

光子晶体对 LYSO 闪烁体光输出的影响

黄乐程, 王光毅, 薛玉雄, 杨生胜*

兰州空间技术物理研究所真空技术与物理重点实验室, 甘肃 兰州 730000

摘要 根据光子晶体(PhCs)提升闪烁体光输出的作用原理,向 5 μm 厚硅酸钇镧(LYSO)闪烁体的光出射面引入 4 种不同结构的光子晶体,以提升闪烁体探测器的探测性能。4 种 PhCs 构型分别为六边晶格空气孔型、正方晶格空气孔型、正方晶格圆柱型、正方晶格长方体型。结合 Rsoft 和 MATLAB 软件,通过对光子晶体周期、比例、高度三个参量的扫描,得到了每种类型光子晶体的最佳结构参数。模拟结果表明:在 LYSO 晶体发光中心波长为 420 nm 的条件下,每种优化后的光子晶体对 LYSO 的光输出都有一定程度的提升,且六边晶格空气孔型光子晶体对光输出的提升最大,高达 17.1945%。

关键词 薄膜; 光子晶体; 光输出; 闪烁体; 硅酸钇镧; 闪烁体探测器

中图分类号 O436

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201939.1031001

Effect of Photonic Crystal on Light Output from Lutetium-Yttrium Oxyorthosilicate Scintillators

Huang Lecheng, Wang Guangyi, Xue Yuxiong, Yang Shengsheng*

Science and Technology on Vacuum Technology and Physics Laboratory, Lanzhou Institute of Physics, CAST, Lanzhou, Gansu 730000, China

Abstract According to the principle of improving the light output from scintillators by using photonic crystals (PhCs), we add four PhCs to the 5- μm -thick surface of a lutetium-yttrium oxyorthosilicate (LYSO) scintillator to improve the performance of the scintillator detectors. Four PhC structures are used, *i. e.*, hexagonal air-holes, square air-holes, square cylinders, and square cubic rods. By scanning the period, ratio, and height of PhCs, we acquire four optimized structures using the Rsoft and MATLAB softwares, which is performed under the condition of a 420-nm-center wavelength of LYSO. The simulation results indicate that all the optimized PhC structures exhibit an increased light output and the structure with hexagonal air-holes shows the highest output (up to 17.1945%).

Key words thin films; photonic crystals; light output; scintillators; lutetium-yttrium oxyorthosilicate; scintillator detectors

OCIS codes 310.6628; 310.1860; 310.6860

1 引 言

随着微小卫星市场的蓬勃发展,人们开始考虑利用研制周期短、成本低的微小卫星平台^[1],并在其上搭载探测器进行更加精细化、全面化的空间探测^[2]。然而,传统闪烁体探测器的体积大、功耗高,无法适配微小卫星平台,即使高度发达的集成电路产业能够实现探测器后端电子学电路的小体积和低功耗^[3],也无法突破光子在闪烁体内部的全反射对闪烁体探测器探测性能的限制。以硅酸钇镧

(LYSO)晶体为例,尽管其具有密度大、辐射长度短、不潮解、相对发光效率高等优点,但即使在其出射面添加折射率为 1.41 的硅胶光学耦合剂来增大闪烁光的出射临界角,该晶体内部直接出射(不经过多次反射)的光子比例也仍低于 20%^[4],限制了电子学电路收集到的光子数量,制约了闪烁体探测器的探测性能。受光子晶体(PhCs)提升发光二极管(LED)出光效率^[5-6]以及太阳能电池性能^[7]的启发,笔者在 LYSO 闪烁体的光出射面引入了类似的量子阱结构——光子晶体,以期在适配微小卫星平台

收稿日期: 2019-04-30; 修回日期: 2019-05-29; 录用日期: 2019-06-06

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFB0501303)、国家自然科学基金(11705073)

* E-mail: 2syang@sina.com

的同时提升闪烁晶体的光输出,进而提升探测器的探测性能。

2 光子晶体的作用机理

光子晶体提高闪烁体光输出的作用原理如下^[4,8-12]:

闪烁体内部由于粒子入射而产生的光在光密介质与光疏介质的交界处发生折射及全反射,其中入射角 θ 小于临界角 θ_c 的光依然会出射,而 $\theta > \theta_c$ 的光在闪烁体出射面上遇到光子晶体发生衍射,使得一部分入射角大于临界角的光能够在光疏介质中传播,提升了闪烁体的光产额。图 1 为光子晶体与闪烁体出射光波的微观示意图。添加的光子晶体在闪烁体表面形成了固有的倒格矢量 \mathbf{G} ,当光从闪烁体内部出射时,光的平面波矢 $\mathbf{k}_{//}$ 和倒格矢 \mathbf{G} 的倍数发生耦合,若满足关系式

$$|\mathbf{k}_{//} + n\mathbf{G}| < |\mathbf{k}_0|, n \in \mathbf{Z}, \quad (1)$$

则闪烁体内部相应的光将出射(式中 \mathbf{k}_0 为真空波矢, $|\mathbf{k}_0| = \frac{2\pi}{\lambda_0}$, λ_0 为发射光的波长, n 为整数)。宏观上来看,光子晶体的作用结果相当于增大了光出射的临界角。

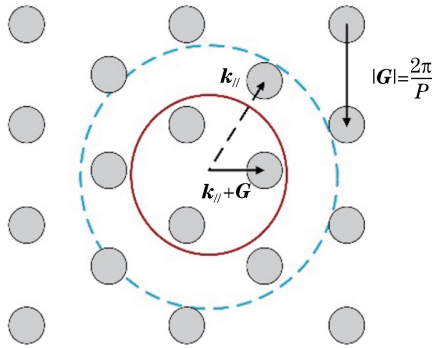


图 1 光子晶体作用原理示意图

Fig. 1 Schematic of the principle of photonic crystals

LYSO 晶体的闪烁荧光发光光谱如图 2 所示^[13],出射光的中心波长为 420 nm。另外,衡量该探测器探测性能的指标分别为时间分辨率 Δt 、能量分辨率 η_T 以及探测效率 ϵ ^[3]。向闪烁体的光出射面添加光子晶体后,理论上闪烁体的光输出将会得到提升,电路收集到的光子数量将会增多,探测器的时间分辨率 Δt 、能量分辨率 η_T 以及探测效率 ϵ 都将得到一定程度的提升。

3 光子晶体的模拟

为验证光子晶体提升闪烁体光输出理论的正确

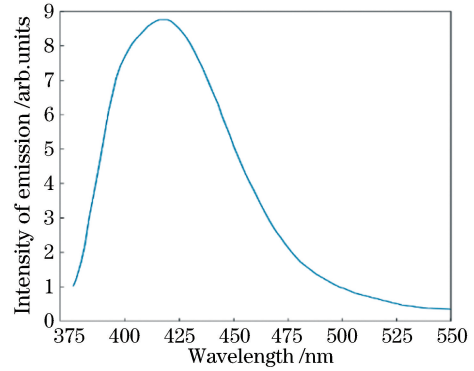


图 2 LYSO 晶体的发光光谱

Fig. 2 Spectrum of light output of LYSO crystals

性,选取强度高、材质透明且折射率大($\lambda = 420$ nm, $n = 1.85$)的 Si_3N_4 晶体作为光子晶体材料^[14],经过镀 Si_3N_4 膜(物理气相沉积法)、涂光刻胶(旋转涂覆法)、镀金属层(电子束蒸发法)、电子束曝光、反应离子束刻蚀等步骤制备出 Si_3N_4 与 LYSO 晶体的耦合结构^[4,15]。由于光子晶体的制备周期长、效率低,故先采用 Rsoft 软件对不同构型的光子晶体进行模拟。模拟过程分为两步:首先,规定沿 y 轴正方向为光的 0° 发射角,垂直于 y 轴正方向($-x$ 轴)为 90° 发射角,扫描周期及比例系数两个参量,计算每种结构在 $[0^\circ, 89^\circ]$ 发射角范围内的平均光输出;其次,对于每种特定结构,利用 Rsoft 中的 MOST 模块进行光子晶体高度参数的优化,寻找每种构型光子晶体的最优结构参数。

3.1 光子晶体的理论计算方法

Rsoft 软件运用严格耦合波算法(RCWA),并结合 Maxwell 方程的快速收敛算法以及数值稳定方法对光子晶体的结构参数进行优化^[6,15]。

将 Maxwell 方程展开为电场分量和磁场分量的形式,基于光子晶体在 xoz 平面上的周期性分布,利用傅里叶级数展开公式

$$\begin{cases} \epsilon(x) = \sum_p \epsilon_p \exp\left(i \frac{2\pi p}{a_x} x\right) \\ \epsilon(z) = \sum_q \epsilon_q \exp\left(i \frac{2\pi q}{a_z} z\right) \end{cases}, \quad (2)$$

将 y 方向的电场、磁场分量代入到展开的 Maxwell 方程中,可得每个级次谐波的电场、磁场矢量,进而求得每个分量的透射率以及总透射率。(2)式中, ϵ_p 、 ϵ_q 分别为傅里叶级数第 p 、 q 项相对介电常数的分量, a_x 、 a_z 分别为光子晶体在 x 、 z 方向上的晶格常数。

3.2 光子晶体的结构设计及仿真

结合高度 $h = 5 \mu\text{m}$ 的 LYSO 闪烁晶体和高度

为 h_{PhC} 的 Si_3N_4 晶体进行仿真,4 种模型结构如图 3 所示。其中图 3(a)和图 3(b)所示为空气孔型 Si_3N_4 晶体板置于 LYSO 晶体上,并分别以六边形晶格和正方形晶格形式排列;图 3(c)和图 3(d)所示为以正方形晶格形式排列的 Si_3N_4 介质棒置于 LYSO 晶体上,介质棒分别为圆柱型和长方体型(侧面为正方形)。4 种光子晶体的结构以及 LYSO 晶体都置于 $n_{\text{background}}=1$ 的真空介质中;设置自由空间波长为 LYSO 晶体的中心波长($\lambda=420\text{ nm}$),LYSO 晶体的折射率 $n_{\text{LYSO}}=1.82$;在 Rsoft 软件中分别设置每种结构的材料属性,其中基底设置为折射率为 1.82 的材料,晶体板和介质棒设置为“ Si_3N_4 ”材料,空气孔设置为“Air”材料。每种光子晶体的晶格常数(即周期变量)设为 P ,高度变量为 h_{PhC} ,比例系数为 R_A ;空气孔和圆柱半径为 R ,长方体侧面边长为 D (即其侧面正方形边长为 D),它们与周期 P 的关系为

$$\begin{cases} R = \frac{1}{2}P \cdot R_A \\ D = P \cdot R \end{cases} \quad (3)$$

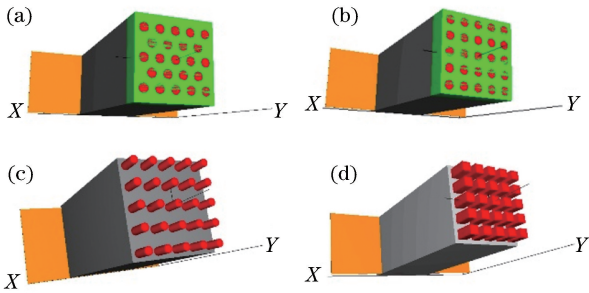


图 3 4 种不同结构类型的光子晶体。(a)六边形晶格空气孔型;(b)正方形晶格空气孔型;(c)正方形晶格圆柱型;(d)正方形晶格长方体型

Fig. 3 Four PhCs with different structures. (a) Hexagonal air-holes; (b) square air-holes; (c) square cylinders; (d) square cubic rods

为了从 4 种不同结构的光子晶体中选择对 LYSO 晶体光输出提升最大的结构,对以上 4 种类型的光子晶体进行周期 P 、比例系数 R_A 、高度 h_{PhC} 3 个参数的扫描。根据扫描生成的数据文件,通过编写 MATLAB 程序,计算出每种参数所对应的模型在 $[0^\circ, 89^\circ]$ 光发射角度内的平均光输出。为了提升扫描精度及节省扫描时间,将每种结构的扫描拆分成两步。首先,在光子晶体高度 $h_{\text{PhC}}=500\text{ nm}$ 的条件下,对周期 P 、比例系数 R_A 进行扫描。考虑到实际加工精度以及加工成本,设置周期的扫描步长为 10 nm ,比例系数的扫描步长为 10% ,变量取值范围以及步长如表 1 所示。

表 1 周期、比例系数和发射角度参数

Table 1 Parameters of period, ratio, and launching angle

Variables	Range	Precision
P/nm	100-1000	10
R_A	10%-90%	10%
Launch angle	$[0^\circ, 89^\circ]$	1°

通过扫描确定最佳的周期和比例参数之后,再进行光子晶体高度的扫描。扫描范围为 $h_{\text{PhC}} \in [0, 800]\text{ nm}$,步长为 10 nm 。扫描结束后,即可得到 $[0^\circ, 89^\circ]$ 光发射角度范围内,每种类型光子晶体使 LYSO 晶体光输出最大的结构参数。

4 光子晶体的仿真结果

4.1 无光子晶体的 LYSO 晶体

为了更加清楚地说明 Si_3N_4 光子晶体对 LYSO 晶体光输出的影响,首先模拟得到了无光子晶体结构且高度 $h=5\text{ }\mu\text{m}$ 的 LYSO 晶体(即参考晶体)在 $[0^\circ, 89^\circ]$ 光发射角度内的光输出曲线,如图 4 所示。结果表明,在发射角度超过 33° 之后,光输出为 0,即再无光从 LYSO 晶体内部出射,符合 $\theta_c = \arcsin \frac{n_{\text{background}}}{n_{\text{LYSO}}} = 33^\circ$ 的计算结果。另外,经计算可得,在 $[0^\circ, 89^\circ]$ 范围内该晶体的平均光输出为 35.5077% 。

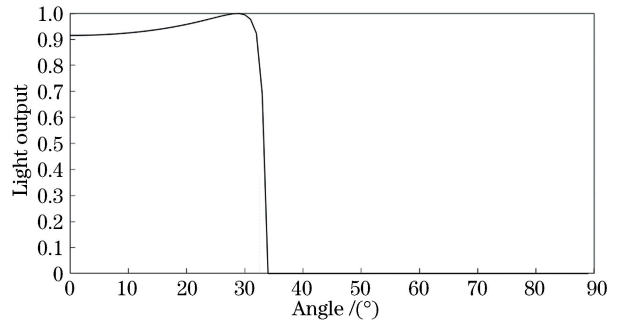


图 4 LYSO 晶体的光输出与发射角度的关系

Fig. 4 Relationship between light output of LYSO crystals and launching angle

4.2 4 种不同结构的光子晶体

图 5(a)~(d)所示的平均输出光谱分别对应图 3(a)~(d)所示的光子晶体结构。结果表明:当 $[P, R_A]=[230\text{ nm}, 80\%]$ 时,六边形晶格空气孔型光子晶体的最大平均光输出 $T_{\text{hal}}=37.8372\%$;当 $[P, R_A]=[1000\text{ nm}, 90\%]$ 时,正方形晶格空气孔型光子晶体的最大平均光输出 $T_{\text{sal}}=38.9457\%$;当 $[P, R_A]=[870\text{ nm}, 80\%]$ 时,正方形晶格圆柱型光子

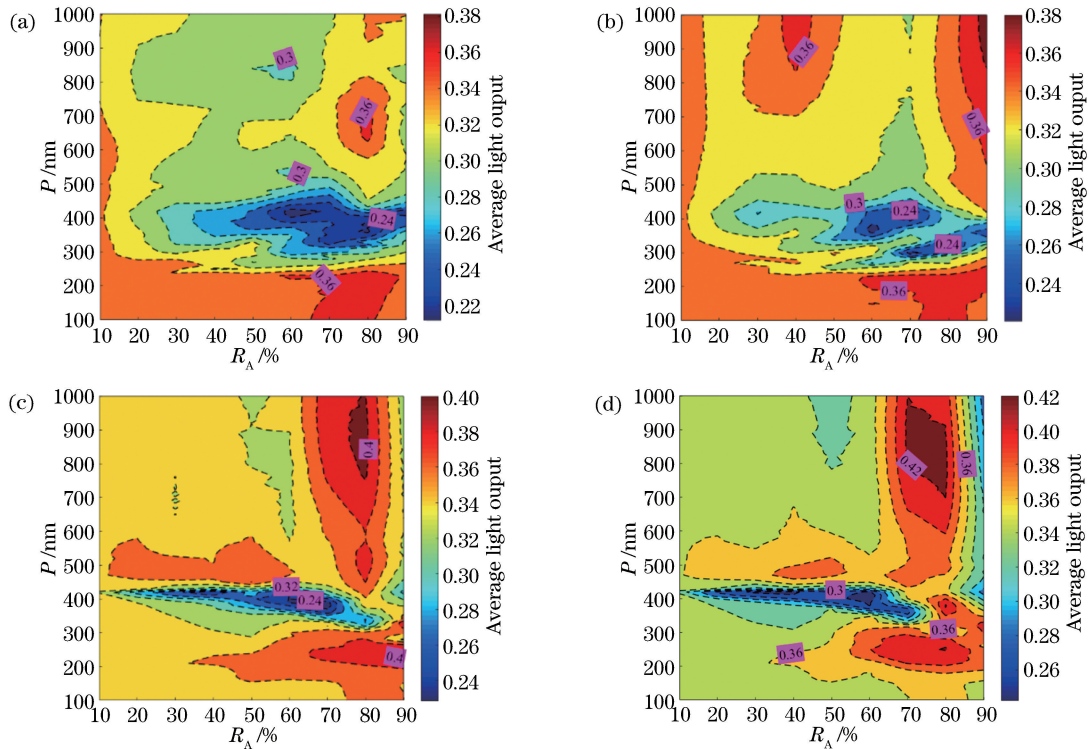


图 5 4 种构型光子晶体的周期及比例系数对 LYSO 晶体平均光输出的影响。(a)六边形晶格空气孔型；(b)正方形晶格空气孔型；(c)正方形晶格圆柱型；(d)正方形晶格长方体型

Fig. 5 Effects of period and ratio of four PhCs on the average light output of LYSO crystals. (a) Hexagonal air-holes; (b) square air-holes; (c) square cylinders; (d) square cubic rods

晶体的最大平均光输出 $T_{scr1} = 40.5623\%$ ；当 $[P, R_A] = [770 \text{ nm}, 80\%]$ 时，正方形晶格长方体型光子晶体最大平均光输出 $T_{ssr1} = 42.5092\%$ 。

在每种构型的周期 P 和比例系数 R_A 确定的情况下，对每种结构光子晶体的高度 h_{PhC} 进行扫描，结果如图 6 所示。图 6(a)~(d) 所示的光子晶体高度扫描图分别对应图 3(a)~(d) 所示的光子晶体结构。结果表明：当 $h_{PhC} = 650 \text{ nm}$ 时，六边形晶格空气孔型光子晶体的最大平均光输出 $T_{ha2} = 52.7022\%$ ，此时该构型在 $[0^\circ, 89^\circ]$ 光发射角度内的光输出曲线如图 7 中的“hex airhole”曲线所示。由于 Si_3N_4 晶体存在虚部折射率，有一部分出射光被光子晶体吸收，故在 $[0^\circ, 33^\circ]$ 内，光输出相较于参考晶体略有下降^[4]。当 $h_{PhC} = 460 \text{ nm}$ 时，正方形晶格空气孔型光子晶体的最大平均光输出 $T_{sa2} = 39.6030\%$ ，其光输出曲线如图 7 中的“square airhole”曲线所示，在 $[0^\circ, 33^\circ]$ 光发射角度内，该结构光子晶体对光的吸收相较于六边形晶格空气孔型的吸收更大。当 $h_{PhC} = 540 \text{ nm}$ ，正方晶格圆柱型光子晶体的最大平均光输出 $T_{scr2} = 41.8681\%$ ，其光输出曲线如图 7 中的“square cylinder”曲线所示。当

$h_{PhC} = 570 \text{ nm}$ 时，正方形晶格长方体型光子晶体的最大平均光输出 $T_{ssr2} = 43.5938\%$ ，对应的光输出曲线如图 7 中的“square rod”曲线所示。可见：与参考晶体相比，在 $[0^\circ, 33^\circ]$ 光发射角度内，添加 4 种不同构型的光子晶体的闪烁体，其光输出均有不同程度的下降，说明光子晶体对出射光有一定的吸收作用；在 $[34^\circ, 89^\circ]$ 光发射角度内，添加 4 种不同结构光子晶体的闪烁体依然有一定的光输出，验证了光子晶体作用原理的正确性。此外，对于正方形晶格长方体型光子晶体来说，其在 $[34^\circ, 89^\circ]$ 范围内均有光输出，其他 3 种结构的光子晶体在入射角为 56° 之后就不再光出射。

综上可得优化后的 4 种光子晶体的结构参数及其对 LYSO 晶体光输出的提升效果，如表 2 所示。

5 结 论

本文利用 Rsoft 与 MATLAB 软件，模拟了 Si_3N_4 光子晶体的 4 种结构，给出了每种构型的最佳结构参数以及在此结构下的光输出曲线和平均光输出，为每种结构的加工制作提供了一定的理论指导。模拟结果表明：相较于参考晶体，在 $[0^\circ, 89^\circ]$ 的光发射角度内，每种最佳结构的光子晶体对 LYSO

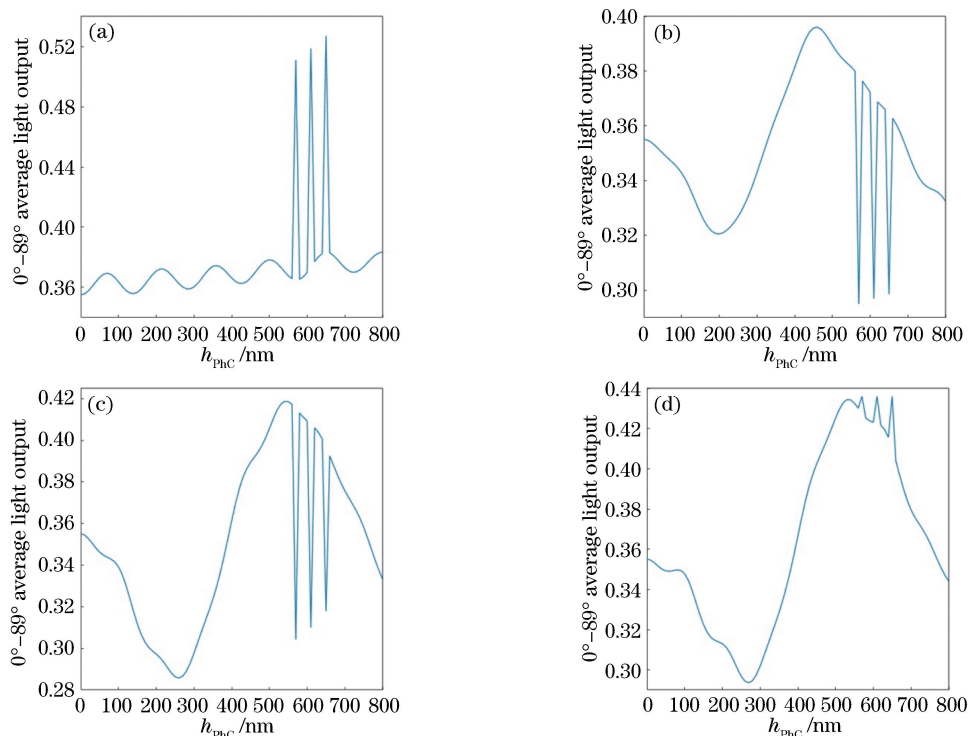


图 6 4 种构型光子晶体的高度对 LYSO 晶体平均光输出的影响。(a)六边形晶格空气孔型；(b)正方形晶格空气孔型；(c)正方形晶格圆柱型；(d)正方形晶格长方体型

Fig. 6 Effects of height of four PhCs on the average light output of LYSO crystals.

(a) Hexagonal air-holes; (b) square air-holes; (c) square cylinders; (d) square cubic rods

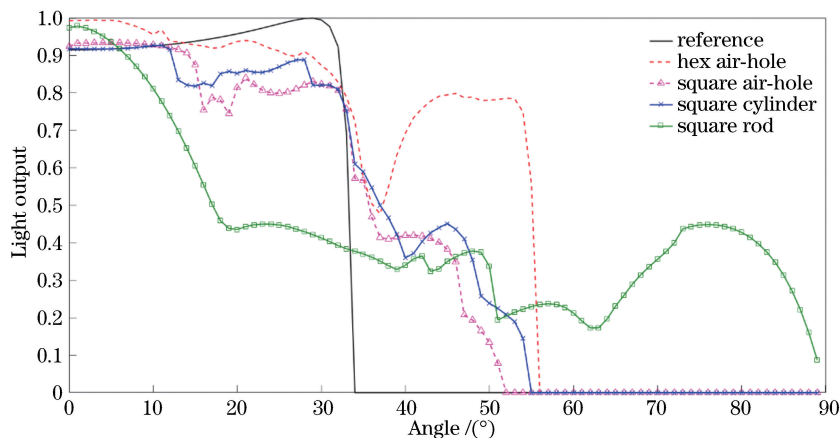


图 7 优化后 4 种光子晶体对 LYSO 晶体光输出的影响

Fig. 7 Influence of four optimized PhCs on the light output of LYSO crystals

表 2 优化后的 4 种光子晶体结构参数及其对 LYSO 光输出的提升效果

Table 2 Parameters of four optimized PhCs and its light output enhancement for LYSO

Structure	P / nm	$R_A / \%$	$h_{\text{PhC}} / \text{nm}$	Average light output / %	Improvement / %
Reference	0	0	0	35.5077	0
Hex air-holes	230	80	650	52.7022	17.1945
Square air-holes	1000	90	460	39.6030	4.0953
Square cylinders	870	80	540	41.8681	6.3604
Square cubic rods	770	80	570	43.5938	8.0861

闪烁体的光输出都有一定程度的提升,验证了光子晶体提升闪烁体光输出理论的正确性,为闪烁体探测器性能的提升提供了理论依据;同时,在优化后的4种光子晶体构型中,六边形晶格空气孔型光子晶体对LYSO晶体光输出的提升效果最佳,相较于参考晶体,有17.1945%的提升,相较于其他三种光子晶体,有9%~13%的提升,为光子晶体构型的选取与制作提供了参考。

参 考 文 献

- [1] Zhou Y Q, Luo C, Ni T, *et al.* Development trend of the commercialized microsatellite industry [J]. Space International, 2016(5): 37-43.
周英庆, 罗超, 倪涛, 等. 商业化微小卫星产业发展趋势及思考[J]. 国际太空, 2016(5): 37-43.
- [2] Shi L Q. Research on radiation environment and surface charging effect of low orbit aircraft [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2011: 1-15.
师立勤. 低轨道航空器辐射环境和表面充电效应研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2011: 1-15.
- [3] Wang X L, Li C, Shao M. Technology of particles detecting [M]. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2009: 232-274.
汪晓莲, 李澄, 邵明. 粒子探测技术[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2009: 232-274.
- [4] Knapitsch A, Lecoq P. Review on photonic crystal coatings for scintillators[J]. International Journal of Modern Physics A, 2014, 29(30): 1430070.
- [5] Hu Y L, Liu D L, Wang B, *et al.* Characteristics of light extraction for surface-microcavity photonic crystal LED[J]. Acta Optica Sinica, 2017, 37(6): 0623004.
胡永禄, 刘道柳, 王博, 等. 表面微腔光子晶体LED的光提取特性[J]. 光学学报, 2017, 37(6): 0623004.
- [6] Liu M. Study of the mechanism of LED efficiency enhancement by periodical nano-scale structures[D]. Jinan: Shandong University, 2017: 107-119.
刘萌. 纳米尺度周期结构提高LED发光效率机制的研究[D]. 济南: 山东大学, 2017: 107-119.
- [7] Liang W Y, Zhong J Y, Xu H T, *et al.* Tailoring the performance of semitransparent organic solar cells by tandem one-dimensional photonic crystals [J]. Acta Photonica Sinica, 2018, 47(8): 0823003.
梁文跃, 钟锦耀, 徐海涛, 等. 利用叠层一维光子晶体调控半透明有机太阳能电池的性能[J]. 光子学报, 2018, 47(8): 0823003
- [8] Kronberger M, Auffray E, Lecoq P. Probing the concepts of photonic crystals on scintillating materials [J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2008, 55(3): 1102-1106.
- [9] Pignalosa P, Liu B, Chen H, *et al.* Giant light extraction enhancement of medical imaging scintillation materials using biologically inspired integrated nanostructures[J]. Optics Letters, 2012, 37(14): 2808-2810.
- [10] Zhu Z C, Liu B, Cheng C W, *et al.* Enhanced light extraction efficiency for glass scintillator coupled with two-dimensional photonic crystal structure [J]. Optical Materials, 2013, 35(12): 2343-2346.
- [11] Zhu Z C, Liu B, Cheng C W, *et al.* Improved light extraction efficiency of cerium-doped lutetium-yttrium oxyorthosilicate scintillator by monolayers of periodic arrays of polystyrene spheres [J]. Applied Physics Letters, 2013, 102(7): 071909.
- [12] Liu B, Chen H, Gu M, *et al.* Scintillators boosted by nanophotonics [J]. Physics, 2014, 43(4): 254-262.
刘波, 陈鸿, 顾牡, 等. 闪烁体与光子人工微结构[J]. 物理, 2014, 43(4): 254-262.
- [13] Zhu Z C, Liu B, Cheng C W, *et al.* Improved light extraction of LYSO scintillator by the photonic structure from a layer of anodized aluminum oxide [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2015, 786: 1-4.
- [14] Knapitsch A, Auffray E, Fabjan C W, *et al.* Effects of photonic crystals on the light output of heavy inorganic scintillators [J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2013, 60(3): 2322-2329.
- [15] Chen M. Study on application of enhancing the light output of scintillator based on micro-nano fabrication [D]. Shanghai: University of Chinese Academy of Sciences, 2015: 9-21.
陈媚. 基于微纳加工的闪烁体表面修饰技术应用探索[D]. 上海: 中国科学院大学, 2015: 9-21.