

纳米结构对蓝宝石红外增透性能的影响研究

赵耐丽

(桂林航天工业学院, 广西 桂林 541004)

摘要: 目的 解决现有的红外增透膜只能在特定波长及特定角度下有效的问题。方法 通过 FDTD 方法, 以蓝宝石为基础材料, 设计了纳米凸起结构、纳米孔洞结构及纳米光栅结构三类五种仿生增透纳米光栅结构, 实现在 0.7~5 μm 近红外及中红外波段增透。以表面微结构单元的高度、宽度和间距为优化对象, 通过调节微结构阵列的单元几何参数以及单元排布, 分析不同微结构的单元高度、宽度和间距对蓝宝石透过率的影响规律。结果 仿真结果表明, 在其他几何参数固定的情况下, 三类结构的光透过性都随着单元高度的增加而增强, 且逐渐趋于稳定。在单元高度处于最佳状态时, 三类结构的光透过性都在底部宽度接近或稍微超过单元间距时达到最佳, 超过这个范围, 透过特性随单元宽度尺寸的增加而降低。故制造过程中应注意各单元结构的间隔, 以达到良好的增透效果。结论 通过横向对比三类五种结构, 在对等参数条件下, 纳米光栅结构具备最优秀的增透特性。

关键词: 蓝宝石; 红外; 增透; 表面微结构; 纳米结构; 仿生

中图分类号: TG115.23 文献标识码: A 文章编号: 1001-3660(2016)09-0194-07

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2016.09.029

Influence of Nanostructure on the Antireflective Performance of Sapphire

ZHAO Nai-li

(Guilin University of Aerospace Technology, Guilin 541004, China)

ABSTRACT: **Objective** In order to solve the problem that infrared anti-reflection film is valid only on a certain wave length or angle. **Methods** Three kinds of structures, containing nanometer raised structure, nanometer pore structure and nanometer grating structures, were designed based on sapphire material by FDTD method to realize transmission enhancement in 0.7~5 μm near-infrared and mid-infrared region. To optimize the height, width and spacing of the surface microstructure unit, their influence on transmission was analyzed through adjusting geometric parameter and unit configuration. **Results** Simulation results showed that with the other geometric parameters fixed, all of the three kinds exhibited enhanced light transmission phenomenon with an increase in cell height and gradually trended to be stable as the height increases. With cell height in its best condition, the best transmission characteristics were obtained when the three structures were close to or slightly above the bottom of the cell gap width. Beyond this range, the transmission characteristic decreased with increasing cell width. Therefore, in order to achieve a good antireflection effect, attention should be paid to the structure of each unit interval during the manufacturing process. **Conclusion** By virtue of comparison among the three kinds of five nano-structures, it is indicated that nano-grating

收稿日期: 2016-03-19; 修订日期: 2016-04-25

Received: 2016-03-19; Revised: 2016-04-25

基金项目: 广西壮族自治区教育厅高校科研项目 (YB2014438)

Fund: Supported by the University Scientific Research Project of the Education Department of Guangxi Province (YB2014438)

作者简介: 赵耐丽 (1980—), 女, 硕士, 讲师, 主要研究方向为表面形貌设计与分析。

Biography: ZHAO Nai-li(1980—), Female, Master, Lecturer, Research focus: surface morphology design and analysis.

structures own the best transmission enhancement quality under equal parameter conditions.

KEY WORDS: sapphire; infrared; transmission enhancement; surface micro-texture; nanometer structure; bionic

红外技术始于世界大战,刚开始仅应用于军事领域,后来渐渐进入民用领域^[1]。在常用红外光学材料中,氧化物单晶材料,尤其是蓝宝石材料,具有许多优秀的特性,红外波段透过率高,高温下温度稳定性好,机械强度高,材质坚硬,被广泛应用于国防、科研等领域^[1]。在工业生产中,普遍使用四分之波长厚的透明薄膜作为增透膜。薄膜增透的原理是通过干涉相消,减少反射光,增强透射,因此只能在特定波长及特定角度下减小反射率。另外,这种增透镀膜也面临许多其他问题:衬底材料的粘合问题,热匹配性差,有限的增透带宽,角度一旦改变减反效果相对变差^[2]。

亚波长增透结构的出现为解决镀膜的缺陷提供了契机,亚波长增透结构是指刻蚀在衬底表面的微观结构,其特征尺寸小于入射波长,只有零级衍射的透射波和反射波。徐启元等^[3]利用等效介质理论、薄膜理论研究了二维亚波长结构的增透设计,发现采用蓝宝石双面设计二维亚波长结构后,在 3~5 μm 波段的平均透过率可达 99.25%。Ji 等^[4]对比了纳米柱、子弹状纳米结构、纳米圆台、抛物线状纳米结构和纳米锥结构的减反效果,研究发现,结构高度的变化对纳米柱的反射率影响最大,对纳米锥结构的影响较小,并且结构顶部越尖,可获得更优的减反性能。Liu^[5]和 Hattori^[6]研究发现纳米球由于受到单层减反膜的限制,不具有宽波谱减反性能,而 Huang 等^[7]提出的一种深宽比为 80 的纳米线减反结构,可在超宽波段以及广视角下获得优秀的减反特性,但其极深的结构制造困难,耗时太多。在 20 世纪 60 年代,Bernhard 发现蛾的眼睛是由一层六角形排列有序的纳米阵列构成^[8],并且具备优秀的减反效果,同时没有薄膜增透膜的缺陷。通常情况下,材料表面的反射效应主要是不同介质界面处折射率不连续导致的,而蛾眼结构在空气和衬底间提供了近乎完美的阻抗匹配,具有优异的抗反射性能,包括宽的工作波长带宽^[10]、全方向性^[11]和偏振不敏感性^[12-13]等,因而越来越多的研究者开始着手研究这类增透结构。Southwell^[14]从数学模型上找到了不同基底上最佳的蛾眼结构形貌,这种蛾眼结构相当于由多层不同折射率的减反膜叠加而成,可在一个

400~700 nm 范围内获得较低的反射率,但是根据现有的制备工艺,该结构很难实现。目前,对三维蛾眼仿生结构阵列的增透机理仍处于一个探索阶段,不能很好地为制造生产提供指导。因此,本文旨在通过仿真计算典型蛾眼仿生微结构,探究与生产制造有关的参数对蓝宝石透过率的影响规律,以期给制造高透过率蓝宝石材料提供优化建议。

1 分析光学透过性影响因素的理论基础

对于大多数光学器件来说,反射造成能量损耗主要有两种情况:1)在不同介质交界面上,由于折射率的不连续性,造成了菲涅尔反射,损失一部分能量;2)由于光线在薄板与空气的介质分界面上来回反射,降低了光密度,降低了透过率。在薄膜光学中,由于光线会在薄膜间存在多次反射现象,反射率和透射率均根据光多次干涉后的结果确定。

1.1 Swanepoel 薄膜光学的计算方法

针对计算透过率中遇到的各种问题,Swanepoel 开发了一种可靠简单的计算方法^[15]。对于一个平整薄膜,当它的厚度为 d ,折射率为 n ,吸收系数为 a ,同时覆盖在折射率为 s 的衬底上时,透射率方程 $T=(\lambda, s, n, d, a)$ 。

假定折射率虚部 $k=0$ 时,可以得到简化公式:

$$T(\lambda) = \frac{Ax}{B - Cx \cos \phi + Dx^2} \quad (1)$$

式中: $A=16n^2s$; $B=(n+1)^3(n+s^2)^2$; $C=2(n^2-1)(n^2-s^2)$; $D=(n-1)^3(n-s^2)$; $\phi=4\pi nd/\lambda$; $x=\exp(-ad)$ 。此外,折射率 n 是波长 λ 的函数。

在仅有衬底无干涉的情况下,透过率可以通过一个著名的公式计算:

$$T_s = \frac{(1-R)^2}{1+R^2} \quad (2)$$

式中: R 为菲涅尔反射, $R = \left[\frac{s-1}{s+1} \right]^2$, s 代表衬底折射率。将 R 代入 (2) 式得:

$$T_s = \frac{2s}{1+s^2} \quad (3)$$

干涉条纹的基础方程为 $2nd = m\lambda$ 。

干涉条纹中的极限波峰为：

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (4)$$

干涉条纹中的极限波谷为：

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (5)$$

T_M 与 T_m 是关于波长的连续方程。

基于 Swanepoel 的理论，可以用 $T_M(\lambda)$ 和 $T_m(\lambda)$ 曲线包络上下抖动的 $T(\lambda)$ 曲线。把波段根据材料透光特性分成三个区域：1) 无吸收波段（透明区域）；2) 微弱吸收半透明波段；3) 强吸收波段。

对于一个透明区域有 $a=0, x=1$ ，代入式(4)可得：

$$T_M = \frac{2s}{1+s^2} \quad (6)$$

式(6)与式(3)符合，而 T_s 表示无光吸收情况下的透过率。

同理可以由式(5)可得：

$$T_m = \frac{4n^2 s}{n^4 + n^2(s^2 + 1) + s^2} \quad (7)$$

当 $n > s$ 时， $T_M > T_m$ ；当 $n < s$ ， $T_M < T_m$ 。由于在 $T_M < T_m$ 区域内有 $T_M = T_s$ ，因此，当给衬底材料镀折射率低于衬底材料的膜时，可以增强透过率。

1.2 无干涉情况下透过率 T_a 的计算方法

通过对式(1)积分，可以得到无干涉情况下的透过率 T_a ：

$$T_a = \int_0^\pi \frac{Ax}{B - Cx \cos \phi + Dx^2} d\phi \quad (8)$$

假定一个小积分区域内所有参数均为固定常数，可得：

$$T_a = \frac{Ax}{(B - Cx + Dx^2)(B + Cx + Dx^2)^{1/2}} \quad (9)$$

通过将式(4)乘以式(5)再开方，可得 T_a ：

$$T_a = \sqrt{T_M \cdot T_m} \quad (10)$$

由此可得 T_a 等于 T_M 与 T_m 的几何平均值。

实际情况中，由于蓝宝石表面有一定的粗糙度，不存在完美平行界面，很难观测到以上的干涉

引起的透过率波动（也称法布里-珀罗效应），此处可以利用公式(10)计算无干涉情况下透过率曲线来计算实际情况下的透过率。由此可计算 1 μm 厚蓝宝石材料透过率特性图，如图 1 所示。图中红线代表实际透过率， T_m 为透过率波谷拟合曲线； T_M 为透过率波峰拟合曲线； T_a 为无干涉情况下透过率拟合曲线。

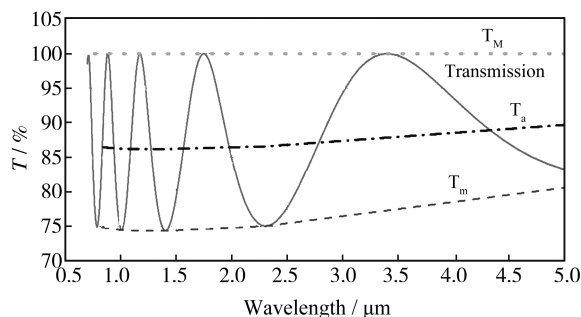


图 1 蓝宝石材料透过率特性

Fig.1 Transmittance characteristics of sapphire

2 基于 FDTD 方法的蓝宝石表面微结构透过特性分析

采用 Lumerical 公司旗下的 FDTD solutions 软件，通过时域有限差分法分析各种不同表面微结构的光学透过特性。在波段为 0.7 ~ 5 μm 的范围内对蓝宝石进行模型仿真^[1]，主要设计了三类模型：纳米凸起结构、纳米孔洞结构及纳米光栅结构（如图 2a 所示），凸起结构中包括锥形凸起结构（如图 2b 所示）以及蛾眼凸起结构（如图 2c 所示），对应孔洞结构包括锥形孔洞结构以及蛾眼孔洞结构（如图 2d 所示）和分析单元几何参数和单元周期对透过性的影响。

为了分析表面微结构对蓝宝石红外透过性能的影响，针对凸起结构和孔洞结构分别定义以下三个表征参数：间距、高度和宽度，如图 3 和图 4 所示。首先固定间距与微结构宽度，建立多个具有不同高度的模型，通过仿真分析确定最优微结构高度，在此基础上，以微结构的宽度为变量，分析微结构宽度对红外透过率的影响，以确定最优的微结构宽度。最后，以微结构单元之间的间距为变量，确定最优的微结构间距。5 种不同表面微结构在不同参数下对透过率的影响结果如图 5—19 所示。

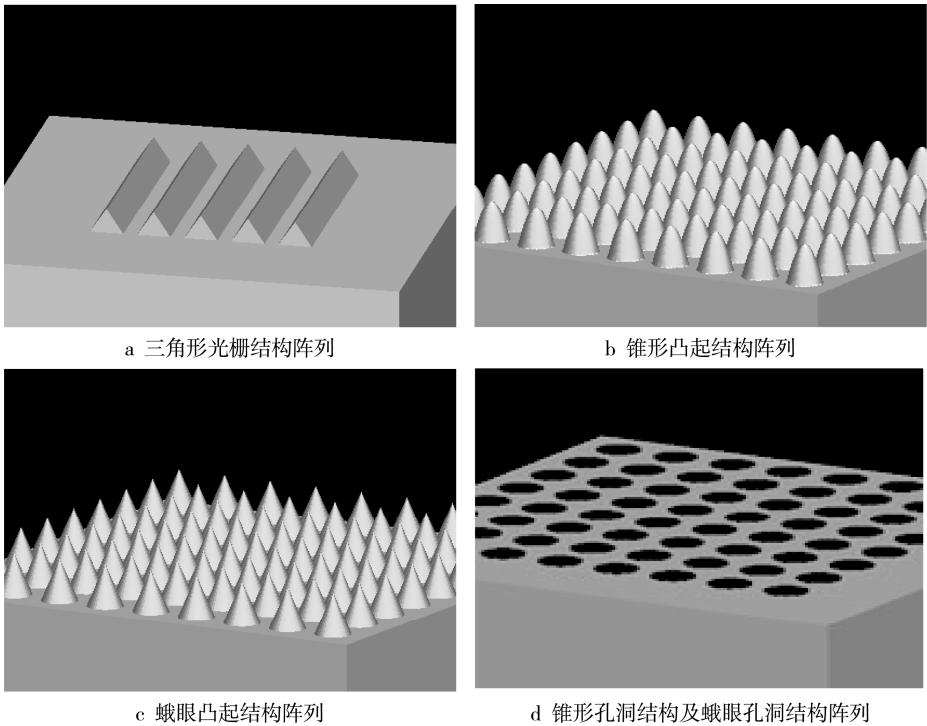


图 2 纳米表面微结构

Fig.2 Surface morphology of nanostructures: a) triangle grating array structure, b) cone convex array structure, c) moth eye bump array structure, d) tapered hole and moth eye hole array structure

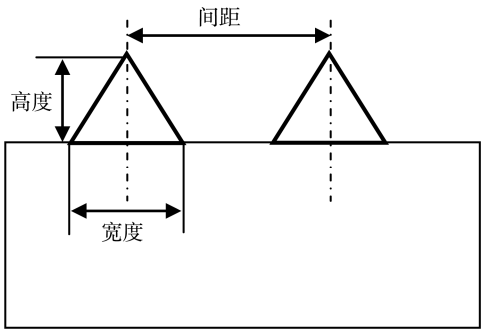


图 3 凸起结构表征参数
Fig.3 Parameters of bump structure

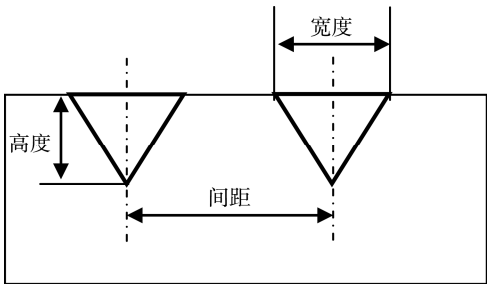


图 4 孔洞结构表征参数
Fig.4 Parameters of hole structure

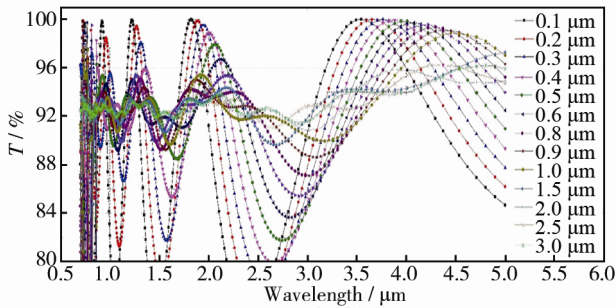


图 5 不同高度光栅结构的透过特性
Fig.5 The influence of height of grating structure on transmittance characteristics

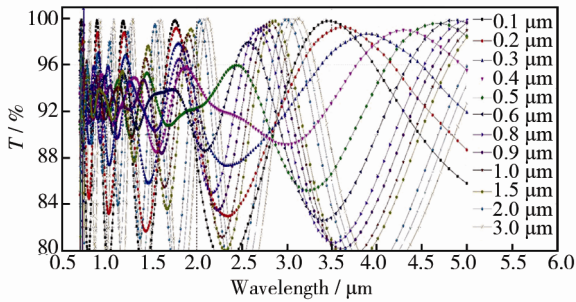


图 6 不同宽度光栅结构的透过特性
Fig.6 The influence of width of grating structure transmittance characteristic

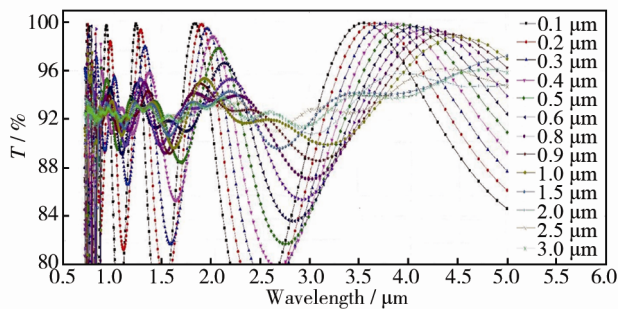


图7 不同单元间距光栅结构的透过特性

Fig.7 The influence of space of grating structure transmittance characteristic

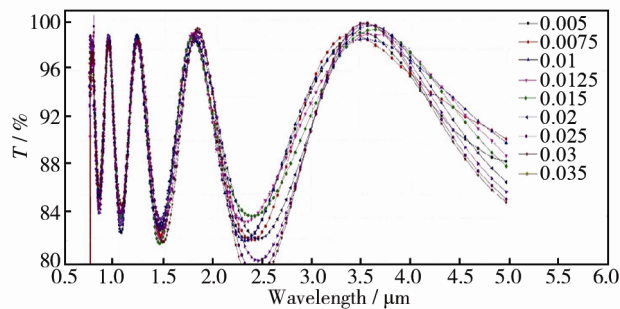


图11 不同曲率半径蛾眼凸起结构的透过特性

Fig.11 The influence of radius of moth eye bump structure transmittance characteristic

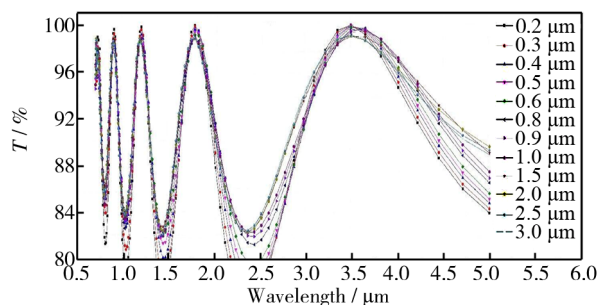


图8 不同高度锥形凸起结构的透过特性

Fig.8 The influence of height of cone convex structure on transmittance characteristics

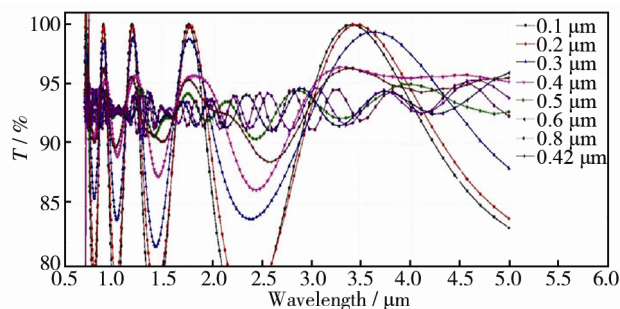


图12 不同宽度蛾眼凸起结构的透过特性

Fig.12 The influence of width of moth eye bump structure transmittance characteristic

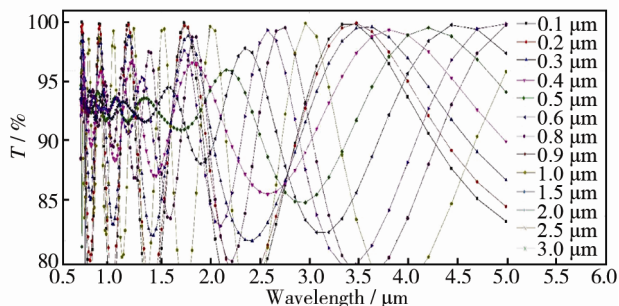


图9 不同宽度锥形凸起结构的透过特性

Fig.9 The influence of width of cone convex structure transmittance characteristic

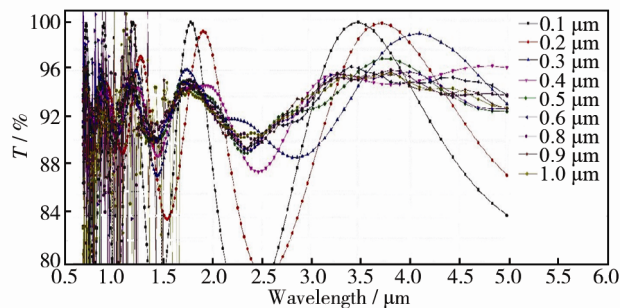


图13 不同单元间距蛾眼凸起结构的透过特性

Fig.13 The influence of space of moth eye bump structure transmittance characteristic

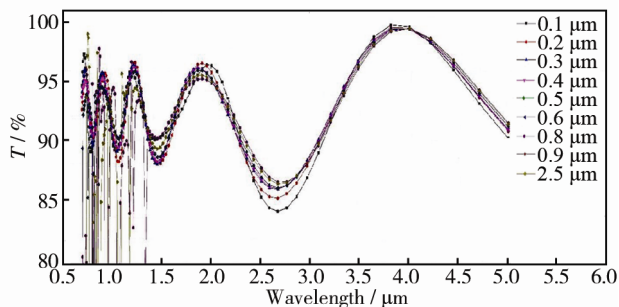


图10 不同单元间距锥形凸起结构的透过特性

Fig.10 The influence of space of cone convex structure transmittance characteristic

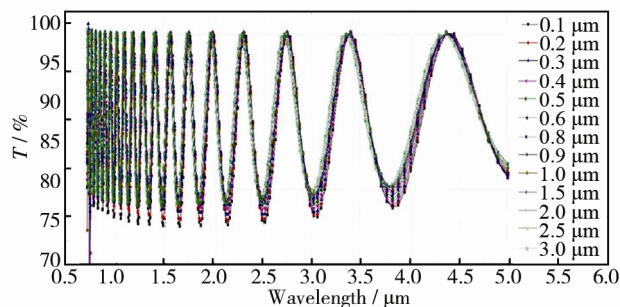


图14 不同高度锥形孔洞结构的透过特性

Fig.14 The influence of height of tapered hole structure on transmittance characteristics

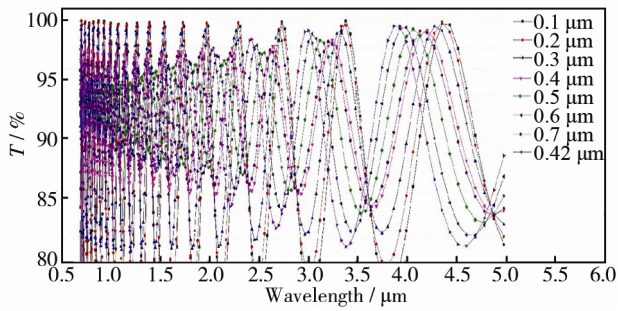


图 15 不同宽度锥形孔洞结构的透过特性

Fig.15 The influence of width of tapered hole structure transmittance characteristic

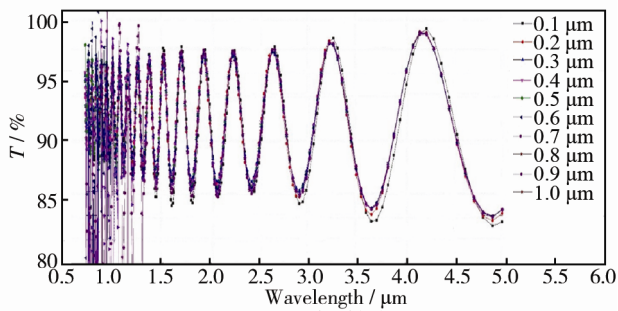


图 16 不同单元间距锥形孔洞结构的透过特性

Fig.16 The influence of space of tapered hole structure transmittance characteristic

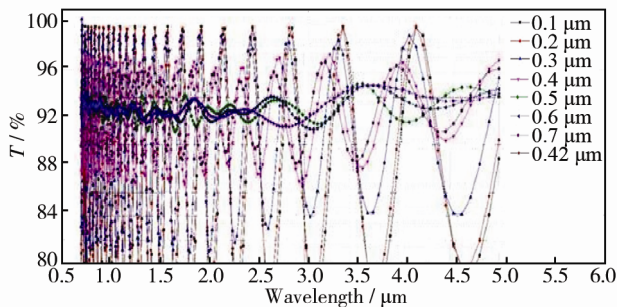


图 17 不同曲率半径蛾眼孔洞结构的透过特性

Fig.17 The influence of radius of moth eye hole structure transmittance characteristic

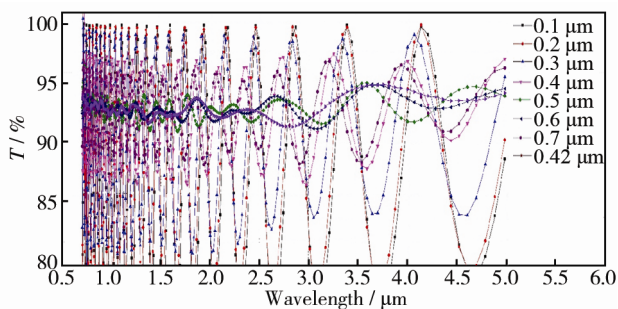


图 18 不同宽度蛾眼孔洞结构的透过特性

Fig.18 The influence of width of moth eye hole structure transmittance characteristic

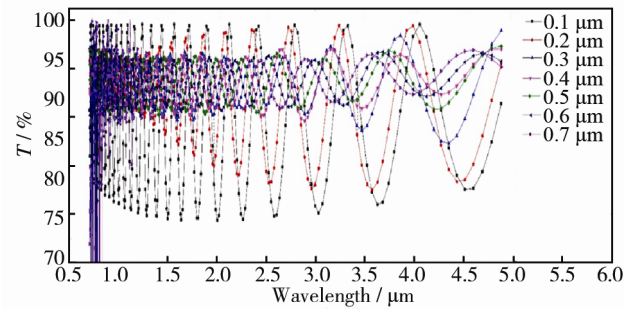


图 19 不同单元周期蛾眼孔洞结构的透过特性

Fig.19 The influence of period of moth eye hole structure transmittance characteristic

由仿真结果可得：

1) 固定其他几何参数，调整单元高度（孔洞为深度，蛾眼为曲率），可得：随着结构高度的增加，凸起结构和孔洞结构及光栅结构都表现出光透过特性增强的现象，但多趋于饱和，随着高度的增加，渐渐趋于稳定。其中，凸起结构和光栅结构均在高度接近 $0.9 \mu\text{m}$ ，蛾眼结构在曲率为 $0.015 \mu\text{m}$ 时，接近饱和，不再显著变化。故制造过程中，不必刻蚀过深即可达到一个良好的效果。

2) 三类五种结构均在底部宽度接近或稍微超过单元间距时，透过率达到最佳，超过该范围，透过率随单元尺寸的增加而降低。故制造过程中应注意各单元结构间隔，以达到良好的增透效果。

3) 通过对单元间距的仿真结果观察可得，总体上所有单元间距的增大，蓝宝石增透效果加强，但当周期尺寸接近 $0.9 \mu\text{m}$ 时，达到接近饱和的状态，透过特性不再随单元尺寸的增加而显著增强。但对于纳米锥孔阵列，透过特性随着深度的增加不明显。

通过调节参数，尽量设计结构对等的五类模型，同时建立平板模型作为参照，横向对比不同结构特点。仿真计算结果如图 20 所示。

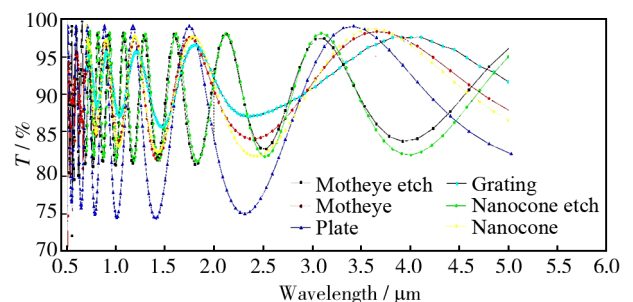


图 20 三类五种结构透过率对比

Fig.20 Comparing the transmittance of five structure

对于单元几何尺寸和单元周期相同的三类五种结构, 增透效果由强到弱依次为: 光栅结构、蛾眼凸起结构、蛾眼孔洞结构、锥形凸起结构、锥形孔洞结构。

3 总结

为了提高蓝宝石的红外增透性能, 设计了三种不同的表面微结构, 通过仿真分析对各种表面微结构的参数进行了优化, 发现在相同的表征参数下, 纳米光栅结构的增透效果最佳。

参考文献

- [1] 张志坚. 红外光学材料的现状与发展[J]. 云南冶金, 2000, 29(5): 35—38.
ZHANG Zhi-jian. Status Quo and Development of Infra-red Optical Materials[J]. Yunnan Metallurgy, 2000, 29(5): 35—38.
- [2] 冯丽萍, 刘正堂, 李阳平, 等. 蓝宝石衬底上增透膜的设计与制备[J]. 功能材料, 2004, 35(4): 498—500.
FENG Li-ping, LIU Zheng-tang, LI Yang-ping, et al. Design and Preparation of Antireflective Films for Sapphire[J]. Journal of Functional Materials, 2004, 35(4): 498—500.
- [3] 徐启远, 刘正堂, 李阳平, 等. 蓝宝石衬底上二维亚波长增透结构的设计分析[J]. 微细加工技术, 2007(6): 18—20.
XU Qi-yuan, LIU Zheng-tang, LI Yang-ping, et al. Design and Analysis of Two-dimensional Antireflective Sub-wavelength Structured Surface on Sapphire[J]. Microfabrication Technology, 2007(6): 18—20.
- [4] JI S, PARK J, LIM H. Improved Antireflection Properties of Moth Eye Mimicking Nanopillars on Transparent Glass: Flat Antireflection and Color Tuning[J]. Nanoscale, 2012, 4(15): 4603—4610.
- [5] LIU B T, YEH W D. Antireflective Surface Fabricated from Colloidal Silica Nanoparticles[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2010, 356: 145—149.
- [6] HATTORI H. Anti-reflection Surface with Particle Coating Deposited by Electrostatic Attraction[J]. Advanced Materials, 2001, 13: 51—54.
- [7] HUANG Y F, CHATTOPADHYAY S, JEN Y J, et al. Improved Broadband and Quasi-omnidirectional Anti-reflection Properties with Biomimetic Silicon Nanostructures[J]. Nature Nanotechnology, 2007, 2: 770—774.
- [8] BERNHARD C G, MILLER W H. A Corneal Nipple Pattern in Insect Compound Eyes[J]. ACTA Physiologica Scandinavica, 1962(56): 385—368.
- [9] SUN C H, JIANG P, JIANG B. Broadband Moth-eye Antireflection Coatings on Silicon[J]. Applied Physics Letters, 2008, 92(6): 061112-061112-3.
- [10] LIN Y R, LAI K Y, WANG H P, et al. Sol-gel-tunable Si Nanorod Arrays with Enhanced Antireflection and Self-cleaning Properties[J]. Nanoscale, 2010, 2(12): 2765.
- [11] WANG W T, LU N, HAO J Y, et al. Self-assembled Monolayer Islands Masked Chemical Etching for Broad-band Antireflective Silicon Surfaces[J]. The Journal of Physical Chemistry, 2010(114): 1989—1995.
- [12] LIN Yu-sheng, HU Wen-ching, HUANG Kuo-cheng, et al. Wafer-level Fabrication and Optical Characterization of Nanoscale Patterned Sapphire Substrates[J]. Applied Surface Science, 2011, 258: 2—6.
- [13] YANAGISHITA T, NISHIO K, MASUDA H. Anti-reflection Structures on Lenses by Nanoimprinting Using Ordered Anodic Porous Alumina[J]. Applied Physics Express, 2009, 2(2): 022001-022001-3.
- [14] Southwell W H. Pyramid-array Surface-relief Structures Producing Antireflection Index Matching on Optical Surfaces[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1991, 8(3): 549—553.
- [15] SWANEPOEL R. Determination of the Thickness and Optical Constants of Amorphous Silicon[J]. Journal of Physics E Scientific Instruments, 1983, 16(12): 1214—1222.