

# 纳米孔隙聚合物光学薄膜透过率谱线的数值计算\*

杨振宇 朱大庆 赵 茗 曹明翠

(华中科技大学激光技术国家重点实验室, 武汉 430074)

**摘 要** 用时域有限差分(Finite Difference Time Domain - FDTD)算法模拟了光从真空垂直入射到表面覆盖有一层纳米孔隙聚合物薄膜的玻璃介质,得到了在不同波长下的纳米孔隙薄膜的透过率谱线. 将 FDTD 模拟结果的透过率谱线与理论谱线相对照,估算出了该薄膜的等效折射率. 我们分别模拟了孔隙率为 5%、10%、15%、20% 和 30% 的薄膜,得到了它们的透过率谱线,而且利用这些谱线得到了它们不同的等效折射率值. 文末给出了只有两层薄膜构成的纳米孔隙宽带增透薄膜的结构,而且利用 FDTD 算法模拟了光经过这种增透膜入射到玻璃介质的过程,结果显示这种增透膜在可见光波长范围的透过率高达 99.5%.

**关键词** 纳米孔隙光学薄膜;时域有限差分算法;透过率谱线;等效折射率

**中图分类号** O438 **文献标识码** A

## 0 引言

在增透膜的设计中人们一直在寻找折射率低,而且可以在一定范围内可调的一系列低折射率薄膜材料. 理论上 100% 单层增透膜的折射率必须满足  $n_f = \sqrt{n_0 n_s}$ , 其中  $n_0$  为空气的折射率,  $n_s$  为基片的折射率. 使用最多的基片是玻璃材料或透明的有机材料,它们的折射率一般在 1.5 左右,因此理论上就要求增透膜的折射率为 1.22 左右,而且对于宽带增透膜而言就更加要求有一组  $n_0$  到  $n_s$  之间可以变化的低折射率薄膜. 而现在人们能够找到的最小折射率为 1.35 左右 ( $MgF_2$ 、 $CaF_2$ ), 所以传统的增透膜必须采取大规模的膜系设计技术来达到这些条件,通常一个性能好的增透膜系会达到几十层甚至上百层. 而纳米孔隙聚合物薄膜的等效折射率可以作到令人难以置信的低. 有文献称现在已经可以做出厚度从 195 nm 到 100 nm, 折射率从 1.50 到 1.05 的纳米孔隙聚合物薄膜<sup>[1-4]</sup>. 这对于传统的薄膜光学可以说是一次巨大的进步.

本文所做的工作是用 FDTD 算法模拟了光从真空垂直入射到表面覆盖有一层纳米孔隙聚合物薄膜的玻璃介质,得到了在不同波长下的纳米孔隙薄膜的透过率谱线. 在文章的最后给出了只有两层薄膜构成的宽带增透薄膜的结构,而且利用 FDTD 算法模拟了光经过这种增透膜入射到玻璃介质的过程.

## 1 FDTD 算法模拟与分析

纳米孔隙聚合物薄膜是采用纳米相位分离技术

得到一种聚合物材料薄膜. 将两种高分子材料混合在基片上制备成膜,再用一种溶剂选择性的溶解掉其中的一种聚合物材料,从而在结构上形成了所谓的纳米孔隙薄膜.

图 1 为用 FDTD 算法模拟的光从真空垂直入射到表面覆盖有一层纳米孔隙聚合物薄膜的玻璃介质的示意图. 具体的模拟过程是这样的:光波由在真空中的光源发出,经过纳米孔隙聚合物薄膜入射到折射率等于 1.5 的玻璃介质中,分别记录下光波入射前的强度  $A_{in}$  和透射到玻璃介质后的强度  $A_{tr}$ . 由于模拟过程是假设各种介质对光波无吸收损耗,因此光波经由纳米孔隙薄膜透射到玻璃介质的透射率  $T = A_{tr}/A_{in}$ . 在模拟过程中我们构造的纳米孔隙薄膜是由孔隙和折射率等于 1.46 的介质组成的,采用的激励源为单频连续光源. 为了降低四周边界造成的数值反射影响模拟的结果,四周的边界都采用了最佳匹配层(PML)边界条件<sup>[5-7]</sup>.

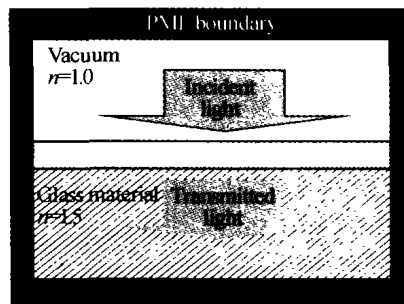


图 1 FDTD 算法模拟的光从真空垂直入射到表面覆盖有一层纳米孔隙聚合物薄膜的玻璃介质的示意图  
Fig. 1 Sketch map of the light-wave propagation through a nano-porous film simulated by FDTD method

图 2 为光波在经过纳米孔隙聚合物薄膜入射到玻璃介质的过程中光场等高线分布图. 其中纳米孔隙聚合物薄膜的孔隙率等于 20%, 薄膜厚度等于

\*国家自然科学基金资助项目(项目批准号:60107001)  
Tel:027-87541184 Email:yppzm@yahoo.com.cn  
收稿日期:2004-02-13

108 nm, 光波波长等于 600 nm. 图 2(a) 是光波在入射到薄膜前时的光场分布, 图 2(b) 是入射进薄膜时的光场分布, 图 2(c) 是光波经过薄膜透射到玻璃介质时的光场分布. 从图中可以清楚的观察到绝大部分的光能量透射到了玻璃介质中, 纳米孔隙薄膜的增透特性表现的非常明显. 下面对模拟结果的分析将进一步证明这一点.

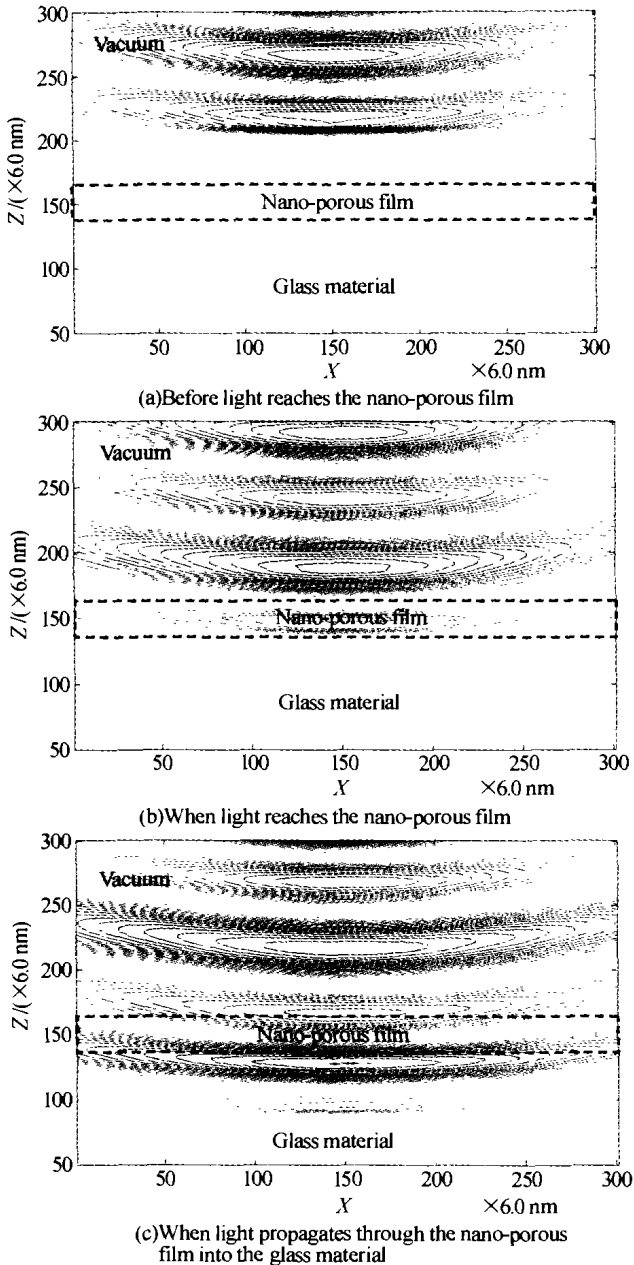


图 2 光波在经过纳米孔隙聚合物薄膜入射到玻璃介质的过程中光场等高线分布图  
 Fig. 2 Contour line of the field during light propagating through the nano-porous film into the glass material

图 3 为在 400 nm 到 800 nm 的可见光光谱范围内光波经由纳米孔隙薄膜透射到玻璃介质的透过率谱线. 由下到上分别对应的纳米孔隙薄膜的孔隙率为 5%、10%、15%、20% 和 30%, 薄膜的厚度都为 108 nm. 其中点划线表示的是由 FDTD 算法模拟的

薄膜透射率谱线, 实线表示的是与模拟结果相匹配的某一折射率的增透膜透射率谱线, 这个特定的折射率即为该纳米孔隙薄膜的等效折射率. 由下到上分别对应的纳米孔隙薄膜的等效折射率为 1.425、1.391、1.352、1.320 和 1.251. 与模拟结果匹配的透射率谱线是这样得到的

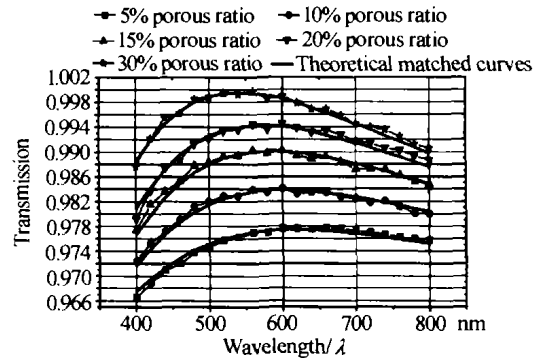


图 3 400 ~ 800 nm 光谱范围内不同孔隙率薄膜的透过率谱线  
 Fig. 3 The transmittance spectrum (400 ~ 800 nm) with different porous ratio

$$T = 1 - \frac{(n_0 - n_g)^2 \cos^2 \frac{\delta}{2} + (\frac{n_0 n_g}{n} - n)^2 \sin^2 \frac{\delta}{2}}{(n_0 + n_g)^2 \cos^2 \frac{\delta}{2} + (\frac{n_0 n_g}{n} + n)^2 \sin^2 \frac{\delta}{2}} \quad (1)$$

等式(1)是某一特定折射率薄膜的透过率与薄膜折射率、厚度、光波波长、入射角度的函数式, 其中  $n_0$  为真空折射率 1.0,  $n_g$  为玻璃介质折射率 1.5,  $n$  为薄膜折射率,  $\delta = \frac{4\pi n h}{\lambda \cos \theta}$ , 由于本讨论中, 纳米孔隙薄膜厚度  $h$  等于 108 nm, 光的人射角度  $\theta$  等于  $0^\circ$ , 因此透过率仅与薄膜的折射率和光波波长相关. 将已知条件带入等式(1)得到等式(2)

$$T = 1 - \frac{0.25 \cos^2 \frac{6.79 \cdot 10^{-7} n}{\lambda} + (\frac{15}{n} - n)^2 \sin^2 \frac{6.79 \cdot 10^{-7} n}{\lambda}}{6.25 \cos^2 \frac{6.79 \cdot 10^{-7} n}{\lambda} + (\frac{1.5}{n} + n)^2 \sin^2 \frac{6.79 \cdot 10^{-7} n}{\lambda}} \quad (2)$$

改变等式(2)中的折射率值  $n$ , 就能得到一系列不同折射率薄膜对应的透过率谱线, 将这些谱线与 FDTD 算法模拟的透过率谱线进行数学上的对照, 找出与模拟谱线最匹配的就是图 3 中实线所示的那一条谱线. 该谱线对应的折射率即为该孔隙率下的纳米孔隙薄膜的等效折射率. 从图中可以明显的发现纳米孔隙薄膜的等效折射率是随着孔隙率的增大而不断减小的.

## 2 一种宽带高透过率增透膜

纳米孔隙聚合物薄膜最有前景的方向就是将其应用在增透膜的设计和制作当中. 由于它可以达到

普通介质材料无法达到的低折射率,因此它的应用将大大简化增透膜的设计过程,提高增透膜的光学性能,而且使制作工艺过程变得简单易行.下面就给出一种仅由两层介质薄膜组成的宽带增透膜.这种增透膜是由德国一实验室首先提出的.图4为该增透膜的结构示意图.图中纳米孔隙聚合物薄膜的孔隙率为56%,厚度为115 nm,  $\text{MgF}_2$  薄膜的折射率为1.381,厚度为99 nm.下面用 FDTD 算法模拟孔隙率为56%的纳米孔隙薄膜与  $\text{MgF}_2$  薄膜构成的增透膜的光传输过程.

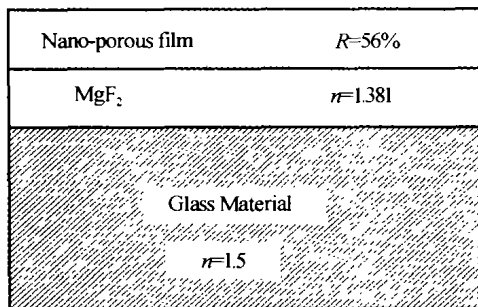


图4 由双层薄膜构成的宽带增透膜示意图

Fig.4 The sketch map of the broad-band antireflection coating composed of two films

图5所示为 FDTD 算法模拟的上述结构增透膜在400~800 nm 可见光波长范围内的透射率谱线.从图中可以发现该增透膜在400~800 nm 的波长范围内,平均透过率超过了99.5%,而且该增透膜的透过率在500~700 nm 之间的透过率谱线相当平坦,其峰值透过率几乎达到了100%.它的这些性能

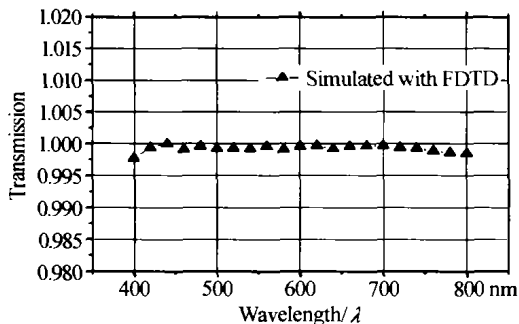


图5 用 FDTD 算法模拟得到的宽带纳米孔隙增透膜的透射率谱线

Fig.5 The transmittance spectrum of the antireflection coating simulated by FDTD method

远远高于传统工艺上采用  $\text{MgF}_2$  材料制作的增透膜,因为一般工业上用  $\text{MgF}_2$  材料增透膜的透过率在97%左右,而且其透过率谱线远不及该增透膜透过率谱线平坦.

### 3 结论

利用纳米相位分离技术制作的纳米孔隙聚合物薄膜可以得到一般介质无法达到的低折射率,通过改变孔隙率的大小可以得到等效折射率不同的薄膜,将这种材料应用在光学增透膜的设计和制作当中,不仅提高了增透膜的光学性能而且简化了传统的增透膜制作工艺.

### 参考文献

- Walheim S, Schaffer E, Mlynek J, *et al.* Nanophase-separated polymer films as high-performance antireflection coatings. *Science*, 1999, **283**(5401): 520 ~ 522
- Walheim S, Boltau M, Mlynek J, *et al.* Structure formation via polymer demixing in spin-cast films. *Macromolecules*, 1997, **30**(17): 4995 ~ 5003
- Boltau M, Walheim S, Mlynek J, *et al.* Surface-induced structure formation of polymer blends on patterned substrates. *Nature*, 1998, **391**(6670): 877 ~ 879
- Yang Zhenyu, Zhu Daqing, Lu Dongsheng, *et al.* Study of the relationship between porous ratio and effective index in nanoporous film. *Optical and Quantum Electronics*, 2003, **35**(12): 1133 ~ 1141
- Berenger J P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J Comp Phys*, 1994, **114**(2): 185 ~ 200
- 林青春,肖悦娱,何赛灵. 基于广角 FD-BPM 的 PML 边界处理方法. *光子学报*, 2002, **31**(3): 349 ~ 353  
Lin Q C, Xiao Y Y, He S L. *Acta Photonica Sinica*, 2002, **31**(3): 349 ~ 353
- 徐静,戴道铎,何赛灵. 基于 PML 边界的有限差分法及其在光波导泄漏损耗计算中的应用. *光子学报*, 2003, **32**(12): 1426 ~ 1429  
Xu J, Dai D X, He S L. *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(12): 1426 ~ 1429

## Numerical Analysis of the Nano-porous Optical Film's Transmission Spectrum

Yang Zhenyu, Zhu Daqing, Zhao Ming, Cao Mingcui

State Key Laboratory of Laser Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074

Received date: 2004-02-13

**Abstract** The finite difference time domain (FDTD) method is used to simulate light propagating from vacuum to glass material covered with nano-porous films, and the transmittance spectrum with different wavelength are obtained. Compared with theoretical spectrum, the refractive index of the nano-porous film is calculated. A series of nano-porous films with the porous ratio of 5%、10%、15%、20% as well as 30% are simulated. In the end of this paper, a broad-band antireflection coating composed of the nano-porous film and one MgF<sub>2</sub> layer is proposed. Simulated this antireflection coating by FDTD method, the average transmittance can be reached above 99.5% between 400nm and 800nm.

**Keywords** Nano-porous optical film; FDTD method; Transmittance spectrum; Equivalent refractive index



**Yang Zhenyu** was born in March 1977, received bachelor's degree in electrical engineering from Huazhong University of Science & Technology (HUST) in 1999. Currently, he is pursuing the Ph. D. degree of physical electronics in the State Key Lab. of Laser Technology at HUST. His research interests include computational electromagnetism, integrated optics design and nano-porous polymer film.