

基于严格耦合波理论的亚波长光栅合成孔径成像分析

王柯威^{1,2,3}, 肖康^{2,3}, 孙静^{2,3*}, 王中阳^{1,2,3**}¹上海科技大学物质科学与技术学院, 上海 201210;²中国科学院上海高等研究院基础交叉研究中心, 上海 201210;³中国科学院大学, 北京 100049

摘要 合成孔径技术是一种能够有效实现超分辨成像的技术。目前的合成孔径成像技术大多以标量衍射理论为基础,但当成像目标的尺寸小于波长时,标量衍射理论中的近似与假设不再成立。因此,本团队在高斯光束照明条件下,以更为严格的耦合波理论为基础,分析了亚波长光栅的合成孔径成像技术。通过模拟仿真 280 nm 周期、140 nm 线宽的一维矩形光栅的合成孔径成像,分析了光栅有界情况下,模式个数对光栅重构的影响以及恢复光栅结构所需的最少模式个数。接下来讨论了标量衍射理论相对于耦合波理论可能产生的误差。分析了照明光以 $\pm 90^\circ$ 入射的理想情况下对光栅进行合成孔径成像的最小分辨率,并认为其仅与波长有关,可分辨的光栅周期最小为 $\lambda/2$,线宽分辨率为 $\lambda/4$ 。本文为合成孔径技术在亚波长光栅中的应用提供了更严格的理论基础。

关键词 全息; 合成孔径成像; 亚波长光栅; 严格耦合波分析; 超分辨成像

中图分类号 O438.2

文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL202249.2406001

1 引言

光学系统中普遍存在分辨率受限的问题,Abbe^[1]在 1873 年首次给出了光学衍射与成像系统分辨率之间的关系,成像系统的横向分辨率被限制为 $\delta x = \frac{\lambda}{2NA}$,其中 λ 为成像所用光的波长,NA 为物镜的数值孔径。因此,若要获得更高的分辨率,有增大数值孔径和减小波长两种方式。目前,可见光波段的普通光学显微镜能达到的最小横向分辨率在 200~250 nm 之间。随着物理学、材料学、医学等现代科学的高速发展,人们对显微成像的分辨率提出了更高要求,而且人们在过去几十年中提出了许多方法来克服显微成像的局限性,其中的合成孔径显微技术(SAM)是一种能够有效超越分辨率极限的技术^[2]。

合成孔径技术^[3]在 20 世纪 60 年代被提出,它最初起源于合成孔径雷达(SAR)^[3-5]的概念。1995 年,该方法结合傅里叶全息成像技术被用于显微成像领域^[2]。当采用不同角度的物光和参考光照射样品时,就会引起出射光场的角谱旋转,使得原本被光学系统截断的空间高频信息能够被光学系统探测到,从而使光学系统获得超越物镜分辨率的能力。在过去的几十年中,合成孔径技术取得了长足发展^[6-10]:2018 年, Lin 等^[9]使用数值孔径为 0.9 的物镜和波长为 405 nm 的照明光

对周期为 460 nm、线宽为 230 nm 的光栅实现了成像;2020 年, Zheng 等^[10]使用数值孔径为 1.3 的物镜和波长为 532 nm 的照明光对周期为 330 nm 的样品实现了成像,样品成像的最小线宽为 198 nm,这也是目前合成孔径技术能够达到的最大分辨率。另一种具有代表性的合成孔径技术是 2013 年 Zheng 等^[11]提出的傅里叶叠层技术(FPM),该算法先用迭代相位恢复算法代替全息技术来恢复相位,然后再采用合成孔径技术得到样品的超分辨率图像。2017 年, Sun 等^[12]通过数值孔径为 0.4 的物镜与 435 nm 的照明光实现了周期为 308 nm、线宽为 154 nm 的周期性样品的成像,这是 FPM 能够达到的最小分辨率。2019 年, Lee 等^[13]通过数值孔径为 0.3 的物镜和波长为 515 nm 的照明光实现了周期为 486 nm、线宽为 243 nm 的周期性样品的成像,这是反射式 FPM 目前能够达到的最大分辨率。目前对于合成孔径技术理论基础的讨论主要是基于标量衍射光学理论进行的,当分辨率小于波长时,标量衍射理论中的近似条件与假设不再成立,同时,标量衍射理论忽略了光偏振效应,而且各种偏振之间的相互作用对衍射结果具有较大影响,因此应使用更严格的理论进行分析。

亚波长光栅的周期性结构与晶体中晶格的周期性排列有着极大的相似之处,研究亚波长光栅的成像对于研究晶体结构成像具有重要意义^[14-15],因此,本文将

收稿日期: 2022-02-21; 修回日期: 2022-03-25; 录用日期: 2022-04-14

基金项目: 上海市科学技术委员会资助项目(20DZ2210300)

通信作者: *sunj@sari.ac.cn; **wangzy@sari.ac.cn

针对亚波长光栅成像进行分析。现行主流分析亚波长光栅的方法为严格耦合波分析法(RCWA法)^[16-17],该方法又被称为“傅里叶模态法”(FMM法)^[18]。严格耦合波分析法是 20 世纪 80 年代由 M. G. Moharam 和 T. K. Gaylord^[19]提出的,最初被用于计算平面光栅的衍射效率,经过几十年的发展,该方法本身已十分完善。该方法通过直接求解麦克斯韦方程能够精确求出平面波照射亚波长光栅时出射的光场。

本文利用高斯照明条件下严格耦合波分析法对亚波长光栅的合成孔径成像技术进行了详细分析。首先使用不同角度的聚焦高斯光束照射亚波长光栅,得到出射光场分布与角谱分布,并对所得到的恢复相位以后的角谱分布在角谱空间进行合成孔径成像,然后进行傅里叶逆变换得到光栅结构。采用 MATLAB 软件进行仿真,结果显示:在理想情况下,合成孔径技术能够得到的光栅最小分辨周期为 $\lambda/2$,线宽分辨率为 $\lambda/2$ 。与标量衍射理论相比,本文不使用菲涅耳近似,而是直接求解麦克斯韦方程,得到的结果更加严谨准确,为合成孔径技术在亚波长光栅成像中的应用提供了更严格的理论基础。

2 基本原理与实验仿真

2.1 基于高斯光束聚焦照明亚波长光栅的严格耦合波分析法

在相位成像中,通常使用相干激光作为照明光源。本节给出了高斯光束聚焦照明光栅条件下,通过严格耦合波分析法求解出射光场的理论方法。

严格耦合波分析法是一种通过严格求解麦克斯韦方程组来分析光场通过光栅结构后的透射和反射光场的方法。如图 1 所示,将待成像的光栅结构分为区域 I (反射区域)、区域 II (光栅区域)、区域 III (透射区域),其中:区域 I 和区域 III 中是两种均匀介质,两种介质的折射率分别设为 n_{I} 、 n_{II} ;两种介质在区域 II (光栅区)中呈周期性分布,周期为 Λ ,深度为 d ,占空比为 f 。

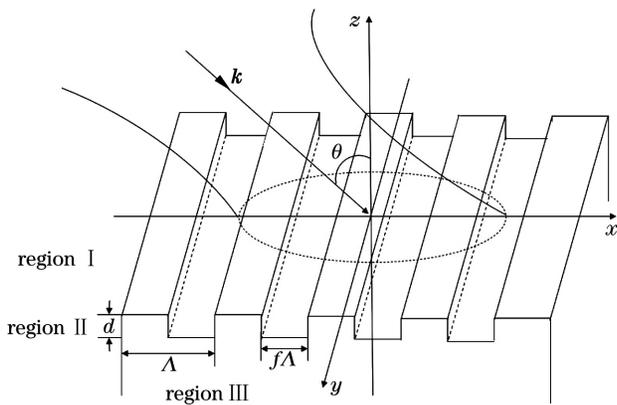


图 1 高斯光束以 θ 角入射到一维矩形光栅示意图

Fig. 1 Schematic of Gaussian beam incidence on one-dimensional rectangular grating at angle θ

定义 z 轴垂直于光栅方向, x 轴为光栅周期排列的方向。高斯光束以一定角度(与 z 轴夹角为 θ)聚焦照射在待成像光栅表面。

光栅区域的介电常数可以用傅里叶级数展开为

$$\epsilon(x) = \sum_h \epsilon_h \exp\left(j \frac{2\pi h x}{\Lambda}\right), \quad (1)$$

式中: ϵ_h 是光栅区域相对介电常数的第 h 级傅里叶分量,对于矩形光栅,有 $\epsilon_h = (n_{\text{I}}^2 - n_{\text{II}}^2) \frac{\sin(\pi h f)}{\pi h}$, j 代表虚数。

根据严格耦合波分析法,当 TE 偏振光以一定角度 θ 入射到光栅区域时,入射场可以表示为

$$E_{\text{inc},y} = \exp[-jk_0 n_{\text{I}}(x \sin \theta + z \cos \theta)], \quad (2)$$

式中: $k_0 = 2\pi/\lambda$ 为光束在自由空间中传播的波矢的大小, $k_0 = 2\pi/\lambda$, λ 为入射光波长。此时,反射区域(区域 I, $z > 0$)与透射区域(区域 III, $z < d$)的场分布形式为

$$E_{\text{I},y} = E_{\text{inc},y} + \sum_i R_i \exp[-j(k_{x,i}x - k_{z,i}z)], \quad (3)$$

$$E_{\text{III},y} = \sum_i T_i \exp\{-j[k_{x,i}x - k_{z,i}(z - d)]\}, \quad (4)$$

式中: $k_{x,i}$ 由 Floquet 条件^[20]给出,即

$$k_{x,i} = k_0[n_{\text{I}} \sin \theta - i(\lambda/\Lambda)]; \quad (5)$$

$k_{z,i}$ 与 $k_{z,III,i}$ 分别为区域 I 中反射衍射波波矢量的 z 分量和区域 III 中透射衍射波波矢量的 z 分量,即

$$k_{z,i} = \begin{cases} +k_0 \left[n_{\ell}^2 - (k_{x,i}/k_0)^2 \right]^{1/2}, & k_0 n_{\ell} > k_{x,i} \\ -jk_0 \left[(k_{x,i}/k_0)^2 - n_{\ell}^2 \right]^{1/2}, & k_{x,i} > k_0 n_{\ell} \end{cases}, \ell = \text{I, III}; \quad (6)$$

R_i 为反射区域第 i 级反射波的归一化电场幅值; T_i 为透射区域第 i 级透射波的归一化电场幅值。反射区域和透射区域的磁场可以由麦克斯韦方程得到,即

$$\mathbf{H} = \left(\frac{j}{\omega \mu} \right) \nabla \times \mathbf{E}, \quad (7)$$

式中: μ 表示磁导率; ω 表示入射光波的角频率; \mathbf{E} 表示光栅区域的切向电场。将光栅区域的切向电场和切向磁场分解为一系列空间衍射波组成的傅里叶级数形式,即

$$E_{\text{gy}} = \sum_i S_{y,i}(z) \exp(-jk_{x,i}x), \quad (8)$$

$$H_{\text{gx}} = -j \left(\frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_i U_{x,i}(z) \exp(-jk_{x,i}x), \quad (9)$$

式中: ϵ_0 为真空中的介电常数; μ_0 为真空中的磁导率; $S_{y,i}(z)$ 与 $U_{x,i}(z)$ 分别为光栅区域满足麦克斯韦方程的第 i 级谐波的归一化振幅。

将式(8)和式(9)代入麦克斯韦方程,结合式(1)可以得到

$$\frac{\partial S_{y,i}}{\partial z} = k_0 U_{x,i},$$

$$\frac{\partial U_{xi}}{\partial z} = \left(\frac{k_{xi}^2}{k_0} \right) S_{yi} - k_0 \sum_p \epsilon_{(i-p)} S_{yp} \quad (10)$$

式(10)便是由麦克斯韦方程得到的光栅区域内所有满足电磁场的方程。如此可得到一系列耦合波方程组,通过求解这些耦合波方程组就可以

得到 R_i 与 T_i 系数^[16]。这样便可以得到波长为 λ 的平面波以一定角度 θ 照射光栅后的反射场及透射场。

实际上,由于使用高斯光束聚焦照明,可将高斯光束展开为一系列平面波的叠加,即

$$F\left(\frac{\cos \alpha}{\lambda}, \frac{\cos \beta}{\lambda}\right) = \int A(x, y, z) \exp\left[jk_0\left(\frac{\cos \alpha}{\lambda}x + \frac{\cos \beta}{\lambda}y\right)\right] dx dy, \quad (11)$$

式中: α 表示入射角度与 x 轴的夹角; β 表示入射角度与 y 轴的夹角; $A(x, y, z)$ 是沿 z 轴正入射条件下的高斯光束,其表达式为

$$A(x, y, z) = E_0 \frac{\omega_0}{\omega(z)} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{\omega^2(z)}\right] \exp\left\{-j\left[k_0 z + \frac{k_0(x^2 + y^2)}{2R(z)} - \eta(z)\right]\right\}, \quad (12)$$

其中 E_0 为归一化常数, ω_0 为高斯光束束腰处的半峰全宽, $\omega(z) = \omega_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda z}{\pi \omega_0^2}\right)^2}$ 为传播到 z 处的高斯光束的半峰全宽, $R(z) = z \left[1 + \left(\frac{\pi \omega_0^2}{\lambda z}\right)^2\right]$ 为传播到 z 处的高斯光束的波面曲率半径, $\eta(z) = \arctan\left(\frac{\lambda z}{\pi \omega_0^2}\right)$ 。

当高斯光束以 θ 角入射时,高斯光束的形式相对于坐标 x, z 发生旋转,旋转后的坐标 x' 与 z' 变换为 $x' = x \cos \theta + z \sin \theta$ 和 $z' = z \cos \theta + x \sin \theta$ 。所以,旋转后的高斯光束变为

$$A(x, y, z) = E_0 \frac{\omega_0}{\omega(z \cos \theta + x \sin \theta)} \exp\left[-\frac{(x \cos \theta + z \sin \theta)^2 + y^2}{\omega^2(z \cos \theta + x \sin \theta)}\right] \exp\left\{-j\left[k_0(z \cos \theta + x \sin \theta) + \frac{k_0[(x \cos \theta + z \sin \theta)^2 + y^2]}{2R(z \cos \theta + x \sin \theta)} - \eta(z \cos \theta + x \sin \theta)\right]\right\}. \quad (13)$$

因此,当高斯光束照射在光栅表面时,出射的场分布为高斯光束每个平面波分量的振幅与由严格耦合波分析法求解出的某一个角度出射场的乘积。对于反射式成像,每个平面波分量的反射场为

$$E_{1,y} = F\left(\frac{\cos \alpha}{\lambda}, \frac{\cos \beta}{\lambda}\right) \left\{ E_{inc,y} + \sum_i R_i \exp[-j(k_{xi}x - k_{1,zi}z)] \right\}. \quad (14)$$

采用傅里叶逆变换便可以求出高斯光束以不同角度入射到周期性光栅后反射得到的光场分布。接下来本文将采用上述高斯光束照明条件下的严格耦合波分析法分析亚波长光栅合成孔径成像。

2.2 基于严格耦合波分析法的亚波长光栅合成孔径成像

合成孔径技术是目前被广泛应用的一种超分辨率技术。该技术的本质是采用不同入射角度的光照射物体,此时物体平面中的场相当于增加了一个额外的线性相位,导致出射光场的角谱旋转,从而使得原本正入射时被光学系统截断的空间高频信息能够被光学系统收集进而被探测到。首先记录一系列不同角度入射波照明样品后出射光场的空间傅里叶频谱强度,然后采用相位恢复方法得到频谱的相位,在傅里叶频谱空间对角谱分布进行合成,再对合成的频谱进行傅里叶逆变换即可获得样品的超分辨率图像。接下来采用 2.1 节所述方法求解高斯光束照明光栅后的出射光场分布与角谱分布,然后使用合成孔径技术对亚波长光栅进行成像。

模拟分析中使用的亚波长光栅如图 2(a) 所示。考虑一维光栅的周期为 $\Lambda = 280 \text{ nm}$, 占空比为 $f = 0.5$, 高度为 $d = 400 \text{ nm}$, 入射介质和衬底介质是真空,且只有单层,使用的照明光的波长 $\lambda = 532 \text{ nm}$ 。

当采用聚焦后光束角半角为 10° 的高斯光束正入射该光栅时,通过式(14)得到的光栅出射光场分布以及角谱分布的仿真结果如图 2(b)、(c) 所示。可以看到,当光束被物镜聚焦后以 10° 的半角入射到光栅后,对于本文考虑的亚波长光栅,随着出射场的传播,高级次衍射波转化为消逝波,不能传播到远场,高级次衍射波对应的细节无法被捕获,光栅结构已经不可见。

当采用聚焦后光束角半角为 10° 的高斯光束分别以 $\pm 60^\circ$ 入射该光栅时,得到的出射光场分布以及角谱空间分布如图 3 所示。

由图 3 可以看出,当使用一定角度的照明光照射光栅时,出射的角谱空间发生旋转。当半角为 10° 的聚焦光束以 -60° 入射时,0 级衍射波以 60° 角度出射,此时 1 级衍射波也被激发出来,在图 3(b) 中可以看到 $-90^\circ \sim -80^\circ$ 之间存在 1 级衍射波分布。因此,通

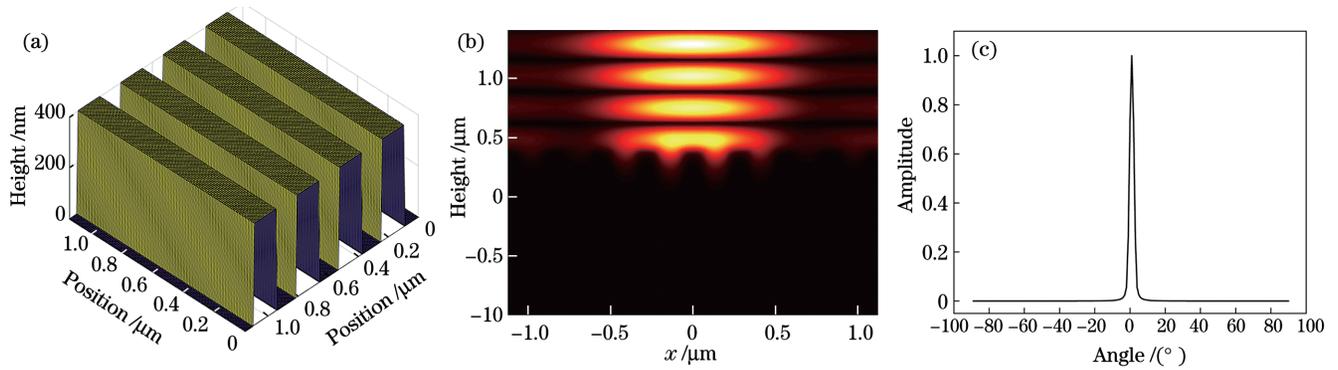


图2 模拟仿真中使用的光栅结构图以及高斯光束正入射下的出射光场分布及角谱分布。(a)光栅结构图;(b)出射光场分布;(c)角谱分布
 Fig. 2 Grating structure used in simulation and output optical field distribution and angular spectrum distribution under normal incidence of Gaussian beam. (a) Grating structure; (b) output optical field distribution; (c) angular spectrum distribution.

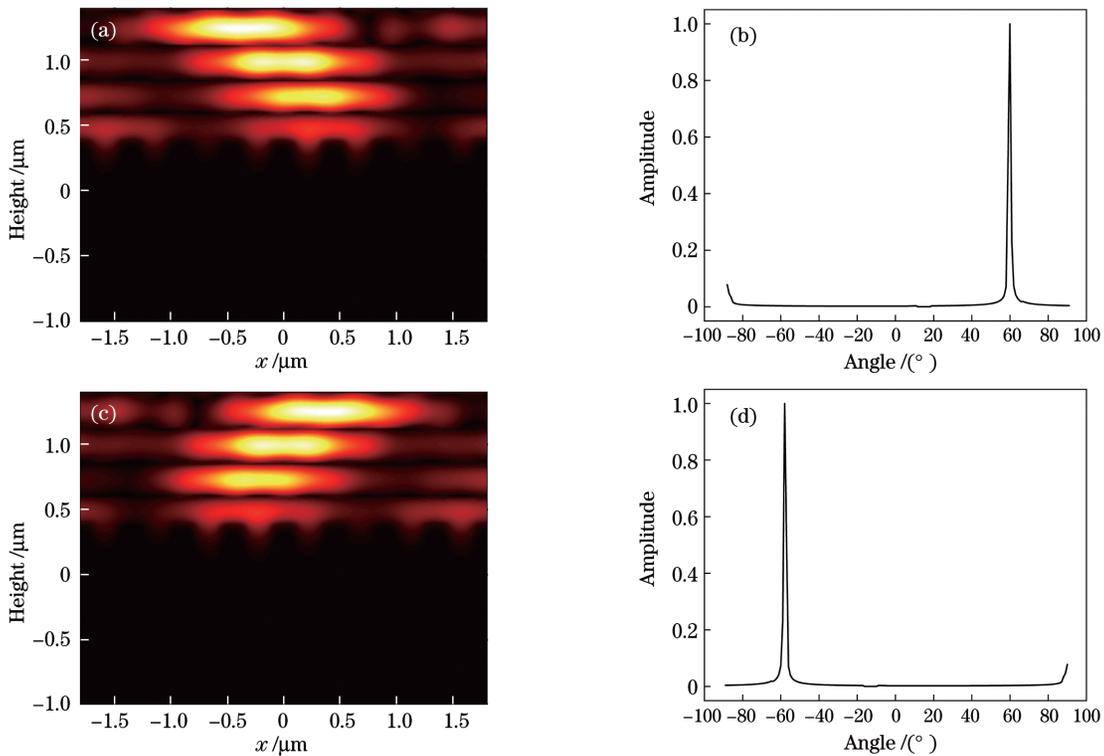


图3 当采用聚焦后光束角半角为 10° 的高斯光束分别以 $\pm 60^\circ$ 入射光栅时得到的出射光场分布与角谱分布。(a) 60° 入射时的出射光场分布;(b) -60° 入射时的角谱分布;(c) -60° 入射时的出射光场分布;(d) 60° 入射时的角谱分布
 Fig. 3 Output optical field distributions and angular spectrum distributions when Gaussian beam with a half angle of 10° is incident on grating at $\pm 60^\circ$. (a) Optical field distribution at 60° incidence; (b) angular spectrum distribution at -60° incidence; (c) optical field distribution at -60° incidence; (d) angular spectrum distribution at 60° incidence

过不停地转动照明角度,如图4(a)所示,可以获得更大的角谱信息。图4(a)中心处的圆圈代表物镜聚焦产生的 k 分量。本文使用半角 10° 聚焦,因此 k_{obj} 对应 $\pm 10^\circ$ 的角谱分量。为了不使频谱信息有所丢失,每两个照明角度之间频谱移动的步长应至少等于高斯照明光束的半峰全宽。此时两个不同角度照明光产生的角谱恰好相交,在一维光栅情况下不会发生频谱信息的丢失。

接着采用相位迭代方法恢复探测过程中空间傅里叶频谱面丢失的相位。将不同角度照明光对应出射的

角谱空间按照图4(a)所示步骤合成一个完整的空间傅里叶频谱,如图4(c)所示,对其进行傅里叶逆变换得到如图4(b)所示的场分布,然后将其与仅有正入射时得到的实空间分布、角谱分布进行对比。

对比图4(c)与图2(c)可以看到,采用不同角度照明可将原本不能通过光学系统或者不能传播到远场的信息重新激发出来。之后再采用相位恢复和合成孔径技术,就可以获得 $-70^\circ \sim 70^\circ$ 内的全部角谱信息。对比图4(b)与图2(b)可以发现,合成孔径后,光栅的细节信息被重新获得,得到高斯与光栅卷积所形成的图像。

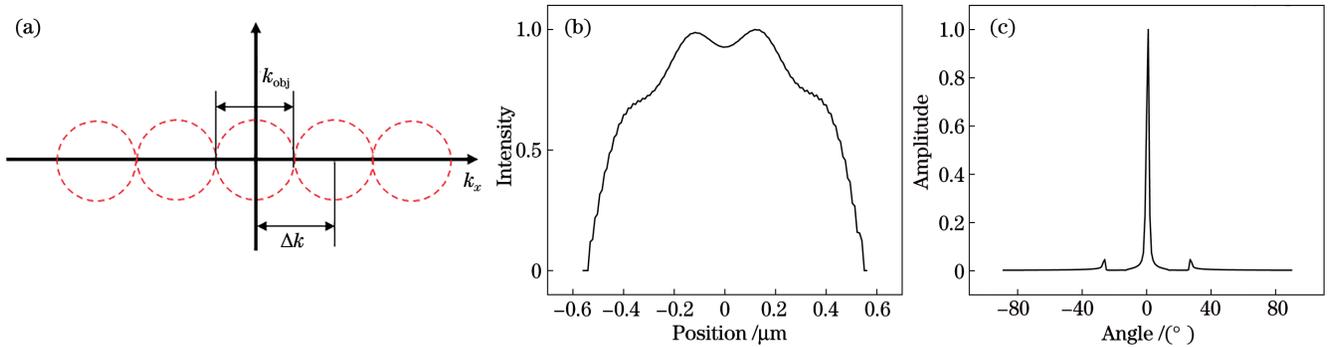


图 4 合成孔径后的实空间分布与角谱分布。(a)多角度照明合成孔径示意图;(b)合成孔径后的实空间分布;(c)合成孔径后的角谱分布

Fig. 4 Real spatial and angular spectral distributions after synthetic aperture. (a) Schematic of synthetic aperture with multi-angle illumination; (b) real spatial distribution after synthetic aperture; (c) angular spectrum distribution after synthetic aperture

对图 4(b)进行反卷积得到了光栅的结构,其与实际仿真所用光栅样品的对比如图 5 所示。

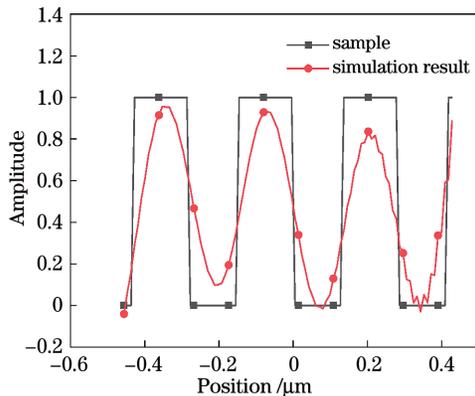


图 5 合成孔径后的光栅结构以及实际仿真所用光栅样品的结构

Fig. 5 Grating structure obtained with synthetic aperture and structure of grating sample used in actual simulation

将合成孔径得到的光栅结构与实际仿真所用光栅进行对比可以看出,采用高斯光束照明条件下以严格耦合波理论为基础的合成孔径技术成功地周期为 280 nm、线宽为 140 nm 的光栅实现了成像。

3 分析与讨论

3.1 光栅本征模式截断个数分析

亚波长光栅的严格耦合波理论又被称为傅里叶模态法^[16]。由式(1)可知,计算时需要将光栅区的介电常数展开为傅里叶级数,此时展开的每一个傅里叶级数代表光栅分解后的一个本征模式。当高斯光束照射亚波长光栅时,势必涉及光栅有界问题,而参与重构的光栅本征模式个数与光栅有界相联系,分为以下两种情况:1)光栅区域大于照明区域;2)照明区域大于光栅区域,此时光栅仅包含有限个周期。

针对第一种情况,即光栅区域大于照明区域时,照明区域会对光栅进行截断,此时只有照明区域内的光栅参与成像。这意味着不是所有的光栅的本征模式都

参与了计算,因此,出射场的计算精度取决于包含的模式个数。在实际的系统中,考虑的更多的是能够传播到远场的信息,许多高阶模式在 z 方向上是迅速消逝的,可以被略去。本文以计算得到的反射系数 R 的收敛情况为标准^[18],判断所需模式个数。图 6 为不同光栅周期下光栅模式截断个数对出射场计算精确度的影响。

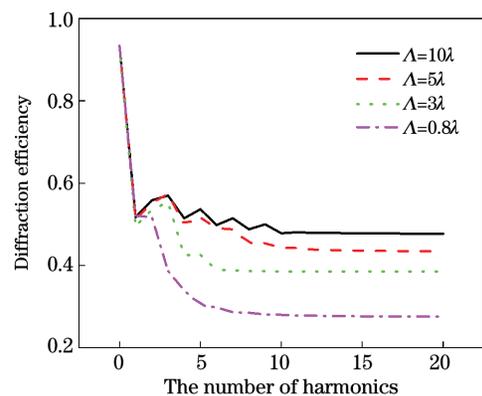


图 6 不同光栅周期下光栅模式截断个数对出射场计算精确度的影响

Fig. 6 Influence of the number of harmonics on calculation accuracy of output optical field under different grating periods

由图 6 可以看出,计算的精确度与光栅周期具有密切关系:随着光栅周期不断减小(由 10 倍波长逐渐减小到亚波长范围),曲线收敛得越来越快,对应所需要的模式个数不断减少。这意味着大多数高阶模式都变为消逝波,无法传播到远场。因此,对亚波长光栅模式进行截断时至少需要保留 5 个模式。

针对第二种情况,即照明区域大于光栅区域时,光栅本身只含有有限个周期数,此时光栅的截断是由光栅的有界引起的,因此需要足够的模式数完整地重构光栅图像,模式个数越多,对光栅的还原越精确。图 7(a)、(b)、(c)分别为光栅本身与使用 2、3、10 个模式重构光栅的结构对比图。

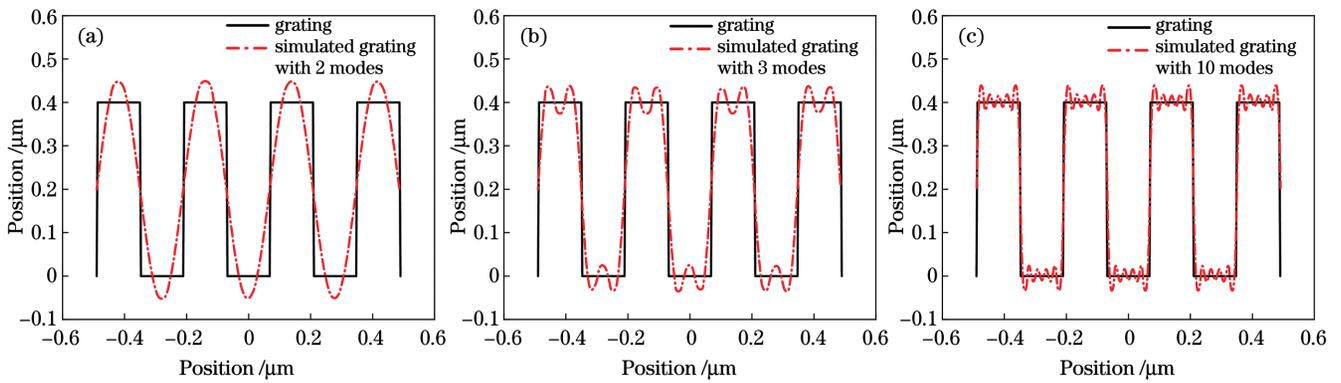


图 7 光栅本身结构与使用不同数量模式重构光栅结构的对比。(a)2个模式;(b)3个模式;(c)10个模式

Fig. 7 Structure comparison between grating itself and reconstructed grating with different number of modes. (a) 2 modes; (b) 3 modes; (c) 10 modes

由图 7 可知:在照明区域大于光栅区域的情况下,重构使用的模式个数越多,对光栅的复原越精确,而且与第一种情况相同,许多高阶模式的信息无法传播到远场,因而不能被获取。同时,由于小于照明区域的亚波长光栅本身的尺寸很小,而且所含周期数不多,因此只需要很少的模式便可以重构出光栅。在光栅尺寸为 940 nm 以及光栅周期为 280 nm 的情况下,至少需要保留 3 个模式。

3.2 严格耦合波分析法与标量衍射理论的误差分析

标量衍射理论使用菲涅耳近似或夫琅禾费近似,这些近似在处理原始衍射公式时需要用到两个近似条件:1)傍轴近似;2)远场近似。傍轴近似要求入射与出射光束不能有过的倾斜角度;而远场近似则要求观测物体非常薄,其厚度几乎可以忽略不计。采用合成

孔径技术对光栅样品成像时往往需要使用大角度照明光,并且当光栅深度较大时电磁场各分量之间的相互作用不可以忽略不计。如果此时依旧使用标量衍射理论对光栅成像进行分析或设计光栅结构,就会导致实验误差过大。严格耦合波分析法严格求解麦克斯韦方程,不存在上述两个近似条件,因此能够得到精确的分析结果。接下来本文将从光栅周期、光栅深度以及光栅材料折射率三方面对标量衍射理论相对于严格耦合波分析法可能会产生的误差进行分析。

本文将计算得到的 0 级反射波的衍射效率(0 级衍射效率)作为标准^[16,21],判断标量衍射理论相对于严格耦合波分析法产生的误差。图 8(a)、(b)、(c)分别为不同光栅周期、光栅深度、光栅材料折射率对误差(0 级衍射效率)的影响。

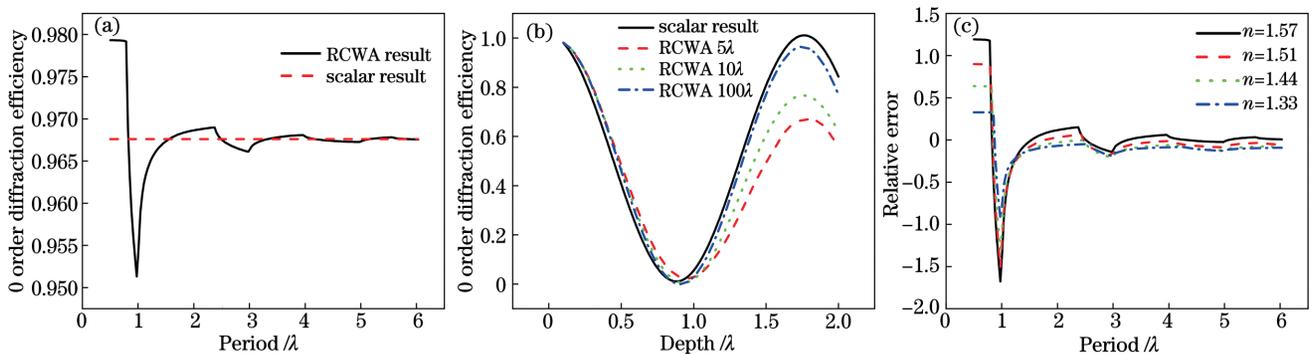


图 8 不同参数对 0 级衍射效率的影响。(a)光栅周期的影响;(b)光栅深度的影响;(c)光栅材料折射率的影响

Fig. 8 Effects of different parameters on 0 order diffraction efficiency. (a) Effect of grating period; (b) effect of grating depth; (c) effect of refractive index of grating material

首先分析不同光栅周期产生的影响。为尽可能将其他因素的影响降低,选择正入射,光栅材料的折射率为 1.56,光栅深度为 0.1λ,光栅周期由 0.5λ 增大到 6λ。由图 8(a)可以看到,使用标量衍射理论计算得到的 0 级衍射效率不会随着周期的改变而发生改变,而严格耦合波分析法计算得到的 0 级衍射效率却随周期的不断改变而改变,并且光栅周期越小,0 级衍射效率变化得越剧烈。此外还可以看到,当光栅周期大于 2λ 时,

两种方法的结果趋于一致,误差不超过 0.5%。当处理亚波长光栅时,标量衍射理论得到的结果误差过大,需要用严格耦合波分析法进行处理。

然后分析不同光栅深度产生的影响。照明光依旧为正入射,光栅材料的折射率为 1.56,光栅深度由 0 逐渐增加到 2λ。由图 8(b)可以看到:仅仅增大深度对计算结果的影响不是很大;但如果同时出现周期较小和深度较大的情况时,标量衍射理论所得结果的误差就

会非常大,例如,当深度为 2λ 且周期为 5λ 时,误差接近30%。因此,当光栅周期处于亚波长量级并且光栅深度达到或超过 1.5λ 时,标量衍射理论将会失效。

最后分析光栅材料折射率产生的影响。照明光选择正入射,光栅深度为 0.1λ ,光栅周期由 0.5λ 增加到 6λ ,并选择了几种常用折射率(1.33、1.44、1.51、1.57)。由图8(c)可以看到,当光栅周期处于亚波长量级时,随着光栅材料折射率逐渐增大,标量衍射理论产生的误差会增大。

综上所述,标量衍射理论在光栅周期较大并且深度较小的情况下是适用的,但当分析亚波长深刻蚀光栅时,标量衍射理论由于没有考虑电磁场之间的相互作用而不再适用,应使用更为精确的严格耦合波分析法进行分析。

3.3 分辨率

由图4可知,通过使用不同角度的入射光照明

品,可以在傅里叶频谱空间合成一个更大的频谱,实现超分辨成像。光栅的光场信息能否传播到远场取决于式(6),当 $k_0 n_t < k_{xi}$ 时, k_{xi} 为虚数,此时反射波和衍射波均为消逝波,无法传播到远场,只存在0级反射波。只有满足 $k_0 n_t > k_{xi}$ 的条件时,反射波和衍射波才能够存在。因此,分辨率的分析分为存在更高级次衍射波以及只存在0级反射波两种情况进行讨论。

当 $k_0 n_t > k_{xi}$ 时,由式(5)可知

$$\frac{\Lambda}{\lambda}(n \sin \theta - 1) < i < \frac{\Lambda}{\lambda}(n \sin \theta + 1) \quad (15)$$

当照明光以 90° 入射并且高级次衍射波只剩余1级时, $\Lambda \geq \lambda/2$ 。这意味着,当光栅周期大于 $\lambda/2$ 时,可以通过转动照明光至 $\pm 90^\circ$ 入射,使光栅的1级衍射级次传播至远场,然后再通过合成孔径技术合成完整的频谱,就可以得到超分辨图像。图9所示为当532 nm照明光以接近 90° 照明270、268、266 nm周期光栅时的角谱分布以及合成孔径成像后的光栅结构。

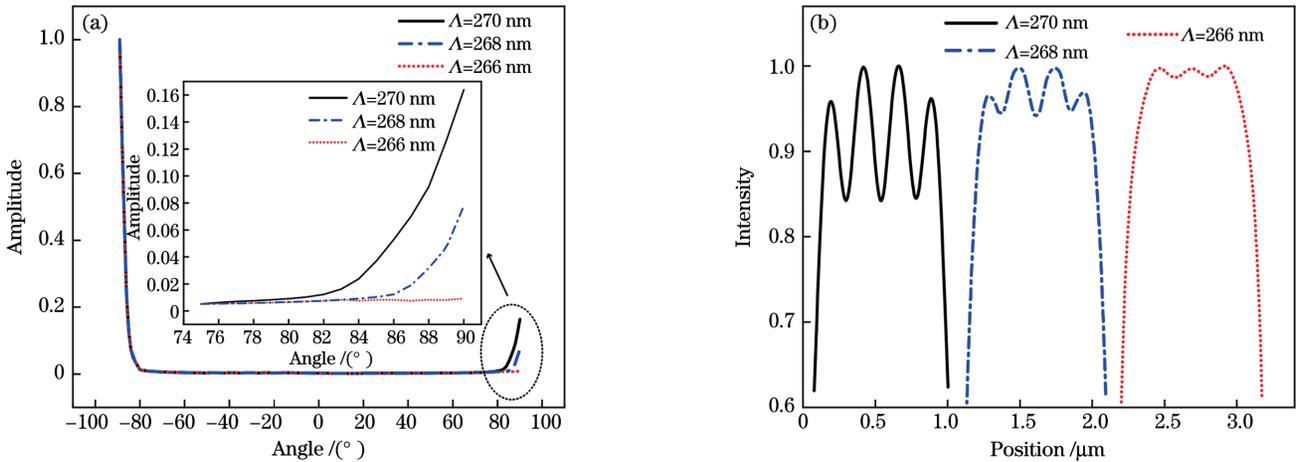


图9 532 nm照明光以接近 90° 照明270、268、266 nm周期光栅时的角谱分布以及合成孔径成像后的光栅结构。(a)角谱分布;(b)合成孔径成像后的光栅结构

Fig. 9 Angular spectrum distribution and grating structure after synthetic aperture imaging when 532 nm beam illuminates grating with 270, 268 and 266 nm period at incident angle about 90° . (a) Angular spectrum distribution; (b) grating structure after synthetic aperture imaging

由图9(a)可以看出:当光栅周期接近 $\lambda/2$ 时,1级衍射仅分布在 $80^\circ \sim 89^\circ$ 范围内;当周期为 $\lambda/2$ 时,即使以 90° 照明,1级衍射依然无法传播到远场。此时对应图9(b)中合成孔径成像后的光栅结构,可以发现当周期为 $\lambda/2$ 时,已经无法分辨光栅的周期,可分辨的光栅周期仅与波长相关,为 $\lambda/2$ 。

当 $k_0 n_t < k_{xi}$ 时, k_{xi} 为虚数,因此,高级次衍射波随着传播距离增大迅速消逝,如图9(a)中的点曲线所示,即532 nm照明光以接近 90° 照明266 nm周期光栅时仅剩0级反射波的角谱分布。对于280 nm周期光栅,当532 nm光正入射照明时,1、2、3级次衍射波随传播距离增加而消逝的情况如图10所示。

由图10可知,1、2、3级衍射波均在传播一个波长的距离后迅速消失,只存在0级反射波。由式(15)可

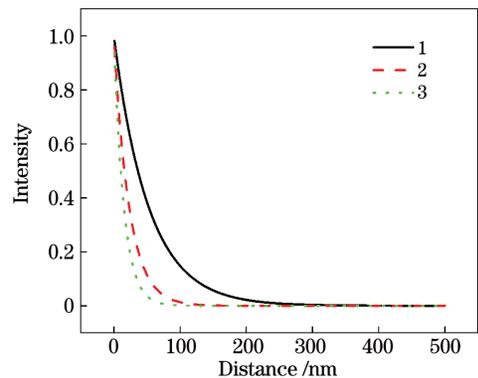


图10 532 nm光照明280 nm周期光栅时,1、2、3级次衍射波随传播距离增大而消逝的情况

Fig. 10 Diffraction waves of 1st, 2nd and 3rd orders fading with the increase of propagation distance for 532 nm beam illuminating 280 nm periodic grating

以得到此时 $\Delta < \lambda/2$ 。由于此时只存在 0 级反射波,不存在光栅衍射光信息,故而探测 0 级反射波无法对光栅结构进行成像。

接下来分析线宽分辨率。在 1 级衍射级次存在的情况下,不断改变占空比,使光栅的两个凸起部分逐渐靠近,直至两个凸起成像后的交点在两个凸起高度的

一半处相交,认为此时无法分辨^[22]。使用 532 nm 照明,光栅凸起部分设置为 160 nm,狭缝部分分别设置为 135、133、131 nm,此时周期分别为 295、293、291 nm,能够保证 1 级衍射级次存在。对光栅进行前文所述的合成孔径成像,得到图 11 所示的光栅结构,对中间两个凸起峰进行拟合,得到 peak 1 与 peak 2。

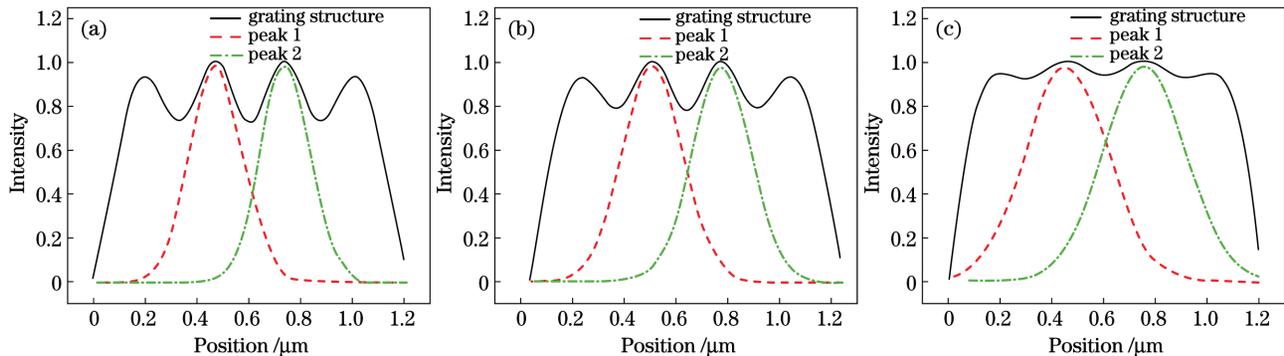


图 11 532 nm 光照明线宽为 135、133、131 nm 的光栅时,合成孔径成像后的光栅结构。(a)135 nm 线宽;(b)133 nm 线宽;(c)131 nm 线宽

Fig. 11 Grating structure after synthetic aperture imaging for 532 nm beam illuminating grating with line width of 135, 133 and 131 nm. (a) Line width of 135 nm; (b) line width of 133 nm; (c) line width of 131 nm

由图 11(a)可以看出,当线宽为 135 nm 且周期为 295 nm 时,两个拟合峰的交点在 0.4 左右,并且该交点可以清晰地将光栅相邻的两个凸起部分分开。随着占空比的改变,当线宽为 133 nm 时,如图 11(b)所示,相邻两个凸起部分成像后的拟合峰的交点在 0.5 左右;根据分辨率判定,认为此时刚好能够将两个凸起部分分开。继续改变占空比,使光栅相邻两个凸起部分继续靠近,如图 11(c)所示,拟合峰的交点达到 0.6 左右,此时认为两凸起部分不能分辨,无法对该光栅成功成像。

综上所述,采用不同角度照明光栅进行合成孔径成像,理论上能够成像的光栅周期最小为 $\lambda/2$,线宽分辨率最小为 $\lambda/4$ 。

4 结 论

本文使用严格耦合波理论,在高斯光束照明条件下,对亚波长光栅的合成孔径成像技术进行理论分析。通过精确求解高斯光束照明下光栅的出射光场分布与角谱分布,在角谱空间进行合成孔径成像,理论上可以获得出射场半空间内的角谱信息。本团队采用波长为 532 nm 的照明光合成了一 $70^\circ \sim 70^\circ$ 之间的光栅出射角谱信息,对 280 nm 周期、140 nm 线宽光栅的成像进行了分析。当光以 90° 平行照明光栅时,可以得到理论上的分辨率极限,此时的分辨率极限与孔径无关,仅与照明光的波长 λ 有关,此时对应的最小光栅周期为 $\lambda/2$,线宽分辨率为 $\lambda/4$ 。本文结果对亚波长情况下合成孔径技术的使用具有一定的指导意义。

参 考 文 献

- [1] Abbe E. Beiträge zur theorie des mikroskops und der mikroskopischen wahrnehmung[J]. Archiv Für Mikroskopische Anatomie, 1873, 9(1): 413-468.
- [2] Turpin T M, Gesell L H, Lapides J, et al. Theory of the synthetic aperture microscope[J]. Proceedings of SPIE, 1995, 2566: 230-240.
- [3] Meinel A B. Aperture synthesis using independent telescopes[J]. Applied Optics, 1970, 9(11): 2501-2504.
- [4] Rogstad D H. A technique for measuring visibility phase with an optical interferometer in the presence of atmospheric seeing[J]. Applied Optics, 1968, 7(4): 585-588.
- [5] Rogstad D H, Lockart I A, Wright M C H. Aperture-synthesis observations of H I in the galaxy M83[J]. The Astrophysical Journal Letters, 1974, 193: 309-319.
- [6] Alexandrov S A, Hillman T R, Gutzler T, et al. Synthetic aperture Fourier holographic optical microscopy[J]. Physical Review Letters, 2006, 97(16): 168102.
- [7] Kim M, Choi Y, Fang-Yen C, et al. High-speed synthetic aperture microscopy for live cell imaging[J]. Optics Letters, 2011, 36(2): 148-150.
- [8] Luo W, Greenbaum A, Zhang Y B, et al. Synthetic aperture-based on-chip microscopy[J]. Light: Science & Applications, 2015, 4(3): e261.
- [9] Lin Y C, Tu H Y, Wu X R, et al. One-shot synthetic aperture digital holographic microscopy with non-coplanar angular-multiplexing and coherence gating[J]. Optics Express, 2018, 26(10): 12620-12631.
- [10] Zheng C, Jin D, He Y P, et al. High spatial and temporal resolution synthetic aperture phase microscopy[J]. Advanced Photonics, 2020, 2(6): 065002.
- [11] Zheng G A, Horstmeyer R, Yang C. Wide-field, high-resolution Fourier ptychographic microscopy[J]. Nature Photonics, 2013, 7(9): 739-745.
- [12] Sun J S, Zuo C, Zhang L, et al. Resolution-enhanced Fourier ptychographic microscopy based on high-numerical-aperture illuminations[J]. Scientific Reports, 2017, 7: 1187.

- [13] Lee H, Chon B H, Ahn H K. Reflective Fourier ptychographic microscopy using a parabolic mirror[J]. Optics Express, 2019, 27(23): 34382-34391.
- [14] 李亦佳, 王正方, 王静, 等. 基于光纤布拉格光栅振动传感器和极限学习机的工字钢梁损伤识别[J]. 中国激光, 2021, 48(16): 1610004.
Li Y J, Wang Z F, Wang J, et al. Damage identification of I-beam based on fiber Bragg grating vibration sensor and extreme learning machine[J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(16): 1610004.
- [15] 沈川, 韦穗, 虞海秀, 等. 基于亚波长光栅结构的硅基液晶器件模型研究[J]. 光学学报, 2020, 40(3): 0305001.
Shen C, Wei S, Yu H X, et al. Model of liquid crystal on silicon device with sub-wavelength grating structure[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(3): 0305001.
- [16] Moharam M G, Gaylord T K. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction[J]. Journal of the Optical Society of America, 1981, 71(7): 811-818.
- [17] Moharam M G, Gaylord T K, Pommet D A, et al. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1995, 12(5): 1077-1086.
- [18] 张锦龙, 史帅凯, 焦宏飞, 等. 层叠亚波长光栅中的模式匹配分析法[J]. 光学学报, 2020, 40(12): 1205001.
Zhang J L, Shi S K, Jiao H F, et al. Analytical mode matching in stacked subwavelength gratings[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(12): 1205001.
- [19] Moharam M G, Gaylord T K, Grann E B, et al. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1995, 12(5): 1068-1076.
- [20] Floquet G. Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques[J]. Annales Scientifiques De l'École Normale Supérieure, 1883, 12: 47-88.
- [21] Lichtenberg B, Gallagher N C, Jr. Numerical modeling of diffractive devices using the finite element method[J]. Optical Engineering, 1994, 33: 3518-3526.
- [22] Masters B R. Superresolution optical microscopy: the quest for enhanced resolution and contrast[M]. Cham: Springer, 2020.

Synthetic Aperture Imaging Analysis of Sub-Wavelength Grating Based on Rigorous Coupled-Wave Analysis Method

Wang Kewei^{1,2,3}, Xiao Kang^{2,3}, Sun Jing^{2,3*}, Wang Zhongyang^{1,2,3**}

¹*School of Physical Science and Technology, Shanghai Tech University, Shanghai 201210, China;*

²*Center for Research and Interdisciplinary, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201210, China;*

³*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*

Abstract

Objective Microscopy is an essential tool in most life science laboratories. However, the resolution of the microscope is limited by the numerical aperture (NA) of the objective and light wavelength, which is defined as $\lambda/(2NA)$. In recent decades, methods such as stimulated emission depletion (STED), stochastic optical reconstruction microscopy (STORM), and photoactivated localization microscopy (PALM) have been proposed to overcome this limitation. However, in some fields, such as X-ray crystallography, wavefront sensing, and living cell imaging, label-free methods have demonstrated significant advantages. Aperture synthesis has been reported as one of the most effective label-free imaging methods that can be used to increase microscope resolution. Currently, most analyses of synthetic aperture techniques are based on scalar diffraction theory. However, for imaging objects smaller than the optical wavelength, the approximations and hypotheses in scalar diffraction theory are no longer valid. In this study, the imaging of sub-wavelength gratings is analyzed using the synthetic aperture method based on rigorous coupled-wave analysis (RCWA), which directly solves the Maxwell equation to obtain the analytical solution of the exit field under Gaussian beam illumination. The proposed method provides a more accurate analysis of synthetic-aperture imaging techniques for sub-wavelength gratings.

Methods RCWA was used to analyze the diffraction of a grating incident by a plane wave. In practice, illumination is a focused Gaussian beam that can be expanded into a series of plane waves. Therefore, the output field distribution can be expressed as the product of each plane wave component of the rotated Gaussian beam and diffraction field at the corresponding incident angle solved by RCWA. A one-dimensional rectangular grating with a 280 nm period and 140 nm line width was employed in the simulation (Fig. 1). RCWA under Gaussian beam illumination was used to analyze the output optical field and angular spectrum distribution with a half angle of 10° at different angles (Fig. 3). The angular spectra obtained from different illumination angles were combined using the synthetic aperture method (Fig. 4). Then, inverse Fourier transform was used to obtain the image of the sub-wavelength grating. Thus, a super-resolution grating structure was obtained (Fig. 5).

Results and Discussions As shown in equation (1), the dielectric constant of the grating area is expanded into the Fourier series, which represents the corresponding eigenmode of grating during calculation. The number of modes used in

grating reconstruction is closely related to the boundedness of the grating. We discuss two cases: the illumination area being larger than the grating area (Fig. 6) and the illumination area being smaller than the grating area (Fig. 7). Overall, the number of modes required for reconstruction relates to the grating size and period. When the grating size is small and the grating period is less than the wavelength, at least five eigenmodes must be retained. Subsequently, the differences between scalar diffraction theory and RCWA are discussed. The errors of scalar diffraction theory relative to the RCWA method are analyzed for different grating periods, depths, and materials with different refractive indices (Fig. 8). This study shows that because the interaction between electromagnetic fields is ignored, scalar diffraction theory is no longer valid for sub-wavelength gratings. Finally, the resolution of the synthetic aperture method is discussed. Equation (5) and Fig. 9 show that the minimum distinguishable period is half the wavelength of the incident light. In addition, the minimum resolution is one-quarter of the wavelength of the incident light (Fig. 11).

Conclusions In this study, the synthetic aperture imaging of sub-wavelength gratings is theoretically analyzed using strict coupled wave theory under Gaussian beam illumination. By accurately solving the optical field and angular spectrum distribution of the grating, the half space of the angular spectrum is synthesized using the synthetic aperture technique, and the image of the grating structure can be obtained by an inverse Fourier transform. In particular, the image of a grating with a 280 nm period and 140 nm line width is successfully reconstructed with the illumination of a 532 nm wavelength laser. For this synthetic aperture technique, the theoretical resolution is only related to the wavelength of the illumination light, as the resolved minimum grating period is $\lambda/2$ and the resolution of the line width is $\lambda/4$. This study provides guidance for using synthetic aperture technology with sub-wavelength gratings.

Key words holography; synthetic aperture imaging; sub-wavelength grating; rigorous coupled-wave analysis; super resolution imaging