

基于槽形函数拟合的刻划光栅衍射特性分析方法^{*}

巴音贺希格¹⁾ 朱洪春¹⁾²⁾

1) 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130033)

2) 中国科学院研究生院, 北京 100049)

(2006 年 8 月 30 日收到, 2006 年 11 月 9 日收到修改稿)

作为对光栅刻划工艺的理论指导, 提出了一种基于槽形函数拟合的机械刻划光栅衍射特性分析方法, 解决了高刻线密度光栅衍射效率测量值与理论值偏差较大的问题. 以刻线密度为 1200 l/mm 的紫外光栅为例, 对光栅主截面上的实际槽形纵横坐标扫描取值, 进而拟合出槽形函数, 经理论计算找到了导致衍射效率偏低的原因, 并通过改进工艺, 使光栅衍射效率提高了约 20%.

关键词: 刻划光栅, 槽形函数拟合, 衍射特性, 分析方法

PACC: 4210, 4110H

1. 引 言

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^[1,2]. 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. 由于被挤压出的铝质栅线聚积了弹性势能, 在恢复力的作用下要释放能量, 其结果是使光栅的实际闪耀角比刻划刀定向角小(因为恢复力存在梯度, 由槽底到槽顶递减), 因此, 在安装刻划刀时, 总是需要在刻划刀定向角上加几度的经验值, 才能使得所刻出光栅的闪耀角与设计值基本符合, 进而满足光谱仪器及激光器工作要求, 这是机械刻划闪耀光栅遵循的一般规律, 在工艺上的应用也比较成功^[3-5]. 对于 300 l/mm 以下的低刻线密度光栅而言, 遵循这一规律制作出的光栅其衍射效率测量值与理论值符合较好. 但是, 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, 因而以往所研制的紫外光栅的缺陷就凸显出来.

目前, 在国内外需求量比较大的紫外光谱仪是使用刻线密度为 1200 l/mm 的平面闪耀光栅的紫外分光光度计. 其中, 刻划光栅占有较大份额. 但是, 在光栅的研制和使用过程中发现, 按照常规方法制作

的光栅其衍射效率测量值与理论值相差甚远. 导致这种偏差的原因究竟是什么, 未曾见到相关的文献报道. 紫外光栅属于亚波长光栅, 分析其衍射特性需要采用严格矢量理论. 分析光栅问题时, 大多事先设定槽形函数的一种数学表示形式, 然后逐步逼近已知或需要的规则槽形. 高刻线密度的紫外光栅在刻划过程中的形变程度究竟如何, 尚未做过数量级上的考证, 因而用传统方法仿真未知的光栅槽形显然不够直接. 鉴于此, 本文提出了一种基于槽形函数拟合的刻划光栅衍射特性分析方法, 即对光栅主截面上的实际槽形纵横坐标扫描取值, 进而拟合出实际槽形函数, 并通过数值计算(本文采用微分法^[6,7])得到光栅的衍射效率, 其近似程度要优于其他方法. 这种方法简便、快捷, 对高刻线密度刻划光栅的衍射特性分析具有普遍意义.

2. 光栅槽形函数拟合及效率分析

2.1. 光栅槽形扫描取值及槽形函数拟合方法

衍射效率是光栅最重要的技术指标, 它对光谱仪器的能量传输特性具有重要的影响. 测试光栅的衍射效率可用“线谱法”或“连续扫描法”, 本文采用“线谱法”, 所使用光栅效率测试仪的前置单色器能

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 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”和“十一五”国家科技支撑计划重大项目(批准号: 2006BAK03A02)资助的课题.

够输出 213.8 nm, 253.7 nm, 313.2 nm, 365.0 nm, 435.8 nm, 546.1 nm 和 643.8 nm 等分立波长的单色自然光. 为了便于测试光栅衍射效率, 在刻划 1200 l/mm 的紫外光栅时, 光栅制作者一般要将闪耀波长定在 213.8 nm 处, 由 Littrow 设置下的光栅方程

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

确定光栅闪耀角 θ_1 (图 1 一个周期单元的左底角), 此角在光栅制作中也称为金刚石刻划刀定向角. (1) 式中, d 为光栅常数, m 为衍射级次, λ 为闪耀波长.

对于闪耀波长为 213.8 nm, 刻线密度为 1200 l/mm 的光栅, 由于 $d = 833.3$ nm, 闪耀角则为 7.37° . 过去由于受到刀具研磨技术水平的限制, 金刚石刻划刀刀尖角 (即光栅槽顶角) 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^[3-5]

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

则非定向角 $\theta_2 = 62.63^\circ$ (图 1 一个周期单元的右底角) 槽深 $h = 101.02$ nm.

正如引言中所述, 对于低刻线密度的红外光栅, 实际槽形与理想槽形偏差较小, 其衍射效率测量值与理论值符合较好, 但是, 上述紫外光栅则不同, 衍射效率测量值要比理论值低约 30%. 为了对这种偏差的产生原因做出明确的理论解释, 提出了基于槽形函数拟合的光栅衍射特性分析方法.

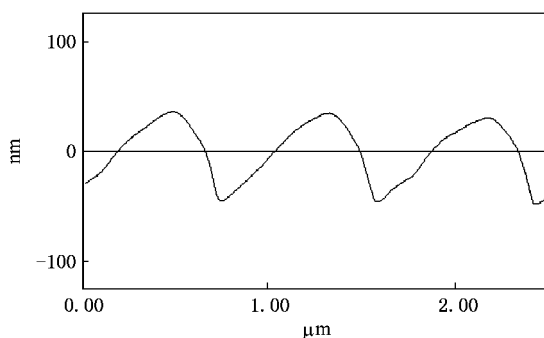


图 1 实际刻划光栅槽形原子力显微镜剖面分析

原子力显微镜 (AFM) 是当前最先进的物体表面微结构形貌测量仪器. 在测试光栅槽形时, 我们通常采用以远距离吸引力为敏感信号的轻敲模式 (tapping mode), 探针材料为氮化硅 (Si_3N_4), 针尖半径为 5—20 nm. 图 1 是闪耀波长为 213.8 nm, 刻线密度为 1200 l/mm 的机械刻划光栅槽形轮廓的原子力显微镜剖面图. 平均光栅常数为 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形状.

运用矢量理论分析光栅衍射效率时, 必须给定光栅槽形函数, 如三角形、正弦形、矩形或梯形等, 若光栅槽形不是属于这些理想形状, 则要用某种函数来逐渐逼近之. 为了能够如实反映光栅的衍射效率, 我们提出了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 Content 等^[8]使用的方法相近). 它的优点是无需其他参数, 衍射效率计算值的近似程度更高, 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问题. 其具体方法为从图 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.

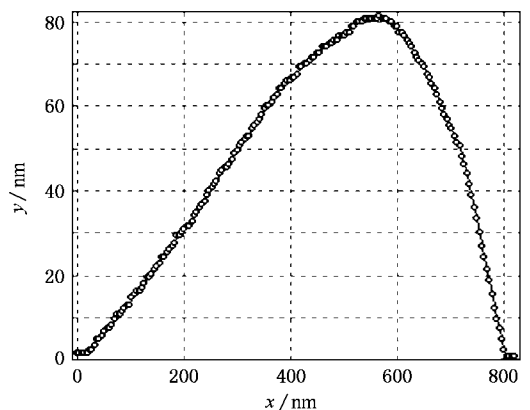


图 2 光栅槽形曲线扫描取值

利用光栅槽形曲线的扫描数据, 可以拟合出槽形函数. 我们通过编制程序的方法来实现多项式函数拟合, 并把它嵌入到计算光栅衍射效率的主程序里, 这样程序的运行较为方便.

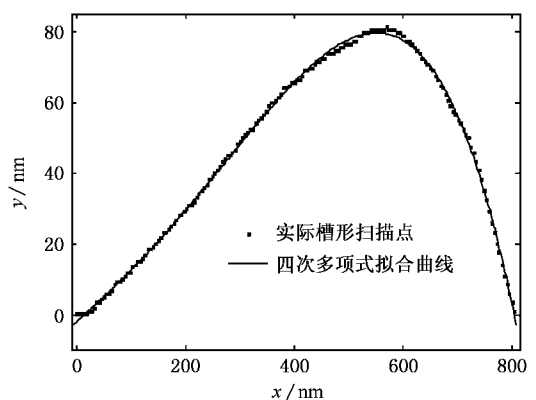


图 3 光栅槽形的四次多项式拟合曲线

图3给出了四次多项式拟合曲线,函数形式为

$$y = -8.595 \times 10^{-10} x^4 + 4.255 \times 10^{-7} x^3 + 4.404 \times 10^{-5} x^2 + 0.1388x - 2.101. \quad (3)$$

由图3看出,四次多项式拟合的曲线和实际光栅槽形符合较好,我们就选用了四次多项式来表示光栅的槽形函数。

通过上述函数拟合的方法,拟合出了表示实际光栅槽形的槽形函数,以四次多项式拟合函数表达式(3)作为光栅槽形函数,运用严格矢量理论编制出数值计算光栅衍射效率的程序,就可对光栅的衍射特性展开研究。

2.2. 拟合槽形和理想槽形光栅的效率对比

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,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 l/mm刻划光栅的40 nm—500 nm波长范围内的TE, TM偏振波衍射效率曲线,光栅材料为铝(Al),本文采用的是有限电导率(金属的介电常数亦即折射率为复数)光栅模型下的微分法^[6,7]。其中,理想三角槽形的顶角即光栅刻划刀刀尖角 ϕ 为 110° ,闪耀角 θ_1 为 7.37° ,而拟合槽形则自然包括了所有的槽形参数。效率曲线中-1级衍射效率最大值及其对应的波长见表1,表2列出的是拟合槽形光栅对应五个波长的-1级衍射效率计算值与测量值。

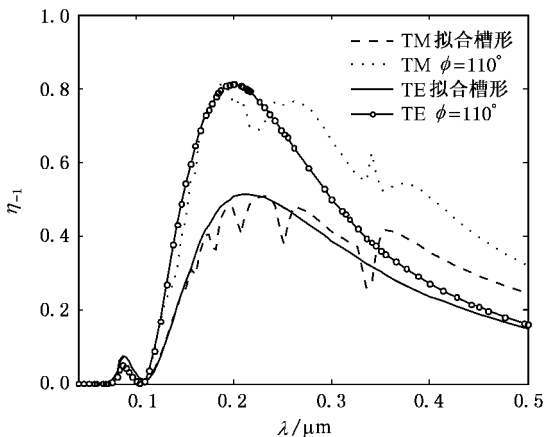


图4 拟合槽形和理想槽形的效率对比

从图4和表1可以看出,第一,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(在闪耀波长附近)。第二,随着波长的增加偏振愈加突出,且TM波有明显的异常现象。第三,在理想槽

形下,TE和TM波的闪耀波长分别向短波方向发生了15.40 nm和27.67 nm的漂移,这说明由Littrow设置下的光栅方程来确定光栅闪耀角略嫌不够。第四,拟合槽形下,TE和TM波的闪耀波长基本与设计波长符合,这说明无论红外光栅还是紫外光栅,我们在刻划工艺中控制光栅闪耀角的方法是成熟和可靠的。第五,表2中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符合较好。

表1 拟合槽形和理想槽形光栅效率最大值及其对应波长

偏振态	槽形	λ/nm	η_{-1}
TE	拟合	213.25	0.5153
	理想	198.40	0.8129
TM	拟合	230.69	0.5097
	理想	186.13	0.8119
测量值(自然光)		213.80	0.5122

表2 拟合槽形光栅-1级衍射效率计算值与测量值

λ/nm	TE	TM	测量值
213.8	0.5152	0.4784	0.5122
253.7	0.4719	0.4275	0.4552
313.2	0.3641	0.3903	0.3890
365.0	0.2807	0.4108	0.3594
435.8	0.2007	0.3091	0.2661

2.3. 光栅衍射效率测量值偏低的原因分析

从以上分析可知,刻划过程中光栅槽形的弹塑性形变引起闪耀角的改变很小,而且实践证明可以通过增加刻划刀安装角(即定向角)的方法予以补偿,因而它并非造成光栅衍射效率下降的原因所在。借助对图5和图6的分析可以找到问题的答案。

图5分别给出了槽顶角为 110° 和 152° 理想槽形下TE波的衍射效率曲线以及拟合槽形下TE波的衍射效率曲线,图6则是对应的TM波的计算结果。从图中可以看出,当把理想三角槽形的顶角取为 152° 时,其衍射效率与拟合槽形的效果接近。

从图5和图6可以看出,第一,拟合槽形下的衍射效率与槽顶角为 152° 的理想槽形下的理论衍射效率相当,这说明刀尖角为 110° 的刻划刀不能够刻出 110° 槽顶角的1200 l/mm的紫外光栅,刻出的光栅相当于槽顶角为 152° — 153° 的理想槽形光栅。光栅槽形变引起的 40° 以上的槽顶角增幅是导致光栅衍射效率下降约30%的原因所在,槽顶角增大槽深必

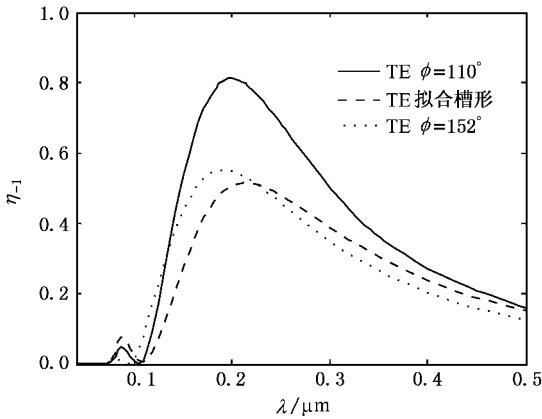


图 5 TE 偏振下衍射效率对比

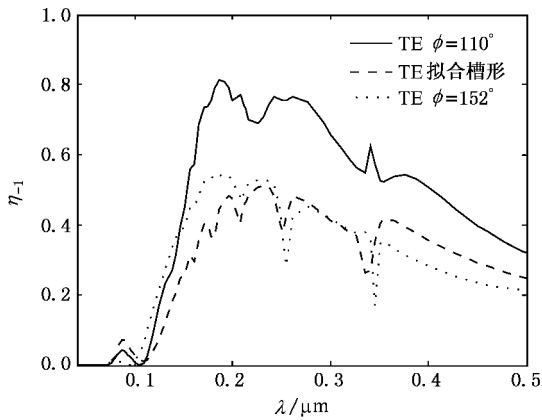


图 6 TM 偏振下衍射效率对比

然变浅.第二,在光栅刻划工艺方面,不同刻线密度的光栅其槽形形变量不同,紫外光栅的形变要大于红外光栅,这说明过去对紫外光栅的槽形形变程度估计不足.值得一提的是用 110°刀尖角的金刚石刀刻划出的竟然是等同于槽顶角约为 152°的光栅,1200 l/mm 的紫外光栅在刻划过程中会发生如此大的形变是光栅制作者们未曾想到的.这一点也尚未见到报道.第三,提高紫外刻划光栅衍射效率的途径必然是缩小光栅刻划刀的刀尖角.

2.4. 改进刻划参数后的结果

为了提高紫外刻划光栅的衍射效率,将金刚石刻划刀刀尖角磨制为 92°,光栅刻线密度仍为 1200 l/mm,闪耀波长为 213.8 nm,则非定向角 80.63°,由(2)式知槽深 $h = 105.53 \text{ nm}$.图 7 为此刻划光栅槽形轮廓的原子力显微镜剖面图,测得平均光栅常数为 836.26 nm,光栅槽深为 99.96 nm,光栅槽形与理想三角形状仍有偏差.

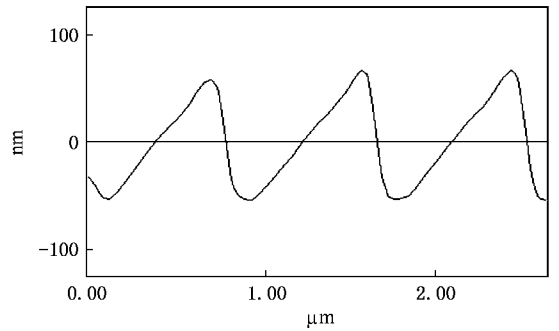


图 7 光栅槽形原子力显微镜剖面

图 8 给出了九次多项式拟合曲线,函数形式为

$$y = 9.543 \times 10^{-22} x^9 - 2.938 \times 10^{-18} x^8 + 3.642 \times 10^{-15} x^7 - 2.331 \times 10^{-12} x^6 + 8.172 \times 10^{-10} x^5 - 1.514 \times 10^{-7} x^4 + 1.197 \times 10^{-5} x^3 + 0.0001728 x^2 + 0.08039 x - 0.9232. \quad (4)$$

由图 8 看出,九次多项式拟合的曲线和实际光栅槽形重合很好,选用(4)式来表示光栅的槽形函数.

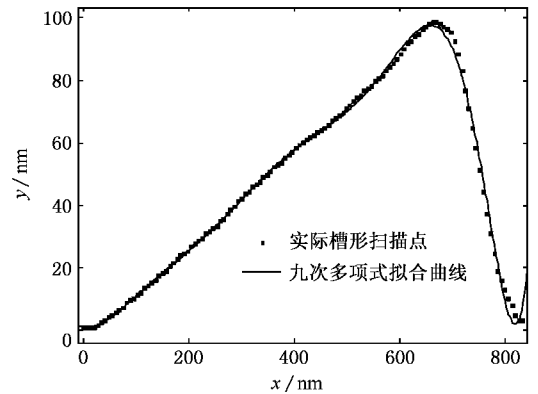


图 8 光栅槽形的九次多项式拟合曲线

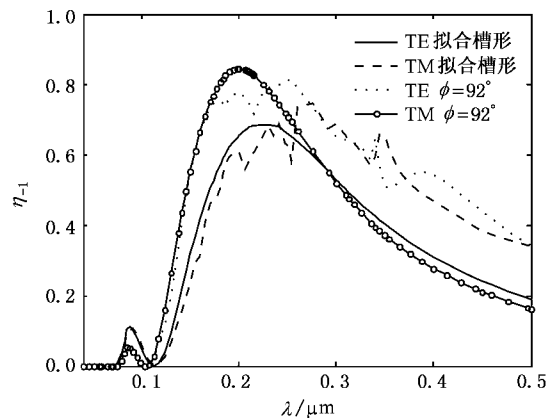


图 9 拟合槽形和理想槽形的效率对比

图 9 给出了 TE, TM 偏振波效率曲线,其中,理想三角槽形的顶角 92° ,闪耀角为 7.37° . -1 级衍射效率最大值及其对应的波长见表 3;表 4 列出的是拟合槽形光栅对应五个波长的 -1 级衍射效率计算值与测量值.

表 3 拟合槽形和理想槽形光栅效率最大值及其对应波长

偏振态	槽形	λ/nm	η_{-1}
TE	拟合	225.40	0.6875
	理想	199.69	0.8461
TM	拟合	275.50	0.7459
	理想	253.97	0.8147
测量值(自然光)		213.80	0.6525

表 4 拟合槽形光栅 -1 级衍射效率计算值与测量值

λ/nm	TE	TM	测量值
213.8	0.6822	0.5979	0.6525
253.7	0.6542	0.6034	0.6392
313.2	0.4936	0.6448	0.5801
365.0	0.3738	0.5542	0.4752
435.8	0.2598	0.4057	0.3457

从图 9 和表 3 可知,第一,拟合槽形下的实际衍射效率比理想槽形下的理论衍射效率低 10% 左右(在闪耀波长附近),明显缩小了二者的偏离程度,尤其在大于 275 nm 波段二者基本重合.第二,随着波长的增加偏振愈加突出, TM 波有明显的异常现象.第三,在理想槽形下, TE 波的闪耀波长向短波方向发生了 14.11 nm 的漂移, TM 波的闪耀波长向长波方向发生了 40.17 nm 的漂移.第四,拟合槽形下, TE 和 TM 波的闪耀波长向长波方向漂移较大,这主要是工艺上的原因造成的.对刻划光栅来讲,当金刚石刻划刀定向角和刀尖角都比较小时,光栅很难刻成功,将出现光栅形不成三角槽形,且槽深浅,表面粗糙等现象.因此,为了在刀尖角为 92° 的情况下刻出光栅,经过多次的实验,最终采取了略加大刻划刀安装角(决定光栅闪耀角)的折中方法,因而导致了实际光栅闪耀波长的长移.这一点还需要在工艺上作进一步的探索和改进加以克服.

图 10 分别给出了槽顶角为 135° 理想槽形下 TE 波的衍射效率曲线以及拟合槽形下 TE 波的衍射效率曲线,图 11 则是对应的 TM 波的计算结果.从图中可以看出,当把理想三角槽形的顶角取为 135° 时,其闪耀波长附近衍射效率与拟合槽形的效果接近.

从图 10, 11 和表 4 可以看出,第一,拟合槽形下

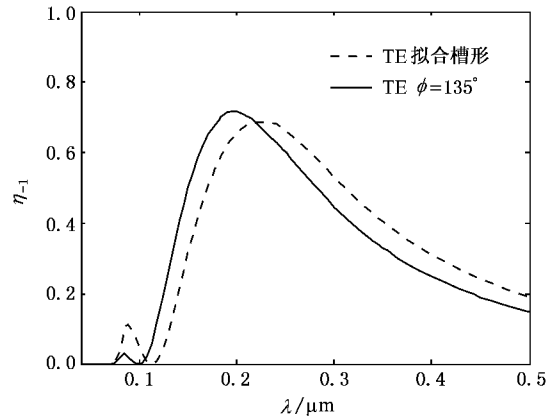


图 10 TE 偏振下衍射效率对比

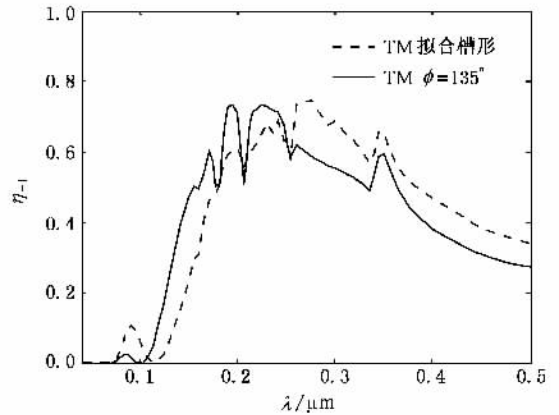


图 11 TM 偏振下衍射效率对比

的衍射效率与槽顶角为 135° 的理想槽形下的理论衍射效率相当.第二,将光栅刻划刀刀尖角由 110° 改为 92° 后,尽管光栅的槽顶角仍然由于形变增大了约 40° ,但槽深却增加了约 18 nm,因而光栅衍射效率提高了约 20%(在闪耀波长附近).

3. 结 论

刻划光栅槽形的形成是金刚石刻划刀对金属膜层实施挤压使其发生弹-塑性形变的耦合形变过程,光栅的槽形函数不易给出,因而影响衍射特性的正确分析.首先,作为对光栅刻划工艺的理论指导,本文提出了一种无需事先知道光栅具体槽形,而是根据光栅实际槽形来直接拟合其槽形函数的刻划光栅衍射特性分析方法,找到了导致高刻线密度光栅衍射效率测量值与理论值偏差较大的根源.其次,这种由物体表面的微结构检测结果与衍射光栅电磁场理论数值计算结果相结合产生的分析方法为光栅的刻

划找到了一种很好的检验手段,无需作效率测试,只要通过原子力显微镜读取光栅主截面上槽形坐标值数据,就可以拟合出槽形函数,从而数值计算出各波长的衍射效率值,并能够解决闪耀波长位置是否正确等问题,为刻划参数的调整提供量化依据.第三,通常测试光栅效率时,对光栅的刻划面积有一定要求,即约大于 $15\text{ mm} \times 15\text{ mm}$.如果刻划面积太小,则不易进行光栅衍射效率的测试.本文的方法则没有这种限制,刻划宽度达到 1 mm 就足以进行 AFM 检测和效率计算,由于刻刀行程短、磨损小,有利于保持光栅刻划参数的重复性和刻划条件的稳定性.第

四,这种方法的巧妙之处在于事先不知道光栅槽形的情况下,可以直接通过光栅主截面上的槽形坐标数据拟合出槽形函数,只要光栅槽形测量误差足够小,衍射效率计算结果的精度就会足够高,其优越性是不同于测量值不受光源的稳定性和测量的实时性影响,而且它不仅适用于刻划光栅的衍射特性分析,对其他类型光栅^[9-12]同样适用,因而具有普遍意义.第五,本文给出的光栅衍射特性分析方法,在光栅优化设计中可以成为由光栅衍射特性反演光栅几何、物理参数^[13-15]时值得借鉴的手段.

- [1] Liang H M ,Zhuang K ,Zhang Q Y ,Yang H M 1981 *Acta Opt . Sin .* **1** 51 (in Chinese) [梁浩明、庄 夔、张庆英、杨厚民 1981 光学学报 **1** 51]
- [2] Zhu S J ,Zou H X ,Bao X C ,Guo H L 1986 *Diffraction gratings* (Beijing : Mechanical industry publishing company) p158 (in Chinese) [祝绍箕、邹海兴、包学诚、郭厚林 1986 衍射光栅 (北京 : 机械工业出版社) 第 158 页]
- [3] Bayanheshig ,Gao J X ,Qi X D ,Li C Q 2004 *J. Optoelectronic . Laser* **15** 1137 (in Chinese) [巴音贺希格、高键翔、齐向东、李春启 2004 光电子·激光 **15** 1137]
- [4] Bayanheshig ,Gao J X ,Qi X D ,Li Y H ,Zhang F C ,Li C Q 2005 *Chin . J. Laser* **32** 301 (in Chinese) [巴音贺希格、高键翔、齐向东、李英海、张坊城、李春启 2005 中国激光 **32** 301]
- [5] Bayanheshig ,Gao J X ,Qi X D 2006 *Opt. Precision Eng .* **14** 391 (in Chinese) [巴音贺希格、高键翔、齐向东 2006 光学精密工程 **14** 391]
- [6] Petit R 1980 *Electromagnetic Theory of Gratings* (New York : Springer-Verlag) p205
- [7] Nerville M ,Vincent P ,Petit R 1974 *Nouv. Rev. Opt .* **5** 65
- [8] Content D ,Arsenovic P ,Kuznetsov I ,Hadjimichael T 2001 *Proc. SPIE* **4485** 405
- [9] Bayanheshig ,Tang Y G ,Qi X D 2004 *Acta Phys . Sin .* **53** 4181 (in Chinese) [巴音贺希格、唐玉国、齐向东 2004 物理学报 **53** 4181]
- [10] Kong W J ,Liu S J ,Shen J ,Shen Z C ,Shao J D ,Fan Z X 2006 *Acta Phys . Sin .* **55** 1143 (in Chinese) [孔伟金、刘世杰、沈 健、沈自才、邵建达、范正修 2006 物理学报 **55** 1143]
- [11] Liu S J ,Shen J ,Shen Z C ,Kong W J ,Wei C Y ,Jin Y X ,Shao J D , Fan Z X 2006 *Acta Phys . Sin .* **55** 4588 (in Chinese) [刘世杰、沈 健、沈自才、孔伟金、魏朝阳、晋云霞、邵建达、范正修 2006 物理学报 **55** 4588]
- [12] Liu M M ,Zhang G P ,Zou M 2006 *Acta Phys . Sin .* **55** 4608 (in Chinese) [刘敏敏、张国平、邹 明 2006 物理学报 **55** 4608]
- [13] Mephedran R C ,Wilson I J ,Waterworth M D 1973 *Opt. Commun .* **7** 331
- [14] Mephedran R C ,Waterworth M D 1973 *Opt. Acta* **20** 177
- [15] Li J L ,Fu K X ,Zhang L J 2005 *Acta Opt . Sin .* **25** 1324 (in Chinese) [李建龙、傅克祥、张丽娟 2005 光学学报 **25** 1324]

Analytical method of the diffraction characteristic of ruled grating based on profile fitting function^{*}

Bayanheshig¹⁾ Zhu Hong-Chun^{1,2)}

1) *Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China*

2) *Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*

(Received 30 August 2006 ; revised manuscript received 9 November 2006)

Abstract

The diamond stylus extrudes the metal film and causes coupled elastic-plastic deformation which shapes the profile of the ruled grating. The grating profile function which is hard to get would influenced accurate analysis of the diffraction characteristic. An analytical method of the diffraction characteristic of the mechanically ruled grating is presented based on the profile fitting function. The problem of excessive departure between the measured and theoretical value of the diffraction efficiency of high density ruled grating is solved by this method. We take a 1200 l/mm UV grating ,the grating profile is scanned in the principal section and then the profile curve function is got. The reason why the diffraction efficiency wasn't high is found by calculation. And then the diffraction efficiency increased about 20% by improving the technology.

Keywords : ruled grating , profile fitting function , diffraction characteristic , analytical method

PACC : 4210 , 4110H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60478034) ,the Specialized Research Foundation for the Gainer of Outstanding Doctoral Thesis and Presidential Scholarship of Chinese Academy of Sciences and the National Key Technologies R&D Program the " 11th 5-year Plan "(Grant No. 2006BAK03A02).