

# 一种色彩可调的 Au-ZnO-Al 纳米结构的仿真模拟

檀 珺

(安徽文达信息工程学院, 安徽 合肥 230000)

**摘要** 纳米结构作为实现完美吸收的有效途径被广泛研究, 可用于彩色滤光片、热光伏等诸多领域。在这些纳米结构中, 通过金属-氧化物-金属结构实现的颜色称为结构色, 其是用来制备结构色的一种简便方法。在实际应用中, 该结构制备结构色具有稳定、色域广等优点。由于颜色是通过一些反射纳米结构实现的, 这些反射纳米结构来源于光与物质之间的相互作用, 因此结构颜色也可以通过调整结构参数来实现, 这将有助于实现连续的颜色变化。

**关键词** 结构色 完美吸收 MIM 结构

中图分类号: O43

文献标识码: A

文章编号: 1007-0745(2022)07-0016-03

## 1 前言

近年来, 三层金属-氧化物-金属(MIM)纳米结构被广泛用于实现对光波长的完美吸收, 通过改变结构参数实现对光波反射和吸收的有效控制, 甚至得到完美吸收的一定频率的光波<sup>[1-3]</sup>。所谓特定频率的完美吸收即在一定光波段处的反射率为零。因此, MIM结构可以用来制备结构色。与传统染料相比, 结构色由于其具有高分辨率、高信息存储密度、高集成度、不褪色等优点而备受关注。结构色的原理是由于某种微观结构的大小与光波长相匹配, 有序排列使光的反射、透射、散射而产生颜色。这种结构颜色是由周期性微观结构引起的。相较于化学色, 结构色有着稳定而不褪色的优点。在这些完美的光吸收结构中, 大部分结构呈有图案化的金属结构和没有图案化的薄膜结构, 如自然界中孔雀的羽毛, 蝴蝶的翅色等都属于天然的结构色, 这些天然的结构色的形成大多数是因为其本身的特殊性微观结构而引起的光学现象。

最近, 研究人员报告了用于沉积在铝表面上的单层硅薄膜的完美光吸收体和用于 Al-Si-Al 纳米结构的完美光捕获体<sup>[4-8]</sup>。在这里, 我们从 MIM 结构开始, 用 FDTD 解决方案模拟了三层纳米结构 Au-ZnO-Al 结构在可见光范围内的反射率。反射光谱用于计算结构表

面显示的颜色。反复模拟 Al-Si-Al 纳米结构的反射率, 并与 Au-ZnO-Al 结构的反射率进行比较。研究发现, Au-ZnO-Al 结构的反射光谱带通宽度较窄, 可应用于窄带带通滤波器的制造。Au-ZnO-Al 纳米结构非常简单, 易于制造, 对于滤光片和结构彩色显示的应用具有很大的优势。

## 2 理论模型



图 1 Au-ZnO-Al 结构示意图

本次研究的器件结构示意图如图 1 所示, 该结构为三层金属-氧化物-金属(MIM)纳米结构, 其中顶层金属层为金(Au)层, 中间氧化物层为低吸收系数的氧化锌(ZnO)层, 底层金属层为铝(Al)层, 它们依

★基金项目: 安徽省安徽文达信息工程学院校级自然科学基金项目, 项目名称: 亚波长结构色器件的应用研究(项目编号: XZR2021B12); 校级大学生创新创业训练计划创新训练项目, 项目名称: 一种色彩可调的多层结构的仿真模拟(项目编号: 202112810004x)。

次堆叠在玻璃(硅)基板上。底部铝层应足够厚,以防止入射光穿透整个结构。该结构主要通过调整 ZnO 层厚度来改变入射光作用在整个结构后的反射率光谱。用透射矩阵来计算结构的反射率。这里指定  $i=0, 1, 2, 3$  代表空气层、顶部金层、氧化锌层和铝层。 $\theta_i$  表示光在介质  $i$  中的入射角,  $n_i$  和  $k_i$  表示介质  $i$  折射率的实部和虚部,  $\phi_i$  表示光波在介质  $i$  中传播的相位延迟。 $d_1, d_2, d_3$  分别表示 Au、ZnO 和 Al 层的厚度。这里设置  $d_1=28\text{nm}$ ,  $d_3=200\text{nm}$  和  $d_2$  的值分别为 275nm、130nm、150nm 和 170nm。

反射率计算如下:

$$R=|r|^2=|\frac{M_{21}}{M_{11}}|^2 \quad (1)$$

$$M=\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}=D_0^{-1}(D_1P_1D_1^{-1})(D_2P_2D_2^{-1})D_3 \quad (2)$$

$$P_i=\begin{pmatrix} \exp(j\phi_i) & 0 \\ 0 & \exp(-j\phi_i) \end{pmatrix}, \phi_i=\frac{2\pi(n_i-jk_i)d_i}{\lambda} \quad (3)$$

对于 TE 偏振:

$$D_i=\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ (n_i-jk_i)\cos\theta_i & -(n_i-jk_i)\cos\theta_i \end{pmatrix} \quad (4)$$

对于 TM 偏振:

$$D_i=\begin{pmatrix} \cos\theta_i & \cos\theta_i \\ (n_i-jk_i)\cos\theta_i & -(n_i-jk_i)\cos\theta_i \end{pmatrix} \quad (5)$$

MIM 结构允许在 TE 和 TM 偏振状态下发生等离子共振,金属表面自由电子分布均匀。当光从光密电介质入射到光疏金属的界面时,金属层中的自由电子被诱导产生沿电场方向的不均匀密度分布,产生表面等离子体并在金属表面上传播。当光在介电层与金属层的界面处发生全反射时,折射光是一种平面波,沿界面方向传播,其幅度沿垂直于界面的方向呈指数衰减,这种电磁波称为倏逝波。当入射角或波长为合适值时,表面等离子体波和倏逝波的频率和波长相称,发生耦合。此时,一定波长的入射光被吸收,反射光的能量急剧下降。

### 3 仿真模拟和结果讨论

本文模拟采用的软件为 Lumerical 公司的 FDTD solutions 软件。通过该软件对理论模型建模,通过改变模型中的部分参数(中间介质层 ZnO 层的厚度)进行仿真模拟,将得到的反射率光谱数据计算得到形成的结构色,并通过 CIE1931 标准色度系统的理论知识分析形成不同颜色结构色的原因。

在建立模型的过程中,将 Au-ZnO-Al 纳米结构 X、

Y 方向设置无限大,Z 方向的厚度可以通过设置参数进行调节。硅基底的厚度需要设置得足够厚,用来防止入射光穿透硅基底。保持 Al 层的厚度为 200 nm,顶层 Au 的厚度为 28nm,调节 ZnO 的厚度分别为 275nm、130nm、150nm 和 170 nm 时分别对该结构进行仿真模拟,得到反射率光谱图,图 2 即为该纳米结构的光学反射率光谱图,y 轴对应反射率,x 轴对应光波长。红色、青色、绿色、橙色曲线分别对应 ZnO 层厚度为 275nm、130nm、150nm 和 170nm 结构的反射率光谱曲线。

观察图 2 可发现,红色、青色、绿色、橙色曲线的波谷位置光波长分别为 542nm、588nm、642nm 和 695 nm,且反射率近零,即说明该结构在 ZnO 的厚度为 275nm、130nm、150nm 和 170 nm 时反射率光谱中获得完美吸收的波长分别为 542nm、588nm、642nm 和 695 nm。

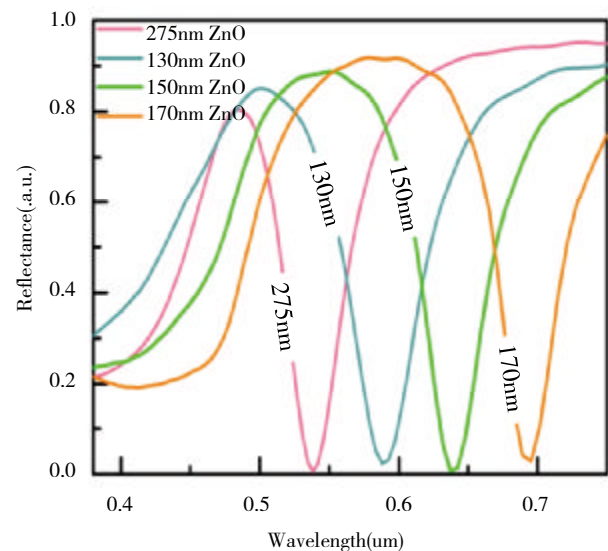


图 2 ZnO 层厚度分别为 275nm、130nm、150nm 和 170nm 的 MIM 结构的计算光学反射率光谱

不发光的物体本身没有颜色。物体受到各种波段光照射后,一部分光被物体吸收,另一部分被反射,每个物体吸收不同光的频率及光量各不相同。如果从色度学的角度来解释,物体所吸收的特定频率的光量决定了人眼观察到的物体的颜色<sup>[9]</sup>。由于纳米结构中 ZnO 层厚度的变化导致结构对整个可见光波段中特定频率的光进行不同程度的吸收和反射,从而改变光谱的组成。因此,人眼观察到结构表面的颜色随着结构参数的变化而变化。这里使用 FDTD 来模拟纳米结构的反射光谱,将获得的反射率光谱数据根据 CIE1931-

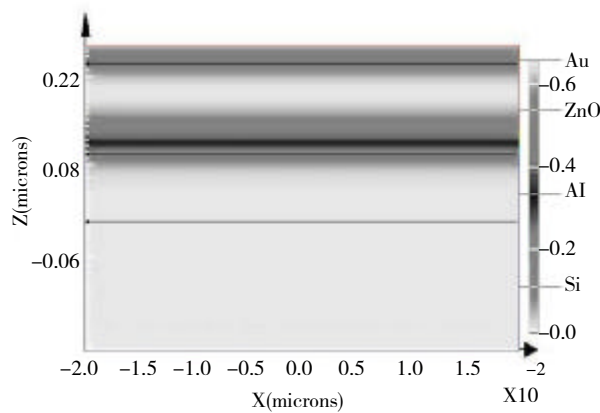


图3 ZnO的厚度为150nm的Au-ZnO-Al纳米结构的X-Z平面的电场分布图

XYZ系统计算得到其对应的颜色。结果显示对应四种反射光谱的结构表面颜色分别为深粉色、青色、绿色和黄色。

基于以前的研究人员已经发表了Al-Si-Al纳米结构的完美吸收体的近零反射率。重复Al-Si-Al纳米结构的模拟，并与我们提出的Au-ZnO-Al结构的反射光谱进行比较。

结果发现，由于室温下ZnO的带隙为3.37 eV，Si的带隙为1.11 eV，因此ZnO的吸收系数低于Si，Au-ZnO-Al纳米结构的反射光谱的禁带宽度比Al-Si-Al纳米结构的反射光谱的禁带宽度窄。因此，所提出的Au-ZnO-Al纳米结构可以更好地实现需要窄禁带宽度的应用。为了研究光能在纳米结构中的耗散位置，通过FDTD求解软件计算了纳米结构中ZnO的厚度为150nm时X-Z平面的电场分布，如图3所示。结果发现基底Si层和底部Al层的电场强度几乎为零，电场主要分布在顶部Au层和ZnO层上。

#### 4 结论

综上所述，由薄金膜和沉积在厚铝膜上的高折射率氧化锡膜组成的简单Au-ZnO-Al纳米结构可以实现可调谐完美吸收，在实现滤波器和制造中具有很好的应用。固定金和铝的厚度，改变氧化锌的厚度范围为130nm到275nm，得到粉红、青、绿、黄三种颜色。此外，通过对比Au-ZnO-Al和Al-Si-Al纳米结构具有完美吸收的反射光谱，结果发现Au-ZnO-Al结构的反射光谱的带通宽度非常窄，说明所提出的Au-ZnO-Al纳米结构可以更好地实现需要窄带通宽度的应用。最后对ZnO的厚度为150nm的Au-ZnO-Al纳米结构的电场分布进行了仿真模拟，发现电场主要分布在金层和氧化

锌层，而铝层几乎没有电场分布。此研究将有助于实现结构色和彩色滤光片。

#### 参考文献：

- [1] M. S. Sadreddin, T. S. Luk, and J. Guo. Zeroth order Fabry-Perot resonance enabled ultra-thin perfect light absorber using percolation aluminum and silicon Nano films[J]. *Optical Materials Express*, 2016, 06(04): 1032-1042.
- [2] S. S. Mirshafieyan and J. Guo. Silicon colors: Spectral selective perfect light absorption in single layer silicon films on aluminum surface and its thermal tenability[J]. *Opt. Express*, 2014, 22(25): 31545-31554.
- [3] 同 [2].
- [4] T. Sun, C. F. Guo, F. Cao, E. M. Akinoglu, Y. Wang, M. Giersig, Z. Ren, and K. Kempa. A broadband solar absorber with 12 nm thick ultrathin a-Si layer by using random metallic nanomeshes[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2014, 104(25): 251119-1-251119-4.
- [5] X. Shang, C. Yu, H. Ru and W. Peng. Structured Metal Film as a Perfect Absorber[J]. *Adv. Mater.*, 2013(29): 3993.
- [6] N. Liu, M. Mesch, T. Weiss, M. Hentschel, and H. Giessen. Infrared perfect absorber and its application as plasmonic sensor[J]. *Nano Lett.*, 2010(10): 2342-2348.
- [7] 王嘉星, 范庆斌, 张辉, 等. 表面等离子激元结构色研究进展 [J]. *光电工程*, 2017, 44(01): 23-33.
- [8] 王嘉星. 基于金属纳米结构的表面等离子激元结构色研究 [D]. 南京: 南京大学, 2018.
- [9] 汤顺青. 色度学 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1990: 1-69.