

光栅模式的色散方程与对称性

项长铖^{1,2**}, 周常河^{1*}

¹中国科学院上海光学精密机械研究所信息光学与光电技术实验室, 上海 201800;

²中国科学院大学, 北京 100049

摘要 提出了横电、横磁偏振布拉格角入射下光栅模式的色散方程可进一步分解的理论, 证明了分解得到的方程与光栅模式对称性间的等价关系。光栅模式的对称性有助于阐释光栅内部衍射过程的物理图像。通过讨论光栅模式方程的根的性质, 提出了一种提高有效折射率计算效率的方法。

关键词 衍射; 衍射理论; 衍射光栅; 色散方程; 对称性

中图分类号 O436 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201838.0905001

Dispersion Equation and Symmetry of Grating Modes

Xiang Changcheng^{1,2**}, Zhou Changhe^{1*}

¹Laboratory of Information Optics and Optoelectronic Technology, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Shanghai 201800, China;

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract The theory about the further factorization of the dispersion equation of the grating mode under the incidence of Bragg angle and transverse electric and transverse magnetic polarizations is proposed, and the equivalent relationship between the factorized equation and the symmetry of the grating mode is confirmed. The symmetry of grating modes is beneficial to illustrate the physical picture of the diffraction process within gratings. By the analysis of the distribution property of the root of the grating mode equation, a method to improve the computation efficiency of the effective refractive index is proposed.

Key words diffraction; diffraction theory; diffraction gratings; dispersion equation; symmetry

OCIS codes 050.2770; 050.1960; 050.1970

1 引 言

亚波长光栅具有许多独特的光学特性, 可用作具有不同功能的光学器件, 如宽带反射器^[1-3]、分束器^[4-6]、偏振分束器^[7]、导模谐振滤波器^[8-9]、波导耦合器^[10]等。设计满足特定功能的亚波长光栅, 需要计算光栅的衍射效率, 目前常用的数值计算方法主要包括有限时域差分(FDTD)法^[11]和严格耦合波分析(RCWA)法^[12]。FDTD和RCWA均能高效精确地求解光栅的麦克斯韦方程。然而这两种方法的物理图像比较复杂, 且不利于求解光栅问题的逆问题, 因此FDTD或RCWA用于设计光栅的效率不高。

经典模式方法^[13]给出了光栅衍射过程更清晰

的物理图像: 光栅的不同模式在光栅区域各自独立传播, 并在入射界面和出射界面与入射波及衍射波耦合。在经典模式方法的基础上, 简化模式方法(SMM)^[14]专注于少数(2~3个)非倏逝传播模式, 并在处理低对比度透射光栅时忽略反射光的作用, 可以得到光栅衍射效率解析的近似公式。SMM首先被应用于分析和设计单层的矩形光栅。Zheng等^[15-17]将SMM拓展应用于分析和设计正弦槽型、三角槽型以及双层的矩形光栅。这些拓展的应用主要得益于光栅模式的对称性。Suratteau等^[18]介绍了横电(TE)偏振下, 光栅模式对称性与模式色散方程之间的联系。本文将该结论推广, 使其在TE、横磁(TM)偏振下同时适用, 并论证了对称模式的色散方程具有的特殊性质, 提升了求解模式有效折射

收稿日期: 2018-03-02; **修回日期:** 2018-04-19; **录用日期:** 2018-04-23

基金项目: 国家自然科学基金(61405217, 61405216)

* **E-mail:** chazhou@mail.shcnc.ac.cn; ** **E-mail:** cexiang@siom.ac.cn

率的效率。

2 模式色散方程的分解与模式对称性

2.1 模式色散方程的分解

图 1 所示为矩形光栅轮廓和坐标系统的示意图,XYZ 坐标原点位于脊的顶端中点,其中 d 为光栅周期, h 为光栅高度, α_0 为入射角, g 和 c 分别为光栅沟与脊的宽度, n_g 和 n_c 为相应的折射率。

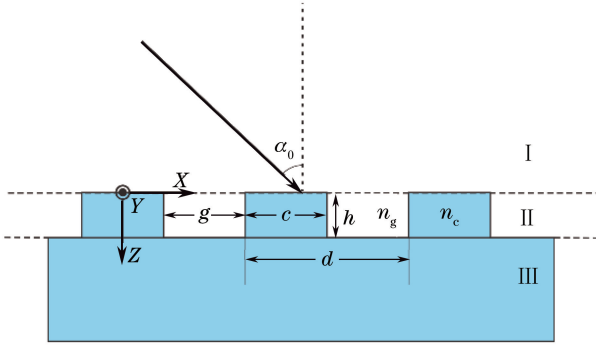


图 1 矩形光栅和坐标系统示意图

Fig. 1 Rectangular grating and attached coordinate system

波长为 λ 的单色平面波以入射角 α_0 入射至光栅,在区域 II 激发光栅模式。光栅模式是光栅电磁场边值问题的正交完备解,该边值问题包含一个亥姆霍兹方程:

$$\nabla^2 F(x, z) + k_0^2 \epsilon(x) F(x, z) = 0, \quad (1)$$

$$F = \begin{cases} E_y, & \text{TM polarization} \\ H_y, & \text{TE polarization} \end{cases}, \quad (2)$$

式中 k_0 为真空中的波矢大小, $\epsilon(x)$ 为介电常数, (x, y, z) 为三维坐标值, E_y, H_y 分别为 y 方向的电场及磁场分量大小。

根据经典模式理论,光栅模式^[13]可表示为

$$F(x, z) = u(x; n_{\text{eff}}) \exp(ik_0 n_{\text{eff}} z), \quad (3)$$

式中 $u(x; n_{\text{eff}})$ 为模式轮廓, n_{eff} 为模式的有效折射率。边界条件指出 $u(x; n_{\text{eff}})$ 和 $u'(x; n_{\text{eff}})/\rho(x)$ 在沟与脊的边界处连续,其中

$$\rho(x) = \begin{cases} 1, & \text{TE polarization} \\ \epsilon(x), & \text{TM polarization} \end{cases}. \quad (4)$$

同时,这两个函数具有准周期性:

$$ru(x; n_{\text{eff}}) = u(x + d; n_{\text{eff}}), \quad (5)$$

$$ru'(x; n_{\text{eff}})/\rho(x) = u'(x + d; n_{\text{eff}})/\rho(x + d), \quad (6)$$

式中 $r = \exp(ik_{x0}d)$, $k_{x0} = k_0 \sin \alpha_0$ 。

每个光栅模式的有效折射率均满足光栅色散方程^[11],即

$$\cos(\beta c) \cos(\gamma g) - \frac{\beta^2 + \tau^2 \gamma^2}{2\tau\beta\gamma} \sin(\beta c) \sin(\gamma g) = \cos(ik_{x0}d), \quad (7)$$

式中参数 β, γ 和 τ 的表达式为

$$\beta = \begin{cases} \sqrt{k_0^2 (n_c^2 - n_{\text{eff}}^2)}, & n_c \geq n_{\text{eff}} \\ i\sqrt{k_0^2 (n_{\text{eff}}^2 - n_c^2)}, & n_{\text{eff}} > n_c \end{cases}, \quad (8)$$

$$\gamma = \begin{cases} \sqrt{k_0^2 (n_g^2 - n_{\text{eff}}^2)}, & n_g \geq n_{\text{eff}} \\ i\sqrt{k_0^2 (n_{\text{eff}}^2 - n_g^2)}, & n_{\text{eff}} > n_g \end{cases}, \quad (9)$$

$$\tau = \begin{cases} 1, & \text{TE polarization} \\ \frac{\epsilon_c}{\epsilon_g}, & \text{TM polarization} \end{cases}, \quad (10)$$

式中 ϵ_g, ϵ_c 分别为光栅沟与脊的介电常数。

当 $\alpha_0 = \arcsin(n\lambda/d)$ 时,(7)式变为

$$\cos(\beta c) \cos(\gamma g) - \frac{\beta^2 + \tau^2 \gamma^2}{2\tau\beta\gamma} \sin(\beta c) \sin(\gamma g) = 1, \quad (11)$$

其可以分解^[18]为

$$\left[\beta \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) + \tau \gamma \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) \right] \times \left[\beta \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) + \tau \gamma \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) \right] = 0. \quad (12)$$

当 $\alpha_0 = \arcsin[(2n+1)\lambda/(2d)]$ 时,(7)式变为

$$\cos(\beta c) \cos(\gamma g) - \frac{\beta^2 + \tau^2 \gamma^2}{2\tau\beta\gamma} \sin(\beta c) \sin(\gamma g) = -1, \quad (13)$$

其可以分解为

$$\left[\beta \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) - \tau \gamma \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) \right] \times \left[\beta \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) - \tau \gamma \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) \right] = 0. \quad (14)$$

2.2 光栅模式的对称性

通过观察模式轮廓可以发现,当入射光垂直入射或以布拉格角入射时,存在偶对称[如图 2(a)、(b)所示]和奇对称[如图 2(c)、(d)所示]的光栅模式。这种对称的分类仅仅基于少数模式的观察得出,其分类的完备性需要进一步证明。模式色散方程的分解暗示了该方程与两种对称模式之间的联系。文献[18]论证了 $\tau = 1, \alpha_0 = \arcsin(n\lambda/d)$ 时,对称模式和模式色散方程分解之间的联系。

根据文献[13]的表述,偶对称的模式轮廓可以表示为

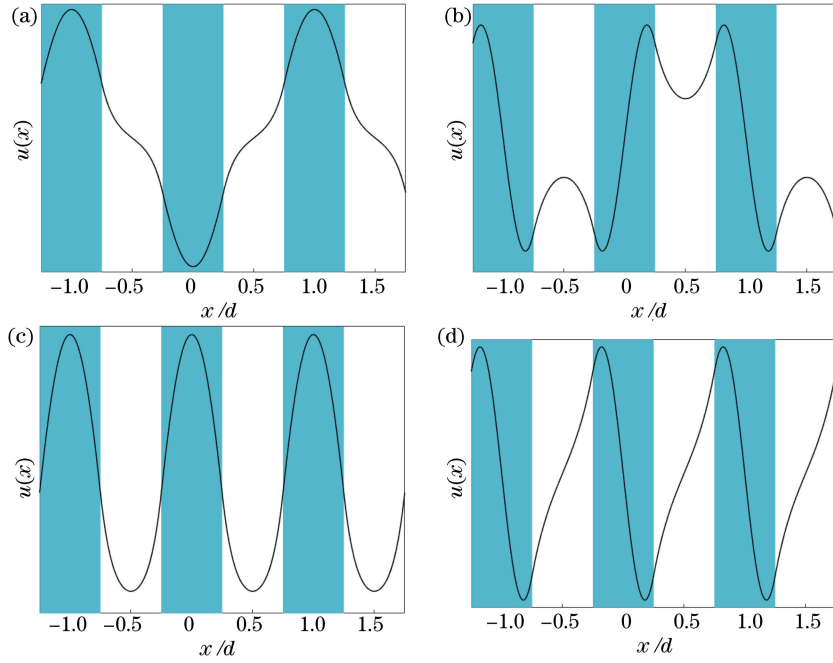


图 2 四种对称的光栅模式轮廓(光栅参数: $d=1965\text{ nm}$, $c=g=932.5\text{ nm}$, $n_c=1.4496$, $n_g=1$, $\lambda=1310\text{ nm}$)。

(a)(b)一阶布拉格角入射下前两个光栅模式; (c)(d)二阶布拉格角入射下前两个光栅模式

Fig. 2 Four types of symmetric mode profiles with grating parameters of $d=1965\text{ nm}$, $c=g=932.5\text{ nm}$, $n_c=1.4496$, $n_g=1$ and $\lambda=1310\text{ nm}$. (a) (b) First two modes under incidence of the first order Bragg angle; (c) (d) first two modes under incidence of the second order Bragg angle

$$u^I(x; n_{\text{eff}}) = \begin{cases} \cos(\beta x), & -\frac{c}{2} < x \leq \frac{c}{2} \\ \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left[\gamma\left(x - \frac{c}{2}\right)\right] - \frac{1}{\tau} \frac{\beta}{\gamma} \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left[\gamma\left(x - \frac{c}{2}\right)\right], & \frac{c}{2} < x \leq d - \frac{c}{2} \end{cases}, \quad (15)$$

$$u^I(x + d; n_{\text{eff}}) = r u^I(x; n_{\text{eff}}). \quad (16)$$

(15)、(16)式满足亥姆霍兹方程和准周期性, $u(x; n_{\text{eff}})$ 和 $u'(x; n_{\text{eff}})/\rho(x)$ 在 $x=c/2$ 处连续, 且还在 $x=d-c/2$ 处连续, 从而有

$$\beta \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin(\gamma g) = -\tau \gamma \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) [r - \cos(\gamma g)], \quad (17)$$

$$\beta \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) [r + \cos(\gamma g)] = -\tau \gamma \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin(\gamma g). \quad (18)$$

当且仅当 $r = \pm 1$ 时, (17)、(18)式等价。当 $r = -1$ 时, (17)、(18)式等价于

$$\beta \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) - \tau \gamma \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0. \quad (19)$$

当 $r = 1$ 时, (17)、(18)式等价于

$$\beta \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) + \tau \gamma \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0. \quad (20)$$

奇对称的模式轮廓可以表示为

$$u^{II}(x; n_{\text{eff}}) = \begin{cases} \sin(\beta x), & -\frac{c}{2} < x \leq \frac{c}{2} \\ \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left[\gamma\left(x - \frac{c}{2}\right)\right] + \frac{1}{\tau} \frac{\beta}{\gamma} \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left[\gamma\left(x - \frac{c}{2}\right)\right], & \frac{c}{2} < x \leq d - \frac{c}{2} \end{cases}, \quad (21)$$

$$u^{II}(x + d; n_{\text{eff}}) = r u^{II}(x; n_{\text{eff}}). \quad (22)$$

同样可以证明, 当且仅当 $r = \pm 1$ 时, $u(x; n_{\text{eff}})$

和 $u'(x; n_{\text{eff}})/\rho(x)$ 在 $x=d-c/2$ 处连续。当 $r = 1$ 时, 连续性等价于

$$\beta \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) + \tau \gamma \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0. \quad (23)$$

当 $r = -1$ 时, 连续性等价于

$$\beta \cos\left(\frac{\beta c}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma g}{2}\right) - \tau \gamma \sin\left(\frac{\beta c}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0. \quad (24)$$

将(19)~(20)式, (23)~(24)式与模式色散方程联系起来, 可以得出结论: 当且仅当 $r = \pm 1$ 时, 光栅模式可按模式轮廓的对称性被完备地分为奇对称模式和偶对称模式。

2.3 对称模式有效折射率的分布和求解

(19)~(20)式, (23)~(24)式可以等价于

$$\beta \tan\left(\frac{\beta c}{2}\right) - \tau \gamma \cot\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0, \quad (25)$$

$$\beta \cot\left(\frac{\beta c}{2}\right) - \tau \gamma \tan\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0, \quad (26)$$

$$\beta \tan\left(\frac{\beta c}{2}\right) + \tau \gamma \tan\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0, \quad (27)$$

$$\beta \cot\left(\frac{\beta c}{2}\right) + \tau \gamma \cot\left(\frac{\gamma g}{2}\right) = 0. \quad (28)$$

将(25)~(28)式左侧看作 n_{eff}^2 的函数, 分别写作 $f_1(n_{\text{eff}}^2)$ 、 $f_2(n_{\text{eff}}^2)$ 、 $f_3(n_{\text{eff}}^2)$ 、 $f_4(n_{\text{eff}}^2)$, 其函数图

像如图 3 所示, 容易证明, 这些函数在其定义域内均具有单调性, 即这些函数在相邻的奇点内单调递增或递减。因此, 在相邻奇点之间的区间内, 它们分别有且仅有一个根, 这一性质可以用于提高求解模式有效折射率的效率。一般来说, 求解类似(9)式的超越方程在给定区间内的所有解较为困难, 通常采用分区间逐段扫描, 在两端异号的区间内采用求单个数值解的方法, 该方法效率不高且存在漏解的可能。若利用对称模式方程的性质, 则只需要将指定的求解区间按奇点划分成若干块, 然后采用二分法等区间求解算法即可快速求出所有指定区间内有效折射率。同样, 当光栅参数为 $f \in [0.1, 0.9]$, $d = 1500 \text{ nm}$, $n_g = 1$, $n_c = 1.45$ (占空比 $f = c/d$) 时, 计算光栅在 1064 nm 波长入射下前三个光栅模式的有效折射率, 以 1×10^{-3} 为单位区间逐段扫描求解。图 4 所示为两种不同方法计算得到的前三个模式 ($q = 0, 1, 2$) 的有效折射率随占空比 f 变化的曲线, 其中实线为传统分区扫描的方法的结果, 虚线为对称模式方程求解的结果。可以看出, 两者的结果没有差别。采用对称模式方程在速度上有显著优势, 见表 1。

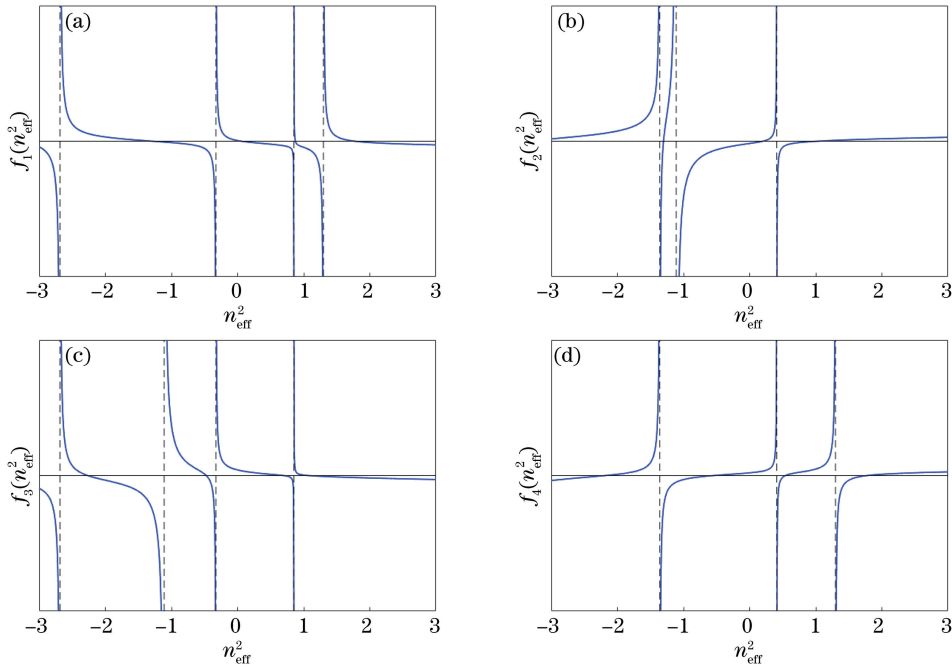


图 3 四个函数的图像(光栅参数: $d = 1979 \text{ nm}$, $c = 1385 \text{ nm}$, $g = 594 \text{ nm}$, $n_c = 1.4496$, $n_g = 1$, $\lambda = 1064 \text{ nm}$)。

(a) $f_1(n_{\text{eff}}^2)$; (b) $f_2(n_{\text{eff}}^2)$; (c) $f_3(n_{\text{eff}}^2)$; (d) $f_4(n_{\text{eff}}^2)$

Fig. 3 Graphs of four functions under grating parameters of $d = 1979 \text{ nm}$, $c = 1385 \text{ nm}$, $g = 594 \text{ nm}$, $n_c = 1.4496$, $n_g = 1$ and $\lambda = 1064 \text{ nm}$. (a) $f_1(n_{\text{eff}}^2)$; (b) $f_2(n_{\text{eff}}^2)$; (c) $f_3(n_{\text{eff}}^2)$; (d) $f_4(n_{\text{eff}}^2)$

表 1 两种方法计算有效折射率的时间

Table 1 Computation time of effective index by two methods

s

Method	1	2	3	4	5	Average
Scanning method	36.03	35.27	35.42	35.15	35.06	35.39
Method using symmetric mode equation	0.41	0.42	0.43	0.42	0.40	0.42

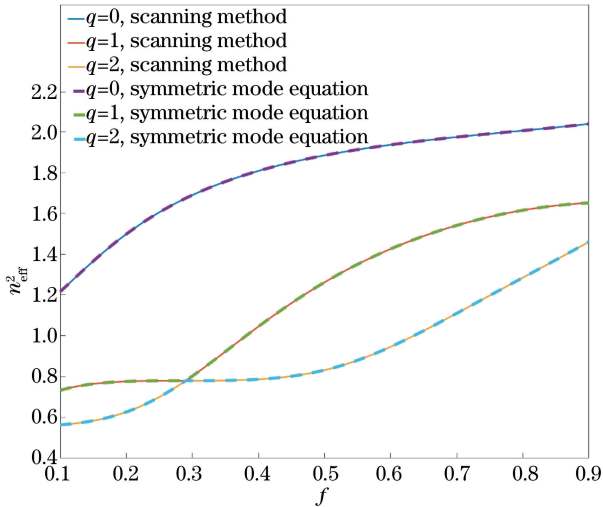


图 4 两种方法计算得到的前三个模式的有效折射率随占空比 f 变化的曲线(光栅参数: $d=1500$ nm,

$$n_c=1.4496, n_g=1, \lambda=1064 \text{ nm})$$

Fig. 4 Effective refractive index of the first three modes obtained by two methods versus duty ratio under grating parameters of $d=1500$ nm, $n_c=1.4496$,

$$n_g=1 \text{ and } \lambda=1064 \text{ nm}$$

3 结 论

证明了光栅模式对称性与模式有效折射率满足对称模式方程之间的等价关系,并指出了模式的对称性只在布拉格角入射或垂直入射的情况下存在。求解对称模式方程能够同时得出光栅模式的折射率 and 对称性。由于不同对称性模式的耦合系数为零,折射率 and 对称性在设计双层或多层光栅计算模式间的耦合关系时能带来便利。通过比较发现,采用对称模式方程求解模式折射率的方法比传统的求解方法具有效率上的优势。布拉格角入射是大部分光栅设计适用的情形,因此运用布拉格角入射下的对称模式方程求解模式折射率具有重要的意义。

参 考 文 献

- [1] Karagodsky V, Sedgwick F G, Chang-Hasnain C J. Theoretical analysis of subwavelength high contrast grating reflectors[J]. *Optic Express*, 2010, 18(16): 16973-16988.
- [2] Karagodsky V, Chang-Hasnain C J. Physics of near-wavelength high contrast gratings[J]. *Optics*

Express, 2012, 20(10): 10888-10895.

- [3] Xie J L, Hao Y Q, Wang Z W, *et al.* Design of $2 \mu\text{m}$ waveband GaSb based subwavelength grating mirror[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2017, 54(7): 070501.
谢检来, 郝永芹, 王志伟, 等. $2 \mu\text{m}$ 波段 GaSb 基亚波长光栅反射镜的设计[J]. *激光与光电子学进展*, 2017, 54(7): 070501.
- [4] Feng J, Zhou C, Zheng J, *et al.* Modal analysis of deep-etched low-contrast two-port beam splitter grating[J]. *Optics Communications*, 2008, 281(21): 5298-5301.
- [5] Feng J, Zhou C, Wang B, *et al.* Three-port beam splitter of a binary fused-silica grating[J]. *Applied Optics*, 2008, 47(22): 6638-6643.
- [6] Wang J, Zhou C, Ma J, *et al.* Modal analysis of 1×3 reflective triangular gratings under normal incidence[J]. *Chinese Optics Letters*, 2017, 15(4): 040902.
- [7] Zheng J, Zhou C, Feng J, *et al.* Polarizing beam splitter of deep-etched triangular-groove fused-silica gratings[J]. *Optics Letters*, 2008, 33(14): 1554-1556.
- [8] Wu J, Zhou C, Cao H, *et al.* Simplified mode analysis of guided mode resonance gratings with asymmetric coatings[J]. *Chinese Optics Letters*, 2013, 11(6): 060501.
- [9] Hu J H, Liu X H, Zhao J J, *et al.* Design and analysis of optical filter based on subwavelength high-contrast grating[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2016, 53(5): 050502.
胡劲华, 刘秀红, 赵继军, 等. 一种亚波长高折射率差光栅滤波器的设计与分析[J]. *激光与光电子学进展*, 2016, 53(5): 050502.
- [10] Zhang J, Yang J, Lu H, *et al.* Polarization-independent grating coupler based on silicon-on-insulator[J]. *Chinese Optics Letters*, 2015, 13(9): 091301.
- [11] Garcia S G, Bretones A R, Olmedo B G, *et al.* Time domain techniques in computational electromagnetics[M]. Southampton: WIT Press, 2003: 91-132.
- [12] Moharam M, Gaylord T K. Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings [J]. *Journal of the Optics Society of America A*, 1982, 72(1): 1385-1392.

-
- [13] Botten L, Craig M, McPhedran R, *et al.* The dielectric lamellar diffraction grating [J]. *Journal of Modern Optics*, 1981, 28(3): 413-428.
- [14] Clausnitzer T, Kämpfe T, Kley E B, *et al.* An intelligible explanation of highly-efficient diffraction in deep dielectric rectangular transmission gratings [J]. *Optics Express*, 2005, 13(26): 10448-10456.
- [15] Zheng J, Zhou C, Feng J, *et al.* Polarizing beam splitter of two-layer dielectric rectangular transmission gratings in Littrow mounting [J]. *Optics Communications*, 2009, 282(15): 3069-3075.
- [16] Feng J, Zhou C, Cao H, *et al.* Deep-etched sinusoidal polarizing beam splitter grating [J]. *Applied Optics*, 2010, 49(10): 1739-1743.
- [17] Zheng J, Zhou C, Feng J, *et al.* Polarizing beam splitter of deep-etched triangular-groove fused-silica gratings [J]. *Optics Letters*, 2008, 33(14): 1554-1556.
- [18] Suratteau J Y, Cadilhac M, Petit R. On the numerical study of deep dielectric lamellar gratings [J]. *Journal of Optics*, 1983, 14(6): 273-288.