doi:10.3788/gzxb20164507.0705001

正弦光栅标量衍射及等效介质理论有效性分析

王卫敏,阮东升,井绪峰

(中国计量学院光学与电子科技学院,杭州 310018)

摘 要:利用严格傅里叶模式理论研究了不同基底折射率、入射角度、归一化周期、归一化沟槽深度对正 弦型光栅微结构衍射效率的影响,并分析了该光栅的衍射特性.基于标量衍射理论和等效介质理论,分 别计算了光栅周期远远大于和远远小于入射波长时,正弦型光栅的衍射效率,并与傅里叶模式理论的计 算结果进行比较,分析标量衍射理论和等效介质理论的有效性.结果表明:在垂直入射条件下,当光栅基 质材料折射率为1.5时,标量衍射理论在光栅归一化周期大于5时,能够准确计算光栅衍射效率,误差 小于3%;当基底折射率增大到3.42时,只有在光栅归一化周期大于10时,标量衍射理论才有效,误差 小于5%;当正弦型光栅透射光中只有0级衍射光传播时,等效介质理论能够准确计算其透射率;随着 入射角度的增大,标量衍射理论和等效介质理论的有效性都不同程度地降低.

Analysis of Accuracy of Scalar Diffraction Theory and Effective Medium Theory for Sinusoidal Grating

WANG Wei-min¹, RUAN Dong-sheng¹, JING Xu-feng¹

(College of Optical and Electronic Technology, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China)

Abstract: By using the rigorous Fourier modal theory, the influence of the substrate refractive index, the incident angle, the normalized period and the normalized depth with different values on the diffraction efficiency of a sinusoidal grating microstructure was investigated. Also, the diffraction properties of the grating were analyzed. Based on the scalar diffraction theory and the effective medium theory, the diffraction efficiencies of the sinusoidal grating were calcualted at which the period is far greater than the incident wavelength and far smaller than the wavelength respectively. Using the different parameters of grating structure, comparing the results calculated by these two theories with that estimated by Fourier modal theory, the accuracy of the scalar diffraction theory and the effective medium theory was analyzed. The results show that when the refractive index of grating is about 1.5, the normalized depth is less than or equal to 1 and normalized period is greater than or equal to 5, the scalar diffraction theory can be used to calculate the diffraction efficiency of sinusoidal grating, the error is less than 3%; If the refractive index is increased to 3.42, only when the normalized period is greater than or equal to 10, the scalar diffraction theory can be used to estimate the diffraction efficiency and the error is less than 5%. Only zeroth transmittance light is propagating, effective medium theory is valid to evaluate the diffraction efficiency of sinusoidal grating. It is noted that the error of two simple methods is minimum at a normal incidence. Furthermore, the accuracy of scalar diffraction theory and effective medium theory decreases as the incident angle increasing.

基金项目:国家自然科学基金(Nos. 61405182,61308090,61308089,61440065)、2013 留学人员择优资助人才项目和 2015 年学生开放实验 项目资助

第一作者:王卫敏(1993-),男,硕士研究生,主要研究方向为亚波长光栅结构技术. Email:764160462@qq.com

导师(通讯作者):井绪峰(1984-),男,副教授,博士,主要研究方向为亚波长光学器件的设计及制备. Email:jingxufeng@cjlu.edu.cn 收稿日期:2015-11-30;录用日期:2016-03-01

Key words: Diffraction element; Subwavelength component; Fourier modal method; Sinusoidal grating; Effective medium theory; Scalar diffraction theory

OCIS Codes: 050.0050; 050.1950; 050.1960; 050.2065; 050.660

0 引言

正弦型光栅具有色散、分束、相位匹配等特性,可 用于光谱仪、颜色测定仪等[1-2].近年来,正弦型光栅微 结构的应用范围从光谱学领域扩展到计量科学、光通 信等领域[3-6].

衍射效率是正弦型光栅应用的一个重要参量.目 前,正弦型光栅衍射效率的计算主要是采用严格矢量 衍射理论[7-11],但计算过程复杂,计算程序和数学公式 繁琐[8-11].一般认为,当光栅的特征尺寸远远大于入射 波长时,标量衍射理论可以计算光栅的衍射效率[12-14]. 当衍射光栅的周期尺寸和入射波长比较接近或者更小 时,等效介质理论可以近似地计算光栅的衍射效 率[15-16]. 计算衍射效率有效性对衍射光学元件的设计 和制备至关重要的. 文献 [12-16] 中仅定性地给出了利 用这两种简单近似理论计算光栅衍射效率的大致范 围,并没有对正弦型光栅衍射效率的有效性进行定量 分析.为了避开严格矢量衍射理论的繁杂性,本文采用 标量衍射理论和等效介质理论近似地计算衍射光栅的 衍射效率,定量分析这两种简单方法的有效性,从而确 定标量衍射理论和等效介质理论用于计算正弦型光栅 衍射效率的适用范围.

傅里叶模式理论 FMM 计算结果 1

图1是正弦型光栅结构, A表示光栅周期, d表 示光栅沟槽深度,n。表示基质折射率,n。表示空气 折射率,λ表示入射光波长. 假定 n₀=1,入射平面波波 长为 632.8 nm, 且光栅结构折射率与基质折射率相 同.此外,计算中不考虑光栅的吸收损耗和介质的色散 影响.





对于正弦型表面光栅结构,用傅里叶模式方法 (Fourier Modal Mthod, FMM)^[7]在竖直方向将结构近 似分成多层薄状矩形光栅,用 Maxwell 方程组求出每 一层光栅的电磁场,然后结合边界条件,用反射透射系 数矩阵算法(Reflection Transmission Coefficient Matrix)计算振幅系数,求得光栅的衍射效率,一般情 况下,FMM的计算结果收敛性依赖于空间谐波级次和 光栅分层数,已经证明 TE(Transverse Electric)偏振入 射波收敛性优于 TM(Transverse Magnetic)偏振入射 波情况,TE(TM)偏振入射波表示电场强度矢量方向 垂直(平行)于入射面.

图 2 表示在 TE 偏振入射条件下正弦型光栅衍射 效率随光栅归一化周期,入射角 θ ,基质折射率 n_{g} 的变 化情况.图 2(a)、(b)、(c)分别表示在基底折射率为1.5 的条件下,正弦型光栅0级、-1级和+1级透射光的 衍射效率随归一化结构周期的变化特性,并且假定归 一化沟槽深度为 $0.5(d/\lambda=0.5)$. 从图中可以看出,无论 是0级,还是±1级,随着归一化周期的变大或变小,光 栅的衍射效率都趋于稳定.对于归一化周期中间区域, 衍射效率波动较大.图 2(d)、(e)、(f)表示基底折射率增 大到 3.42,光栅衍射效率随归一化周期的变化关系.

4

6

 $\theta = 0^{\circ}$

 $\theta = 30^{\circ}$

 $\theta = 60^{\circ}$

8

10





图 2 FMM 计算的衍射效率变化特性 Fig. 2 Diffraction efficiency calculated by FMM

图 3 表示在不同的入射角度和不同的基底折射率 条件下 TE 偏振入射光栅衍射效率随归一化沟槽深度 的变化特性. 当基底折射率为 1.5,沟槽深度接近于入 射波长时,0 级次的衍射光衍射效率接近于 0,而±1 级的衍射光衍射效率却接近于0.35.当折射率为3.42, 沟槽深度约为入射波长的四分之一时,才出现上述情况.换句话说,当折射率变大时,若想要使得0级衍射 光衍射效率为0,则需要减小光栅沟槽深度.





图 3 衍射效率随归一化沟槽深度的变化特性 Fig. 3 Diffraction efficiency on the depth

2 标量衍射理论 SDT

当光栅周期远远大于入射光波长时,即光栅归一 化周期远远大于1时,可以利用标量衍射理论近似计 算光栅的衍射效率.正弦型位相光栅的复振幅透射率 为

$$t(x) = \sum_{m} \delta(x - m\Lambda) * \left\{ \exp\left[j \frac{\beta}{2} \sin\left(2\pi f_0 x\right)\right] \cdot \operatorname{rect}\left(\frac{x}{\Lambda}\right) \right\}$$
(1)

式中, β 表示位相延迟的峰谷幅度, δ 表示狄拉克函数, f_0 为光栅频率,即 $f_0 = 1/\Lambda$,*表示卷积。根据基尔霍 夫标量衍射理论,光栅衍射效率 η_m 可以表示为^[19]

$$\eta_m = \left| \frac{1}{\Lambda} \int_0^{\Lambda} t(x) \exp\left(-\frac{2\pi i m x}{\Lambda}\right) dx \right|^2$$
(2)

式中,m表示衍射级次。将式(1)带入式(2),积分可得 正弦型位相光栅的衍射效率^[19]为

$$\eta_m = \mathbf{J}_m^z \left(\beta/2\right) \tag{3}$$

式中, $\beta=2\pi(n_{e}-n_{o})d/(\cos\theta_{e}\lambda),n_{o}$ 表示入射介质的折 射率, n_{e} 表示光栅折射率,J表示贝塞尔函数。为了准 确计算光栅衍射效率,考虑光栅表面的菲涅耳反射效 应,正弦型位相光栅衍射效率为

$$\eta_{m} = \left[\left(n_{g} \cos \theta_{g} / n_{0} \cos \theta_{0} \right) \tau^{2} \left(\theta_{0} \right) \mathbf{J}_{m} \left(\frac{\beta}{2} \right) \right]^{2}$$
(4)

式中

$$\left\{ \begin{array}{l} (n_{g}\cos\theta_{g}/n_{0}\cos\theta_{0})\tau^{2}(\theta_{0}) = \\ \left\{ \begin{array}{l} \frac{4n_{0}n_{g}\cos\theta_{0}\cos\theta_{g}}{(n_{0}\cos\theta_{g}+n_{g}\cos\theta_{0})^{2}} & (\text{TM } \texttt{m} \texttt{K}) \\ \frac{4n_{0}n_{g}\cos\theta_{0}\cos\theta_{g}}{(n_{g}\cos\theta_{0}+n_{0}\cos\theta_{g})^{2}} & (\text{TE } \texttt{m} \texttt{K}) \end{array} \right.$$

式中, $\tau(\theta_0)$ 为菲涅耳透射系数。因为入射光和透射光 在不同介质中,所以还考虑了菲涅耳透射因子 $n_{\rm g}\cos\theta_{\rm g}/n_0\cos\theta_0$.

首先,分析标量衍射理论 SDT(Scalar Diffraction Theory)的有效性范围.图4系统比较了傅里叶模式方法和标量衍射理论在不同参量下的0级衍射效率.图4 (a)、(c)是 TE 偏振入射的情况,图4(b)、(d)是 TM 偏振入射的情况.在图4(a)、(b)中,当入射角度为60°时, SDT 和 FMM 计算结果差距很大,SDT 基本已经不适用.当折射率增大到3.42,SDT 和 FMM 之间的差距 会变小,原因在于当折射率较大时衍射效率非常低.





为了定量地比较标量衍射理论和傅里叶模式方法 的计算结果,定义误差为

 $\operatorname{Error} = \log(|\eta_m(\mathrm{FMM}) - \eta_m(\mathrm{SDT})|)$ (6)

图 5 定量地展示了 FMM 与 SDT 之间的误差,随着入射角度的增加误差显著增大。图 5(a)、(b)表明当基质折射率为 1.5,入射角小于 30°时,SDT 与 FMM

之间的误差小于 3%,即在 $d/\lambda=0.5$, $n_{s}=1.5$, $0^{\circ} \leq 0 \leq 30^{\circ}$ 的条件下,当 $\Lambda/\lambda \geq 5$ 时,标量衍射理论可以准确地 计算正弦光栅的衍射效率,而当 $\theta \geq 60^{\circ}$ 时,误差都超过 了 10%。图 5(c)、(d)表明在入射角增大到 60°时,误 差小于 5%,标量衍射理论在大角度条件下依然适用.





图 5 FMM 与 SDT 之间的误差变化特性 Fig. 5 The error of diffraction efficiency

图 6 表示傅里叶模式理论和标量衍射理论计算的 0 级衍射效率随着光栅微结构的沟槽深度变化特性, 光栅周期为入射波长的 5 倍,光栅折射率分别取 1.5 和 3.42. 从图 6 可以看出,无论 TE 偏振光还是 TM 偏振光入射,当沟槽深度较大时,两种方法计算的结果差别较大,标量衍射理论不能准确地计算光栅衍射效率.





基于 FMM 和 SDT 计算的衍射效率误差,定义两种理论的线性坐标误差为

 $\operatorname{Error} = \eta_m(\mathrm{FMM}) - \eta_m(\mathrm{SDT}) \tag{7}$

图 7 表示随着沟槽深度的变化两种理论的误差分析。当 $\Lambda/\lambda=5, 0 < d/\lambda \le 1, \theta=0$ 即垂直入射时,不管 折射率是 1.5 还是 3.42,标量衍射理论与傅里叶模式 方法的误差都小于 1%,说明在这种情况下标量衍射 理论可以用来计算光栅的衍射效率。而当折射率为 1.5时,在 $\theta \ge 30^{\circ}$ 的条件下,标量衍射理论的误差非常 大,最大误差已经超过 10%。此时,标量衍射理论只 适用于某些特定的光栅高度。从图 7(c)、(d)中,发现 随着折射率的变大, $\theta = 30^{\circ}$ 时,误差都在 10%以内,但



图 7 FMM 与 SDT 之间的误差变化特性 Fig. 7 Diffraction error between FMM and SDT

3 等效介质理论 EMT

一般认为,当光栅周期远远小于入射波长时, EMT(Effective Medium Theory)可以用来计算光栅的 衍射效率.然而,对于具体的入射条件和光栅参量,等 效介质理论的有效性范围是有所变化的,文献[15-16] 没有给出具体的定量分析.本文将正弦型光栅沿竖直 方向近似成薄层状多层结构,如图 8.





$$f_q = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin\left(\frac{2q}{N} - 1\right) \tag{8}$$

根据等效介质理论,对于 TE 偏振波,0 级和 2 级 等效折射率分别为

$$n_{\rm TE}^{(0)}(q) = \left[(1 - f_q) n_0^2 + f_q n_{\rm g}^2 \right]^{1/2}$$
(9)

$$n_{\rm TE}^{(2)}(q) = \left[(n_{\rm TE}^{(0)}(q))^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\Lambda}{\lambda}\right)^2 \cdot \pi^2 f_q^2 (1 - f_q)^2 (n_{\rm g}^2 - n_0^2)^2 \right]^{1/2}$$
(10)

对于 TM 偏振波,0 级和 2 级等效折射率分别 为^[20-21]

$$n_{\rm TM}^{(0)}(q) = \left[\frac{1 - f_q}{n_0^2} + \frac{f_q}{n_g^2}\right]^{-1/2} \tag{11}$$

$$n_{\rm TM}^{(2)}(q) = \left[\left(n_{\rm TM}^{(0)}(q) \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\Lambda}{\lambda} \right)^2 \pi^2 f_q^2 (1 - f_q)^2 \right]^2 \left(\frac{1}{n_{\rm TM}^2} - \frac{1}{n_{\rm TM}^2} \right)^2 \left(n_{\rm TM}^{(0)}(q) \right)^6 \left(n_{\rm TE}^{(0)}(q) \right)^2 \right]^{1/2}$$
(12)

把多层等效的介质层看作是多层光学薄膜,根据 薄膜光学理论^[22],N层等效的光学薄膜特征矩阵为

$$\begin{bmatrix} B\\ C \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{q=1}^{N} \begin{bmatrix} \cos \delta_{q} & (\sin \delta_{q})/\eta_{q} \\ i\eta_{q} \sin \delta_{q} & \cos \delta_{q} \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1\\ \eta_{g} \end{bmatrix}$$
(13)

式中, δ_q 表示第 q 层的位相, $\delta_q = 2\pi dn(q) \cos \theta_q / \lambda, n(q)$ 表示第 q 层的等效折射率, η_q 表示第 q 层的光学导纳,

 $\eta_q = \eta_0 n_{\text{TE}}(q) \cos \theta_q, \eta_{\epsilon}$ 表示基质的光学导纳, η_0 为空气 中光学导纳, $\eta_0 = (\epsilon_0 / \mu_0)^{1/2} = 2.6544 \times 10^{-3} \text{ S}, \theta_q$ 为第 q 层的出射角。根据斯涅耳定律 $n_0 \sin \theta_0 = n_q \sin \theta_q$ 求 得 θ_q .定义 K = C/B,则多层等效的正弦型光栅结构的 反射率为

$$R = \left(\frac{\eta_0 n_{\rm g} - K}{\eta_0 n_{\rm g} + K}\right) \left(\frac{\eta_0 n_{\rm g} - K}{\eta_0 n_{\rm g} + K}\right)^* \tag{14}$$

若不考虑介质的吸收,则透射率为 T=1-R.

为了定量地分析等效介质理论应用的有效性范围,比较了FMM和EMT计算的透射率结果.图9表



图 9 FMM 和 EMT 衍射效率变化特性

Fig. 9The diffraction efficiencies calculated by FMM and EMT as a function of the normalized period图 10 为不同的人射条件和不同的基底折射率条件下,0级、2级等效介质理论和 FMM 计算的 0 级透

示在 TE 偏振光入射条件下,随着归一化周期的变化, 0级和 2级等效介质理论计算的 0级透射率与 FMM 计算结果的比较.基于等效介质理论,利用 EMT 只能 计算等效光栅的 0级衍射效率即 0级透射率.图 9(a)、 (b)、(c)显示在基质折射率为 1.5,入射角度小于 30°的 条件下,EMT 和 FMM 的计算结果误差在 1%范围内, 2级等效介质理论与 FMM 计算结果的误差小于 0级 等效介质理论与 FMM 之间的误差;当 $\theta = 60°$ 时, EMT 已经完全不适用.图 9(d)、(e)、(f)表示基质折射 率为 3,42. 射率随着沟槽深度变化.图 10(a)、(b)表明在 TE 波垂 直入射,时,在计算的沟槽深度范围内,不管折射率是 1.5 还是 3.42,FMM 和 EMT 计算结果符合较好,此 时可以利用 EMT 准确地计算光栅的衍射效率.当入 射角增大到 30°,两种理论的计算结果差别较大,但是 误差都是 2%以内.而当入射角度增大到 60°,EMT 已 经完全不能计算光栅的衍射效率.通过计算,发现 TM 波的 EMT 有效性情况与 TE 波的相似.



图 10 FMM 和 EMT 衍射效率比较 Fig. 10 Comparison of diffraction efficiency

4 结论

本文定量地讨论和分析了等效介质理论和标量衍 射理论的有效性范围.标量衍射理论只能用来计算正 弦型光栅的归一化周期大于等于10的衍射效率.当正 弦型光栅只有0级衍射光时,等效介质理论就可以在 1%的误差范围内,计算其透射率.该结论对光学元件

设计具有重要的指导意义.

参考文献

- [1] ALEXEI E, ALEXANDRE F. Investigation of the properties of Bragg-Fresnel grating[J]. *Proceedings Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers*, 2004, **5539**: 148-159.
- [2] 马介渊. 衍射光栅的光刻工艺与研究[D]. 西安: 西安理工大 学,2008.
- [3] KITAGAWA H, FUJITA M, SUTO T, et al. Green GaInN photonic-crystal light-emitting diodes with small surface

recombination effect[J]. Applied Physics Letters, 2011, 98: 181104.

- [4] LIU Xuan, HUANG Hai-tao, ZHU He-yuan, et al. Widely tunable, narrow linewidth Tm : YAG ceramic laser with a volume Bragg grating[J]. Chinese Optics Letters, 2015, 13 (3): 061404.
- [5] FUJI T, GAO Y, SHARMA R, et al. Increase in the extraction efficiency of GaN-based light-emitting diodes via surface roughening [J]. Applied Physics Letters, 2004, 84 (6): 855-857.
- [6] CHEN Yun-lin, FAN Tian-wei, TONG Man. Diffractive selfimaging based on selective etching of a ferroelectric domain inversion grating[J]. Chinese Optics Letters, 2015, 13(2): 020502.
- [7] LI Li-feng. Multilayer modal method for diffraction gratings of arbitrary profile, depth, and permittivity[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1993, 10(12): 2581-2591.
- [8] LI Li-feng. New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings [J]. Journal of the Optical Society of America A, 1997, 14(10): 2758-2767.
- [9] MOHARAM M, GAYLORD T. Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings [J]. Journal of the Optical Society of America A, 1982, 72: 1385-1392.
- [10] TING C, CHEN C, CHOU C. Subwavelength structures for broadband antireflection application [J]. Optics Communications, 2009, 282(3): 434-438.
- [11] CHANDEZON J, DUPUIS M. Multicoated gratings: a differential formalism applicable in the entire optical region
 [J]. Journal of the Optical Society of America A, 1982, 72 (7): 839-846.
- [12] HOSHINO T, BANERJEE S, ITOH M, et al. Diffraction pattern of triangular grating in the resonance domain [J]. Journal of the Optical Society of America A, 2009, 26(3): 715-722.
- [13] LEE T, LIN C, MA S, et al. Analysis of position dependent

light extraction of GaN based LEDs[J]. Optics Express, 2005, 13(11): 4175-4179.

- [14] POMMET D, MOHARAM M, GRANN E. Limits of scalar diffraction theory for diffractive phase elements[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1994, 11(6): 1827-1834.
- [15] RAGUIN D, MORRIS G. Analysis of antireflectionstructured surfaces with continuous one-dimensional surface profiles[J]. Applied Optics, 1993, 32(14): 2582-2598.
- [16] RAGUIN D, MORRIS G. Antireflection structured surfaces for the infrared spectral region[J]. Applied Optics, 1993, 32 (7): 1154-1167.
- [17] MA Jian-yong, LIU Shi-jie, JIN Yun-xia, et al. Novel method for design of surface relief guided-mode resonant gratings at normal incidence [J]. Optics Communications, 2008, 281(12): 3295-3300.
- [18] 唐雄贵,基于严格模式理论的光栅衍射特性的研究[D],成 都:四川大学,2002.
- [19] COWAN J. Aztec surface-relief volume diffractive structure
 [J]. Journal of the Optical Society of America A, 1990, 7
 (8): 1529-1544.
- [20] BRUNDRETT D, GLYTSIS E, GAYLORD T. Homogeneous layer models for high-spatial-frequency dielectric surface-relief gratings: conical diffraction and antireflection designs[J]. Applied Optics, 1994, 33 (13): 2695-2706.
- [21] LI Xiu-shan, NING Yong-qiang, ZHANG Xing, et al. Influence of grating parameterson reflectivity of Si/SiO₂ high contrast gratings [J]. Chinese Journal of Luminescence, 2015, 36(7): 806-810.
 李秀山,宁永强,张星,等. Si/SiO₂ 高对比光栅参数对反射率 的影响[J]. 发光学报,2015, 36(7): 806-810.
- [22] MACLEOD H. Thin film optical filters [M]. Bristol: Institute of Physics Publishing, 2001.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (Nos. 61405182, 61308090, 61308089, 61440065), the Overseas Students Preferred Funding of Activities of Science and Technology Project of 2013 and the Students Open Experimental Project of 2015