

文章编号: 0253-2239(2007)07-1151-5

# 紫外刻划光栅母版及二代版衍射特性的模拟与分析\*

朱洪春<sup>1,2</sup> 巴音贺希格<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130033)  
(<sup>2</sup> 中国科学院研究生院, 北京 100039)

**摘要:** 运用微分理论对刻线密度为 1200 lp/mm 的紫外刻划光栅母版及其二代复制版的衍射特性做了模拟, 指出了二者之间存在的差异, 并与测试结果做了对照。数值模拟表明, 紫外刻划光栅二代复制版的衍射特性与其母版略有不同, 原因是光栅槽形发生了改变, 分别给出了采用多项式拟合槽形函数和傅里叶级数拟合槽形函数的方法。此理论分析方法为澄清光栅复制工艺中的争议完善翻版技术以及寻找提高紫外光栅衍射效率的途径提供了很好的理论参考依据。

**关键词:** 衍射与光栅; 紫外刻划光栅; 复制光栅; 衍射特性; 微分法

中图分类号: O436.1; O438.2 文献标识码: A

## Analysis and Simulation of Diffraction Characteristics of the Ultraviolet Ruled Grating Master and the Second Duplicate

Zhu Hongchun<sup>1,2</sup> Bayanheshig<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, the Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033)  
(<sup>2</sup> Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039)

**Abstract:** The diffraction characteristics of 1200 lp/mm ultraviolet ruled grating master and the second duplicate were simulated by differential theory and distinguished. The simulation results were compared with the tested results. The numerical simulation indicated that the diffraction characteristics of the ultraviolet ruled grating master and the second duplicate are slightly different for the change of grating groove profiles. The methods of grating groove profile polynomial fitting and Fourier series fitting are presented. This theoretical analysis clarified the dispute in the diffraction grating duplication craft, perfected reprint technology and offered practical theoretical reference for improving diffraction grating efficiency.

**Key words:** diffraction and grating; ultraviolet ruled grating; replica grating; diffraction characteristic; differential theory

### 1 引 言

三角槽形紫外刻划光栅是金刚石刻划刀对铝膜挤压、抛光, 从而使铝膜表面按照设计要求发生适当形变的过程<sup>[1,2]</sup>。这种形变是以塑性形变为主, 并伴有非线性弹性形变的耦合形变, 它使得光栅的实际槽形偏离理想三角形, 衍射效率的测量值与理论

设计值偏差较大, 更为直接的后果是光栅的衍射效率不够高。近年来随着紫外光谱仪性能要求的不断提高, 对其核心分光元件光栅的技术指标的期望也越来越高, 以往所研制的紫外光栅的缺陷就越来越不能被接受。光谱光栅制作属于亚波长级的微细加工, 它不仅需要精度极高的刻划机, 而且对电源稳定

\* 国家自然科学基金(60478034)、中国科学院“优秀博士学位论文、院长奖获得者科研启动专项资金”(O72031G070)和“十一五”国家科技支撑计划重大项目(2006BAK03A02)资助课题。

作者简介: 朱洪春(1981—), 女, 山东菏泽人, 硕士研究生, 主要从事衍射光栅微分理论等方面的研究。

E-mail: zhbaobei001@163.com

导师简介: 巴音贺希格(1962—), 男, 内蒙古鄂尔多斯人, 研究员, 博士生导师, 主要从事光栅理论研究和分光器件设计与制作等方面的研究。E-mail: bayin888@sina.com

收稿日期: 2006-10-10; 收到修改稿日期: 2007-01-10

性、环境温度和湿度要求也极为苛刻,除此之外还需熟练掌握光栅刻划技术,包括毛坯的选择、膜层厚度的选择、刻刀角度参量的选择、刻刀的研磨调整、刻划负载的选择、刻槽质量的判定以及机械稳定性检验和调整等诸多方面因素,因而刻划出一块较为理想的光栅母版相当困难,尤其制作高刻线密度紫外光栅更为不易。因此,能否利用现有紫外光栅母版,通过翻版技术来提高光栅的衍射效率是很有必要探讨的问题。

为了寻找答案,要展开理论分析。首先要选择适合于分析有限电导率短波金属光栅的收敛性较好的严格光栅理论,本文选择了微分法<sup>[3~5]</sup>。其次,形变使实际光栅槽形偏离理想三角形,槽形函数不易给出,影响衍射特性的正确分析,因而找到能够直接仿真实际光栅槽形的方法十分关键。本文采用由原子力显微镜获取光栅槽形剖面曲线,自动扫描识别软件对光栅剖面曲线横纵坐标扫描取值,再由扫描数据拟合实际光栅槽形函数的方法。由这种方法计算所得的光栅衍射效率值要比传统方法(即预先设定槽形函数的一种数学表示形式,然后逐步逼近已知槽形)的结果具有更高的近似程度。

## 2 槽形函数拟合方法及光栅母版与二代版衍射特性分析

### 2.1 光栅槽形函数拟合及母版效率计算

为便于测试光栅衍射效率,在刻划 1200 lp/mm 的紫外光栅时,将闪耀波长定在 213.8 nm 处(锌灯的最短波长),由利特罗(Littrow)设置下的光栅方程

$$2d\sin\theta_1 = k\lambda, \quad (1)$$

其中  $k$  为衍射级次, $\lambda$  为闪耀波长, $d$  为光栅周期, $\theta_1$  为闪耀角,如图 1 所示光栅一个周期单元的左底角,在光栅制作中也称为金刚石刻划刀定向角。

对于闪耀波长为 213.8 nm, 1200 lp/mm 的光栅,由于  $d=833.3$  nm,闪耀角则为  $7.37^\circ$ 。过去由于受刀具研磨技术水平的限制,金刚石刻划刀刀尖角(此角决定光栅槽顶角)取为  $\phi=110^\circ$ ,并一直沿用至今。习惯上将闪耀光栅假设为理想的三角槽形,光栅槽深表示为<sup>[6,7]</sup>

$$h = \frac{\tan\theta_1 \tan\theta_2}{\tan\theta_1 + \tan\theta_2} d, \quad (2)$$

式中  $\theta_2$  为非定向角, $\theta_2 = 62.63^\circ$ (如图 1 所示光栅一个周期单元的右底角), $h$  为槽深, $h = 101.02$  nm。

原子力显微镜(AFM)是当前最先进的物体表面

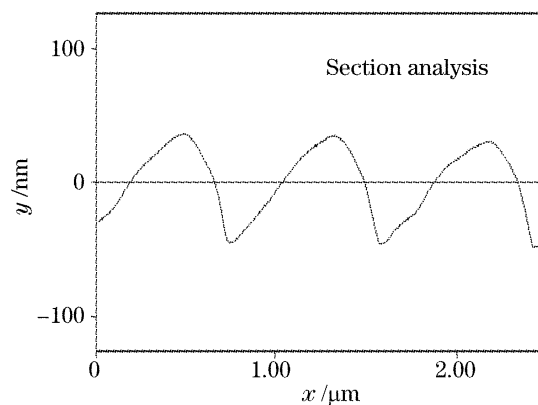


图 1 母版光栅槽形原子力显微镜剖面图  
Fig. 1 Groove profile of the grating master by atomic force microscope

微结构形貌测量仪器。图 1 是闪耀波长为 213.8 nm,刻线密度为 1200 lp/mm 机械刻划光栅槽形轮廓的原子力显微镜剖面图,平均光栅周期为 835.21 nm,光栅槽深为 82.12 nm,光栅槽形因形变明显偏离理想三角形状。

为了能够如实反映真实光栅的衍射效率,采用一种以槽形横纵坐标  $x, y$  值直接拟合槽形函数的方法,其基本思想与 D. A. Content 等<sup>[8]</sup>使用的方法相近。这种方法的优点是无需其他参量,由拟合槽形计算出的衍射效率值的近似程度会更高,且不同于测量值那样还要涉及到光源的稳定性和测量的实时性。其方法是从图 1 中截取一个周期单元,用自动扫描识别软件对光栅剖面曲线进行扫描取值,如图 2 所示,并将得到的  $x, y$  值保存为数据文件。

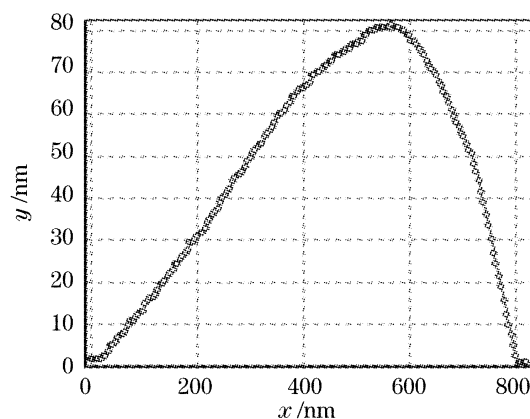


图 2 光栅槽形曲线扫描取值

Fig. 2 Scanned picture of the grating groove profile

利用光栅槽形曲线的扫描数据,可以拟合出槽形函数。通过编制程序的方法来实现多项式函数拟合,并把它嵌入到基于微分法的计算光栅衍射效率的主程序里(自行编制),这样程序的运行较为方便。

图 3 给出了四次多项式拟合曲线,函数形式为

$$y = ax^4 + bx^3 + cx^2 + ex + \epsilon, \quad (3)$$

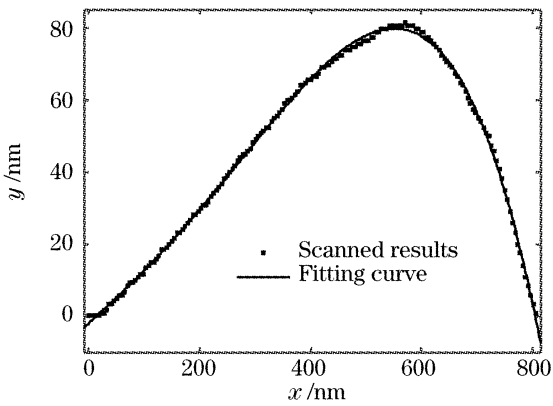


图 3 光栅槽形的四次多项式拟合曲线

Fig. 3 Four-order polynomial fitting curve of the grating groove profile

其中  $a = -8.595 \times 10^{-10}$ ,  $b = 4.255 \times 10^{-7}$ ,  $c = 4.404 \times 10^{-5}$ ,  $e = 0.1388$ ,  $\epsilon = -2.101$ 。由图 3 看出, 四次多项式拟合的曲线和光栅拟合槽形吻合较好, 选用(3)式作为光栅的槽形函数。

光栅的拟合槽形接近于真实槽形, 由拟合槽形计算出来的光栅衍射效率值更能反映实际值, 而理想槽形其实就是设计槽形。为了比较拟合槽形和理想槽形下光栅的衍射效率, 图 4 给出闪耀波长为 213.8 nm, 1200 lp/mm 刻划光栅的 40~500 nm 波长范围内的 TE、TM 偏振波 -1 级效率  $\eta_{-1}$  曲线, 光栅材料为铝(Al)。其中, 理想三角槽形的顶角即金刚石刻划刀刀尖角  $\phi$  为  $110^\circ$ , 闪耀角  $\theta_1$  为  $7.37^\circ$ , 而拟合槽形则自然包括了所有的槽形参量。

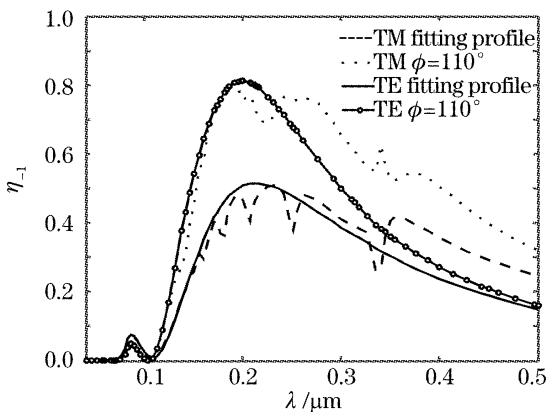


图 4 拟合槽形和理想槽形的效率对比

Fig. 4 Comparison of the efficiency between fitting profile and ideal profile

从图 4 可以看出, 在闪耀波长附近, 拟合槽形下的衍射效率比理想槽形下的理论衍射效率低 30% 左右; 随着波长的增加偏振愈加突出, 且 TM 波有明显的异常现象; 在理想槽形下, TE 和 TM 波的闪耀波长均向短波方向发生漂移, 最大值分别在 198.40 nm 和 186.13 nm 处, 衍射效率分别为 0.8129

和 0.8119, 说明由利特罗设置下的光栅方程来确定光栅闪耀角略嫌不够; 拟合槽形下, TE 和 TM 波的闪耀波长基本与设计波长吻合, 最大值分别在 213.25 nm 和 230.69 nm 处, 衍射效率分别为 0.5153 和 0.5097, 说明在工艺中控制光栅闪耀角的方法成熟、可靠。

值得一提的是, 用刀尖角  $110^\circ$  的金刚石刀刻划出的竟然等同于槽顶角为  $152^\circ$  的光栅。由图 5 可以看出, 当把理想三角槽形的顶角取为  $152^\circ$  时, 其衍射效率与拟合槽形的效率接近, 光栅的槽顶角比刀尖角大了约  $42^\circ$ 。这说明过去对紫外光栅的槽形形变程度估计不足, 1200 lp/mm 的紫外光栅在刻划过程中会发生如此大的形变是未曾想到的。

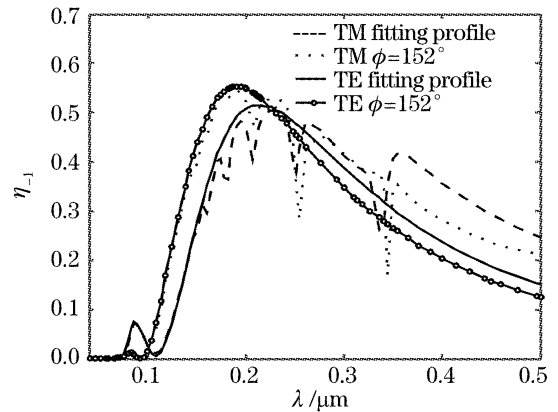


图 5 拟合槽形和理想槽形的效率对比

Fig. 5 Comparison of the efficiency between fitting profile and ideal profile

### 2.2 二代版的效率计算

如图 1 所示的母版光栅, 经复制可产生如图 6 所示的二代版。二代版经复制又可产生其槽形如图 1 所示的复制光栅, 大量提供给用户的就是这种光栅。同理, 这种复制光栅也可以叫做三代版, 由它又可复制出槽形如图 6 所示的光栅, 依此类推。显

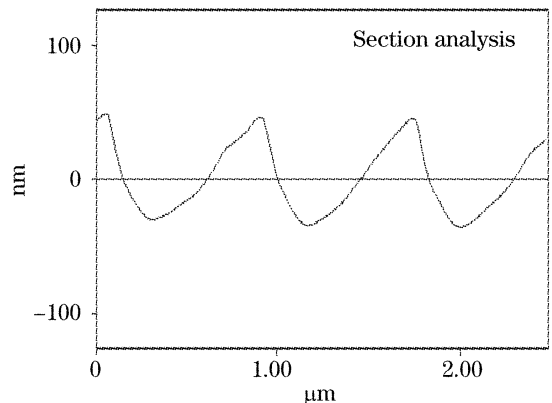


图 6 二代版光栅槽形原子力显微镜剖面图

Fig. 6 Groove profile of the second duplicate by atomic force microscope

然,母版和二代版的使用方向恰好相反。

光栅复制是相当复杂的综合过程,其技术指标的优劣受多个因素影响。有时复制光栅(槽形如图1)的衍射效率会高于二代版,有时则低于二代版,对此研究人员始终没有找到确切的答案。那么,究竟哪一种是必然结果呢?按照通常的光栅刻划经验,光栅的零级面<sup>[5,6]</sup>越小,光栅槽形越接近三角形,−1级能量越高,反之亦然。仅从传统意义上的光栅零级面定义来看,图1的零级面明显比图6的大(即其光栅脊线没有图6尖锐),镜面反射强,−1级效率自然要低。

类似于对母版光栅的处理,从图6中截取一个周期单元,拟合其槽形函数。由于光栅槽形曲线顶端斜率变化大,采用多项式拟合槽形函数时次数过高,符号运算和数值计算同时进行带来程序的运行困难,因而改用傅里叶级数拟合,函数形式为

$$y = a_0 + \sum_{n=1}^7 (a_n \cos nKx + b_n \sin nKx), \quad (4)$$

其中

$$\begin{aligned} K &= 0.007815, & a_0 &= 36.6, \\ a_1 &= -26.59, & b_1 &= -22.95 \\ a_2 &= -8.753, & b_2 &= 4.174, \\ a_3 &= 0.8492, & b_3 &= 4.621, \\ a_4 &= 2.298, & b_4 &= -0.9517, \\ a_5 &= -0.8756, & b_5 &= -2.059, \\ a_6 &= -1.467, & b_6 &= -0.3741, \\ a_7 &= -0.6405, & b_7 &= 0.5799 \end{aligned}$$

由图7看出,七次傅里叶级数拟合的曲线和光栅拟合槽形重合很好,选用(4)式来表示二代版光栅的槽形函数。

图8给出闪耀波长为213.8 nm, 1200 lp/mm

表1 光栅母版和二代版的−1级衍射效率

Table 1 Diffraction efficiency about the grating master and the second duplicate in the order −1

$\lambda / \text{nm}$	Grating master			2nd duplicate		
	TE	TM	Measured value	TE	TM	Measured value
213.8	0.5152	0.4784	0.5122	0.5200	0.5213	0.5318
253.7	0.4719	0.4275	0.4552	0.4866	0.4009	0.4516
313.2	0.3641	0.3903	0.3890	0.3768	0.4775	0.4382
365.0	0.2807	0.4108	0.3594	0.2979	0.3464	0.3331
435.8	0.2007	0.3091	0.2661	0.2156	0.2986	0.2688

从分析可知,由呈不规则三角槽形的母版光栅翻制出的二代版槽形亦呈不规则三角形,但二者属于不同槽形光栅,因而有着不同的衍射特性和偏振特性;母版光栅和二代版光栅的效率曲线存在偏差,

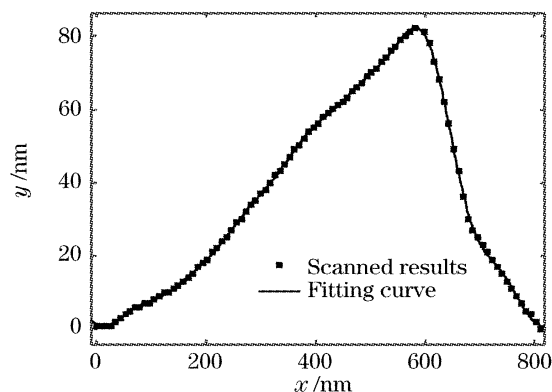


图7 光栅槽形的七次傅里叶展开式拟合曲线

Fig. 7 Seventh-order Fourier's expansion fitting curve of the grating groove profile

刻划光栅母版和二代版在40~500 nm波长范围内的TE、TM偏振波−1级效率曲线。可以看出,TE波的效率曲线接近重合,但TM波的效率曲线差别比较明显。为便于比较,表1列出了对应于213.8 nm, 253.7 nm, 313.2 nm, 365.0 nm和435.8 nm波长单色自然光的母版和二代版光栅TE、TM偏振波−1级衍射效率计算值和测量值。

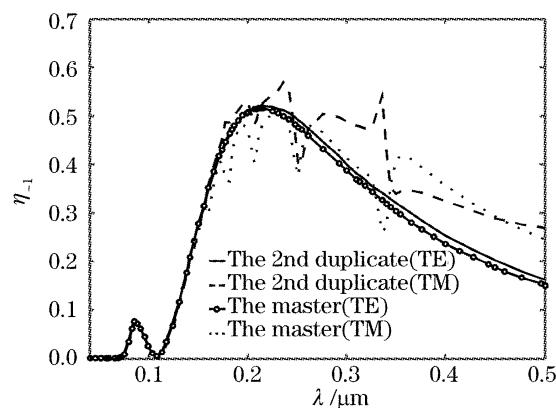


图8 母版和二代版拟合槽形的效率对比

Fig. 8 Comparison of efficiency curve of the grating master and the second duplicate fitting grating profile

但从能量传输角度而言,彼此区别甚微,说明并非光栅脊线的零级面小效率一定就高,与光栅槽底的形状也有关联;母版和二代版光栅的槽深是相等的,而母版光栅因形变槽顶角扩大约42°,直接后果是槽

深变浅约 20 nm,这是使光栅的实际衍射效率低于理想值约 30%的原因,因此光栅槽深对其效率影响很大;光栅衍射效率测量值是指单色自然光的衍射效率,它与 TE 波和 TM 波的平均理论计算值吻合较好。

### 3 结 论

母版光栅与二代版光栅在衍射特性和偏振特性方面存在一些差异,但从应用中的能量传输特性而言几乎没有多大区别,即尽管母版与二代版的槽形不同,属于不同的光栅,但衍射场能量分布基本相同。因此,希望通过槽形反转来提高光栅衍射效率的想法(或争议)缺乏理论依据。另外,数值模拟结果还表明,光栅刻划过程中铝膜的形变使得光栅槽深变浅(槽顶角变大),从而使光栅衍射效率降低。所以,为了适应紫外光谱仪器对光栅的效率要求,必须放弃使用多年的大角度刻刀,只有缩小刀尖角才有可能研制出高衍射效率的光栅。本文的结果对机刻光栅和复制光栅的制作具有借鉴意义,采用的分析方法也可以移植到由光栅衍射特性反演光栅几何、物理参量<sup>[9~13]</sup>的工作中。

### 参 考 文 献

- 1 Liang Haoming, Zhuang Kui, Zhang Qingying *et al.*. The diffraction grating ruling engines[J]. *Acta Optica Sinica*, 1981, **1**(1): 51~58 (in Chinese)  
梁浩明,庄夔,张庆英等. 衍射光栅刻划机[J]. *光学学报*, 1981, **1**(1): 51~58
- 2 Zhu Saoji, Zou Haixing, Bao Xuecheng *et al.*. *Diffraction Gratings* [M]. Beijing: China Machine Press, 1986. 193~242 (in Chinese)  
祝绍箕,邹海兴,包学诚等. 衍射光栅[M]. 北京: 机械工业出版社, 1986. 193~242

- 3 R. Petit. *Electromagnetic Theory of Gratings* [M]. New York: Springer-Verlag, 1980. 101~109
- 4 M. Nervière, P. Vincent, R. Petit. Theory of conducting gratings and their applications to optics [J]. *Nouv. Rev. Optique*, 1974, **5**(2): 65~77
- 5 M. Nervière, E. Popov. *Light Propagation in Periodic Media: Diffraction Theory and Design* [M]. New York: Marcel Dekker, 2002. 37~51, 77~98
- 6 Bayanheshig, Gao Jianxiang, Qi Xiangdong *et al.*. Manufacture for high diffraction efficiency grating in the first-order output of 10.6  $\mu\text{m}$  laser[J]. *Optoelectronic • Laser*, 2004, **15**(10): 1137~1140 (in Chinese)  
巴音贺希格,高键翔,齐向东等. 10.6  $\mu\text{m}$  激光器一级输出高衍射效率闪耀光栅的研制[J]. *光电子 • 激光*, 2004, **15**(10): 1137~1140
- 7 Bayanheshig, Gao Jianxiang, Qi Xiangdong *et al.*. Design and manufacture for select frequency oscillation grating in the zero-order coupling output of 9.77  $\mu\text{m}$  laser[J]. *Chin. J. Lasers*, 2005, **32**(3): 301~305 (in Chinese)  
巴音贺希格,高键翔,齐向东等. 9.77  $\mu\text{m}$  激光器零级耦合输出选频振荡光栅的设计和研制[J]. *中国激光*, 2005, **32**(3): 301~305
- 8 D. Content, P. Arsenovic, I. Kuznetsov *et al.*. Grating groove metrology and efficiency predictions from the soft X-ray to the far infrared[C]. *Proc. SPIE*, 2001, **4485**: 405~416
- 9 R. C. Mephedran, I. J. Wilson, M. D. Waterworth. Blaze optimization for sinusoidal profile gratings[J]. *Opt. Commun.*, 1973, **7**(4): 331~334
- 10 R. C. Mephedran, M. D. Waterworth. Blaze optimization for triangular profile gratings[J]. *Optica Acta*, 1973, **20**(3): 177~191
- 11 A. Roger, D. Maystre. Inverse scattering method in electromagnetic optics; application to diffraction gratings[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1980, **70**(12): 1483~1495
- 12 A. Roger, M. Bredine. Grating profile reconstruction by an inverse scattering method[J]. *Opt. Commun.*, 1980, **35**(3): 299~302
- 13 Li Jianlong, Fu Kexiang, Zhang Lijuan. Determining the grating's parameters with the diffraction orders of  $m = \pm 1$  efficiencies ratio[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(10): 1324~1328 (in Chinese)  
李建龙,傅克祥,张丽娟. 用光栅的 $\pm 1$ 级能量之比测量光栅参量[J]. *光学学报*, 2005, **25**(10): 1324~1328