

任意槽形金属光栅衍射特性的矢量理论分析与计算

樊叔维

(中国科学院长春光学精密机械与物理研究所应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130021)

摘要: 根据麦克斯韦基本方程组, 推导了描述任意槽形金属光栅衍射特性的矢量理论分析方法——严格的耦合波方法, 该方法可用于分析具有任意面型函数的金属光栅在 TE, TM 两种偏振模式的平面波入射下的光栅衍射特性。文中讨论了光栅结构参数, 入射波参数对衍射效率的影响以及金属光栅的损耗。

关键词: 衍射; 金属光栅; 耦合波理论

中图分类号: O436.1 文献标识码: A

1 引言

衍射光栅作为一种光学元件, 它的应用已不仅仅局限于光谱学领域, 亦广泛应用于计量, 集成光学, 信息处理及光通信等领域^[1]。金属表面浮雕光栅由于其高的反射波衍射效率引起了研究人员对其衍射特性研究的极大兴趣。在研究金属光栅衍射的实际问题中, 一般均假设金属的导电率为无穷大^[2-5], 这种假设在长波段可以给出较为准确的解, 而在短波段, 如可见光及更短波段, 金属的导电率很差, 因此这种假设在短波段是不成立的。耦合波方法是二十世纪80年代提出的一种严格的矢量理论分析方法^[6-8], 它在分析过程中考虑了光栅材料的实际的电磁特性, 它将光栅区域内的电磁场作空间谐波展开, 通过不同区域边界的电磁场边界匹配条件得到一组无限维耦合微分方程组, 采用一定的数学方法求得光栅电磁场衍射问题的精确解。它已被广泛应用于光栅结构的分析与设计中。

2 理论分析

求解光栅衍射场的矢量理论的一般方法就是求解在入射区域, 光栅区域以及透射区域内满足电磁场边界条件的麦克斯韦基本方程组的解。利用耦合波方法求解任意面型函数的光栅的电磁场衍射边值问题时, 它主要包括三个步骤: 1) 将光栅

分为许多薄层, 所分层数应足够近似光栅实际的面型函数; 2) 每个光栅薄层内的电磁场通过严格的耦合波方法确定; 3) 在不同区域边界面上及光栅薄层之间运用电磁场边界匹配条件, 通过一定的数学方法求得各级衍射波的振幅及衍射效率。

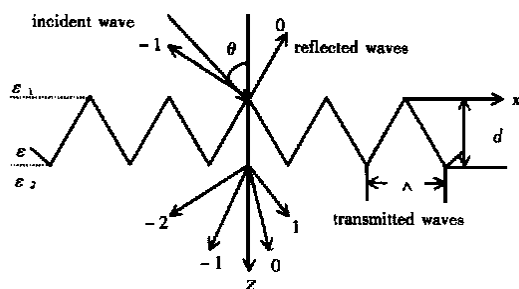


Fig. 1 Geometry for the binary phase grating diffraction

本文分析的任意面型函数金属浮雕光栅的衍射问题如图1所示。一平面波以入射角 θ 入射, 则光栅将产生各级反射波及透射波, 如图1所示。反射区域及透射区域的介电常数分别为 ϵ_1, ϵ_2 , 光栅区域包含了两种介质的周期分布, 其介电常数为一周函数, 故可将介电常数用傅立叶级数展开:

$$\begin{aligned} \epsilon(x, z) &= \epsilon(x + \Lambda, z) \\ &= \sum_{i=-\infty}^{\infty} \epsilon_i(z) \exp(j \frac{2\pi i}{\Lambda} x), \end{aligned}$$

式中 $\epsilon_i(z)$ 为光栅区域内介电常数的第 i 级傅立叶系数, 它为光栅深度的函数。

将光栅分为 N 层薄层, 设第 n 层光栅的深度为 d_n 。则每一个薄层光栅的介电常数为一周函数, 可用傅立叶级数展开为:

$$\epsilon_n(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \epsilon_{n,i} \exp(j \frac{2\pi i}{\Lambda} x)$$

式中 $\epsilon_{n,i}$ 为第 n 薄层光栅介电常数的傅立叶级数的第 i 级系数, 它是一个常数。

2.1 TE 偏振

对于 TE 偏振, 电场矢量平行于刻槽方向, 入射平面波的波长为 λ , 在入射区及透射区, 介电常数为常数, 可以直接求得在这两个区域内的电场分布为:

$$E_1 = \sum_{i=-\infty}^{\infty} R_i \exp[-j(k_{0x}x - k_{0z}z)] + \sum_{i=-\infty}^{\infty} T_i \exp\{-j[k_{ix}x - k_{iz}i(z-d)]\} \quad (1)$$

$$E_3 = \sum_{i=-\infty}^{\infty} T_i \exp\{-j[k_{ix}x - k_{iz}i(z-d)]\} \quad (2)$$

其中: $k_{0x} = k_0 \epsilon_1 \sin\theta$; $k_{0z} = k_0 \epsilon_1 \cos\theta$; $k_0 = 2\pi/\lambda$; λ 为自由空间光波长。

$k_i = k_{0x} - ik_0 N \Lambda$; k_i 为第 i 级衍射波矢的 x 分量。

$$k_{1zi} =$$

$$\begin{cases} \left[\left(k_0 \epsilon_1 \right)^2 - k_i^2 \right]^{1/2} & k_0 \epsilon_1 > k_i \\ -j \left[k_i^2 - \left(k_0 \epsilon_1 \right)^2 \right]^{1/2} & k_0 \epsilon_1 < k_i \end{cases}; k_{1zi} \text{ 为}$$

入射区域第 i 级衍射波矢的 z 分量。 R_i 为第 i 级反射衍射波的振幅;

$$k_{3zi} =$$

$$\begin{cases} \left[\left(k_0 \epsilon_3 \right)^2 - k_i^2 \right]^{1/2} & k_0 \epsilon_3 > k_i \\ -j \left[k_i^2 - \left(k_0 \epsilon_3 \right)^2 \right]^{1/2} & k_0 \epsilon_3 < k_i \end{cases}; k_{3zi} \text{ 为}$$

透射区域第 i 级衍射波矢的 z 分量。 T_i 为第 i 级透射衍射波的振幅;

在光栅区域, 第 n 薄层电场, 磁场可以表示为空间谐波的傅立叶级数展开:

$$E_{n,2y} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} V_{n,i}(z) \exp(-jk_{ix}) \quad (3)$$

$V_{n,i}(z)$ 为第 n 层第 i 级电场空间谐波的振幅;

$$H_{n,2x} = -j \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon_0}{\mu_0} U_{n,i}(z) \exp(-jk_{ix})$$

(4)

$U_{n,i}(z)$ 为第 n 层第 i 级磁场空间谐波的振幅;

在第 n 层光栅区域, 场振幅必须满足麦克斯韦基本方程组:

$$\frac{\partial E_{n,2y}}{\partial z} = j\omega\mu_0 H_{n,2x}$$

$$\frac{\partial H_{n,2x}}{\partial z} = j\omega\epsilon_0 E_{n,2x} + \frac{\partial H_{n,2z}}{\partial x} \quad (5)$$

将(3), (4)式代入(5)经过一系列数学推导, 得到第 n 层光栅区域的一组耦合波方程:

$$\frac{\partial^2 V_{n,i}}{\partial z^2} = k_i V_{n,i} - k_0^2 \sum_{i=-\infty}^{\infty} \epsilon_{n,i-n} V_{n,n} \quad (6)$$

该耦合波方程采用本征值法求解如下:

$$V_{n,i}(z) =$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} w_{n,lm} \{ c_{n,m1} \exp[-k_0 q_{n,m}(z - D_n + d_n)] + c_{n,m2} \exp[k_0 q_{n,m}(z - D_n)] \}$$

$$U_{n,i}(z) =$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} s_{n,lm} \{ -c_{n,m1} \exp[-k_0 q_{n,m}(z - D_n + d_n)] + c_{n,m2} \exp[k_0 q_{n,m}(z - D_n)] \}$$

$$D_n - d_n < z < D_n, D_n = \sum_{l=1}^n d_l \quad (7)$$

上式中, $q_{n,m}$ 为本征值; $w_{n,lm}$ 本征值 $q_{n,m}$ 对应的本征矢量的第 l 个分量; $s_{n,lm} = w_{n,lm} q_{n,m}$; $c_{n,m1}$, $c_{n,m2}$ 为待定系数, 由边界条件来确定如下:

在入射区域与第 1 薄层光栅的边界面上, 有:

$$\delta_0 + R_i = V_{1,i}(0) \quad (8)$$

$$j[k_{0z} - k_{1zi} R_i] = -k_0 U_{1,i}(0)$$

在第 N 薄层光栅与透射区域的边界面上, 有:

$$T_i = V_{N,i}(d) \quad (9)$$

$$jk_{3zi} T_i = -k_0 U_{N,i}(d)$$

在第 n 薄层光栅与第 $n-1$ 薄层光栅的边界面上有:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} w_{n-1,lm} [c_{n-1,m1} \exp(-k_0 q_{n-1,m} d_n) + c_{n-1,m2}] =$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} w_{n,lm} [c_{n,m1} + c_{n,m2} \exp(-k_0 q_{n,m} d_n)]$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} s_{n-1,lm} [c_{n-1,m1} \exp(-k_0 q_{n-1,m} d_n) - c_{n-1,m2}] =$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} s_{n,lm} [c_{n,m1} - c_{n,m2} \exp(-k_0 q_{n,m} d_n)] \quad (10)$$

由方程组(8)~(10)可以求得 $c_{n,m1}$, $c_{n,m2}$, 及 R_i , T_i 。则反射区及透射区的各级衍射波的衍射效率为:

$$eff_{ri} = |R_i|^2 Re[k_{1zi}/(k_0 \epsilon_1^{1/2} \cos\theta)];$$

$$eff_{ti} = |T_i|^2 Re[k_{3zi}/(k_0 \epsilon_3^{1/2} \cos\theta)] \quad (11)$$

考虑金属光栅存在损耗 $loss$, 即有:

$$loss = 1 - \sum_{i=-\infty}^{\infty} (eff_{ri} + eff_{ti}) \quad (12)$$

直接由方程组(8)~(10)求解 R_i , T_i , 不会有任何数值不稳定问题出现。但是, 当光栅区域分层很多, 即 N 很大时, 实际计算时, 计算时间将非常长, 可以采用透射矩阵方法辅以一定的数学变换

来提高计算效率,避免出现数值不稳定问题。

对于 TM 偏振,可进行类似处理,具体求解步骤,不再赘述。

3 数值计算

应用严格的矢量理论方法——耦合波方法,入射光为 TE 偏振光,分别计算了不同面型函数光栅,在不同的入射光波参数及光栅参数情况下,各级衍射光的衍射效率的变化。限于篇幅,本文计算的光栅的面型函数分别为矩形,锯齿型。光栅材料的特性可由其复折射率或复介电常数表示,复折射率(或复介电常数)为波长的函数,因此,即使对同一种材料及结构的光栅,在不同波长光波照射下的衍射场的分布是不同的。本文计算的光栅表面镀金,入射波波长分别为可见光波 $0.5\mu\text{m}$ 及红外光波 $1.0\mu\text{m}$ 。

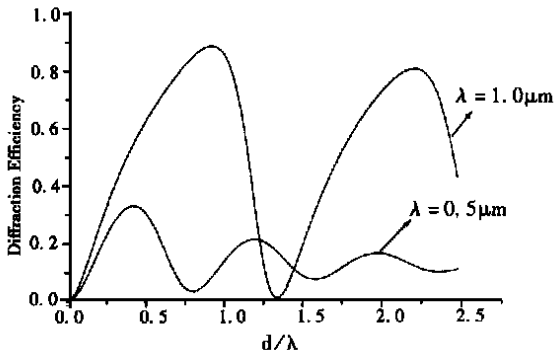


Fig. 2 Diffraction efficiency as a function of grating depth for a metallic rectangular-groove surface-relief grating. ($\theta = 30$ degree, $\Lambda = \lambda$)

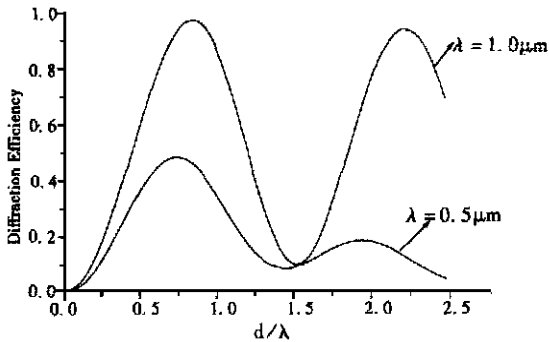


Fig. 3 Diffraction efficiency as a function of grating depth for a metallic sawtooth-groove surface-relief grating. ($\theta = 30$ degree, $\Lambda = \lambda$)

图 2,图 3 给出了矩形及锯齿型槽光栅在不同波长的入射光照射下,光栅深度对+1 级反射波衍射效率的影响。从图中可以发现,对不同的槽形,衍射效率随光栅深度的变化是相似的,均呈有规律的周期性变化,并且,当波长较短时衍射效率随着光栅深度的增加呈较快的振荡衰减趋势;同时,衍射效率变化的周期与入射波的波长相关,波长增加,周期增大。

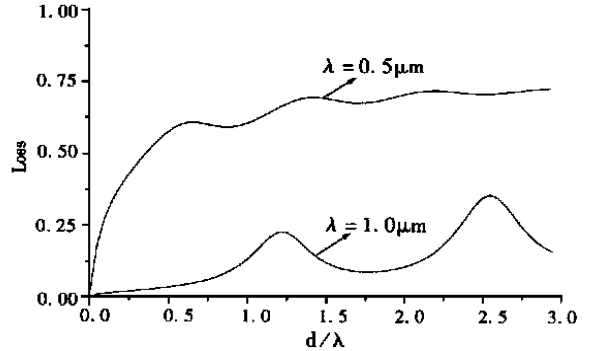


Fig. 4 Loss as a function of grating depth for a metallic rectangular-groove surface-relief grating. ($\theta = 30$ degree, $\Lambda = \lambda$)

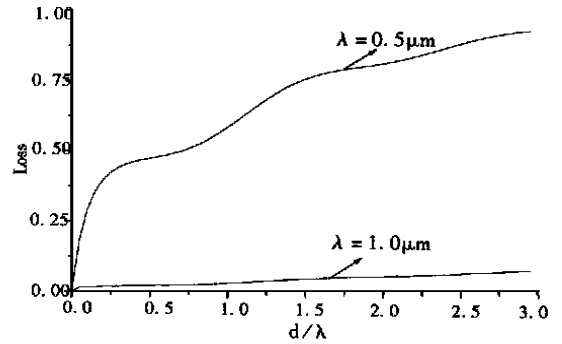


Fig. 5 Loss as a function of grating depth for a metallic sawtooth-groove surface-relief grating. ($\theta = 30$ degree, $\Lambda = \lambda$)

图 4,图 5 给出了矩形及锯齿形槽光栅在不同波长的入射光照射下,光栅损耗的变化曲线。从图中可以发现,对不同的槽形,光栅损耗的变化也是相似的。当入射波波长较短时,金属的导电率极差,因此此时光栅存在较高的损耗;当入射波波长较长时,金属的导电率很高,接近完纯导体,此时光栅的损耗较小。

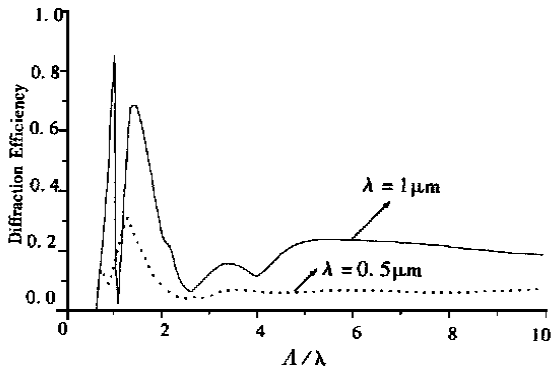


Fig. 6 Diffraction efficiency as a function of grating period for metallic rectangular-groove surface-relief grating. ($\theta = 30$ degree, $d = \lambda$)

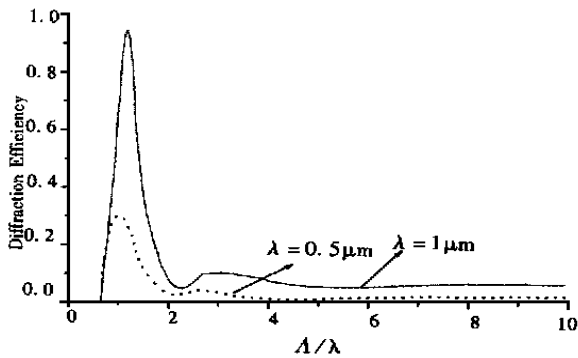


Fig. 7 Diffraction efficiency as a function of grating period for metallic rectangular-groove surface-relief grating. ($\theta = 30$ degree, $d = 0.5 \lambda$)

图 6, 图 7 给出了矩形及锯齿型槽光栅在不同波长的入射光照射下, 光栅周期对+1 级反射波衍射效率的影响。从图中可以发现, 对不同的槽形, 衍射效率随光栅周期的变化是相似的, 而衍射效率随光栅周期的变化又与光栅深度的大小密切相关, 当光栅深度较小时, 衍射效率在光栅周期大于 5 倍的波长时即趋于稳定值; 而当光栅深度较大时, 衍射效率在光栅周期大于 10 倍的波长时才逐渐趋于稳定值。

4 结 论

采用严格的耦合波理论, 可以简便有效地求解不同面型函数的金属光栅衍射特性的问题。利用本文给出严格的耦合波方法, 计算中从未发生过数值不稳定问题, 表明该方法是一种稳定, 有效的矢量理论分析方法。通过数值计算分析可知, 入射光波参数, 光栅的结构参数等对光栅衍射特性及光栅的损耗产生不同的影响。

参考文献:

- [1] Petit R. Electromagnetic Theory of Gratings[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1980.
- [2] Maestre D, et al. Diffraction by an infinite conductivity lamellar grating[J]. Opt. Commun, 1972, (5): 90-93.
- [3] Heath J W, et al. Perfectly blazed reflection gratings with rectangular grooves[J]. J. Opt. Soc. Am., 1978, 68(5): 1211-1217.
- [4] Whitman G M, et al. Rigorous theory of scattering by perfectly conducting periodic surfaces with trapezoidal height profile, TE and TM polarization[J]. J. Opt. Soc. Am., 1980, 70: 1495-1503.
- [5] Petit R, et al. Form of the electromagnetic field in the groove region of a perfectly conducting echelette grating[J]. J. Opt. Soc. Am., 1988, 73(6): 963-965.
- [6] Moharam M G, et al. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction[J]. J. Opt. Soc. Am., 1981, 71(7): 811-818.
- [7] Moharam M G, et al. Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings[J]. J. Opt. Soc. Am., 1982, 72(10): 1385-1392.
- [8] Moharam M G, et al. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach[J]. J. Opt. Soc. Am., 1995, 12(5): 1077-1085.

Vector theory analysis and numerical calculation for any shape profile metallic gratings

FAN Shu-wei

(Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics,
Chinese Academy of Sciences, Changchun 130021, China)

Abstract: Based on the Maxwell equation and the boundary continuity of electromagnetic field, the vector theory analysis method – the rigorous coupled-wave analysis technique for describing the diffraction of electromagnetic waves by any shape profile metallic gratings for both TE and TM polarization is presented. The effects of grating structure parameters and incidence wave parameter on diffraction efficiency are investigated. The loss of grating is also given.

Key words: diffraction; metallic grating; coupled-wave theory

作者简介: 樊叔维(1968-), 女, 山东鱼台人。1989年毕业于西安交通大学, 1997年在该校获得博士学位。现为中国科学院长春光机所博士后。

消 息

《光学 精密工程》从1996年始被中国科学引文数据库收录为来源期刊。凡列入中国科学引文数据库的来源期刊从总体上来说核心期刊中的核心部分。

本刊被中国科学期刊全文数据库第一批收录为自然科学核心期刊。

为了实现科技期刊编辑、出版发行工作的电子化, 推进科技信息交流的网络化进程, 本刊现已入网“万方数据(ChinaInfo)系统科技期刊群”, 所以, 向本刊投稿并录用的稿件文章, 将一律由编辑部统一纳入万方数据系统全文上网(网址: <http://www.chinainfo.gov.cn/periodical>)。凡有不同意见, 请另投它刊。本刊所付稿酬包含刊物内容上因特网提供信息服务报酬, 不再另付。

读者可上因特网进入万方数据系统查询检索本刊内容, 也欢迎各界朋友通过万方数据系统向我刊提出宝贵意见、建议、或征订本刊。

中国科学引文数据库利用该库的数据资源已开发出两种产品, 即《中国科学引文索引》(光盘版)和(印刷版)。欲购者请与中科院文献情报中心中国科学院引文数据库联系。

电话: (010) 62564354 传真: (010) 62566846

《光学 精密工程》编辑部公告

为适应我国信息化建设需要, 扩大作者学术交流渠道, 本刊已加入《中国学术期刊(光盘版)》和“中国期刊网”。作者著作权使用费与本刊稿酬一次性给付。如作者不同意将文章编入该数据库, 请在来稿时声明, 本刊将做适当处理。

特此公告!

《光学 精密工程》编辑部
2000年4月

X 射线光学系统的光线追迹

王惠云¹, 吕丽军²

(1. 上海大学物理系, 上海 201800; 2. 上海大学精密机械系, 上海 201800)

摘要: 阐述了硬 X 射线光学系统的光线追迹过程, 处理的光学系统可包含任意数目的镜子、晶体及光阑, 镜子或晶体的面形可以各种各样, 它们的排列方式可为共主面或相互正交。根据劳厄衍射方程的矢量形式计算光线经对称或非对称晶体衍射后的方向。我们应用 C 语言编写了光线追迹程序, 它不仅可以得到光路中任意位置像面上光线的点列图分布, 而用可以计算晶体的摇摆曲线。最后作为例子, 我们用此程序计算了一条同步辐射 X 射线光束线系统的成像。

关键词: X 射线; 光线追迹; 晶体的摇摆曲线

中图分类号: TH703 **文献标识码:** A

1 引言

同步辐射光束线的设计一般是根据光束线的工作波长范围、性能要求和经验, 初步选择可能的单色仪、前置和后置光学系统, 并对其进行像差分析; 然后应用光线追迹对光学系统进行精确的成像模拟和性能估算; 最后综合考虑性能、造价和复杂性等因素决定光束线系统^[1,2]。由于光束线中的光学元件和机械真空系统往往都比较昂贵, 因此建立光线追迹软件对光束线系统的设计显得尤为重要。

目前, 国际上许多同步辐射中心都建立了功能强、效率高的光线追迹手段, 像 SHADOW^[3], RAY^[4] 等。在国内, 关于软 X 射线光学系统的光线追迹方面已做了比较系统的工作^[5], 但在硬 X 射线光学系统光线追迹的研究工作方面见报道的还不多。

在硬 X 射线波段, 大多采用晶体作为分光元件, 光束的准直、聚焦用反射镜。本文主要介绍由多块光学晶体、反射镜等组成的光学系统的光线追迹过程; 光学元件的面形可为平面、球面、抛物面、超环面、椭球面或各种柱面; 相邻两块光学元件的排列方式可为共主平面(成“Z”形或“U”形排列)或相互正交; 另外, 还可以在光路中任何位置加入光阑。程序不仅可以输出光线打在任何一个

光学元件表面和光路中任意位置处像面的光线坐标分布, 而且还可以输出晶体的摇摆曲线图。

2 光线追迹过程

2.1 单块光学元件的光线追迹

我们选定的坐标系如图 1 所示。X₀Y₀Z₀ 是源点坐标系。XYZ 是光学元件坐标系, 其中 Z 轴垂直于光学元件表面, 原点 O 位于光学元件的顶点, XY 过 O 点并垂直于 Z 轴。XZ 是像坐标平面, 它垂直于主光线。

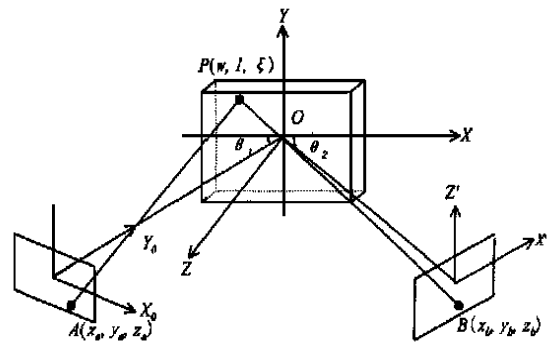


Fig. 1 X₀Y₀Z₀, XYZ and XZ are coordinate systems on the source, optical element and image plane, respectively