

透射光栅衍射效率的通用模型*

尚万里 杨家敏[†] 赵阳 朱托 熊刚

(中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2010年10月25日收到; 2010年11月27日收到修改稿)

在远场条件下采用夫朗和费衍射近似, 经过波动光学的计算推导, 得到透射光栅各级绝对衍射效率及相对衍射效率通用计算模型. 此模型可以用来计算任意栅线截面情况下透射光栅的衍射效率. 利用此模型, 分别建立了矩形、梯形和5边准梯形截面的衍射效率计算模型, 并对模型正确性进行了验证.

关键词: 透射光栅, 衍射效率, 数值模拟

PACS: 42.79Dj, 42.40.Lx, 07.85.Jy

1. 引言

透射光栅是一种重要的极紫外和软 X 射线光谱范围的色散元件^[1-5]. 由于其测谱范围宽, 谱分辨较好及与记录元件匹配简单等特点, 被广泛应用于软 X 射线能谱测量中, 在惯性约束聚变研究中, 它也是一种重要的测谱工具^[6-8]. 为了能用透射光栅进行软 X 射线能谱的定量测量, 必须知道其衍射效率, 包括绝对衍射效率和各级之间的相对衍射效率. 为此, 许多科研工作者对透射光栅进行过一系列的实验标定和理论模拟计算^[9-11].

对于光栅衍射效率计算模型最初采用的是矩形栅线截面模型. 1964年, Born 和 Wolf 利用矩形栅线结构对光栅衍射效率进行了模拟^[12]. 后来, Schnopper 等人在矩形栅线截面衍射效率模型的基础上, 考虑了 X 射线对栅线的穿透, 对其在斯坦福同步辐射源上标定的光栅衍射效率进行了模拟^[9]. Brauning 等人沿袭了 Schnopper 等人的光栅衍射效率计算方法, 只是将其中的矩形栅线截面替代为梯形栅线截面, 使其更加贴近电子沉积刻蚀得到的光栅栅线^[10]. 杨家敏等人继续扩展了 Brauning 等人的衍射效率模型, 提出了准梯形来代替梯形的计算方法^[13].

本文在远场条件下采用夫琅和费衍射近似, 经过波动光学的计算推导, 得到透射光栅各级绝对衍

射效率及相对衍射效率通用计算模型. 此模型可以用来计算任意栅线截面的光栅衍射效率.

2. 理论推导

2.1. 单一狭缝时的衍射

先分析点光源通过单一狭缝的情况, 再推广到很多条狭缝. 假定点光源位于宽度为 $2a$ 的狭缝中心垂直面内, 即垂直入射情况, 根据菲涅耳衍射理论, 在衍射像平面内一点 P 的光波为

$$u(P) = A \iint K \frac{\exp ik(D+B)}{DB} d\sigma, \quad (1)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda},$$

其中 A 是离光源单位距离处球面波的振幅, B 为点光源到子波的距离, D 为子波到 P 点的距离, λ 为光源光波长, k 为波数, K 为菲涅耳倾斜因子, 它是子波传播方向与原波面法线夹角 θ 的函数, 表示为

$$K = \frac{\cos\theta}{i\lambda}.$$

考虑一个特殊点, 即轴上的 P_0 点, 则

$$u(P_0) = \frac{A}{bb_0} \exp ik(b+b_0) \iint K \exp ik\beta d\sigma, \quad (2)$$

b 为狭缝到象面的距离, b_0 为点光源到狭缝的距离. 不考虑子波时, 从光源发出的光原封不动的传到 P_0

* 国家高技术研究发展计划(863)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: yjm70018@my-public.sc.cninfo.net

点时的振幅为

$$\begin{aligned}
 u_0 &= \frac{A}{b+b_0} \exp ik(b+b_0) \\
 &= \bar{f} \frac{A}{bb_0} \exp ik(b+b_0), \\
 \frac{1}{\bar{f}} &= \frac{1}{b} + \frac{1}{b_0}, \\
 \bar{f} &= \frac{bb_0}{b+b_0},
 \end{aligned} \tag{3}$$

而且对于轴上点, $\theta=0$, 令 $D=b+\beta$, 则

$$\begin{aligned}
 u(P) &= u(P_0) = \frac{u_0}{\bar{f}} \iint K \exp ik\beta d\sigma \\
 &= \frac{u_0}{i\lambda\bar{f}} \iint \cos\theta \exp ik\beta d\sigma \\
 &= \frac{u_0}{i\lambda\bar{f}} \iint \exp ik\beta d\sigma.
 \end{aligned} \tag{4}$$

以上是点光源透过狭缝的衍射积分基本公式, 取狭缝宽度方向为 x , 狭缝长度方向为 y , 且

$$\bar{x} = \frac{\bar{f}}{b}x, \bar{y} = \frac{\bar{f}}{b}y, D_0 = \frac{x^2+y^2}{2(b+b_0)},$$

则可得到

$$\begin{aligned}
 u(P) &= \frac{u_0 \exp ikD_0}{i\lambda\bar{f}} [C(x) + iS(x)] \\
 &\quad \times [C(y) + iS(y)],
 \end{aligned} \tag{5}$$

$$C(x) + iS(x) = \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \exp \frac{ik}{2\bar{f}} (\varepsilon - \bar{x})^2 d\varepsilon,$$

$$C(y) + iS(y) = \int_{\eta_1}^{\eta_2} \exp \frac{ik}{2\bar{f}} (\eta - \bar{y})^2 d\eta.$$

沿狭缝方向长度 η , 相对于入射光波长来说足够大, 因此积分上下限可取无穷大.

$$\begin{aligned}
 u(P) &= \frac{u_0 \exp ikD_0}{i\sqrt{2\lambda\bar{f}}} (1+i) \int_{-a}^a \exp \frac{ik}{2\bar{f}} \\
 &\quad \times (\varepsilon^2 - 2\varepsilon\bar{x} + \bar{x}^2) d\varepsilon.
 \end{aligned} \tag{6}$$

当 $\bar{f} \rightarrow \infty$, 即在光路中采用准直镜和望远镜, 或者在衍射空附近有透镜使得衍射成像在 P_0 点, 即 P_0 为共轭面上的像时, 称衍射为夫朗和费衍射. 此时可以省略掉上述积分中 ε 的二次项和其他高次项, 变得容易积分. 把有二次项和其他高次项积分的衍射称为菲涅耳衍射. 在我们的计算中按夫朗和费衍射处理:

$$\int_{-a}^a \exp \frac{ik}{2\bar{f}} (\varepsilon^2 - 2\varepsilon\bar{x} + \bar{x}^2) d\varepsilon$$

$$= \exp \frac{ik\bar{x}^2}{2\bar{f}} \int_{-a}^a \exp -\frac{ikx\varepsilon}{b} d\varepsilon,$$

$$u(P) = \frac{u_0 \exp ikD_0}{i\sqrt{2\lambda\bar{f}}} (1+i) \exp \frac{ik\bar{x}^2}{2\bar{f}} \int_{-a}^a \exp -\frac{ikx\varepsilon}{b} d\varepsilon. \tag{7}$$

2.2. 周期性光栅的衍射

以上是对单一狭缝的衍射积分, 下面求解周期分布的衍射积分. 在狭缝宽度无限细, 且平行光入射到多个狭缝上时, 会形成波面分割造成的多光束干涉. 设狭缝条数为 M , 进入光栅的入射光振幅相等为 A , 相位差为 δ . 则干涉光强度为

$$\begin{aligned}
 u(P) &= A \sum_{m=0}^M \exp im\delta = A \frac{1 - \exp iM\delta}{1 - \exp i\delta} \\
 &= A \exp \left[i(M-1) \frac{\delta}{2} \right] \left(\frac{\sin M \frac{\delta}{2}}{\sin \frac{\delta}{2}} \right).
 \end{aligned} \tag{8}$$

考虑狭缝宽度 $2a$, 则 P 点上的光波振幅为

$$\begin{aligned}
 U(P) &= \frac{u_0 \exp ikD_0}{i\sqrt{2\lambda\bar{f}}} (1+i) \exp \frac{ik\bar{x}^2}{2\bar{f}} \\
 &\quad \times \exp \left[i(M-1) \frac{\delta}{2} \right] \left(\frac{\sin M \frac{\delta}{2}}{\sin \frac{\delta}{2}} \right) \\
 &\quad \times \int_{-a}^a \exp -\frac{ikx\varepsilon}{b} d\varepsilon.
 \end{aligned} \tag{9}$$

光强为

$$\begin{aligned}
 I(P) &= |U(P)|^2 \\
 &= \frac{u_0^2}{\lambda\bar{f}} \left(\frac{\sin M \frac{\delta}{2}}{\sin \frac{\delta}{2}} \right)^2 \left| \int_{-a}^a \exp -\frac{ikx\varepsilon}{b} d\varepsilon \right|^2.
 \end{aligned} \tag{10}$$

当 $\sin \frac{\delta}{2} = 0$ 时, $\frac{\delta}{2} = \frac{lX}{2} = \frac{l}{2} \frac{kx}{b} = m\pi$, $I(P)$ 出现极大值, 即实现衍射分级:

$$I_{(m)} = I_0 \frac{1}{l^2} \left(\frac{\sin Mm\pi}{M \sin m\pi} \right)^2 \left| \int_{-a}^a \exp -\frac{ikx\varepsilon}{b} d\varepsilon \right|^2. \tag{11}$$

以上情况下栅线部分穿透为 0, 考虑栅线穿透, 以光瞳函数 $F(\varepsilon)$ 表示

$$I_{(m)} = I_0 \frac{1}{l^2} \left(\frac{\sin Mm\pi}{M \sin m\pi} \right)^2 \left| \int_{-a}^{l-a} F(\varepsilon) \exp -\frac{ikx\varepsilon}{b} d\varepsilon \right|^2. \tag{12}$$

实际上,当光强有最大值时,

$$\lim \frac{\sin Mm\pi}{M\sin m\pi} = 1.$$

另有 $\frac{kx}{b} = \frac{2m\pi}{l}$, 所以,

$$I_{(m)} = I_0 \frac{1}{l^2} \left| \int_{-a}^{l-a} F(\varepsilon) \exp - \frac{i2m\varepsilon\pi}{l} d\varepsilon \right|^2. \quad (13)$$

由此得到光栅衍射效率一般公式.

如果考虑光栅的支撑结构, 设其面积与光栅面积比值为 f , 则光栅衍射效率通用公式如下:

$$I_{(m)} = I_0(1-f) \frac{1}{l^2} \left| \int_{-a}^{l-a} F(\varepsilon) \exp - \frac{i2m\varepsilon\pi}{l} d\varepsilon \right|^2. \quad (14)$$

3. 不同栅线结构时的衍射效率模拟

3.1. 矩形栅线结构下的衍射效率计算模型

光瞳函数为

$$F(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & x \in [-a, a], \\ \exp ikz(\delta + i\beta), & x \in (a, l-a), \end{cases}$$

$$I_{(m)} = I_0 \frac{1}{l^2} \left| \int_{-a}^a \exp - \frac{i2mx\pi}{l} dx + \int_a^{l-a} \exp ikz(\delta + i\beta) \exp - \frac{i2mx\pi}{l} dx \right|^2. \quad (15)$$

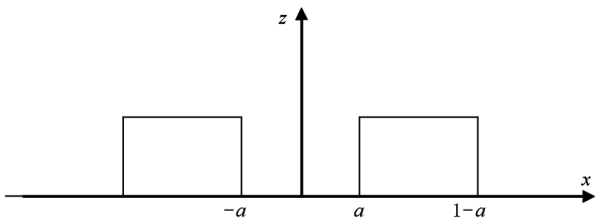


图1 矩形栅线结构

$1 - \delta, \beta$ 分别为金栅线材料光学常数的实部和虚部, $k = 2\pi/\lambda$ 为光波波数.

1) $m = 0$ 时,

$$I_{(0)} = I_0 \frac{1}{l^2} \left| \int_{-a}^a dx + \exp ikz(\delta + i\beta) \int_a^{l-a} dx \right|^2, \\ = I_0 \frac{1}{l^2} |2a + \exp ikz(\delta + i\beta)(l - 2a)|^2. \quad (16)$$

2) $m \neq 0$ 时,

$$I_{(m)} = I_0 \left(\frac{\sin 2am\pi/l}{m\pi} \right)^2 |1 - \exp ikz(\delta + i\beta)|^2. \quad (17)$$

3.2. 梯形栅线结构下的衍射效率计算模型

$$F(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & x \in [x_0, x_1], \\ \exp ik[y_1 + c_1(x - x_1)](\delta + i\beta), & x \in (x_1, x_2], \\ \exp ik y_2(\delta + i\beta), & x \in (x_2, x_3], \\ \exp ik[y_3 + c_3(x - x_3)](\delta + i\beta), & x \in (x_3, l]. \end{cases}$$

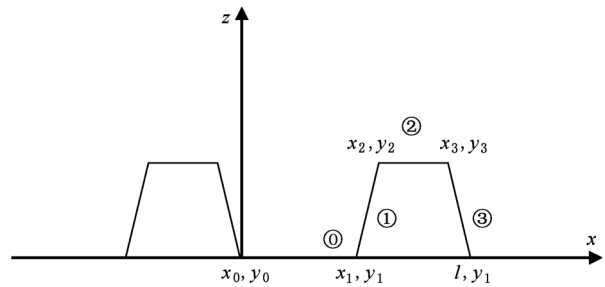


图2 梯形栅线结构

$$I_{(m)} = I_0 \frac{1}{l^2} \left| \int_{x_0}^{x_1} \exp - \frac{i2mx\pi}{l} dx + \int_{x_1}^{x_2} \exp ik[y_1 + c_1(x - x_1)](\delta + i\beta) \times \exp - \frac{i2mx\pi}{l} dx + \int_{x_2}^{x_3} \exp ik y_1(\delta + i\beta) \exp - \frac{i2mx\pi}{l} dx + \int_{x_3}^l \exp ik[y_3 + c_3(x - x_3)](\delta + i\beta) \times \exp - \frac{i2mx\pi}{l} dx \right|^2, \quad (18)$$

即

$$I_m = I_0 \frac{1}{l^2} \left| \sum_{n=0}^3 f_{n,m} \right|^2, \quad (19)$$

c 为每段栅线的斜率, $f_{n,m}$ 为单个周期中第 n 段栅线截面对衍射光波振幅的贡献.

1) $m = 0$ 时, 当栅线斜率为 0, 即 $n = 0$ 或 2 时,

$$f_{n,0} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \exp ikz_n(\delta + i\beta) dx \\ = \exp ikz_n(\delta + i\beta)(x_{n+1} - x_n). \quad (20)$$

当栅线斜率不为0时, $z_n = y_n + c_n(x - x_n)$,

$$f_{n,0} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \exp ikz_n (\delta + i\beta) dx$$

$$= \frac{\exp[-k\beta(y_n - c_n x_n) + ik\delta(y_n - c_n x_n)]}{-k\beta c_n + ik\delta c_n}$$

$$\times [\exp(-k\beta c_n x_{n+1} + ik\delta c_n x_{n+1}) - \exp(-k\beta c_n x_n + ik\delta c_n x_n)]. \quad (21)$$

2) $m \neq 0$ 时, 对于积分项里的 $\exp -i \frac{2m\pi x}{l}$, 亦

可写作 $\exp i \frac{2m\pi x}{l}$, 表示负衍射级, 对绝对值大小没有影响.

$$f_{n,0} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \exp ikz_n (\delta + i\beta) \exp i \frac{2m\pi x}{l} dx$$

$$= \frac{\exp[-k\beta(y_n - c_n x_n) + ik\delta(y_n - c_n x_n)]}{-k\beta c_n + i(k\delta c_n + \frac{2m\pi}{l})}$$

$$\times [\exp(-k\beta c_n x_{n+1} + i(k\delta c_n + \frac{2m\pi}{l})x_{n+1}) - \exp(-k\beta c_n x_n + i(k\delta c_n + \frac{2m\pi}{l})x_n)]. \quad (22)$$

3.3.5 边准梯形栅线结构下的衍射效率计算模型

依然将栅线结构对衍射有贡献部分分为4段.

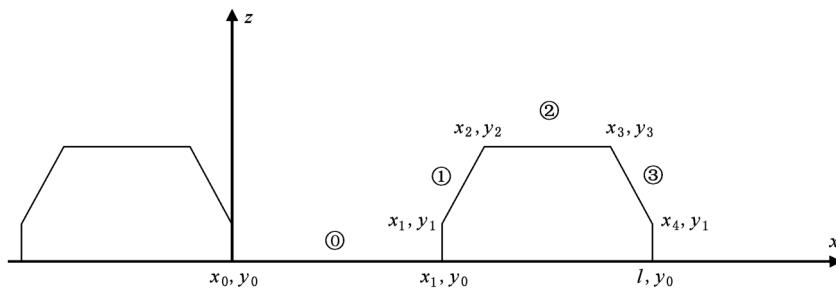


图3 5边准梯形栅线结构

2) $m \neq 0$ 时,

$$f_{n,0} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \exp ikz_n (\delta + i\beta) \exp i \frac{2m\pi x}{l} dx$$

$$= \frac{\exp[-k\beta(y_n - c_n x_n) + ik\delta(y_n - c_n x_n)]}{-k\beta c_n + i(k\delta c_n + \frac{2m\pi}{l})}$$

$$\times [\exp(-k\beta c_n x_{n+1} + i(k\delta c_n + \frac{2m\pi}{l})x_{n+1}) - \exp(-k\beta c_n x_n + i(k\delta c_n + \frac{2m\pi}{l})x_n)]. \quad (26)$$

为了更精确的分析栅线结构, 可以继续扩展栅

与梯形结构相比, 差别在于光瞳函数中 z 不同.

$$F(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & x \in [x_0, x_1], \\ \exp ik[y_1 + c_1(x - x_1)](\delta + i\beta), & x \in (x_1, x_2], \\ \exp ik y_2 (\delta + i\beta), & x \in (x_2, x_3], \\ \exp ik[y_3 + c_3(x - x_3)](\delta + i\beta), & x \in (x_3, l], \end{cases}$$

$$I_m = I_0 \frac{1}{l^2} \left| \sum_{n=0}^3 f_{n,m} \right|^2. \quad (23)$$

1) $m = 0$ 时, 当栅线斜率为0, 即 $n = 0$ 或 2 时,

$$f_{n,0} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \exp ikz_n (\delta + i\beta) dx$$

$$= \exp ikz_n (\delta + i\beta) (x_{n+1} - x_n). \quad (24)$$

当栅线斜率不为0时, $z_n = y_n + c_n(x - x_n)$,

$$f_{n,0} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \exp ikz_n (\delta + i\beta) dx$$

$$= \frac{\exp[-k\beta(y_n - c_n x_n) + ik\delta(y_n - c_n x_n)]}{-k\beta c_n + ik\delta c_n}$$

$$\times [\exp(-k\beta c_n x_{n+1} + ik\delta c_n x_{n+1}) - \exp(-k\beta c_n x_n + ik\delta c_n x_n)]. \quad (25)$$

线结构到7边准梯形^[14], 9边准梯形, 11边准梯形等. 模型与公式可以类推得到.

4. 模型正确性的验证

为了验证通用(14)式的正确性以及用其建立的各种栅线截面衍射效率计算模型的有效性, 我们将矩形及5边准梯形模型的计算结果与网络参考值^[15]进行了对比. 矩形栅线截面模型中, 取占空比为0.35, 光栅栅线厚度为0.4 μm , f 为0. 在5

边准梯形栅线截面模型中,选取 $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ 两点十分接近, $(x_3, y_3), (x_4, y_1)$ 两点十分接近的栅线截面,此时栅线截面近似为矩形. 同样取占空比为0.35,光栅栅线厚度为 $0.4 \mu\text{m}$, f 为0,计算得到的零级到三级绝对衍射效率,与网络给出的同样栅线截面条件下的零级到三级绝对衍射效率进行了对比. 图4(a)为矩形栅线截面模型与网络参

考值的对比,图4(b)为5边准梯形栅线截面模型与网络参考值的对比. 可以看到,通过(14)式所建立的矩形栅线截面模型以及5边准梯形栅线截面模型的计算结果与网络参考值很好地符合. 这证明了通过(14)式所建立的两模型的正确性,同时也证明了上述推导得到的通用(14)式的正确性.

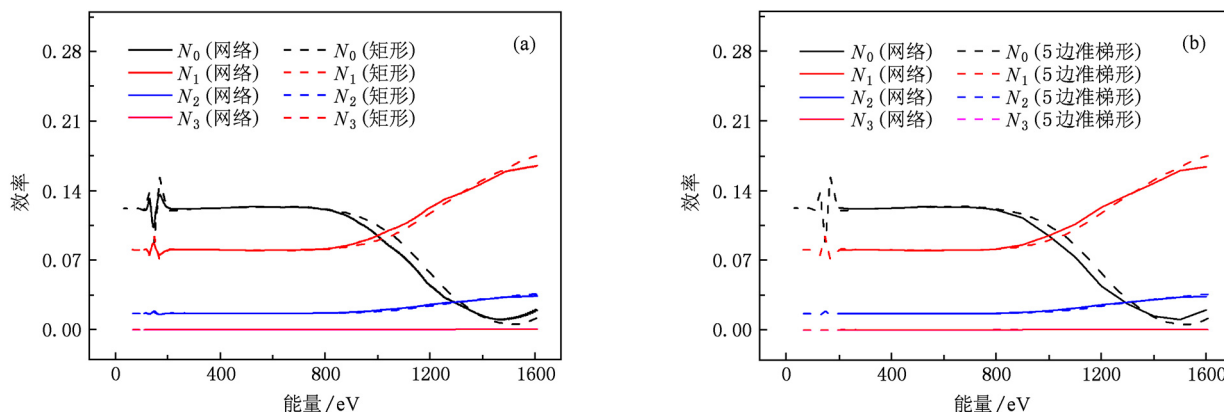


图4 (a)矩形模型所得结果与网络参考值的对比;(b)5边准梯形模型所得结果与网络参考值的对比($a/d=0.35, z=0.4 \mu\text{m}$)

5. 结 论

针对于目前的几种透射光栅衍射效率计算模型,在远场条件下采用夫琅禾费衍射近似,经过波动光学的计算推导,得到透射光栅各级绝对衍射

率及相对衍射效率通用计算模型. 此模型不但包括了目前几种透射光栅衍射效率计算模型,而且可以适用于任何几何形状的光栅截面衍射效率计算,为将来更加丰富的光栅制作积累了理论基础. 通过矩形和5边准梯形的栅线截面模型,验证了此通用透射光栅衍射效率计算模型的正确性.

[1] Dijkstra J H, Lantwaard L J 1975 *Opt. Commun.* **15** 300
 [2] Brauning H, Kraus H, Dangschat H, Beuermann K P, Predehl P, Trumper J 1979 *Appl. Opt.* **18** 3502
 [3] Arakawa E T, Caldwell P J 1980 *Nucl. Instrum. & Meth.* **172** 293
 [4] Hawryluk A M 1981 *J. Vac. Sci. Tech.* **19** 897
 [5] Bionta R M 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 725
 [6] Eidmann K, Kishimoto T, Herrmann P, Mizui J, Pakula R, Sigel R, Witkowski S 1986 *Laser & Part. Beams.* **4** 521
 [7] Mochizuki T, Yabe T, Okada K, Hamada M, Ikeda N, Kiyokawa S, Yamanaka C 1986 *Phys. Rev. A* **33** 525
 [8] Tsakiris G D, Herrmann P, Pakula R, Schmalz S, Sigel R, Witkowski S 1986 *Europhys. Lett.* **2** 213
 [9] Schnopper H W, Van Speybroeck L P, Delvaille J P, Epstein A, Kallne E, Bachrach R Z, Dijkstra J, Lantward L 1977 *Appl. Opt.* **16** 1088
 [10] Brauning H, Predehl P, Beuermann K P 1979 *Appl. Opt.* **18** 368
 [11] Li Y L, Bai W A, Chen S S, Xu Z Z 1989 *Acta Optica Sinica* **9** 550 (in Chinese) [李跃林、白文安、陈时胜、徐至展 1989 光学学报 **9** 550]
 [12] Born M, Wolf E 1964 *Principles of Optics* (New York: Macmillan) Chap. 8
 [13] Yang J M, Ding Y N, Cao L F, Ding Y K, Yang G H, Zhen Z J, Wang Y M, Zhang W H, Cui M Q, Zhu P P, Zhao Y D, Li G 2000 *High Power Laser and Particle Beams* **12** 723 (in Chinese) [杨家敏、丁耀南、曹磊峰、丁永坤、杨国洪、郑志坚、王耀梅、张文海、崔明启、朱佩平、赵屹东、黎刚 2000 强激光与粒子束 **12** 723]
 [14] Shang W L, Zhu T, Xiong G, Zhao Y, Zhang W H, Yi R Q, Kuang L Y, Cao L F, Gao Y L, Yang J M, Zhao Y D, Cui C W, Zheng L, Han Y, Zhou K J, Ma C Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 320 (in Chinese) [尚万里、朱托、熊刚、赵阳、张文海、易荣清、况龙钰、曹磊峰、高宇林、杨家敏、赵屹东、崔明启、郑雷、韩勇、周克瑾、马陈燕 2011 物理学报 **60** 320]
 [15] <http://www-cxro.lbl.gov/>

General model of transmission grating diffraction efficiency^{*}

Shang Wan-Li Yang Jia-Min[†] Zhao Yang Zhu Tuo Xiong Gang

(*Research Center of Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

(Received 25 October 2010; revised manuscript received 27 November 2010)

Abstract

In the Fraunhofer diffraction approximation, a general model for calculating the transmission grating diffraction efficiency is deduced from wave optics under the condition of far field. Diffraction efficiency of transmission grating with any cross section can be obtained from such a general model. Rectangular, trapezoidal, 5-side quasi-trapezoidal and 7-side quasi-trapezoidal cross section calculation method are established with this model. And two examples are given to demonstrate the correctness of this general model.

Keywords: transmission grating, diffraction efficiency, calculational simulation

PACS: 42.79.Dj, 42.40.Lx, 07.85.Jy

^{*} Project supported by the National High Technology Program 863 of China.

[†] Corresponding author. E-mail: yjm70018@my-public.sc.cninfo.net