

文章编号 1004-924X(2009)05-0990-11

宽波段金属光栅设计中闪耀波长对光栅异常的补偿效应

张善文^{1,2}, 巴音贺希格¹

(1. 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033;

2. 中国科学院 研究生院, 北京 100049)

摘要:给出了适用性强、工艺上易于实现的单闪耀面宽波段金属光栅的设计方法。基于 Rayleigh 异常和共振异常两种不同的光栅异常机理,分别讨论了它们出现的条件;在光栅电磁场理论的基础上,数值分析了 TE 波、TM 波闪耀波长的分布规律,得到了闪耀波长与光栅异常和光栅光谱范围的关系;提出了用 TM 波第一闪耀波长补偿 Rayleigh 异常或共振异常,实现制作宽波段金属光栅的设计思想。同时,指出了 TM 波第一闪耀波长对 Rayleigh 异常补偿效应,只是它对共振异常补偿效应的极限情况。给出了将补偿效应应用于紫外可见分光光度计和红外分光光度计中不同刻线密度宽波段金属光栅的设计实例。实验表明,使用补偿效应法无论在理论设计上还是在工艺实现上都要优于传统的宽波段金属光栅设计方法,可得用于各个波段的宽波段金属光栅衍射效率都在 40% 以上。

关键词:宽波段光栅;金属光栅;补偿效应;闪耀波长;Rayleigh 异常;共振异常

中图分类号:O436.1; O438.2 **文献标识码:**A

Compensating effect of blazed wavelength to grating anomalies in design of broadband metallic diffraction gratings

ZHANG Shan-wen^{1,2}, Bayanheshig¹

(1. *Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, 130033, China;*

2. *Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

Abstract: A new design method with good applicability and easy to implement in technology is presented for broadband metallic diffraction gratings with single blaze surfaces. In consideration of the principles of two types of grating anomalies, Rayleigh type and resonance type, the occurrence conditions of the grating anomalies are discussed. On the basis of electromagnetic theory of gratings, the blaze characters of diffraction efficiency both for TE and TM modes are numerically analyzed, and the relationships among the grating anomalies, the spectrum bands of gratings and the blazed wavelengths is obtained. An idea of designing diffraction gratings is proposed to compensate the Rayleigh anomaly or resonance anomaly with the first blazed wavelength of TM mode. It is pointed out that the compensating effect of the first blazed wavelength of TM mode to Rayleigh anomaly is only the limitation case to the resonance anomaly. The design examples of broadband metallic gratings with different groove

收稿日期:2009-03-10; **修订日期:**2009-04-10.

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 60478043);“十一五”国家科技支撑计划重大项目(No. 2006BAK03A02);国家创新方法工作专项项目(No. 2008IM040700);国家重大科研装备研制项目(No. ZBYZ2008-1);中国科学院重大科研装备研制项目(No. YZ200804);吉林省科技发展计划资助项目(No. 20070523; No. 20086013)

densities applied in UV-visible and infrared spectrometers are given. Experiments indicate that the diffraction efficiency of the broadband metallic grating has been over 40% in different spectral bands, which shows that the compensating effect method is better than traditional design methods of broadband metallic gratings, whether in theory design or technology process.

Key words: broadband grating; metal grating; compensating effect; blazed wavelength; Rayleigh anomaly; resonance anomaly

1 引言

在光谱仪器中,尤其在色散型分光光度计中^[1],要求衍射光栅具有较宽的光谱范围。然而,常用的刻划光栅一般为三角槽形,只有一个闪耀面(对应一个闪耀波长),光谱范围相对较窄,因此,一台仪器往往要配备多块光栅,使仪器结构变得复杂。上世纪70年代末,国内外光栅制作机构通过光栅刻划机刻制出一种可以代替多块光栅的中红外(刻线密度在100 l/mm以下)宽光谱范围的光栅^[2-4],即所谓宽波段中红外金属光栅。它有两个定向角亦即有两个定向面,能够实现双波长闪耀,习惯上称之为双闪耀光栅。虽然双闪耀光栅具有较好的光谱性能,但是其制作难度大,工艺上不易实现。这主要与光栅刻划原理有关。制作光栅时,尖劈形金刚石光栅刻划刀对镀于玻璃或金属基底上的铝膜施加作用力,挤压铝膜使其发生塑性形变,从而形成周期性三角槽形光栅。刻划刀的定向角决定了光栅的闪耀角,在刻划刀定向角一侧的叫作定向面。于是,制作双闪耀光栅就有三方面的困难:第一,要将光栅刻划刀研磨出两个定向角,即决定光栅闪耀面形状的刻划刀定向面为折面,而且只有两个定向面的长度及两个定向角的选择适当,才能既使光谱两端的能量“闪耀”,又不使中间段的能量过低,即实现双闪耀和宽波段。实际上,要精确地做到这些基本不可能。第二,光栅槽形的形成过程并不完全是塑性形变的结果,同时还伴有非线性弹性形变,它使得光栅的闪耀角与刻划刀的定向角之间产生偏差。因此,制作闪耀光栅(单定向面)有一个要领,即在安装光栅刻划刀时,需要在由光栅方程求得的理论闪耀角基础上加一定的经验值来确定刻划刀的安装角(即定向角)以补偿上述偏差。然而,具有双定向面的光栅刻划刀安装角的选取异常困难,面对的不确定因素太多。第三,刻划双闪耀光栅需

要控制的参数较多,包括两个闪耀角,两个闪耀面长度以及槽顶角等5个参数,这些参数同时满足设计要求的工艺重复性极低。

数值计算结果表明,双闪耀光栅的衍射效率对上述各参数的变化非常敏感,这些参数只能在很窄的范围内选取,否则,衍射效率就无法满足要求。本文根据数值计算对光栅槽形参数进行优化设计,并制作了90.9 l/mm的中红外双闪耀金属光栅。但是,其衍射效率与理论设计达到较好吻合实属不易。相对于常用单闪耀面光栅,双闪耀光栅的研制对金刚石刻划刀的磨制以及刻划参数的选取等要求都更加苛刻,尤其对于刻线密度较大的紫外可见光栅而言,通过由双定向面达到宽光谱范围在工艺上是行不通的。

鉴于此,本文旨在给出适用性强、工艺上易于实现的单闪耀面宽波段金属光栅设计新方法。基于Rayleigh异常和共振异常两种不同的光栅异常机理,分别讨论了常用的一级Littrow设置下它们出现的条件,在光栅电磁场理论^[5-7]的基础上,数值分析了TE波、TM波闪耀波长的分布规律,发现了闪耀波长与光栅异常和光栅光谱范围的关系,提出了用TM波第一闪耀波长补偿Rayleigh异常或共振异常,实现制作宽波段光栅的设计思想,并指出TM波第一闪耀波长对共振异常的补偿效应为普适情况,对Rayleigh异常的补偿效应^[8]则可以看出是它的极限情况。利用这种补偿效应设计了从紫外到中远红外不同刻线密度的宽波段光栅,并将补偿效应推广到分光光度计常用的一级偏Littrow设置,从而实现了由单定向面光栅实现宽光谱范围的目的,其意义在于不仅可以大大降低光栅工艺上的难度,提高制作过程的重复性,而且衍射效率还会更高。

2 两类光栅异常的分析

光栅的衍射效率随入射角或波长变化的曲

线在某些位置发生突变的现象在光栅理论中被称为异常现象。光栅异常会在待观测的光谱范围内掺杂进“虚假”的峰和谷,这些峰和谷很容易与正常谱线混淆,使得可利用的光谱范围变窄,不利于光谱分析。

异常现象有两类,第一类叫 Rayleigh 异常(Rayleigh anomaly)^[9],它们发生在入射波长或入射角的某些临界点上,常被称为 Rayleigh 波长或 Rayleigh 入射角。在这些条件下,某些衍射波所对应的衍射角刚好为 90° ,它们发生掠射,意味着它们处于存在和消失(更准确地说,应该是传播波和倏逝波)的临界状态,不妨称之为 Rayleigh 边界波。由于传播波携带能量,而倏逝波不携带能量,在经过临界点时,所有传播波都要调节各自所携带的能量,以保持能量守恒。此时,衍射效率曲线表现为在 Rayleigh 边界波处发生导数跃变,常出现局部的、光谱范围很窄的峰和谷。Rayleigh 异常依赖于偏振模式,TE 波的异常在光栅槽深小于一个波长时并不明显^[10];TM 波无论光栅槽深或浅, Rayleigh 异常都比较明显,而且它们的位置可以由光栅方程确定。下面根据光栅方程

$$\sin \theta_m = \sin \theta_i + m \frac{\lambda}{d}, \quad (1)$$

确定 TM 波 Rayleigh 异常的位置。其中, θ_m 为衍射角, θ_i 为入射角, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 为衍射级次, λ 为入射波长, d 为光栅常数, λ/d 称为“归一化波长”。根据式(1)得到任意级次 Littrow 设置下的光栅方程

$$2 \sin \theta_i = -m_\epsilon \lambda / d, \quad (2)$$

m_ϵ 代表任意 Littrow 级次,通过式(2)可以求出光栅的闪耀角,在 -1 级 Littrow 级设置下, $m_\epsilon = -1$, 闪耀角 $\alpha = \arcsin^{-1} \left(\frac{\lambda}{2d} \right)$ 。Rayleigh 异常出现时,发生掠射的某一衍射波成为边界波,其衍射角 $\theta_m = \pm 90^\circ$, 将此时的式(2)带入式(1),得到 Rayleigh 异常位置,

$$\lambda_{Rm} = \frac{\lambda}{d} \Big|_{\theta_m = \pm 90^\circ} = \pm \frac{2}{2m - m_\epsilon}. \quad (3)$$

式中“+”和“-”分别对应 $m \geq 0$ 和 $m < 0$, 两种情况具有相同的结果,故只取“+”。以闪耀角 5° 、槽顶角为 90° 、刻线密度为 100 l/mm 的光栅为例,当 $m = 1, 2, 3, \dots$ 时,第一、第二、第三等各级 Rayleigh 异常在归一化波长 λ/d 轴上分布于 $0.6667, 0.4, 0.2857 \dots$ 等位置,如图 1 所示。

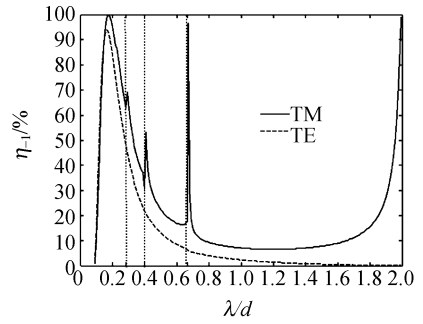


图 1 各级 Rayleigh 异常的位置分布

Fig. 1 Position distribution of Rayleigh anomalies

第二类异常叫共振异常(resonance anomaly)^[11],它是由于入射波激发起某种能够沿光栅表面传播的表面波而形成的,这种激发被称之为传播波与表面波的耦合,在耦合发生时,入射波的能量一部分被转移到表面波中去,导致光栅各衍射级次能量重新分配,由此造成衍射效率在相位匹配点附近的急剧起伏。金属光栅能够被激发出表面等离子体波,而且只能被 TM 偏振波激发,所需要的相位匹配条件是:

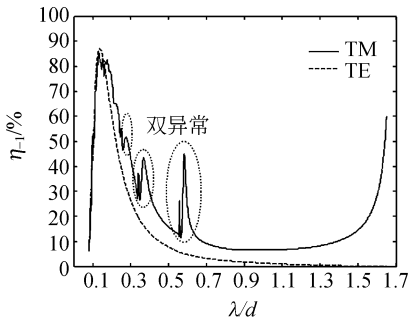
$$\sqrt{\frac{\epsilon_1(\omega)}{1 + \epsilon_1(\omega)}} = \sin \theta_i + m \frac{\lambda}{d}, \quad (4)$$

其中, $\epsilon_1(\omega) = n^2 - \kappa^2$, n 和 κ 分别为金属复折射率的实部和虚部。令 $\Omega = \sqrt{\frac{\epsilon_1(\omega)}{1 + \epsilon_1(\omega)}}$, 根据式(2)得到任意级次 Littrow 设置下共振异常的位置

$$\lambda_{rm} = \frac{\lambda}{d} \Big|_{\theta_m = \pm \arcsin^{-1} \Omega} = \pm \frac{2\Omega}{2m - m_\epsilon}. \quad (5)$$

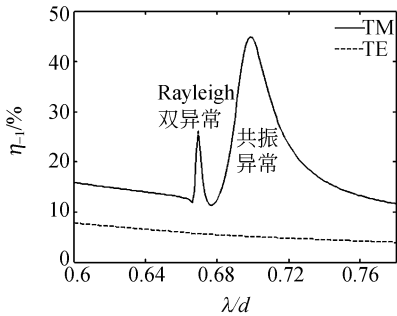
根据入射波长不同,金属光栅可分为完全电导率光栅(perfectly conducting gratings,理想导体光栅)和有限电导率光栅(finite conducting gratings,非理想导体光栅)两种。Au、Ag、Cu 和 Al 等金属,对 $4 \mu\text{m}$ 以上的波长其复折射率虚部与实部比值较大,反射率接近于 1,属于完全电导率金属;对 $4 \mu\text{m}$ 以下的波长其复折射率虚部与实部比值较小,入射能量被部分吸收,属于有限电导率金属^[5]。对于有限电导率光栅来说, Ω 略 > 1 , 则从式(3)和式(5)可以看出表面等离子体波激发的共振异常处于稍大于 Rayleigh 异常的位置。对于完全电导率光栅来说, $\epsilon_1(\omega) \gg 1$, Ω 趋近于 1, 则式(5)可以退化为式(3),此时从位置分布上来

看, Rayleigh 异常的位置可以看成是表面等离子体波激发共振异常的极限位置。



(a) 各级次双异常的分布

(a) Distribution of all double anomalies



(b) (a)图中幅度最大异常的放大

(b) Enlargement of the strongest anomaly in (a)

图 2 各级次双异常的位置分布

Fig. 2 Position distribution of double anomalies

有限电导率光栅情况与完全电导率光栅有所不同,不仅有 Rayleigh 异常出现,共振异常也会同时出现,不妨称此情况为双异常。如图 2 所示,以闪耀角为 5°、槽顶角为 90°、刻线密度为 1 200 l/mm 的镀铝光栅为例,当 $m = 1, 2, 3, \dots$ 时,第一共振异常,第二共振异常,第三共振异常等各级共振异常的位置分布于相应的 Rayleigh 异常附近,如 0.666 7, 0.400 0, 0.285 7... 等位置附近。其中,(a)图为各级次双异常的分布情况,椭圆型虚线内为双异常的部分,(b)图为(a)图中幅度最大异常的放大。可以看出,在各级次双异常中共振异常的幅度明显大于 Rayleigh 异常的幅度,且无论是哪种异常,第一异常幅度都大于其他级次的异常。

虽然式(5)可以确定共振异常的位置,但是,

它只是近似表达式,与完全电导率情况下的 Rayleigh 异常不同,实际上共振异常的位置还与光栅槽深有关。对于具有确定周期的光栅,随着光栅槽深的变化,共振异常的位置也将发生明显的移动。如图 3 所示,以刻线密度为 1 200 l/mm、槽顶角为 90°,闪耀 α 角分别为 5°和 15°的两种镀铝光栅为例,共振异常位置从 0.676 8 偏移到 0.693 6, Rayleigh 异常却仍在 0.666 7 处。

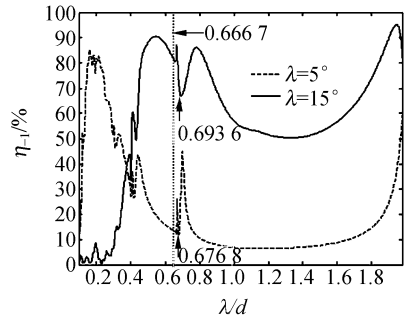


图 3 共振异常位置随光栅闪耀角变化(即槽深变化)而移动

Fig. 3 Positions of resonance anomalies varied with the variation of blaze angles (groove depths)

3 闪耀波长的分布规律

光栅的闪耀是指把大部分入射光的能量集中到少数几个(通常只有一个)非 0 衍射级次上的现象,此时对应的波长称为闪耀波长。

3.1 TE 波闪耀波长位置的确定

TE 波衍射效率曲线比较规则且简单,大体呈余弦形状。由数值计算可知,对于浅槽形光栅(槽深 $< \lambda$),闪耀波长只有一个。但是,其位置的确定并不严格,位于稍 $> \lambda_{Rm}$ 的位置,即,

$$\lambda_b > \lambda_{Rm}, \tag{6}$$

当式(3)取“+”时,令式(3)和式(2)相等,可得,

$$\sin \theta_{Rm} = \frac{-m_\epsilon}{2m - m_\epsilon}, \tag{7}$$

其中, θ_{Rm} 为 Rayleigh 异常对应的 Rayleigh 衍射角。现取 $m_\epsilon = -1, m > 0$, 当 m 取不同值时,对应不同 Rayleigh 衍射角和 Rayleigh 异常,位置见表 1。因此,可通过式(6)和表中的 Rayleigh 异常位置确定 TE 波的闪耀波长位置。

表 1 各 Rayleigh 角与 Rayleigh 异常位置的对应关系

Tab. 1 Correspondence of Rayleigh angles with positions of Rayleigh anomalies

m	1	2	3	4	5	6
θ_{Rm}	19.47°	11.54°	8.21°	6.38°	5.22°	4.41°
λ_{Rm}	0.667	0.400	0.286	0.222	0.182	0.154

具有不同闪耀角的光栅其闪耀波长的位置分布如图 4 所示。实线和虚线分别代表完全电导率光栅和有限电导率光栅衍射效率, $\alpha = 5^\circ$ 处于 θ_{R5} 和 θ_{R6} 之间, 则闪耀波长位于稍 $> \lambda_{R6} \approx 0.154$ 的位置(竖直虚线, 下同); $\alpha = 10^\circ$ 处于 θ_{R2} 和 θ_{R3} 之间, 闪耀波长则位于稍 $> \lambda_{R3} \approx 0.286$ 的位置; 当 $\alpha = 15^\circ$ 处于 θ_{R1} 和 θ_{R2} 之间时, 闪耀波长则位于稍 $> \lambda_{R2} = 0.400$ 的位置; 当 $\alpha = 25^\circ > \theta_{R1}$ 时, 闪耀波长位于稍 $> \lambda_{R1} \approx 0.667$ 的位置。这里需要特别说明的是, $\alpha = 19.47^\circ$ (图中近似为 20°) 与第一个 Rayleigh 衍射角相等时, 它的闪耀波处于稍 $> (\lambda_{R2} + \lambda_{R1})/2 \approx 0.534$ 的位置。

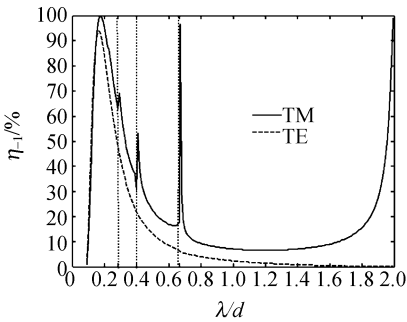


图 4 TE 波闪耀波长位置分布

Fig. 4 Position distribution of blaze wavelengths of TE mode

综上所述, 随着光栅闪耀角的增大, TE 波闪耀波长逐渐向长波方向移动, 最后位于 $\lambda_{R1} \approx 0.667$ 附近。它的位置分布规律如下: 当 $\theta_{Rm} < \alpha < \theta_{R(m+1)}$ 时, 闪耀波长位于稍大于 $\lambda_{R(m+1)}$ 的位置; 当 $\alpha = \theta_{R1} \approx 19.47^\circ$ 时, 闪耀波长处于稍大于 $(\lambda_{R2} + \lambda_{R1})/2 \approx 0.534$ 的位置, 且在 λ_{R1} 处也具有较高的衍射效率。另外, 有限电导率光栅与完全电导率光栅的 TE 波闪耀波长基本处于同一位置, 只是前者峰值的大小比后者略小。

3.2 TM 波闪耀波长位置的确定

对于完全电导率闪耀光栅, TM 波通常有两个闪耀波长, 下面通过 Maréchal-Stroke 定理^[12]、

互易定理的推论^[13]确定它们的位置。

根据 Maréchal-Stroke 定理, 当一束 TM 平面波垂直入射到一完全电导率三角形光栅的一个斜面上时, 如果另一斜面的长度是半波长的整数倍, 且这个光栅的槽顶角为 90° , 那么, 这时光栅第 m 级衍射波的衍射效率是 100%。由光栅方程可以确定 -1 级 Littrow 设置下 TM 波第一闪耀波长的位置为,

$$\lambda_{b1} = \lambda/d = 2 \sin \theta_i, \quad (8)$$

式中, λ_{b1} 为 TM 波第一闪耀波长的位置, θ_i 等于光栅闪耀角 α 。需要指出的是, Maréchal-Stroke 定理仅对于 TM 波数学上才严格成立, 对于 TE 波不成立。

根据互易定理的推论, 当一束 TM 平面波在 -1 级 Littrow 设置下, 以 $90^\circ - \theta_i$ 的入射角入射到与 Maréchal-Stroke 定理相同的光栅表面上时, -1 级衍射效率为 100%, 由这一推论可以确定 TM 波第二闪耀波长的位置为,

$$\lambda_{b2} = 2 \cos \theta_i. \quad (9)$$

对于有限电导率光栅, 它的两个闪耀波长位置也在完全电导率光栅相对应闪耀波长附近。如图 5 所示, 左右两条虚线代表两个闪耀波长在归一化波长轴上的位置, 它们分别位于 $\lambda_{b1} = 2 \sin 15^\circ \approx 0.347$, $\lambda_{b2} = 2 \cos 15^\circ \approx 1.970$, 中间的虚线代表光栅异常位置。

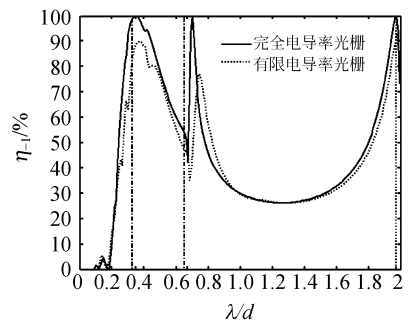


图 5 TM 波两个闪耀波长的分布

Fig. 5 Distribution of two blaze wavelengths of TM mode

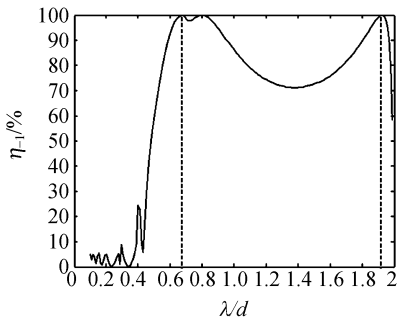
4 闪耀波长对光栅异常的补偿效应

在光谱学里, TE 波和 TM 波有不同的异常表现, 对于常用三角槽形光栅, TE 波不会出现异常, 对光栅异常有贡献的主要是 TM 波的异常。

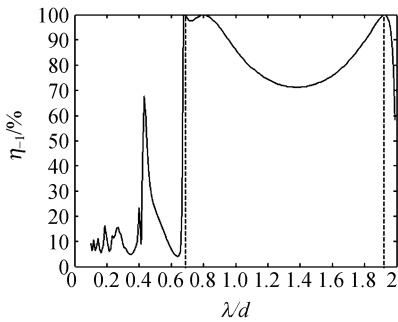
因此,要想减弱甚至消除 TM 波的异常,即补偿 TM 波的异常达到增加光谱范围的目的,不仅要确定光栅 TM 波异常的位置,更重要的是要确定其大小以及影响其大小的因素。下面就完全电导率光栅和有限电导率光栅分别展开讨论。

4.1 完全电导率光栅闪耀波长对 Rayleigh 异常的补偿效应

对于完全电导率光栅,式(3)只能确定 Rayleigh 异常的位置,却不能预测其大小,异常大小用异常幅度来衡量,即用异常的峰和谷所对应衍射效率的差值来衡量。图 1 和图 6 给出了 Rayleigh 异常大小随光栅闪耀角变化的情况。



(a) 光栅闪耀角为 19.47°时的 Rayleigh 异常
(a) Amplitude of Rayleigh anomaly when blaze angle is 19.47°



(b) 光栅闪耀角为 70.53°时的 Rayleigh 异常
(b) Amplitude of Rayleigh anomaly when blaze angle is 70.53°

图 6 Rayleigh 异常幅度随光栅闪耀角的变化

Fig. 6 Amplitudes of Rayleigh anomalies vary with blaze angles

以闪耀角等于 5°为例,如图 1 所示, TM 波第一闪耀波长位于 $\lambda_{b1} = 0.174$ 的垂直虚线处,各级 Rayleigh 异常与闪耀波长在 λ/d 轴上位置的差值 $\lambda_{Rm} - \lambda_{b1}$ 及 Rayleigh 异常强度大小关系见表

2, $\lambda_{Rm} - \lambda_{b1}$ 从 0.111 增加到 0.493, Rayleigh 异常幅度从约 5% 上升到约 80%, 显然,离 TM 波第一闪耀波长最远的第一 Rayleigh 异常幅度最大。

表 2 各 Rayleigh 异常变化幅度

Tab. 2 Variation of amplitudes of Rayleigh anomalies

Rayleigh 异常级次	$m=3$	$m=2$	$m=1$
λ_{Rm}	0.285	0.4	0.667
$\lambda_{Rm} - \lambda_{b1}$	0.111	0.226	0.493
异常幅度	约 5%	约 20%	约 80%

增大光栅闪耀角, TM 波第一闪耀波长位置向长波方向移动, 当它与第一 Rayleigh 异常位置重合时, $\lambda_{R1} - \lambda_{b1} = 0$, 联立式(8)和式(3)可得光栅闪耀角 $\alpha = 19.47^\circ$, 衍射效率曲线如图 6(a) 所示, 此时第一 Rayleigh 异常幅度下降到 0, 即第一 Rayleigh 异常被消除。同理, 将 TM 波第二闪耀波长与第一 Rayleigh 异常位置重合, $\lambda_{R1} - \lambda_{b2} = 0$, 联立式(9)和式(3)可得光栅闪耀角 $\alpha = 70.53^\circ$, 衍射效率曲线如图 6(b) 所示。可以看出, 第一, 第一 Rayleigh 异常仍然存在, TM 波第二闪耀波长不能将其补偿; 第二, 光谱范围明显窄于图 6(a); 第三, $\lambda/d > 0.667$ 光谱范围对应的衍射效率曲线与补偿效应发生时完全相同, 这正是互易定理的结果。

由此可见, 第一 Rayleigh 异常和 TM 波第一闪耀波长在 λ/d 轴上的差值, 即 $\lambda_{R1} - \lambda_{b1}$ 的大小决定异常的大小, 两者差值越小, 异常幅度越小, 反之则越大; 当两者差值为零时, 第一 Rayleigh 异常消失, 而在此位置的 TM 波却依然闪耀。这是因为将幅度最大的第一 Rayleigh 异常完全消除的条件恰恰是获得 TM 波第一闪耀波长的条件, 不妨将这种现象称为闪耀波长对光栅异常的补偿效应。结合图 4 中 TE 波闪耀波长的分布规律, 补偿效应发生时 TE 波闪耀波长也在 Rayleigh 异常附近, 具有较高的衍射效率, 因而 TE 波和 TM 波衍射效率的平均值(非偏振光的衍射效率)在较宽的波段范围内就具有较高的衍射效率, 这样就实现了光谱的宽波段。图 7 所示给出了补偿效应在光栅闪耀角为 19.47°、槽顶角为 90°、刻线密度为 100 l/mm 时完全电导率光栅设计中的应用, 其中 UN 代表非偏振光的衍射效率。

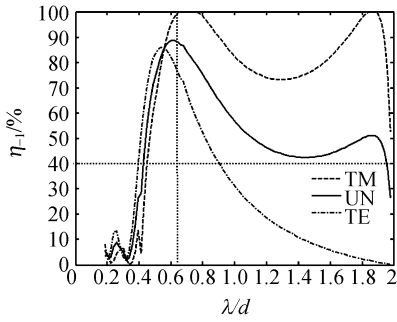


图 7 补偿效应使光谱范围变宽

Fig. 7 Broaden spectrum due to compensating effect

宽波段直接与光谱范围及其平均衍射效率相关,于是,考虑到光栅在光谱仪器中的应用要求,在此给出两个定义:第一,平均衍射效率 $\geq 40\%$ 的光谱范围称为有效光谱范围;第二,如果有效光谱范围内衍射效率曲线较为平滑且覆盖了光栅方程所确定光谱范围的 70%,则它被称为宽波段。从图 7 可以看出,光栅的平均衍射效率曲线有一定规律,它大体呈“M”形。据此可归纳出确定光栅槽型几何参数取值范围的简单方法,姑且称为“M”判断法,即对于形如“M”的平均衍射效率曲线(UN),如果它的 3 个最低点处衍射效率值都 $\geq 40\%$,且“M”曲线较为光滑并覆盖了光栅方程所确定光谱范围的 70%,则“M”对应的光谱范围就属于宽波段,本文就以“M”判断法作为标准来设计光栅。

4.2 有限电导率光栅闪耀波长对共振异常的补偿效应

有了完全电导率光栅补偿效应的研究基础,就不难对有限电导率光栅的补偿效应展开研究,并分析它们的共同点和不同点。相同点在于 Rayleigh 异常的位置可以看成是共振异常的极限位置,对 Rayleigh 异常的补偿效应可以看成是对共振异常补偿效应的特殊情况,当 TM 第一闪耀波长与共振异常位置重合时,即为对有限电导率光栅异常的补偿效应。不同点在于有限电导率光栅虽然存在双异常,但是共振异常的幅度要远大于 Rayleigh 异常,影响光谱宽度的因素主要是共振异常,而且式(5)只能近似地确定共振异常的位置,随着闪耀角的增大,即光栅槽深变深,共振异常的位置向长波方向移动。基于这种事实,为使

闪耀波长能够有效补偿共振异常展宽光谱宽度,采用逐渐增大闪耀角“追赶”共振异常的方法,这样,不管 TM 波第一闪耀波长和共振异常的具体位置分布怎样,只要两者位置重合,共振异常就得到补偿,光谱范围就会加宽。由于光谱是否为宽波段要看非偏振光的衍射效率,以下只给出非偏振光的衍射效率图。图 8 展示了刻线密度为 1 200 l/mm、槽顶角为 90° 的镀铝光栅的补偿效应情况,它是以波长为横坐标、闪耀角为纵坐标的非偏振光衍射效率等高线图,覆盖波段从紫外到近红外范围。图中左侧带有单向箭头的实线表示光栅第一 Rayleigh 异常位置,右侧带有单向箭头的实线表示第一共振异常位置随闪耀角的变化,带有双向箭头的实线经过点 1、2 和 3,对应“M”判断法中的三个衍射效率低点,这三点处衍射效率值为 40%,因而带有双向箭头的实线所覆盖的光谱范围衍射效率都在 40%以上,表明此波段范围内的光栅异常得到补偿。可以看出,幅度最大的第一 Rayleigh 异常的位置不随闪耀角变化,第一共振异常的位置随闪耀角的增大而偏向长波方向,当光栅闪耀角约为 20° 时,第一共振异常得到补偿,此时点 1 和 3 对应的波长分别为 $\lambda_1 \approx 0.32 \mu\text{m}$ 和 $\lambda_3 \approx 1.66 \mu\text{m}$,光谱宽度 $\lambda_3 - \lambda_1 \approx 1.34 \mu\text{m}$,约占整个光栅方程确定光谱范围的 80%以上,衍射效率都 $>40\%$ 。

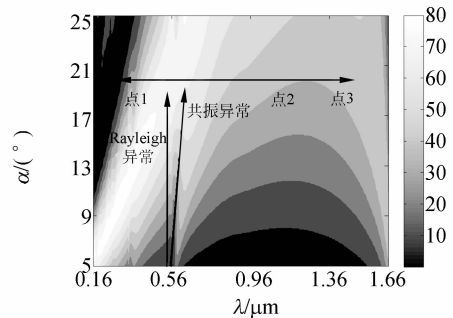
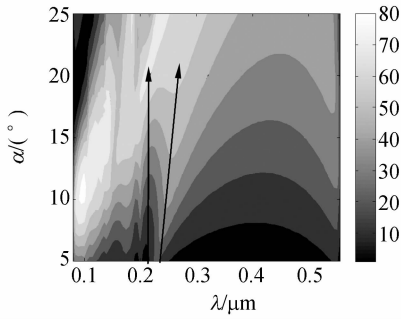


图 8 补偿效应的等高线图(1 200 l/mm)

Fig. 8 Contour of compensating effect(1 200 l/mm)

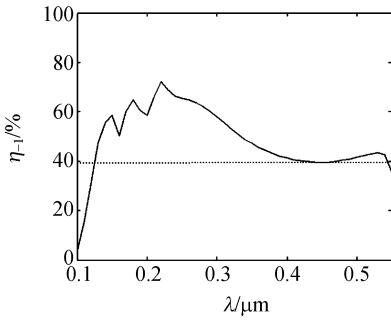
需要指出的是,对于高刻线密度的光栅,高级次的光栅异常作用会显现出来。以 3 600 l/mm、槽顶角为 90° 的镀铝光栅为例,如图 9 所示,利用等高线图(a)找到满足补偿效应的光栅闪耀角,由此计算光栅的衍射效率,如图(b)所

示。可以看出,此时第一共振异常得到补偿,但是,第二和第三共振异常却相对比较明显,短波端的衍射效率曲线有两处起伏,总的波段依然较宽。



(a) 补偿效应的等高线图

(a) Contour of compensating effect



(b) 衍射效率曲线

(b) Diffraction efficiency curve

图 9 补偿效应高级次共振异常(3 600 l/mm)

Fig. 9 Compensating effect and higher orders of resonance anomaly(3600 l/mm)

5 偏 Littrow 设置下的补偿效应

紫外可见分光光度计和红外分光光度计使用的光学系统通常为艾伯特—法斯基系统,即光栅在偏 Littrow 设置或近 Littrow 设置(偏离角很小)下使用,所以,有必要研究补偿效应在这一设置下的应用。如图 10 所示,入射波矢与某一级(设为 m_δ)衍射波矢之间的夹角为 δ ,叫做偏离角。在这里 δ 的正负号规定是:如果衍射波矢比入射波矢的相反方向更靠近 x 的正方向,则 $\delta > 0$;反之, $\delta < 0$ 。在图 10 中, $\delta > 0$ 。

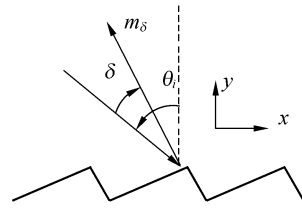


图 10 光栅的偏 Littrow 设置

Fig. 10 Off-Littrow mount for grating

如果给定偏离角 δ 、入射波长 λ 和光栅常数 d ,根据式(1)可将入射角表示为

$$\theta_i = \frac{\delta}{2} - \sin^{-1} \left[\frac{m_\delta \lambda}{2d \cos(\delta/2)} \right], \quad (10)$$

在此设置下共振异常同样发生,但是,由于 δ 的存在,共振异常位置会随它的大小的不同而发生移动。并将式(10)带入式(4),求解 λ/d 得

$$\lambda_{tm}' = \pm \frac{2 \cos^2(\delta/2) \left[(2m - m_\delta) \Omega - 2 \sin(\delta/2) \sqrt{m(m - m_\delta) + \frac{m_\delta^2 (\Omega^2 - 1)}{4 \cos^2(\delta/2)}} \right]}{4m(m - m_\delta) \cos^2(\delta/2) + m_\delta^2}, \quad (11)$$

式(11)是光栅异常位置分布的普遍表达式。对于完全电导率光栅而言, $\epsilon_1(\omega) \gg 1$,即 Ω 趋近于 1,

式(11)可以退化为

$$\lambda_{Rm}' = \pm \frac{2 \cos^2(\delta/2) [2m - m_\delta - 2 \sin(\delta/2) \sqrt{m(m - m_\delta)}]}{4m(m - m_\delta) \cos^2(\delta/2) + m_\delta^2}, \quad (12)$$

式(12)为偏 Littrow 设置下 Rayleigh 异常位置的分布,所以, Rayleigh 异常位置的分布可以看作是

共振异常位置分布的极限情况。在 -1 级偏 Littrow 设置下, $m_\delta = -1$,式(11)和式(12)变为

$$\lambda_{rm}' = \pm \frac{2\cos^2(\delta/2) \left[(2m+1)\Omega - 2\sin(\delta/2) \sqrt{m(m+1) + \frac{(\Omega^2-1)}{4\cos^2(\delta/2)}} \right]}{4m(m+1)\cos^2(\delta/2) + 1}, \quad (13)$$

和

$$\lambda_{Rm}' = \pm \frac{2\cos^2(\delta/2) [2m+1 - 2\sin(\delta/2) \sqrt{m(m+1)}]}{4m(m+1)\cos^2(\delta/2) + 1}, \quad (14)$$

(11)到式(14)取“+”时, $m > 0$; 取“-”时, $m < 0$ 。不同 m 值对应的光栅异常位置将随偏离角发生变化。

下面讨论不同偏离角设置下闪耀波长对光栅异常的补偿效应。适用于红外分光光度计的中红外宽波段金属光栅的设计实例参见文献[8], 现以可见红外分光光度计用 1 200 l/mm 镀铝光栅为例, 考察槽顶角为 95° 时偏离角 δ 对衍射效率的影响。由于考虑到金刚石刻划刀(对应槽顶角)的耐磨性^[14], 刀尖角取 95° , 计算结果如图 11 所示。

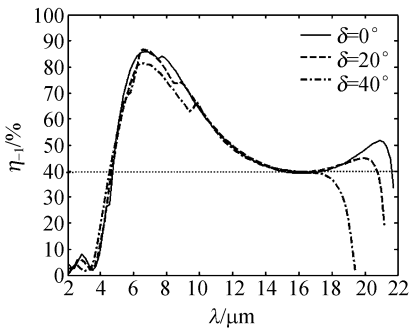


图 11 偏离角对光谱宽度的影响

Fig. 11 Effect of deflection angles on spectrum band

可以看出, 随着偏离角 δ 的增大, 有效光谱范围变窄, 衍射效率有所降低, 闪耀波长位置变化不明显。虽然光栅异常的位置略向长波端漂移, 但是, 漂移范围基本在闪耀波长附近, 即衍射效率较高的波段, 补偿效应仍然起作用。另外, 根据数值

计算可知, 槽顶角为 95° 时, 其衍射效率曲线形状与 90° 相似, 只是衍射效率曲线整体有微弱下降。

6 补偿效应法与传统法的比较

国内外于 20 世纪 70 年代末研制的所谓双闪耀光栅具有两个定向面, 如图 12 所示, 将其设计方法简称为简单传统法。它是指通过求解分别对应于闪耀角 α_1 和 α_2 的光栅方程确定双闪耀光栅的两个闪耀波长的设计方法。优化传统法是指基于简单传统法的设计思想, 采用严格光栅电磁场理论, 通过大量数值计算优化包括两个闪耀角 α_1 和 α_2 , 两个闪耀面的长度 l_1 和 l_2 的比值, 以及槽顶角 ϕ 5 个参数中 4 个独立变量的设计方法。

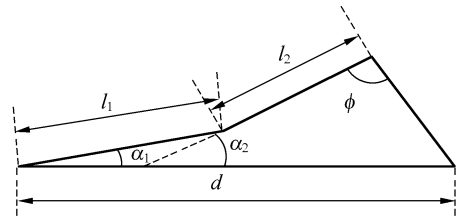


图 12 双闪耀光栅槽形剖面图

Fig. 12 Sectional view of double blaze grating groove

表 3 以光栅周期 d 为 $11 \mu\text{m}$ 的中红外金属光栅为例, 将简单传统法、优化传统法及补偿效应法的设计结果进行了比较。

表 3 简单传统法、优化传统法及补偿效应法设计参数的比较结果
Tab. 3 Comparison results of design parameters of simple traditional, optimized traditional and compensating effect methods

设计方法	设计依据	α_1 或其 取值范围	α_2 或其 取值范围	ϕ 或其 取值范围	$l_1 : l_2$ 或其 取值范围	有效光谱范围	有效光谱范围的 衍射效率
简单传统法	光栅方程	15.8°	72.7°	90°	1.44	不存在	不存在
优化传统法	数值结果	$17^\circ \sim 18^\circ$	$24^\circ \sim 25^\circ$	$90^\circ \sim 91^\circ$	1.24~1.78	$5 \sim 21.5 \mu\text{m}$	40~85%
补偿效应法	衍射特性分析	$19.3^\circ \sim 21.3^\circ$	不需考虑	$90^\circ \sim 95^\circ$	不需考虑	$5 \sim 21.5 \mu\text{m}$	40~88%

可以看出,无论是优化传统法还是补偿效应法,它们的光栅几何参数在表3中的相应取值范围内变化时,都能满足宽波段的条件。在数值分析基础上,在这些光栅几何参数的取值范围内选取了较优值,分别计算了3种设计方法的衍射效率曲线,如图13所示。其中,两个闪耀波长为 $6\ \mu\text{m}$ 和 $21\ \mu\text{m}$,简单传统法选取 $\alpha_1 = 15.8^\circ$ 、 $\alpha_2 = 72.7^\circ$ 、 $\phi = 90^\circ$ 、 $l_1 : l_2 = 1.44$;优化传统法选取 $\alpha_1 = 17.5^\circ$ 、 $\alpha_2 = 24.5^\circ$ 、 $\phi = 90^\circ$ 、 $l_1 : l_2 = 1.44$;补偿效应法选取 $\alpha = 19.47^\circ$ 、 $\phi = 90^\circ$ 。下面参照表3和图13,比较3种设计方法。

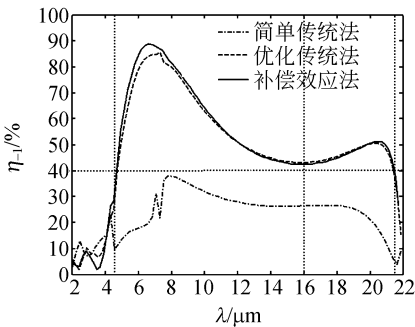


图13 3种设计方法的衍射效率比较

Fig. 13 Comparison of diffraction efficiency of three design methods

数值计算结果表明,利用简单传统法设计出的光栅,在整个光谱范围内衍射效率都偏低,这完全背离了设计初衷。很显然,根据简单传统法设计宽波段双闪耀光栅是不可行的。因此,本文主要从设计难度和工艺实现两个方面比较优化传统法和补偿效应法。第一,优化传统法有4个变量,它们相互制约共同影响光栅的衍射效率,需要同时优化4个参数才能够达到宽波段,优化过程复杂,计算量大。补偿效应法则只需满足TM波第一闪耀波长与Rayleigh异常位置重合这一条件

参考文献:

- [1] К. И. 塔拉索夫. 光谱仪器[M]. 北京:机械工业出版社,1985.
ТАРАСОВ К И. *Optical Spectrometer* [M]. Beijing: Mechanism Industry Press, 1985. (in Chinese)
- [2] MAKOTO I, MASARU I, TOSHIKI K, *et al.*. Infrared spectrophotometers using a double blazed grating [J]. *J. Spectrosc. Soc. Jpn.*, 1978, 27

即可,理论依据具体,方法简单。第二,对单闪耀面光栅而言,通过刻划工艺能够将闪耀角精确控制在 2° 以内,光栅槽顶角 ϕ 控制在 5° 以内,在工艺上实现补偿效应法的设计结果是很容易的。然而,优化传统法设计的是双闪耀面光栅,它需要控制4个参数,而且这些参数的取值范围很窄, α_1 、 α_2 和 ϕ 的取值范围都在 1° 以内, l_1 和 l_2 的比值在1.24~1.78之间,在工艺上同时精确控制这些参数几乎不可能,即在工艺上实现优化传统法的设计结果是不现实的。

7 结论

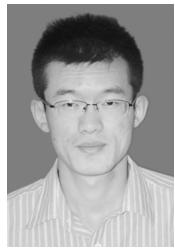
在衍射光栅电磁场理论数值计算的基础上,利用TM波第一闪耀波长对光栅异常的补偿效应,提出了一种宽波段单闪耀面金属光栅的设计方法,从紫外、可见到中远红外波段可以实现高衍射效率。在光栅设计中补偿效应法有如下规律:第一,可以定性分析光栅异常的大小,即TM波第一闪耀波长离异常位置越远,异常越大,反之则越小。第二,随着闪耀角的增大,闪耀波长向光栅异常方向移动,异常幅度减小,当TM波第一闪耀波长与光栅异常重合时,异常消失,即产生闪耀波长对光栅异常的补偿效应。第三、TM波第一闪耀波长对Rayleigh异常的补偿效应可以看成是对共振异常补偿效应的极限情况。第四,补偿效应法在偏Littrow设置下的效果也较好,偏离角的大小影响光谱宽度。第五,以光栅方程为依据的所谓双闪耀光栅设计方法不可行,简单传统法不能实现宽波段,优化传统法则在工艺上不易实现,而补偿效应法无论在理论设计上还是工艺实现上都便捷可靠。

(4), 304-310.

- [3] 庄夔,梁浩明,张庆英,等. 衍射光栅集光效率的研究[J]. *光学精密工程*, 1980(1): 74-84.
ZHUANG K, LIANG H M, ZHANG Q Y, *et al.*. The investigation of diffraction efficiency for grating [J]. *Opt. Precision Eng.*, 1980(1):74-84. (in Chinese)
- [4] 祝绍箕,邹海兴,包学诚,等. 衍射光栅[M]. 北京:机械工业出版社,1986.
ZHU S Q, ZOU H X, BAO X C, *et al.*. *Diffraction Gratings* [M]. Beijing: Mechanical Industry

- Press, 1986. (in Chinese)
- [5] PETIT R. *Electromagnetic Theory of Gratings* [M]. New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1980.
- [6] 张善文, 巴音贺希格. 衍射光栅积分理论中核函数的简化及其特性分析[J]. 物理学报, 2008, 57(6): 3486-3493.
ZHANG S W, BAYANHESHIG. The kernel function's simplification and its characteristic analysis in integral theory of diffraction gratings [J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(6): 3486-3493. (in Chinese)
- [7] 巴音贺希格, 朱洪春. 软 X 射线掠入射金属光栅闪耀特性的校正傅里叶展开微分法分析[J]. 光学精密工程, 2007, 15(1): 1-8.
BAYANHESHIG, ZHU H C. Analysis on blaze characteristics of grazing incidence metal grating in soft X-ray region by differential theory with correct Fourier expansion[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2007, 15(1): 1-8. (in Chinese)
- [8] ZHANG S W, BAYANHESHIG. Using the compensating effect for Rayleigh anomalies to design a type of broadband mid-IR grating [J]. *Opt. Express*, 2008, 16(10): 7049-7054.
- [9] RAYLEIGH. Note on the remarkable case of diffraction spectra described by Prof. Wood [J]. *Phil. Mag.*, 1907, 14: 60-65.
- [10] PALMER H C Jr. Parallel Diffraction Grating Anomalies[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1952, 42: 269-273.
- [11] HUTLEY M C. *Diffraction Grating* [M]. New York: Academic Press, 1980.
- [12] MARECHAL A, STROKE G W. Sur l'origine des effets de polarisation et de diffraction dans les réseaux optiques [J]. *C. R. Acad. Sci.*, 1959, 249: 2042-2044.
- [13] VINCENT P, NEVIERE M. The reciprocity theorem for corrugated surfaces used in conical diffraction mountings [J]. *Opt. Acta*, 1979, 26: 889-898.
- [14] 巴音贺希格, 高键翔, 齐向东. 机械刻划长焦距凹面金属光栅的研制[J]. 光学精密工程, 2006, 14(3): 391-395.
BAYANHESHIG, GAO J X, QI X D. Manufacturing for ruling concave metal grating with a long focal length [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(3): 391-395. (in Chinese)

作者简介:



张善文(1980—),男,吉林通化人,博士研究生,2004年于长春理工大学获学士学位,主要从事光栅积分理论及光栅刻划工艺研究。E-mail: zhshwen007@sina.com

导师简介:



巴音贺希格(1962—),男,内蒙古鄂尔多斯人,理学博士,研究员,博士生导师,1984年于内蒙古民族大学获学士学位,2001年于吉林大学获硕士学位,2004年于中科院研究生院获博士学位,主要从事光栅理论、光栅制作技术及光谱技术的研究。E-mail: bayin888@sina.com