

波长尺寸表面浮雕光栅的严格理论计算和分析

袁小聪 屈冬宁

(英国伦敦大学, 英皇学院物理系)

提 要

本文采用麦克斯韦(Maxwell)方程微分积分方程对波长尺寸的梯形反射光栅在TE模式(横向电场)偏振状态入射下,进行严格理论的计算和分析.表面电场计算表明,光栅刻槽斜边界对于金属材料金和铝光栅表面电场分布具有明显效应,对于入射波长为 $\lambda = 1.0 \mu\text{m}$ 附近的红外区域,金属材料具有强烈的金属特性,此时表面电场的斜边界效应更加明显.表面电场及其远场衍射效率伴随刻槽深度变化,而振荡特性进一步阐明了此效应对近,远场的作用.该方程适用于任意形状光栅或单一散射体对任意入射方向,任意偏振态的衍射和散射问题.

关键词 表面浮雕光栅, 刻槽深度.

1 引 言

在研究光栅衍射的实际问题中,先后提出了积分方法,微分方法以及耦合波理论等^[1~7],分别对平面光栅^[8],介电体材料^[9]及金属材料^[10]的光栅进行了分析和计算,但以上诸方法均着重研究了解决光栅问题的数学方法或利用数字计算进一步分析了光栅衍射的远场.本文采用麦克斯韦(Maxwell)方程,通过电磁场在介质表面的边界条件,直接生成微分积分方程组,严格地描述了衍射体的表面电磁场,散射场及透射场.此方法的优点在于通过计算分析表面电磁场,并且了解到当散射体尺寸为波长量级时,各种几何的、物理的和材料的因素引起的表面场变化及其对衍射远场的影响,更深刻地认识到散射体尺寸为波长量级时的特性,从而有利于研究其潜在的物理意义.

2 理论分析

设介质 $V_0(\mathbf{r})$ 为自由空间 $V_1(\mathbf{r})$ 为复折射率为 $n_1 + i\phi_1$ 的散射体,其中 n_1 为折射率, κ_1 为消失系数,对于介电体($\chi_1 = 0$),金属导体($\chi_1 > 0$),纯导体($\chi_1 \gg 0$).电磁场在两种介质耦合的边界条件为,电场和磁场的切向分量在边界连续,即

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_s) &= \mathbf{n} \times \mathbf{H}_1(\mathbf{r}_s), \\ \mathbf{n} \times \mathbf{H}_0(\mathbf{r}_s) &= \mathbf{n} \times \mathbf{H}_1(\mathbf{r}_s) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

式中 \mathbf{n} 为表面外法线矢量, \mathbf{r}_s 为表面位置矢量.通过推导麦克斯韦(Maxwell)方程并应用反傅里叶变换及边界条件^[11],得到一组微分方程(2)~(7),

在 V_0 空间

收稿日期:1992年9月26日;收到修改稿日期:1993年3月10日
本课题得到王宽诚教育基金会有限公司的资助.

$$\begin{aligned}
 & \left(1 + \frac{\nabla_p \nabla_p}{k_0^2}\right) \cdot \oint\!\!\!\oint_{S_0} G_0(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_s) J_s^e(\mathbf{r}_s) dS(\mathbf{r}_s) - \nabla_p \times \oint\!\!\!\oint_{S_0} G_0(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_s) J_s^m(\mathbf{r}_s) dS(\mathbf{r}_s) \\
 & = \begin{cases} -E^s(\mathbf{r}_p), & \text{when } \mathbf{r}_p \in V_0(\mathbf{r}) \\ -\frac{1}{2}E^s(\mathbf{r}_p) + \frac{1}{2}E^i(\mathbf{r}_p) & \text{when } \mathbf{r}_p \in S(\mathbf{r}_s) \\ E^i(\mathbf{r}_p) & \text{when } \mathbf{r}_p \in V_1(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (2) \\
 & \hspace{15em} (3) \\
 & \hspace{15em} (4)
 \end{aligned}$$

在 V_1 空间

$$\begin{aligned}
 & \left(1 + \frac{\nabla_p \nabla_p}{k_0^2}\right) \cdot \oint\!\!\!\oint_{S_1} G_1(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_s) J_s^e(\mathbf{r}_s) dS(\mathbf{r}_s) - \nabla_p \times \oint\!\!\!\oint_{S_1} G_1(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_s) J_s^m(\mathbf{r}_s) dS(\mathbf{r}_s) \\
 & = \begin{cases} E_1(\mathbf{r}_p), & \text{when } \mathbf{r}_p \in V_1(\mathbf{r}) \\ \frac{1}{2}E_1(\mathbf{r}_p), & \text{when } \mathbf{r}_p \in S(\mathbf{r}_s) \\ 0 & \text{when } \mathbf{r}_p \in V_1(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (5) \\
 & \hspace{15em} (6) \\
 & \hspace{15em} (7)
 \end{aligned}$$

式中 $E^i(\mathbf{r})$ 为入射光波, $E^s(\mathbf{r}_p)$ 为衍射或散射光波, $E^1(\mathbf{r}_p)$ 为 V_1 介质的电场, $J_s^e(\mathbf{r}_s)$ 和 $J_s^m(\mathbf{r}_s)$ 分别为表面电磁场, 即 $J_s^e(\mathbf{r}_s) = -\mathbf{n} \times H_s$, $J_s^m(\mathbf{r}_s) = \mathbf{n} \times E_s$, $G_0(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_s)$ 和 $G_1(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_s)$ 为介质 V_0 和 V_1 的格林函数, 对于光栅结构, 该函数可以表示为^[12,13]:

$$G_{0,1}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_s) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{i}{2\gamma_j^{0,1} P} \exp [i\alpha_j(x_p - x_s) + i\gamma_j^{0,1}(|z_p - z_s|)] \quad (8)$$

式中 P 为光栅周期, $\gamma_j^{0,1} = \sqrt{K_{0,1}^2 - \alpha_j^2}$, $K_{0,1}$ 为介质 V_0 和 V_1 内的波数, $\alpha_j = \alpha_0 + 2\pi j/p$, $\alpha_0 = K_0 \sin\theta_0$, θ_0 为入射角.

方程组(2)~(7)的物理意义为散射场由众多的表面次级子波叠加而成, 格林函数则描述着光场的传播, 换言之, 它表达着衍射或散射的远场对表面电磁场和响应. 这是惠更斯(Huygens)原理的重述. 该方程组不仅适用于周期性变化的光栅结构, 而且适用于单一的散射结构. 此方程组建立的基本条件是研究线性的, 均匀的, 各向同性的散射介质.

显然方程组(2)~(7)对于大多数衍射结构不能采用简单的解析方法计算其电磁场的分布. Harrington^[14]详细介绍了求解电磁场离散解的力矩方法(Moments Method), 其中包括傅里叶展开方法, 逐点匹配方法及区间分割方法等. 本文中针对光栅的几何尺寸为波长量级的特点, 为了达到精确度的要求, 采用分割区间的方法, 对方程组(2)~(7)进行数值计算, 如图 1 所示.

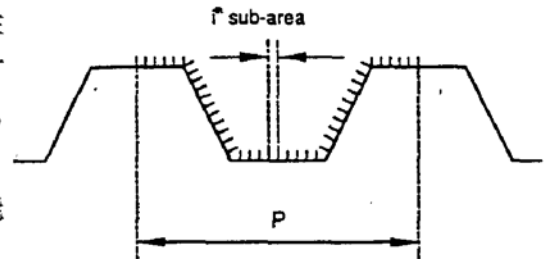


Fig. 1 Schematic diagram of the grating surface showing grating parameters and the sub-areas for the purpose of integration on the i^{th} sub-area

3 数值解及其物理意义

求解方程组(2)~(7)的基本思路是首先考虑联立方程组(4)和(7)式, 在此方程组中, 左边 J_s^e 和 J_s^m 为未知复变量, 而方程右边 E^i 为入射波, 因此联立方程组(4)和(7)式可以求解表面电磁分布 J_s^e 和 J_s^m . 对于散射问题, 当表面场 J_s^e 和 J_s^m 为已知的情况下, 方程(2)式可以计算远场的散射分布 $E^s(\mathbf{r}_p)$.

3.1 表面电场分布

图 2(a)为金属材料金和铝光栅表面电场数值分布. 入射光波为 TE 模式的 $\lambda = 1.0 \mu\text{m}$ 的正入射. 图中垂直虚线将光栅周期划分为顶部、斜边和底部, 水平虚线为经典的标量理论值. 显

然,严格理论的数值解与标量理论分布具有明显的差异,并且这种差异尤其突出地表现在靠近斜边两端的顶部和底部.由表面电场分布看,位于顶部靠近斜边的振幅渐变大,而底部靠近斜边的振幅逐渐变小,两者均背离标量理论值向相反的方向变化,而且均发生在靠近斜边的位置.因此我们认为光栅的斜边边界对入射光波及表面场有重大影响,其物理意义是阻止 TE 模式的入射光波抵达光栅槽的底部,因为这是为了满足表面电磁场边界条件的需要,即切向电磁场要求在边界连续,因此,位于光栅槽底部靠近斜边的幅值(V_0 介质内)必须小于其它位置的振幅,以便于匹配余边另一侧(V_1 介质内)较小的电场振幅^[15,16]

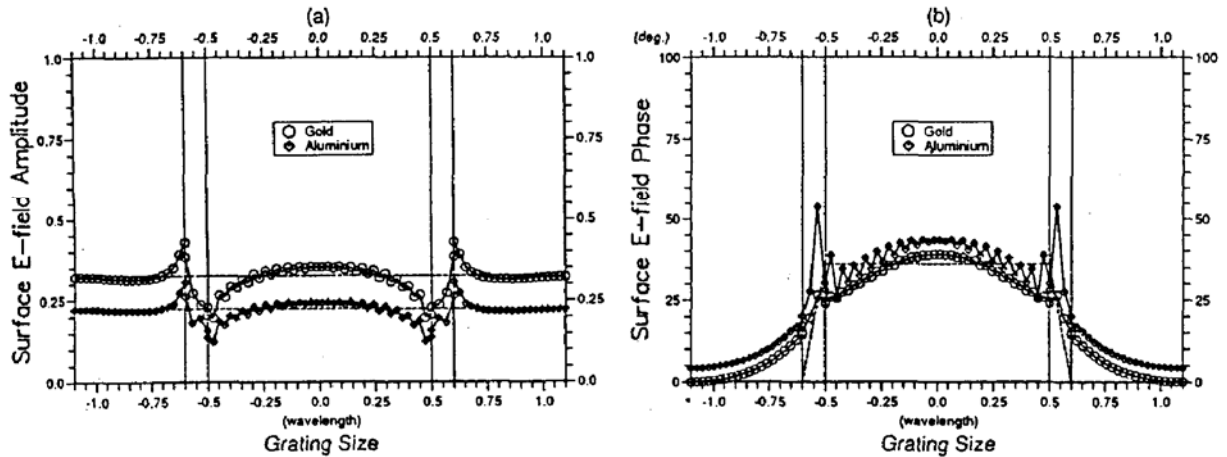


Fig. 2 Amplitude (a) and phase (b) of the surface electric field for the trapezium-shaped aluminium ($n_c = 1.75 + i8.5$)^[18] and gold ($n_c = 0.179 + i6.044$) gratings at normal incidence. The gratings have the period $P = 2.2 \lambda$ and equal ridge and groove width $W = 1.0 \lambda$. The groove depth is $D = 0.1 \lambda$

图 2(b)所示为表面电场的位相分布,根据标量理论所述,其位相分布应为光栅表面浮雕的几何形状,如图中虚线所示.然而,同样的明显差异发生在斜边边界附近.光栅槽内的电场数值解平均位相值为 33° ,小于标量理论值 36° ,即光栅槽深度的几何尺寸.此现象说明了斜边边界效应有效地阻止了 TE 模式入射光波抵达槽底,从而减小了表面场的实际位相深度.

由图 2 所示,可以认为表面电磁场的振幅和位相同时受到衍射体的调制,即便对于纯金属的导体,它已不再为纯位相的散射体,受调制的振幅将沿光栅表面进行能量再次分配,因此该结论对于采用光学手段检测波长尺寸的散射结构尤其重要.另外影响表面电磁场分布的还有其它因素,如偏振模式,入射角,刻槽深度及介质材料等.

3.2 表面电场与刻槽深度

图 3 所示为光栅刻槽内底部表面电场平均值与刻槽深度关系.图 3(a)所示为光栅周期 $p = 2.2 \lambda$ 的情况,表面电场在浅的深度范围内,即 $d < 0.2 \lambda$ 时,幅值变化不明显.然而,在此深度极限以外,平均电场明显呈振荡状态.换言之,此时的刻槽深度严重影响着表面电场的幅值和分布.对于大周期光栅的情况,由图 3(b)所示为 $p = 8.2 \lambda$,在整个深度范围内,平均电场振荡很微弱,呈现常量趋势.

上述表面电场相对于刻深度的振荡特性,可以认为是入射光波与槽内二次后向衍射波进行多次干涉所致^[15,16],当光栅尺寸接近波长尺寸时,其斜边边界效应愈加强烈,从而导致表面电场的振荡特性变得尤为突出.对于大尺寸光栅,严格理论的计算结果接近于标量理论的论述,这是可以理解的.

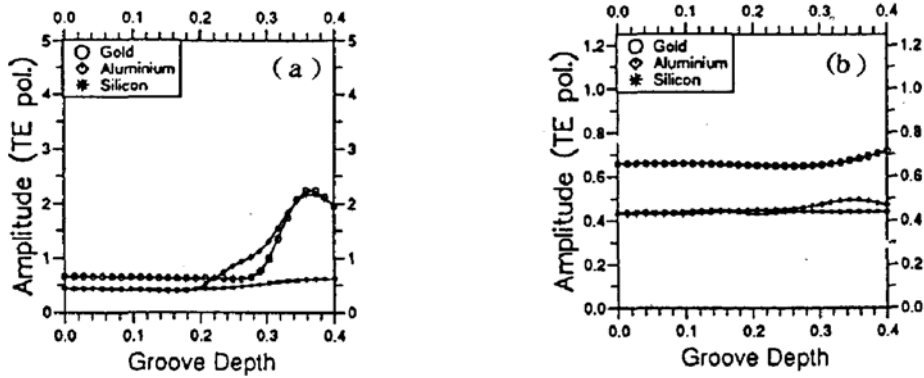


Fig. 3 Average surface electric field at the bottom of the groove versus the depth for gold ($n_c = 1.4 + i1.88$), aluminium ($n_c = 0.4 + i4.45$) and silicon ($n_c = 3.5 + i0.0$) gratings at normal incidence when (a) $p = 2.2\lambda$ and (b) $p = 8.2\lambda$

3.3 远场衍射与刻槽深度

图 4 描述光栅的各级衍射波在入射情况下与刻槽深度的关系. 由图 4 可见, 零级衍射效率 (D. E.) 在深度为 $0.25 \sim 0.3\lambda$ 情况下, 存在着一个极小值 (小于 2%). 此现象无疑说明衍射波的能量重新分配直接反映着光栅的深度信息, 作者认为此现象是由于光栅刻槽斜边边界效应对入射光波的作用, 而且该效应波延伸到了远场的衍射^[17]. 按照槽内二次后向衍射波多次干涉的理论, 表面电磁场随着光栅刻槽的深度变化, 而开始表现其振荡特性, 图(4)所示的表面场振荡特性同样影响着远场衍射. 因此, 远场的深度效应对研究探测微小结构的深度具有实用价值.

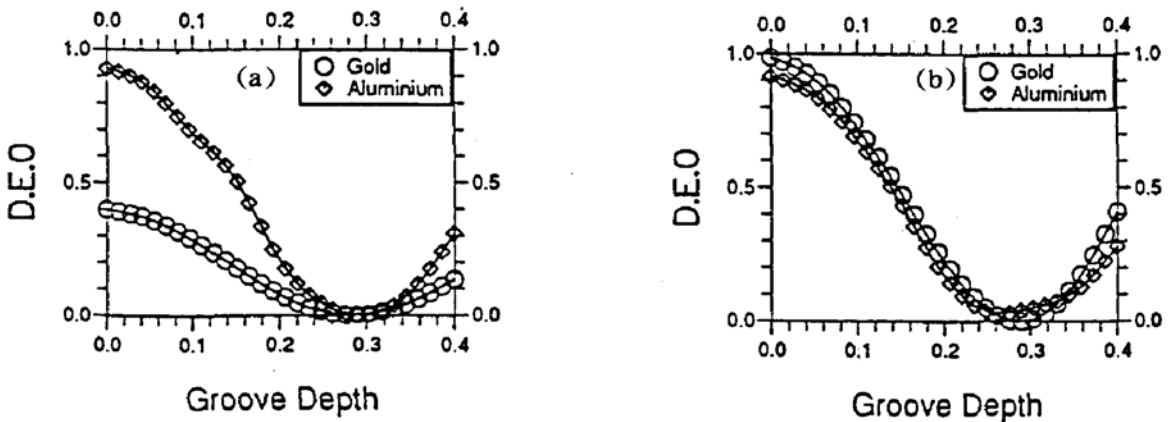


Fig. 4 Diffraction efficiency orders for trapezium-shaped grating versus groove depth at normal incidence for (a) aluminium ($n_c = 0.4 + i4.45$) and gold ($n_c = 1.4 + i1.88$) and (b) aluminium ($n_c = 1.75 + i8.5$) and gold ($n_c = 0.179 + i6.044$). The gratings have the period of $P = 2.2\lambda$ and equal ridge and groove width $W = 1.0\lambda$

图 4(a)表明, 在入射波长为 $\lambda = 0.4\mu\text{m}$ 时, 金属金和铝光栅的零级衍射波具有相同的最小值深度, 即当 $d = 0.28\lambda$ 时, 零级衍射效率最小; 图 4(b)表明, 在入射波长为 $\lambda = 1.0\mu\text{m}$ 时, 铝的最小值深度为 $d = 0.22\lambda$, 而金的电小值深度为 $d = 0.27\lambda$, 换言之, 对于金而言, 它需要更深的刻槽来达到最小的零级衍射效率. 作者认为产生不同深度值的直接原因来自斜边边界效应, 而且此效应对金属材料尤其明显, 例如如图 3 中非金属材料硅的表面电场表明的相对稳定性. 在波长 $\lambda = 1.0\mu\text{m}$ 的红外区域, 金有较强的金属特性, 因此它表现出强烈的斜边边界效应, 它将阻止 TE 模式的入射光波抵达刻槽底部, 因此数值计算表明金属材料具有相对小的位相

值. 在研究深度效应时, 为了达到象铝光栅一样的零级衍射最小值, 金光栅需要更深的刻槽.

4 结 论

本文采用 de Hoop 提出和微分积分方程, 通过电磁场边界条件的耦合, 对梯形表面浮雕反射光栅的表面电场及远场衍射, 在 TE 模式偏振条件下, 进行了数值计算, 并着重探讨了影响表面电磁场分布的光栅刻槽斜边边界效应, 以及表面电场和远场衍射效率与刻深度的关系. 计算结果表明, 不论是表面电场还是远场衍射效率, 其随深度变化的曲线, 均定性地蕴藏着几何深度信息, 并且进一步证实了光栅的斜边边界效应.

由于方程组(2)~(7)式已经包括了介质的边界条件, 因此对于 TM 模式(横向磁场)偏振状态的入射光波, 此方程组仍然适用. 值得说明的是, 本文叙述的方法不仅适用于周期性结构, 如光栅问题的计算, 对于众多的单一结构, 只要具有适用的格林函数, 例如单槽构具有 Hankel 函数作为格林函数, 进行严格理论的数值计算同样是可进的.

感谢伦敦大学英皇学院物理系教授 Prof. R. E. Burge 的指导和支持.

参 考 文 献

- [1] R. Petit, ed., *Electromagnetic theory of grating*. Berlin: Springer-Verlag, 1980
- [2] D. Maestre, *Rigorous vector theories of diffraction gratings. Progress in Optics XXI*, Elsevier Science Publishers B. V., 1984: 1~67
- [3] D. Maestre, A new general integral theory for dielectric coated gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 1978, **68**: 490~495
- [4] J. Chandezon, M. T. Dupuis, G. Cornet, Multicoated grating: A differential formalism applicable in the entire optical region. *J. Opt. Soc. Am.*, 1982, **72**: 839~846
- [5] S. T. Peng, H. L. Bertoni, T. Tamir, Analysis of periodic thin-film structures with rectangular profiles. *Opt. Commun.*, 1974, **10**: 91~94
- [6] S. T. Peng, T. Tamir, Directional blazing of waves guided by asymmetrical dielectric grating. *Opt. Commun.*, 1974, **11**: 405~409
- [7] S. T. Peng, T. Tamir, H. L. Bertoni, Theory of periodic dielectric waveguides. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, 1975, **MTT-23**: 123~133
- [8] M. G. Moharam, T. K. Gaylord, Rigorous coupled-wave analysis of planar grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 1981, **71**: 811~818
- [9] M. G. Moharam, T. K. Gaylord, Diffraction analysis of dielectric surface relief gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 1982, **72**: 1385~1392
- [10] M. G. Moharam, T. K. Gaylord, Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 1986, **3**: 1780~1787
- [11] A. T. De Hoop, in *Modern topics in electromagnetics and antennas*. PPL Conference Publication 13, Stevenage: Peter Peregrinus Ltd., 1977
- [12] J. G. Dil, B. A. J. Jacobs, Apparent size of reflecting polygonal obstacles of the order of one wavelength. *J. Opt. Soc. Am.*, 1979, **69**: 950~960
- [13] J. Pasman, in *Principles of Optical Disc Systems*. (G. Bouwhuis, J. Braat, A. Huijser, J. Pasman, G. Van Rosmalen and K. S. Immink), Bristol: Adam Hilger Ltd., 1985
- [14] R. F. Harrington, *Field computations by moment methods*. New York: MacMillan, 1968
- [15] D. N. Qu, R. E. Burge, X. Yuan, Analysis of surface electromagnetic fields of wavelength-sized surface relief grating. *Opt. Commun.*, 1991, **84**: 113~117
- [16] D. N. Qu, R. E. Burge, X. Yuan, Diffractive properties of surface relief micro-structures. *Proc. SPIE*, 1991, **1506**: 152~159
- [17] X. Yuan, D. N. Qu, R. E. Burge, Analysis of far-field diffraction characteristics of wavelength-sized surface relief gratings. *J. Mod. Opt.*, 1992, **39**: 1719~1732

- [18] Material data taken from: G. Hass and L. Hadley, Optical properties of metals, in *American Institute of Physics Handbook*, Second edition, D. E. Gray, ed. McGraw-Hill Book Company. Inc., 1963

Rigorous study and numerical analysis of surface relief gratings

YUAN Xiaocong Qu Dongning

(*Physics Department, King's College London Strand, London WC2R 2LS, England*)

(Received 26 September 1992; revised 10 March 1993)

Abstract

The differential integral equation derived from Maxwell's equations was used to rigorously deal with the wavelength-sized surface relief trapezium-shaped reflecting grating in TE (transverse electric) polarization. Numerical analyses of the surface electric field show that the effect of edge and wall of the grating has significant influence on the surface field of metallic materials, e. g. gold and aluminium. Particularly, for the incident wavelength $\lambda = 1.0 \mu\text{m}$ when gold is in strong metallic nature, the edge and wall effect becomes more apparent. The oscillating characteristics of the surface field at the bottom of the grooves and the far field diffraction efficiency against the groove depth are explained by its physical mechanism of the edge and wall effect. This technique can be used to tackle the diffraction problem for arbitrary shapes of grating or single scattering obstacle in arbitrary angles of incidence and polarization.

Key words surface relief grating, groove depth.