

基于严格耦合波理论的多层介质膜光栅 衍射特性分析*

孔伟金^{1)†} 云茂金¹⁾ 孙欣¹⁾ 刘均海¹⁾ 范正修²⁾ 邵建达²⁾

1) 青岛大学物理科学学院, 青岛 266071)

2) 中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

(2007 年 8 月 27 日收到, 2008 年 4 月 15 日收到修改稿)

基于严格耦合波理论建立了多层介质膜光栅的衍射机理模型, 给出了 TE 波自准直条件下多层介质膜光栅衍射效率的表达式. 以 -1 级衍射效率为评价函数, 分析了表面浮雕结构分别为 HfO_2 和 SiO_2 材料的介质膜光栅获得衍射效率优于 96% 的结构参数. 数值计算表明, 顶层材料为 HfO_2 的介质膜光栅具有更宽的结构选择范围. 最后分析了介质膜光栅的制备容差和允许的入射角度范围.

关键词: 衍射效率, 多层介质膜光栅, 严格耦合波理论

PACC: 4225, 4225B, 4278D

1. 引 言

随着激光技术的发展, 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^[1]. 啁啾脉冲放大(chirped-pulse amplification, 简记为 CPA)技术是提高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, 用来展宽和压缩激光脉冲的光栅必须具有尽可能高的衍射效率. 另外, 由于光栅使用在高功率激光系统中, 每个光栅必须具有尽可能高的抗激光损伤能力^[2]. 虽然传统的镀金光栅可以达到 95% 的衍射效率, 但是由于金属具有较强的吸收特性, 文献报道其最高的抗激光损伤阈值在皮秒量级^[3]为 0.4 J/cm^2 . 和镀金光栅相比, 多层介质膜光栅(multi-layer dielectric grating)由于几乎没有吸收而具有较高的抗激光损伤阈值^[4]. 而且, 多层介质膜光栅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^[5]. 近年来, 随着全息光栅制备工艺的发展, 多层介质膜光栅已经逐步取代镀金光栅而广泛应用于 CPA 技术中^[6,7].

本文采用严格耦合波理论建立介质膜光栅获得高衍射效率的模型, 分析介质膜光栅中多层介质膜

和表面浮雕结构之间相互耦合的机制, 研究了多层介质膜光栅的衍射行为. 分别给出了表面浮雕结构为 HfO_2 和 SiO_2 的介质膜光栅其 -1 级获得高衍射效率的结构参数, 最后分析了光栅结构参数的工艺容差. 这些结果对介质膜光栅的设计和制备提供了理论指导.

2. 理论模型

多层介质膜光栅的基本结构如图 1 所示, 它是由基底、多层介质膜和表面浮雕结构组成^[6]. 基底一般为 K9 玻璃或石英玻璃, 多层介质膜是由高低折射率材料沉积而成, 表面浮雕结构可以刻蚀在高折射率材料上, 也可以刻蚀在低折射率材料上. 为减小电场在高低折射率界面的增强, 介质膜光栅的基础高反射膜一般采取 $(\text{H}2\text{L})^n\text{H}$ 结构形式, 其中 H 和 L 分别代表光学厚度为 $\lambda/4$ 的高折射率材料和低折射率材料^[7]. 建立如图 1 所示的坐标系, 设表面浮雕结构的截面在 $x-z$ 平面内, 光栅矢量沿 x 方向, 光栅的周期为 d , 占空比为 f , 光栅的槽深为 h .

严格耦合波理论(rigorous coupled-wave analysis)是利用 Maxwell 方程组和边界条件对具有周期型结

* 国家自然科学基金(批准号: 30376040)和山东省教育厅科研基金(批准号: J06P02)资助的课题.

† E-mail: kwjdsd@163.com

构的光栅进行精确求解的一种方法^[8],其准确程度取决于场的空间谐波级数展开数目和能量守恒^[9].但是倏逝波的存在会产生病态的矩阵^[10],为了解决算法的稳定性问题, Moharam 等^[11]采用增强透射矩阵的方法来消除浮雕结构光栅数值计算的不稳定性,使得该方法数值计算稳定、收敛性好.本文建立的多层介质膜光栅的衍射理论模型是基于严格耦合波理论和增强透射矩阵方法.

如图 1 所示,将多层介质膜光栅空间分为四个区域,其中区域 1 为入射区,区域 2 为矩形光栅区;区域 3 为多层介质膜区域,该区域为高低折射率交替的介质膜,将每层介质膜视为占空比 $f = 1$,周期和表面浮雕结构相同的光栅;区域 4 为光栅出射区.介质膜光栅的严格耦合波理论分析按照如下步骤进行求解:首先,在每一分层中构建耦合波方程.其次,逐层应用电场和磁场边界连续条件,将各个分层的电场和磁场通过耦合波方程联系起来.最后,求解反射和透射的衍射波振幅.

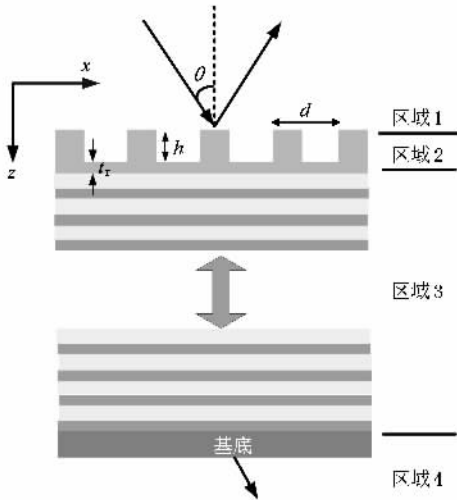


图 1 多层介质膜光栅的基本结构

利用增强透射矩阵中矩阵求逆分解的方法可以消除数值计算的不稳定和数值溢出^[11],进而求出介质膜光栅的反射和透射振幅系数,介质膜光栅的第 i 级衍射的衍射效率为

$$\eta_{ri} = R_i R_i^* \operatorname{Re} \left(\frac{k_{1,zi}}{k_0 n_1 \cos \theta} \right),$$

式中 R_i 是第 i 级反射的衍射光振幅, $k_{1,zi}$ 是光在入射介质中 z 方向的波矢量, k_0 是入射光在真空中的波矢量, n_1 是入射介质的折射率, θ 是入射角.

3. 数值计算和衍射特性分析

多层介质膜光栅的结构参数主要有周期 d 、槽深 h 、占空比 f 和剩余厚度 t_r (顶层刻蚀浮雕结构后的剩余厚度),其衍射效率与这些结构参数的选取密切相关.以下的数值分析以作者设计的多层介质膜 H3I(H2L)H0.5L 为基础膜系^[12](这里的 H 和 L 分别表示光学厚度为 $\lambda/4$ 的 HfO_2 和 SiO_2 材料,折射率分别为 1.96 和 1.46),采用光栅的 -1 级衍射效率作为评价函数进行数值分析.考虑到介质膜光栅在 CPA 中的应用,所设计的介质膜光栅的偏振态为 TE 模式,基本参数选取如下:使用波长为 1053 nm,周期为 675.7 nm (1480/mm),入射角度为 Littrow 条件 (51.2°).当光栅的周期和使用波长满足 $2/3 < \lambda/d < 2$ 关系时,设计的光栅只会出现 0 级和 -1 级衍射光^[13].

3.1. 顶层为 HfO_2 的介质膜光栅

首先考虑表面浮雕结构为 HfO_2 的情况,图 2 给出了顶层 HfO_2 的厚度为 200、250 和 300 nm 时,多层介质膜光栅 -1 级衍射效率随占空比 f 和槽深 h 的变化关系.图 2 中实线包络的区域表示衍射效率优于 96%,虚线包络的区域表示衍射效率优于 99%.从图 2 可以看出,当顶层厚度不变时,对于特定占空比的介质膜光栅,其 -1 级衍射效率随槽深的增加而增加;而当顶层厚度不变时,对于特定槽深的介质膜光栅,其 -1 级衍射效率只能在一定的占空比范围内取得最大值.图 3 给出的是当介质膜光栅的占空比为 0.35 时,介质膜光栅 -1 级衍射效率随槽深和剩余厚度的变化关系,其中标有 0.96 曲线包络的区域表示衍射效率优于 96%,标有 0.99 曲线包络的区域表示衍射效率优于 99%.从图 3 可以看出,衍射效率随剩余厚度的变化呈一定的周期性分布,这对于光栅的制备具有一定的宽容度.图 3 中的直线表示顶层厚度不同时槽深与剩余厚度的关系,三条直线分别对应于顶层厚度为 200、250 和 300 nm.从图 3 还可以看出,当顶层 HfO_2 厚度一定时,槽深和剩余厚度之和始终落在该直线上.而且当顶层厚度越大时,获得相同的衍射效率所需的光栅槽深 h 值越大.

在优化设计光栅的基本结构时,考虑到顶层厚

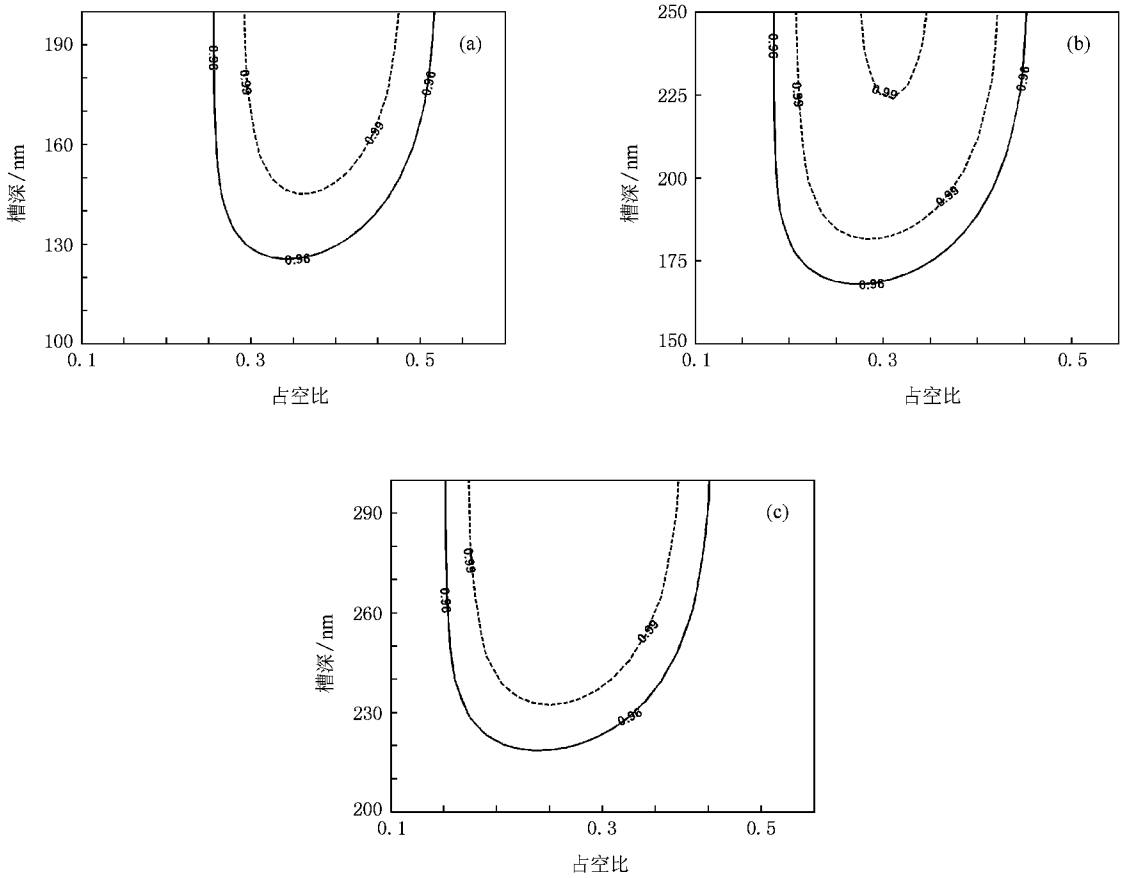


图2 顶层为 HfO_2 的多层介质膜光栅 - 1 级衍射效率与占空比和槽深的关系 (a)顶层 HfO_2 厚度为 200 nm (b)顶层 HfO_2 厚度为 250 nm (c)顶层 HfO_2 厚度为 300 nm

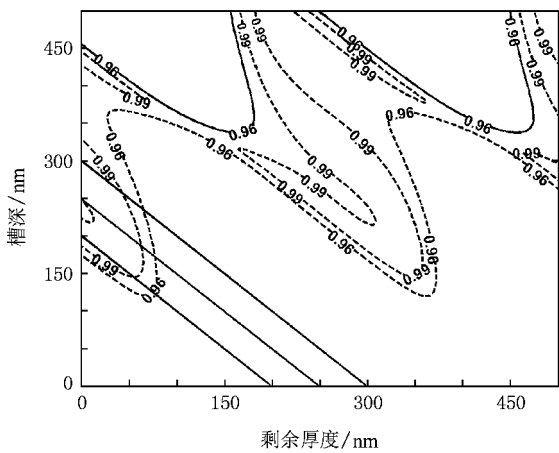


图3 多层介质膜光栅 - 1 级衍射效率与槽深和顶层 HfO_2 刻蚀剩余厚度的关系

度的沉积和光栅刻蚀工艺,易选择较薄的顶层 HfO_2 厚度和较浅的光栅槽. 根据以上分析,当顶层为 HfO_2 的介质膜光栅结构参数取表 1 所列的值时,其 - 1 级衍射效率可以达到 99.5%.

3.2. 顶层为 SiO_2 的介质膜光栅

由以上分析可知,介质膜光栅 - 1 级衍射效率与顶层材料折射率相关. 同时,已有的研究表明 SiO_2 材料作为高反射膜的最外层可以提高其抗激光损伤阈值^[14]. 为此,下面对顶层为 SiO_2 材料的介质膜光栅衍射特性进行分析,其中多层介质膜同样采用 H3L(H2L)H0.5L 的基本结构. 图 4 给出了顶层 SiO_2 的厚度为 700, 800 和 900 nm 时,介质膜光栅 - 1 级衍射效率随槽深和占空比的变化关系.

表 1 顶层为 HfO_2 的介质膜光栅结构参数取值

使用波长/nm	入射角($^\circ$)	光栅周期/nm	槽深/nm	剩余厚度/nm	占空比
1053	51.2	675.7	180	40	0.35

图 4 中实线包络的区域表示衍射效率优于 96% ,虚线包络的区域表示衍射效率优于 99% .从图 4 可以看出,衍射效率的变化规律基本上和顶层为 HfO_2 的介质膜光栅相同,对于给定的占空比,衍射效率随槽深的增加而增加.图 5 给出了占空比取 0.35 时,顶层为 SiO_2 的介质膜光栅 -1 级衍射效率随槽深和 SiO_2 层剩余厚度的变化关系.由图 5 可以看出,在占空比一定的条件下介质膜光栅 -1 级衍射效率随剩余厚度和槽深呈准周期性变化.顶层为

SiO_2 的介质膜光栅和顶层为 HfO_2 的介质膜光栅相比,为了获得相同的衍射效率,后者要求具有更深的光栅槽和剩余厚度.图 5 中的三条直线表示槽深与剩余厚度的关系,分别对应顶层 SiO_2 的厚度为 700,800 和 900 nm.由图 5 可见,为获得 96% 以上的衍射效率,介质膜光栅的槽深必须达到 500 nm 以上,获得高衍射效率的区域范围(图 5 中的实线包络的区域)相对狭窄,表明其工艺容差范围相对较小.

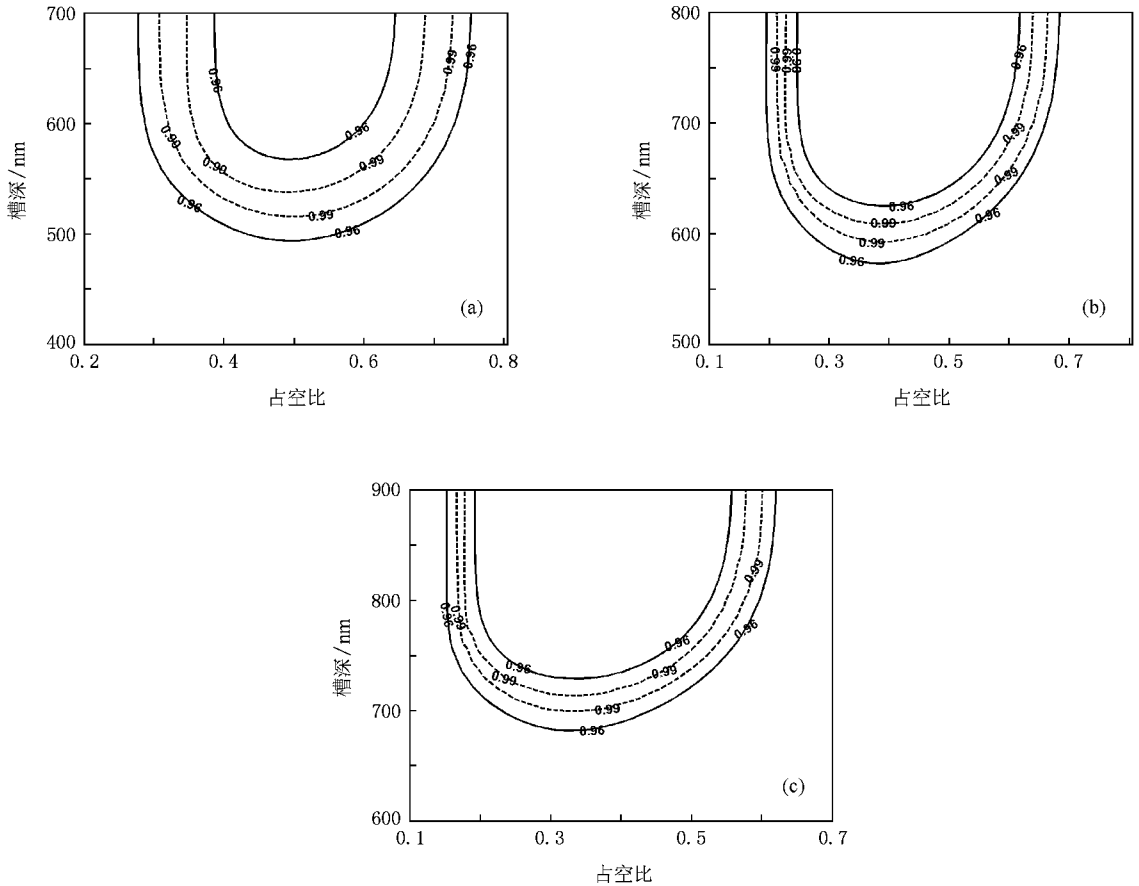


图 4 顶层为 SiO_2 的多层介质膜光栅 -1 级衍射效率与占空比和槽深的关系 (a)顶层 SiO_2 厚度为 700 nm (b)顶层 SiO_2 厚度为 800 nm (c)顶层 SiO_2 厚度为 900 nm

虽然为获得高的衍射效率,顶层为 SiO_2 的光栅需要刻蚀较深的槽,但是与 HfO_2 相比, SiO_2 材料易于沉积和刻蚀^[15].考虑到实际的制备和刻蚀工

艺,对于顶层为 SiO_2 的介质膜光栅选择如表 2 所列的光栅参数值时,其衍射效率可以达到 99.5% 以上.

表 2 顶层为 SiO_2 的介质膜光栅结构参数取值

使用波长/nm	入射角($^\circ$)	光栅周期/nm	槽深/nm	剩余厚度/nm	占空比
1053	51.2	675.7	600	200	0.35

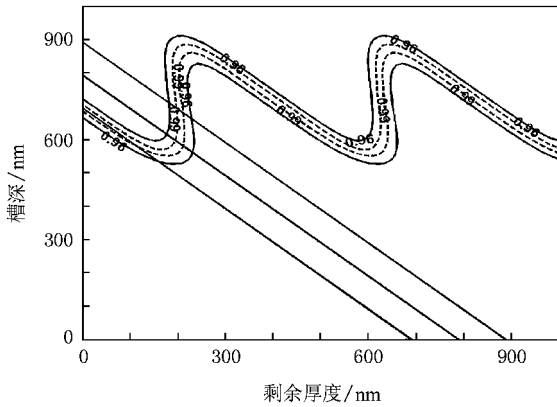


图5 多层介质膜光栅-1级衍射效率与槽深和顶层 SiO_2 的剩余厚度的关系

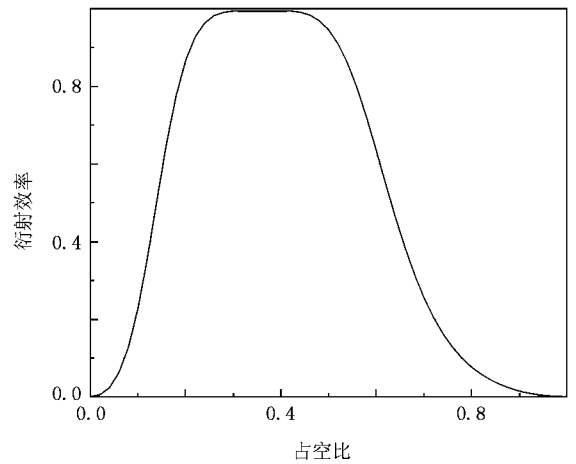


图6 顶层为 HfO_2 的介质膜光栅-1级衍射效率与占空比的关系

4. 工艺容差分析

介质膜光栅的制备需要经过多层介质膜的沉积、全息干涉曝光和显影以及离子束刻蚀等工艺.在制备过程中由于控制精度和工艺流程等因素,使得制备的介质膜光栅和优化设计的结构参数相比可能具有以下几个方面的偏差:光栅占空比的偏差、光栅周期的偏差、光栅槽形结构的变化(由矩形变化为梯形)、光栅槽深和剩余厚度的偏差.由上述讨论可知,槽深和剩余厚度的变化对衍射效率的影响最小.另外,所设计的介质膜光栅使用在自准直(Littrow角)条件下,其衍射效率也要受到入射角的影响.

由于顶层为 HfO_2 的介质膜光栅获得高衍射效率所需的槽较浅,下面以顶层为 HfO_2 的介质膜光栅(结构参数如表1所列)为例进行工艺容差分析.该分析对介质膜光栅的制备和使用具有指导意义.

4.1. 光栅占空比对衍射效率的影响

图6给出了介质膜光栅-1级衍射效率随占空比的变化关系.从图6可以看出,介质膜光栅-1级衍射效率随占空比的增加而先增加后减小,在占空比为0.3—0.42区域内变化相对缓和且达到最大值.该变化规律说明表1中优化设计的结构参数对占空比的变化具有较大的工艺容差.

4.2. 光栅周期对衍射效率的影响

图7所示为介质膜光栅-1级衍射效率随周期的变化关系.由图7可以看出(1)当介质膜光栅的周期小于592 nm时,其-1级衍射效率为零,这是由

于光栅的周期非常小以至于光栅的-1级衍射已经不存在^[13].(2)当介质膜光栅的周期大于592 nm而小于885 nm时,其-1级衍射效率先增加后减小,且在675.7 nm处达到最大值.(3)当介质膜光栅的周期大于885 nm时,其-1级衍射效率呈振荡分布,这是由于在该范围内的导模共振(guided-mode resonance)所致^[16].(4)-1级衍射效率对光栅的周期变化相对敏感,为获得优于96%的衍射效率,光栅的周期必须控制在650—690 nm之间.

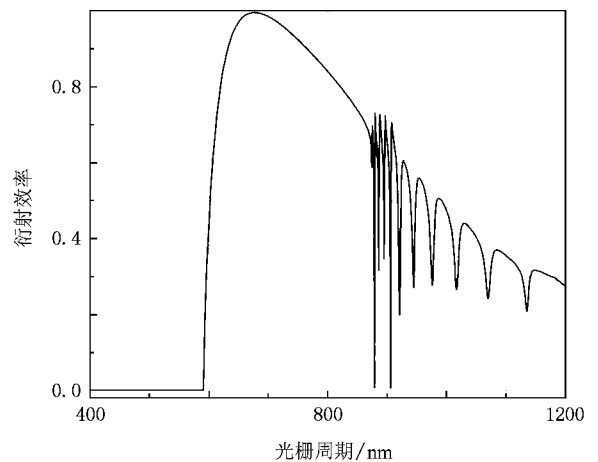


图7 顶层为 HfO_2 的介质膜光栅-1级衍射效率随光栅周期的变化关系

4.3. 光栅槽形结构对衍射效率的影响

实际利用离子束刻蚀所制备的介质膜光栅槽形结构为梯形,图8(a)给出了不同梯形底角的介质膜

光栅 -1 级衍射效率随波长的变化关系,其中 90° 的底角对应于矩形介质膜光栅.从图 8 可以看出 (1) 随着梯形角度的增加,光谱曲线的带宽逐渐增加,其衍射效率也逐渐增加.(2) 尽管具有不同梯形底角的介质膜光栅所对应的光谱带宽和衍射效率不同,但是在 $937, 952, 1135, 1149$ 和 1184 nm 处出现相同的变化拐点.(3) 梯形介质膜光栅和矩形介质膜光栅相比,具有相同光栅参数(周期、槽深、占空比、剩余厚度)的梯形光栅其衍射效率比矩形光栅要低,当梯形底角大于 80° 时,梯形光栅的衍射效率和矩形介质膜光栅的衍射效率基本接近.因此对于梯形介质膜光栅,为了获得优于 99% 的衍射效率,必须重新对其结构参数进行优化.图 8(b) 说明在表 1 所列的结构参数条件下,要获得 96% 以上的衍射效率,梯形介质膜光栅的底角必须大于 70° .

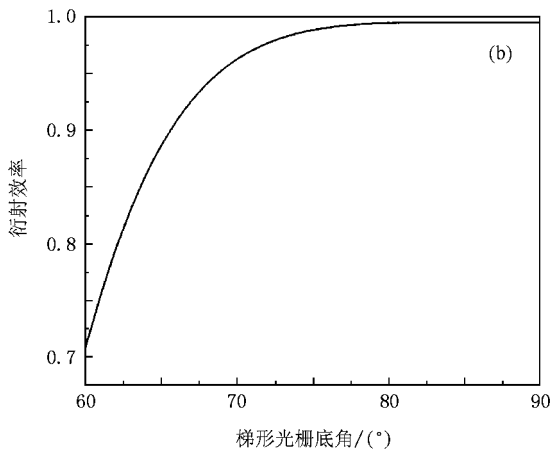
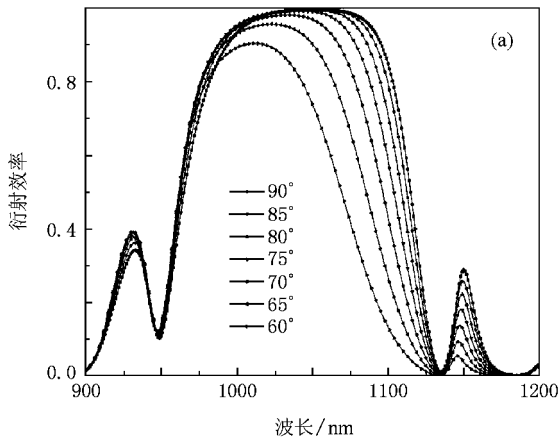


图 8 槽形结构对介质膜光栅 -1 级衍射效率的影响 (a) 不同底角的梯形光栅 -1 级衍射效率随波长的变化关系 (b) 介质膜光栅 -1 级衍射效率随梯形底角的变化关系

4.4. 入射角对衍射效率的影响

表 1 所列数据的设计是 TE 偏振光工作在 Littrow 自准直角度条件下,但是在实际应用中入射角的变化会对衍射效率的分布产生一定的影响.图 9 所示为介质膜光栅 -1 级衍射效率随入射角的变化关系.由图 9 可以看出 (1) 在 40° — 60° 的变化范围内, -1 级衍射效率先增大后减小.(2) 当入射角度为表 1 结构参数所对应的 Littrow 条件 (51.2°) 时,其衍射效率达到最大值.(3) 为了获得优于 96% 的衍射效率,入射角度要控制在 48° — 55° 之间.

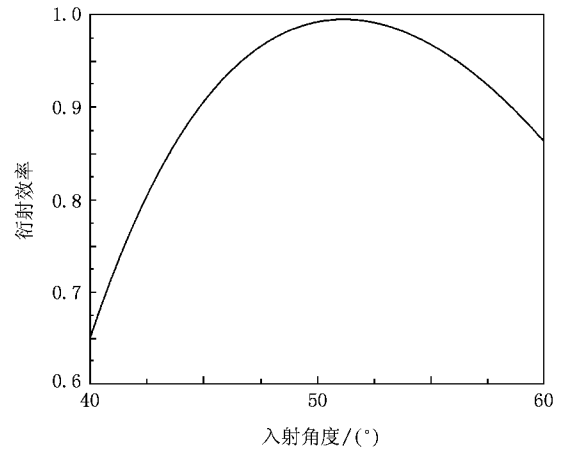


图 9 入射角变化对多层介质膜 -1 级衍射效率的影响

5. 结 论

高衍射效率和高损伤阈值的介质膜光栅是发展超快超功率激光的关键元件.本文采用严格耦合波理论建立了多层介质膜光栅获得高衍射效率的模型.以 $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$ 为基础膜系,利用该模型分别对顶层为 HfO_2 和 SiO_2 的介质膜光栅的衍射特性进行了分析.结果表明,光栅的槽深、占空比和顶层刻蚀后的剩余厚度是影响介质膜光栅衍射效率的主要因素.根据分析结果优化设计了衍射效率高达 99.5% 的顶层材料为 HfO_2 的介质膜光栅,其对应的光栅槽深为 180 nm ,剩余厚度为 40 nm ,占空比为 0.35 .而对于顶层为 SiO_2 的介质膜光栅要获得同样的衍射效率,其优化的槽深为 600 nm ,剩余厚度为 200 nm ,占空比为 0.35 .数值计算表明,光栅的槽深、占空比、周期和入射角度以及光栅的槽形结构对制备工艺都具有一定的工艺容差性.

- [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] Shore B W , Perry M D 1997 *J . Opt . Soc . Am . A* **14** 1124
- [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] Moharam M G , Gaylord T K 1986 *J . Opt . Soc . Am . A* **3** 1780
- [9] Moharam M G , Gaylord T K 1981 *Appl . Opt .* **20** 240
- [10] Moharam M G , Eric B G , Drew A P 1995 *J . Opt . Soc . Am . A* **12** 1068
- [11] Moharam M G , Drew A P , Eric B G 1995 *J . Opt . Soc . Am . A* **12** 1077
- [12] Kong W J , Shen Z C , Shen J , Shao J D , Fan Z X 2005 *Optik .* **116** 325
- [13] Wei H B , Li L F 2003 *Appl . Opt .* **42** 6255
- [14] Yuan L , Zhao Y A , Wang C J , He H B , Fan Z X , Shao J D 2007 *Appl . Sur . Sci .* **253** 3450
- [15] Sadoh T , Eguchi H 2003 *Nucl . Instrum . Methods Phys . Res . B* **206** 478
- [16] Magnusson R , Shin D , Liu Z S 1998 *Opt . Lett .* **23** 612

Diffraction property of multi-layer dielectric gratings studied by rigorous coupled-wave analysis *

Kong Wei-Jin^{1)†} Yun Mao-Jin¹⁾ Sun Xin¹⁾ Liu Jun-Hai¹⁾ Fan Zheng-Xiu²⁾ Shao Jian-Da²⁾

¹ *College of Physics Science , Qingdao University , Qingdao 266071 , China*)

² *Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics , Chinese Academy of Sciences , Shanghai 201800 , China*)

(Received 27 August 2007 ; revised manuscript received 15 April 2008)

Abstract

The rigorous coupled-wave analysis technique for describing the diffraction of multi-layer diffraction grating (MDG) is put forward. Formulations for a stable and efficient numerical implementation of diffraction efficiency are presented for MDG for TE polarization and Littrow angle. With the merit function of the -1 order diffraction efficiency higher than 96% , the parameters of MDG are optimized for HfO₂ and SiO₂ top layers , respectively. Numerical calculation indicates that a larger grating parameter range can be obtained with HfO₂ rather than the SiO₂ on the top. The manufacture tolerance and the effective incident angle for the optimized structure of MDG are discussed in the end.

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

PACC : 4225 , 4225B , 4278D

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10376040) and the Scientific Research Foundation of the Education Bureau of Shandong Province , China (Grant No. J06P02).

† E-mail : kwjsd@163.com