フォトニックバンド計算

フォトニックバンドの計算方法についてまとめておく。特に、厳密結合波理論（RCWA）の中で行われる固有モードの計算と、波数を与えて振動数を計算するフォトニックバンドとの関係を調べるため、一次元フォトニック結晶に斜入射する場合（二次元系の特殊な場合）について考える。

参考文献

「フォトニック結晶入門」迫田和彰　著、森北出版

「Photonic crystals, modeling the flow of light」J. D. Joannopoulos et al., Princeton

1　固有値方程式（二次元の場合）

マクスウェルの方程式（真電流は無いとする）、

$$\begin{aligned}\nabla\times\mathbf{H} &= \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t}\\ \nabla\times\mathbf{E} &= -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}\end{aligned}$$

の全ての成分を書き下すと、

$$\begin{aligned}\frac{\partial H_z}{\partial y}-\frac{\partial H_y}{\partial z} &= \epsilon_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial E_x}{\partial t}\\ \frac{\partial H_x}{\partial z}-\frac{\partial H_z}{\partial x} &= \epsilon_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial E_y}{\partial t}\\ \frac{\partial H_y}{\partial x}-\frac{\partial H_x}{\partial y} &= \epsilon_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial E_z}{\partial t}\\ \frac{\partial E_z}{\partial y}-\frac{\partial E_y}{\partial z} &= -\mu_0\frac{\partial H_x}{\partial t}\\ \frac{\partial E_x}{\partial z}-\frac{\partial E_z}{\partial x} &= -\mu_0\frac{\partial H_y}{\partial t}\\ \frac{\partial E_y}{\partial x}-\frac{\partial E_x}{\partial y} &= -\mu_0\frac{\partial H_z}{\partial t}\end{aligned}$$

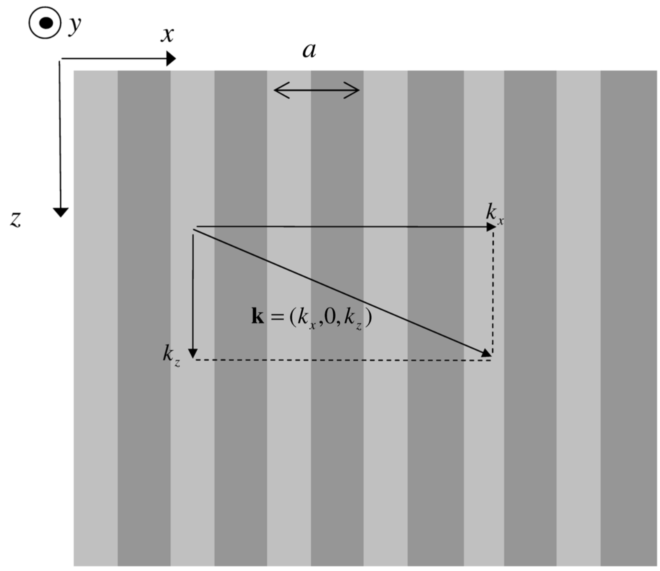

図 1: 一次元フォトニック結晶

のようになる。$\mu(\mathbf{x})=1$ と仮定した。xz 面を進行する光を考えて、y 微分をゼロにすると、上の六本の式は二つの組に分かれる。一つは E_y、H_x、H_z を含む次の三本で、電場が y 軸に平行である (E 偏光)。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H_x}{\partial z}-\frac{\partial H_z}{\partial x} &= \epsilon_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial E_y}{\partial t} && (1)\\
-\frac{\partial E_y}{\partial z} &= -\mu_0\frac{\partial H_x}{\partial t} && (2)\\
\frac{\partial E_y}{\partial x} &= -\mu_0\frac{\partial H_z}{\partial t} && (3)
\end{aligned}$$

もう一組は H_y、E_x、E_z を含むモードで磁場が y 軸に平行である (H 偏光)。

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial H_y}{\partial z} &= \epsilon_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial E_x}{\partial t} && (4)\\
\frac{\partial H_y}{\partial x} &= \epsilon_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial E_z}{\partial t} && (5)\\
\frac{\partial E_x}{\partial z}-\frac{\partial E_z}{\partial x} &= -\mu_0\frac{\partial H_y}{\partial t} && (6)
\end{aligned}$$

E 偏光の場合、式 (1) を時間で微分して、式 (2-3) を代入すると、

$$\begin{aligned}
\epsilon_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial H_x}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial H_z}{\partial t}\\
\epsilon_0\mu_0\epsilon(\mathbf{x})\frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial E_y}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial E_y}{\partial x}
\end{aligned}$$

時間依存性に $\exp(-i\omega t)$ を仮定すると、$\mu_0\epsilon_0=1/c^2$ の関係式を用いて

$$\begin{aligned}
-\epsilon_0\mu_0\epsilon(\mathbf{x})\omega^2 E_y &= \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2}+\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} && (7)\\
\frac{\omega^2}{c^2}E_y &= -\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)E_y && (8)
\end{aligned}$$

が得られる。c は真空中の光速。H 偏光の場合には、式 (6) を時間で微分して、式 (4)-(5) を代入すると、

$$\begin{aligned}
-\mu_0\frac{\partial^2 H_y}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 E_x}{\partial z\partial t}-\frac{\partial^2 E_z}{\partial x\partial t} && (9)\\
-\mu_0\frac{\partial^2 H_y}{\partial t^2} &= -\frac{1}{\epsilon_0}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\frac{\partial H_y}{\partial z}-\frac{1}{\epsilon_0}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\frac{\partial H_y}{\partial x} && (10)\\
+\mu_0\epsilon_0\omega^2 H_y &= -\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\frac{\partial H_y}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\frac{\partial H_y}{\partial x} && (11)\\
\mu_0\epsilon_0\omega^2 H_y &= -\left(\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\frac{\partial}{\partial x}\right)H_y && (12)
\end{aligned}$$

のような固有値方程式が得られる。

2 一次元フォトニック結晶に斜入射する場合

誘電率が x 方向に周期的であると仮定し ($\epsilon(x)=\epsilon(x+a)$)、フーリエ級数で表すと次のようになる。

$$\epsilon(x)=\sum_h \varepsilon_h \exp(iG_h x) \qquad (13)$$

ここで G_h は逆格子ベクトルで $G_h=2\pi h/a$ である。同様に誘電率の逆数も次のように展開しておく。

$$\frac{1}{\epsilon(x)}=\sum_h \kappa_h \exp(iG_h x) \qquad (14)$$

フーリエ級数の展開係数は定義式

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_h &= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \epsilon(x) \exp\left(-iG_h x\right) dx \\
\kappa_h &= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{\epsilon(x)} \exp\left(-iG_h x\right) dx
\end{aligned}
$$

から計算できる。

E 偏光の場合

波数ベクトル $(k_x, 0, k_z)$ を持つ xz 面内を進む波を考える。x 方向に周期性があることを利用して、ブロッホの定理から電場 $E_y(x,z)$ は次のように展開できる。

$$
E_y(x,z) = \exp\left(ik_z z\right)\sum_h \varphi_h \exp\left[i(G_h + k_x)x\right] \tag{15}
$$

この式と逆誘電率の展開式 (14) を、E 偏光の固有値方程式 (式 (8))、

$$
-\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) E_y = \frac{\omega^2}{c^2} E_y \tag{16}
$$

に代入する。左辺を計算すると

$$
\begin{aligned}
&-\sum_h \kappa_h \exp\left(iG_h x\right)\sum_{m'}\left\{(ik_z)^2 + \left(i(G_{m'} + k_x)\right)^2\right\}\varphi_{m'} \exp\left[i(G_{m'} + k_x)x\right]\exp(ik_z z) \\
= &-\sum_{h,m'}\left\{-k_z^2 - (G_{m'} + k_x)^2\right\}\kappa_h \varphi_{m'} \exp\left[i(G_{m'} + G_h + k_x)x\right]\exp(ik_z z) \\
= &\sum_{m,m'}\left\{k_z^2 + (G_{m'} + k_x)^2\right\}\kappa_{m-m'}\varphi_{m'} \exp\left[i(G_m + k_x)x\right]\exp(ik_z z)
\end{aligned}
$$

となる。式変形の途中で $h + m' = m$ のように添え字を書きなおした。右辺の展開は、

$$
\frac{\omega^2}{c^2}\sum_m \varphi_m \exp\left[i(G_m + k_x)x\right]\exp\left(ik_z z\right) \tag{17}
$$

であるから、各 G_m の項が等しいとすると、

$$
\sum_{m'} \kappa_{m-m'}\left\{k_z^2 + (G_{m'} + k_x)^2\right\}\varphi_{m'} = \frac{\omega^2}{c^2}\varphi_m \tag{18}
$$

の形の固有値方程式が得られる。左辺の形は m と m' の入れ替えに対して対称ではない。そこで固有行列をエルミート行列にするために、

$$
\xi_m = \sqrt{(k_z^2 + (G_{m'} + k_x)^2)}\varphi_m \tag{19}
$$

を定義すると、上の式は、

$$
\sum_{m'} \kappa_{m-m'}\left(k_z^2 + (G_{m'} + k_x)^2\right)\frac{1}{\sqrt{k_z^2 + (G_{m'} + k_x)^2}}\xi_{m'} = \frac{\omega^2}{c^2}\frac{1}{\sqrt{k_z^2 + (G_m + k_x)^2}}\xi_m \tag{20}
$$

$$
\sum_{m'} \kappa_{m-m'}\sqrt{k_z^2 + (G_m + k_x)^2}\sqrt{k_z^2 + (G_{m'} + k_x)^2}\xi_{m'} = \frac{\omega^2}{c^2}\xi_m \tag{21}
$$

のようになる。行列 $\mathbf{f}$ の mm' 成分を

$$
f_{mm'} = \kappa_{m-m'}\sqrt{k_z^2 + (G_m + k_x)^2}\sqrt{k_z^2 + (G_{m'} + k_x)^2} \tag{22}
$$

のようにして定義すると、$f_{mm'} = f_{m'm}^*$ が成立するので、$\mathbf{f}$ はエルミート行列になる。$\kappa_{m-m'} = \kappa_{m'-m}^*$ であることは、誘電率を実数に仮定したことからの帰結である。

H 偏光の場合

E 偏光の場合と同様に、ブロッホの定理から磁場 $H_y(x,z)$ を次のように展開する。

$$H_y(x,z) = \sum_h \varphi_h \exp\left[i(G_h + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) \tag{23}$$

このように磁場を展開した場合の電場を式を先に出しておこう。電場分布を描かせるときには必要になる。電場の z 成分は、マクスウェルの方程式（式 (5)）から計算することが出来る。

$$\begin{aligned}
\epsilon_0\epsilon(x)\frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{\partial H_y}{\partial x} && (24)\\
-i\omega\epsilon_0\epsilon(x)E_z &= \sum_h i(G_h + k_x)\varphi_h \exp\left[i(G_h + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (25)\\
E_z &= -\frac{1}{\omega\epsilon_0\epsilon(x)} \sum_h (G_h + k_x)\varphi_h \exp\left[i(G_h + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (26)\\
&= -\frac{1}{\omega\epsilon_0} \sum_p \kappa_p \exp(iG_p x) \sum_h (G_h + k_x)\varphi_h \exp\left[i(G_h + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (27)\\
&= -\frac{1}{\omega\epsilon_0} \sum_{m,h} \kappa_{m-h}(G_h + k_x)\varphi_h \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (28)
\end{aligned}$$

最後の変形では添え字を $p+h=m$ と置き換えた。

それでは固有ベクトル φ_h の決定に移ろう。H 偏光に関する固有値方程式（式 (12)）、

$$-\left(\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial}{\partial x}\right) H_y = \mu_0\epsilon_0\omega^2 H_y \tag{29}$$

において、左辺第一項は誘電率が x にしか依存しないことを仮定すると、$1/\epsilon(x)$ は微分の外に出せる。具体的には、

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial H_y}{\partial z}\\
=& -\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2}\\
=& -\frac{1}{\epsilon(x)}(-k_z^2) \sum_h \varphi_h \exp\left[i(G_h + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)\\
=& +k_z^2 \sum_p \kappa_p \exp\left(iG_p x\right) \sum_{m'} \varphi_{m'} \exp\left[i(G_{m'} + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)\\
=& +k_z^2 \sum_{p,m'} \kappa_p \varphi_{m'} \exp\left[i(G_{m'} + G_p + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)\\
=& +k_z^2 \sum_{m,m'} \kappa_{m-m'} \varphi_{m'} \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)
\end{aligned}$$

のようになる。途中で $m'+p=m$ を用いた。同様に第二項の計算をすると、

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial H_y}{\partial x}\\
=& -\frac{\partial}{\partial x} \sum_h \kappa_h \exp\left(iG_h x\right) \sum_{m'} i(G_{m'} + k_x)\varphi_{m'} \exp\left[i(G_{m'} + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)\\
=& -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{h,m'} \kappa_h i(G_{m'} + k_x)\varphi_{m'} \exp\left[i(G_{m'} + G_h + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)\\
=& -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m,m'} \kappa_{m-m'} i(G_{m'} + k_x)\varphi_{m'} \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)\\
=& +\sum_{m,m'} \kappa_{m-m'}(G_m + k_x)(G_{m'} + k_x)\varphi_{m'} \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)
\end{aligned}$$

のようになる。これらより各 G_m の項が等しいとすると、

$$\sum_{m'} \kappa_{m-m'} \left\{ k_z^2 + (G_m + k_x)(G_{m'} + k_x) \right\} \varphi_{m'} = \frac{\omega^2}{c^2} \varphi_m \tag{30}$$

の形の固有値方程式が得られる。左辺の係数行列は、m と m' を入れ替えると複素共役になるので、エルミート行列である。

3 RCWA 中のモード計算との対応

厳密結合波理論の中では回折格子領域の電磁場モードを計算し、そのモードを基底として電磁場を展開する。そのモードの計算には、次のような行列の固有ベクトルを計算する（詳しくは RCWA の解説を参照)。TE 波の場合には次の行列 $\mathbf{A}$ の固有ベクトルを計算する。

$$\mathbf{A} = \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E} \tag{31}$$

行列 $\mathbf{K}_x$ は成分を k_{xi}/k_0 とする対角行列で、$k_0 = 2\pi/\lambda_0$ は真空中の波数で、k_{xi} は x 方向の i 次の回折光の波数ベクトルである。$\mathbf{E}$ は誘電率のフーリエ係数 ε_{i-p} を ip 成分とする行列である。TM 波の場合には次の行列 $\mathbf{EB}$、

$$\mathbf{EB} = \mathbf{E}(\mathbf{K}_x \mathbf{G} \mathbf{K}_x - \mathbf{I}) \tag{32}$$

の固有ベクトルを計算する。$\mathbf{G}$ は誘電率の逆数をフーリエ展開した係数から得られる行列で、$\mathbf{I}$ は単位行列である。RCWA の電磁場モード計算では、グレーティングの境界を考慮しない。したがって、考えている構造は一次元フォトニック結晶と全く同一である。前節までのバンド計算と何が違うのだろうか。

結論としては、パラメータの与え方が異なっていると言える。一般に、電磁場のモードは波数ベクトルの二つの成分（k_x と k_z、y 成分はゼロと仮定した）と周波数の ω の三つをパラメータとして持つ。通常のフォトニックバンド計算では、k_x と k_z を与えて ω を決定する（分散関係)。一方、RCWA ではグレーティングの外側から、ある特定の周波数の波を入射することを考えるため、ω が与えられるパラメータである。また入射角度が与えられると、スネルの法則から k_x は保存するので、ω と k_x を与えて k_z を決定するのが、RCWA 中のモード計算であるといえる。

周波数と波数ベクトルの接線成分が与えられている計算は、RCWA だけでなく、例えば誘電率の異なる二つの空間の境界面での反射係数（フレネルの反射係数）の決定においても同様である。この場合には、周波数 ω(あるいは波数 k_0) と波数ベクトルの接線成分 k_x が与えられていて、各領域でどのような k_z を持つ波が存在するのかを、最初に決定する。場合によっては伝播波だけでなく、エバネッセント波が現れる場合がある。その後、それらの波に連続条件を課すことで反射係数が決定される。

以下では前節までの議論の延長として RCWA の中に出てくる固有値方程式を導く。

E 偏光の場合

出発点は、

$$-\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) E_y = \frac{\omega^2}{c^2} E_y \tag{33}$$

である。誘電率は x 方向にのみ変化すること ($\epsilon(\mathbf{x}) = \epsilon(x)$) を仮定し、右辺に持っていくと、

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) E_y = \epsilon(x) \frac{\omega^2}{c^2} E_y \tag{34}$$

ブロッホの定理から電場 $E_y(x, z)$ を次のように展開する。

$$E_y(x, z) = \exp(ik_z z) \sum_h \varphi_h \exp(i(G_h + k_x)x) \tag{35}$$

これを上の式に代入する。左辺は

$$
\begin{aligned}
& -\sum_m \left\{(ik_z)^2 + (i(G_m + k_x))^2\right\} \varphi_m \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp(ik_z z) \\
= & \sum_m \left\{k_z^2 + (G_m + k_x)^2\right\} \varphi_m \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp(ik_z z)
\end{aligned}
$$

となる。一方右辺の積は、

$$
\begin{aligned}
& \frac{\omega^2}{c^2} \sum_h \varepsilon_h \exp\left(iG_h x\right) \exp \sum_{m'} \varphi_{m'} \exp\left[i(G_{m'} + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) \\
= & \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{h,m'} \varepsilon_h \varphi_{m'} \exp\left[i(G_h + G_{m'} + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) \\
= & \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{m,m'} \varepsilon_{m-m'} \varphi_{m'} \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right)
\end{aligned}
$$

式変形の途中で $h + m' = m$ のように添え字を書きなおした。両辺の各 G_m 成分を等しいとすると、

$$
\left\{k_z^2 + (G_m + k_x)^2\right\} \varphi_m = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{m'} \epsilon_{m-m'} \varphi_{m'} \tag{36}
$$

が得られる。$\omega = ck_0$ を代入して k_0^2 で割り算すると

$$
\left(\frac{G_m + k_x}{k_0}\right)^2 \varphi_m - \sum_{m'} \epsilon_{m-m'} \varphi_{m'} = -\left(\frac{k_z}{k_0}\right)^2 \varphi_m \tag{37}
$$

$$
\sum_{m'} \left(\delta_{m,m'} \left(\frac{G_{m'} + k_x}{k_0}\right)^2 - \epsilon_{m-m'}\right) \varphi_{m'} = -\left(\frac{k_z}{k_0}\right)^2 \varphi_m \tag{38}
$$

が得られる。左辺の和を行列で表すとその行列は $\mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}$ になるから、RCWA 中の固有値問題と同一であることが分かる。

（ところで偏光を区別する TE 波あるいは TM 波という呼び方にはその定義に混乱があるようだ。何に対して transverse であるかが統一されていないように思われる。冒頭に挙げた教科書では E 偏光は TM 波、H 偏光は TE 波に対応する。二次元の場合には、並進対称性のある軸に対して Transverse と読んでいる。一方、上の行列は RCWA では TE 波と呼ばれる偏光に対応する行列で、入射面に対して Transverse としているようだ。）

H 偏光の場合

H 偏光に関するマクスウェル方程式から出発する。

$$
\left(\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial}{\partial x}\right) H_y = -\mu_0 \epsilon_0 \omega^2 H_y \tag{39}
$$

誘電率 $\epsilon(x)$ が x にしか依存しないことを利用して、

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial}{\partial x}\right) H_y &= -\mu_0 \epsilon_0 \omega^2 H_y \\
\left(+\mu_0 \epsilon_0 \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial}{\partial x}\right) H_y &= -\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial^2}{\partial z^2} H_y \\
\epsilon(x)\left(k_0^2 + \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\epsilon(x)}\frac{\partial}{\partial x}\right) H_y &= -\frac{\partial^2}{\partial z^2} H_y
\end{aligned}
$$

ブロッホの定理から磁場 $H_y(x,z)$ を次のように展開する。

$$H_y(x,z) = \sum_h \varphi_h \exp\left[i(G_h + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) \tag{40}$$

左辺の第二項は、微分した後に逆格子ベクトルの添え字が p になるように書き直すと、

$$-k_0^2 \sum_{p,q} \frac{G_p + k_x}{k_0} \kappa_{p-q} \frac{G_q + k_x}{k_0} \varphi_q \exp\left[i(G_p + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) \tag{41}$$

のようになる。左辺第一項を $k_0^2 \delta_{p,q} \varphi_q$ のように書き直して和の中に含めると、左辺全体は

$$-k_0^2 \epsilon(x) \sum_{p,q} \left(-\delta_{p,q} + \frac{G_p + k_x}{k_0} \kappa_{p-q} \frac{G_q + k_x}{k_0}\right) \varphi_q \exp\left[i(G_p + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) \tag{42}$$

さらに $\epsilon(x)$ に関する展開も含めると、

$$\begin{aligned}
& -k_0^2 \epsilon(x) \sum_{p,q} \left(\frac{G_p + k_x}{k_0} \kappa_{p-q} \frac{G_q + k_x}{k_0} - \delta_{p,q}\right) \varphi_q \exp\left[i(G_p + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (43) \\
= \; & -k_0^2 \sum_r \epsilon_r \exp\left(iG_r x\right) \sum_{p,q} \left(\frac{G_p + k_x}{k_0} \kappa_{p-q} \frac{G_q + k_x}{k_0} - \delta_{p,q}\right) \varphi_q \exp\left[i(G_p + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (44) \\
= \; & -k_0^2 \sum_{m,p,q} \epsilon_{m-p} \left(\frac{G_p + k_x}{k_0} \kappa_{p-q} \frac{G_q + k_x}{k_0} - \delta_{p,q}\right) \varphi_q \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (45) \\
= \; & \sum_m \sum_q \{\mathbf{E}(\mathbf{K}_x \mathbf{G} \mathbf{K}_x - \mathbf{I})\}_{m,q} \varphi_q \exp\left[i(G_m + k_x)x\right] \exp\left(ik_z z\right) && (46)
\end{aligned}$$

のように左辺の行列は $\mathbf{E}(\mathbf{K}_x \mathbf{G} \mathbf{K}_x - \mathbf{I})$ である。計算途中では添え字を $r + p = m$ のように置き換えた。一方、右辺は z 微分により k_z^2 が出るだけであるから、φ_q に関する固有値方程式が、RCWA における行列と同じであることが示された。