

# 基于严格耦合波理论的宽光谱金属 介质膜光栅衍射特性分析\*

孔伟金<sup>†</sup> 王书浩 魏世杰 云茂金 张文飞 王心洁 张蒙蒙

(青岛大学物理科学学院, 青岛 266071)

(2011年4月7日收到; 2011年5月1日收到修改稿)

基于严格耦合波理论建立了金属介质膜光栅的衍射机理模型, 给出了 TE 模式金属介质膜光栅衍射效率的表达式. 以 -1 级衍射效率和工作带宽为评价函数, 对金属介质膜光栅的表面浮雕结构进行了优化设计. 对于 800 nm 和 1053 nm 为中心的 TE 波, 设计的金属介质膜光栅 -1 级衍射效率优于 97% 的工作带宽分别达到 130 nm 和 150 nm, 最后讨论了设计的宽光谱高衍射效率金属介质膜光栅的制备工艺容差. 此研究对于提高脉宽压缩光栅的性能具有重要的意义.

**关键词:** 衍射效率, 金属介质膜光栅, 严格耦合波理论

**PACS:** 42.79.Dj, 42.40.Eq

## 1. 引言

超短超快高功率激光成为探索极端物理条件下物质相互作用的重要手段<sup>[1]</sup>, 啁啾脉冲放大 (chirped-pulse amplification) 技术是实现超短超快激光性能的重要方法. 为提高啁啾脉冲放大系统的工作效率, 满足飞秒激光频谱带宽的使用要求, 用来展宽和压缩飞秒激光脉冲的光栅必须具有尽可能高的衍射效率、宽的工作带宽以及尽可能高的抗激光损伤能力<sup>[2]</sup>. 虽然传统的镀金光栅 (metal grating, MG) 可以达到 95% 的衍射效率<sup>[3]</sup>, 但是由于金属具有较强的吸收特性, 其最高的抗激光损伤阈值在 ps 量级为  $0.4 \text{ J/cm}^2$ . 多层介质膜光栅 (multi-layer dielectric grating, MDG) 基于介质膜的干涉原理和表面浮雕结构的衍射原理, 其结构设计更加灵活<sup>[4]</sup>, MDG 因为没有吸收而具有较高的抗激光损伤阈值<sup>[5]</sup>, 但由于干涉作用其工作带宽通常在几十个 nm 的范围<sup>[6, 7]</sup>, 无法满足飞秒激光对宽光谱的要求. 金属介质膜光栅 (metal multi-layer dielectric grating, MMDG) 结合了金属的宽光谱和介质膜光栅的高衍射效率优点, 近年来成为设计和制备宽光谱

高衍射效率脉宽压缩光栅的主要方式. MMDG 研究者主要通过对金属介质膜膜层结构<sup>[8, 9]</sup>以及表面浮雕结构<sup>[10-12]</sup>的优化设计, 实现 CPA 系统对脉宽压缩光栅宽光谱和高衍射效率的使用要求.

本文采用严格耦合波理论建立了金属介质膜光栅获得宽光谱和高衍射效率的机理模型. 以 -1 级衍射效率和工作带宽为评价函数对 MMDG 表面结构进行优化, 分别设计了以 800 nm 和 1053 nm 为中心波长, -1 级衍射效率优于 97% 的宽光谱金属介质膜光栅, 最后分析讨论了宽光谱金属介质膜光栅结构参数的工艺容差. 这些结果对宽光谱金属介质膜光栅的设计和制备提供了理论指导.

## 2. 理论模型

由 Moharam 和 Gaylord 建立的严格耦合波分析 (rigorous coupled-wave analysis) 方法被广泛地应用于光栅衍射特性的分析和设计<sup>[13, 14]</sup>, 这套理论是对电磁波麦克斯韦方程组的严格求解<sup>[15]</sup>. 在数值模拟中, 通常使用增强透射矩阵 (enhanced transmittance matrix) 方法<sup>[16]</sup>, 这种方法对于 TE 和 TM 模的入射光都可以获得收敛、稳定的解.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10804060, 10904080)、山东省泰山学者建设工程专项经费和青岛市基础研究计划项目资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: kwjdsd@163.com

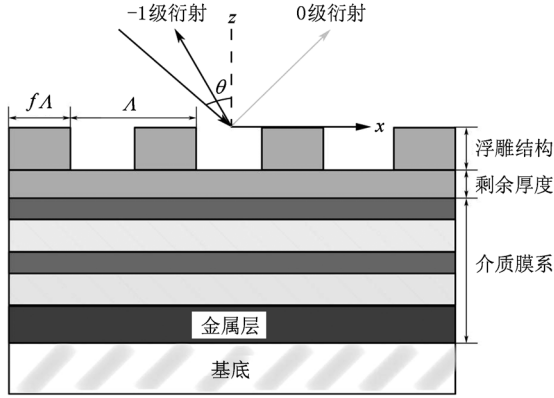


图1 金属介质膜光栅结构示意图

金属介质膜光栅的结构示意图由图1给出,金属层一般加在基底和最底层介质膜之间,在分析中通常将浮雕结构和介质膜系合称为“光栅区”<sup>[17,18]</sup>.基于金属层与介质膜层多方面的相似性,在理论分析中,一般将金属层作为一层对电磁波有吸收作用的介质膜来处理.

在光栅区,光的传播受到周期性变化的浮雕结构的调制,将电磁波按单色平面波展开,即在一个周期上将介电常数展开为傅里叶级数.矩形浮雕结构第  $h$  级傅里叶展开系数为

$$\varepsilon_h = \frac{1}{\Lambda} \int_0^{\Lambda} n_h^2 \exp(-2j\pi hx/\Lambda),$$

对于介质膜系有

$$\varepsilon_{l,h} = \frac{1}{\Lambda} \int_0^{\Lambda} n_l^2 \exp(-2j\pi hx/\Lambda) (l \neq 1),$$

上述两式中的  $n_h$  和  $n_l$  分别代表浮雕结构和介质膜系材料的折射率.

以 TE 模为例(TM 模可由下述方法类比推得),对光栅区,归一化的电场和磁场为

$$\begin{aligned} E_{l,gy} &= \sum_i S_{l,yi}(z) \exp(-jk_{xi}x), \\ H_{l,gx} &= j \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_i U_{l,xi}(z) \exp(-jk_{xi}x). \end{aligned} \quad (1)$$

根据 Maxwell 方程组,可以建立以下微分方程:

$$\left( \frac{\partial^2 S_{l,yi}}{\partial z'^2} \right) = \mathbf{A}(S_{l,yi}), \quad (2)$$

式中  $z' = k_0 z$ , 矩阵  $\mathbf{A} = \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}$ , 其中  $\mathbf{K}_x$  为对角阵即  $\mathbf{K}_x(i,i) = k_{xi}/k_0$ ,  $\mathbf{E}$  为光栅区介电常数的傅里叶展开系数构成的矩阵即  $\mathbf{E}(i,p) = \varepsilon_{(i-p)}$ .

假定矩阵  $\mathbf{A}$  的本征矢量为  $\mathbf{W}_l$ , 本征值为  $G_{l,m}$ , 令  $q_{l,m}$  为  $G_{l,m}$  的平方根(取正值), 矩阵  $\mathbf{Q}_l$  为由  $q_{l,m}$

构成的对角阵,再令  $\mathbf{V}_l = \mathbf{W}_l \mathbf{Q}_l$ , 则其矩阵元  $v_{l,i,m} = q_{l,m} w_{l,i,m}$ . 微分方程的通解可以表示为

$$\begin{aligned} S_{l,y}(z) &= \sum_{m=1}^n w_{l,i,m} \{ B_l \exp[k_0 q_{l,m}(z - D_l)] \\ &\quad + A_l \exp[-k_0 q_{l,m}(z - D_l + d_l)] \}, \\ U_{l,x}(z) &= \sum_{m=1}^n v_{l,i,m} \{ B_l \exp[k_0 q_{l,m}(z - D_l)] \\ &\quad - A_l \exp[-k_0 q_{l,m}(z - D_l + d_l)] \}. \end{aligned} \quad (3)$$

将上述通解代入各层间电磁场的切向连续条件,递推可以求得

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} \delta_{i0} \\ jn_l \cos \delta_{i0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} I \\ -jY_l \end{pmatrix} (R) \\ &= \prod_{l=1}^L \begin{pmatrix} \mathbf{W}_l & \mathbf{W}_l \mathbf{X}_l \\ \mathbf{V}_l & -\mathbf{V}_l \mathbf{X}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_l \mathbf{X}_l & \mathbf{W}_l \\ \mathbf{V}_l \mathbf{X}_l & -\mathbf{V}_l \end{pmatrix}^{-1} \\ &\times \begin{pmatrix} I \\ jY_{II} \end{pmatrix} (T), \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $\delta_{i0}$  为中心元素为 1, 其余元素为 0 的列矩阵,  $\mathbf{Y}_l, \mathbf{Y}_{II}$  和  $\mathbf{X}_l$  均为  $n \times n$  的对角矩阵, 其对角元分别为  $k_{1,zi}/k_0, k_{II,zi}/k_0$  和  $\exp(-k_0 q_{l,m} d_l)$ .

在递推关系数值计算的过程中,可能会遇到矩阵元发散的问题.使用增强透射矩阵方法可以避免数值模拟过程中的不稳定性,获得收敛的解.

对于 TE 模,各衍射级次归一化的反射和透射衍射效率为

$$\begin{aligned} DE_{ri} &= R_i R_i^* \operatorname{Re}(k_{1,zi}/k_0 n_1 \cos \theta), \\ DE_{ti} &= T_i T_i^* \operatorname{Re}(k_{II,zi}/k_0 n_1 \cos \theta). \end{aligned} \quad (5)$$

### 3. 优化方法

在本文中,将浮雕结构和介质膜系分开设计,介质膜系用来提供高的反射率,浮雕结构用来调制光的衍射.如图1所示,定义金属介质膜光栅各参数的表示方法为  $\{ t_g, t_r, f, \theta, \Lambda \}$ , 括号内参数分别表示槽深、剩余厚度、占空比、入射角和周期,长度单位为 nm. 在数值模拟过程中,各参数具有一定的变化间隔,用  $\{ \Delta t_g, \Delta t_r, \Delta f, \Delta \theta, \Delta \Lambda \}$  表示,上式最后一项代表入射光波长的变化间隔.在模拟过程中固定了周期的数值,则定义各参数的表示方法为  $\{ t_g, t_r, f, \theta \}$ , 对应的变化间隔表示为  $\{ \Delta t_g, \Delta t_r, \Delta f, \Delta \theta \}$ .

#### 3.1. 金属介质膜反射镜的优化

本文的目标是设计以 800 nm 和 1053 nm 为中

心波长的宽光谱金属介质膜光栅. 金属介质膜光栅的最终衍射带宽由反射镜的带宽决定<sup>[12]</sup>. 为达到设计目标, 反射镜需要在中心波长附近一个较宽的区域内提供 97% 以上的反射率. 分别给定反射镜的初始膜系为  $Ag(L1.5H)^2$  (中心波长为 800 nm) 和  $Ag(LH)^2$  (中心波长为 1053 nm), 其中 L 和 H 分别代表厚度为  $\lambda_r/4$  ( $\lambda_r$  表示参考波长, 其中  $\lambda_{r,800\text{ nm}} = 620\text{ nm}$ ,  $\lambda_{r,1053\text{ nm}} = 1100\text{ nm}$ ) 的  $HfO_2$  ( $n_H = 1.96$ ) 和  $SiO_2$  ( $n_L = 1.46$ ), Ag 的介电常数对于 800 nm 和 1053 nm 分别为  $-51 + 3.3j$  和  $-28 + 1.5j$ . 基于薄膜干涉理论所设计反射膜的光谱如图 2 所示, 图 2(a) 和(b) 所对应的使用波长分别为 800 nm 和 1053 nm. 由图 2 可知对于 800 nm 和 1053 nm 的中心波长, 所设计的膜系结构均可以提高足够宽的反射带.

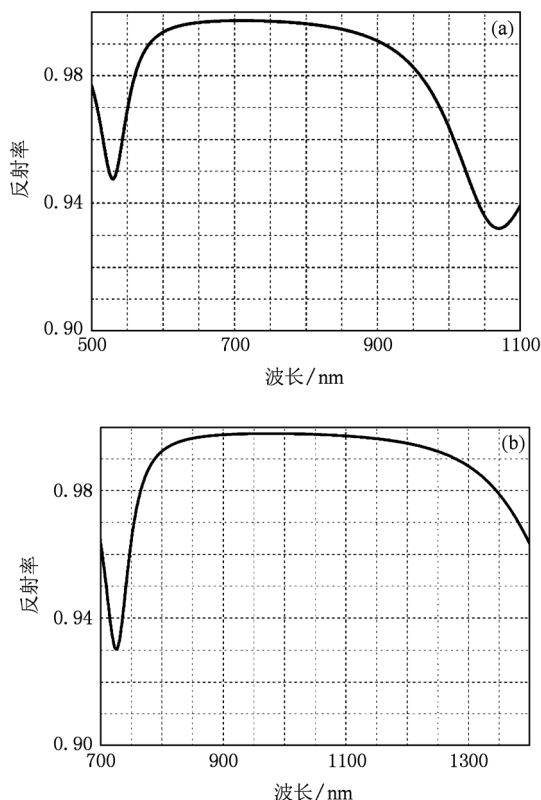


图 2 金属介质反射镜光谱曲线 (a)800 nm;(b)1053 nm

### 3.2. 金属介质膜光栅优化评价函数

金属介质膜反射镜主要用来提供宽的工作带宽, 光栅的表面浮雕结构用来调制光的衍射. -1 级衍射效率取决于光栅的表面浮雕结构. 为优化光栅的表面浮雕结构以获得高的衍射效率和宽的工作带宽, 定义如下评价函数:

$$MF_b = N \cdot \Delta\lambda, \quad (6)$$

其中  $MF_b$  用以描述衍射效率达到 97% 以上的可用

光谱宽度. 由光栅方程可知, 只有当  $\sin\theta$  小于  $\lambda_i/(2\Lambda)$  时, -1 级衍射角小于入射角, 才能够顺利将衍射光线取出. 所以在入射角  $\theta$  和周期  $\Lambda$  固定的条件下, 不满足上述关系的  $\lambda_i$  应当舍去, 这样所得到的  $\lambda_i$  才是可用的.

## 4. 中心波长为 800 nm 的金属介质膜光栅设计

### 4.1. 光栅参数 $\{t_g, t_r, f, \theta\}$ 的优化

波长为 800 nm 的飞秒激光用脉宽压缩光栅的优化, 选定光栅的周期为 550 nm. 光栅结构参数的变化范围从  $\{10\text{ nm}, 1\text{ nm}, 0.2, 39^\circ\}$  到  $\{450\text{ nm}, 300\text{ nm}, 0.5, 65^\circ\}$ , 变化间隔为  $\{10\text{ nm}, 100\text{ nm}, 0.01, 1^\circ\}$ . 以 -1 级衍射效率优于 97%, 且工作带宽大于 100 nm 为评价函数进行优化. 得到光栅表面浮雕结构参数为  $\{240\text{ nm}, 10\text{ nm}, 0.26, 53^\circ\}$ , 最优结构所对应的光谱曲线如图 3 所示. 当波长在 744 nm 到 874 nm 的范围变化时, 根据光栅方程  $\sin\theta = \lambda_i/(2\Lambda)$  可知, 对应 -1 级光线衍射角变化范围为  $42.5^\circ - 52.6^\circ$ , 衍射效率均大于 97% 以上, 可用光谱带宽为 130 nm, 满足飞秒激光对带宽的要求.

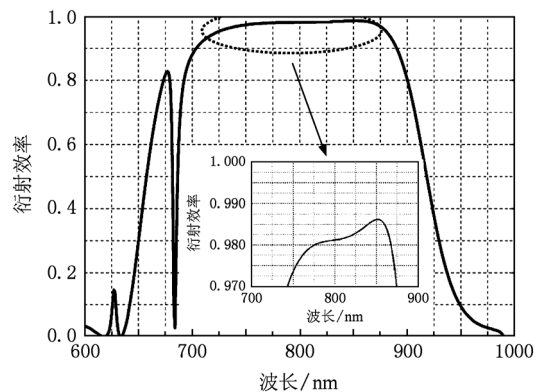


图 3 800 nm 宽光谱金属介质膜光栅光谱曲线

### 4.2. 工艺容差分析

宽光谱金属介质膜光栅的槽深、剩余厚度、占空比在制备过程中会存在一定的误差, 对光栅的衍射效率产生影响, 另外使用时入射角也会影响衍射效率的分布. 图 4(a), (b), (c), (d) 分别给出了 -1 级衍射效率随光栅槽深、剩余厚度、占空比以及入射角变化的等高图.

从图 4(a) 可以看出当固定光栅的其他结构参数, 槽深在 220—400 nm 之间变化时, 其 -1 级衍射

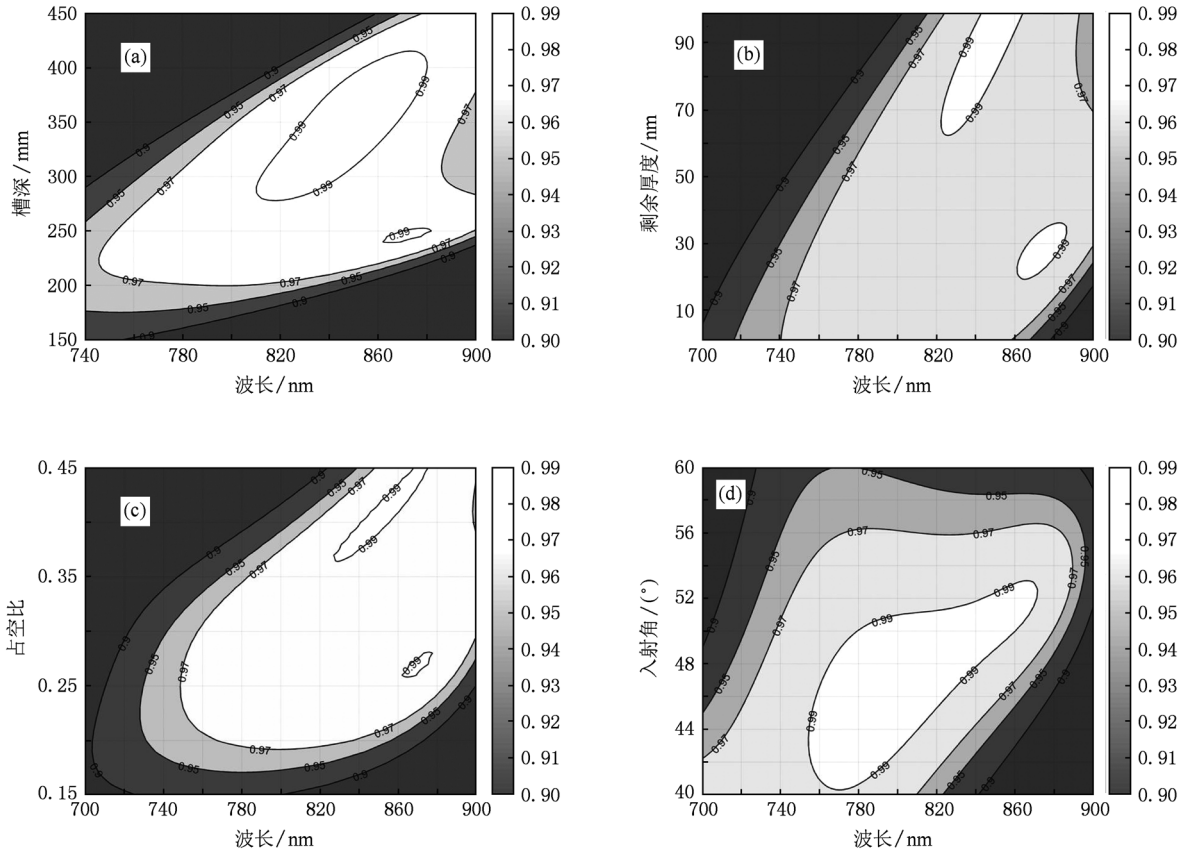


图4 中心波长为 800 nm 的金属介质膜光栅衍射效率随光栅参数的变化曲线

效率均优于 97% . 而当槽深在 280—380 nm 范围内变化时,其 -1 级衍射效率均优于 99% . 图 4(b) 说明剩余厚度在 0—100 nm 之间变化时对 -1 衍射效率的影响比较小. 因此 -1 级 97% 以上衍射效率的对槽深和剩余厚度的工艺容差相对较大. 图 4(c) 说明当金属介质膜光栅的占空比在 0.2—0.45 之间变化时,其 -1 级衍射效率优于 97% 的区域范围比较大,选择 0.26 的占空比同时考虑到了制备工艺. 图 4(d) 表示当入射角在 40°—54° 的范围变化时,在比较大的范围内其 -1 级衍射保持在 97% 以上,入射角的选择原则必须使衍射光学不能和入射光线重合. 由此可见,所设计的 800 nm 金属介质膜光栅的衍射效率和光谱带宽受光栅结构参数影响相对较小,满足光栅制备的工艺要求.

## 5. 中心波长为 1053 nm 的金属介质膜光栅设计

### 5.1. 光栅参数 $\{t_g, t_r, f, \theta\}$ 的优化

对于 CPA 系统,为了满足设计的要求,选定线

密度为 1480 线/mm,此时的周期是 675.7 nm. 选定参数从  $\{10 \text{ nm}, 10 \text{ nm}, 0.20, 56^\circ\}$  至  $\{450 \text{ nm}, 300 \text{ nm}, 0.50, 70^\circ\}$  变化,间隔为  $\{10 \text{ nm}, 10 \text{ nm}, 0.01, 1^\circ\}$ . 对 -1 级衍射效率和工作带宽大于 150 nm 作为评价函数进行优化,所获得的最优化结构参数为  $\{320 \text{ nm}, 10 \text{ nm}, 0.26, 56^\circ\}$ . 最优结构所对应的光谱曲线如图 5 所示. 当波长在 965 nm 到 1158 nm 的范围变化时,衍射效率均可以达到 97% 以上.

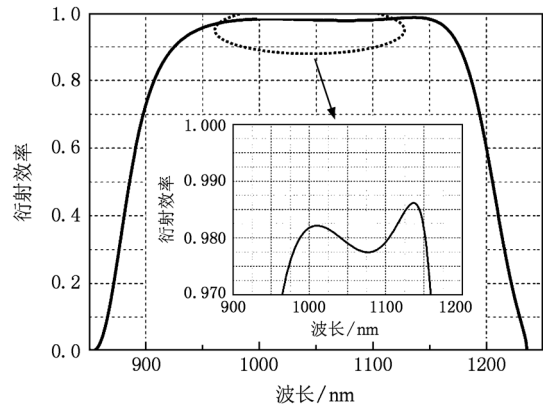


图5 中心波长为 1053 nm 的宽光谱金属介质膜光栅

根据光栅方程  $\sin\theta = \lambda_i/(2\Lambda)$  可知,当波长在 966 nm 到 1120 nm 的范围变化时, -1 级衍射角变化范围为  $45.6^\circ$ — $55.9^\circ$ ,能保证入射光线不受 -1 级衍射光的影响,因此衍射效率 97% 以上可用光谱带宽为 154 nm. 满足飞秒激光对带宽的要求.

### 5.2. 工艺容差分析

为分析中心波长为 1053 nm 的宽光谱金属介质膜光栅的工艺制备容差,图 6(a), (b), (c), (d) 分别给出了 -1 级衍射效率随光栅槽深、剩余厚度、占空比以及入射角变化的等高图. 从图 6(a) 可以看出当固定光栅的其他结构参数,槽深在 260—450 nm 之间变化时,其 -1 级衍射效率均优于 97%. 当要求 -1 级衍射效率均优于 99% 时,其槽深必须在

380—450 nm 范围内,从光栅的刻蚀工艺来看,难度相对较高. 图 6(b) 说明剩余厚度对 -1 级衍射效率的影响比较小. 因此 -1 级 97% 以上衍射效率的对槽深和剩余厚度的工艺容差相对较大. 图 6(c) 说明当金属介质膜光栅的占空比在 0.2—0.35 之间变化时,其 -1 级衍射效率优于 97% 的区域范围比较大. 图 6(d) 表示当入射角在  $40^\circ$ — $60^\circ$  的范围变化时,在比较大的范围内,其 -1 级衍射保持在 97% 以上,优化得到的  $56^\circ$  入射角能够获得宽的光谱带宽以及避免衍射光与入射光重合. 综合分析光栅结构参数影响,可见优化设计的 1053 nm 金属介质膜光栅的衍射效率和光谱带宽具有较大的工艺容差,满足光栅制备的工艺要求.

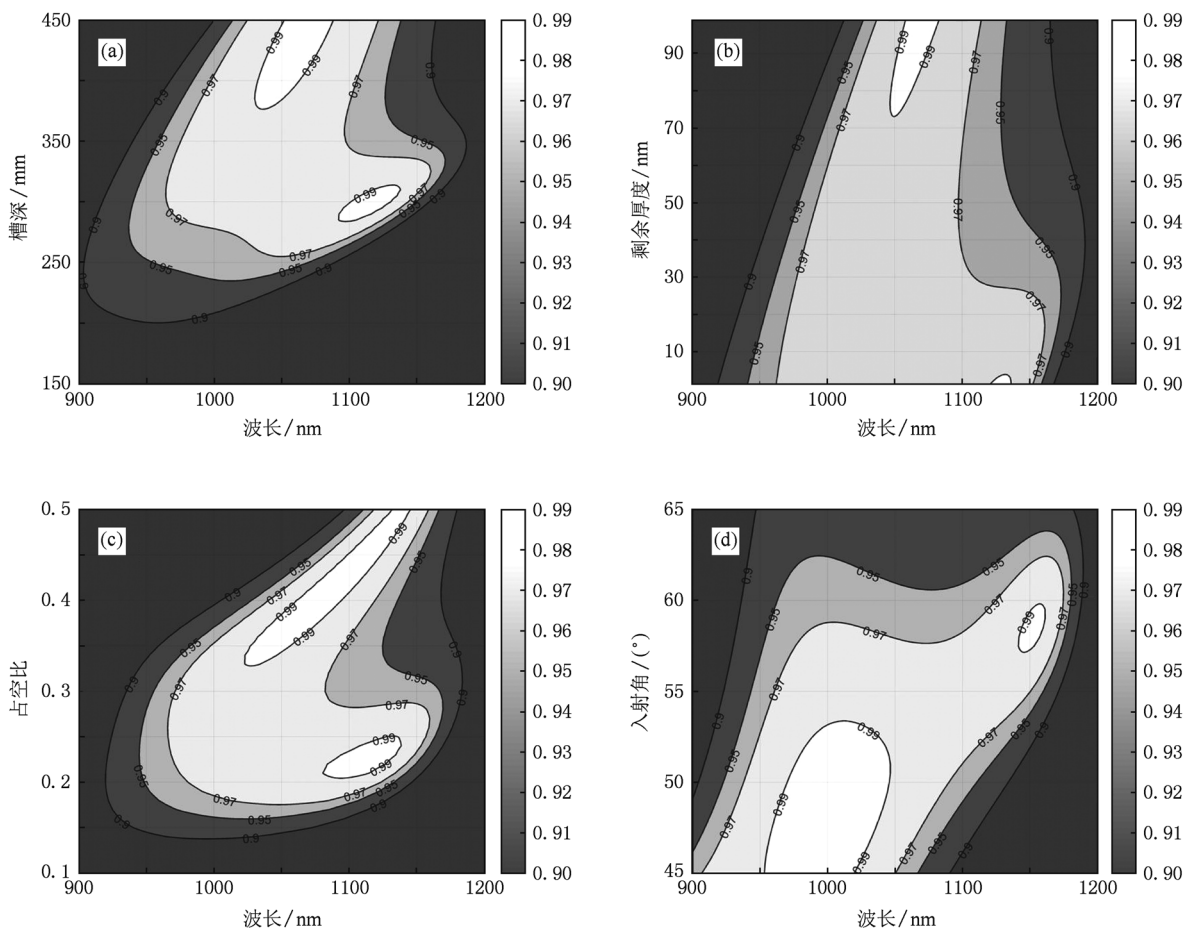


图 6 中心波长为 1053 nm 的金属介质膜光栅衍射效率随光栅参数的变化曲线

## 6. 结 论

本文基于严格耦合波理论建立了金属介质膜

光栅的衍射机理模型,提出了 -1 级衍射效率的带宽评价函数  $MF_1$ . 通过数值模拟和优化设计,获得了以 800 nm 和 1053 nm 为中心波长的宽光谱金属介质膜光栅,其 -1 级衍射效率优于 97% 的工作带

宽分别达到 130 nm 和 150 nm. 分析表明所设计的金属介质膜光栅的衍射效率和工作带宽均具有较大的工艺容差. 本文的研究对于设计和制备宽光谱

高衍射效率的飞秒激光用脉宽压缩光栅具有重要的意义.

- 
- [1] Wang C, Leng Y X, Liang X Y, Zhang C M, Xu Z Z 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 3091
- [2] Koichi Y K, Barty C P 2003 *Opt. Lett.* **28** 2402
- [3] Boyd R D, Britten J A, Decker D E 1995 *Appl. Opt.* **34** 169
- [4] 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]
- [5] Perry M D, Boyd R D, Britten J A, Decker D, Shore B W, Shannon C 1995 *Opt. Lett.* **20** 940
- [6] Kong W J, Yun M J, Sun X, Liu J H, Fan Z X, Shao J D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4904 (in Chinese) [孔伟金、云茂金、孙欣、刘均海、范正修、邵建达 2008 物理学报 **57** 4904]
- [7] 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]
- [8] Palmier S, Neauport J, Baclet N, Lavastre E, Dupuy G 2009 *Opt. Express.* **17** 20430
- [9] Wang J P, Jin Y X, Shao J D, Fan Z X 2010 *Opt. Lett.* **35** 187
- [10] Neauport J, Bonod N, Hocque S, Palmier S, Dupuy G 2010 *Opt. Express.* **18** 23776
- [11] Canova F, Uteza O, Chambaret J P, Flury M, Tonchev S, Fechner R 2007 *Opt. Express.* **15** 15324
- [12] Wang J P, Jin Y X, Ma J Y, Shao J D, Fan Z X 2010 *Appl. Opt.* **49** 2969
- [13] Moharam M G, Gaylord T K 1986 *J. Opt. Soc. Am.* **A 3** 1780
- [14] Moharam M G, Gaylord T K 1981 *Appl. Opt.* **20** 240
- [15] Moharam M G, Eric B G, Drew A P 1995 *J. Opt. Soc. Am.* **A 12** 1068
- [16] Moharam M G, Drew A P, Eric B G 1995 *J. Opt. Soc. Am.* **A 12** 1077
- [17] Kong W J, Shen Z C, Shen J, Shao J D, Fan Z X 2005 *Optik* **116** 325
- [18] Wei H B, Li L F 2003 *Appl. Opt.* **42** 6255

## Diffraction property of broadband metal multi-layer dielectric gratings based on rigorous coupled-wave analysis<sup>\*</sup>

Kong Wei-Jin<sup>†</sup> Wang Shu-Hao Wei Shi-Jie Yun Mao-Jin Zhang Wen-Fei Wang Xin-Jie Zhang Meng-Meng

(College of Physics Science, Qingdao University, Qingdao 266071, China)

(Received 7 April 2011; revised manuscript received 1 May 2011)

### Abstract

The rigorous coupled-wave analysis technique for describing the diffraction of metal multi-layer diffraction grating (MMDG) is built. Formulation for a stable and efficient numerical implementation of diffraction efficiency is presented for MMDG with TE polarization. With the merit function of the  $-1$  order diffraction efficiency higher than 97% and working bandwidth, the parameters of MMDG are optimized to achieve broadband. The bandwidths used for 800 nm and 1053 nm can be 130 nm and 150 nm respectively. The manufacture latitude and the effective incident angle for the optimized structure of MMDG are discussed. The optimized grating should be useful for chirped pulse compress.

**Keywords:** diffraction efficiency, metal multi-layer dielectric grating, rigorous coupled-wave analysis

**PACS:** 42.79.Dj, 42.40.Eq

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10804060, 10904080), the Taishan Scholars Program of Shandong Province of China and the Basic Research Program of Qingdao, China.

<sup>†</sup> E-mail: kwj@163.com