文章编号:1001-5078(2023)12-1885-07

· 红外材料与器件 ·

长波红外高透射率二维光子晶体设计及应用研究

王 朝¹,张 铁²,王 晗¹,安泽琳¹,王 超¹,王如志¹
 (1. 北京工业大学材料与制造学部,新能源材料与技术研究所,新型功能材料教育部重点实验室,北京 100124;
 2. 华北光电技术研究所,北京 100015)

摘 要:近年来,如何提高红外探测器的光子吸收率是目前红外探测的重点研究之一,增加入射 光的透射率是其中重要的一环。传统的多层减反膜受到粘附性,热失配和稳定性不足等问题在 应用上受到一定限制。光子晶体是一种直接在光学表面加工微结构实现增透效果,不存在上述 等问题,并且表现出较好的增透效果。但目前光子晶体设计结构复杂,对工艺加工带来困难。基 于此本文设计了几种简单的 ZnS 光子晶体几何结构,包括长方体、圆柱体、六棱柱体和金字塔结 构,在长波红外 8~10 µm 波段内每种光子晶体结构的最佳平均透射率均在 90 %以上,其中金字 塔的增透效果最好。设计了金字塔阵列结构,透射率仿真结果表明金字塔阵列间隙在一定范围 内均能保持 98 %以上的透射率。最后探究了不同基底材料碲镉汞厚度和温度对光子晶体透射 率的影响。本文研究可为光子晶体增透研究和微纳光学器件设计提供一定的借鉴意义。 关键词:红外探测;长波红外;光子晶体;增透设计

中图分类号:0436;TN213 文献标识码:A DOI:10.3969/j.issn.1001-5078.2023.12.010

Design and application of long wave infrared high transmittance two-dimensional photonic crystals

WANG Chao¹, ZHANG Yi², WANG Han¹, AN Ze-lin¹, WANG Chao¹, WANG Ru-zhi¹
(1. Key Laboratory of Advanced Functional Materials of Ministry of Education, Institute of New Energy Materials and Devices of Faculty of Materials and Manufacturing, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China;
2. North China Research Institute of Electro-Optics, Beijing 100015, China)

Abstract : In recent years , improving the photon absorption rate of infrared detectors is one of the key researches in infrared detection, among which increasing the transmittance of incident light is an important step. The application of traditional multilayer antireflective films is limited by adhesion, thermal mismatch and lack of stability. Photonic crystal is a kind of reflection improvement effect which can be achieved by machining microstructures directly on optical surface. It does not have such problems as above, and shows a good reflection improvement effect. However, the complex structure of the current photonic crystal design poses difficulties for process machining. Based on the above problems, several simple geometric structures of ZnS photonic crystal are designed in this paper, including cuboid, cylinder, hexagonal prism and pyramid structure. In the long wave infrared band of $8 \sim 10 \ \mu m$, the best average transmittance of each kind of photonic crystal structure is above 90 %, and pyramid has the best anti-reflection effect. The pyramid array structure is designed, and the transmission simulation results show that the pyramid array gap can maintain more than 98 % transmission in a certain range. Finally, the influence of the thickness and temperature of different substrate

基金项目:国家重点研发计划项目(No. 2021YFB3500403)资助。

作者简介:王 朝,男,博士研究生,主要从事光子晶体方面的研究。E-mail:wangchao@emails.bjut.edu.cn

通讯作者:王如志,男,博士,教授,主要从事新型半导体光电功能材料的设计、制备与器件应用研究。E-mail:wrz@bjut.

edu. cn

收稿日期:2023-03-23;修订日期:2023-05-09

materials on the transmission of photonic crystal is investigated. The research in this paper can provide some reference

for the research of photonic crystal anti-reflection and the design of micro and nano optical devices.

 $Keywords: {\it infrared detection; long wave infrared; photonic crystal; anti-reflection design}$

1 引 言

在红外探测方面,红外光的透过率对红外探 测器性能其决定性作用,如何提高红外探测器上 光子的吸收率是目前红外探测技术发展的一个重 点^[1-3]。传统上提高光学元件透射率的方式是在 光学元件表面上覆盖一层甚至多层减反膜来增加 光的透射率,从而达到抑制反射损耗提高光学元 件的透射率^[4-6]。但由于增透减反膜与涂层材料 存在物理化学性质的限制,存在粘附性、热失配和 稳定性不足等问题^[7],如何降低光学元件的反射 率提高光的透射率,具有非常重要的研究价值和 科学意义。

光子晶体是在光学表面直接加工微纳结构[8], 从而达到增透性能,该方式能够具有更好的稳定性 和耐久性,并且具有更多的可协调参数例如特征高 度、几何形状和阵列周期等,具有更优秀的灵活性, 并且能够在宽光谱大角度范围内实现增透,具有超 强亲水性和自清洁能力^[9,10]。经历了 30 多年的发 展光子晶体被认为是一种非常有效的增透结构,通 过刻蚀得到的周期性阵列结构可以实现在一定波段 的增透效果^[11,12]。光子晶体的设计来源期初来源于 仿生学,1962年,C.G. Bernhard 与 W.H. Mille 等人发 现一些昆虫的复眼结构具有增透性质[13],1973 年 W. H. Mille 团队成功制作出类似于蛾眼的类光子晶 体结构[14],发现该结构能有效的增强透射光,随后人 们对光子晶体微结构进行了不断拓展与深入研 究[15]。2017年,张东亮等人设计了陷光型光子晶体, 使得碲镉汞探测器量子效率提升了近 20 %^[16]。 2019年,李岩等人设计了双周期嵌套微结构在2.4~ 12 µm 的超宽波长范围内透射率均高于 96.5 %,在 中长波实用波段范围内平均透射率高于99%^[17]。 2021年,林晓敏等人设计了单层金属线栅结构,实现 了在中波红外3~5 µm 波段的透射率为89.1%,同 年杨勇等人设计了一种新型苞状蛾眼光子晶体结构, 实现了在 3~12 μm 波段的透射率高达 99.8 %^[18]。 可惜的是目前光子晶体结构复杂,制备难度高;一些 复杂的光子晶体设想来源于仿生学,对设计新型光 学晶体借鉴性低。

基于此,本文探究了以 ZnS 材料为研究对象的 几种常见几何结构,如长方体、圆柱、六棱柱和金字 塔在红外波段 8~10 μm 的透射率,并探究了其尺 寸变化对透射率的影响。设计了一种金字塔阵列结 构,金字塔单元与相邻金字塔单元间隙在一定范围 内,平均光透射率在 98 %以上,最后探究了不同 HgCdTe 厚度和不同温度环境下对 ZnS 光子晶体透 射率的影响。本文将为设计光子晶体和光学器件设 计提供一定的借鉴意义。

2 光子晶体增透率计算原理与模型构建

2.1 光子晶体增透率计算原理

本文光子晶体仿真使用了时域有限差分法 (FDTD)^[19],从麦克斯韦方程出发并借助吸收边界 条件,在有限的区域内模拟求解空间的电磁场问题。 从麦克斯韦方程组中两个旋度方程出发:

$$\nabla \times \overline{H} = \frac{\partial D}{\partial t} + \overline{J} \tag{1}$$

$$\nabla \times \overline{E} = -\frac{\partial B}{\partial t} - \overrightarrow{J_m}$$
(2)

当介质为各向同性时,用 σ_m 表示等效磁阻率,则:

$$\vec{J}_m = \sigma_m \vec{H} \tag{3}$$

此时,麦克斯韦旋度方程可以在直角坐标系中 展开为:

$$\begin{cases} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma E_y \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = \varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sigma E_z \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = -\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} - \sigma_m H_x \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} - \sigma_m H_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} - \sigma_m H_z \end{cases}$$
(5)

对式(4)和式(5)这两组方程进行差值离散,对 电磁场的各分量的空间节点和时间步按约定取值, 并采用平均值近似,即可求解所有电场和磁场分量 关于时间和空间的差分形式。

2.2 光子晶体仿真模型构建

在光学元件表面制备周期性光子晶体并对其进行数值计算,所建立的单元微结构尺寸相同,当一束平行光入射至光学元件表面时,各微结构所发生的光学效应完全一致,因此提出对单一微结构分析以反应出元件整体的性质。本文采用的光子晶体模型如图1所示(以正方体光子晶体结构为例),设定 *X*和 *Y*方向周期性(Periodic),将设计光子晶体阵列问题转化为仿真单个光子晶体元件。仿真区域的各种结构如图1中的标注所示,包括仿真区域、光源、光子晶体、基底材料和监视器。



图1 光子晶体仿真模型示意图 Fig.1 Schematic diagram of photonic crystal simulation model 仿真参数设定如表1所示,监视器在光子晶 体与基底材料界面向下 0.01 μm 处,用于测量光 子晶体透射率。其他参数在具体仿真部分再 讨论。

表1 仿真环境设定

Tab. 1	l Sim	ulation	environment	Settings
--------	-------	---------	-------------	----------

特定波长/µm	8 ~ 10
仿真温度/K	300
模拟时间/fs	1000
监视器频率点/个	200
入射光类型	平面波

本文对 ZnS 光子晶体进行模拟仿真,其介电常数 n = 2.35。探索了几种常见几何形状的光子晶体,设计了一种透射率的光子晶体阵列结构,最后探究了基底材料 HgCdTe 厚度和低温环境 77 K 对光子晶体增透效率的影响。探索的光子晶体结构参数如表 2 所示。

3 ZnS 光子晶体增透率仿真

本节中,探究了几种常见几何形状的 ZnS 光子 晶体在红外长波8~10 µm 波段对基底材料 HgCdTe 的增透作用,HgCdTe 衬底厚度为 10 µm。

表2 研究的光子晶体材料和结构尺寸

光子晶体材料	几何形状	固定尺寸类型	固定尺寸大小 /µm	周期 X 和 Y 方向范围 /μm	扫描尺寸扫描 类型	扫描尺寸扫描范围 /μm
ZnS	长方体	长和宽	4	4	青同	1 ~10
ZnS	圆柱	直径	4	4	声同	1 ~ 10
ZnS	六棱柱	底面边长	2	4	声同	1 ~ 10
ZnS	金字塔	底面边长	4	4	高	1 ~10
ZnS	金字塔阵列	底面边长	4	4~5	阵列间距	0 ~ 1

Tab. 2 Studied photonic crystal materials and structure size

3.1 ZnS长方体光子晶体透射率仿真

ZnS长方体长和宽为4μm,设置 X和 Y方向为 周期边界,周期为4μm,即对于长方体光子晶体增透 仿真等同于单层 ZnS 薄膜。ZnS 的仿真高度变化范 围为1~10μm,步长为1μm。ZnS 长方体高度的平 均透射率的仿真结果如图 2所示。ZnS 长方体光子 晶体厚度为1μm 时透射率最高,最高平均透射率为 92.8%。随着长方体厚度增加,透射率出现波动变 化,这是由于光在薄膜上发生干涉现象,随着薄膜厚 度增加,光在相干加强和相干削弱之间变化的结果。



(a) ZnS长方体光子晶体仿真示意图



3.2 ZnS 圆柱体光子晶体透射率仿真

ZnS 圆柱体直径为4 μm,周期范围4 μm,相比 与长方体结构每个圆柱单元之间有一定的间隙。 ZnS 圆柱体的仿真高度变化范围为1~10 μm,步长 为1 μm,ZnS 圆柱体仿真结构如图3(a)所示。圆柱 体的透射率仿真结果如图3(b)所示,其中ZnS 圆柱 体高度为1 μm 时平均透射率最高,最高平均透射 率为95.8%。相比与正方体结构,ZnS 圆柱体之间 的间隙结构可以产生一定的光陷阱效应,减少对光 的反射,增加透射率。

3.3 ZnS 六棱柱体光子晶体透射率仿真

ZnS 六棱柱体边长为 2 μm,周期范围 4 μm。 ZnS 六棱柱体仿真结构如图 4(a)所示,相比与直径 为 4 μm 圆柱体结构面积略小,每个六棱柱单元之 间间隙略大一些,六棱柱相对于圆柱体的俯视图如 图 4(a)右上角插图所示。ZnS 六棱柱体的仿真高 度变化范围为 1 ~10 μm,步长为 1μm。六棱柱体的 平均透射率仿真结果如图 4(b)所示,ZnS 六棱柱体 高度为 1 μm 时平均透射率最高,最高平均透射率 为 95.3%。与圆柱体相比,六棱柱体的透射率整体 略低一些。

3.4 ZnS 金字塔结构光子晶体透射率仿真

金字塔结构是最常见的光陷阱结构,该结构有 较好的增透性,在太阳能电池中有广泛应用。ZnS 金字塔底边边长为4 μm,周期范围4 μm。ZnS 金字 塔仿真结构如图 5(a)所示,ZnS 金字塔的仿真高度 变化范围为1~10 μm,步长为1 μm。ZnS 金字塔结 构的平均透射率仿真结果如图 5(b)所示,ZnS 金字 塔高度为3μm时平均透射率最高,最高平均透射 率为98.4%。与长方体、圆柱体和六棱柱体相比, 金字塔结构的最佳平均透射率高于其他光子晶体结 构。这是由于金字塔结构能多次反射入射光,减少 光逃逸出表面的几率。如果金字塔高度太低,反射 光不能反射到相邻的金字塔上;金字塔高度太高存 在光吸收和光干涉等问题。



图 3 仿真模型及光子晶体高度对平均透射率的影响 Fig. 3 Effect of simulation model and photonic crystal height





(a)ZnS六棱柱体光子晶体仿真示意图



图 4 仿真模型及光子晶体高度对平均透射率的影响 Fig. 4 Effect of simulation model and photonic crystal height on average transmittance



on average transmittance

3.5 ZnS 金字塔阵列结构光子晶体透射率仿真 通过探究发现 ZnS 金字塔光子晶体的透射率最 好。最后我们探究了 ZnS 金字塔阵列的增透效果。 在 ZnS 金字塔列阵中, ZnS 金字塔结构选取上述探 索中透射率最高的结构单元, 底边边长为4 μm, 高 为3 μm。周期范围从4 μm 逐渐增加到5 μm, 步长 为 0.1 µm。ZnS 金字塔阵列的仿真结构如图 6(a) 所示,图中的插图表示周期边界的变化情况。ZnS 金字塔阵列结构的平均透射率仿真结果如图 6(b) 所示,当金字塔之间的间隙为 0.1 µm 时,平均透射 率最大,最大平均透射率为 98.45 %。另外金字塔 阵列间隙在 0~0.5 µm 时,平均透射率均在 98 % 以上,表明在制备该结构阵列时可以适当调节金字 塔结构单元之间的间隙,实现工艺上制作方便。当 金字塔单元之间的间隙大于 0.5 µm 时,平均透射 率逐渐降低,这是由于金字塔之间距离增大导致对 二次反射光的捕获能力减弱。存在一定间隙的阵列 结构在微加工技术上更容易制作,该阵列设计为实 验上光子晶体增透设计提供了一定的借鉴作用。



(a) ZnS金字塔阵列仿真结构示意图 (插图表示仿真周期的变化)





Fig. 6 The model of photonic crystal array and the effect of array

spacing on the average transmittance

4 基底材料 HgCdTe 厚度和低温环境对光子晶体 增透效率的影响

本节探究了基底材料 HgCdTe 厚度和低温环境

0K 对光子晶体的增透效率的影响。

4.1 基底材料 HgCdTe 厚度对光子晶体透射率 仿真

由于衬底材料 HgCdTe 的上下表面都会反射 光,则 HgCdTe 厚度对光子晶体的增透效果存在一 定影响,探究该问题对 HgCdTe 材料实际应用有一 定促进作用。借助于3.5节ZnS金字塔形状的光子 晶体模型,金字塔高度为3 µm。HgCdTe 材料仿真 厚度变化范围为1~10µm,步长为1µm,如图7(a) 所示。ZnS金字塔形状的光子晶体的平均透射率的 仿真结果如图7(b)所示,随着 HgCdTe 材料厚度增 加,ZnS光子晶体的增透效果呈现曲折上升。当 HgCdTe 材料厚度大于6µm 时,ZnS金字塔形状的 光子晶体的平均透射率在90%以上。这是由于随 着 HgCdTe 材料厚度增加,则 HgCdTe 对光的吸收率 增加,导致 HgCdTe 对光的反射率减少。







温度影响材料的介电常数,从而影响微纳结构 中光子晶体的透射率。低温是 HgCdTe 材料常见的 工作温度,本文借助于第一性原理方法计算的 HgCdTe 在0K下的介电常数^[20],探究温度对光子 晶体的增透效果。借助于 3.5 节 ZnS 金字塔形状的 光子晶体模型,金字塔高度为 3 μm,常温 300 K 和 0 K时光子晶体的透过率如图 8 所示,两种温度下光 子晶体的透过率趋势一致;相比与 300 K,0K 温度 下光子晶体的透过率略低。在实际工作温度下,光 子晶体的增透效果可能位于两者这间。



5 结 论

本文探索了 ZnS 长方体、圆柱体、六棱柱体和金 字塔二维光子晶体结构在 8~10 μm 红外光的增透 效果,最后探索了金字塔阵列之间的间隙对透射率 的影响。结果表明,在X和Y平面周期条件约束 下,本文所研究的ZnS长方体、圆柱体和六棱柱高度 为1 µm 时,平均透射率最大。相比与长方体结构, 圆柱体和六棱柱体单元结构之间存在一定空隙,存 在一定的光陷阱效应,具有更高的透射率。ZnS 金 字塔高度为3 µm 时,平均透射率为98.4 %,基于 该结果进一步探索了金字塔阵列之间间隙距离对透 射率的影响。研究表明金字塔之间的间隙在0~ 0.5 µm 内平均透射率均在98 %以上。最后探究了 基底材料 HgCdTe 厚度和低温环境 0 K 对光子晶体 的增透效率的影响,研究发现,HgCdTe 材料厚度增 加时,ZnS 光子晶体增透效果曲折增加;相比与常温 300 K,0 K 温度下光子晶体的透射率下降 3 %。本 文的探索为设计光子晶体增透膜和工艺上制备提供 了一定的借鉴意义。

参考文献:

[1] Shi Peng, Fu Xiuhua, Sun Yan, et al. Design and fabrication of double wavelength laser protectiveInfrared antireflection coatings [J]. Chinese Journal of Lasers, 2011, 38 (4):188-192. (in Chinese) 石澎, 付秀华, 孙岩, 等. 双波段激光防护红外减反膜

的研制[J].中国激光,2011,38(4):188-192.

- [2] Rogalski A, Martyniuk P, Kopytko M. Challenges of smallpixel infrared detectors: a review [J]. Reports on Progress in Physics, 2016, 79(4):046501.
- [3] Sun Shufang, Huang Laiyu, Tian Zhen. The theory and research advancement of HgCdTe detectorsat high operating temperature[J]. Laser & Infrared, 2022, 52(5):636 640. (in Chinese)
 宋淑芳,黄来玉,田震.高工作温度碲镉汞红外探测器研究进展[J].激光与红外,2022,52(5):636-640.
- [4] Zhang Wentao, Zhu Baohua, Wang Jiejun. Simulation of transmission characteristics for multilayer film [J]. Photonica Sinica, 2014, 43(S1):215 - 218. (in Chinese) 张文涛,朱保华,汪杰君. 多层增透薄膜透射特性仿真 分析[J]. 光子学报,2014,43(S1):215 - 218.
- [5] Li Fang, Lin Yongchang, Liu Yuliang. Design and fabrication of new anti reflection coatings [J]. Optical Instruments, 2004, 26(2):115-117. (in Chinese)
 李芳,林永昌,刘育梁. 新型减反膜的设计与制备[J]. 光学仪器, 2004, 26(2):115-117.
- [6] Fu Xiuhua, Jiang Hongyan, Zhang Jing, et al. Fabrication and performance testing of large mode area Yb-doped photonic crystal fiber[J]. Laser & Infrared, 2017, 44(9):139
 -147. (in Chinese)

付秀华,姜洪妍,张静,等. 基于硫系玻璃的短中波红 外减反膜研制[J]. 中国激光,2017,44(9):139-147.

- [7] Ye X, Huang J, Geng F, et al. Broadband antireflection subwavelength structures on fused silica using lower temperatures normal atmosphere thermal dewetted Au nanopatterns[J]. IEEE Photonics Journal, 2016;8(1):1-10.
- [8] Brückner J B, Le Rouzo J, Escoubas L, et al. Flat-top and patterned-topped cone gratings for visible and mid-infrared antireflective properties [J]. Opt. Express, 2013, 21 (13):16043-16055.
- [9] Yuan J H, Sang X Z, Wu Q, et al. Efficient red-shifted dispersive wave in a photonic crystal fiber for widely tunable mid-infrared wavelength generation [J]. Laser Physics Letters. 2013;10(4):045405.
- [10] Li M, Lai X, Li C, et al. Recent advantages of colloidal photonic crystals and their applications for luminescence en-

hancement[J]. Materials Today Nano. 2019;6:100039.

- [11] Wang Z Y, Zhang R J, Wang S Y, et al. Broadband optical absorption by tunable Mie resonances in silicon nanocone arrays[J]. Scientific Reports, 2015, 5(1):7810.
- [12] 马季,吴向尧,刘晓静,等. 光子晶体缺陷层吸收特性的研究[J]. 中国激光,2014,41(3):150-154.
- [13] Bernhard C G, Miller W H. A corneal nipple pattern in insect compound eyes[J]. Acta Physiologica Scandinavica, 1962,56(3-4):385-386.
- [14] Clapham P B, Hutley M C. Reduction of lens reflexion by the "Moth Eye" principle[J]. Nature, 1973, 244(5414): 281 - 282.
- [15] Ai Taotao. Progress in the study of photonic crystals[J].
 Laser & Infrared, 2009, 39(12):1257 1262. (in Chinese)
 艾桃桃. 光子晶体的研究进展[J]. 激光与红外,2009, 39(12):1257 1262.
- [16] Lin Xiao, Ding Ziyu, Wang Weiping, et al. Investigation on the operation enhancement of HgCdTe photon-trapping detector[J]. Laser & Infrared, 2022, 47(12):1510 - 1515. (in Chinese)
 林霄,丁子瑜,王伟平,等. 光子晶体陷光型碲镉汞探 测器性能提升研究[J].激光与红外, 2022, 47(12): 1510 - 1515.
- [17] Tan G, Lee J-H, Lan Y-H, et al. Broadband antireflection film with moth-eye-like structure for flexible display applications [J]. Optica, 2017, 4(7):678-683.
- [18] Lan Jun, Chen Jinsong, Xiao Zhigang, et al. Simulation of broadband anti-reflective and bud-shaped moth-eye structure[J]. Photonica Sinica, 2021, 41(14):145 - 151. (in Chinese)
 兰俊,陈劲松,肖志刚,等. 一种宽波段减反的新型苞 状蛾眼结构模拟研究[J]. 光学学报, 2021, 41(14): 145 - 151.
- [19] Qiu J, Hong W, Wang DN, et al. Transmission properties of the single mode fiber with a cross-sectional micro-channel investigated using time-domain finite difference (FDTD) method [J]. Optical Fiber Technology, 2011, 17 (6):580-585.
- [20] Al-Rajoub S, Hamad B. Theoretical investigations of the structural, electronic and optical properties of Hg_{1-x}Cd_xTe alloys [J]. Philosophical Magazine, 2015, 95 (22): 2466 2481.