

文章编号：0253-2239(2005)10-1324-5

用光栅的 ± 1 级能量之比测量光栅参量

李建龙 傅克祥 张丽娟

(四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

摘要：提出了利用透射光谱结合优化算法来反演衍射光栅参量的新方法。利用衍射光栅两个对称级次($m=\pm 1$)的能量比来处理这种差异, 实现光栅参量的成功反演。首先, 在理想光栅(以正弦面型光栅为例)透射光谱曲线上叠加高斯噪声来模拟实验测量曲线, 结合正单纯形法对该法进行模拟反演, 所得结果非常接近真值。其次, 对于体积相位全息光栅, 利用实验测得的透射光谱 ± 1 级能量比, 反演得到的各参量的相对误差不超过 2%, 这进一步证明了该方法的可行性和有效性。同时该方法具有无损伤、操作简便、可重复、易推广、成本低等优点。

关键词：衍射光栅; 透射光谱; 光栅参量; 效率比; 正单纯性法

中图分类号: O436.1 文献标识码: A

Determining the Grating's Parameters with the Diffraction Orders of $m = \pm 1$ Efficiencies Ratio

Li Jianlong Fu Kexiang Zhang Lijuan

(School of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu, 610064)

Abstract: A new method for determining the grating parameters with the transmission spectrum and the optimized algorithm is described. In order to decrease the difference and ensure the precision of the calculation result, the symmetric-order efficiency ratio $m = \pm 1$ is employed. Firstly, several points from the simulated experimental curve are selected, which is attained by adding the Gauss noises on the transmission spectrum, submit to the optimization method — Normal simple algorithm to calculation the optical parameters of the grating. The result is very near to the true value. Secondly, the volume phase holographic grating parameters are calculated with this metrology, the result is perfect, its relative error is less than 2%. This demonstrated the reliability and the credibility of the metrology. It has some advantages such as no damage, facility of manipulation, repeat, easy generalized and low cost.

Key words: diffractive grating; transmission spectrum; grating parameters; efficiency ratio; normal simple algorithm

1 引言

随着光栅在现代工艺中的广泛应用, 其参量的测量已成为光栅应用的一个重要问题, 现在常用的测量方法可分为两种: 直接测量和间接测量。直接测量光栅参量常用的仪器有分光计^[1]、原子力显微镜(AFM)^[2]、衍射光栅和 CCD^[3]等, 有些仪器因其制作工艺复杂, 操作技术要求高, 需要的时间太长, 导致测量成本增大而得不到普遍推广, 有的存在对待测样品的破坏性。近年来, 随着优化算法的日益完善, 具有无损伤、无扰动、成本低等优点的间接测量光学参量的方法^[4~7]已引起人们的重视, 测量衍射光栅的光学

参量的有椭偏法^[6,7]等。而衍射光栅每一衍射级次的能量测量简便, 实验数据稳定且精确^[8], 这一过程远优于椭偏法的测量过程。为此, 本文提出了一种用光栅的透射光谱间接测量光栅参量的新方法。由于实际光栅的表面并不光滑而具有一定的粗糙度, 周期结构并不严格而具有细微的畸变, 光栅层的介质分布不均匀, 这就使实际光栅与理想光栅在各单一物理量之间有较大的差异, 导致人们不能简单采用单一级次来确定反演光栅参量。当入射光垂直入射到光栅表面时, 光栅的两个对称的衍射级次($m=\pm 1$)的能量是一样的, 在非垂直入射时, 这两个衍射级次的能量

作者简介: 李建龙(1978~), 男, 湖南邵阳人, 四川大学硕士研究生, 主要从事光电信号处理方面的研究。

E-mail: jian-long@126.com

收稿日期: 2004-05-24; 收到修改稿日期: 2004-11-30

往往同方向变化。因而它们的能量之比(用 W_{+1}/W_{-1} 表示)能将上述差异减小,甚至抵消,使实验中的测量值 W_{+1}/W_{-1} 与理想光栅的理论值非常接近,从而保证了我们能高精度地反演出光栅的参数。并且此种方法在实验上具有以下的优点:1)实验设备简单易行;2)采集数据较少;3)实验数据稳定且对光栅无损伤。

2 实验装置示意图及光栅模型

在图 1 所示的实验装置示意图中,光源是可见光波段的连续光源,用单色仪将其按一定的波长间隔通过偏振片,偏振片将入射光波转化为线偏振光,该线偏振的 TE 波或 TM 波以一定的入射角入射到光栅表面上,在光栅的后表面上外,将两个探测器所接收的光信息通过 I/D 转换器转化为电信息,然后输送到一台计算机上(这就是比较探测器),由计算机动态跟踪记录±1 级的能量之比,这不仅大大减轻实验者的劳动强度,同时也大大提高了所采集实验数据的精确度。图 2 为光栅纵切面图,其中 d 和 h 分别为光栅的周期和厚度, n_1 为空气的折射率, n_2 为光栅层的折射率,基底的折射率与光栅层的折射率相同。

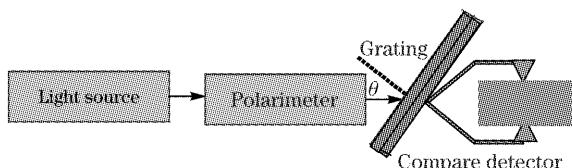


图 1 实验装置图

Fig. 1 Experimental setup

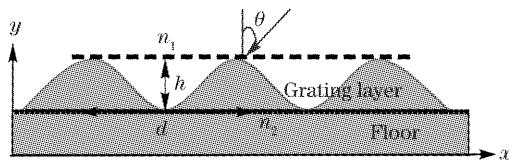


图 2 光栅纵切面图

Fig. 2 The vertical section of the grating model

3 ±1 级与 -1 级能量比

采用图 2 所示的光栅模型,当一束线偏振光以 θ 角入射到光栅平面后,透过光栅的各衍射级次的能量用傅里叶模式理论^[9]及反射透射系数递推算法(RTCM)^[10]来求解,其求解的过程为:首先将光栅分成多个薄层,利用电磁场理论求出各层中的基本

模式场,每一层中的电磁场就是该层中基本模式场的线性叠加,其叠加系数代表该层模式场的振幅系数。只要把电磁场 E, H 的表达式代入到各分层分界面上 E, H 满足的边界条件中,就可以得到一组以振幅系数为未知量的线性代数方程组。最后,为了稳定准确地求解出振幅系数,采用反射透射系数递推算法来求得反射系数,透射系数和振幅系数,最终求得各级透射波的透射率。

当入射光束垂直入射到光栅表面时,由于 $m=\pm 1$ 级的对称性,±1 级的衍射效率大小一样。但是,当入射光束的入射角偏离垂直入射时,这两级的衍射效率就会发生改变。对于比较小的偏离,它们的变化不会很显著。光栅表面的粗糙度,周期的细微畸变以及折射率分布的非均匀都会引起±1 级衍射效率的偏离,但这种偏离通常同方向而削弱 W_{+1}/W_{-1} 的改变,从而能保证在实验中测得的±1 级效率之比与理论模型的±1 级的效率之比基本一致,光栅单一级次的衍射效率在处理刚才提及的偏差而带来的误差不及前者理想。为此,研究了同一块光栅的±1 级能量之差($W_{+1}-W_{-1}$),+1 级的能量(W_{+1}),+1 级与 0 级的能量之比(W_{+1}/W_0)和±1 级能量之比(W_{+1}/W_{-1})对光栅表面粗糙度的敏感度,结果如图 3 所示。这一块正弦面型光栅的各光学参量分别为:光栅周期 $d=1.50 \mu\text{m}$,光栅的介质折射率 $n_2=1.45$,光栅的表面浮雕深度 $h=0.70 \mu\text{m}$,入射角 $\theta=35^\circ$,入射波长 $\lambda=623.8 \text{ nm}$ 。

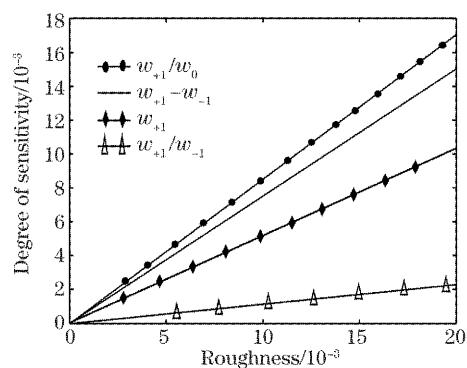
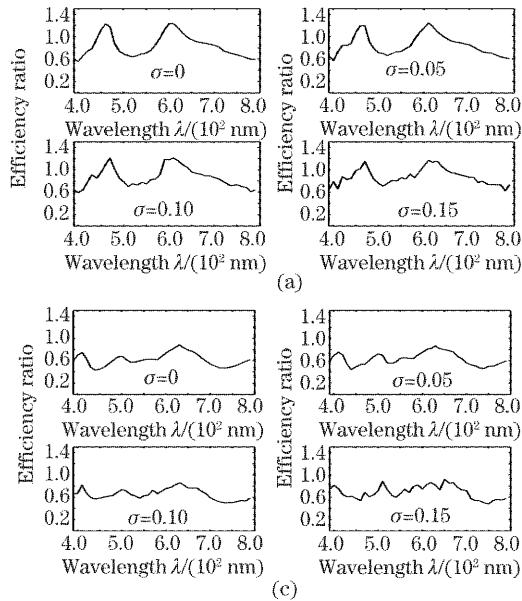


图 3 衍射光栅的各种衍射效率对光栅表面粗糙度的敏感程度

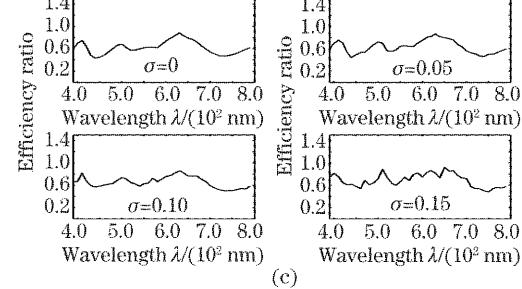
Fig. 3 The sensitivity of every kind diffraction efficiency versus the surface roughness

实验中,通过在正弦面型光栅的表面加上不同的高斯噪声来模拟光栅表面的粗糙度。标准偏差代表表面的粗糙度(用横坐标表示)。各物理量对表面粗糙度的敏感度用相对误差(即光栅表面粗糙时各物理量的值与光栅表面光滑时各物理量所对应的

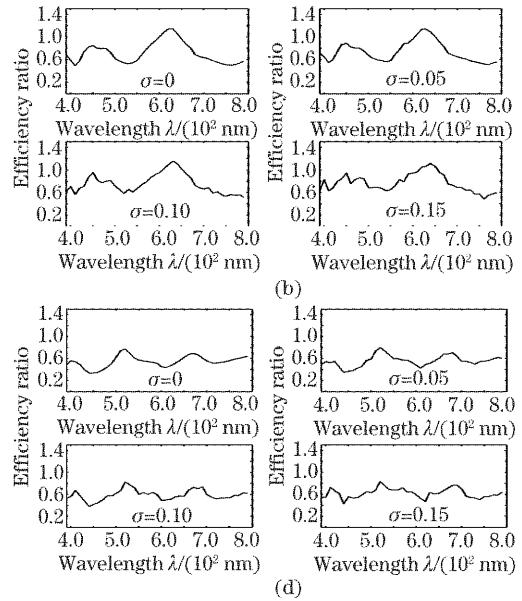
值)来描述(即纵坐标表示)。从图 3 可知,同一条件下,±1 级的能量比对光栅表面的粗糙度最不敏感,次之是单一一级次($m=+1$),最大的+1 级与 0 级之比,它对光栅的表面粗糙度的敏感度差不多是±1 级能量之比的 9 倍。同时,设图 2 所示的光栅其各



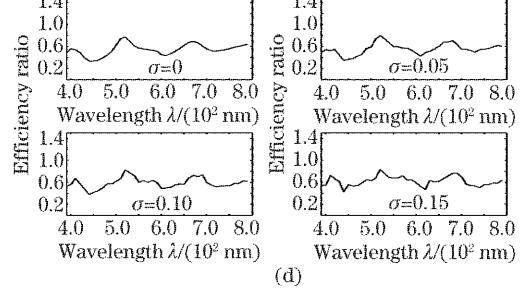
(a)



(b)



(c)



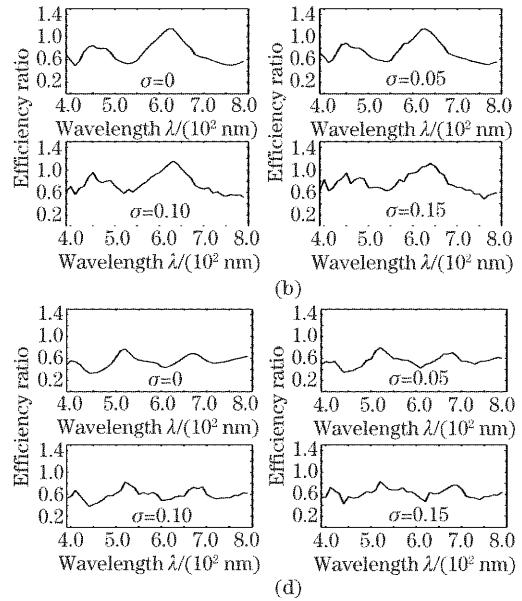
(d)

图 4 不同入射角时,不同粗糙度的±1 级能量之比随入射波长变化曲线。(a) 3°, (b) 6°, (c) 9°, (d) 12°

Fig. 4 The change of W_{+1}/W_{-1} with different angles of incidence versus incident wavelength at different degree of the roughness. (a) 3°, (b) 6°, (c) 9°, (d) 12°

图 4 中的横坐标代表可见光的波长,波长范围为 400~800 nm,纵坐标为 W_{+1}/W_{-1} 。 σ 表示所加高斯噪声的标准偏差,当 $\sigma=0$ 表示光栅是理想的,即光栅面型完全是标准的正弦形,各层的介质均匀,但实际的光栅并非如此,在衍射光栅的实际制作过程中,存在许多误差,可分为系统误差和随机误差两大类,系统误差主要有深度误差、对位误差、线宽误差,对非中心对称元件而言有旋转对位误差,对中心对称元件有偏心误差;随机误差主要是指元件的台阶表面的粗糙程度。深度误差主要是在蚀刻过程中的控制参量不准确而产生的,正弦面形光栅的表面不是标准的正弦曲线,矩形光栅的每一单元的光栅层不是标准的矩形而近乎是梯形,各种面形的光栅表面有不同的粗糙度,介质分布不均匀等。本文中,我们利用光栅衍射的±1 级的对称性质,在一定程度上,它减少折射率的微小变化和光栅层内介质分布不均匀而带来的误差,它将光栅制作过程中存在的误差通过比值的形式大大减小,甚至基本抵消,这一优点我们可以从图 4 可以看出,即使当随机误差的标准偏差加大到 0.15 时,其变化趋势仍与理论曲线基本一致,这体现了 W_{+1}/W_{-1} 处理误差的能力。

参量如下: $d = 1.5 \mu\text{m}$, $h = 0.7 \mu\text{m}$, $n_1 = 1$, $n_2 = 1.453$ 。当线偏振光以 3°, 6°, 9° 和 12° 入射时,不同表面粗糙度下光栅的±1 级的能量之比随波长变化关系的理论曲线如图 4 所示。



从不同入射角的情形可以看出,随着标准偏差的加大,模拟的测量值与真实值的误差增大,这完全符合实际情况。

4 模拟反演

将研究的物理模型约定为正弦表面光栅(如图 2 所示),各参量的值为 $n_1 = 1$, $n_2 = 1.5$, $d = 1.5 \mu\text{m}$, $h = 0.7 \mu\text{m}$, 从第三部分的分析可以看出,在同一入射角情形,虽然光栅表面粗糙程度不同,但 W_{+1}/W_{-1} 随波长的变化基本上是稳定的,取值变化非常小。我们通过在理想透射光谱曲线上叠加不同偏差的高斯噪声来模拟实验曲线,从模拟的实验曲线上任取五个点来反演出光栅参量。整个的模拟计算过程主要包括正演与反演两个部分,一般步骤为:首先从模拟的实际 W_{+1}/W_{-1} 实验光谱曲线上取若干个点,然后用适当的优化算法进行反演,反演进程用评价函数来评定,当评价函数达到设定的一个较小的值时,即可得出光栅参量。用最小二乘法构造的评价函数为

$$P_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\eta_{ci} - \eta_{ei})^2$$

其中 N 为所选点的个数, η_c 为测量值(代表 $\eta_{ci}, i = 1, 2, \dots, N$), η_g 为由光栅参量的尝试解得到的透射率(代表 $\eta_{gi}, i = 1, 2, \dots, N$)。在逐步迭代过程中, η_c 保持不变, η_g 不断变化。选取图 4 中的各种模拟曲线的整数波长处的正负一级的能量之比值作为模拟的实验测量值,采用正单纯形算法^[9] 进行参量反演。

表 1 光栅参量的数值模拟计算结果

Table 1 The result of the parameters of the grating by the calculation

| RResult | θ | 3° | 6° | 9° |
|----------|----------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| σ | | | | |
| 0.05 | | (0.9983, 1.4514, 0.6964) | (0.9999, 1.4513, 0.6948) | (1.0065, 1.4519, 0.6996) |
| 0.10 | | (0.9962, 1.4473, 0.6918) | (0.9897, 1.4510, 0.6973) | (0.9911, 1.4404, 0.6946) |
| 0.15 | | (0.9798, 1.5302, 0.6597) | (0.9806, 1.4468, 0.6839) | (0.9763, 1.4222, 0.6846) |

从表 1 中可以看出,随着标准偏差的增大,所得参量与真实值的误差是增大的,但仍可使各参量的反演值接近真实值,其误差一般小于所选点的标准偏差。当 $\sigma=0.15$ 时,光栅的面型可能已经不再是正弦形,但我们仍反演出了一个光栅参量。这完全可以由图 3 得到解释,因为 W_{+1}/W_{-1} 能大大抑制光栅的表面粗糙度所带来的误差。也就是 $\sigma=0.15$ 的表面粗糙度传递给 W_{+1}/W_{-1} 的偏差稍大于 1.5%, 这仍旧是正弦面型的光栅。从理论上证明了该方法的有效性和可靠性。

5 实验与结论

由于实验中没有正弦面形光栅,只有体积相位全息光栅。为了从实验上检验理论的正确性,我们只好利用后一种光栅,在上述理论的指导下,利用图 1 的装置测量了一块基板为玻璃,记录材料为重铬酸盐明胶的体积相位全息光栅。实验前先用椭偏

在反演中假定光栅的周期已知,在不同入射角不同标准偏差的情形下,选择相同的反演初始点: $n_1 = 0.90, n_2 = 1.35, h = 0.60 \mu\text{m}$, 各参量的反演结果如表 1 所示。表 1 中括号内参量排列依次为 (n_1, n_2, h) , 不加标准偏差时,光栅参量的标准值为 $(1, 1.50, 0.70 \mu\text{m})$ 。

表 2 不同入射角下,不同探测波长的±1级的能量之比的实验测量结果

Table 2 The experimental result of grating's W_{+1}/W_{-1} at various optical wavelength and incident angle

| W_{+1}/W_{-1} | λ | 632.8 nm | 514.5 nm | 496.5 nm | 488.0 nm | 476.5 nm |
|-----------------|-----------|---------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| θ | | | | | | |
| 3° | | 4.181±0.110 | 3.862±0.115 | 3.783±0.213 | 3.901±0.107 | 3.894±0.113 |
| 6° | | 7.208±0.117 | 17.912±0.108 | 19.093±0.099 | 19.256±0.316 | 20.722±0.32 |
| 9° | | 161.632±2.237 | 3.685±0.014 | 11.884±0.023 | 11.032±0.137 | 10.551±0.048 |
| 12° | | 2.061±0.011 | 6.890±0.022 | 6.493±0.056 | 6.473±0.124 | 6.054±0.042 |
| 15° | | 8.903±0.064 | 13.041±0.109 | 0.014±0.204 | 9.548±0.155 | 7.432±0.126 |

从表 2 可以看出,实验测量的最大误差不超过 2%。

在反演的过程中的反演起始点分别为 $n_p=1.20$,

法测量出了光栅膜层的平均折射率(用 n_p 表示),用国产的精密膜厚仪测量了光栅厚度(精度为 $0.1 \mu\text{m}$),并推算出了该光栅的调制折射率(用 n_t 表示),利用测量一级衍射角的方法较准确地测出光栅的周期 d 。

各参量值分别为: $n_p=1.453, n_t=0.08, h=20.1 \mu\text{m}, d=1.72 \mu\text{m}$ 。设光栅周期 d 是准确的而不参与反演。反演光栅的三个参量(n_p, n_t, h),从实验测量的曲线上选取五个不同的 W_{+1}/W_{-1} 代入正单纯形法来反演出该光栅的参量。实验中,我们分别选用了同一入射角五种不同的波长和同一波长五种不同入射角下的 W_{+1}/W_{-1} 值,这五种波长分别为 632.8 nm, 514.5 nm, 496.5 nm, 488.0 nm, 476.5 nm, 入射角分别为 3°, 6°, 9°, 12° 和 15°。对每一个 W_{+1}/W_{-1} 测量三次,然后算出它们的平均值作为测量值,选出其中偏离平均值最大的测量值的偏差作为测量误差。实验测量结果如表 2 所示。

$n_t=0.05, h=18.0 \mu\text{m}$ 。在实际的计算过程中,只要将反演步长乘以一个呈高斯分布的随机数,再严格控制收敛条件。此时可以将起点设得较远,以便减少对

初始值的依赖性。这样,即使在对光栅了解不多的情况下,也能很快地搜索到一组最佳值。在反演程序中选用了两种不同的取值方式:1)同一波长不同的人射角下取值时的反演结果;2)不同的波长同一人射

角下的反演结果,在第一种情况中选取了 632.8 nm 的波长,第二种情况选取了 6°入射角,反演结果如表 3 所示。

表 3 两种不同的选点方法反演出的光栅参量

Fig. 3 The result of parameters with two kinds modes of selecting experimental data

| Mode RResultant | I | II |
|--------------------|-------------------------|-------------------------|
| (n_t, n_p, h) | (0.079, 1.449, 19.6 μm) | (0.080, 1.451, 20.1 μm) |

从表 3 可以看出,这两种选点的方法,都能较准确地反演出光栅的参量。但第一种选值方式所反演出的膜厚与真值的误差约为 2.5%,超过实验测量误差,因而第一种选点法可以在缺少入射光源时用来估计光栅参量。与光栅的真值相比可知,后一种取值的方法优于前一种。

综上所述,透射光谱和正单纯形优化算法结合起来,能准确地测量出光栅参量。该法具有准确、高效、可重复、成本低、对光栅无损伤等优点,在不太了解光栅参量的情形下,该法可能是测量光栅参量的另一可选方法。限于篇幅,我们只用了正单纯形法,只反演了光栅的三个参量,也可以用其他的优化算法,其他光栅参量也可以利用类似的方法反演出来。我们只测量了体积相位光栅的参量,其他类型的透射光栅也可利用该方法。最后要指出的是,鉴于反演理论的程序要求,用该法来测量光栅参量之前需要知道光栅的具体面型。

参 考 文 献

- 1 Luo Yuxi, Tian Xiaohui, Liu Mingxing et al.. A new method of measuring the grating constant and the wavelength[J]. *J. Yanan University*, 1999, **18**(4): 41~45 (in Chinese)
罗玉西,田晓晖,刘明星等. 测量光栅常数和波长的一种新办法[J]. 延安大学学报, 1999, **18**(4): 41~46
- 2 Gao Sitian, Wang Chunyang, Ye Xiaoyou et al.. Nato-technology and nato-metrology [J]. *Modern Computation and Testing*, 2000, **1**: 3~12 (in Chinese)
高思田,王春艳,叶孝佑等. 纳米技术与纳米计量[J]. 现代计量测试, 2000, **1**: 3~12
- 3 Deng Guang'an, Cai Zhigang, Zhang Yunhua et al.. Refraction index measurement of transparent materials by using diffraction grating and CCD[J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(1): 99~103 (in Chinese)
邓广安,蔡志岗,张运华等. 用衍射光栅和 CCD 测量透明材料折射率[J]. 光学学报, 2004, **24**(1): 99~103
- 4 Shen Weidong, Liu Xu, Ye Hui et al.. A new method for determination of the optical constants and thickness of the thin film[J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(7): 885 ~ 889 (in Chinese)
沈伟东,刘旭,叶辉等. 确定薄膜厚度和光学常数的一种新方法[J]. 光学学报, 2004, **24**(7): 885~889
- 5 Liu Xiaolin, Liang Peihui, Zhang Weiqing et al.. Measurement of the parameters multi-layer coating by P-polarized reflectances[J]. *Acta Optica Sinica*, 1998, **18**(5): 607~611 (in Chinese)
刘晓林,梁培辉,张伟清等. 利用 P-偏振光双面反射法测量多层膜的光学参量[J]. 光学学报, 1998, **18**(5): 607~611
- 6 Liao Qingjun, Wang Zhiheng, Wang Lei et al.. Ellipsometric data inversion of absorbing film by simulated annealing[J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(6): 684~687 (in Chinese)
廖清君,王植恒,王磊等. 模拟退火法在吸收薄膜的椭偏反演算法中的应用[J]. 光学学报, 2002, **22**(6): 684~687
- 7 Lu Xiangdong, Fu Kexiang, Wang Zhiheng et al.. Study of measuring gratings parameters by ellipsometric method in theory [J]. *Laser Journal*, 2003, **24**(1): 29~31 (in Chinese)
卢向东,傅克祥,王植恒等. 椭偏法测光栅参量的可行性理论研究[J]. 激光杂志, 2003, **24**(1): 29~31
- 8 Ma Jianyong, Fu Kexiang, Wang Zhiheng et al.. Inversions of gratings parameters by ellipsometric method in theory[J]. *Laser Journal*, 2003, **24**(5): 42~44 (in Chinese)
麻健勇,傅克祥,王植恒等. 基于模式理论光栅椭偏参量反演的数值模拟[J]. 激光杂志, 2003, **24**(5): 42~44
- 9 Zhang Qizhi. Study of the attenuatal phase motion coating of SiN_x[D]. Doctoral Thesis, Sichuan University, 2001. 93~113 (in Chinese)
张奇志. 单层衰减型相移掩膜的研究[D]. 四川大学博士论文, 2001. 93~113
- 10 Fu Kexiang, Zhang Dayue, Wang Zhiheng et al.. Rigorous modal theory of phase grating and the total reflectance property[J]. *Acta Physica Sinica*, 1998, **8**(8): 1278~1288 (in Chinese)
傅克祥,张大跃,王植恒等. 位相光栅的严格模式理论及其全反射特性[J]. 物理学报, 1998, **8**(8): 1278~1288
- 11 Fu Kexing, Wang Zhiheng, Zhang Dayue et al.. A modal theory and recursion RTCM algorithm for gratings of deep grooves and arbitrary profile[J]. *Science in China (A)*, 1999, **42**(6): 636~645 (in Chinese)
傅克祥,王植恒,张大跃等. 大深度任意剖面形状光栅的模式理论和 RTCM 递推算法[J]. 中国科学(A 辑), 1999, **42**(6): 636~645
- 12 C. H. Papadimitriou, K. Steiglitz. *Combinatorial Optimization Algorithms and Complexity* [M]. Liu Zhenhong transl.. Beijing: Tsinghua University Press, 1988 (in Chinese)
帕蒂弥枷,斯提勒泽. 组合最优化算法和复杂性[M]. 刘振宏译. 北京: 清华大学出版社, 1988