

应用微分电磁理论研究软 X 光衍射光栅

袁利祥 范正修 殷功杰

(中国科学院上海光机所, 上海 201800)

提要 微分法是软 X 光波段唯一精确计算衍射光栅效率的电磁理论。应用这种理论成功地设计出带有位相光栅的软 X 光激光反射输出镜, 计算出可能的实验误差。对微分理论的数值结果和精度进行了分析和讨论。

关键词 软 X 光光栅, 微分理论, 软 X 激光输出镜

1 引 言

研究光栅效率的严格电磁理论主要可分三种: 模式法、积分法和微分法^[1], 其中每种理论的最佳使用与光波段有关。在软 X 光波段 λ/d 很小, λ 为波长, d 为光栅周期, 模式法和积分法将在数值处理上遇到麻烦, 而微分法则可推导出包含无穷个方程的耦合微分方程组。由于软 X 光光栅的特点, 高级次衍射项的耦合能量几乎为零, 因此可在精度要求范围下通过截去高阶次衍射项把包含无穷个方程的耦合微分方程组变为包含有限个方程的耦合微分方程组, 后者的数值处理可由 Numerov 算法^[3]和 Runge-Kutta 算法实现。微分法成为软 X 光波段唯一精确计算光栅衍射效率的理论。我们以前曾研究过软 X 光光栅的标量区近似理论^[3], 但它的适用范围很窄, 有三个条件: 1) 正入射或者近正入射; 2) 光栅深度 h 很小; 3) λ/d 很小, 在这三个条件下标量区近似理论可大致计算光栅的衍射效率。微分理论与近似理论相比它适用面更广, 微分法的计算结果也更为精确。微分法可处理的情况包括由正入射至掠入射, 由裸光栅至镀多层膜光栅, 甚至可处理周期性波导等。本文用微分法设计出采用位相光栅的软 X 光激光输出镜, 位相光栅作为软 X 光激光输出镜的研究国内外报道甚少, 计算出可能的实验误差, 对微分理论的数值结果和精度进行了分析和讨论。

2 微分法

如图 1 所示, 各已知变量定义如下: 设入射波矢 K_i 位于 XOY 平面内, 为简单起见, 入射波设为单色平面波, 电场 E 平行于 Z 坐标, 设 K_i 沿 X 方向的传播分量 $\alpha_0 = K \sin\theta$, 沿 Y 方向的传播分量 $\beta_0 = -K \cos\theta$ 。第 n 级衍射波波矢在 X 方向分量为: $\alpha_n = \alpha_0 + nL = K \sin\theta + nL$ 。其中 $L = 2\pi/d$, 第 n 级衍射波波矢在 Y 方向分量为: $\beta_n = (K^2 - \alpha_n^2)^{1/2}$ 。光栅方程表达为: $K \sin\theta_n = K \sin\theta$

+ nL, θ_n 为第 n 级衍射光的衍射角。

通常定义下的四个麦克斯韦方程及边界条件是电磁理论的基础, 如果引进分布函数的概念, 可以证明, 分布意义下的麦克斯韦方程组形式上与通常意义下的麦克斯韦方程组完全一样, 而它已将边界条件全包含在里面了。因此为了方便, 我们在分布的意义下讨论电磁理论(推导过程中不再考虑通常的边界条件)。

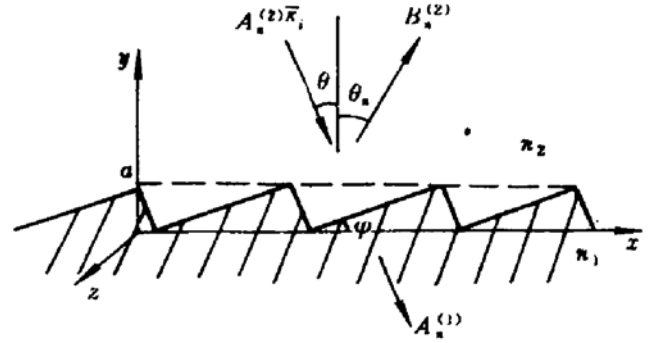


Fig. 1 Schematic representation of the grating and notations

在分布意义上, 由最基本的麦克斯韦方程出发, 推得传播方程:

$$\Delta E + k^2 E = 0 \quad \text{这里 } k^2 = \omega^2 \mu \varepsilon \quad (1)$$

其中 ω 为入射光角频率, 磁导率 μ 在真空和非磁性材料中视为常数, 介电常数 ε 则随不同材料而变化, 正是利用 ε 的这一特点来调制电场 E 。在 $y > a$ 及 $y < 0$ 区域, 介电常数 ε 为常数, k^2 也为常数, 因此方程(1)即为霍姆亥兹方程。在这两个区间的解可分别表达为:

$$y > a \text{ 时 } E_n(y) = A_n^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)}y) + B_n^{(2)} \exp(i\beta_n^{(2)}y) \quad (2)$$

$$y < 0 \text{ 时 } E_n(y) = A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)}y) + B_n^{(1)} \exp(i\beta_n^{(1)}y) \quad (3)$$

其中 $A_n^{(i)}, B_n^{(i)}$ 表示振幅, $i = 1, 2$ 分别表示在折射率为 n_1, n_2 的区域。而在 $0 < y < a$ 的调制区内, 当 y 取某一值 $y = y_0$ 时, 介电常数 $\varepsilon(x, y_0)$ 是 x 坐标的周期性函数, 由(1)式可以看出 k^2 也为随 x 周期性变化的函数, 又电场 $E_z(x, y)$ 也是随 x 变化的周期函数, 故可将 k^2 与 $E_z(x, y)$ 同时展开为傅氏级数:

$$k^2(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (k^2)_n \exp(inLx) \quad (4)$$

$$E_z(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n(y) \exp(i\alpha_n x) \quad (5)$$

代入(1), 经过一系列数学推导, 可得:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} [d^2 E_n(y)/dy^2 - \alpha_n^2 E_n(y) + \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (k^2)_{n-m} E_m(y)] \exp(i\alpha_n x) = 0$$

上式左侧可看成是零函数的傅氏展开, 故对任意 x 均有

$$d^2 E_n(y)/dy^2 = \alpha_n^2 E_n - \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (k^2)_{n-m} E_m \quad (6)$$

n, m 的取值范围均为 $(-\infty, +\infty)$, 显然, 上式对于每一 E_n , 均有相邻级电场 E_m 在起作用, 故称为耦合微分方程组。

微分法的思路是对耦合微分方程组(6)的数值求解, 求出调制区内电场在 $y = 0$ 及 $y = a$ 处的值, 然后分别与(3)式和(2)式的边界值进行匹配, 就可求出衍射效率。

微分法在数值处理上略显复杂, 但它得到的是精确解。光栅的不同外形以及同一类型光栅的不同参数影响的是耦合微分方程组(6)中的 $k^2(x, y)$ 的傅氏展开式系数 $(k^2)_{(n-m)}$, 通过它影响衍射效率。多层膜软 X 光栅用微分法处理时, 与裸光栅相比变化事实上也只在 $(k^2)_{(n-m)}$ 上, 故这部分数值处理时可单独编程。

对于磁场 H 平行于坐标 Z 的情况, 只是数值处理时略有变化而已, 解的思路大致与上面一样。

3 位相型软 X 光激光输出镜

微分法是软 X 光波段唯一精确计算光栅衍射效率的理论,满足光从掠入射至正入射的情况。我们应用这种理论成功地设计了一种最新型的软 X 光激光输出镜。众所周知,由于材料对 X 光的强吸收及几乎所有材料在 X 光波段的折射率均趋于 1,常见的各种形式的透镜及平面镜在 X 光波段已不再适用,因此软 X 光激光腔中的输出镜也必须设计特殊结构。与国外现有一些激光腔装置不同的是,我们采用位相光栅及多层膜结合的形式,位相光栅用来调制衍射光强的分布,它具有最高的衍射输出效率,软 X 光多层膜用来提高整个输出镜的反射率。这两部分可以分开考虑。这种结构认为是目前软 X 光波段可能实现的激光输出镜中效率最高的一种。国外在软 X 光激光腔输出镜实验中多是采用振幅光栅与多层膜结合的方式或者是无衬底多层膜分束镜的方式^[4,5],这在工艺上较易实现但多程输出软 X 光效率并未达到最大值。

作为软 X 光激光输出镜,要求它输出光之外,还需反馈部分光回到腔内,以使之在有限的增益寿命时间内继续获得放大,形成双程、叁程……放大输出。计算表明,当每次输出光与反馈光效率相当时,总输出光强达最大。我们取零级光作为反馈。-1 级光作为输出,不妨针对类氩锆等离子体 $3p - 3s$ 跃迁产生激光 23.2 nm 和 23.6 nm 两强峰,设中心波长为 23.4 nm,设计光栅结构。若定义相对衍射效率为某级衍射光占总衍射光强的百分比。应用微分理论设计光栅的具体数值结果如下:

1) 阶梯形闪耀光栅

闪耀角 $\phi = 1^\circ$,光栅周期 $d = 335.2$ nm,光栅深度 $h = 5.85$ nm,光栅顶角为 90° ,得到 -1 级光相对衍射效率 42.6%,零级光相对衍射效率 42.8%。

2) 矩形光栅

线空比 1:1,光栅深度 $h = 15.44$ nm,光栅线密度 1200 条/mm,求得 -1 级衍射光相对衍射效率为 30.8%,零级衍射光 31.5%。

刻蚀闪耀角为 1° 的闪耀光栅对于国内的实验条件尚不能实现,国外也只见理论分析。刻蚀 15 nm 左右深、线空比 1:1 的矩形光栅也是相当困难的,刻蚀时不可避免存在误差。除去软 X 光多层膜的因素,我们分析离子束刻蚀位相光栅影响衍射效率的主要因素有:线空比误差、深度误差,其次还有图形畸变和光栅面形粗糙等。光栅面形粗糙归纳到多层膜的基底粗糙一起考虑,对于线空比误差我们用微分法计算结果如表 1,深度误差影响衍射效率如表 2,可见线空比误差及深度误差对衍射效率影响都很大,尤其是深度误差, Δh 达 2.0 nm 时零级反馈光强度已趋于零,所以深度控制 Δh 一定得小于 2.0 nm。此外图形畸变也是影响衍射效率不容忽视的一个因素。

Table 1 Effect of the ratio of line width to space of lamellar grating on diffraction efficiency

Ratio of line width of space	4 : 1	3 : 1	2 : 1	1 : 2	1 : 3	1 : 4
$\xi_{\pm 1} (\%)$	10.5	15.2	23.2	23.8	15.6	10.8
$\xi_0 (\%)$	59.0	50.6	41.4	41.0	50.2	58.2

Table 2 Effect of the depth error of lamellar grating on diffraction efficiency

Δh (nm)	-0.5	0.5	-1.0	1.0	-2.0	2.0
h (nm)	14.94	15.94	14.44	16.44	13.44	17.44
$\xi_{\pm 1}$ (%)	24.9	36.1	18.9	40.4	8.3	44.8
ξ_0 (%)	44.7	19.8	57.9	10.1	81.7	0.2

4 数值结果

微分电磁理论得到的是精确解,适用面也广,入射光由正入射至大角度入射情况下都适用。我们曾用来粗略设计软 X 光激光反射输出镜的标量区近似理论适用于近正入射情况。将微分法在正入射情况下与标量区近似理论的结果进行比较,直观地用图 2(a,b)、图 3(a,b) 表示,可见正入射情况下两种理论符合较好。两种理论从不同角度出发处理一个问题得到了相同的结论,这一方面也证明了我们微分理论计算结果的正确性。

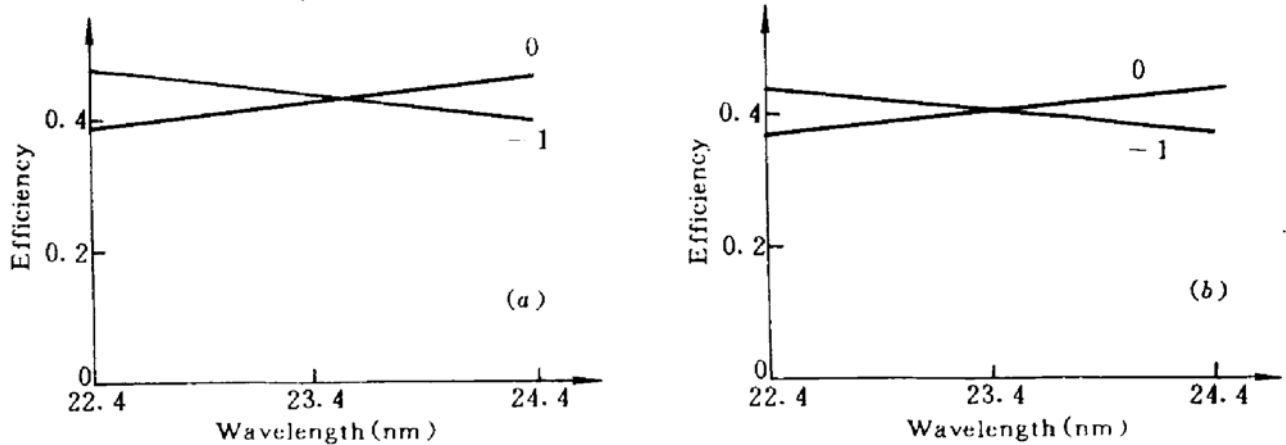


Fig. 2

(a) Efficiency of -1 and 0 diffraction order of echelette grating calculated by differential methods in the $22.4 \sim 24.4$ nm range

(b) Efficiency of -1 and 0 diffraction order of echelette grating calculated by asymptotic theory in the scalar domain

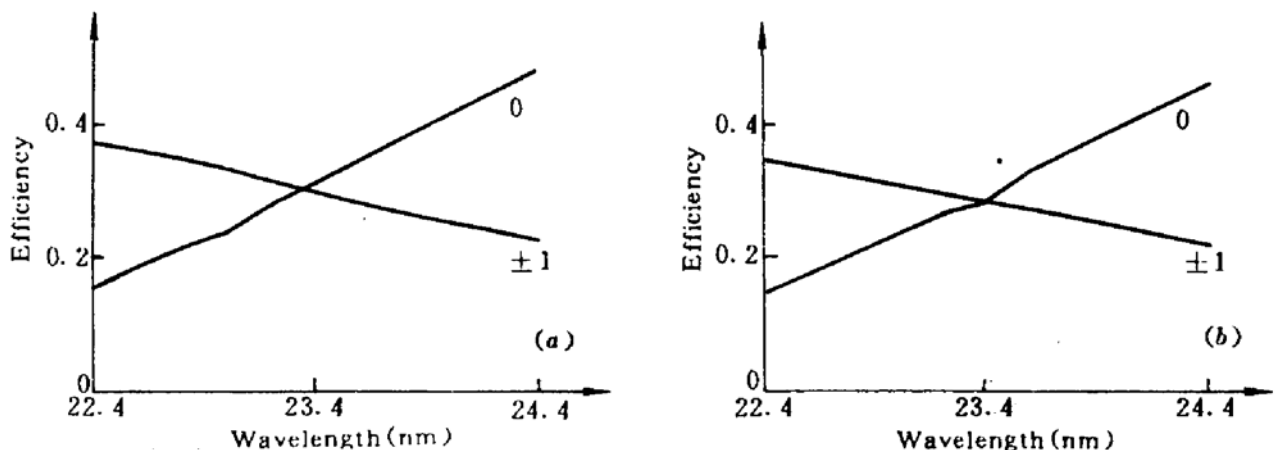


Fig. 3

(a) Efficiency of ± 1 and 0 diffraction order of lamellar grating calculated by differential methods

(b) Efficiency of ± 1 and 0 diffraction order of lamellar grating calculated by asymptotic theory in the scalar domain

微分理论不但可以处理裸光栅,而且可以直接处理镀制多层膜的软 X 光衍射光栅。我们定义绝对衍射效率为某级衍射光占入射光光强的百分比。对于闪耀角为 2° 、高 11.7 nm、顶角 90° 、周期为 335.45 nm 的阶梯形主闪耀裸光栅,如图 4(a) 所示, -1 级相对衍射效率为 99.96% ,但它的绝对衍射效率仅为 0.044% 。镀制 20 层(周期厚度 $D = 12.73$ nm, $\Gamma = d_{m0}/D =$

0.24) 的 Mo/Si 多层膜后,由镀多层膜的微分理论计算得到,如图 4(b), -1 级衍射光的绝对衍射效率达 25.4%。

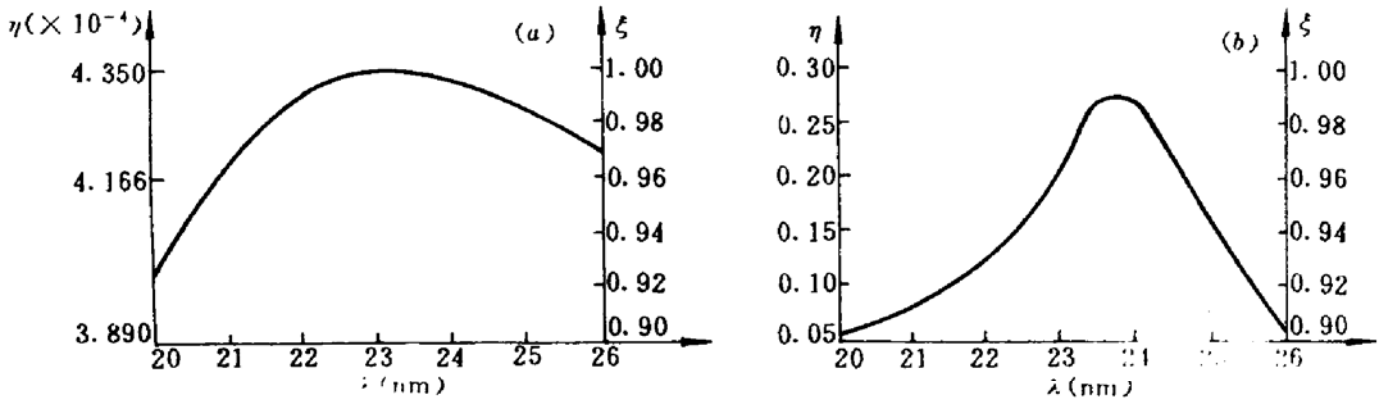


Fig. 4

- (a) -1 order's diffraction efficiency of bare blazed grating: $\varphi = 2^\circ$, $d = 335.45 \text{ nm}$, $h = 11.7 \text{ nm}$, here, η : the energy ratio of -1 order to incidence, ξ : the energy ratio of -1 order to total diffraction orders
 (b) -1 order's diffraction efficiency of the same grating covered with 20 Mo/Si multilayer

由图 2(a,b)、图 3(a,b) 可以看出,两种理论虽然符合得较好,但还是有一点差别,一方面由于近似理论在理论推导时作过一点近似,另一方面微分理论虽然在理论上未作近似是严格的,但在数值处理时对高衍射级次作过截断,为方便计算机运算,把包含无穷个方程的耦合微分方程组变成包含有限个方程的耦合微分方程组。虽然衍射级次截断范围更宽一些可以提高一定的精度,但我们研究结果表明由此带来的效果是很小的,相反计算量却成倍增加。

另一会引起计算误差的是步长的选择。要保证足够的精度,积分步长需选择足够小,否则积分步长太大引起的误差经过多次循环累积,最后数值积分后的值会相差很远。原理上当积分步长足够小时计算结果可以非常精确,但对于镀多层膜后的衍射光栅来说,调制区大大增大,数值积分要积的距离比裸光栅时有数十倍的增加,所以给计算必然花上更大量的时间,故步长的选择依照具体条件适中而定。

参 考 文 献

- 1 R. Petit *et al.*. *Electromagnetic Theory of Gratings*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- 2 袁利祥, 范正修. *中国激光*, 1993, 20(5): 356
- 3 Melkanoff *et al.*. *Methods in Computational Physics*, Academic Press, New York, 1966, 11~45
- 4 Andrew H. Hawryluk *et al.*. *SPIE*, 1986, 688: 81
- 5 Troy W. Barbee *et al.*. *Rev. Sci. Instrum.*, 1989, 60(7): 1588

Study of Soft X-ray Diffractive Gratings Using Differential Method

Yuan Lixiang Fan Zhengxiu Yin Gongjie

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai, 201800)

Abstract The differential method is the only existing accurate method to investigate soft X-ray gratings. Using the method, we designed successfully the soft X-ray laser output mirror with phase grating and calculated the possible experiment error. The numerical result and accuracy are also analysed and discussed.

Key words soft X-ray gratings, differential method, soft X-ray laser output mirror