ZnSe 衬底表面亚波长增透结构的设计及误差分析

尚 鹏^{1,2} 能胜明¹

(¹中国科学院光电技术研究所,四川成都 610209;²中国科学院大学,北京 100049)

摘要 以矢量严格耦合波(RCWA)理论为基础,通过遗传算法优化设计了圆柱形 ZnSe 亚波长微增透结构,获得了 具有较好增透效果的结构参数;重点讨论分析了实际加工过程中圆柱形方向偏差及整体面形轮廓偏差对抗反射特 性的影响;还对多台阶 ZeSe 增透性能随高度的变化进行了分析。结果表明:当圆柱形微结构周期为 3.3 μm,高度 为 1.7517 μm,占空比为 0.7566 时,在 8~14 μm 波段范围具有较好的整体增透效果;占空比偏差,高度偏差及圆柱 体面形轮廓偏差对结构的平均透射性能都具有较大的影响;圆锥形 ZnSe 微结构的透射性能随着高度和划分层数 的增加呈现一定的规律分布,且相比圆柱形最优微结构,平均透射性能有了较大幅度的提高。

关键词 衍射;增透结构;耦合波理论;ZnSe;亚波长

中图分类号 TN201 文献标识码 A doi: 10.3788/CJL201441.0116004

Design and Error Analysis of Sub-Wavelength Antireflective Micro-Structure on Surface of ZnSe Substrate

Shang Peng^{1,2} Xiong Shengming¹

¹Institute of Optics and Electronics, Chinese Academy of Sciences, Chengdu, Sichuan 610209, China ²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract Based on the rigorous couple-wave analysis (RCWA) method, columned ZnSe sub-wavelength microstructure by genetic algorithm (GA) is optimized and optimum structure parameters are obtained. The effect of structure parameter error and profile shape error of columned ZnSe structure on the anti-reflective properties in actual manufacturing process is discussed. The transmittance of the multilevel ZnSe gratings with coned profile is also presented as a function of the structure height. The results show that the columned ZnSe micro-structure can have excellent average anti-reflective properties between 8 μ m and 14 μ m at normal incidence when the structure period, height and filling factor are 3.3 μ m, 1.7517 μ m and 0.7566, respectively. The errors of filling factor, height and profile shape have a big influence on the average transmittance. The transmittance of the ZnSe micro-structure with coned profile shows some regular distribution with the increase of structure height and the number of divided layers, and it has a great improvement as compared with the optimized columned ZnSe micro-structure.

Key words diffraction; antireflection; coupled-wave theory; ZnSe; sub-wavelength

OCIS codes 050.6624; 050.1960; 220.4000; 310.1210

1 引

ZnSe 是目前广泛用于 8~14 μm 波段的红外窗 口材料,为尽可能提高其透射率,传统的方法是在材 料表面沉积增透薄膜,但其环境耐久性较差。近年 来,随着微光学技术的飞速发展,线宽小于微米量级 的亚波长光栅结构引起了人们的广泛关注。这种微 结构通过激光直写、离子束刻蚀等方式加工而成,其 环境适应性完全取决于衬底材料本身,可以有效克 服薄膜材料粘附性差、热膨胀不匹配、可选取的光学 材料有限等问题^[1-3]。但由于亚波长结构的特征尺 寸与入射波长可比拟,等效介质理论、标量衍射理论 等不再适用,必须使用矢量衍射理论。目前,常用的 矢量衍射理论主要有:积分法^[4]和微分法^[5-6],其 中,积分法主要包括有限元法和边界元法,比较适合 分析具有连续轮廓的微结构;而微分法主要包括耦 合波法和模态法,其对具有离散级的轮廓进行分析

言

收稿日期: 2013-05-24; 收到修改稿日期: 2013-08-12

作者简介:尚 鹏(1986—),男,博士研究生,主要从事红外光学性能的设计及分析等方面的研究。

E-mail: shangpeng163@163.com

导师简介: 熊胜明(1964—), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事光学薄膜技术方面的研究。E-mail: xsm@ioe. ac. cn

时更具有优势。其中,严格耦合波法(RCWA)最早 由 Moharam 和 Gaylord 提出,由于其物理概念直 观、通用性强等特点而被广泛采用,后来为解决计算 过程中产生的数值不稳定性,提高计算效率,又提出 了增透矩阵算法^[7-10]。

国外在亚波长结构设计方面已做了大量的理论 工作^[4-13],相关研究工作也迅速展开^[14-17];近年来, 国内对三维微增透结构的设计思路及相关特性分析 也进行了较为详细的研究分析^[1,18-25]。但考虑到实 际加工精度的影响,实际加工出的微结构与设计的 微结构会存在一定的差异,这种偏差(误差)对于结 构整体的抗反射性能会产生一定的影响。Pommet 等^[16]曾研究了一维大周期结构衍射光栅加工误差 对衍射效率的影响;曹召良等^[22]研究了方形柱体光 栅的制作误差影响;孙艳军等^[24]利用等效介质理论 研究分析了蓝宝石基底上方形柱体光栅加工误差对 光学性能的影响;而实际面形误差主要表现为槽宽减 小,侧壁倾斜,有倒角出现等。为了描述这种综合效 应,采用高斯轮廓模型,通过调整面形轮廓指数,比较 分析了综合面形误差对整体抗反射特性的影响。

可实现 8~14 μm 波段范围增透的面形轮廓有 多种,如矩形光栅、三角形光栅、正弦面形光栅和半 圆顶半圆底面形光栅等,且不同面形轮廓的抗反射 特性存在一定的差异。而三维圆形柱状光栅作为一 种常用的微增透结构,有着广泛的用途,因此以圆形 柱状光栅为基本模型。本文在 Matlab 环境下,编写 了二维矢量严格耦合波程序,通过遗传算法优化设 计了 ZnSe 窗口材料在 8~14 μm 波段范围相关结 构参数;以最佳结构参数为基础,重点讨论分析圆形 柱状光栅结构方向误差(周期偏差、高度偏差、占空 比偏差)以及实际加工中由于二次效应所引起的综 合面形偏差对抗反射特性的影响。此外,还对锥形 ZnSe 结构抗反射特性随高度的变化进行了分析,该 研究内容可为微纳结构的设计和制造提供一定的理 论指导。

2 优化设计与结果分析

为简便起见,建立的圆柱体及圆锥体理论模型 如图 1,2 所示。

矢量严格耦合波分析法的求解过程大体分为三步:1)由麦克斯韦方程组导出入射及出射介质中电 磁场解的表达式;2)对光栅层的介电常数进行傅里 叶级数展开,推导出耦合波方程组;3)根据电磁场 边界条件,求解微分方程组,计算各个衍射级次的振





图 2 多台阶逼近锥形微结构示意图

Fig. 2 Diagram of multi-step micro-structure 幅及衍射效率。而相关求解过程已有很多文献发 表^[7-10],在此不再祥述。

2.1 圆柱形 ZnSe 增透微结构的优化设计

在矢量严格耦合波理论分析中,应该满足以下 两个标准:1)电磁场展开时随着保留谐波级次 N 的增加,结构的透射率趋于正确的稳定值,即满足数 值收敛性条件;2)在不考虑材料吸收的条件下,透 射率和反射率始终等于 1,满足能量守恒条件。一 般而言,展开的谐波级数越高,结果就越精确,但其 耗时和内存也会越多,因此选择合理的谐波展开级 次,对于提高计算精度和效率非常重要。计算表明, N>5(2N+1>11)时, ZnSe 微结构的透射率趋于稳 定,数值已满足收敛性条件,因此,在以下的设计分析 中选取的谐波次数为 5。此外,设定计算的透射率为 透射波(TE 波和 TM 波)零级衍射效率的平均值。

图 3 为入射波长 $\lambda = 8 \ \mu m$ 的透射率 *T* 随周期 *P* 的变化(此时,入射角 $\theta = 0^{\circ}$,折射率为 2.4103,占 空比 *f* = 0.5,结构高度 *H* = 2 μm)。由图 3 可知:随 着周期的增加,微结构平均透射率呈增加趋势;但在



图 3 亚波长结构透射率随周期的变化规律 Fig. 3 Transmittance of sub-wavelength structure as a function of period

P=3.319 μm 处,微结构的零级透射率和总透射率 曲线发生了分离,这与周期增大导致非零级衍射波 的出现有关;因此,在光波垂直入射时,为了满足只 有零级衍射的条件,周期 P 应小于 3.319 μm;但并 不是亚波长结构周期越小越好,因为周期越小,制备 的误差就越大,成本也就越高,应当综合考虑制备条 件及设计要求,选择合理的设计参数。在以下的设计 中,设定周期 P 为 3.3 μm;占空比 f 的优化区间为 $0.2\sim0.8$;高度 H 的优化区间为 $0\sim4$ μm。

为提高优化的效率和精度,采用遗传算法进行 相关优化,其相关设置为:迭代次数 60;交叉概率 0.01;变异概率 0.6。优化目标函数定义如下:

$$V_{\rm f} = \max\left[\overline{\sum_{\lambda} T(\lambda_i)}\right],\tag{1}$$

式中 $T(\lambda_i)$ 为垂直入射时,波长 λ_i 处的透射率;所采 用的折射率曲线如图 4 所示。优化结果显示,在迭 代 15 次后,优化目标值即趋于稳定,最终优化出的 结构参数为:周期 $P=3.3 \mu m$,填充因子 $F_o=$ 0.7566,圆柱体高度 $H_o=1.7517 \mu m$ 。此时,微结 构透射率随波长及角度的变化关系如图 5 所示。



图 4 ZnSe 材料折射率随波长的变化 Fig. 4 Refractive index of ZnSe material as





从图 5 可以看出,当入射角为 10°时,在 9.5~ 11.5 μm 波长范围的透射率均高于 98.0%。图 6 为 $\theta=0^{\circ}$ 最佳结构参数下垂直入射时的透射光谱曲 线图。可以看出,圆柱形 ZnSe 抗反射结构在 8~ 14 μ m光波段的平均透射率大于 98.2%,其中最大 透射率出现在波长 10.54 μ m 处。(注:由于优化条 件是垂直入射,所以具有较高衍射效率的入射角度 范围相对较小。)



2.2 方向偏差对抗反特性的影响分析

考虑到实际加工过程中,存在着诸多影响因素 如高度、占空比、周期误差等,因此要想进一步优化 加工工艺,提高加工精度有必要对结构偏差的影响 有一个直观的认识。在此,通过数值计算初步定量 研究分析了结构参量(周期 P、占空比 f、高度 h)偏 差 $\Delta P(P-P_o)$ 、占空比偏差 $\Delta f(f-f_o)$ 、高度偏差 $\Delta h(h-h_o)$ 对微增透 ZnSe 结构零级衍射效率的影 响,并得到了以下几组关系图,图中除了被分析的变 化量外,其余参量都取上文的优化值。

图 7 为垂直入射时,周期偏差 $\Delta P(P-P_{o})$ 与平 均透射率的关系图,由图可知:对于圆柱形 ZnSe 微 增透结构而言,当周期偏差为-1.0 μ m $< \Delta P < 0$ (2.3 μ m $< P < 3.3 \mu$ m)时,8~14 μ m 波段区间的平 均透射率改变幅度在 0.1%以内,基本可视为保持



图 7 周期偏差 ΔP 与平均透射率的关系 Fig. 7 Relationship between period error and average transmittance

不变;但当 $0 < \Delta P < 0.7 \ \mu m(3.3 \ \mu m < P < 4.0 \ \mu m)$ 时,亚波长圆柱形结构的平均透射性能出现了较为 严重的退化,尤其是在短波处(如图 8 所示),这与结 构周期超过零级衍射的临界周期,产生了其他级次 的衍射波有关。因此,在实际加工中,对于周期偏差 而言,应当尽量避免结构周期超过零级衍射的临界 周期而造成整体透射性能严重退化。

图 9,图 10 为垂直入射时,ZnSe 微结构的平均 抗反射性能随填充因子F偏差及结构高度H偏差













Fig. 10 Relationship between height error of sub-wavelength structure and average transmittance

的变化,由图可知,当填充因子 F 及高度 H 偏离优 化值时,8~14 μm 波段的平均透射效率都呈下降 趋势;结构参量 F、H 偏差为 10%时,平均透射率变 化大约分别在 0.77%和 0.58%以内,二者基本处于 同一水平;由图还可以看出 F 出现正向偏差时,平 均透射率曲线变化较陡,而对于高度 H,透射性能 对其负向偏差更敏感;因此,在实际加工中,根据方 案的精度要求,选择合理的制备方式,尽量减小微结 构的占空比偏差和高度偏差,对于获得较好的预期 结果具有重要的意义。

2.3 面形轮廓的影响分析

在加工表面圆形柱状微结构时,由于二次效应 的再沉积和再溅射效应,理论图形轮廓与实际加工 出的图形轮廓会存在一定的差异,如槽宽减小,侧壁 倾斜,有倒角出现等。为了能够准确反映面形轮廓 对结构抗反射特性的影响,通过高斯轮廓模型逼近 理论圆柱形轮廓模型的方法,研究分析了不同面形 轮廓下抗反射特性的差异。所采用的高斯轮廓表达 式如下^[17]:

 $z(x,y) = 1.7517\exp\{-[2\rho(x^2 + y^2)]^n\},$ (2) 且当 $x^2 + y^2 = (fP/2)^2$ 时, z = 0.8759。其中, n为 轮廓指数, 用于描述不同的面形轮廓; 轮廓指数 n 越 大, 其面形轮廓越逼近理论圆柱形轮廓, 研究中分别 选取了 n = 4, 10, 16和 500。其面形轮廓的三维及二 维剖面示意图如图 11 和图 12 所示。

不同面形轮廓下,8~14 μ m 波段范围的透射光 谱性能,如图 13 所示。从图 13 中可知,随着面形轮 廓指数的增加,极值透射率波长逐步向长波方向移 动,由等效介质理论可知,这与微结构的等效折射率 随面形轮廓指数 *n* 的增大而增大有关;且在长波波长 处如 λ =13 μ m,随着 *n* 值的增大其透射率逐渐升高, 但对于短波如 λ =8.2 μ m,则呈相反的变化趋势。不



图 11 模拟分析中所用的不同三维轮廓形貌示意图。 (a) n=4;(b) n=10;(c) n=16;(d) n=500

Fig. 11 Different 3-D profile shapes used in the simulation. (a) n=4; (b) n=10; (c) n=16; (d) n=500 同轮廓形貌下,其透射性能随结构高度的变化如图 14 所示,可以看出,最佳结构下的极值透射率波长 10.54 µm 随着结构高度的增加呈周期性变化趋势, 且其变化幅度随着面形轮廓指数的增加而增加。这 是因为轮廓指数越小,其越接近锥形结构,这与下文 通过多台阶逼近圆锥形结构研究结果相一致。



图 12 不同 n 值下,二维圆柱形亚波长结构示意图 Fig. 12 Diagram of 2-D columned sub-wavelength







- 图 14 不同轮廓形貌下,透射性能随结构高度的变化, (波长为 10.54 μm, 入射角度 θ=0°)
- Fig. 14 Calculated transmittance as a function of structure height for different profile shapes. (Wavelength is $10.54 \ \mu m$, incident angle θ is 0°)

2.4 多台阶逼近 ZeSe 锥形轮廓的性能分析

对于锥形轮廓的亚波长结构而言,可等效为一 个折射率渐变薄膜系统,相比圆柱形微增透结构,具 有更优的抗反射性能。因此,通过多台阶逼近锥形轮廓的方法研究分析了高度 H 对 ZnSe 窗口材料抗 发射特性的影响。在此,选定亚波长结构周期为 3.3 μ m,结构高度 H 在 0~8 μ m 范围变化,使各层 填充因子 F 呈近似线性分布: $f(H_i) = \frac{H_i}{H}$,其中,

 $H_i = \sum_i h_i, h_i$ 为第*i* 层的高度。

图 15 为多台阶(2、4、8、16) 逼近 ZnSe 锥形轮 廓时,8~14 μ m 波段的平均透射性能随高度 H 的 变化规律。由图可知,4、8、16 层台阶之间存在交叉 点,在交叉点以前,平均透射率随台阶数的增加呈减 小趋势,其后呈增加趋势,这与文献[1,21]的结果保 持一致;当台阶数 m 大于 8 时,8~14 μ m 波段范围 的平均透射性能随高度的变化趋于稳定,且在台阶 数 m=16,高度大于 4.25 μ m 时,其平均透射率高 达 99.0%以上,相比圆柱形最优微结构下的透射性 能有了较大幅度的提高。从图 15 中还可以看出,对 于多台阶结构(如 m=8,16),当高度 H 超过一定数 值时,结构的平均透射率处于较小的变化范围;对于 16 层台阶结构而言,其透射性能趋于稳定时的高度 大约为 4.5 μ m。这对于实际加工高度的选取,具有 非常重要的意义。



图 15 亚波长多台阶逼近锥形轮廓,平均透射光谱性能 与结构高度的关系

Fig. 15 Average transmittance curves of sub-wavelength multilevel gratings with coned profile as a function of structure height

3 结 论

结合使用遗传算法和矢量严格耦合波法,优化设 计了 8~14 µm 波段具有较好增透效果的圆柱形 ZnSe 微结构;同时,讨论分析了结构参量偏差和圆柱 形面形轮廓偏差对抗反射特性的影响,并对多台阶结 构透射性能随高度的变化规律进行了初步的研究。

优化结果表明:垂直入射情况下,以ZnSe为衬

底的圆柱形微结构周期为 3.3 μ m,高度为 1.7517 μ m,占空比为 0.7566 时,在 8~14 μ m 波段 范围具有最佳的平均增透效果,其平均透射率可高达 98.2%;

偏差分析表明:在零级衍射阈值以内,周期偏差 对结构的平均透射性能影响最小,平均透射效率变 化不到 0.1%;占空比偏差及高度偏差对整体光学 性能具有较为明显的影响,应当尽量提高二者的加 工精度;随着面形轮廓指数 n 的增加,极值透射率波 长逐步向长波方向移动,且长波处的透射率呈增大 趋势,短波处的透射率呈减小趋势;随着结构高度的 增加,极值波长的透射率呈周期性变化,且其变化幅 度随着 n 的增加而增加。

用多台阶逼近 ZeSe 锥形轮廓结果表明,当台阶 数 n 大于 8 时,8~14 μ m 波段范围的平均透射性能 即趋于稳定,且在台阶数 n=16,高度大于 4.25 μ m 时,平均透射率可高达 99.0%以上,相比圆柱形最 优微结构的平均透射性能有了较大幅度的提高;对 于 16 层台阶结构而言,其稳定高度阈值大约为 4.5 μ m,当高度超过该值时,平均透射率处于较小 的变化范围。这对于实际制备高度的选取,具有一 定的指导意义。

参考文献

- D W Zhang, Z W Lu, W X Yu, *et al.*. Electromagnetic diffraction analysis of 2-D antireflective subwavelength grating with coned profile [J]. Chinese J Lasers, 2002, 11(4): 273-280.
- 2 D S Hobbs, B D Macleod, J R Riccobono. Update on the development of high performance anti-reflecting surface relief micro-structures[C]. SPIE, 2007, 6545, 65450Y.
- 3 Zhong Minlin, Fan Peixun. Applications of laser nano manufacturing technologies[J]. Chinese J Lasers, 2011, 38(6): 0601001.
 钟敏霖,范培迅.激光纳米制造技术的应用[J].中国激光, 2011, 38(6): 0601001.
- 4 D Maystre. A new general integral theory for dielectric coated gratings[J]. J Opt Soc Am, 1978, 68(4): 490-495.
- 5 R Petit. Electromagnetic Theory of Gratings [M]. Berlin: Springer-Veriag, 1980.
- 6 M Neviere, R Petit, M Cadinhac, *et al.*. About the theory of optical grating coupler-waveguide systems [J]. Opt Commun, 1973, 8(2): 113-117.
- 7 M G Moharam, D A Pommet, E B Grann, *et al.*. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surfacerelif gratings; enhanced transmittance matrix approach[J]. J Opt Soc Am A, 1995, 12(5); 1077-1086.
- 8 M G Moharam, E B Grann, D A Pommet, et al.. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupledwave analysis of binary gratings[J]. J Opt Soc Am A, 1995, 12 (5): 1068-1076.
- 9 P Lalanne. Improved formulation of the coupled-wave method for two-dimensional gratings[J]. J Opt Soc Am A, 1997, 14(7): 1592-1598.
- 10 M G Moharam, T K Gaylord. Three-dimensional vector coupledwave analysis of planar grating diffraction[J]. J Opt Soc Am,

1983, 73(9): 1105-1112.

- 11 L F Li. Note on the S-matrix propagation algorithm[J]. J Opt Soc Am A, 2003, 20(4): 655-660.
- 12 E B Grann, M G Moharam, D A Pommet. Artificial uniaxial and biaxial dielectrics with use of two-dimensional sub-wavelength binary gratings[J]. J Opt Soc Am A, 1994, 11(10): 2695-2703.
- 13 L F Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous period structures[J]. J Opt Soc Am A, 1996, 13(9): 1870-1876.
- 14 D S Hobbs, B D MacLeod. Design, fabrication and measured performance of anti-reflecting surface textures in infrared transmitting materials[C]. SPIE, 2005, 5786: 349-364.
- 15 B D MacLeod, D S Hobbs. Low-cost anti-reflection technology for automobile displays [C]. Journal of the Society for Information Display, Automotive Display Conference, 2004.
- 16 D A Pommet, E B Grann, M G Moharam. Effects of process errors on the diffraction characteristics of binary dielectric gratings[J]. Appl Opt, 1995, 34(14): 2430-2435.
- 17 D Lehr, M Helgert, M Sundermann, et al.. Simulating different manufactured antireflective sub-wavelength structures considering the influence of local topographic variations [J]. Opt Express, 2010, 18(23): 23878-23890.
- 18 Yu Weixing, Lu Zhenwu, Wang Peng, et al.. Vector analysis of two-dimensional surface-relief structure diffraction [J]. Acta Optica Sinica, 2001, 21(8): 980-986.
 鱼卫星,卢振武,王 鹏,等. 二维表面浮雕结构的矢量衍射分 析[J]. 光学学报, 2001, 21(8): 980-986.
- 19 D W Zhang, Z W Lu, W X Yu, et al.. Electromagnetic diffraction analysis of columned grid gratings[J]. J Opt A: Pure Appl Opt, 2002, 4(2): 180-186.
- 20 Cao Zhaoliang, Lu Zhenwu, Li Fengyou, *et al.*. Design consideration of two-dimensional antireflective sub-wavelength periodic gratings[J]. Optics and Precision Engineering, 2002, 10 (6): 537-541.

曹召良,卢振武,李凤友,等.二维抗反射亚波长周期结构光栅 的设计分析[J].光学精密工程,2002,10(6):537-541.

21 Yu Weixing, Lu Zhenwu, Wang Peng, *et al.*. Vector diffracted characteristic of tapered profile two dimensional subwavelength surface-relief structure[J]. Acta Photonica Sinica, 2001, 30(3): 331-335.

鱼卫星, 卢振武, 王 鹏, 等. 锥形轮廓亚波长二维表面浮雕结构的矢量衍射特性[J]. 光子学报, 2001, 30(3), 331-335.

- 22 Cao Zhaoliang, Lu Zhenwu, Li Fengyou, *et al.*. Analysis of fabrication error of subwavelength dielectric gratings[J]. Acta Photonica Sinica, 2004, 33(1): 76-80. 曹召良, 卢振武, 李凤有, 等. 亚波长介质光栅的制作误差分析 [J]. 光子学报, 2004, 33(1): 76-80.
- 23 Xu Jiajun, Xing Tingwen. Analysis of two-dimensional pinhole vector diffraction in visible light[J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31 (12): 1205003.
 许嘉俊,邢廷文.可见光二维小孔矢量衍射分析[J].光学学报,

2011, 31(12): 1205003.

- 24 Sun Yanjun, Leng Yanbing, Dong Lianhe, *et al.*. Study on antireflective relief periodic structure of sapphire infrared window [J]. Infrared Technology, 2011, 33(2): 92-95.
 孙艳军,冷雁冰,董连和. 蓝宝石红外窗口抗反射浮雕结构研究 [J]. 红外技术, 2011, 33(2): 92-95.
- 25 Kong Weijin, Wang Shuhao, Wei Shijie, *et al.*. Design and diffraction property of broad waveband high-diffraction-efficiency grating for chirped pulse compressor[J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(10): 1005001. 孔伟金,王书浩,魏世杰,等. 宽光谱高衍射效率脉宽压缩光栅