

# 梯形介质膜光栅衍射特性分析

孔伟金<sup>1</sup> 云茂金<sup>1</sup> 崔春玲<sup>1</sup> 晋云霞<sup>2</sup> 邵建达<sup>2</sup> 范正修<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 青岛大学物理科学学院, 山东 青岛 266071; <sup>2</sup> 中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

**摘要** 基于严格耦合波理论建立了梯形介质膜光栅的衍射机理模型, 利用该模型讨论了底角为  $70^\circ$  的梯形介质膜光栅  $-1$  级的衍射行为。通过对梯形介质膜光栅的占空比、槽深和剩余厚度的优化, 设计了应用于  $1053\text{ nm}$  和  $51.2^\circ$  角度入射的梯形介质膜光栅。对于顶层为  $\text{HfO}_2$  的介质膜光栅, 当槽深为  $200\text{ nm}$ , 剩余厚度为  $100\text{ nm}$ , 占空比为  $0.35$  时, 其衍射效率优于  $99.5\%$ , 而对于顶层为  $\text{SiO}_2$  的梯形光栅, 为获得  $99.5\%$  的衍射效率, 其槽深为  $800\text{ nm}$ , 剩余厚度为  $320\text{ nm}$ 。而且, 获得同样的衍射效率, 顶层为  $\text{HfO}_2$  的梯形光栅具有更宽的光谱特性。数值计算表明, 严格耦合波理论模型对梯形介质膜光栅衍射效率的计算具有很好的收敛性和稳定性。

**关键词** 光学薄膜; 多层介质膜光栅; 严格耦合波理论; 衍射效率

中图分类号 O484.4<sup>+</sup>1 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20082807.1415

## Diffraction Property of Multi-Layer Dielectric Grating with Trapezium Groove

Kong Weijin<sup>1</sup> Yun Maojin<sup>1</sup> Cui Chunling<sup>1</sup> Jin Yunxia<sup>2</sup> Shao Jianda<sup>2</sup> Fan Zhengxiu<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> College of Physics Science, Qingdao University, Qingdao, Shandong 266071, China

<sup>2</sup> Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academic of Science, Shanghai 201800, China)

**Abstract** The rigorous coupled-wave analysis is used to describe the diffraction of multi-layer diffraction grating (MDG) with trapezium groove. The diffraction performance of multi-layer dielectric grating with the trapezium groove of  $70^\circ$  is discussed. Trapezium MDG used for wavelength of  $1053\text{ nm}$  and incident angle of  $51.2^\circ$  is designed by optimizing the duty cycle, depth and residual thickness of the top layer. For gratings etched into the top  $\text{HfO}_2$  layer, diffraction efficiency of  $99.5\%$  can be attained when the duty cycle is  $0.35$ , groove depth is  $200\text{ nm}$  and the residual thickness of  $\text{HfO}_2$  is  $50\text{ nm}$ . Whereas for  $\text{SiO}_2$  as the top corrugated layer, the groove depth is  $800\text{ nm}$  and the top  $\text{SiO}_2$  residual layer is  $320\text{ nm}$  in order to obtain the same diffraction efficiency as  $99.5\%$ . Furthermore, the trapezium MDG with  $\text{HfO}_2$  on the top has wider wavebandth compared with the design of  $\text{SiO}_2$  on the top of MDG to obtain the same diffraction efficiency. Numerical calculation indicates that the coupled-wave analysis model has excellent convergence and stable performance to analyze the diffraction of trapezium MDG.

**Key words** optical thin film; multi-layer dielectric grating; rigorous coupled-wave theory; diffraction efficiency

## 1 引 言

啁啾脉冲放大 (Chirped-pulse amplification, CPA) 技术<sup>[1,2]</sup> 中核心元件衍射光栅必须具有尽可能高的衍射效率和抗激光损伤阈值<sup>[3,4]</sup>。镀金光栅由于具有较强的吸收特性, 很难获得高的衍射效率和抗激光损伤阈值<sup>[5]</sup>。多层介质膜光栅 (Multi-layer dielectric grating, MDG) 几乎没有吸收而具有高于镀金光栅的抗激光损伤阈值和衍射效率等优点<sup>[6]</sup>, 被广泛应用于啁啾脉冲放大 (CPA) 系统中来

展宽和压缩激光脉冲<sup>[7]</sup>。

介质膜光栅是由基底、多层介质膜和位于其顶层的光栅浮雕结构组成的<sup>[8]</sup>。其制备工艺包括多层介质膜的制备、显影和曝光以及离子束刻蚀等过程<sup>[9]</sup>。由于离子束刻蚀得到的槽形基本上为梯形结构<sup>[10]</sup>, 而且单个介质膜光栅的性能影响拼接光栅的性能<sup>[11,12]</sup>, 因此有必要分析梯形介质膜光栅的衍射特性并讨论其工艺容差。本文采用严格耦合波理论 (Rigorous coupled-wave analysis) 建立梯形介质膜

收稿日期: 2007-11-05; 收到修改稿日期: 2008-01-10

基金项目: 国家自然科学基金(10704079)资助课题。

作者简介: 孔伟金(1976-), 男, 副教授, 博士, 主要从事光学薄膜和衍射光学等方面的研究。E-mail: kwjds@163.com

光栅获得高衍射效率的机理模型,分析了梯形介质膜光栅的衍射行为。优化设计了顶层材料分别为  $\text{HfO}_2$  和  $\text{SiO}_2$  的梯形介质膜光栅的结构参量,其衍射效率达到 99.5%。最后分析了严格耦合波理论对梯形介质膜光栅进行数值计算的收敛性。理论模型的建立和衍射特性的分析对设计和制备高衍射效率的梯形介质膜光栅具有重要的指导意义。

## 2 理论模型

梯形介质膜光栅的基本结构如图 1 所示。基底一般为 K9 玻璃或石英玻璃,介质膜光栅的基础高反射膜一般采取  $(\text{H}2\text{L})^n$  结构形式<sup>[6~8]</sup>。建立如图 1 所示的坐标系,位于多层介质膜顶层的表面浮雕结构,其截面在  $x-z$  平面内,光栅矢量沿  $x$  方向,光栅的周期为  $d$ ,占空比为  $f$ 。

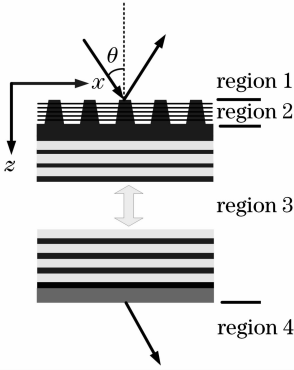


图 1 多层介质膜光栅的基本结构模型

Fig. 1 Schematic of multi-layer dielectric grating

严格耦合波理论是利用麦克斯韦(Maxwell)方程组和边界条件对具有周期型结构的光栅进行精确求解的一种方法<sup>[13]</sup>。梯形介质膜光栅严格耦合波模型建立的思想是:将多层介质膜光栅的空间分为四个区域:区域 1 为入射区,区域 2 为梯形光栅区,在该区内将梯形光栅分为  $L$  层,只要分的足够细,每一分层则可以看作一个矩形光栅;区域 3 为多层介质膜区域,该区域为多层高低折射率交替的介质膜,处理的方法是将每层介质膜视为占空比为  $f=1$ ,周期和表面浮雕结构周期相同的光栅;区域 4 为光栅出射区。

在光栅区,光的传播受到折射率变化的调制,介电常数的周期性分布如图 1。因为光栅表面具有周期性,在一个周期上将介电常数展开为傅里叶级数形式:

$$\epsilon(x) = \sum_h \epsilon_h \exp(j2\pi hx/d), \quad (1)$$

其中  $\epsilon_h$  是第  $h$  级介电常数傅里叶展开系数。

入射区域  $Z < 0$ , 归一化的电场表示为

$$E_{1,y} = E_0 + \sum_i R_i \exp[-j(k_{ix}x - k_{i,z}z)], \quad (2)$$

式中  $E_0 = \exp[-jk_0 n_1 (\sin \theta x + \cos \theta z)]$ , 透射区域:  $Z > D$ , 归一化的电场表示为

$$E_{\parallel,y} = \sum_i T_i \exp\{-j[k_{ix}x - k_{\parallel,z}(z-D)]\}, \quad (3)$$

式中  $D$  的厚度为光栅的槽深和多层介质膜厚度之和,  $R_i$  和  $T_i$  是归一化的反射和透射衍射波的振幅系数,  $k_{ix}$  和  $k_{\parallel,z}$ ,  $k_{\parallel,z}$  为波矢量。

光栅区和多层介质膜区域:  $0 < Z < D$ , 第  $l$  分层(光栅分层和多层介质膜)的归一化的电场和磁场可以表示为

$$\begin{cases} E_{1,gy} = \sum_i S_{1,yi}(z) \exp(-jk_{ix}x), \\ H_{1,gx} = -j \left( \frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_i U_{1,xi}(z) \exp(-jk_{ix}x), \end{cases} \quad (4)$$

式中  $\epsilon_0$  和  $\mu_0$  分别为介电常数和磁介质常数;  $S_{1,yi}(z)$  和  $U_{1,xi}(z)$  分别是在分层的归一化的第  $i$  级电场和磁场的振幅表达式。在各个光栅分层区域和多层介质膜的分层区域,光的传播满足麦克斯韦方程和边界连续条件。

利用增强透射矩阵的方法可以消除数值计算的不稳定性<sup>[14]</sup>。根据增强透射矩阵方法和对各分层内的光波可以得到如下递推关系<sup>[14]</sup>:

$$\begin{bmatrix} \delta_{i0} \\ jn_1 \cos \theta_{i0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I \\ -jY_1 \end{bmatrix} [R] = \begin{bmatrix} f_1 \\ g_1 \end{bmatrix} T_1, \quad (5)$$

式中  $T = a_{L+1}^{-1} X_L \cdots a_1^{-1} X_1 \cdots a_1^{-1} X_1 T_1$ , 通过对给定的初始值  $f_{L+1} = 1$ ,  $g_{L+1} = jY_{\parallel}$  逐步对各个分层的光栅区和多层膜区进行迭代递推运算,可以从靠近基底侧的多层介质膜一直递推到光栅区和空气的分界面。也就是第一分层所对应的  $f_1$  和  $g_1$ , 由此可以得到反射和透射的各个衍射级次的衍射效率为

$$\begin{cases} DE_{ri} = R_i R_i^* \operatorname{Re}(k_{\parallel,zi}/k_0 n_1 \cos \theta), \\ DE_{ti} = T_i T_i^* \operatorname{Re}(k_{\parallel,zi}/k_0 n_1 \cos \theta) \end{cases} \quad (6)$$

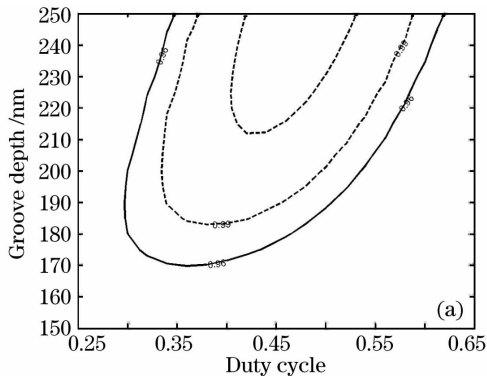
## 3 介质膜光栅的数值分析

梯形介质膜光栅的衍射效率与光栅的周期  $d$ 、槽深  $h$ 、占空比  $f$  以及剩余厚度  $t_r$  (顶层刻蚀浮雕结构后的剩余厚度) 等结构参量的密切相关。以下对梯形介质膜光栅衍射特性的分析是基于作者所设计的多层介质膜  $\text{H}3\text{L}(\text{H}2\text{L})^9 \text{H}0.5\text{L}$  结构<sup>[15]</sup> ( $\text{H}$  和  $\text{L}$  分别表示光学厚度为  $\lambda/4$  的  $\text{HfO}_2$  和  $\text{SiO}_2$  材料,其折射率分别为 1.96 和 1.46)。

考虑到介质膜光栅在啁啾脉冲放大中的应用,所设计的介质膜光栅基本参量为:波长 1053 nm,入射角为  $51.2^\circ$ ,TE 偏振周期为 675.7 nm,底角为  $70^\circ$ 。由于入射波长大于光栅周期,梯形介质膜光栅只出现 0 级和 -1 级,采用 -1 级的反射衍射效率作为评价函数进行数值分析。

### 3.1 顶层为 $\text{HfO}_2$ 的梯形介质膜光栅

顶层浮雕结构为  $\text{HfO}_2$ ,图 2(a)给出了梯形(底角为  $70^\circ$ )的介质膜光栅 -1 级衍射效率随占空比  $f$  和槽深  $h$  变化的等高图。图中实线包络的区域其衍射效率优于 96%,虚线包络的区域其衍射效率优于 99%。从图中可以看出,对于特定占空比的介质膜光栅,其 -1 级衍射效率随槽深的增加而增加;特



定槽深的介质膜光栅,其 -1 级衍射效率在一定的占空比范围内取得最大值;当槽深取 180~210 nm,占空比取 0.32~0.5 时,介质膜光栅的衍射效率均优于 99%。根据图中所示,选取介质膜光栅的槽深为 200 nm,占空比为 0.35。

为进一步分析顶层  $\text{HfO}_2$  材料刻蚀光栅后的剩余厚度对其衍射效率的影响,图 2(b)给出了梯形介质膜光栅的占空比为 0.35 时,其 -1 级衍射效率在随槽深  $h$  和剩余厚度  $t_r$  的变化关系。从图中可以看出,梯形介质膜光栅 -1 级衍射效率的分布随槽深和剩余厚呈周期性变化;当槽深为 200 nm,占空比为 0.35 时,取剩余厚度为 50 nm,则梯形介质膜光栅的 -1 级衍射效率优于 99%。

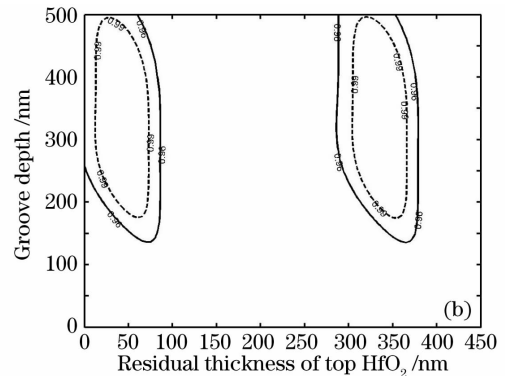


图 2 顶层为  $\text{HfO}_2$  的梯形介质膜光栅衍射效率随占空比和槽深(a),槽深和剩余厚度(b)的变化关系

Fig. 2 Diffraction efficiency of  $\text{HfO}_2$  MDG as a function of duty cycle and depth (a), depth and residual thickness (b)

在优化设计光栅的基本结构时,考虑到顶层厚度的沉积和光栅刻蚀工艺,易选择较薄的顶层  $\text{HfO}_2$  厚度和较浅的光栅槽。同时,实验比较容易获得 0.35 的占空比槽形结构。根据以上分析,对于底角为  $70^\circ$ ,顶层为  $\text{HfO}_2$  的梯形介质膜光栅,其槽深为 200 nm,剩余厚度为 50 nm,占空比为 0.35 时,其 -1 级衍射效率优于 99.5%。图 3 给出了对应于不同底角的梯形光栅衍射效率随波长的变化关

系。从图中可以看出,底角为  $70^\circ$  的介质膜光栅具有最优良的衍射效率分布,其衍射效率在 1053 nm 两侧 1034~1072 nm 范围内优于 99%;随着梯形角度的增加,其衍射效率受到一定的影响,因此在刻蚀光栅时,要准确的控制其底角的角度。

### 3.2 顶层为 $\text{SiO}_2$ 的梯形介质膜光栅

图 4(a)给出了顶层为  $\text{SiO}_2$  的梯形(梯形底角为  $70^\circ$ )介质膜光栅衍射效率随占空比和槽深的变化关系。从图中可以看出:衍射效率在占空比为 0.1~0.4 和槽深为 600~850 nm 较大的变化范围内时,其衍射效率优于 99%。取槽深为 800 nm,占空比为 0.35。图 4(b)给出了当占空比为 0.35 时,顶层为  $\text{SiO}_2$  的梯形介质膜光栅 -1 级衍射效率随槽深和剩余厚度的变化关系。可见,其衍射效率随占空比和槽深的变化关系成周期性分布;当槽深取 800 nm,剩余厚度为 320 nm 时,其衍射效率优于 99%。考虑到梯形介质膜光栅的掩模和刻蚀等工艺,选取其槽深为 800 nm,剩余厚度为 320 nm,占空比为 0.35 时,其衍射效率优于 99.5%。图 5 给

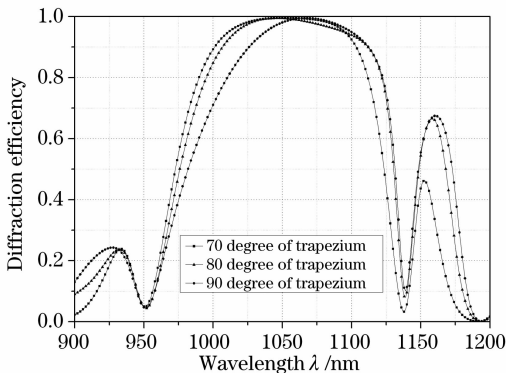


图 3  $\text{HfO}_2$  梯形光栅的光谱特性曲线

Fig. 3 Spectral properties of  $\text{HfO}_2$  trapezium grating

出了对于上述光栅参量时,不同底角的梯形介质膜光栅衍射效率随波长的变化关系。可以看出,当选取上述优化的光栅结构后,梯形底角为  $70^\circ$  时其衍射效率优于  $99.5\%$ ;底角为  $70^\circ$  和  $90^\circ$ (矩形光栅)

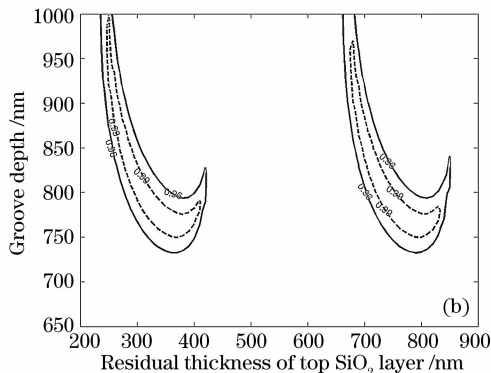
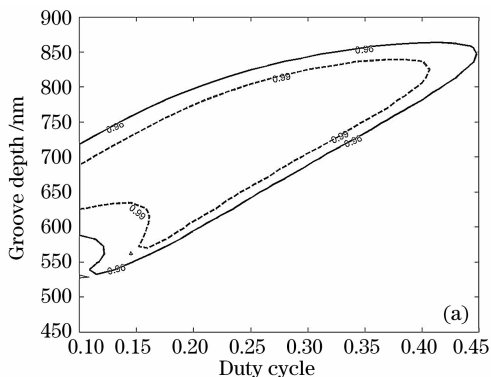


图 4 顶层为  $\text{SiO}_2$  的梯形介质膜光栅衍射效率随占空比和槽深(a), 槽深和剩余厚度(b)的变化关系

Fig. 4 Diffraction efficiency of MDG with  $\text{SiO}_2$  on the top as a function of duty cycle and depth (a), depth and residual thickness (b)

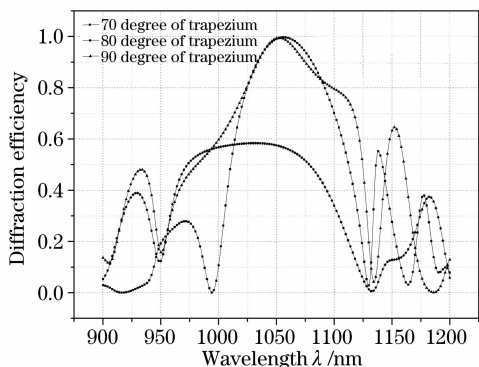


图 5  $\text{SiO}_2$  梯形光栅的光谱特性曲线

Fig. 5 Spectral properties of  $\text{SiO}_2$  trapezium grating

### 3.3 梯形介质膜光栅的角谱特性

入射角的变化对梯形介质膜光栅衍射效率也会产生一定的影响。图 6 分析了上述优化设计的顶层分别为  $\text{HfO}_2$  和  $\text{SiO}_2$  的介质膜光栅其衍射效率随

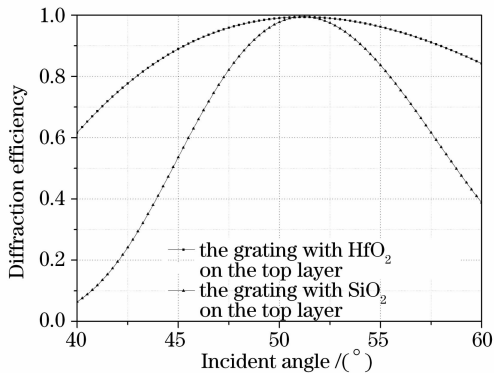


图 6 梯形介质膜光栅的角谱特性

Fig. 6 Angle-spectrum property of trapezium MDG

在  $1053 \text{ nm}$  附近具有相同的衍射效率,而梯形底角为  $80^\circ$  时,其衍射效率变化比较大,说明顶层为  $\text{SiO}_2$  的介质膜光栅对梯形的底角非常敏感。

入射角变化关系。可见,顶层为  $\text{HfO}_2$  的梯形(底角为  $70^\circ$ )介质膜光栅入射角在  $47.5^\circ \sim 55.1^\circ$  范围变化时,其衍射效率优于  $96\%$ ;入射角为  $50.1^\circ \sim 52.5^\circ$  时,衍射效率优于  $99\%$ 。相对于顶层为  $\text{HfO}_2$  的梯形介质膜光栅,顶层为  $\text{SiO}_2$  的梯形(底角为  $70^\circ$ )介质膜光栅入射角的变化范围  $49.5^\circ \sim 52.9^\circ$  时,其衍射效率优于  $96\%$ 。综合来看,顶层为  $\text{HfO}_2$  的梯形光栅比顶层为  $\text{SiO}_2$  的梯形介质膜光栅具有更宽的角谱特性。

### 3.4 梯形介质膜光栅衍射效率的收敛性

梯形光栅区分层数目  $L$  对介质膜光栅衍射效率数值计算的稳定性和收敛性有很大的影响。图 7 分别给出了上述优化设计顶层为  $\text{HfO}_2$  和  $\text{SiO}_2$  梯形(底角为  $70^\circ$ )介质膜光栅衍射效率随梯形光栅区的分层数目  $L$  变化的关系。要具有稳定的数值收

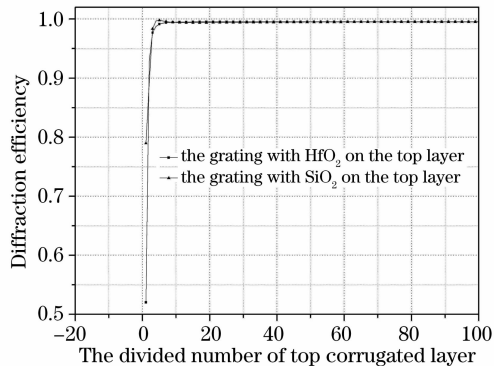


图 7 梯形介质膜光栅数值计算的收敛性

Fig. 7 Convergent performance of the numerical calculation of trapezium MDG

敛性, 分层数目越多, 其收敛性越好; 对于底角为  $70^\circ$  梯形时, 分层数必须达到 100 层时具有稳定的收敛性; 除梯形的底角外, 梯形光栅的槽深、占空比、使用波长、使用角度、偏振态等其它因素对数值计算的收敛性和稳定性也有一定的影响。

## 4 结 论

基于严格耦合波理论, 建立了梯形介质膜光栅衍射特性分析的模型, 利用该模型优化设计了衍射效率优于 99.5% 的顶层分别为  $\text{HfO}_2$  和  $\text{SiO}_2$  的梯形介质膜光栅。为了获得优于 99.5% 衍射效率, 顶层为  $\text{HfO}_2$  梯形介质膜光栅的槽深为 200 nm, 剩余厚度为 50 nm, 而对于顶层为  $\text{SiO}_2$  的介质膜光栅, 其槽深为 800 nm, 剩余厚度为 320 nm。可见, 获得同样的衍射效率, 顶层为  $\text{SiO}_2$  的梯形介质膜光栅需要更深的槽。另外, 顶层为  $\text{HfO}_2$  的梯形介质膜光栅具有更宽的角谱特性。因此, 在梯形介质膜光栅的实际制备中, 宜选取顶层为  $\text{HfO}_2$  材料刻蚀光栅结构。

不论是对顶层为  $\text{HfO}_2$  的光栅还是对于  $\text{SiO}_2$  的光栅, 数值计算的结果具有很好的收敛性和稳定性, 表明基于严格耦合波的理论建立的模型对于分析梯形介质膜光栅是有效的。

## 参 考 文 献

- 1 Wang Hongying, Liu Hongjun, Li Xiaoli *et al.*. Dispersion control in broadband optical parametric chirped pulse amplification laser system[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(7): 1338~1343  
王红英, 刘红军, 李小莉等. 宽带光学参变啁啾脉冲放大系统的色散控制[J]. *光学学报*, 2007, **27**(7): 1338~1343
- 2 Wang Li, Han Xiyou. Ultra-short Gaussian pulse expansion and deformation by high-order group velocity dispersion[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(1): 138~143  
王 丽, 韩秀友. 高阶群速度色散引起的高斯超短脉冲宽度的展宽和形变[J]. *光学学报*, 2007, **27**(1): 138~142
- 3 Maurice Pessot, Jeff Squier, Gerard Mourou. Chirped-pulse amplification of 100-fsec pulses[J]. *Opt. Lett.*, 1989, **14**(15): 797~799

- 4 C. P. Hauri, P. Schlup, G. Arisholm *et al.*. Phase-preserving chirped-pulse optical parametric amplification to 17.3 fs directly from a Ti:sapphire oscillator[J]. *Opt. Lett.*, 2004, **29**(12): 1369~1371
- 5 R. D. Boyd, J. A. Britten, D. E. Decker *et al.*. High-efficiency metallic diffraction gratings for laser applications[J]. *Appl. Opt.*, 1995, **34**(10): 1697~1706
- 6 M. D. Perry, R. D. Boyd, J. A. Britten *et al.*. High-efficiency multi-layer dielectric diffraction gratings[J]. *Opt. Lett.*, 1995, **20**(8): 940~942
- 7 B. W. Shore, M. D. Perry, J. A. Britten *et al.*. Design of high-efficiency dielectric reflection gratings[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1997, **14**(5): 1124~1136
- 8 Karl Hehl, Joerg Bischoff, Ullrich Mohaupt *et al.*. High-efficiency dielectric reflection gratings: design, fabrication, and analysis[J]. *Appl. Opt.*, 1999, **38**(30): 6257~6271
- 9 Hongbo Wei, Lifeng Li. All-dielectric reflection gratings: a study of the physical mechanism for achieving high efficiency[J]. *Appl. Opt.*, 2003, **42**(31): 6255~6260
- 10 J. A. Britten, M. D. Perry, B. W. Shore *et al.*. High-efficiency, dielectric multi-layer gratings optimized for manufacturability and laser damage threshold[C]. *Proc. SPIE*, 1996, **2714**: 511~520
- 11 Zuo Yanlei, Wei Xiaofeng, Zhu Qihua *et al.*. Far field analysis after chirped pulse passing through a misalignment tiled-grating compressor[J]. *Chin. J. Lasers*, 2006, **33**(7): 922~927  
左言磊, 魏晓峰, 朱启华等. 啁啾脉冲通过失调拼接光栅压缩池后的远场分析[J]. *中国激光*, 2006, **33**(7): 922~927
- 12 Yang Xuedong, Xia Lan, Ma Weixin *et al.*. Experiment of real-time monitoring and adjusting of rotation error about tiled gratings[J]. *Chin. J. Lasers*, 2007, **34**(9): 1222~1226  
杨学东, 夏 兰, 马伟新等. 光栅拼接旋转偏差实时检测调节实验[J]. *中国激光*, 2007, **34**(9): 1222~1226
- 13 M. G. Moharam, E. B. Grann, A. Pommet. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1995, **12**(5): 1068~1076
- 14 M. G. Moharam, Drew A. Pommet, Eric B. Grann. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis of surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1995, **12**(5): 1077~1086
- 15 Kong Weijin, Shao Jianda, Zhang Weili *et al.*. Design and character analysis of multi-layer dielectric film used in pulse compressed gratings[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(5): 701~706  
孔伟金, 邵建达, 张伟丽等. 脉宽压缩光栅用的多层膜设计和性能分析[J]. *光学学报*, 2005, **25**(5): 701~706
- 16 Lei Yuan, Yuanan Zhao, Congjuan Wang *et al.*. Effect of  $\text{SiO}_2$  protective layer on the femtosecond laser-induced damage of  $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$  multilayer high-reflective coatings[J]. *Appl. Sur. Sci.*, 2007, **253**: 3450~3454