

层叠亚波长光栅中的模式匹配分析法

张锦龙^{1,2*}, 史帅凯^{1,2}, 焦宏飞^{1,2}, 程鑫彬^{1,2}

¹同济大学先进微结构材料教育部重点实验室, 上海 200092;

²同济大学物理科学与工程学院精密光学工程技术研究所, 上海 200092

摘要 模式匹配分析法是计算亚波长光栅衍射效应的一种高效方法。对于亚波长层叠光栅, 相邻的不同介质层边界处电磁场切向分量连续, 每层中电磁场的各个波导模式对该层中电磁场的贡献与相邻层中电磁场切向分量的贡献相等, 相邻层间模式匹配, 故可将模式匹配分析法应用于亚波长层叠光栅中。通过具体实例比较了由模式匹配分析法与严格耦合波分析法计算得到的光栅衍射效率和电磁场强度分布, 对比结果表明模式匹配分析法在分析亚波长层叠介质光栅方面相较于严格耦合波分析法更为高效, 在收敛性以及计算速度方面有着独特的优势, 且对于深刻理解层叠光栅对电磁波的衍射效应以及结合优化方法设计新型亚波长光栅、新型超表面方面具有重要意义。

关键词 光纤光学; 层叠亚波长光栅; 模式匹配分析法; 严格耦合波分析; 导模共振

中图分类号 O436

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.1205001

Analytical Mode Matching in Stacked Subwavelength Gratings

Zhang Jinlong^{1,2*}, Shi Shuaikai^{1,2}, Jiao Hongfei^{1,2}, Cheng Xinbin^{1,2}

¹The MOE Key Laboratory of Advanced Micro-Structured Materials, Tongji University, Shanghai 200092, China;

²Institute of Precision Optical Engineering, School of Physics Science and Engineering,

Tongji University, Shanghai, 200092, China

Abstract Analytical mode matching is an efficient method to calculate the diffraction of subwavelength grating. For stacked subwavelength gratings, the tangential component of an electromagnetic field is continuous at the boundary of adjacent different dielectric layers, and the contribution of each waveguide mode of the electromagnetic field in each layer to the electromagnetic field in the layer is equal to that of the tangential component of the electromagnetic field in the adjacent layer. The modes between adjacent layers are matched. Thus, the analytical mode matching can be applied to stacked subwavelength dielectric gratings. The diffraction efficiencies and the electromagnetic field distributions calculated using the analytical mode matching and the rigorous coupled wave analysis method are compared in this study. Comparison results show that the proposed analytical mode matching is an effective method for calculating the diffraction of stacked subwavelength dielectric gratings owing to its unique advantage in convergence and calculation speed and it offers a profound understanding of the diffraction effects of stacked subwavelength gratings on electromagnetic waves. The proposed method combined with optimization methods can be used to design new stacked subwavelength gratings and metasurfaces.

Key words fiber optics; stacked subwavelength grating; analytical mode matching; rigorous coupled wave analysis; guide mode resonance

OCIS codes 050.1950; 050.6624; 260.1960

1 引 言

亚波长光栅为周期小于且接近于入射光波长的一类光栅的总称, 其通常结构紧凑, 光谱调控性能强, 因而在诸多方面有着重要的应用, 如反射镜^[1-2]、

偏振片^[3-6]、滤光片^[7]、波导^[8]以及波片^[9-10]等器件的制作。在这些应用中亚波长光栅体现出诸多光学干涉薄膜难以实现的光谱特性。近几年来有研究者提出亚波长层叠光栅。层叠式的光栅结构较单层光栅更为复杂, 但能够实现单层光栅实现不了的一些

收稿日期: 2020-02-17; 修回日期: 2020-03-18; 录用日期: 2020-03-23

基金项目: 国家自然科学基金(61621001, 61975155)、国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院联合基金(U1630124, U1630123)、上海市教育委员会科研创新计划

* E-mail: jinlong@tongji.edu.cn

新功能,如对于单波长偏振光的全角度反射^[11-12]、宽带更加平坦的窄带滤光片^[13]以及不同波段的宽带反射镜^[14-15]。

关于其理论分析方面,早在1993年Wang等^[16]就将光栅光谱中的异常特性解释为导模共振(GMR)效应,即将光栅视作均匀波导,在某些入射波长下,入射光与光栅波导中的泄露模互相耦合,引起电磁场能量的重新分布,因为波导的模式是分立的,所以这种效应导致光栅的反射透射光谱在某些分立波长处急剧变化。光栅的导模共振相关理论能够较为准确地预测光栅光谱的窄带异常特性,但是随着光栅材料折射率与环境对比度的增加,光栅光谱表现为宽带效应,如宽带反射^[1-2]。在这种情况下,导模共振理论不能很好地解释光栅光谱的宽带异常特性。2010年,Karagodsky等^[17]提出将单层亚波长光栅视作周期性波导阵列,入射光在光栅内激发了不同的传播模式,这些模式的场强叠加在一起实现了对于电磁波的完全反射或完全透射^[18-19]。这种模式匹配分析法(AMM)^[20]能够计算出光栅中各个模式的场强分布,各个模式之间相互干涉叠加与最终光栅的光谱能够准确地对应起来,该方法不仅能够解释GMR效应产生的光栅窄带异常特性,而且能够解释光栅的宽波段光谱特性。2013年,Wu等^[21]将这种模式匹配分析法推广至非对称的情况下,即入射介质与出射介质折射率不相同的情形,并且以这种理论分析了GMR效应中的窄带高反射现象。

关于光栅的衍射效率以及电磁场分布计算方面,现行主流算法为严格耦合波分析法(RCWA)^[22-23],又称傅里叶模态法(FMM)。RCWA方法于20世纪80年代提出后用于计算平面光栅的衍射效率,经过几十年的发展,该算法本身已十分完善。RCWA方法将麦克斯韦方程的求解问题转化为一

个求解特征函数的问题,通过对光栅中电磁场作傅里叶变换得到光栅区域内特征函数耦合的电磁场表达式,然后在光栅区域与其他区域交界面上求解边界条件得到最终光栅衍射效率的值。当所求解问题为多层光栅结构时,需要将每层的特征函数在不同光栅层边界上逐层匹配边界条件后进行计算。由于其计算时需要将光栅区的介电常数展开为傅里叶级数,结果的准确性由展开项数决定。通常计算时,数值截断误差取几十项。这就导致了使用RCWA方法计算光栅衍射效率时,收敛性慢,耗费时间长。RCWA虽然能够给出光栅的衍射效率与电磁场分布,但是不能直观地表达电磁波在光栅内部的传播行为。

本文将单层光栅中的模式匹配分析法推广至层叠式多层光栅中。在层叠式光栅中,每层光栅中传播模式的波数以及存在几种主要的传播模式与其他光栅层折射率无关,故可以使用波导传输的理论来分析亚波长层叠光栅。本文提出的理论分析方法与RCWA法相比,在收敛性以及计算耗费时间上有着独特的优势,并且能清晰表达光栅内每种模式对于总场强分布的贡献,可为设计新型层叠式亚波长光子器件提供便利。

2 层叠光栅的模式匹配分析法

简便起见,首先分析双层矩形光栅。入射介质与光栅间隙折射率为 $n_0=1$,基底折射率为 n_s ,入射面定义为光栅横截面,入射光条件为TM光(磁场方向垂直于光栅横截面)、正入射。光栅的几何结构如图1(a)所示,光栅在 x 方向上周期排列,在 y 方向上无限延伸。 Λ 、 a 、 s 分别为光栅周期、孔距与线宽, $s=\Lambda-a$ 。 z_1 为光栅总厚度, z_2 为顶层光栅下表面到 $z=0$ 平面的距离, z_3 为底层光栅厚度, $-z_2$ 到 $-z_3$ 之间为厚度为0、折射率为1的虚设层,

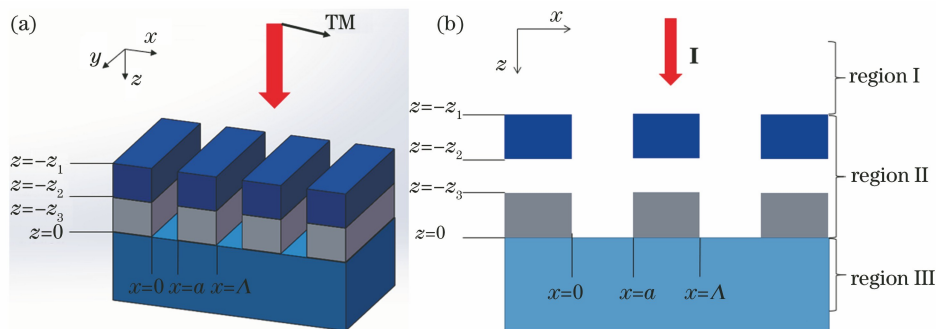


图1 层叠光栅结构图。(a)三维结构示意图;(b)截面图

Fig. 1 Stacked grating structure diagrams. (a) Three-dimensional schematic diagram; (b) section diagram

此层为求解方便而引入。由于光栅在 y 方向上无限延伸,所求解问题变为二维问题且待求电磁场分量仅有 H_y, E_x, E_z ,因此可取一个垂直 y 轴的横截面进行分析,如图 1(b)所示。首先将所取平面分为 3 个区域:区域 I(入射区),即 $z \leq -z_1$ 部分,此区域包括入射波与反射波;区域 II(光栅区),即 $-z_1 \leq z < 0$ 部分,此区域包括 3 层,第 1 层与第 3 层内包含电磁波在周期波导中形成的传播模式的叠加,第 2 层为虚设层;区域 III(透射区),即 $z \geq 0$ 部分,此区域仅包括透射波。

根据光栅方程写出区域 I 与区域 III 中电磁场的表达式,根据波导模式的波数写出区域 II 中电磁场的表达式,最后根据匹配边界条件即可求出各级次衍射波的衍射效率以及整个空间的电磁场分布。

区域 I 中电磁场可表示为

$$H_y^1(x, z \leq -z_1) = \exp[-jk_0(z + z_1)] - \sum_{l=0}^{\infty} r_l h_{y,l}^{1,\text{out}}(x) \exp[j\gamma_{0,l}(z + z_1)], \quad (1)$$

$$E_x^1(x, z \leq -z_1) = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \exp[-jk_0(z + z_1)] + \sum_{l=0}^{\infty} r_l e_{x,l}^{1,\text{out}}(x) \exp[j\gamma_{0,l}(z + z_1)], \quad (2)$$

$$h_{y,l}^{1,\text{out}}(x) = \cos[(2l\pi/\Lambda)(x - a/2)], \quad (3)$$

$$e_{x,l}^{1,\text{out}} = (\gamma_{0,l}/k_0) \eta h_{y,l}^{1,\text{out}}(x), \quad (4)$$

$$\gamma_{0,l}^2 = (2\pi/\lambda)^2 - (2\pi l/\Lambda)^2, \quad (5)$$

式中: k_0 为入射光在入射介质中的波数; r_l ($l=0, 1, 2, \dots$) 为各反射级次衍射波的振幅系数, l 为衍射级次,因此处所举例子具有对称性,故可将负衍射级次的衍射光合并至正衍射级次计算; $2l\pi/\Lambda, \gamma_{0,l}$ 分别表示由光栅方程所确定的反射波波数的 x 分量与 z 分量; λ 为入射光在真空中的波长; $\eta = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$ 为电磁波的真空波阻抗,其中 μ_0 为真空中的磁导率; ϵ_0 为真空介电常数。(1)式中第 1 项表示入射波的磁场分量,振幅已归一化,第 2 项表示反射波各衍射级次的磁场分量,由其 x, z 方向波数所确定的传播模式叠加表示;(2)式是由(1)式根据麦克斯韦方程组导出的,(2)式第 1 项为入射光电场分量,第 2 项为反射波各衍射级次的电场分量。

区域 II 中第 1 层(最上层)与第 3 层(最下层)可视作无穷周期的平板波导阵列处理, k_{a_i}, k_{s_i} 分别表示空气孔隙($0 < x < a$)、介质柱($a < x < \Lambda$)中电磁波波数的 x 分量, β_{m_i} 表示波数的 z 分量,其中 m 为模式阶数, $i=1$ 时代表第 1 层, $i=3$ 时表示第 3 层。第 1 层中电磁场可表示为

$$H_y^{\text{II},1}(x, -z_1 \leq z \leq -z_2) = \sum_{m=1}^{\infty} h_{y,m}^{\text{II},1}(x) \{A_m \exp[-j\beta_{m1}(z + z_2)] - A_m^\rho \exp[+j\beta_{m1}(z + z_2)]\}, \quad (6)$$

$$E_x^{\text{II},1}(x, -z_1 \leq z \leq -z_2) = \sum_{m=1}^{\infty} e_{x,m}^{\text{II},1}(x) \{A_m \exp[-j\beta_{m1}(z + z_2)] + A_m^\rho \exp[+j\beta_{m1}(z + z_2)]\}, \quad (7)$$

$$h_{y,m}^{\text{II},1} = \begin{cases} \cos(k_{s_1,m} s/2) \cos[k_{a_1,m}(x - a/2)], & 0 < x < a \\ \cos(k_{a_1,m} a/2) \cos\{k_{s_1,m}[x - (a + \Lambda)/2]\}, & a < x < \Lambda \end{cases}, \quad (8)$$

$$e_{x,m}^{\text{II},1} = \begin{cases} (\beta_{m1}/k_0) \eta h_{y,m}^{\text{II},1}, & 0 < x < a \\ (\beta_{m1}/k_0) n_1^{-2} \eta h_{y,m}^{\text{II},1}, & a < x < \Lambda \end{cases}, \quad (9)$$

式中: n_1 为第 1 层的折射率; A_m 为第 1 层光栅层中沿 z 轴正向传播的波导振幅系数, A_m^ρ 为第 1 层光栅层中沿 z 轴反向传播的波导振幅系数,其中 ρ 无实际意义,用于区分正反向传播系数。

因第 3 层中波导模式的波数分布仅与此层折射率分布有关,故第 3 层中电磁场表达式与第 1 层电磁场表达式[(6)~(9)式]类似,可表示为

$$H_y^{\text{II},3}(x, -z_3 \leq z \leq 0) = \sum_{m=1}^{\infty} h_{y,m}^{\text{II},3}(x) [C_m \exp(-j\beta_{m3}z) - C_m^\rho \exp(+j\beta_{m3}z)], \quad (10)$$

$$E_x^{\text{II},3}(x, -z_3 \leq z \leq 0) = \sum_{m=1}^{\infty} e_{x,m}^{\text{II},3}(x) [C_m \exp(-j\beta_{m3}z) + C_m^\rho \exp(+j\beta_{m3}z)], \quad (11)$$

$$h_{y,m}^{\text{II},3} = \begin{cases} \cos(k_{s_3,m} s/2) \cos[k_{a_3,m}(x - a/2)], & 0 < x < a \\ \cos(k_{a_3,m} a/2) \cos\{k_{s_3,m}[x - (a + \Lambda)/2]\}, & a < x < \Lambda \end{cases}, \quad (12)$$

$$e_{x,m}^{\text{II},3} = \begin{cases} (\beta_{m3}/k_0) \eta n_1^{-2} h_{y,m}^{\text{II},3}, & 0 < x < a \\ (\beta_{m3}/k_0) n_0 n_3^{-2} \eta h_{y,m}^{\text{II},3}, & a < x < \Lambda \end{cases}, \quad (13)$$

式中: n_3 为第 3 层的折射率; C_m 为第 3 层光栅层中沿 z 轴正向传播的波导振幅系数, C_m^e 为第 3 层光栅层中沿 z 轴反向传播的波导振幅系数。

第 2 层为引入的虚设层, 取虚设层折射率为 n_0 , 则有

$$H_y^{II,2}(x, -z_2 \leq z \leq -z_3) = \sum_{l=0}^{\infty} h_{y,l}^{II,2}(x) \{B_l \exp[-j\gamma_{0,l}(z+z_3)] - B_l^e \exp[+j\gamma_{0,l}(z+z_3)]\}, \quad (14)$$

$$E_x^{II,2}(x, -z_2 \leq z \leq -z_3) = \sum_{l=0}^{\infty} e_{x,l}^{II,2}(x) \{B_l \exp[-j\gamma_{0,l}(z+z_3)] + B_l^e \exp[+j\gamma_{0,l}(z+z_3)]\}, \quad (15)$$

$$h_{y,l}^{II,2}(x) = \cos[(2l\pi/\Lambda)(x-a/2)], \quad (16)$$

$$e_{x,l}^{II,2} = (\gamma_{0,l}/k_0) \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} h_{y,l}^{II,2}(x), \quad (17)$$

式中: B_l 为间隔层中沿 z 轴正向传播的电磁波振幅系数, B_l^e 为第一层光栅层中沿 z 轴反向传播的电磁波振幅系数, 也是所要求解的待定系数。由文献[17]中(1f)式和(2)式联立可求出每层光栅中的波导模式的波数 k_a 、 k_s 、 β 。

区域 III 中电磁场可表示为

$$H_y^{III}(x, z \geq 0) = \sum_{l=0}^{\infty} \tau_l h_{y,l}^{III,out}(x) \exp(-j\gamma_{s,l}z), \quad (18)$$

$$E_x^{III}(x, z \geq 0) = \sum_{l=0}^{\infty} \tau_l e_{x,l}^{III,out}(x) \exp(-j\gamma_{s,l}z), \quad (19)$$

$$h_{y,l}^{III,out}(x) = \cos[(2l\pi/\Lambda)(x-a/2)], \quad (20)$$

$$e_{x,l}^{III,out} = (\gamma_{s,l}/k_0) \eta n_s^{-2} h_{y,l}^{III,out}(x), \quad (21)$$

$$\gamma_{s,l}^2 = (2\pi n_s/\lambda)^2 - (2\pi l/\Lambda)^2, \quad (22)$$

式中: τ_l ($l=0, 1, 2, \dots$) 即为各透射级次衍射波的振幅系数。

至此整个空间电磁场分布都被表达出来, 接下来匹配边界条件, 求出各级次衍射波的振幅系数以及光栅中传播模式的振幅系数。先求解单层光栅时入射与出射平面的匹配边界条件, 再求解双层光栅时入射与出射平面以及虚设层的上下边界面的匹配边界条件。这四个边界面上的边界条件类似, 都是光栅与均匀介质的交界面, 易于求解方程组, 这也是引入虚设层的原因。

首先匹配入射面 ($z = -z_1$) 上的电磁场分量, 电磁场切向分量 H_y 与 E_x 连续, 即 $z = -z_1$ 时, 式(1)与(6)相等, 式(2)与(7)相等, 以匹配 H_y 为例可得

$$1 - \sum_{l=0}^{\infty} r_l h_{y,l}^{I,out}(x) =$$

$$\sum_{m=1}^{\infty} h_{y,m}^{II,1}(x) \{A_m \exp[-j\beta_{m1}(-z_1+z_2)] - A_m^e \exp[+j\beta_{m1}(-z_1+z_2)]\}, \quad (23)$$

利用(3)式的正交性, (23)式两边同乘(3)式并积分可消去左边的求和号, 可得

$$(\delta_{l,0} - r_l)(2 - \delta_{l,0})^{-1} = \sum_{m=1}^{\infty} \{A_m \exp[-j\beta_{m1}(-z_1+z_2)] - A_m^e \exp[+j\beta_{m1}(-z_1+z_2)]\} \cdot \Lambda^{-1} \int_0^{\Lambda} [h_{y,m}^{II,1}(x) h_{y,l}^{I,out}(x)] dx, \quad (24)$$

同理匹配 E_x 可得

$$(\delta_{l,0} + r_l)(\eta\gamma_{0,l}/k_0)^2(2 - \delta_{l,0})^{-1} = \sum_{m=1}^{\infty} \{A_m \exp[-j\beta_{m1}(-z_1+z_2)] + A_m^e \exp[+j\beta_{m1}(-z_1+z_2)]\} \cdot \Lambda^{-1} \int_0^{\Lambda} [e_{x,m}^{II,1}(x) e_{x,l}^{I,out}(x)] dx. \quad (25)$$

为了表达清晰, 引入矩阵来表达边界条件的匹配。首先定义以下矩阵

$$\mathbf{r} = (r_0 \quad r_1 \quad r_2 \quad \dots)^T = \mathbf{R} (1 \quad 0 \quad 0 \quad \dots)^T, \quad (26)$$

$$\mathbf{A} = (A_1 \quad A_2 \quad \dots)^T, \quad (27)$$

$$\mathbf{A}^e = (A_1^e \quad A_2^e \quad \dots)^T, \quad (28)$$

$$\mathbf{A}^e = \boldsymbol{\rho}_a \mathbf{A}, \quad (29)$$

$$\boldsymbol{\varphi}_1 = \text{diag}\{\exp[-j\beta_{m1}(z_1 - z_2)]\}, \quad (30)$$

其中 \mathbf{R} 为后续计算方便引入的方阵, 其第 1 列为衍射光各级次反射系数。

矩阵 $\mathbf{E}^{I \sim II,1}$, $\mathbf{H}^{I \sim II,1}$ 的元素为

$$H_{l,m}^{I \sim II,1} = \Lambda^{-1} (2 - \delta_{l,0}) \int_0^{\Lambda} [h_{y,m}^{II,1}(x) h_{y,l}^{I,out}(x)] dx, \quad (31)$$

$$E_{l,m}^{I \sim II,1} = \Lambda^{-1} (\eta\gamma_{0,l}/k_0)^{-2} (2 - \delta_{l,0}) \int_0^{\Lambda} [e_{x,m}^{II,1}(x) e_{x,l}^{I,out}(x)] dx, \quad (32)$$

由(24)与(25)式可得

$$(\mathbf{I} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{E}^{I \sim II,1} (\boldsymbol{\varphi}_1^{-1} + \boldsymbol{\varphi}_1 \boldsymbol{\rho}_a) = (\mathbf{I} - \mathbf{R})^{-1} \mathbf{H}^{I \sim II,1} (\boldsymbol{\varphi}_1^{-1} - \boldsymbol{\varphi}_1 \boldsymbol{\rho}_a), \quad (33)$$

同理匹配光栅出射面 ($z=0$) 边界条件可得

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{H}^{II,3 \sim III} (\mathbf{C} - \mathbf{C}^e) = \mathbf{E}^{II,3 \sim III} (\mathbf{C} + \mathbf{C}^e), \quad (34)$$

其中各矩阵定义如下:

$$\mathbf{H}^{\text{II},3\sim\text{III}} \text{中元素为} \quad \int_0^{\Lambda} [e_{x,m}^{\text{II},3}(x)e_{x,l}^{\text{III},\text{out}}(x)]dx, \quad (36)$$

$$H_{l,m}^{\text{II},3\sim\text{III}} = \Lambda^{-1}(2 - \delta_{l,0}) \int_0^{\Lambda} [h_{y,m}^{\text{II},3}(x)h_{y,l}^{\text{III},\text{out}}(x)]dx, \quad \mathbf{C} = (C_1 \quad C_2 \quad \dots)^{\text{T}}, \quad (37)$$

$$\mathbf{C}^{\rho} = (C_1^{\rho} \quad C_2^{\rho} \quad \dots)^{\text{T}}, \quad (38)$$

$$\mathbf{E}^{\text{II},3\sim\text{III}} \text{中元素为} \quad \boldsymbol{\varphi}_3 = \text{diag}[\exp(-j\beta_{m3}z_3)], \quad (39)$$

$$E_{l,m}^{\text{II},3\sim\text{III}} = \Lambda^{-1}(2 - \delta_{l,0}) (\eta\gamma_{s,l}/k_0n_s^{-2})^{-2} \quad \text{再定义 } \mathbf{C}^{\rho} = \boldsymbol{\rho}_c \mathbf{C}, (34) \text{式就可化为}$$

$$\boldsymbol{\rho}_c = (\mathbf{I} + \mathbf{H}^{-1\text{II},3\sim\text{III}} \mathbf{E}^{\text{II},3\sim\text{III}})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{H}^{\text{II},3\sim\text{III}-1} \mathbf{E}^{\text{II},3\sim\text{III}}), \quad (40)$$

其中 \mathbf{I} 为单位矩阵。

接下来继续匹配光栅层中的边界条件。第 1 层与第 2 层界面满足

$$\boldsymbol{\varphi}_2^{-1} \mathbf{B} - \boldsymbol{\varphi}_2^{-1} \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{H}^{\text{II},1\sim\text{II},2} (\mathbf{A} - \mathbf{A}^{\rho}), \quad (41)$$

$$\boldsymbol{\varphi}_2^{-1} \mathbf{B} + \boldsymbol{\varphi}_2 \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{E}^{\text{II},1\sim\text{II},2} (\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\rho}), \quad (42)$$

其中各矩阵定义如下： $\mathbf{H}^{\text{II},1\sim\text{II},2}$ 中各元素为

$$H_{l,m}^{\text{II},1\sim\text{II},2} = \Lambda^{-1}(2 - \delta_{l,0}) \int_0^{\Lambda} [h_{y,m}^{\text{II},1}(x)h_{y,l}^{\text{II},2}(x)]dx, \quad (43)$$

$\mathbf{E}^{\text{II},1\sim\text{II},2}$ 中各元素为

$$E_{l,m}^{\text{II},1\sim\text{II},2} = \Lambda^{-1}(2 - \delta_{l,0}) (\eta\gamma_{0,l}/k_0)^{-2} \int_0^{\Lambda} [e_{x,m}^{\text{II},1}(x)e_{x,l}^{\text{II},2}(x)]dx, \quad (44)$$

$$\mathbf{B} = (B_1 \quad B_2 \quad \dots)^{\text{T}}, \quad (45)$$

$$\mathbf{B}^{\rho} = (B_1^{\rho} \quad B_2^{\rho} \quad \dots)^{\text{T}}, \quad (46)$$

$$\boldsymbol{\varphi}_2 = \text{diag}\{\exp[-j\gamma_{0,l}(z_2 - z_3)]\}. \quad (47)$$

第 2 层与第 3 层界面满足

$$\mathbf{B} - \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{H}^{\text{II},2\sim\text{II},3} (\boldsymbol{\varphi}_3^{-1} \mathbf{C} - \boldsymbol{\varphi}_3 \mathbf{C}^{\rho}), \quad (48)$$

$$\mathbf{B} + \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{H}^{\text{II},2\sim\text{II},3} (\boldsymbol{\varphi}_3^{-1} \mathbf{C} + \boldsymbol{\varphi}_3 \mathbf{C}^{\rho}), \quad (49)$$

其中各矩阵定义如下： $\mathbf{H}^{\text{II},2\sim\text{II},3}$ 中各元素为

$$H_{l,m}^{\text{II},2\sim\text{II},3} = \Lambda^{-1}(2 - \delta_{l,0}) \int_0^{\Lambda} [h_{y,m}^{\text{II},2}(x)h_{y,l}^{\text{II},3}(x)]dx, \quad (50)$$

$\mathbf{E}^{\text{II},2\sim\text{II},3}$ 中各元素为

$$E_{l,m}^{\text{II},2\sim\text{II},3} = \Lambda^{-1}(2 - \delta_{l,0}) (\eta\gamma_{0,l}/k_0)^{-2} \int_0^{\Lambda} [e_{x,m}^{\text{II},2}(x)e_{x,l}^{\text{II},3}(x)]dx. \quad (51)$$

(33,34,40,41,42,48,49)式改用矩阵形式表示为

$$\begin{cases} \boldsymbol{\rho}_c = (\mathbf{I} + \mathbf{H}^{\text{II},3\sim\text{III}-1} \mathbf{E}^{\text{II},3\sim\text{III}})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{H}^{\text{II},3\sim\text{III}-1} \mathbf{E}^{\text{II},3\sim\text{III}}) \\ \mathbf{B} - \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{H}^{\text{II},2\sim\text{II},3} (\boldsymbol{\varphi}_3^{-1} \mathbf{C} - \boldsymbol{\varphi}_3 \mathbf{C}^{\rho}) \\ \mathbf{B} + \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{E}^{\text{II},2\sim\text{II},3} (\boldsymbol{\varphi}_3 \mathbf{C} + \boldsymbol{\varphi}_3 \mathbf{C}^{\rho}) \\ \boldsymbol{\varphi}_2^{-1} \mathbf{B} - \boldsymbol{\varphi}_2 \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{H}^{\text{II},1\sim\text{II},2} (\mathbf{A} - \mathbf{A}^{\rho}) \\ \boldsymbol{\varphi}_2^{-1} \mathbf{B} + \boldsymbol{\varphi}_2 \mathbf{B}^{\rho} = \mathbf{E}^{\text{II},1\sim\text{II},2} (\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\rho}) \\ (\mathbf{I} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{E}^{1\sim\text{II},1} (\boldsymbol{\varphi}_1^{-1} + \boldsymbol{\varphi}_1 \boldsymbol{\rho}_a) = (\mathbf{I} - \mathbf{R})^{-1} \mathbf{H}^{1\sim\text{II},1} (\boldsymbol{\varphi}_1^{-1} - \boldsymbol{\varphi}_1 \boldsymbol{\rho}_a) \\ \boldsymbol{\tau} = \mathbf{H}^{\text{II},3\sim\text{III}} (\mathbf{C} - \mathbf{C}^{\rho}) = \mathbf{E}^{\text{II},3\sim\text{III}} (\mathbf{C} + \mathbf{C}^{\rho}) \end{cases}. \quad (52)$$

(52)式中 7 个等式包含 8 个未知变量,各式自上而下依次迭代即可求出光栅区每层中波导传播模式的振幅系数矩阵 $\mathbf{A}, \mathbf{A}^{\rho}, \mathbf{B}, \mathbf{B}^{\rho}, \mathbf{C}, \mathbf{C}^{\rho}$ 以及各级衍射光的振幅系数矩阵 $\mathbf{R}, \boldsymbol{\tau}$ 。求出这些系数即可得到光栅的各级次衍射效率与整个空间中的电磁场分布。

接着,考虑层叠光栅为三层时的情形。其截面图如图 3 所示。相比较两层光栅,三层光栅多了一层光栅层、一层虚设层。为保证符号的一致性,区域 II 中第一层与第三层光栅中导波模式的振幅系数仍为 $A_m, A_m^{\rho}, C_m, C_m^{\rho}$, 两层虚设层与第二层光栅中导波模式的振幅系数,由上到下依次为 B_m, B_m^{ρ}, D_l ,

D_l^ρ, F_m, F_m^ρ , 则新加入的边界条件与(52)式中第2~5式类似, 同样可用矩阵表示, 此时在区域 II 中四个分界面 $z = -z_2 \sim -z_5$ 上的边界条件依次可表示为

$$\begin{cases} \varphi_2^{-1} \mathbf{B} - \varphi_2 \mathbf{B}^\rho = \mathbf{H}^{\text{II},1 \sim \text{II},2} (\mathbf{A} - \mathbf{A}^\rho) \\ \varphi_2^{-1} \mathbf{B} + \varphi_2 \mathbf{B}^\rho = \mathbf{E}^{\text{II},1 \sim \text{II},2} (\mathbf{A} + \mathbf{A}^\rho) \\ \mathbf{B} - \mathbf{B}^\rho = \mathbf{H}^{\text{II},2 \sim \text{II},3} (\varphi_3^{-1} \mathbf{D} - \varphi_3 \mathbf{D}^\rho) \\ \mathbf{B} + \mathbf{B}^\rho = \mathbf{E}^{\text{II},2 \sim \text{II},3} (\varphi_3^{-1} \mathbf{D} + \varphi_3 \mathbf{D}^\rho) \\ \varphi_4^{-1} \mathbf{E} - \varphi_4 \mathbf{E}^\rho = \mathbf{H}^{\text{II},3 \sim \text{II},4} (\mathbf{D} - \mathbf{D}^\rho) \\ \varphi_4^{-1} \mathbf{E} + \varphi_4 \mathbf{E}^\rho = \mathbf{E}^{\text{II},3 \sim \text{II},4} (\mathbf{D} + \mathbf{D}^\rho) \\ \mathbf{F} - \mathbf{F}^\rho = \mathbf{H}^{\text{II},4 \sim \text{II},5} (\varphi_5^{-1} \mathbf{C} - \varphi_5 \mathbf{C}^\rho) \\ \mathbf{F} + \mathbf{F}^\rho = \mathbf{E}^{\text{II},4 \sim \text{II},5} (\varphi_5^{-1} \mathbf{C} + \varphi_5 \mathbf{C}^\rho) \end{cases} \quad (53)$$

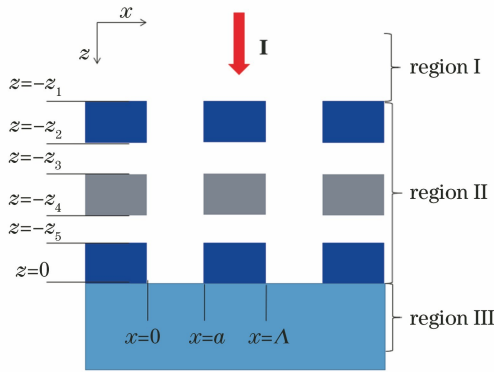


图 2 三层层叠光栅截面图

Fig. 2 Three layers stacked grating section diagram

同样通过迭代的方式可求出每层光栅导波模式中的振幅系数、光栅各级次衍射波的振幅系数。在求解更多层层叠光栅时可按照此法添加每层分界面的边界条件, 并依次迭代求解。由 TE 波、TM 波对偶性, 可得出 TE 波入射时的分析方法, 并可将来这

种模式分析方法推广至倾斜入射条件下^[19]。

3 对比计算与分析

基于实例分析模式匹配分析法和严格耦合波法对层叠光栅衍射效率以及相应电磁场分布的计算结果。首先分析双层高折射率差光栅(HCGs)作为宽带反射镜的实例, 光栅截面如图 3(a)所示, 光栅第一层介质为 Si($n_{\text{Si}} = 3.48$), 厚度 $h_1 = 440$ nm, 第二层介质与基底为 SiO_2 ($n_{\text{SiO}_2} = 1.45$), 第二层总厚度 $h_2 = 370$ nm, 其余空间为空气($n_{\text{air}} = 1$), 其他几何参数为周期 $\Lambda = 780$ nm、占空比 $s/\Lambda = 0.72$ 。TM 光正入射时, 衍射效率分别由模式匹配分析法与严格耦合波法计算得出。其中使用严格耦合波法计算时, 空间谐波数与考虑的衍射级次取 101, 计算结果比较精确。由模式匹配分析法计算时, 分别取在光栅内部存在 2 种、3 种、4 种以及 10 种模式时的结果。两种计算方法得出的零级衍射光(反射光)光谱及其差值如图 3(b)所示, 其中 R 代表反射率(衍射效率)。由图 3(b)下图可以看出模式匹配分析法收敛速度极快, 当考虑 10 种导波模式时计算衍射效率误差在 $10^{-4} \sim 10^{-5}$ 量级。这就意味着使用模式匹配分析法计算时, 所需要处理的矩阵阶数小, 而使用严格耦合波法计算时, 考虑的空间谐波数与衍射级次往往需要几十甚至上百, 需要处理阶数庞大的矩阵而花费较多的计算时间。在此处忽略模式匹配分析法与严格耦合波法分析在计算时矩阵的稀疏性以及可能出现的奇异矩阵。

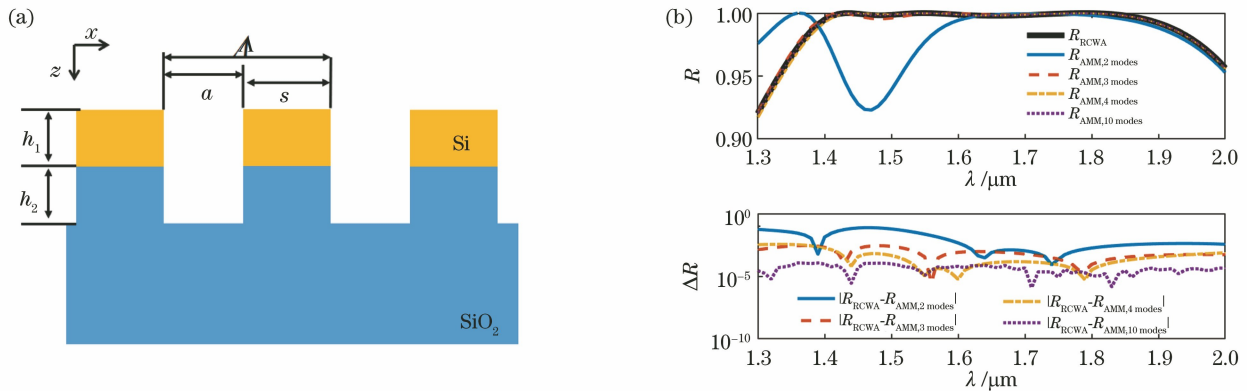


图 3 双层层叠光栅截面示意图与衍射效率计算误差。(a) 截面示意图($\Lambda = 780$ nm, $s/\Lambda = 0.72$, $z_1 = 440$ nm, $z_2 = 370$ nm); (b) 严格耦合波法与模式匹配分析法计算得到的衍射效率的对比

Fig. 3 Cross section diagram of double layers grating and calculation errors of diffraction efficiency. (a) Section diagram ($\Lambda = 780$ nm, $s/\Lambda = 0.72$, $z_1 = 440$ nm, $z_2 = 370$ nm); (b) comparison of diffraction efficiency calculated by rigorous coupled wave analysis and mode analytical method

分别对两种算法运算时间进行测试。对于此例双层光栅计算波长范围为 1300~2000 nm,且每 10 nm取一点,其中模式匹配分析法因运行时间较短重复运行 100 遍,取其累计时间,严格耦合波法运行 1 遍。计算时间如表 1 所示。

接下来对其相应的电磁场分布进行分析。取 TM 入射光波长为 1550 nm,由模式匹配分析法与严格耦合波法计算得出的归一化磁场强度振幅 $|H_y|$ 分布分别如图 4(a)、图 4(b)所示。模式匹配分析法计算时考虑 10 种模式存在,严格耦合波法计算时的截

断误差与计算衍射效率时的截断误差相同。其中在光栅区电磁场由若干种波导模式叠加而成,现取其前 4 种进行分析,如图 5 所示。由前面的波数分析可知,此时在高折射率材料 Si 中仅前两种波导模式的纵向(z 方向)波数为实数,即前两种模式能够传播,如图 5(a)、图 5(b)所示,其余模式均以隐失波的形式存在,所贡献的场强较弱,如图 5(c)、图 5(d)所示。而在低折射率材料 SiO_2 中仅有一种纵向的传播模式存在,但在此例下模式振幅系数较小,可认为在此条件下,Si 光栅对整体结构的反射起主要的作用。

表 1 计算双层层叠光栅时各算法的运行时间

Table 1 Running time of different algorithms for the double layers grating calculation

Diffraction orders	2	3	4	10	101
Running time of AMM(100 times) /s	4.13	4.97	5.52	17.21	—
Running time of RCWA(once) /s	—	—	—	—	11.87

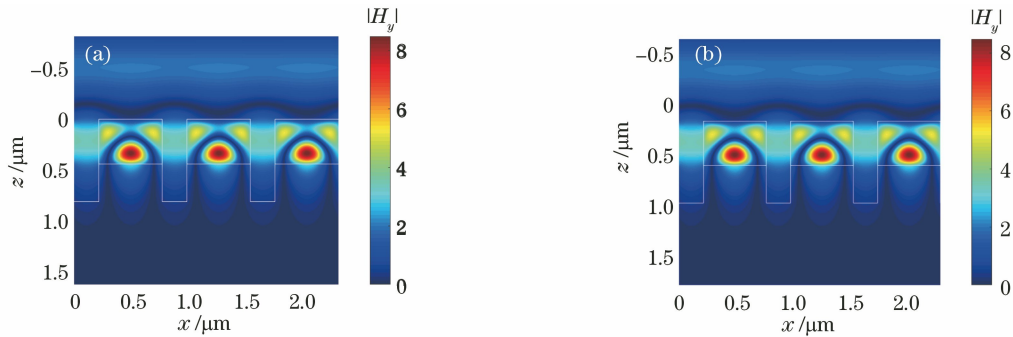


图 4 双层层叠光栅中磁场振幅 $|H_y|$ 的对比结果。(a)严格耦合波法;(b)模式匹配分析法

Fig. 4 Comparison of the amplitude distribution of magnetic field calculated by two methods in the double layers grating.

(a) Rigorous coupled wave analysis; (b) mode analytical method

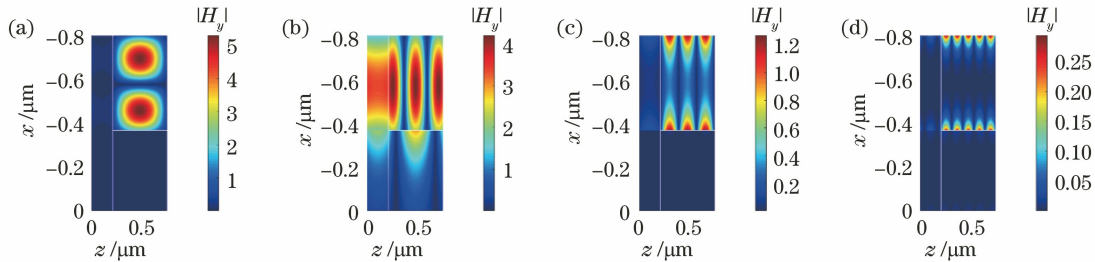


图 5 双层层叠光栅中前四种模式磁场振幅 $|H_y|$ 分布。(a)模式 1;(b)模式 2;(c)模式 3;(d)模式 4

Fig. 5 Amplitude distribution of magnetic field of the first four modes in the double layers grating.

(a) Mode 1; (d)mode 2; (c)mode 3; (d) mode 4

下面再以低折射率差三层层叠光栅反射镜为例进行研究,光栅截面如图 6(a)所示,第一、第三层材料为 HfO_2 ($n_{\text{HfO}_2} = 1.9$),第二层光栅材料为 SiO_2 ($n_{\text{SiO}_2} = 1.46$),基底为熔融石英,折射率取 1.45,其余空间为空气,折射率取 1。几何参数如下:周期 $\Lambda = 690$ nm、占空比 $s/\Lambda = 0.76$ 、 $z_1 = 405$ nm、 $z_2 = 662$ nm、 $z_3 = 284$ nm。TM 光正入射时,衍射效率

分别由模式匹配分析法与严格耦合波法计算得出。使用严格耦合波法计算时,截断误差与计算双层光栅衍射效率时的截断误差相同,可认为结果较为精确。当使用模式匹配分析法时,所考虑的模式为 3~4 种时,误差在 $10^{-3} \sim 10^{-4}$ 量级,如图 6(b)所示。即在求解过程中所处理的矩阵都是 3 阶或 4 阶矩阵,因而计算速度较快。

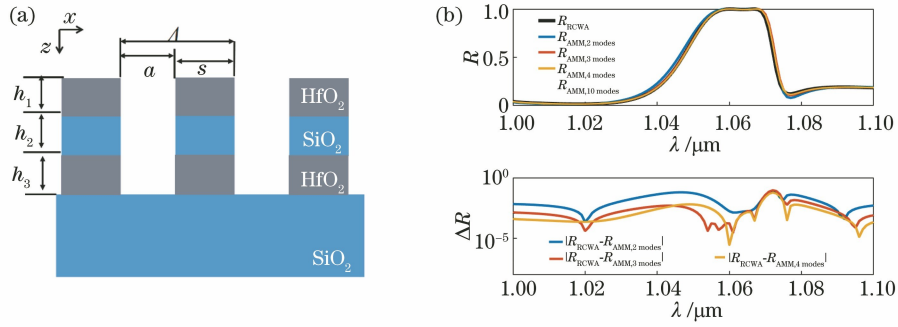


图 6 三层层叠光栅截面示意图与衍射效率计算误差。(a)截面示意图($\Lambda=690\text{ nm}$, $s/\Lambda=0.76$, $z_1=405\text{ nm}$, $z_2=662\text{ nm}$, $z_3=284\text{ nm}$);(b)严格耦合波法与模式匹配分析法计算得到的衍射效率的对比

Fig. 6 Sectional diagram of three-layer stacked grating and calculation error of diffraction efficiency. (a) Section diagram ($\Lambda=690\text{ nm}$, $s/\Lambda=0.76$, $z_1=405\text{ nm}$, $z_2=662\text{ nm}$, $z_3=284\text{ nm}$); (b) comparison of diffraction efficiency calculated by rigorous coupled wave analysis and mode analytical method

分别对两种算法运算时间进行测试。对于此例三层光栅计算波长范围为 $1000\sim 1100\text{ nm}$,且每 1 nm 取一点,其中模式匹配分析法因运行时间较短重复运行 100 遍,取其累计时间,严格耦合波法运行 1 遍。计算时间如表 2 所示。

接下来分析电磁场分布与高反射之间的关系,由(52)式可得,0 级透射系数与光栅出射平面($z=0$)上几种导波模式的场强分布有关。当入射光波长

为 1064 nm 时, HfO_2 中仅存在两种可传播模式(β 为实数),即只有前两种导波模式的场强对最终电场分布起主要贡献,如图 7(a)所示。这两种模式在光栅出射平面($z=0$)一个周期($0<x<\Lambda$)内,有效值相等,相位差 $\Delta\Phi$ 如图 7(b)所示。两种主要的传播模式在光栅出射平面($z=0$)内向入射方向与出射方向两侧辐射的电磁波能量相等,这两种模式相互抵消,使得光栅不产生透射光,形成强烈反射。

表 2 计算三层层叠光栅时各算法的运行时间

Table 2 Running time of different algorithms for three-layers stacked grating calculation

Diffraction orders	2	3	4	101
Running time of AMM(100 times) /s	7.91	9.88	19.27	—
Running time of RCWA(once) /s	—	—	—	22.62

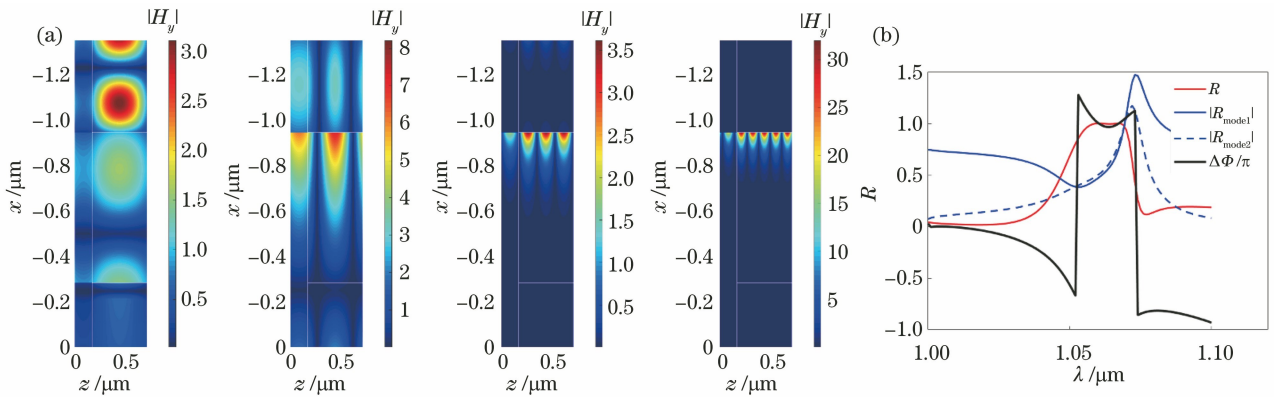


图 7 三层层叠光栅计算结果。(a)光栅中前 4 种模式磁场振幅 $|H_y|$ 分布;(b)两种导波模式在出射平面($z=0$)完美相消导致光栅高反射

Fig. 7 Calculation results of three-layer stacked grating. (a) Amplitude distribution of magnetic field of the first four modes in the grating; (b) perfect cancellation of two modes at the output plane($z=0$) leading to high reflectivity

4 结 论

通过以上计算分析,可以对比模式匹配分析法与严格耦合波法在计算层叠光栅时的收敛性、优缺

点以及各自适用范围。模式匹配分析法收敛性强、计算时间短,所得结果物理意义明确,但是仅能计算槽形为矩形的光栅。而严格耦合波法为了求解精度,需要处理阶数庞大的矩阵,因而计算时间稍长一

些,但是严格耦合波法能够计算任意表面形貌的光栅,其应用范围更广一些。

本文基于单层亚波长光栅波导理论的模式匹配分析法,将其应用范围推广至亚波长层叠光栅中。取具体实例计算,分析了双层、三层亚波长光栅内电磁波传播模式的分布,并与用严格耦合波法计算结果进行对比,计算表明模式匹配分析法能够详细阐述电磁波在光栅内部的传播行为,解释亚波长层叠光栅特殊的衍射效应。本文提出的模式匹配分析法在计算层叠光栅时,可大幅减少计算成本,因而可结合优化方法,设计新式的亚波长层叠光栅、超表面以及新型光子器件。

参 考 文 献

- [1] Mateus C F R, Huang M C Y, Deng Y, et al. Ultrabroadband mirror using low-index cladded subwavelength grating [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2004, 16(2): 518-520.
- [2] Mateus C F R, Huang M C Y, Chen L, et al. Broadband mirror (1.12-1.62 μm) using a subwavelength grating [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2004, 16(7): 1676-1678.
- [3] Lee K J, LaComb R, Britton B, et al. Silicon-layer guided-mode resonance polarizer with 40-nm bandwidth[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2008, 20(22): 1857-1859.
- [4] Lee K J, Curzan J, Shokoooh-Saremi M, et al. Resonant wideband polarizer with single silicon layer [J]. Applied Physics Letters, 2011, 98 (21): 211112.
- [5] Lee K J, Giese J, Ajayi L, et al. Resonant grating polarizers made with silicon nitride, titanium dioxide, and silicon: design, fabrication, and characterization [J]. Optics Express, 2014, 22(8): 9271-9281.
- [6] Yoon J W, Lee K J, Magnusson R. Ultra-sparse dielectric nanowire grids as wideband reflectors and polarizers [J]. Optics Express, 2015, 23 (22): 28849-28856.
- [7] Wang J J, Glesk I, Chen L R. Subwavelength grating filtering devices[J]. Optics Express, 2014, 22(13): 15335-15345.
- [8] Zhou Y, Karagodsky V, Pesala B, et al. A novel ultra-low loss hollow-core waveguide using subwavelength high-contrast gratings [J]. Optics Express, 2009, 17(3): 1508-1517.
- [9] Mutlu M, Akosman A E, Kurt G, et al. Broadband quarter-wave plates at near-infrared using high-contrast gratings [J]. Proceedings of SPIE, 2013, 8633: 86330O.
- [10] Chen M, Fan F, Xu S T, et al. Artificial high birefringence in all-dielectric gradient grating for broadband terahertz waves [J]. Scientific Reports, 2016, 6: 38562.
- [11] Kroker S, Brückner F, Kley E B, et al. Enhanced angular tolerance of resonant waveguide grating reflectors [J]. Optics Letters, 2011, 36(4): 537-539.
- [12] Kroker S, Käsebier T, Kley E B, et al. Coupled grating reflectors with highly angular tolerant reflectance[J]. Optics Letters, 2013, 38(17): 3336-3339.
- [13] Yamada K, Lee K J, Ko Y H, et al. Flat-top narrowband filters enabled by guided-mode resonance in two-level waveguides[J]. Optics Letters, 2017, 42 (20): 4127-4130.
- [14] Yao Y H, Wu W. All-dielectric heterogeneous metasurface as an efficient ultra-broadband reflector [J]. Advanced Optical Materials, 2017, 5 (14): 1700090.
- [15] Zhang R, Wang Y F, Zhang Y J, et al. Broadband and polarization-insensitive subwavelength grating reflector for the near-infrared region [J]. Chinese Optics Letters, 2014, 12(2): 020502.
- [16] Wang S S, Magnusson R. Theory and applications of guided-mode resonance filters [J]. Applied Optics, 1993, 32(14): 2606-2613.
- [17] Karagodsky V, Sedgwick F G, Chang-Hasnain C J. Theoretical analysis of subwavelength high contrast grating reflectors [J]. Optics Express, 2010, 18 (16): 16973-16988.
- [18] Karagodsky V, Chang-Hasnain C J. Physics of near-wavelength high contrast gratings [J]. Optics Express, 2012, 20(10): 10888-10895.
- [19] Chang-Hasnain C J, Yang W J. High-contrast gratings for integrated optoelectronics[J]. Advances in Optics and Photonics, 2012, 4(3): 379-440.
- [20] Qiao P F, Yang W J, Chang-Hasnain C J. Recent advances in high-contrast metastructures, metasurfaces, and photonic crystals[J]. Advances in Optics and Photonics, 2018, 10(1): 180-245.
- [21] Wu J, Zhou C H, Cao H C, et al. Simplified mode analysis of guided mode resonance gratings with asymmetric coatings [J]. Chinese Optics Letters, 2013, 11(6): 060501.
- [22] Moharam M G, Gaylord T K. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction [J]. Journal of the Optical Society of America, 1981, 71 (7): 811-818.
- [23] Moharam M G, Gaylord T K, Pommet D A, et al. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach [J]. Journal of the Optical Society of America A, 1995, 12(5): 1077-1086.