraviolet band with structural parameters x , d , P and H : (a) Evolution of peak transmission with Al component x ; (b) evolution of peak transmission with aperture d ; (c) evolution of peak transmission with period P ; (d) evolution of peak transmission with thickness H .

较长波段透射峰的透过率影响显著, 而对紫外较短波段透射峰的透过率影响较小. 整体来说, 紫外较短波段超常透射现象较为明显 ($T_1 > T_2$), 孔径大小的改变对紫外波段透射峰峰值处透过率的影响最为显著.

4 结 论

综上所述, 本文利用有限差分域算法进行数值模拟, 研究了薄膜衬底 Al 组分以及纳米孔阵列孔径、周期、厚度等结构参数对透射峰中心波长及峰值处透过率的定量影响. 结果表明, Al 组分的改变对于紫外较长波段以及可见光区域的透过率影响较为明显. 孔径的增大使峰值处透过率显著增大, 增大孔径有效地促进了 SPPs 和 LSPRs 耦合增强, 从而实现透过率增强. 事实上, 在我们所设计的 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜中的光透射既包含 SPRs 模式耦合的贡献, 也包括传统的非 SPs 贡献. 若仅仅考虑 Bethe 经典衍射理论^[30]计算出的透过率, 比我们仿真的结果小 2—3 个数量级, 由此说明 SPRs 效应是引起亚波长纳米孔阵

列结构出现超常透射现象的主要原因. 阵列周期的增大使透射峰峰值位置显著红移, 峰值处透过率不断降低. 周期的变化可以对透射峰的中心波长产生显著影响, 阵列的周期性在大波长范围内调制峰值位置方面起主导作用. 因此, 通过调整阵列的周期, 可以精确调控表面等离子体共振的波长位置, 即调制透射峰的位置. Al 纳米阵列厚度增大, 在紫外较长波段和可见光区透射峰不断蓝移, 透过率不断下降, 在紫外较短波段整体呈现蓝移趋势, 峰值处透过率变化不明显. 通过合理的设计和优化 Al 纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 结构相关参数, 能够有效地调控透射峰中心波长以及实现紫外波段的超常透射. 本研究基于紫外波段超常透射机制进行材料优化和结构设计, 能够在紫外光电探测器和滤波器等器件制作方面提供科学基础.

数据可用性声明

本篇论文的关联数据可以在补充材料 (online) 和科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00036> 中获取.

参考文献

- [1] Ebbesen T W, Lezec H J, Ghaemi H F, Thio T, Wolff P A 1998 *Nature* **391** 667
- [2] Wang L S, Wang G X, Yang K, Zhang W N, Liu W J 2023 *Opt. Commun.* **535** 129336
- [3] Hou Y M 2011 *Plasmonics* **6** 289
- [4] Tam H T T, Kajikawa K 2021 *Opt. Express* **29** 35191
- [5] Yue W S, Wang Z H, Yang Y, Li J Q, Wu Y, Chen L Q, Ooi B, Wang X B, Zhang X X 2014 *Nanoscale* **6** 7917
- [6] Guan J F, Yu X, Ding G T, Chen T, Lu Y Q 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 117301 (in Chinese) [关建飞, 俞潇, 丁冠天, 陈陶, 陆云清 2024 物理学报 **73** 117301]
- [7] Lu Y Q, Cheng X Y, Xu M, Xu J, Wang J 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 204207 (in Chinese) [陆云清, 成心怡, 许敏, 许吉, 王瑾 2016 物理学报 **65** 204207]
- [8] Du B B, Yang Y, Zhang Y, Jia P P, Ebendorff-Heidepriem H, Ruan Y L, Yang D X 2019 *J. Phys. D Appl. Phys.* **52** 275201
- [9] Ozbay E 2006 *Science* **311** 189
- [10] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W 2003 *Nature* **424** 824
- [11] Ekinici Y, Solak H H, David C 2007 *Opt. Lett.* **32** 172
- [12] Hu J L, Shen M Z, Li Z G, Li X H, Liu G Q, Wang X D, Kan C X, Li Y 2017 *Nanotechnology* **28** 215205
- [13] Zhang X G, Liu G Q, Liu, Z Q, Hu Y, Cai Z J, Liu X S, Fu G L, Liu M L 2014 *Opt. Eng.* **53** 107108
- [14] Watanabe Y, Inami W, Kawata Y 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 023112
- [15] Ekinici Y, Solak H H, Loeffler J F 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 083107
- [16] Li H J, Wu Z Y, Wu S Y, Tian P F, Fang Z L 2023 *J. Alloys Compd.* **960** 170671
- [17] Bhuiyan A F M A U, Feng Z X, Meng L Y, Fiedler A, Huang H L, Neal A T, Steinbrunner E, Mou S, Hwang J, Rajan S, Zhao H P 2022 *J. Appl. Phys.* **131** 145301
- [18] Huang R, Wang Z Y, Wu K, Xu H, Wang Q, Guo Y C 2024 *J. Semicond.* **45** 69
- [19] Xi H R, Yang T F, Xie M Y, Liang X J, Fang Z L, Ye Y, Chen Y, Wei Y M, Wang Z, Guan H Y, Lu H H 2024 *Laser Photon. Rev.* **18** 2301129
- [20] Dashkov A S, Khakhulin S A, Shapran D A, Glinskii G F, Kostromin N A, Vasilev A L, Yakunin S N, Komkov O S, Pirogov E V, Sobolev M S, Goray L I, Bouravleuv A D 2024 *J. Semicond.* **45** 57
- [21] Zhukovsky S V, Andryieuski A, Takayama O, Shkondin E, Malureanu R, Jensen F, Lavrinenko A V 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 177402
- [22] Tolmachev V A, Mavlyanov R K, Kalinin D A, Zharova Y A, Zaitseva N V, Pavlov S I 2017 *Opt. Spectrosc.* **123** 928
- [23] Pan L, Song B A, Xiao C F, Zhang P Q, Lin C G, Dai S X 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 114201 (in Chinese) [潘磊, 宋宝安, 肖传富, 张培晴, 林常规, 戴世勋 2020 物理学报 **69** 114201]
- [24] Schmidt-Grund R, Kranert C, von Wenckstern H, Zviagin V, Lorenz M, Grundmann M 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 165307
- [25] MALITSON I H 1962 *J. Opt. Soc. Am.* **52** 1377
- [26] Genet C, Ebbesen T W 2007 *Nature* **445** 39
- [27] Van der Molen K L, Klein Koerkamp K J, Enoch S, Segerink F B, van Hulst N F, Kuipers L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045421
- [28] Han J G, Azad A K, Gong M F, Lu X C, Zhang W L 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 071122
- [29] Liu Z W, Steele J M, Srituravanich W, Pikus Y, Sun C, Zhang X 2005 *Nano Lett.* **5** 1726
- [30] Bethe H A 1944 *Phys. Rev.* **66** 163

DATA PAPERS

Extraordinary transmission in ultraviolet band in $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3/\text{Al}$ nanopore array*

Zhu Wen-Hui¹⁾ Feng Lei¹⁾ Zhang Ke-Xiong²⁾ Zhu Jun^{1)†}

1) (*School of Physical Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China*)

2) (*School of Integrated Circuits, Dalian University of Technology, Dalian 116620, China*)

(Received 5 July 2024; revised manuscript received 4 September 2024)

Abstract

The finite difference time domain method is used to compute the transmissions of periodic triangular-lattice Al nanopore arrays on $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ thin film substrates. The influences of Al component x in $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ substrate, and the thickness, aperture and period of Al nanopore array on their optical transmission behaviors are studied systematically.

The numerical results indicate that when $x = 0$, there are two strong transmission peaks at 263 nm and 358 nm, respectively. As x increases, the transmission peak at 263 nm exhibits a slight blue-shift, with intensity first increasing and then decreasing. Meanwhile, the transmission peak at 358 nm demonstrates a noticeable blue-shift and its intensity strengthens continuously. The change of Al component x has a significant effect on the peak position of the transmission peak in the longer ultraviolet band and the peak transmission in the shorter ultraviolet band. If the periodic structure of the nanopore array keeps unchangeable, the two prominent transmission peaks appear near 244 nm and 347 nm, respectively, as the air column apertures enlarge. Remarkably, these dual peaks initially undergo a red-shift, followed by a blue-shift, while the transmission steadily increases and the reflectivity decreases. The change in aperture size can significantly affect the peak transmission, and by controlling the aperture size appropriately, the transmission intensity can be significantly enhanced. With the expansion of the period, the two strong transmission peaks are located at 249 nm and 336 nm, respectively, and the two transmission peaks show obvious red-shift. The former transmission peak is redshifted to 304 nm, and the latter one is redshifted to 417 nm. Moreover, the transmissions at these peaks continue to decrease. The change in period can significantly affect the central wavelength of the transmission peak, and the periodicity of the array plays a dominant role in modulating the peak position in a large wavelength range. As Al thickness increases, a blue-shift of the transmission peak occurs at 380 nm, and the transmission decreases continuously. The change in thickness significantly affects the transmission intensity of the transmission peak in the longer ultraviolet band and the visible light region, but it is not so pronounced as the effect of aperture size on transmission intensity.

Through reasonable design and optimization of structural parameters of Al nanopore array/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$, the peak position of transmission peak can be effectively regulated and the extraordinary transmission in ultraviolet band can be achieved.

Keywords: $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$, nanopore array, local surface plasmon resonance, extraordinary transmission

PACS: 78.67.Ty, 85.40.Cz, 78.47.Rb, 42.70.Qs

DOI: 10.7498/aps.73.20240928

CSTR: 32037.14.aps.73.20240928

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62364014, 12164031).

† Corresponding author. E-mail: jiulye@126.com

Al纳米孔阵列/ $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ 薄膜中的紫外波段超常透射

朱文慧 冯磊 张克雄 朱俊

Extraordinary transmission in ultraviolet band in $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3/\text{Al}$ nanopore array

Zhu Wen-Hui Feng Lei Zhang Ke-Xiong Zhu Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 207801 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240928

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240928>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Mn掺杂 $\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ - $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ - PbTiO_3 单晶微米尺度压电阵列的制备与铁电畴结构研究

Preparation and ferroelectric domain structure of micro-scale piezoelectric array fabricated by Mn doped $\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ - $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ - PbTiO_3 single crystal

物理学报. 2020, 69(18): 187701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200544>

基于阳极氧化铝模板增强 $\text{NaYF}_4:\text{Yb}^{3+}/\text{Er}^{3+}$ 上转换发光研究

Enhancement of $\text{NaYF}_4:\text{Yb}^{3+}/\text{Er}^{3+}$ up-conversion luminescence based on anodized alumina template

物理学报. 2024, 73(3): 037803 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231405>

关于 $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ 同型异质结的双波段、双模式紫外探测性能分析

Dual-band and dual-mode ultraviolet photodetection characterizations of $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ homo-type heterojunction

物理学报. 2023, 72(2): 027301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221738>

利用银纳米立方增强效率的多层溶液加工白光有机发光二极管

Efficiency improvement in solution-processed multilayered phosphorescent white organic light emitting diodes by silica coated silver nanocubes

物理学报. 2020, 69(4): 047801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191526>

Ag纳米线四聚体中的局域表面等离子体共振腔模态变化

Study on mode shifts of localized surface plasmon cavity in Ag nanowire tetramer

物理学报. 2021, 70(23): 235201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211230>

基于Au纳米岛修饰的CdSSe纳米带光电探测器

High-performance photodetectors based on Au nanoislands decorated CdSSe nanobelt

物理学报. 2023, 72(9): 098103 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222021>