

二维平面光栅角色散公式的完整解析形式及分析*

巴音贺希格 唐玉国 齐向东

(中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130033)

(2004 年 1 月 31 日收到, 2004 年 3 月 23 日收到修改稿)

在矢量衍射理论上给出了任意入射状态下二维平面光栅的光栅方程, 推导出二维平面光栅角色散公式的完整解析形式, 确立了二维平面光栅衍射极角角色散(第一类角色散)和衍射方位角角色散(第二类角色散)的概念. 通过二维平面光栅衍射极角和衍射方位角角色散的理论分析和数值计算, 阐明了当入射波矢偏离光栅法线时, 衍射光斑阵列发生畸变的机理, 并明确指出了引起衍射方位角角色散的突变、导致衍射光斑阵列剧烈变化的条件, 因而具有理论上的意义. 在实际应用方面, 以晶体和量子点的 x 射线衍射、低能电子衍射和反射式高能电子衍射为例, 或许可以利用导出的公式检验、分析和解释晶体的点阵结构及晶体的生长过程, 进而由此寻找表征晶体结构的新途径.

关键词: 二维平面光栅, 衍射极角角色散, 衍射方位角角色散, 晶体电子衍射

PACC: 4210, 4110H

1. 引 言

通常把衍射单元在二维方向上周期排列的光栅称为二维光栅或网格光栅. 根据二维方向的相对位置不同又可分为正交光栅和交叉光栅. 从光栅周期与使用波长比较来看, 光栅周期大于使用波长若干倍情形的称为大周期光栅, 光栅周期接近或小于使用波长的称为小周期光栅或亚波长光栅. 我们知道, 从 20 世纪 60 年代开始, 以借助数值模拟手段分析光栅衍射特性为特征的严格矢量衍射理论, 随着电子计算机运算能力的迅速提高应运而生并得以不断繁荣. 目前它已逐渐发展成为一种公认的成熟的光学研究理论, 其优势在于分析亚波长光栅的衍射特性. 随着一维亚波长光栅的基本性质业已明朗, 人们又从 20 世纪 90 年代初开始, 试图采用矢量衍射理论解决二维平面光栅问题. 加之通过二元光学技术在物体表面制造任意相位分布的亚波长量级的圆形或矩形孔、柱、锥阵列, 以满足所要求的衍射效率或者其他一些目的已经成为可能. 因此, 计算二维平面光栅衍射效率时遇到的数值方法的稳定性、收敛性和计算速度等自然成了光栅研究者倾注心血潜心研究的焦点, 近几年发表的相关文章也不少^[1-14]. 其中, 文献 [2, 3] 以矢量模式理论方法研究

了矩孔光栅的衍射效率, 并数值考察了矩孔金属光栅的偏振特性; 文献 [5-9] 以所谓严格的耦合波理论计算和分析了二维表面浮雕结构的消偏振、减反射特性; 文献 [10, 11] 采用“逆规则”傅里叶展开法分别研究了正交浮雕光栅问题的收敛性, 大大提高了计算速度; 文献 [12-14] 对二维电磁各向异性浮雕型介质光栅的衍射特性进行了理论分析, 为实际光栅的参量优化设计提供了有用的方法. 这些具有创造性的工作既丰富了光栅理论研究的内容, 又为光栅的设计、制作和应用提供了重要的理论依据.

一般认为, 矢量衍射理论在分析亚波长光栅衍射特性时具有独特优势, 因而衍射效率、偏振特性、抗反射特性和全反射特性^[15]等问题成为其主要的研究对象. 与此形成鲜明反差的事实是采用矢量衍射理论研究大周期光栅, 尤其是研究二维光栅的报道不多见. 但研究发现, 基于矢量衍射理论对大周期二维光栅的色散规律展开讨论极为便利, 能够得到其角色散公式的完整解析形式, 这一点标量衍射理论不易做到. 其实, 大周期二维光栅的用途也十分广泛, 如其原理用于生物细胞和材料结构的软 x 射线成像^[16]、常用的光束分束器和阵列发生器^[17]、网格结构的可见光/红外图像转换薄膜^[18]等, 证实阿贝成像理论和证明傅里叶分析基本原理的阿贝-波尔特实验^[19]更是我们熟知的. 还有, 通过 x 射线

* 国家自然科学基金(批准号: 60478034, 10004011)资助的课题.

衍射 (XRD)^[20]、低能电子衍射 (LEED)^[21]和反射式高能电子衍射 (RHEED)^[22]光斑阵列的变化规律判断晶体的结构特征是半导体物理中常用的实验方法,通常采用的是斜入射(掠入射)方式^[20-22].目前,在这一研究领域里可供借鉴的简单的解析表达式只有经典布拉格公式,用它来分析和解释晶体结构生成过程中电子衍射图样变化规律.如果能够得到可以反映晶体结构更多信息的解析表达式,仅对凝聚态物理而言也是一件好事情.鉴于此,本文在矢量衍射理论上给出了任意斜入射下二维平面光栅的光栅方程,导出了二维平面光栅角色散公式的完整解析形式,确立了二维平面光栅衍射极角角色散(也可称为第一类角色散)和衍射方位角角色散(也可称为第二类角色散)的概念.通过二维平面光栅衍射极角和衍射方位角角色散的理论分析和数值计算,阐明了当入射波矢偏离光栅法线时,衍射光斑阵列发生畸变的机理,并明确指出了引起衍射方位角角色散的突变、导致衍射光斑阵列剧烈变化的条件,这些工作无疑是有学术意义的,同时也可能会成为实际应用的理论参考.

2. 理论和数值分析

如图 1 所示,设波长为 λ 的平面波以入射角 θ (即入射波矢与 z 轴之间的夹角),入射方位角 ϕ (即入射波矢在 xoy 平面上的投影矢量与 x 轴之间的夹角)入射到正交光栅(矩形柱阵列)上, h 为刻槽深度, τ_x 为横向(x 方向)槽宽, τ_y 为纵向(y 方向)槽宽, d_x 为横向周期, d_y 为纵向周期, δ 为入射电场矢量 E_{inc} 的偏振角.

由矢量衍射理论可知,入射区(后向衍射区)和透射区(前向衍射区)电场矢量可表示为^[15]

$$E_R(\mathbf{r}) = E_{inc} + \sum_{m,n} R_{mn} \exp[i\mathbf{k}_{1mn} \cdot \mathbf{r}], \quad (1)$$

$$E_T(\mathbf{r}) = \sum_{m,n} T_{mn} \exp[i\mathbf{k}_{3,4mn} \cdot (\mathbf{r} - h\hat{z})]. \quad (2)$$

磁场矢量也有与电场矢量相对应的相似形式.这里, E_{inc} 为入射场电矢量, R_{mn} 和 T_{mn} 分别为反射系数和透射系数, $i = \sqrt{-1}$ 为虚数单位, $m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 分别为 x 方向和 y 方向的衍射级次, \mathbf{k}_{1mn} 的下标 1 表示入射区(反射区), $\mathbf{k}_{3,4mn}$ 的下标 3 和 4 分别表示介质基底层和透射区.

$$\mathbf{k}_{1mn} = k_{xm}\hat{x} + k_{yn}\hat{y} - r_{mn}\hat{z}, \quad (3)$$

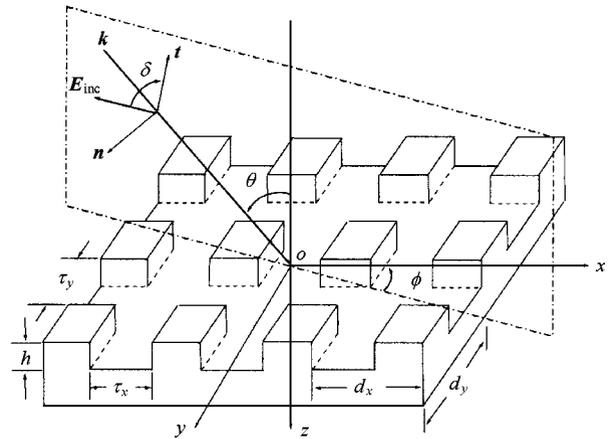


图 1 物理模型及入射波矢示意图

$$\mathbf{k}_{3,4mn} = k_{xm}\hat{x} + k_{yn}\hat{y} + t_{mn}\hat{z}. \quad (4)$$

第 (m, n) 级衍射波矢量的 x 分量和 y 分量分别为

$$k_{xm} = k_{x0} + m \frac{2\pi}{d_x}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (5)$$

$$k_{yn} = k_{y0} + n \frac{2\pi}{d_y}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6)$$

$$k_{x0} = k_0 \sin\theta \cos\phi, \quad (7)$$

$$k_{y0} = k_0 \sin\theta \sin\phi. \quad (8)$$

这里 $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$. 为表述方便把 r_{mn} 和 t_{mn} 统一以 $k_{l, \pm mn}$ 表示,在只考虑传播波的情况下,它有如下形式:

$$k_{l, \pm mn} = (k_l^2 - k_{xm}^2 - k_{yn}^2)^{1/2}, \quad (9)$$

$$k_l = \frac{2\pi}{\lambda} n_l, \quad l = 1, 3, 4, \quad (10)$$

式中, $l = 1, 3, 4$ 分别表示反射区、基底层和透射区,对应的折射率分别为 $n_1 = n_4 = 1$ (假设光栅在自由空间), n_3 为介质基底层折射率.

设 θ_{mn} 为第 (m, n) 级衍射波矢量与 z 轴之间的夹角即衍射极角, ϕ_{mn} 为第 (m, n) 级衍射波矢量在 xoy 平面上的投影矢量与 x 轴之间的夹角即衍射方位角,则与 (7)(8) 式同理可写出

$$k_{xm} = \frac{2\pi}{\lambda} n_l \sin\theta_{mn} \cos\phi_{mn}, \quad (11)$$

$$k_{yn} = \frac{2\pi}{\lambda} n_l \sin\theta_{mn} \sin\phi_{mn}. \quad (12)$$

由 (5)–(8)(11) 和 (12) 式得到正交光栅的光栅方程如下:

$$n_l \sin\theta_{mn} \cos\phi_{mn} = \sin\theta \cos\phi + m \frac{\lambda}{d_x}, \quad (13)$$

$$n_l \sin \theta_{mn} \sin \phi_{mn} = \sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_y}. \quad (14)$$

由(13)和(14)式不难求出衍射极角和衍射方位角分别为

$$\theta_{mn} = \arcsin \frac{1}{n_l} \sqrt{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_x} \right)^2 + \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_y} \right)^2}, \quad (15)$$

$$\phi_{mn} = \arctan \frac{\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_y}}{\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_x}}. \quad (16)$$

当平面波垂直入射($\theta = 0^\circ, \phi = 0^\circ$)时,由(15),(16)式知,衍射极角和衍射方位角会变为

$$\theta_{mn} = \arcsin \frac{\lambda}{n_l} \sqrt{\left(\frac{m}{d_x} \right)^2 + \left(\frac{n}{d_y} \right)^2}, \quad (17)$$

$$\phi_{mn} = \arctan \frac{nd_x}{md_y}. \quad (18)$$

由此可以看出,在垂直入射条件下正交光栅的衍射方位角不仅与衍射区域介质折射率无关,而且也与波长无关,同时,若 $d_x = d_y$,则 $\phi_{mn} = \arctan(n/m)$,只取决于衍射级次的大小.

通过求微分的方法,由(15)(16)式可以得到正交光栅角色散公式的完整解析形式,

$$\frac{d\theta_{mn}}{d\lambda} = \frac{1}{n_l \cos \theta_{mn}} \frac{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_x} \right) \frac{m}{d_x} + \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_y} \right) \frac{n}{d_y}}{\sqrt{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_x} \right)^2 + \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_y} \right)^2}}, \quad (19)$$

$$\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda} = \frac{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_x} \right) \frac{n}{d_y} - \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_y} \right) \frac{m}{d_x}}{\sec^2 \phi_{mn} \left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_x} \right)^2}. \quad (20)$$

(19)(20)式中的 θ_{mn} 和 ϕ_{mn} 可由(15)(16)式得到.

当平面波垂直入射时(19)(20)式则会变为

$$\frac{d\theta_{mn}}{d\lambda} = \frac{1}{n_l \cos \theta_{mn}} \sqrt{\left(\frac{m}{d_x} \right)^2 + \left(\frac{n}{d_y} \right)^2}, \quad (21)$$

$$\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda} = 0, \quad (22)$$

其中 θ_{mn} 由(17)式所决定.此时,如果 $(m, n) = (m, 0)$,且 $n_l = 1$ 时,则

$$\frac{d\theta_{mn}}{d\lambda} = \frac{m}{d_x \cos \theta_{mn}}. \quad (23)$$

这是常见的一维光栅的角色散公式.为了加以区别,不妨把 $d\theta_{mn}/d\lambda$ 称为正交光栅的衍射极角角色散,

而把 $d\phi_{mn}/d\lambda$ 称为正交光栅的衍射方位角角色散.

总角色散可写成

$$\frac{d\rho_{mn}}{d\lambda} = \sqrt{\left(\frac{d\theta_{mn}}{d\lambda} \right)^2 + \left(\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda} \right)^2}. \quad (24)$$

它表示任意两个衍射光斑之间的角距离.

根据余弦函数的性质,从衍射极角角色散公式

(19)以及衍射极角公式(15)看出,要使角色散有实数值,任意斜入射时必须有下列不等式成立:

$$\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_x} \right)^2 + \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_y} \right)^2 < n_l^2. \quad (25)$$

上述不等式的成立意味着入射极角、入射方位角、入射波长、光栅周期(x, y 方向)、衍射区域介质折射率和衍射级次(m, n)等物理量并非可以取任意值,而是彼此之间存在着一种相互制约关系.从(9)式不难理解,这种制约关系之所以能够成立,就其物理本质而言,它是产生传播波的必然要求.但是,衍射方位角角色散公式(20)以及衍射方位角公式(16)中不存在上述制约关系,说明它对传播波没有限制作用.

下面,根据(19)(20)和(24)式给出正交光栅两种角色散的算例.设沿 x, y 方向的光栅周期均为 $10.0 \mu\text{m}$,考察衍射波在区域1和区域4(折射率等于1)的角色散情况,入射波长取 $\lambda = 632.8 \text{ nm}$.

图2给出了入射方位角 $\phi = 0^\circ$ 时 $(+1, +1)$ 级

衍射波的衍射极角角色散、衍射方位角角色散和总角色散随入射角变化的情况. 可以看出: 第一, 只要 $\theta \neq 0^\circ$ (即非垂直入射), 衍射光斑阵列就不再沿纵横相交的直线族排列, 而是要发生畸变, 衍射光斑将分布于相交的曲线族上, 实验事实也是如此. 第二, 即使入射方位角 $\phi = 0^\circ$, 只要 $\theta \neq 0^\circ$, 则有 $d\phi_{mn}/d\lambda \neq 0$, 此结果可直接由(20)式看出. 为了突出此特点, 在计算中特意取 $\phi = 0^\circ$. 第三, 衍射极角角色散随入射角的变化较为平缓, 但是, 衍射方位角角色散则由 $\theta = 0^\circ$ 时的零会随着入射角的增大而迅速达到一个最大值. 计算表明 $(-1, -1)$ $(+1, -1)$ 和 $(-1, +1)$ 级衍射波也在这一入射角下出现最大值.

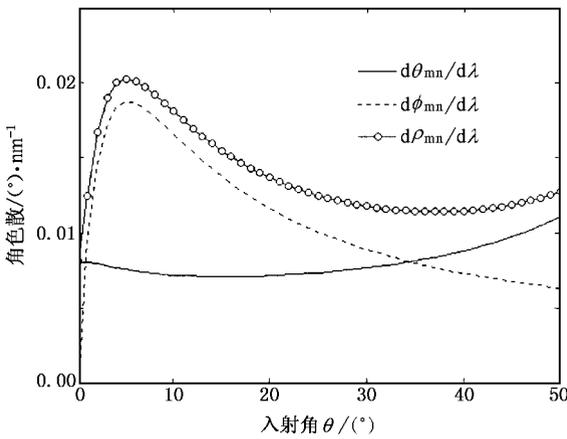


图2 角色散与入射角关系 $\phi = 0^\circ (m, n) = (+1, +1)$

由于(19)(20)式不仅与入射波矢的入射状态有关, 而且还与光栅结构有关, 因此搞清楚如图2所示出现极大值的条件, 可能会对具体应用有着潜在的意义. 通过对衍射方位角角色散表达式求偏导数的方法可以找到极值点的位置. (20)式还可写成下列形式:

$$\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda} = \frac{\left(\sin\theta\cos\phi + m\frac{\lambda}{d_x}\right)\frac{n}{d_y} - \left(\sin\theta\sin\phi + n\frac{\lambda}{d_y}\right)\frac{m}{d_x}}{\left(\sin\theta\cos\phi + m\frac{\lambda}{d_x}\right)^2 + \left(\sin\theta\sin\phi + n\frac{\lambda}{d_y}\right)^2}, \quad (26)$$

$$\left.\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda}\right|_{\substack{\theta \neq 0^\circ \\ \phi = 0^\circ}} = \frac{n}{d_y} \frac{\sin\theta}{\left(\sin\theta + m\frac{\lambda}{d_x}\right)^2 + \left(n\frac{\lambda}{d_y}\right)^2}. \quad (27)$$

由 $\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda}\right) = 0$ 得到

$$\sin\theta = \pm\sqrt{\left(\frac{m}{d_x}\right)^2 + \left(\frac{n}{d_y}\right)^2}\lambda. \quad (28)$$

这说明, 如入射角满足(28)式, 衍射方位角角色散就

会发生突变出现最大值, 且与入射方位角 ϕ 是否为零无关. 衍射方位角角色散峰值为

$$\left.\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda}\right|_{\max} = \mp \frac{\frac{m}{d_x}\sin\phi - \frac{n}{d_y}\cos\phi}{2\lambda\left[\sqrt{\left(\frac{m}{d_x}\right)^2 + \left(\frac{n}{d_y}\right)^2} \pm \left(\frac{m}{d_x}\cos\phi + \frac{n}{d_y}\sin\phi\right)\right]}. \quad (29)$$

若 $m = n, d_x = d_y$, 则

$$\left.\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda}\right|_{\max} = \mp \frac{\sin\phi - \cos\phi}{2\lambda[\sqrt{2} \pm (\sin\phi + \cos\phi)]}. \quad (30)$$

衍射方位角角色散峰值只与入射方位角、入射波长以及衍射级次的正负有关. 由(30)式可知, 当 $\phi = 0^\circ$ 时, 有

$$\left.\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda}\right|_{\max}^{\phi=0^\circ} = \pm \frac{1}{2\lambda(\sqrt{2} \pm 1)}. \quad (31)$$

可以验证, m 的正负与(29)–(31)式的分母中的正负号一致, 如 $m > 0$ 对应分母中的正号, $m < 0$ 对应分母中的负号; n 的正负与衍射方位角角色散正负号一致, 如 $n > 0$ 时, $d\phi_{mn}/d\lambda > 0$, 反之亦然. 例如, 由(31)式算得, 衍射级次 $(m, n) = (+1, +1)$ 的衍射方位角角色散为 $d\phi_{mn}/d\lambda|_{\max}^{\phi=0^\circ} = 0.0188(^\circ) \cdot \text{nm}^{-1}$, 且由(28)式可知, 此时衍射方位角角色散极值点出现在 $\theta = 5.134^\circ$, 与图2的结果一致. 同理 $(\pm 2, \pm 2)$ 和 $(\pm 3, \pm 3)$ 级的极值点在 $\theta = 10.311^\circ$ 和 $\theta = 15.574^\circ$, $(\pm 1, \pm 2)$ 和 $(\pm 2, \pm 1)$ 级的极值点在 $\theta = 8.135^\circ$.

再以 $(-1, -1)$ 及 $m = n < 0$ 级次衍射波为例, 考察当入射角在满足(28)式时, 正交光栅两种角色散和总角色散的特点. 例如, 当 $d_x = d_y$ 时 $(-1, -1)$ 级在入射角 $\theta = 5.134^\circ$, $(-2, -2)$ 级在入射角 $\theta = 10.311^\circ$, $(-3, -3)$ 级在入射角 $\theta = 15.574^\circ$ 等, 这种条件下角色散值在 $\phi = 45^\circ$ 左右会发生突变. 如图3所示 $(-1, -1)$ 级衍射波在入射角 $\theta = 5.134^\circ$ 时, 衍射极角角色散随入射方位角 ϕ 的增大而减小, 但不会为零, 到 $\phi = 45^\circ$ 时, 它将跃变为这一级次的最大值. 又如图4所示 $(-1, -1)$ 级衍射波在入射角 $\theta = 5.134^\circ$ 时, 衍射方位角角色散约在 $\phi = 20^\circ$ 之前随入射方位角 ϕ 变化的幅度不明显, 在 $\phi = 20^\circ$ 之后随入射方位角 ϕ 变化的幅度较大, 接近 $\phi = 45^\circ$ 时变化剧烈, $\phi = 45^\circ$ 时则为零. $\phi > 45^\circ$ 时的情况与此相反. 总角色散随入射方位角的变化如图5所示. 上述数值结果表明: 当 $d_x = d_y$, $(-1, -1)$ 级在

入射角 $\theta = 5.134^\circ$ ($-2, -2$) 级在入射角 $\theta = 10.311^\circ$ ($-3, -3$) 级在入射角 $\theta = 15.574^\circ$ 等情况下, 衍射光斑阵列在 $\phi = 45^\circ$ 左右的畸变程度很大.

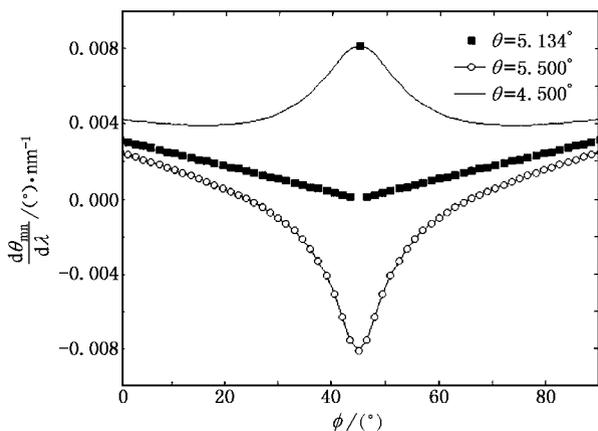


图3 衍射极角角色散与入射方位角的关系 $(m, n) = (-1, -1)$

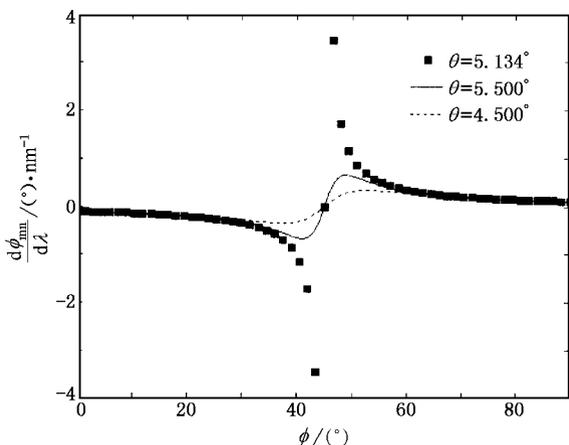


图4 衍射方位角角色散与入射方位角的关系 $(m, n) = (-1, -1)$

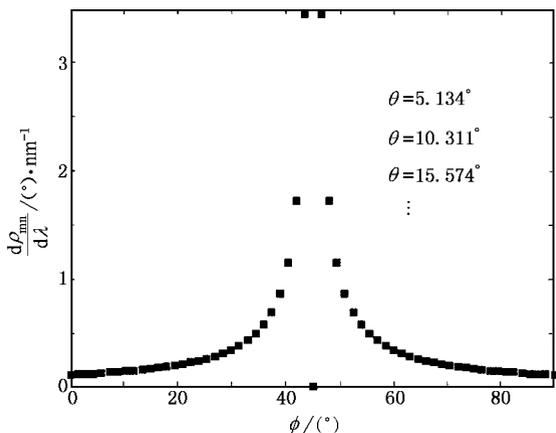


图5 总角色散与入射方位角的关系 $m = n < 0$

3. 讨 论

如果二维平面光栅的阵列结构在二维方向上的相对位置不是正交而是任意交叉, 则此时偏离正交位置的度对衍射极角、衍射方位角以及两种角色散无疑会有影响, 这一点对晶体电子衍射的研究也是有意义的. 文献 [10] 曾成功地采用“逆规则”傅里叶展开法研究了任意交叉浮雕光栅问题的收敛性和计算速度, 其特点是坐标轴建立在彼此不完全正交的三个维度上, 构成一个倾斜(非正交)坐标系, 如图 6 所示(俯视图). 图 6 中, x^1 和 x^3 分别平行于直角坐标系的 x 和 z 轴, x^2 则与 y 轴形成 ζ 度夹角, $|\zeta| < 90^\circ$, 显然, x^1 和 x^2 分别平行于光栅的两个周期方向, 光栅周期分别为 d_1 和 d_2 .

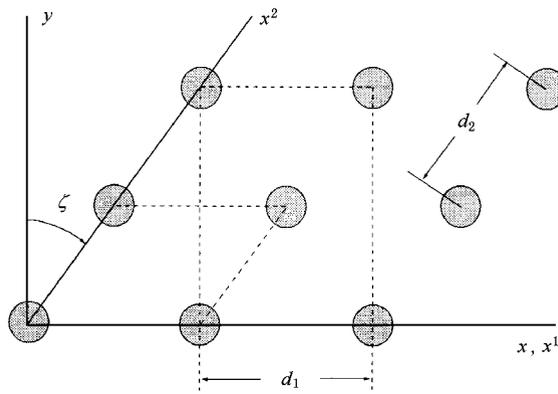


图6 交叉光栅俯视图及非正交坐标系

这样做的优点是在数学上与直角坐标系的情形没有本质区别, 可同理计算非正交坐标系情形下的光栅衍射效率. 我们可以在这种非正交坐标系下讨论交叉光栅的色散问题, 可想而知, 其难度比直角坐标系下讨论正交光栅的色散问题要大一些. 两个坐标系之间的基本关系如下:

$$\begin{aligned} x^1 &= x - y \tan \zeta, \\ x^2 &= y \sec \zeta, \\ x^3 &= z. \end{aligned} \tag{32}$$

周期结构延伸方向的单位矢量在直角坐标系和非正交坐标系上的投影分别为

$$\begin{aligned} b_1 &= \hat{x}, \\ b_2 &= \hat{x} \sin \zeta + \hat{y} \cos \zeta, \\ b_3 &= \hat{z}; \\ b^1 &= \hat{x} - \hat{y} \tan \zeta, \end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^2 &= \hat{y} \sec \zeta, \\ \mathbf{b}^3 &= \hat{z}. \end{aligned} \quad (34)$$

以上两组基矢满足关系式 $\mathbf{b}_\rho \cdot \mathbf{b}^\sigma = \delta_\rho^\sigma$, 这里 δ_ρ^σ 为 Kronecker δ 符号. 在非正交坐标系下, 入射波矢可表示为

$$\mathbf{k} = k_\rho \mathbf{b}^\rho = \alpha_0 \mathbf{b}^1 + \beta_0 \mathbf{b}^2 - \gamma_{00} \mathbf{b}^3, \quad (35)$$

$$\alpha_0 = k_0 \sin \theta \cos \phi, \quad (36)$$

$$\beta_0 = k_0 \sin \theta \sin(\phi + \zeta), \quad (37)$$

$$\gamma_{00} = k_0 \cos \theta. \quad (38)$$

第 (m, n) 级衍射波矢量的 x^1 分量和 x^2 分量分别为

$$\alpha_m = \alpha_0 + m \frac{2\pi}{d_1}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (39)$$

$$\beta_n = \beta_0 + n \frac{2\pi}{d_2}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (40)$$

设 θ_{mn} 为第 (m, n) 级衍射波矢量与 x^3 轴(即 z

轴)之间的夹角即衍射极角, ϕ_{mn} 为第 (m, n) 级衍射波矢量在 x^1 轴平面上的投影矢量与 x^1 轴(即 x 轴)之间的夹角即衍射方位角, 则与(36)和(37)式同理可写出

$$\alpha_m = \frac{2\pi}{\lambda} n_l \sin \theta_{mn} \cos \phi_{mn}, \quad (41)$$

$$\beta_n = \frac{2\pi}{\lambda} n_l \sin \theta_{mn} \sin(\phi_{mn} + \zeta). \quad (42)$$

由(36)(37)(39)–(42)式可以得到非正交坐标系下交叉光栅的光栅方程,

$$n_l \sin \theta_{mn} \cos \phi_{mn} = \sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}, \quad (43)$$

$$n_l \sin \theta_{mn} \sin(\phi_{mn} + \zeta) = \sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_2}. \quad (44)$$

由(43)和(44)式, 经推导求出衍射极角和衍射方位角分别为

$$\theta_{mn} = \arcsin \frac{1}{n_l} \sqrt{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right)^2 + \sec^2 \zeta \left[\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right) \sin \zeta - \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_2}\right)\right]^2}, \quad (45)$$

$$\phi_{mn} = \arctan \left[\sec \zeta \left[\frac{\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_2}}{\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}} - \sin \zeta \right] \right]. \quad (46)$$

当 $\zeta = 0$ 时(45)和(46)式将退化为(15)和(16)式. 由(45)(46)式可以得到交叉光栅角色散公式的完整解析形式

$$\frac{d\theta_{mn}}{d\lambda} = \frac{1}{n_l \cos \theta_{mn}} \frac{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right) \frac{m}{d_1} + \sec^2 \zeta \left[\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right) \sin \zeta - \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_2}\right)\right] \left(\frac{m}{d_1} \sin \zeta - \frac{n}{d_2}\right)}{\sqrt{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right)^2 + \sec^2 \zeta \left[\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right) \sin \zeta - \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_2}\right)\right]^2}}, \quad (47)$$

$$\frac{d\phi_{mn}}{d\lambda} = \frac{\sec \zeta}{\sec^2 \phi_{mn}} \frac{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right) \frac{n}{d_2} - \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_2}\right) \frac{m}{d_1}}{\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right)^2}. \quad (48)$$

当 $\zeta = 0$ 时(47)和(48)式将退化为(19)和(20)式. 当平面波垂直入射($\theta = 0^\circ$, $\phi = 0^\circ$)时(45)–(47)式不会变得像(17)(18)和(21)式那样简捷, 但是, (48)式和(22)式一样等于零. 与(26)式同理, 可以写出与(48)式对应的变式, 并对其求入射角 θ 的偏导数, 得到衍射方位角角色散出现最大值的位置, 即

$$\sin \theta = \pm \sqrt{\left(\frac{m}{d_1}\right)^2 + \left(\frac{n}{d_2}\right)^2} \lambda. \quad (49)$$

将(49)式代入(48)式的变式, 也可以得到衍射方位

角角色散峰值表达式, 这里限于篇幅不再给出. 由(45)式知, 交叉光栅对传播波的限制条件为

$$\begin{aligned} &\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right)^2 \\ &+ \sec^2 \zeta \left[\left(\sin \theta \cos \phi + m \frac{\lambda}{d_1}\right) \sin \zeta \right. \\ &\left. - \left(\sin \theta \sin \phi + n \frac{\lambda}{d_2}\right)\right]^2 < n_l^2. \end{aligned} \quad (50)$$

4. 结 论

本文首先在矢量衍射理论上给出了任意入射状态下正交光栅的光栅方程,推导出了角色散公式的解析形式,确立了正交光栅衍射极角和衍射方位角角色散的概念.通过正交光栅衍射极角和衍射方位角角色散的理论分析和数值计算,阐明了当入射波矢偏离光栅法线时,衍射光斑阵列发生畸变的机理,并明确指出了引起衍射方位角角色散的突变、导致衍射光斑阵列剧烈变化的条件,即当入射角满足 $\sin\theta = \pm \sqrt{(m/d_x)^2 + (n/d_y)^2} \lambda$ 时,衍射方位角角色散将发生突变出现最大值.其次,又在非正交坐标系下给出了交叉光栅的光栅方程,导出了它的衍射极角和衍射方位角角色散公式的解析形式,并进行了相应的讨论.至此二维平面光栅角色散公式的完整解析形式被全部建立起来,此项工作具有理论上的意义.在实际应用方面,对于光学系统而言,

二维周期结构衍射光斑阵列分布的变化不仅意味着其色散特性在发生着变化,而且将连带着光斑强度的均匀性、分辨率等性能的改变,有了二维平面光栅角色散公式的完整解析形式及其分析方法,为进一步的研究打下了一定的基础.还有,以晶体和量子点的 XRD,LEED,RHEED 为例,或许利用二维平面光栅的衍射极角、衍射方位角及角色散公式,可以检验、分析和解释晶体的点阵结构及晶体的生长过程,甚至可能会由此寻找到表征晶体结构的新途径.从测量技术角度看,建立在非正交坐标系上的交叉光栅的数学式与建立在直角坐标系上的正交光栅的数学式具有等效性,坐标轴的倾斜不会带来具体操作的不便,因为二者的计量基准一致,都是以 xoz 平面(亦即 x^1ox^3 平面)、 yoz 平面(亦即 yo^1x^3 平面)和 z 轴(亦即 x^3 轴)为零起点.由本文给出的二维平面光栅的角色散公式可以看出,它们与光栅槽深、占空比和光栅槽形面形无关,因此适用于所有的二维衍射光栅,而且也不涉及入射波的偏振态.

- [1] Grann E B , Moharam M G 1996 *Appl. Opt.* **35** 795
- [2] Yan Y , Chen H , Zhu W Y 1994 *Acta Opt. Sin.* **14** 621 (in Chinese) [严 瑗、陈 晖、朱文勇 1994 光学学报 **14** 621]
- [3] Zhu W Y , Lin W D , Gao J *et al* 1997 *Acta Opt. Sin.* **17** 1251 (in Chinese) [朱文勇、林维德、高 景等 1997 光学学报 **17** 1251]
- [4] Motamedi M E , Southwell W H , Gunning W J 1992 *Appl. Opt.* **31** 4371
- [5] Noponen E , Turunen J 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 2494
- [6] Grann E G , Moharam M G , Pommet D A 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 2695
- [7] Zhang G P , Ming H , Xie J P *et al* 1997 *Chin. J. Lasers* **24** 699 (in Chinese) [张国平、明 海、谢建平等 1997 中国激光 **24** 699]
- [8] Yu W X , Lu Z W , Wang P *et al* 2001 *Acta Opt. Sin.* **21** 980 (in Chinese) [鱼卫星、卢振武、王 鹏等 2001 光学学报 **21** 980]
- [9] Yu W X , Lu Z W , Wang P *et al* 2001 *Acta Phot. Sin.* **30** 331 (in Chinese) [鱼卫星、卢振武、王 鹏等 2001 光子学报 **30** 331]
- [10] Li L 1997 *J. Opt. Soc. Am. A* **14** 2758
- [11] Fu K X , Wang Z H , Zhang J *et al* 2001 *Acta Opt. Sin.* **21** 236 (in Chinese) [傅克祥、王植恒、张 靖等 2001 光学学报 **21** 236]
- [12] Li L 2001 *Proc. SPIE* **4438** 132
- [13] Popov E , Nevieri M 2001 *J. Opt. Soc. Am. A* **18** 2886
- [14] Zeng Y S , Tang X G , Fu K X *et al* 2003 *Acta Opt. Sin.* **23** 95 (in Chinese) [曾阳素、唐雄贵、傅克祥等 2003 光学学报 **23** 95]
- [15] Fu K X , Zhang D Y , Wang Z H *et al* 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1278 (in Chinese) [傅克祥、张大跃、王植恒等 1998 物理学报 **47** 1278]
- [16] Xu X D , Hong Y L , Huo T L *et al* 2000 *Acta Opt. Sin.* **20** 1255 (in Chinese) [徐向东、洪义麟、霍同林等 2000 光学学报 **20** 1255]
- [17] Wen H D , Liu S M , Guo R *et al* 2002 *Chin. J. Quant. Electron.* **19** 16 (in Chinese) [温海东、刘思敏、郭 儒等 2002 量子电子学报 **19** 16]
- [18] Yu X Y , Ding X , Li Z *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1307 (in Chinese) [禹宣伊、丁 欣、李 卓等 2002 物理学报 **51** 1307]
- [19] Liang Q T 1980 *Physical Optics* (Beijing : Machine Industry Publishers) (in Chinese) [梁铨廷 1980 物理光学 (北京 : 机械工业出版社)]
- [20] Zhang J M , Xu K W 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 146 (in Chinese) [张建民、徐可为 2003 物理学报 **52** 146]
- [21] Jiang J L , Li W J , Zhou L *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 157 (in Chinese) [姜金龙、李文杰、周 立等 2003 物理学报 **52** 157]
- [22] Qin F W , Gu B , Xu Y *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1240 (in Chinese) [秦福文、顾 彪、徐 茵等 2003 物理学报 **52** 1240]

The complete analytical form and analysis on angular dispersion formula of two-dimensional grating^{*}

Bayanheshig Tang Yu-Guo Qi Xiang-Dong

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

(Received 31 January 2004 ; revised manuscript received 23 March 2004)

Abstract

On the basis of the vector diffraction theory , the equation of two-dimensional grating in arbitrary angle of incidence is given , the complete analytical form of angular dispersion formula of two-dimensional grating is firstly deduced , and the concept of angular dispersion of diffractive polar angle (ADDPA)(the first kind angular dispersion) and angular dispersion of diffractive azimuthal angle (ADDAA)(the second kind angular dispersion) are established . In addition , according to theoretical analysis and numerical method on ADDPA and ADDAA of two-dimensional grating , the mechanism that diffraction spot array generates distortion is explained when the incidence wave has an angular deviation from the grating normal . Moreover , the conditions for causing mutation of ADDAA and leading to the dramatic change of diffraction spot array are also determined . This work , therefore , is of great importance in basic theory research . In practical application , taking x-ray diffraction , low-energy electron diffraction and reflection high-energy electron diffraction of crystal and quantum dot for example , we may take advantage of the above formula to test , analyze and explain the structure of a crystal lattice and the crystal growth process , then we can find new methods of characterizing crystal structure .

Keywords : two-dimensional grating , angular dispersion of diffractive polar angle , angular dispersion of diffractive azimuthal angle , crystal electron diffraction

PACC : 4210 4110H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60478034 ,10004011).