

太赫兹波发射晶体的亚波长微棱锥增透结构的设计与实验研究*

胡晓堃¹⁾ 李江¹⁾ 李贤¹⁾ 陈耘辉²⁾ 栗岩锋^{1)†} 柴路¹⁾ 王清月¹⁾

1) (天津大学精密仪器与光电子工程学院, 超快激光研究室, 光电信息技术教育部重点实验室, 天津 300072)

2) (天津大学精密仪器与光电子工程学院, 精密测试技术及仪器国家重点实验室, 微纳加工技术中心, 天津 300072)

(2012年9月24日收到; 2012年11月1日收到修改稿)

光学整流方法产生太赫兹 (THz) 辐射常用的非线性发射晶体在 THz 波段都具有较高的折射率, 使得很大一部分 THz 波由于晶体表面的菲涅尔反射而无法有效耦合输出. 本文报道了 GaP 晶体 THz 波发射器输出表面上亚波长微棱锥增透结构的设计和实验研究. 利用有效介质模型在理论上验证了亚波长光栅结构的增透效果, 并进一步设计了适用于不同频段的增透结构的参数. 实验中, 通过微机械加工手段在 GaP 晶体输出端面刻划了多种亚波长微棱锥结构, 验证了其增透效果及参数对增透频带的关系. 理论与实验的符合证明该设计思想也可用于其他 THz 波发射晶体.

关键词: THz 波, 光学整流, 亚波长微棱锥增透结构, 微加工

PACS: 07.57.Hm, 42.79.Wc, 87.85.Va

DOI: 10.7498/aps.62.060701

1 引言

太赫兹 (THz) 波, 通常指的是 0.1 THz 到 10 THz 频段的电磁波辐射, 因其具有多种独特的性质, 故在安全检查^[1-3]、太赫兹时域光谱技术 (THz-TDS)^[4]、生物医学成像^[5,6]、无损探伤^[7] 等方面有着广泛的应用前景^[8,9].

光学整流^[10] 作为产生超快 THz 波的一个主要手段, 因其系统简单、辐射的 THz 波频带宽, 是理想的 THz-TDS 的辐射源. 但是, 光学整流仍然普遍存在 THz 波转化效率较低的问题. 为解决这一问题, 有不同的方案被提出, 如使用周期极化的非线性介质通过准相位匹配延长晶体中的作用距离^[11]; 类比大口径光电导天线^[12,13] 将抽运光扩束以增大光斑面积并匹配上大口径的 THz 发射晶体^[14]; 利用色散器件倾斜抽运光脉冲波面并通过非共线相

位匹配获得高效 THz 波输出等^[15]. 除了通过增强 THz 波产生效率来提升 THz 波的输出功率外, 还应该注意到的一个问题是: 常用的 THz 波发射晶体在 THz 波段都有着很高的折射率, 例如磷化镓 (GaP) 和掺 MgO 的铌酸锂 (LiNbO₃) 晶体在 1 THz 处的折射率分别为 3.3 和 4.9^[16], 这就意味着 THz 波在发射晶体 - 空气的耦合输出端面上, 由单次菲涅尔反射所带来的功率损耗就高达 28.6% 和 43.7%. 这些反射损耗一方面限制了 THz 波输出效率的提升, 另一方面反射的 THz 波会影响 THz-TDS 信号的处理.

本文以 GaP 晶体为例, 报道了增强 THz 波输出的亚波长微棱锥增透结构的设计和验证, 使用有效介质理论及严格耦合波分析法对比研究了多种尺度参数下 THz 波的增透效果, 然后通过微机械加工方法在 GaP 晶体输出端面上刻划微结构并在实验上验证了其增透效果.

* 国家自然科学基金 (批准号: 61077083, 61027013, 61078028, 60838004)、国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2007CB310408, 2010CB327604, 2011CB808101) 和国家自然科学基金中俄合作交流项目 (批准号: 61211120193) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: yanfengli@tju.edu.cn

2 基于有效介质理论的亚波长微棱锥增透结构的设计

2.1 亚波长微棱锥增透结构

类比以往提高电磁波透射效果的方法,许多可供选择的手段可用于 THz 波段,例如依靠干涉相长手段的 1/4 波长镀膜技术^[17]、多层镀膜^[18]以及亚波长的光栅结构等^[19].其中,利用光学镀膜技术在发射晶体-空气耦合输出表面镀一层 1/4 波长的增透膜,一方面此种镀膜只能提高窄带 THz 波的透过率,而对于宽带 THz 波系统,可以预见它的效果是大大降低的;另一方面,在发射晶体后表面镀一层厚达数十微米的增透膜,从工艺角度来看制备难度比较大,同时性质也不稳定.此外,多层镀膜相比前者而言更适用于宽带 THz 波系统,然而找到多种对 THz 波低吸收并且折射率介于发射晶体与空气之间的材料是非常困难的,同时此种抗反射层的制备也比较复杂.最后,已有报导将亚波长微棱锥结构刻划于高阻硅上作为 THz-TDS 中泵光的滤波器,在阻隔泵光的同时更高效的传输太赫兹波^[20-22],并且具有较宽的透射谱.

基于以上增透思想,本文利用类似的微金字塔形结构,如图 1 所示,将其刻划于 THz 波发射晶体的输出表面上,通过此手段能够使发射晶体所产生的 THz 波更高效的耦合输出,从而提高泵光-THz 波的总体产生效率.

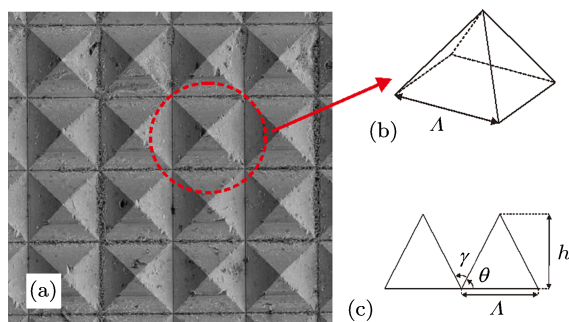


图 1 (a) 在 GaP 晶体表面刻划的亚波长微棱锥结构扫描电镜照片; (b) 微棱锥立体结构示意图; (c) 微棱锥截面结构及其参数

2.2 增透结构的理论分析

对于如图 1 所示的微金字塔形棱锥结构的增透效果可以采用严格耦合波理论 (rigorous coupled-wave analysis, RCWA)^[23] 或者等效介质理论 (effective medium theory, EMT)^[24] 进行理论分析. RCWA

是通过利用麦克斯韦方程组得到的精确数值解法,但是由于过于复杂,对于一维结构的增透效果的研究往往就需要解数十组大型方程组,求解这里的二维结构将更为复杂,用于增透微结构的参数设计较为繁琐.因此,本文采用等效介质理论模拟微棱锥结构对 THz 波辐射的透过系数,此方法通过适当引入拟合函数能够获得与 RCWA 接近的结果,因此具有计算速度快和精度较高的优点,能作为加工优化微棱锥结构的理论指导.

根据等效介质理论,为了计算微金字塔形增透结构的透射率,首先将该结构等分为无数个小薄层,并由等效介质理论获得每一个薄层内微棱锥的有效折射率,如图 2 所示.当增透结构周期 Λ 远小于 THz 辐射的波长 λ (即 $\Lambda/\lambda \rightarrow 0$) 时,其中每一个薄层的折射率可以用一阶有效折射率表达^[25]:

$$n_{\text{eff}} = \sqrt{fn_s^2 + (1-f)n_i^2}, \quad (1)$$

其中 Λ 是微棱锥周期, λ 是 THz 波的波长, n_s 是发射晶体的折射率, n_i 是周围介质 (本文中为空气) 的折射率, f 表示当前薄层发射晶体所占的面积百分比.

当微棱锥周期接近 THz 波的波长时, (1) 式中的等效折射率公式就会出现较大的误差,由 EMT 理论可知,此时可以使用二阶等效折射率公式^[25]:

$$n_{\text{eff}} = \left[fn_s^2 + (1-f)n_i^2 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\Lambda}{\lambda} \right)^2 f^2 (1-f)^2 (n_s^2 - n_i^2)^2 \right]^{1/2}. \quad (2)$$

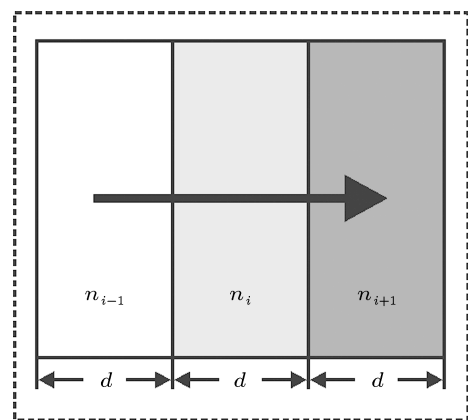


图 2 矩阵传输理论中薄层变量关系示意图

为了获得增透结构对 THz 波的增透效果,本文采用传输矩阵理论^[26],为表示两个薄层间折射率

的变化关系, 引入透射矩阵:

$$Q_i = \frac{1}{2n_{i+1}} \begin{bmatrix} n_{i+1} + n_i & n_{i+1} - n_i \\ n_{i+1} - n_i & n_{i+1} + n_i \end{bmatrix}, \quad (3)$$

其中 n_i, n_{i+1} 分别表示第 i 层与第 $i+1$ 层微棱锥结构的有效折射率.

此外, 由 THz 波在单个薄层之间传输所产生的相位差引入传输矩阵:

$$P_i = \begin{bmatrix} e^{-j\varphi_i} & 0 \\ 0 & e^{j\varphi_i} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

其中 φ_i 表示 THz 波经过第 i 层所改变的相位.

这样, 其总体的传输矩阵可以表示为

$$M = Q_N \left(\prod_{i=1}^{N-1} P_i Q_i \right), \quad (5)$$

其中 N 为微棱锥分的薄层数.

根据矩阵传输理论, 将总传输矩阵表示为

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}, \quad (6)$$

将 M 可以变换得到散射矩阵

$$S = \begin{bmatrix} t_{12} & r_{21} \\ r_{12} & t_{21} \end{bmatrix} = \frac{1}{D} \begin{bmatrix} AD - BC & B \\ -C & 1 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

由此可以获得 THz 辐射穿过微棱锥结构的透射系数与反射系数, 其中透射系数的表达式为

$$t = \frac{AD - BC}{D}. \quad (8)$$

为了对比增透效果, 本文采用相对增透系数 $t_{\text{antireflective}}/t_{\text{normal}}$ 表示, 其中 $t_{\text{antireflective}}$ 为刻划有增透结构的发射晶体所对应的 THz 波透射系数, t_{normal} 为未刻划增透结构的发射晶体对应的 THz 波透射系数.

对某一固定周期结构的微棱锥, 当 THz 波的波长接近微棱锥周期时, 会发生高阶衍射, 降低增透效果. 由此定义截止频率为 [25]

$$f_{\text{cutoff}} = \frac{c}{n_s \Lambda}. \quad (9)$$

在数值模拟中, 加入由截止频率决定的衍射因子 $\text{sinc}\left(\frac{f - f_{\text{cutoff}}}{a}\right)$ [25], 其中 a 为拟合系数, 因此最终的相对透射系数表达式变为

$$t_{\text{relative}} = \frac{t_{\text{antireflective}}}{t_{\text{normal}}} \cdot \text{sinc}\left(\frac{f - f_{\text{cutoff}}}{a}\right). \quad (10)$$

2.3 增透结构的参数设计

如图 1(c) 所示, 微棱锥增透结构拥有两个独立的参数: 结构周期 Λ 和结构底角 θ (或者结构高度 h), 以下本文以 GaP 晶体为例研究这两个参数对增透效果的影响.

首先通过 RCWA 模拟获得底角为 45° , 周期分别为 40, 50, 60 和 70 μm 的增透结构的相对增透系数, 同时通过改变拟合系数获得的 EMT 法模拟曲线, 如图 3 所示. 通过比较两种方法的计算结果, 可以看出 EMT 方法得到的曲线总体趋势与 RCWA 相一致, 证明 EMT 法不仅计算速度快, 而且经过适当的修正也能够获得较精确的模拟结果, EMT 方法得到的曲线平坦是由于拟合项中的 sinc 函数所致, 而实际透射曲线变化跟此函数关系有一定偏差. 此外, 从图中可以看到随着增透结构周期的增大, 由于衍射损耗造成的影响, 所能获得增透的 THz 频谱越来越窄, 并逐渐向低频移动 ((9) 式). 由此, 可以根据不同发射晶体所辐射的 THz 波的频谱峰值和范围, 选择相应的增透结构周期, 以获得更高效的增透效果.

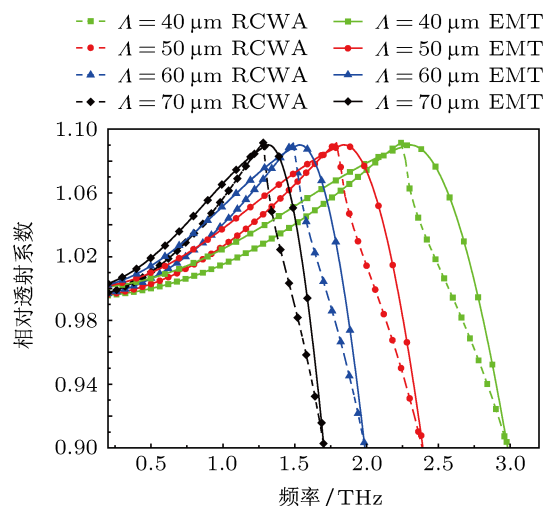


图 3 用 RCWA 和 EMT 分别计算底角为 $\theta = 45^\circ$, 不同周期微金字塔形结构的相对透射系数

如图 1(c) 所示, 增透结构另一个重要的参数是底角 θ (或者高度 h), 它对增透效果的影响如图 4 所示. 可以看到随着底角的增大, 棱锥结构的增透效果更加明显. 其原因也是显而易见的: 根据前面提到的传输矩阵理论, 结构分割出来的相邻的两个小薄层的有效折射率差会随着增透结构底角 θ 的增大而逐渐变小, 这相当于进一步减缓了发射

晶体到空气的折射率突变,从而提高了输出面的透射效率.

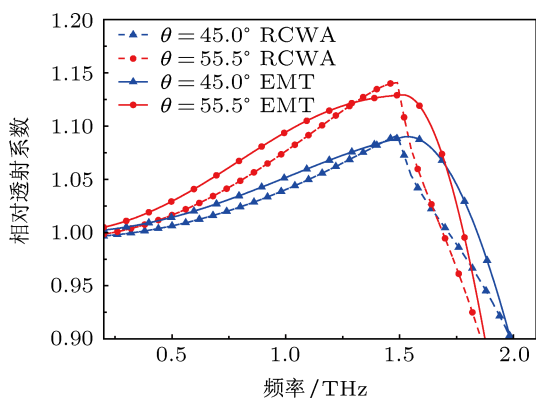


图4 用RCWA和EMT计算得到的周期为60 μm,底角θ分别为45°和55.5°的增透结构的相对透射系数

2.4 增透结构的加工

飞刀切削加工技术 (fly-cutting)^[27] 是微机械加工的一种. 利用单点金刚石刀尖的高速旋转刻划发射晶体表面, 同时以惰性气体原子轰击法柔化晶体表面, 经过多次加工刻线成型, 实际加工可达到预

期效果.

3 实验装置及结果

实验使用典型的8-f型基于光学整理的THz-TDS系统, 结构如图5所示^[28], 其中飞秒激光源为实验室自制的钛宝石飞秒激光器, 其中心波长805 nm, 重复频率100.6 MHz, 脉冲宽度50 fs, 平均功率350 mW, 所用THz发射晶体为ZnTe晶体, 利用基于ZnTe晶体的电光探测方法测量THz波的时域信号.

实验选用的晶体为厚度为1 mm的<110>切向GaP晶体, 由于晶体厚度相对较小, 无法忽略增透结构的厚度, 因此增透结构薄层被刻划掉的晶体成分所产生的THz波的影响也是无法忽略的, 这样会对实验增透效果有所影响. 所以实验中GaP并没有像文献[29]中那样作为发射晶体使用, 而是置于8-f THz-TDS系统的THz波焦点处(位置如图5中虚线框所示), 通过对比测量有无增透结构的THz波的透射谱线以得到微棱锥结构的增透效果.

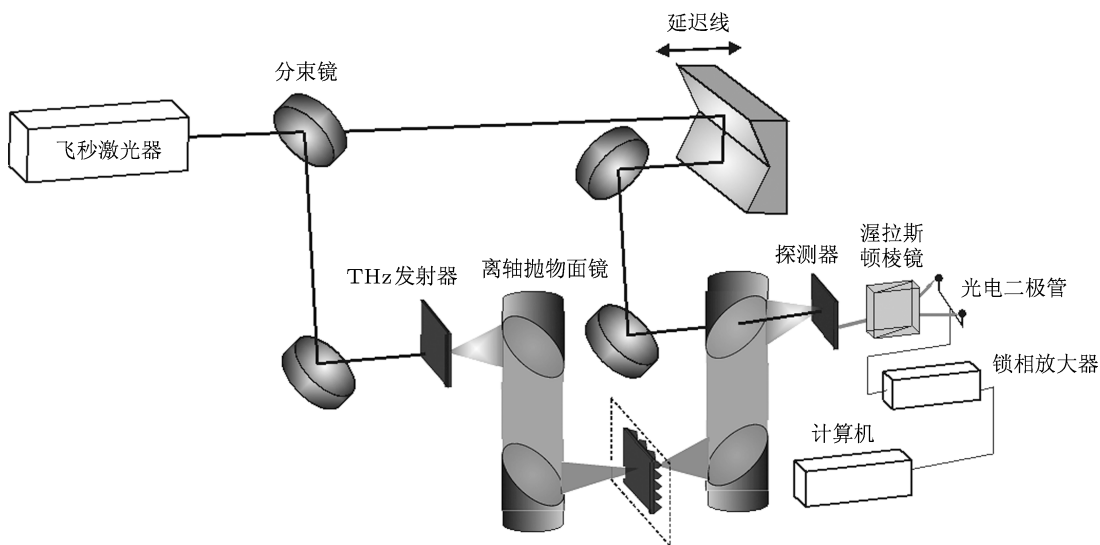


图5 实验系统示意图

3.1 微棱锥结构的周期对增透效果的影响

图6所示为刻有底角为45°、周期分别为70 μm和40 μm的增透结构的晶体的THz波透射谱线与未被加工晶体的THz波透射谱线的对比. 图6(a)中, 周期为70 μm的增透结构的透射谱振幅相对无增透结构晶体的透射谱在低频部分有一定的增大, 而在1.5 THz后开始衰减, 这与其理论的截

止频率1.29 THz基本相符. 从图3的理论曲线来看, 要在系统产生的频谱范围内的高频产生增透效果, 需要较小的周期. 而从图6(b)中可以看出, 周期为40 μm的增透结构的晶体透射谱在更高的频率上相对未被加工过的晶体的透射振幅有增强效果, 直到2.3 THz附近才开始衰减. 从EMT理论分析可知, 40 μm的增透结构的截止频率约为2.26 THz, 与实验也相符.

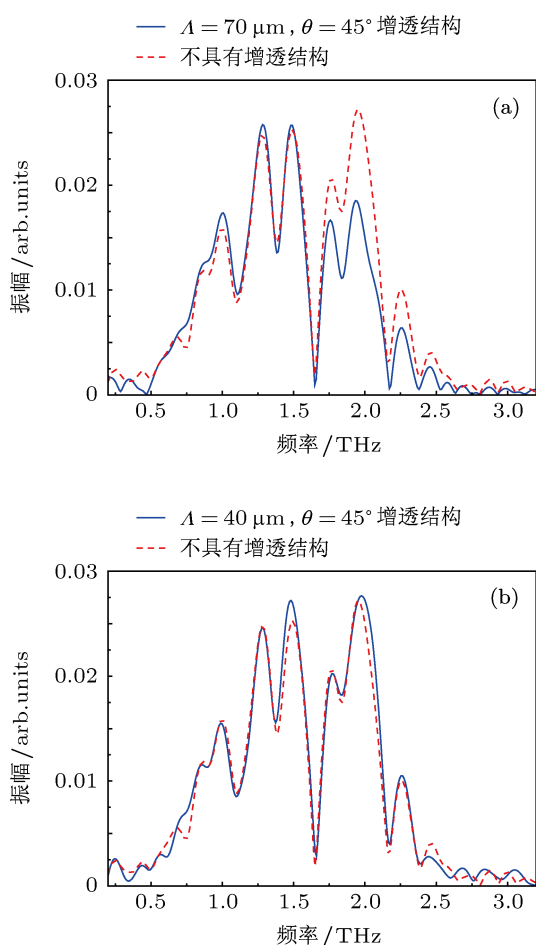


图6 (a) 刻有底角为 45° , 周期为 $70\ \mu\text{m}$ 增透结构的晶体与无增透结构的晶体的 THz 透射谱的对比; (b) 刻有底角为 45° , 周期为 $40\ \mu\text{m}$ 增透结构的晶体与无增透结构的晶体的 THz 透射谱的对比

3.2 微棱锥结构的底角对增透效果的影响

图6中增透结构加工过程中使用的刀尖角度 γ 为 90° , 即微棱锥增透结构的底角为 45° . 根据图4的理论结果可知, 如果刻划底角更大的结构或者说增加微棱锥结构的渐变就会使得增透效果进一步加强. 图7对比采用 90° 和 69° 的飞刀在晶体表面刻划出周期为 $60\ \mu\text{m}$ 、底角分别为 45° 和 55.5° 的

棱锥增透结构. 两种刀具加工后的增透结构对 THz 波的透射谱相比参考谱线在 $1.7\ \text{THz}$ 附近开始出现衰减 (对比截止频率 $1.51\ \text{THz}$), 并且显而易见, 69° 刀具所加工的增透结构的增透效果明显高于 90° 刀具所加工的结构. 此外, 该周期下微棱锥结构的增透效果比图6中的结构更为明显的原因是该微棱锥结构加工效果更好.

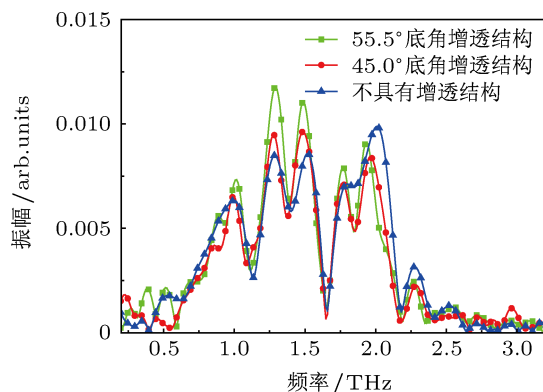


图7 周期为 $60\ \mu\text{m}$ 、使用不同角度刀尖加工的增透结构对 THz 波的透射谱

4 结论

采用有效介质理论和严格耦合波理论方法对比设计了用于增强光学整流产生 THz 波的发射晶体端面耦合输出的亚波长微棱锥结构, 结果表明微棱锥结构的周期越小, 增透的频谱越宽, 且其峰值越向高频, 增加微棱锥的底角能够进一步加强增透效果. 采用飞刀切削方法在 GaP 晶体上加工了不同参数的微棱锥结构, 通过 THz-TDS 系统研究了其增透效果, 与理论符合得很好. 因此本文的结果对在其他晶体上进行增透微结构的设计具有指导意义. 在实验中 GaP 晶体作为被动器件测试具有很好的增透效果, 其作为发射晶体在 THz 波产生过程中的作用将作为后续工作的研究内容.

- [1] Jacobsen R H, Mittleman D M, Nuss M C 1996 *Opt. Lett.* **21** 2011
- [2] Shen Y C, Lo T, Taday P F, Cole B E, Tribe W R, Kemp M C 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 241116
- [3] Ikeda T, Matsushita A, Tatsuno M, Minami Y, Yamaguchi M, Yamamoto K, Tani M, Hangyo M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 034105
- [4] Jeon T I, Grischkowsky D 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 3032
- [5] Markelz A G, Roitberg A, Heilweil E J 2000 *Chem. Phys. Lett.* **320** 42
- [6] Yoneyama H, Yamashita M, Kasai S, Kawase K, Ito H, Ouchi T 2008 *Opt. Commun.* **281** 1909
- [7] Chen D P, Xing C F, Zhang Z, Zhang C L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 024202 (in Chinese) [陈大鹏, 邢春飞, 张峥, 张存林 2012 物理学报 **61** 024202]
- [8] Li Z Y, Yao J Q, Xu D G, Zhong K, Wang J L, Bing P B 2011 *Chin. Phys. B* **20** 054207
- [9] Federici J, Moeller L 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 111101
- [10] Hoffmann M C, Fülöp J A 2011 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44** 083001
- [11] Vodopyanov K L 2006 *Opt. Express* **14** 2263
- [12] Zhang T Y, Cao J C 2004 *Chin. Phys.* **13** 1742

- [13] Beck M, Schäfer H, Klatt G, Demsar J, Winnerl S, Helm M, Dekorsy T 2010 *Opt. Express* **18** 9251
- [14] Blanchard F, Razzari L, Bandulet H C, Sharma G, Morandotti R, Kieffer J C, Ozaki T, Reid M, Tiedje H F, Haugen H K, Hegmann F A 2007 *Opt. Express* **15** 13212
- [15] Stepanov A G, Bonacina L, Chekalin S V, Wolf J P 2008 *Opt. Lett.* **33** 2497
- [16] Hebling J, Yeh K L, Hoffmann M C, Bartal B, Nelson K A 2008 *J. Opt. Soc. Am. B* **25** B6
- [17] Gatesman A J, Waldman J, Ji M, Musante C, Yngvesson S 2000 *IEEE Microw. Guided Wave Lett.* **10** 264
- [18] Hosako I 2005 *Appl. Opt.* **44** 3769
- [19] Southwell W H 1991 *J. Opt. Soc. Am. A* **8** 549
- [20] Brückner C, Käsebier T, Pradarutti B, Riehemann S, Notni G, Kley E B, Tünnermann A 2009 *Opt. Express* **17** 3063
- [21] Kuroo S I, Oyama S, Shiraiishi K, Sasho H, Fukushima K 2010 *Appl. Opt.* **49** 2806
- [22] Escoubas L, Simon J J, Loli M, Berginc G, Flory F, Giovannini H 2003 *Opt. Commun.* **226** 81
- [23] Moharam M G, Gaylord T K 1981 *J. Opt. Soc. Am.* **71** 811
- [24] Raguin D H, Morris G M 1993 *Appl. Opt.* **32** 1154
- [25] Han P, Chen Y W, Zhang X C 2010 *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **16** 338
- [26] Saleh B E A, Teich M C 2007 *Fundamentals of Photonics* (2nd Ed.) (New Jersey: Wiley Interscience), p246–260
- [27] Fang F Z, Liu Y C 2004 *J. Micromech. Microeng.* **14** 984
- [28] Wang C L, Tian Z, Xing Q R, Gu J Q, Liu F, Hu M L, Chai L, Wang Q Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7857 (in Chinese) [王昌雷, 田震, 邢岐荣, 谷建强, 刘丰, 胡明列, 柴路, 王清月 2010 物理学报 **59** 7857]
- [29] Liu F, Hu X K, Li Y F, Xing Q R, Hu M L, Chai L, Wang Q Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 040703 (in Chinese) [刘丰, 胡晓堃, 栗岩峰, 邢岐荣, 胡明列, 柴路, 王清月 2012 物理学报 **61** 040703]

Theoretical design and experiment study of sub-wavelength antireflective micropyramid structures on THz emitters*

Hu Xiao-Kun¹⁾ Li Jiang¹⁾ Li Xian¹⁾ Chen Yun-Hui²⁾ Li Yan-Feng^{1)†}
Chai Lu¹⁾ Wang Qing-Yue¹⁾

1) (Ultrafast Laser Laboratory, College of Precision Instrument and Optoelectronics Engineering, Key Laboratory of Optoelectronic Information Technology (Ministry of Education), Tianjin University, Tianjin 300072, China)

2) (State Key Laboratory of Precision Measuring Technology and Instruments, College of Precision Instrument and Optoelectronics Engineering, Centre of MicroNano Manufacturing Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

(Received 24 September 2012; revised manuscript received 1 November 2012)

Abstract

Nonlinear crystals commonly used in optical rectification for the generation of terahertz (THz) radiation have high refractive indices in the THz frequency range, and thus Fresnel reflection at the crystal-air output surface causes a large part of the generated THz wave to be reflected back into the crystals. Here we report on the design and experimental study of sub-wavelength antireflective micropyramid structures on GaP crystals. Effective medium theory is used to demonstrate the enhancement of THz output by the antireflective micropyramid structures, and further to design the antireflective structures at different frequencies. Several micropyramid structures are fabricated on the output surface of GaP crystals by micromachining, and the correlation between the THz output enhancement and the structure parameters is verified. The agreement between theory and experiment shows that our methodology is applicable to other THz emitters based on optical rectification.

Keywords: THz wave, optical rectification, sub-wavelength antireflective micropyramid structures, micromachining

PACS: 07.57.Hm, 42.79.Wc, 87.85.Va

DOI: 10.7498/aps.62.060701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61077083, 61027013, 61078028, 60838004), the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2007CB310408, 2010CB327604, 2011CB808101), and NSFC-RFBR Program (Grant No. 61211120193).

† Corresponding author. E-mail: yanfengli@tju.edu.cn