多層化された RCWA

回折格子の形状が奥行き方向に変化する場合の RCWA のフォーミュレーションを次の論文にそって紹介する。数値的な不安定性を回避する一つの方法で、Enhanced Transmittance matrix と呼ばれる方法である。

- [1] J. Opt. Soc. Am. A 12, 1077 (1995), M. G. Moharam, D. A. Pommet, and E. B. Grann Stable implementaton of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach

1 一次元の場合

奥行き方向に変化する回折格子を薄くスライスした積層として考える。まず、各スライスにおいて誘電率を次のように展開する。ここで、d_l は l 番目の層の厚さで、その層の上側の z 座標が D_l である。

$$\begin{aligned}\varepsilon_l(x) &= \sum_h \varepsilon_{l,h} \exp\left(j\frac{2\pi hx}{\Lambda}\right) \\ & D_l - d_l < z < D_l \equiv \sum_{p=1}^{l} d_p\end{aligned}$$

各層において、通常の RCWA に基づいて固有値問題を解き、その層での固有モードと固有ベクトルを計算する。そのモードを基底として、係数 $\mathbf{c}_l^+$、$\mathbf{c}_l^+$ を用いて電磁場を級数展開する。l 番目の層を表すために、添え字 l が加わっている。一番上の面での境界条件は、

$$\begin{pmatrix} \delta_{i0} \\ jn_{\mathrm{I}}\cos\theta\delta_{i0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -j\mathbf{Y}_{\mathrm{I}} \end{pmatrix} \mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{W}_1\mathbf{X}_1 \\ \mathbf{V}_1 & -\mathbf{V}_1\mathbf{X}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{pmatrix} \tag{1}$$

となり、$l-1$ 番目と l 番目の層の間の境界条件は、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{l-1}\mathbf{X}_{l-1} & \mathbf{W}_{l-1} \\ \mathbf{V}_{l-1}\mathbf{X}_{l-1} & -\mathbf{V}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{l-1}^+ \\ \mathbf{c}_{l-1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_l & \mathbf{W}_l\mathbf{X}_l \\ \mathbf{V}_l & -\mathbf{V}_l\mathbf{X}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_l^+ \\ \mathbf{c}_l^- \end{pmatrix} \tag{2}$$

である。最後に一番下の界面 $z = D_L$ での境界条件を考えると、

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^{n} w_{i,m}\left(c_m^+ \exp[-k_0 q_m d] + c_m^-\right) &= T_i \\ \sum_{m=1}^{n} v_{i,m}\left(c_m^+ \exp[-k_0 q_m d] - c_m^-\right) &= j\frac{k_{\mathrm{II},zi}}{k_0}T_i\end{aligned}$$

が得られ、行列形式に直すと、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_L\mathbf{X}_L & \mathbf{W}_L \\ \mathbf{V}_L\mathbf{X}_L & -\mathbf{V}_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_L^+ \\ \mathbf{c}_L^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ j\mathbf{Y}_{\mathrm{II}} \end{pmatrix} \mathbf{T} \tag{3}$$

となる。これらの関係式から、係数を $\mathbf{c}_l$ を消去すると次のようになる。

$$\begin{pmatrix} \delta_{i0} \\ jn_{\mathrm{I}}\cos\theta\delta_{i0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -j\mathbf{Y}_{\mathrm{I}} \end{pmatrix} \mathbf{R} = \prod_{l=1}^{L} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_l & \mathbf{W}_l\mathbf{X}_l \\ \mathbf{V}_l & -\mathbf{V}_l\mathbf{X}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_l\mathbf{X}_l & \mathbf{W}_l \\ \mathbf{V}_l\mathbf{X}_l & -\mathbf{V}_l \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ j\mathbf{Y}_{\mathrm{II}} \end{pmatrix} \mathbf{T} \tag{4}$$

この式は、右辺の行列をそのまま計算すると、値の小さな成分を含む行列 $\mathbf{X}$ の逆行列を計算することになるので、数値的に不安定になりやすい。

そこで一番下の境界条件から出発し、透過率ベクトル $\mathbf{T}$ を置き換えながら、不安定な逆行列計算を避けるようにして計算を進める。

$$\begin{aligned}
&\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} \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ j\mathbf{Y}_{\mathrm{II}} \end{pmatrix} \mathbf{T} \\
\equiv\ & \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} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix} \mathbf{T} \\
&\quad \text{行列 } \mathbf{f}_{L+1}, \mathbf{g}_{L+1} \text{を導入した} \\
=\ & \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{X}_L & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L & \mathbf{W}_L \\ \mathbf{V}_L & -\mathbf{V}_L \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix} \mathbf{T} \\
\equiv\ & \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{X}_L^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{b}_\mathbf{L} \end{pmatrix} \mathbf{T} \\
&\quad \text{行列 } \mathbf{a}_\mathbf{L} \text{ と } \mathbf{b}_\mathbf{L} \text{の定義} \\
=\ & \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{X}_L^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{b}_L \end{pmatrix} \mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L\mathbf{T}_L \\
&\quad \text{行列 } \mathbf{T}_\mathbf{L} \text{の導入} \\
=\ & \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{X}_L^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}_L \\ \mathbf{b}_L\mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L \end{pmatrix} \mathbf{T}_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{I} \\ \mathbf{b}_L\mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L \end{pmatrix} \mathbf{T}_L \\
=\ & \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L(\mathbf{I} + \mathbf{X}_L\mathbf{b}_L\mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L) \\ \mathbf{V}_L(\mathbf{I} - \mathbf{X}_L\mathbf{b}_L\mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L) \end{pmatrix} \mathbf{T}_L \\
\equiv\ & \begin{pmatrix} \mathbf{f}_L \\ \mathbf{g}_L \end{pmatrix} \mathbf{T}_L
\end{aligned}$$

すなわち、一番右辺の係数に対して、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ j\mathbf{Y}_{\mathrm{II}} \end{pmatrix} \tag{5}$$

を定義し、さらに次の行列 $\mathbf{a}_L$ と $\mathbf{a}_L$ を導入して、安定な形で透過率の係数 $\mathbf{T}_L$ を置き換えていく。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{b}_\mathbf{L} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L & \mathbf{W}_L \\ \mathbf{V}_L & -\mathbf{V}_L \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix} \tag{6}$$

これにより次の層での係数が次式のように求まる。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_L \\ \mathbf{g}_L \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L(\mathbf{I} + \mathbf{X}_L\mathbf{b}_L\mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L) \\ \mathbf{V}_L(\mathbf{I} - \mathbf{X}_L\mathbf{b}_L\mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L) \end{pmatrix} \tag{7}$$

これらの置き換えの結果、透過率は

$$\begin{aligned}
\mathbf{T} &= \mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L\mathbf{T}_L \\
\mathbf{T}_L &= \mathbf{a}_{L-1}^{-1}\mathbf{X}_{L-1}\mathbf{T}_{L-1} \\
\mathbf{T}_{L-1} &= \mathbf{a}_{L-2}^{-1}\mathbf{X}_{L-2}\mathbf{T}_{L-2} \\
&\cdots \\
\mathbf{T}_2 &= \mathbf{a}_1^{-1}\mathbf{X}_1\mathbf{T}_1
\end{aligned}$$

であるので、最終的には

$$\mathbf{T} \quad = \quad \mathbf{a}_L^{-1}\mathbf{X}_L\mathbf{a}_{L-1}^{-1}\mathbf{X}_{L-1}\cdots\mathbf{a}_1^{-1}\mathbf{X}_1\mathbf{T}_1 \tag{8}$$

が得られる。上の置き換えを繰り返していくと、一番上面での境界条件は $\mathbf{f}_1$ と $\mathbf{g}_1$ を含む次の形になる。

$$\begin{pmatrix} \delta_{i0} \\ jn_{\mathrm{I}}\cos\theta\delta_{i0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -j\mathbf{Y}_{\mathrm{I}} \end{pmatrix}\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{g}_1 \end{pmatrix}\mathbf{T}_1$$

これを方程式を $\mathbf{R}$ と $\mathbf{T}_1$ が未知数になるように書き直すと、

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{I} & \mathbf{f}_1 \\ j\mathbf{Y}_{\mathrm{I}} & \mathbf{g}_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{T}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{i0} \\ jn_{\mathrm{I}}\cos\theta\delta_{i0} \end{pmatrix}$$

となる。この連立一次方程式を解き、式 (8) を用いると $\mathbf{T}$ が決定できる。

2 二次元の場合

二次元の RCWA の場合にも、一次元の場合と同じように扱うことができる。$z=0$ での境界条件をあらためて書き出すと

$$\bar{S}_{inc} - \hat{R}_S\bar{r} = \hat{F}\hat{W}_1(\bar{c}^+ + \hat{X}_1\bar{c}^-)$$

と、

$$\bar{U}_{inc} - \hat{R}_U\bar{r} = -\hat{F}\hat{\Omega}_1\hat{W}_1\hat{Q}_1(-\bar{c}^+ + \hat{X}_1\bar{c}^-)$$

から

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{R}_S \\ \hat{R}_U \end{pmatrix}\bar{r} &= \begin{pmatrix} \hat{F}\hat{W}_1 & \hat{F}\hat{W}_1\hat{X}_1 \\ \hat{F}\hat{\Omega}_1\hat{W}_1\hat{Q}_1 & -\hat{F}\hat{\Omega}_1\hat{W}_1\hat{Q}_1\hat{X}_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_1^+ \\ \bar{c}_1^- \end{pmatrix} \\ \hat{F}^{-1}\left\{\begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{R}_S \\ \hat{R}_U \end{pmatrix}\bar{r}\right\} &= \begin{pmatrix} \hat{W}_1 & \hat{W}_1\hat{X}_1 \\ \hat{\Omega}_1\hat{W}_1\hat{Q}_1 & -\hat{\Omega}_1\hat{W}_1\hat{Q}_1\hat{X}_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_1^+ \\ \bar{c}_1^- \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{9}$$

が得られる。$l-1$ 層と l 層の間の境界条件は 、

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} \hat{W}_{l-1}\hat{X}_{l-1} & \hat{W}_{l-1} \\ \hat{\Omega}_{l-1}\hat{W}_{l-1}\hat{Q}_{l-1}\hat{X}_{l-1} & -\hat{\Omega}_{l-1}\hat{W}_{l-1}\hat{Q}_{l-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_{l-1}^+ \\ \bar{c}_{l-1}^- \end{pmatrix} \\ = &\begin{pmatrix} \hat{W}_l & \hat{W}_l\hat{X}_l \\ \hat{\Omega}_l\hat{W}_l\hat{Q}_l & -\hat{\Omega}_l\hat{W}_l\hat{Q}_l\hat{X}_l \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_l^+ \\ \bar{c}_l^- \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{10}$$

である。最後に、一番下の境界面での境界条件は、

$$\hat{F}\hat{W}_L(\hat{X}_L\bar{c}_L^+ + \bar{c}_L^-) \quad = \quad -\hat{T}_S\bar{t}$$

と、

$$-\hat{F}\hat{\Omega}_L\hat{W}_L\hat{Q}_L(-\hat{X}_L\bar{c}_L^+ + \bar{c}_L^-) \quad = \quad \hat{T}_U\bar{t}$$

であるから、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{F}\hat{W}_L\hat{X}_L & \hat{F}\hat{W}_L \\ \hat{F}\hat{\Omega}_L\hat{W}_L\hat{Q}_L\hat{X}_L & -\hat{F}\hat{\Omega}_L\hat{W}_L\hat{Q}_L \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_L^+ \\ \bar{c}_L^- \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -\hat{T}_S \\ \hat{T}_U \end{pmatrix}\bar{t} \\ \begin{pmatrix} \hat{W}_L\hat{X}_L & \hat{W}_L \\ \hat{\Omega}_L\hat{W}_L\hat{Q}_L\hat{X}_L & -\hat{\Omega}_L\hat{W}_L\hat{Q}_L \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_L^+ \\ \bar{c}_L^- \end{pmatrix} &= \hat{F}^{-1}\begin{pmatrix} -\hat{T}_S \\ \hat{T}_U \end{pmatrix}\bar{t} \end{aligned} \tag{11}$$

がえられる。書き下した境界条件を一次元の場合と見比べると、行列 $\hat{\Omega}_l\hat{W}_l\hat{Q}_l$ を $\hat{V}_l$ と置き換えれば、式 (1) と式 (9)、式 (2) と式 (10)、式 (3) と式 (11) が対応し、全く同じ形を持つことが分かる。

したがって、行列 $\hat{f}_{L+1}$、$\hat{g}_{L+1}$ を

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_{L+1} \\ \hat{g}_{L+1} \end{pmatrix} \equiv \hat{F}^{-1}\begin{pmatrix} -\hat{T}_S \\ \hat{T}_U \end{pmatrix}$$

として、計算を出発すれば、一次元の場合と同じように計算をすることができる。一番上の境界面での接続条件は、

$$\hat{F}^{-1}\left\{\begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{R}_S \\ \hat{R}_U \end{pmatrix}\bar{r}\right\} = \begin{pmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{g}_1 \end{pmatrix}\bar{t}_1$$

$$\begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{R}_S \\ \hat{R}_U \end{pmatrix}\bar{r} = \hat{F}\begin{pmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{g}_1 \end{pmatrix}\bar{t}_1$$

となるので、これを書き換えて、

$$\begin{pmatrix} \hat{R}_S & \hat{F}\hat{f}_1 \\ \hat{R}_U & \hat{F}\hat{g}_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{r} \\ \bar{t}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \end{pmatrix}$$

が解くべき方程式になる。

(120330)