

位相光栅的衍射级次*

傅克祥 王植恒 文 军 周传宏

(四川大学物理系, 成都 610064)

摘 要 用矢量衍射理论讨论了位相光栅衍射级次的有限性及其与入射角的关系, 得出的结论与用光程方法得出的结果一致, 作出了在不同入射角条件下各衍射级次的分布图, 给出了求解各级衍射波方向的公式。明确指出, 当在空气层中只存在零级反射波和零级透射波时, 在介质基底中还可能存在高级次的衍射波。

关键词 矢量衍射, 位相光栅, 衍射级次。

1 引 言

微光学(二元衍射光学)的研究始于 70 年代末^[1]。90 年代时, 微加工技术已经达到了很高的精度^[2], 水平尺寸可精确到 $0.01 \mu\text{m}$, 浮雕深度可精确到 $0.005 \mu\text{m}$ 。随着微加工技术的高速发展, 微光学的研究在 90 年代形成了热潮。由于微光学在量子光学、集成光学、光谱学和光学全息中的广泛应用前景, 形成了种类繁多的微光学器件, 因此受到众多学者的重视。目前, 微光学器件的微结构尺寸已接近或小于所使用的波长, 其衍射特性用标量衍射理论已不能完满解释, 必须使用电磁矢量理论去分析问题。已有许多关于衍射效率的讨论^[3], 但对衍射级次的探讨却很不够。普通光学中的光程分析方法给出了入射面垂直于光栅方向的光栅方程^[4], 用矢量衍射理论也得到了与此相同的光栅方程, 并明确提出了衍射级次的有限性^[3], 例如对于亚波长光栅, 只存在零级衍射^[5]。但文献对位相光栅的衍射级次随光栅周期的变化规律的讨论还不够全面, 特别是在光波任意斜入射下, 衍射级次与入射极角、方位角、光栅周期和波长的关系及其分布规律, 各级衍射波的传播方向规律, 还未见文献报道。对于在空气层中只存在零级反射波和零级透射波的情况, 介质基底层中的衍射级次问题也未探讨。本文用矢量衍射理论对衍射级次的分布问题作深入讨论, 并把它与用光程分析方法所得的结论进行比较。

2 均匀层中电磁波的严格解

设光波波长为 λ_0 , 光栅沿 x 方向的周期为 T_0 , 光栅槽宽为 C , 槽深为 h , 如图 1 所示。对于空气中垂直于光栅方向、入射角为 θ_0 的入射平面光波, 可以把它分解成 TE 波与 TM 波的

* 中国工程物理研究院二所和中国科学院光电所微细加工光学技术国家重点实验室资助。

收稿日期: 1997-05-13; 收到修改稿日期: 1997-07-28

叠加, 即

$$\text{TE: } \mathbf{E} = (0, E, 0), \quad \mathbf{H} = \frac{i}{\omega\mu_0} \left[-\frac{\partial E}{\partial z}, 0, \frac{\partial E}{\partial x} \right],$$

$$E = E_0 \exp [i(k_x x + k_z z)] \quad (1)$$

$$\text{TM: } \mathbf{H} = (0, H, 0), \quad \mathbf{E} = \frac{i}{\omega\epsilon_0} \left[\frac{\partial H}{\partial z}, 0, -\frac{\partial H}{\partial x} \right],$$

$$H = H_0 \exp [i(k_x x + k_z z)] \quad (2)$$

其中: $k_x = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sin \theta_0$ 、 $k_z = \frac{2\pi}{\lambda_0} \cos \theta_0$ 为入射波矢量的 x 、 z 分量。定态电磁波应满足亥姆霍兹方程

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_0^2 \right] [\mathbf{E}, \mathbf{H}] = 0$$

其中 k_0 为入射波矢量。

不管是 TE 波还是 TM 波, 若入射面 (x, z) 垂直于光栅方向 (y 方向), 满足亥姆霍兹方程的反射波和透射波解的形式均为^[1]

$$\Psi(x, z) = \sum_j a_j \exp [i(k_{xj}x + \Lambda_j z)] \quad (3)$$

其中 k_{xj} 、 Λ_j 分别代表第 j 级波的波矢量的 x 分量和 z 分量,

$$k_{xj} = k_x + \frac{2\pi j}{T_0}, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \infty. \quad (4)$$

$$\Lambda_j = \pm \sqrt{\left[\frac{2\pi}{\lambda_0} \right]^2 - \left[k_x + \frac{2\pi j}{T_0} \right]^2} = \pm \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{1 - \left[\sin \theta_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \right]^2} \quad (5)$$

式中反射波取 $-$ 号, 透射波取 $+$ 号。 Ψ 可代表 TE 波和 TM 波反射场与透射场的任一分量。

在均匀介质基底层中, 解的形式不变。但由于相对折射率 n_s 不等于 1, 因而(5)式应改写成

$$\Lambda_j^{\hat{}} = \pm \sqrt{\left[\frac{2\pi}{\lambda_0} n_s \right]^2 - \left[k_x + \frac{2\pi j}{T_0} \right]^2} = \pm \frac{2\pi n_s}{\lambda_0} \sqrt{1 - \left[\frac{\sin \theta_0}{n_s} + \frac{\lambda_0 j}{T_0 n_s} \right]^2} \quad (6)$$

对于任意斜入射的平面光波(见图 2), 也可把它分解成 TE 波和 TM 波的叠加, 即

$$\text{TE: } \begin{cases} \mathbf{E} = \left[-\mathbf{e}_y \frac{\omega\mu_0 k_z}{k_s^2} H_{x0} + \mathbf{e}_z \frac{\omega\mu_0 k_y}{k_s^2} H_{x0} \right] \exp [i(k_x x + k_y y + k_z z)] \\ \mathbf{H} = \left[\mathbf{e}_x H_{x0} - \mathbf{e}_y \frac{k_x k_y}{k_s^2} H_{x0} - \mathbf{e}_z \frac{k_x k_z}{k_s^2} H_{x0} \right] \exp [i(k_x x + k_y y + k_z z)] \end{cases} \quad (7)$$

$$\text{TM: } \begin{cases} \mathbf{E} = \left[\mathbf{e}_x E_{x0} - \mathbf{e}_y \frac{k_x k_y}{k_s^2} E_{x0} - \mathbf{e}_z \frac{k_x k_z}{k_s^2} E_{x0} \right] \exp [i(k_x x + k_y y + k_z z)] \\ \mathbf{H} = \left[\mathbf{e}_y \frac{\omega\epsilon_0 k_z}{k_s^2} E_{x0} - \mathbf{e}_z \frac{\omega\epsilon_0 k_y}{k_s^2} E_{x0} \right] \exp [i(k_x x + k_y y + k_z z)] \end{cases} \quad (8)$$

其中 E_{x0} 、 H_{x0} 是独立的已知量, 并以此来决定它的偏振状态。设入射角为 (θ_0, ϑ_0) [见图 2 (b)], 则入射波矢量

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{e}_x k_x + \mathbf{e}_y k_y + \mathbf{e}_z k_z \quad (9)$$

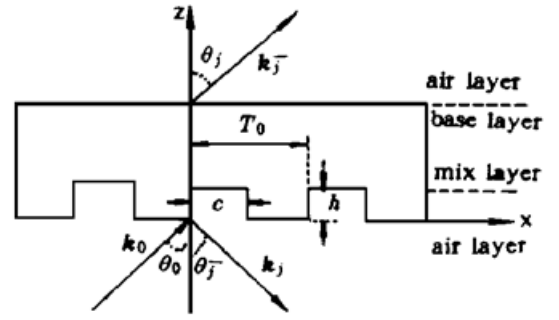


Fig. 1 Geometry of phase grating

$$\left. \begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi}{\lambda_0} \cos \varrho \sin \theta_0, \\ k_y &= \frac{2\pi}{\lambda_0} \sin \varrho \sin \theta_0, \\ k_z &= \frac{2\pi}{\lambda_0} \cos \theta_0, \\ k_s^2 &= k_y^2 + k_z^2 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

可以严格证明*，反射波和透射波解的形式为^[6]

$$\Psi(x, y, z) = \sum_j a_j \exp [i(k_{xj}x + k_y y + \Lambda_j z)] \quad (11)$$

其中 Ψ 为电磁波的任一直角分量，波矢量为

$$\mathbf{k} = \mathbf{e}_x k_{xj} + \mathbf{e}_y k_y + \mathbf{e}_z \Lambda_j \quad (12)$$

其中 k_{xj} 、 k_y 、 Λ_j 分别代表 j 级波的波矢量的 x 、 y 、 z 分量， k_x 、 k_y 由(10)式确定。

$$k_{xj} = k_x + \frac{2\pi j}{T_0}, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \infty \quad (13)$$

$$\Lambda_j = \pm \sqrt{k^2 - k_y^2 - k_{xj}^2} = \pm \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{1 - \sin^2 \varrho \sin^2 \theta_0 - \left[\cos \varrho \sin \theta_0 + \frac{2\pi j}{T_0} \right]^2} \quad (14)$$

式中透射波取+号，反射波取-号。

(3)式和(11)式分别为在特殊斜入射和任意斜入射下均匀介质中的反射或透射场的表达式，其各项系数将由入射波和边界条件确定。由于本文限于讨论衍射级次问题，所以只讨论各项成为导波应满足的条件。

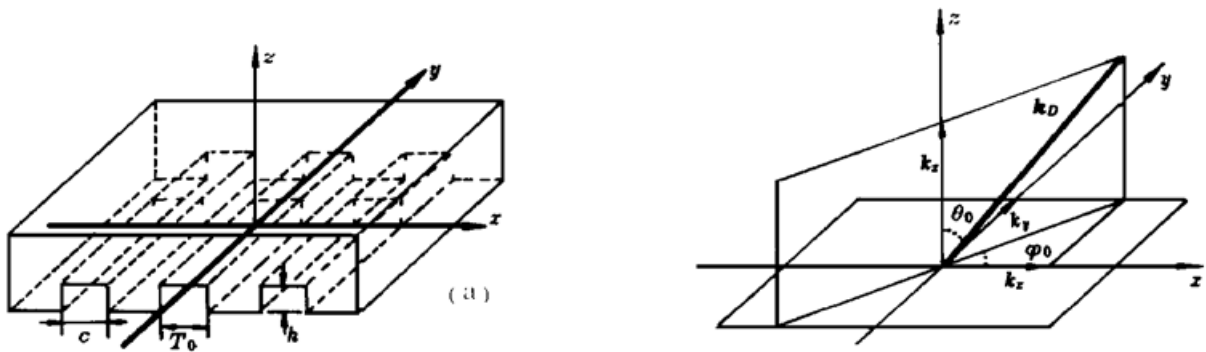


Fig. 2 (a) Three-dimension geometry of rectangular phase grating in the arbitrary incident angle, (b) Three-dimension figure of wave vector

3 垂直入射下反射波和透射波的衍射级次

为了保证反射波和透射波是导波，由(3)式可知， Λ_j 必须为非零实数，否则就会变成倏逝波而不能传到远处。在垂直入射条件下， $\theta_0 = 0$ ，根据(5)式，必然要求

$$1 - \left[\frac{\lambda_0 j}{T_0} \right]^2 > 0$$

从而得

$$|j| < \frac{T_0}{\lambda_0} \quad (15)$$

其最大衍射级 J 为

* 光栅中电磁场的严格解将另文讨论。

$$J = \begin{cases} \text{取整} \left[\frac{T_0}{\lambda_0} \right] - 1, & \text{当 } \frac{T_0}{\lambda_0} \text{ 为整数时} \\ \text{取整} \left[\frac{T_0}{\lambda_0} \right], & \text{当 } \frac{T_0}{\lambda_0} \text{ 为非整数时} \end{cases} \quad (16)$$

由此可见, 反射波和透射波的衍射级次是有限的。由(16)式可知, 当 $\lambda_0 < T_0 \leq 2\lambda_0$ 时, 只存在零级和 ± 1 级衍射波, 当 $T_0 \leq \lambda_0$ 时, 只存在零级衍射波。也就是说, 当光栅周期小于等于波长时, 垂直入射的光波只能被垂直反射和垂直透射, 当光栅周期大于波长时, 还存在若干个偏离入射方向的其它级次的反射波和透射波。设第 j 级衍射波的偏转角为 θ_j (见图 1), 则

$$\sin \theta_j = \frac{k_{xj}}{k_0} = \frac{\lambda_0 j}{T_0}, \quad \theta_j = \arcsin \left[\frac{\lambda_0 j}{T_0} \right] \quad (17)$$

(17) 式与标量衍射理论中著名的光栅方程^[4]是一致的。

4 任意斜入射下的衍射级次

对于任意斜入射的情况, 为保证反射波和透射波是导波, 必然要求(14)式中的 Λ_j 为非零实数, 即

$$1 - \sin^2 \varphi \sin^2 \theta_0 - \left[\cos \varphi \sin \theta_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \right]^2 > 0 \quad (18)$$

显然, j 的取值是有限的, 所以衍射级次仍是有限的。依据(18)式作出衍射级次分布图, 如图 3 所示。图中以入射极角 θ_0 (单位为度) 为横坐标, 以周期 T_0 (以波长为单位) 为纵坐标, 图 3 (a)、(b)、(c)、(d) 的入射方位角 φ 分别为 0° 、 45° 、 60° 、 75° 。各级衍射波的存在区域标明在图中。

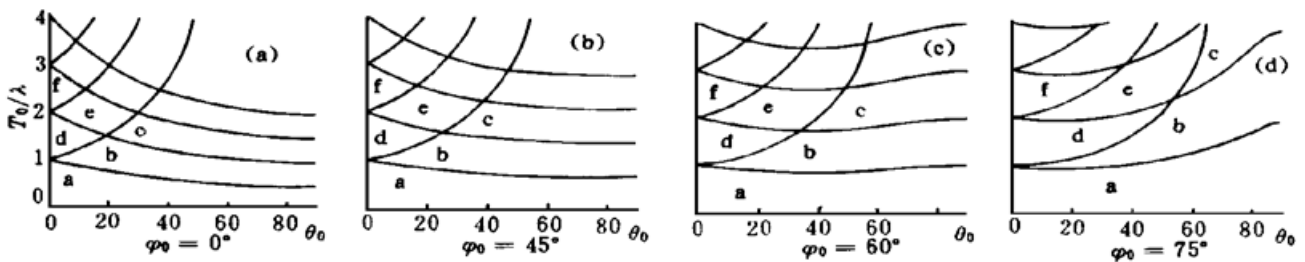


Fig. 3 Distribution of diffraction orders

在图 3 中 a 区对应 0 级衍射, b 区对应 0、-1 级衍射, c 区对应 0、-1、-2 级衍射, d 区对应 0、 ± 1 级衍射, e 区对应 0、 ± 1 、-2 级衍射, f 区对应 0、 ± 1 、 ± 2 级衍射。

在不同方位角 φ 下, 零级次分布图如图 4 所示。每条曲线下面的区域就是只存在零级次的区域。

在只有零级次的情况下, 光栅混合层实际上是一种微结构薄膜, 根据文献[7]的讨论, 该膜层与一个各向异性单轴晶体薄膜类似, 它有一个等效的折射率 n_e (对于 TE 波) 和 n_m (对于 TM 波), 其值介于 1 和 n_s 之间,

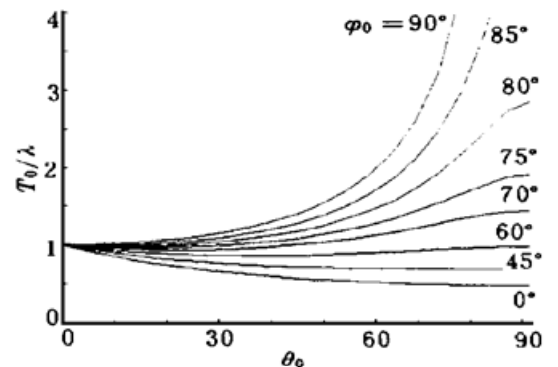


Fig. 4 Distribution of the zero-order of diffraction

可通过调整光栅周期 T_0 、占空比 b 和槽深 h 加以灵活控制。称这种薄膜为“亚波长微结构薄膜”(subwavelength micro-structure film, 简称 SMF)。

5 任意斜入射下的光栅方程

在任意斜入射条件下, 设第 j 级衍射波的偏转角为 (θ_j, φ) , θ_j 代表第 j 级波矢量与 z 轴的夹角, φ 代表第 j 级波矢量在 x, y 平面上的投影矢量与 x 轴的夹角, 则波矢量 \mathbf{k} 的各分量可表为

$$k_{xj} = \frac{2\pi}{\lambda_0} \cos \varphi \sin \theta_j, \quad k_y = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sin \varphi \sin \theta_j, \quad \Lambda_j = \frac{2\pi}{\lambda_0} \cos \theta_j \quad (19)$$

根据(10)、(13)、(19)式, 得

$$\left. \begin{aligned} \cos \varphi \sin \theta_j &= \cos \varphi_0 \sin \theta_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \\ \sin \varphi \sin \theta_j &= \sin \varphi_0 \sin \theta_0 \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

求解(20)式, 得各级衍射波的偏转角为

$$\left. \begin{aligned} \theta_j &= \sin^{-1} \sqrt{(\sin \varphi_0 \sin \theta_0)^2 + \left[\cos \varphi_0 \sin \theta_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \right]^2} \\ \varphi &= \operatorname{tg}^{-1} \sqrt{\sin \varphi_0 \sin \theta_0 / \left[\cos \varphi_0 \sin \theta_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \right]} \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

(20)式就是任意斜入射下的光栅方程, 该式中第一式可由下述光程方法导出。

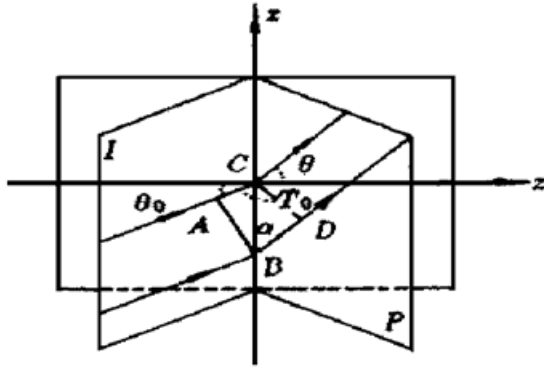


Fig. 5 Geometry of optical distance

干涉光程法原理如图5。光栅平面的法线方向沿 z 轴, 光栅方向为 y 轴且垂直于图面向外, 光栅周期方向沿 x 轴, 入射光线方向与 x 轴组成的平面为 I 平面, 出射光线方向与 x 轴组成的平面为 P 平面。在任意入射条件下, I 、 P 平面一般不重合。设两束光线刚好入射到光栅的最小周期节点上, 根据光干涉原理, 相邻两束入射光线间的光程差为 $DB - AC$ 。当该光程差等于波长 λ_0 的整数倍 j 时, 就是产生干涉亮纹的条件。设光栅周期为 $T_0 = CB$, 入射光线、透射光线与 x 轴的夹角为 α_0 、 α , 与 z 轴的夹角为 θ_0 、 θ , 则产生亮纹的条件就是

$$T_0 \cos \alpha - T_0 \cos \alpha_0 = \lambda_0 j$$

从而得到任意斜入射下的光栅方程为

$$\cos \alpha = \cos \alpha_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \quad (22)$$

注意到 $\cos \alpha = \frac{k_{xj}}{k} = \cos \varphi \sin \theta_j$, $\cos \alpha_0 = \frac{k_x}{k_0} = \cos \varphi_0 \sin \theta_0$, (22)式与(20)式第一式完全一致。

考虑到入射面法向单位矢量 \mathbf{n}_i 和透射面法向单位矢量 \mathbf{n}_t 为

$$\mathbf{n}_i = \frac{\mathbf{k}_0 \times \mathbf{e}_z}{k_0}, \quad \mathbf{n}_t = \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_z}{k_0} \quad (23)$$

把(9)式、(10)式、(12)式和(13)式代入, 得

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{n}_i &= \sin \varrho \sin \theta_0 \mathbf{e}_x - \cos \varrho \sin \theta_0 \mathbf{e}_y \\ \mathbf{n}_t &= \sin \varrho \sin \theta_0 \mathbf{e}_x - \left[\cos \varrho \sin \theta_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \right] \mathbf{e}_y \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

由(24)式可知,在一般情况下, $\mathbf{n}_i \neq \mathbf{n}_t$, 因而入射面与各级透射面不重合。同理,入射面与各级反射面也不重合。只有两种特殊情况才会使入射面、透射面和反射面相重合: 1) $j = 0$, 即零级波; 2) $\varrho = 0$, 即入射面与光栅横切面(xz 面)一致, 见图5。当入射面不在 xz 面上时, $\theta_0 + \alpha_0 > \frac{\pi}{2}$, $\theta_j + \alpha_j > \frac{\pi}{2}$; 当入射面刚好在 xz 平面上时, $\theta_0 + \alpha_0 = \frac{\pi}{2}$, $\theta_j + \alpha_j = \frac{\pi}{2}$ 。在后一情况下, 由(23)式得

$$\sin \theta_j = \sin \theta_0 + \frac{\lambda_0 j}{T_0} \quad (25)$$

这就是特殊斜入射下的光栅方程^[4]。(25)式也可由矢量衍射理论[(20)式]得出, 只要令 $\varrho = 0$, 立即得(25)式。

综上所述, 由矢量衍射理论和光线干涉光程原理都能得到相同的光栅方程(但光程方法得不到(20)式第二式)。

6 当空气层中只存在零级衍射时基底层中的衍射级次

为了简便, 仅讨论垂直入射的情况。在垂直入射条件下, $\theta_0 = 0$, 当 $T_0 \leq \lambda_0$ 时, 在入射空气层中只存在零级反射波, 在出射空气层只存在零级透射波, 但在介质基底层中还可能存在着其它级次的衍射波。由(6)式可知, 当 $\theta_0 = 0$, $T_0 \leq \lambda_0$ 时, 只要

$$1 - \left[\frac{\lambda_0 j}{T_0 n_s} \right]^2 > 0$$

Λ_j 仍为非零实数。因此, 在均匀介质层中, 还存在着几个级次的衍射波, 其最大级次 $J_{介}$ 为

$$J_{介} = \begin{cases} \text{取整} \left[\frac{T_0 n_s}{\lambda_0} \right] - 1, & \text{当 } \frac{T_0 n_s}{\lambda_0} \text{ 为整数时} \\ \text{取整} \left[\frac{T_0 n_s}{\lambda_0} \right], & \text{当 } \frac{T_0 n_s}{\lambda_0} \text{ 为非整数时} \end{cases} \quad (26)$$

例如, 设 $T_0 = 10 \mu\text{m}$, $\lambda_0 = 10.6 \mu\text{m}$, $n_s = 4$, 则 $J_{介} = 3$ 。这就是说, 虽然在外部空气层中只存在零级透射波和零级反射波, 然而在基底层中还存在着零级、 ± 1 级、 ± 2 级和 ± 3 级衍射波, 设这些衍射波的偏转角为 θ_j , 则

$$\sin \theta_j = \frac{k_{xj}}{k_{介}} = \frac{\lambda_0 j}{T_0 n_s}, \quad \theta_j = \arcsin \left[\frac{\lambda_0 j}{T_0 n_s} \right] \quad (27)$$

在这个特例中, 很容易算得 $\theta_j = 15.37^\circ, 32.01^\circ, 52.66^\circ$ 。虽然在基底层中存在着 ± 1 级、 ± 2 级和 ± 3 级衍射波, 但它们并不进入空气层中, 因为这几个偏转角都大于临界反射角 $\theta_c = \sin^{-1} \frac{1}{n_s} = 14.48^\circ$, 从而又被全反射回介质中。在各级全反射波的共同作用下, 将会使空气层中的零级反射率产生一些独有的特征。这将另文讨论。

在任意斜入射下, 也有上述相似的性质。

结 论 本文用矢量衍射理论系统地讨论了位相光栅衍射级次与光栅参数和入射照明光入射角度之间的关系, 说明了衍射级次的有限性。本文得到的结果表明, 在计算衍射角度和衍射

级次时,用直观的几何光程方法推导的光栅方程仍是可用的。

本文阐明了位相光栅在光栅周期小于波长时,会消除高级次衍射,只存在零级衍射;指出在只存在零级衍射时,这种位相光栅更具有薄膜的性质,即形成了亚波长微结构薄膜。这种结构型光学薄膜的研究将会对薄膜光学的研究产生重大影响。

参 考 文 献

- [1] K. Knop, Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rect-angular grooves. *J. Opt. Soc. Am.*, 1978, **68**(9) : 1206~ 1210
- [2] P. B. Fischer, S. Y. Chou, Sub-50 nm high aspect-ratio silicon pillars, ridges and trenches fabricated using ultrahigh resolution electron beam lithography and reactive ion etching. *Appl. Phys. Lett.*, 1993, **62**(12) : 1414~ 1416
- [3] E. Noponen, J. Turunen, Binary high-frequency-carrier diffractive optical elements: Electromagnetic theory. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1994, **11**(3) : 1097~ 1109
- [4] (苏)福里斯著,吉林大学译,普通物理学,北京:人民教育出版社,120~ 121
- [5] E. B. Grann, M. G. Moharam, Hybrid two-dimensional subwavelength surface-relief grating-mesh structures. *Appl. Opt.*, 1996, **35**(5) : 795~ 800
- [6] E. Noponen, J. Turunen, Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three-dimensional profiles. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1994, **11**(9) : 2494~ 2502
- [7] E. B. Grann, M. G. Moharam, D. A. Pommet, Artificial uniaxial and biaxial dielectrics with use of two-dimensional subwavelength binary gratings. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1994, **11**(10) : 2695~ 2703

Diffractive Order of Phase Grating

Fu Kexiang Wang Zhiheng Wen Jun Zhou Chuanhong

(Physics Department, Sichuan University, Chengdu 610064)

(Received 13 May 1997; revised 28 July 1997)

Abstract The finiteness of diffractive order of the phase grating and the relations between the diffractive orders and the incident angle are discussed by means of the vector diffraction theory. The results are in correspondence with that attained by the optical path method. The distribuion of each diffractive order is illustrated at different incident angles and the diffractive direction of each diffraction wave are given. It is pointed out that while there only exist the zero-order reflection wave and the zero-order transmit in free space layer, the diffraction waves of higher diffractive orders may exist in the substrate layer.

Key words vector diffraction, phase grating, diffractive order.