

Быстрый численный метод для моделирования одномерных дифракционных решеток

А.А.Щербаков, А.В.Тищенко

На основе метода обобщенных источников построен новый метод расчета дифракции света на одномерных диэлектрических дифракционных решетках с произвольным профилем. Метод является альтернативой широко используемому модальному фурье-методу, поскольку обладает теми же возможностями в задании различных профилей решеток, однако дает значительное преимущество при расчете сложных решеток, поскольку требует намного меньшего числа математических операций. Применимость метода показана на основе сравнения результатов расчетов с его использованием и результатов, полученных стандартными методами расчета дифракции света на решетках.

Ключевые слова: метод обобщенных источников, дифракция, дифракционные решетки, модальный фурье-метод.

1. Введение

Возможность точного моделирования дифракции на периодических структурах с разнообразными профилями очень важна для многих прикладных задач современной оптики [1]. Кроме того, в последнее время методы расчета дифракционных решеток стали применяться для изучения неперриодических структур – отдельных элементов дифракционной и интегральной оптики [2–5]. Использование искусственной периодичности в таких задачах оказывается оправданным, поскольку позволяет получать оценку искомого решения в тех областях, где неприменимы стандартные методы расчета электромагнитных характеристик отдельных неперриодических элементов, размеры которых сравнимы с длиной волны падающего излучения.

Среди методов численного расчета различных дифракционных решеток наиболее популярными на сегодняшний день являются модальный фурье-метод (МФМ) (Fourier modal method – FMM) [6, 7], американский вариант названия – RCWA (rigorous coupled wave approach) [8], и конечно-разностные методы во временном или частотном пространстве [1]. МФМ обладает широкими возможностями в задании различных профилей решеток, достаточно прост в реализации и хорошо подходит для изучения структур с характерными периодами как много меньшими длинами волны падающего на них излучения, так и сравнимыми с ней или незначительно ее превышающими. В нем реализуется поиск собственных мод (дифракцион-

ных порядков) дифракционной решетки в пространстве ее обратных векторов. Главный недостаток метода (как и всех модальных методов [9]) заключается в том, что его вычислительная сложность (число операций, необходимых для реализации алгоритма) зависит от числа N рассматриваемых дифракционных порядков как N^3 . Это означает, что необходимое для рассмотрения неперриодических структур увеличение числа периодов решетки и соответственное увеличение числа дифракционных порядков ведут к быстрому достижению пределов возможностей использования метода даже при вычислениях на мощных компьютерах. Тем не менее он зачастую оказывается предпочтительнее конечно-разностных схем, слабо учитывающих физическую специфику конкретных задач и требующих огромных затрат памяти для анализа сложных решеток.

Помимо упомянутых подходов к расчету дифракционных решеток, необходимо отметить также модальный метод [9, 10], методы Шандезона [9, 11] и Рэлея [12]. Модальный метод, в отличие от МФМ, осуществляет поиск истинных мод решетки, но обладает тем же недостатком – быстрым ростом вычислительной сложности с увеличением числа мод. Кроме того, необходимость построения модального базиса ограничивает область его применения фактически лишь решетками с прямоугольным профилем. Применение этого метода оправданно, например, в случаях, когда необходимо с большой точностью рассчитывать локальные поля или исследовать точность какого-либо более общего метода на примере прямоугольных решеток. Методы Шандезона и Рэлея основываются на гипотезе Рэлея о возможности представления поля в области решетки с помощью плоских волн и предоставляют возможность очень точного расчета другой частной задачи – решеток с профилями, представимыми гладкими функциями. В связи с этим методы Шандезона и Рэлея часто используются для анализа синусоидальных решеток.

Таким образом, для изучения оптических свойств сложных неперриодических элементов дифракционной и интегральной оптики с помощью методов расчета периодических структур необходимо преодолеть указанный предел сложности вычислений N^3 . В настоящей работе предла-

А.А.Щербаков. Московский физико-технический институт (государственный университет), Россия, Московская обл., 141700 Долгопрудный, Институтский пер., 9; e-mail: alex.shcherbakov@gmail.com

А.В.Тищенко. Московский физико-технический институт (государственный университет), Россия, Московская обл., 141700 Долгопрудный, Институтский пер., 9; место работы в настоящее время: Université Jean Monnet, Laboratoire Hubert Curien, 42000, 18 rue Prof. Benoît Lauras, Saint-Etienne, France; e-mail: alexandre.tishchenko@univ-st-etienne.fr

Поступила в редакцию 25 января 2010 г., после доработки – 19 апреля 2010 г.

гается подход к расчету дифракции света на решетках, альтернативный общепризнанному МФМ и позволяющий значительно снизить вычислительную сложность задачи – до $N \log N$. Новый метод основывается на методе обобщенных источников GSM (generalized source method) [13] и сводит задачу к самосогласованной системе линейных алгебраических уравнений. Для ее решения используется обобщенный метод минимальных невязок GMRES (generalized minimal residual method) [14], а особые свойства матриц, получаемых GSM, дают возможность производить все матрично-векторные умножения в GMRES с помощью быстрого преобразования Фурье (БПФ) [15]. Для моделирования дифракции на 2D-объектах в работе [16] был предложен похожий быстрый алгоритм, в котором итеративно и через БПФ решается интегральное уравнение Фредгольма в виде свертки.

2. Аналитическое решение

Для получения аналитических выражений, на основе которых строится численное решение задачи, используется метод обобщенных источников [13]. Он представляет собой схему для решения задач распространения электромагнитного излучения в неоднородных средах. Этот метод может быть описан как последовательность следующих двух шагов. Рассмотрим функцию $\varepsilon(\mathbf{r})$, описывающую пространственно неоднородную диэлектрическую проницаемость, соответствующую рассматриваемой задаче. Сначала исследуемая задача заменяется на другую, геометрия и распределение диэлектрической проницаемости $\varepsilon_b(\mathbf{r})$ которой не слишком сильно отличаются от первоначальных, но которая имеет известное точное решение уравнений Максвелла для любого распределения токов $\mathbf{J}(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{E}_b = \mathfrak{K}_b(\mathbf{J}), \quad (1)$$

где \mathfrak{K}_b – некоторый линейный оператор. Это решение будем в дальнейшем называть базисным, а соответствующую ему функцию $\varepsilon_b(\mathbf{r})$ – базисным распределением проницаемости.

Второй шаг метода обобщенных источников предполагает поиск искомого решения для задачи с $\varepsilon(\mathbf{r})$ в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathfrak{K}_b(\mathbf{J}_{\text{gen}}). \quad (2)$$

Здесь \mathbf{E}_0 – поле падающего на изучаемую систему излучения, а обобщенный источник

$$\mathbf{J}_{\text{gen}} = -i\omega\Delta\varepsilon\mathbf{E}, \quad (3)$$

где $\Delta\varepsilon = \varepsilon - \varepsilon_b$. Тем самым соотношение (2) становится неявным самосогласованным уравнением для нахождения неизвестных полей \mathbf{E} :

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathfrak{K}_b(-i\omega\Delta\varepsilon\mathbf{E}). \quad (4)$$

В работе [17] метод обобщенных источников использовался для построения численного метода для расчета рассеяния света на отдельных диэлектрических наночастицах. В настоящей работе метод применяется для расчета дифракции на одномерных плоских решетках с произвольным профилем.

Сначала, в соответствии с логикой GSM, необходимо выбрать базисную среду, базисное решение и получить

явный вид уравнения (2). Для этого рассмотрим плоскую одномерную дифракционную решетку глубиной h с периодом Λ , расположенную в плоскости xu и периодическую вдоль оси x . Предположим сначала, что рассматриваемая решетка расположена в однородной изотропной среде с проницаемостью ε_b , которую примем за базисную (изменения, вносимые присутствием двух различных сред с обеих сторон решетки, обсуждаются ниже). Тогда решение уравнения Гельмгольца для векторного потенциала \mathbf{A} в предположении, что использована калибровка Лоренца, имеет вид свертки [18]:

$$\mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{J} * G = \int_{V'} \mu_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV', \quad (5)$$

где интегрирование производится по области существования тока;

$$G(\mathbf{r}) = \frac{\exp(ik_b |\mathbf{r}|)}{4\pi |\mathbf{r}|} \quad (6)$$

– функция Грина скалярного уравнения Гельмгольца [18]; $k_b = \omega \sqrt{\varepsilon_b \mu_0}$. Здесь и далее для экономии места множитель $\exp(-i\omega t)$ опускается.

Для получения явного вида (2) с помощью (5) следует учесть, что ток в одномерной периодической структуре может быть разложен в сумму пространственных гармоник:

$$\mathbf{J}(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{j}_n(z) \exp(ik_{xn}x + ik_{y0}y), \quad (7)$$

где $k_{xn} = k_{x0} + nK = k_{x0} + 2\pi n/\Lambda$; k_{x0}, k_{y0} – компоненты волнового вектора падающей волны, возбуждающей ток (7). Подставляя (7) в (5) и выражая компоненты электрического поля через потенциалы, приходим к искомому соотношению для пространственных гармоник компонент электрического поля:

$$\begin{aligned} E_{\alpha n}(k_{xn}, z) &= \frac{\partial_{\alpha z}}{i\omega\varepsilon_b} j_{zn}(z) \\ &+ \omega\varepsilon_b \sum_{\beta=x,y,z} \left\{ Y_{\alpha\beta n}^+ \int_{-\infty}^z j_{\beta n}(z') \exp[ik_{zn}(z-z')] dz' \right. \\ &\left. + Y_{\alpha\beta n}^- \int_z^{\infty} j_{\beta n}(z') \exp[-ik_{zn}(z-z')] dz' \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $\alpha, \beta = x, y, z$; $k_{zn} = \sqrt{k_b^2 - k_{xn}^2 - k_{y0}^2}$; $Y_{\alpha\beta n}^{\pm} = (k_{\alpha n}^{\pm} k_{\beta n}^{\pm} - k_b^2 \delta_{\alpha\beta})/2k_{zn}$. Волновые векторы $\mathbf{k}_n^{\pm} = \langle k_{xn}, k_{y0} \pm k_{zn} \rangle^T$ соответствуют волнам, распространяющимся в положительном и отрицательном направлениях вдоль оси z . Заметим, что кроме плоских гармоник во всем пространстве поле (8) источника (7) содержит поправку в области источника и физически соответствует разрыву нормальной компоненты поля в плоскостях, перпендикулярных оси z .

Для удобства дальнейшего рассмотрения введем модифицированное поле, которое, в отличие от (8), всюду выражается суперпозицией плоских волн:

$$\tilde{E}_{x,yn}(k_{xn}, k_{y0}, z) = E_{x,yn}(k_{xn}, k_{y0}, z), \quad (9)$$

$$\tilde{E}_{zn}(k_{xn}, k_{y0}, z) = E_{zn}(k_{xn}, k_{y0}, z) - \frac{j_{zn}(z)}{i\omega\varepsilon_b}.$$

При этом в соответствии с (3)

$$\tilde{E}_z = E_z + \frac{\Delta \varepsilon E_z}{\varepsilon_b} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_b} E_z, \quad (10)$$

т. е. z -компонента модифицированного поля с точностью до константы совпадает с электрической индукцией и, следовательно, непрерывна на любой плоскости, параллельной xy .

В связи с тем, что в рассматриваемых структурах плоские волны являются базисными решениями в смысле метода обобщенных источников, удобно перейти к рассмотрению ТЕ и ТМ поляризованных гармоник вместо компонент электрического и магнитного полей. Введем векторы амплитуд a_n^{\pm} ТЕ волн и a_n^{\pm} ТМ волн

$$\mathbf{a}_n^{\pm} = \langle a_n^{\pm} \mathbf{a}_n^{\pm} \rangle^T, \quad (11)$$

где знак « \pm » показывает направление их распространения относительно оси z . Тогда, обозначив вектор амплитуд плоских гармоник падающей волны как $\mathbf{a}_{\text{inc}}^{\pm}(z)$, с учетом (9) и (11) перепишем выражение (8):

$$\mathbf{a}_n^{\pm}(z) = \delta_{n0} \mathbf{a}_{\text{inc}}^{\pm}(z) + \int_{-\infty}^{\infty} P_n^{\pm} R_n^{\pm}(z, z') \mathbf{j}_n(z') dz'. \quad (12)$$

Здесь

$$P_n^{\pm} = \begin{pmatrix} -\frac{\omega \mu_0 k_{y0}}{2\gamma_n k_n} & \frac{\omega \mu_0 k_{xn}}{2\gamma_n k_{zn}} & 0 \\ \pm \frac{k_{xn}}{2\gamma_n} & \pm \frac{k_{y0}}{2\gamma_n} & -\frac{\gamma_n}{2k_{zn}} \end{pmatrix}; \quad (13)$$

$$R_n^{\pm}(z, z') = \theta[\pm(z - z')] \exp[\pm i k_{zn}(z - z')]; \quad (14)$$

$$\theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0 \\ 1/2, & z = 0; \\ 0, & z < 0 \end{cases} \quad (15)$$

δ_{nm} – символ Кронекера; $\gamma_n = \sqrt{k_{xn}^2 + k_{y0}^2}$.

Полученное соотношение (12) определяет базисное решение метода обобщенных источников. Теперь необходимо получить формулу (3) в виде, пригодном для дальнейшего использования. Для этого разложим обе части (3) по фурье-гармоникам:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_n(z) &= -i\omega \{ [\varepsilon(x, z) - \varepsilon_b] \mathbf{E}(x, y, z) \}_n \\ &= -i\omega \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varepsilon_{n-m}(z) \mathbf{E}_m(z) + i\omega \varepsilon_b \mathbf{E}_n(z) \\ &= -i\omega \varepsilon_b \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Delta_{nm}(z) \mathbf{E}_m(z). \end{aligned} \quad (16)$$

Свертка в (16) представляется в виде произведения теплицевой матрицы (т.е. такой матрицы, элементы которой зависят лишь от разности индексов) $\Delta_{nm}(z)$, состоящей из фурье-гармоник диэлектрической проницаемости, и гармоник компонент электрического поля $E_{\alpha m}(z)$. Выражая в (16) вектор $\mathbf{E}_m(z)$ через (11), получаем

$$j_{n\alpha}(z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\beta=x,y,z} V_{nm}^{\alpha\beta}(z) [Q_{m\beta}^+ \mathbf{a}_m^+(z) + Q_{m\beta}^- \mathbf{a}_m^-(z)], \quad (17)$$

$$\alpha = x, y, z,$$

где Q^{\pm} – матрица перехода от амплитуд ТЕ и ТМ поляризованных волн к амплитудам компонент электрического поля,

$$Q_n^{\pm} = \begin{pmatrix} \frac{k_{y0}}{\gamma_n} & \mu \frac{k_{xn} k_{zn}}{\omega \varepsilon_b \gamma_n} \\ -\frac{k_{xn}}{\gamma_n} & \mu \frac{k_{y0} k_{zn}}{\omega \varepsilon_b \gamma_n} \\ 0 & \frac{\gamma_n}{\omega \varepsilon_b} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

а компоненты блочно-диагональной матрицы V записываются как

$$V_{nm}(z) = -i\omega \varepsilon_b \begin{pmatrix} \Delta_{nm}(z) & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{nm}(z) & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\Delta}_{nm}(z) \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Здесь $\bar{\Delta}$ – теплицева матрица с коэффициентами, выражающимися через фурье-образы обратной диэлектрической проницаемости:

$$\bar{\Delta}_{nm}(z) = \delta_{nm} - \varepsilon_b \bar{\varepsilon}_{n-m}(z), \quad (20)$$

$$\bar{\varepsilon}_{nm}(z) = \frac{1}{\Lambda} \int_0^{\Lambda} \frac{1}{\varepsilon(x, z)} \exp[-i(n-m)Kx] dx. \quad (21)$$

В итоге, подставляя (17) в (12), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_n^{\pm}(z) &= \delta_{n0} \mathbf{a}_{\text{inc}}^{\pm}(z) \\ &+ \sum_{\alpha=x,y,z} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\beta=x,y,z} P_{n\alpha}^{\pm} R_n^{\pm}(z, z') V_{m\beta}^{\alpha\beta}(z') \right. \\ &\left. - [Q_{m\beta}^+ \mathbf{a}_m^+(z') + Q_{m\beta}^- \mathbf{a}_m^-(z')] \right\} dz'. \end{aligned} \quad (22)$$

Уравнение (22) представляет собой аналог уравнения (4) метода обобщенных источников в применении к задаче дифракции электромагнитного излучения на одномерной периодической плоской структуре. Неявное самосогласованное уравнение (22), как будет показано в разд. 3, позволяет построить численный алгоритм как решение алгебраической системы линейных уравнений, для которой могут быть использованы мощные и хорошо разработанные методы линейной алгебры.

Заметим, что при получении соотношения (19) для матрицы V неявно предполагалось, что индекс, соответствующий дифракционным порядкам, пробегает бесконечное число значений. Однако в процессе численного решения задачи дифракции может быть учтено лишь конечное количество дифракционных порядков. Номер порядка, на котором происходит замена ряда конечной суммой, обозначим N_0 . Тогда для случая дифракционных решеток, которые характеризуются разрывной функцией $\varepsilon(x, z)$ (т.е. для профилированных решеток), функция $\mathbf{E}(x, y, z)$ также разрывна в пространственном слое, занимаемом решеткой, и матрица V имеет вид, отличный от (19), т.к. преобразование Фурье от произведения двух разрывных функций с общими точками разрыва (см. (16)) не определено [19]. Вытекающее из этого следствие можно кратко сформулировать следующим образом. Если две кусочно-непрерывные функции (f и g) не имеют совпадающих точек разрыва, ряд произведений их гармоник

$\sum_{n=-N}^N f_{m-n} g_n$ сходится к $\sum_{n=-\infty}^{\infty} f_{m-n} g_n$ при $N \rightarrow \infty$. Однако, если некоторые точки разрыва функций f и g совпадают, необходимо вычислять $\sum_{n=-N}^N [1/f]_{m-n}^{-1} g_n$ для того, чтобы корректно аппроксимировать рядом Фурье произведение fg . Отметим, что эти правила необходимо применять также и в МФМ. На протяжении долгого времени этот метод использовался без учета указанного правила, что являлось причиной плохой сходимости решения для дифракции ТМ поляризованных волн. Данный факт был обнаружен экспериментально в работе [7] и изучался в [20, 21] применительно к расчету дифракции на двумерных решетках.

Для применения указанных правил рассмотрим поля на границе профиля решетки, разделяющего различные среды. Как известно, тангенциальные компоненты электрического поля на этой границе непрерывны. Для этих компонент аппроксимация рядов Фурье произведения функций не требует обращения матриц и, следовательно,

$$(J_{\parallel})_n = -i\omega(D_{\parallel} - D_{b\parallel})_n = -i\omega\epsilon_b \sum_{m=-N_0}^{N_0} \Delta_{nm} (E_{\parallel})_m. \quad (23)$$

Нормальная компонента вектора \mathbf{D} на поверхности решетки непрерывна, однако соответствующая компонента \mathbf{E} претерпевает разрыв. Подстановка $(1/\epsilon)_{m-n}^{-1} E_n$ в (16) дает для нормальной компоненты обобщенного тока J_{\perp} следующее выражение:

$$(J_{\perp})_n = -i\omega(D_{\perp} - D_{b\perp})_n = -i\omega\epsilon_b \sum_{m=-N_0}^{N_0} \left(\frac{\bar{\epsilon}_{n-m}^{-1}}{\epsilon_b} - \delta_{nm} \right) (E_{\perp})_m. \quad (24)$$

Для того чтобы использовать связь между обобщенным током и полем (23) и (24), следует определить преобразование координат, которое выражает нормальные компоненты поля и тока через их x -, y - и z -компоненты. Пусть в каждой точке границы раздела двух сред новая координатная система вводится с помощью угла наклона ψ к оси z (рис. 1). Обозначим оси нового базиса как p , q , причем ось p перпендикулярна границе раздела сред, а оси y и q – параллельны.

Будем полагать в дальнейшем, что угол ψ – гладкая функция. Это не является сильным ограничением, поскольку данная функция фактически определена в некоторых точках на оси x и, следовательно, может быть экс-

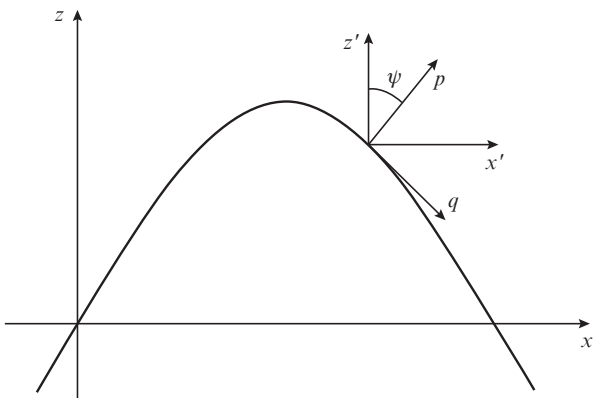


Рис.1. Локальная система координат на поверхности решетки.

траполирована гладкой функцией с узким спектром. В этом случае фурье-образы тригонометрических функций угла ψ всегда существуют, и соответствующие им теплицевы матрицы коммутируют с матрицами Δ_{nm} и $\bar{\Delta}_{nm}$. Таким образом, используя (23), (24) и матрицу поворота к новой системе координат, можно получить следующее соотношение между полем и обобщенным током:

$$j_{nc}(z) = -i\omega\epsilon_b \sum_{\beta=x,y,z} \sum_{m=-\infty}^{\infty} [\delta_{c\beta} \Delta_{nm}(z) + \Gamma_{c\beta np}(z) D_{pm}(z)] E_{m\beta}(z), \quad (25)$$

где тензор $\Gamma_{c\beta}$ имеет четыре ненулевые теплицевы компоненты: $\Gamma_{xxnm} = [\sin^2 \psi]_{nm}$, $\Gamma_{zznm} = [\cos^2 \psi]_{nm}$ и $\Gamma_{xznm} = \Gamma_{zxnm} = [\sin \psi \cos \psi]_{nm}$, а матрица

$$D_{nm}(z) = \frac{\bar{\epsilon}_{nm}^{-1}(z) - \epsilon_{nm}(z)}{\epsilon_b}. \quad (26)$$

Подстановка (25) в (10) дает

$$E_{nz} = - \sum_{m=-\infty}^{\infty} [\Gamma_{zx} CD]_{nm} E_{mx} + \sum_{m=-\infty}^{\infty} D_{nm} \tilde{E}_{mz}, \quad (27)$$

где

$$C_{nm} = \left[\frac{\epsilon_{nm}}{\epsilon_b} + \Gamma_{np} D_{pm} \right]^{-1}. \quad (28)$$

Таким образом, с помощью (25) и (27) получаем для матрицы $V_{nm}^{c\beta}$ вместо (19) новое выражение:

$$V_{nm}(z) = -i\omega\epsilon_b \begin{pmatrix} \Delta_{nm} + [\Gamma_{xx} D - \Gamma_{xz} \Gamma_{zx} DCD]_{nm} & 0 & [\Gamma_{zx} CD]_{nm} \\ [\Gamma_{xx} D]_{nm} & \Delta_{nm} & 0 \\ [\Gamma_{zx} DC]_{nm} & 0 & \delta_{nm} - C_{nm} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Итак, в результате применения метода обобщенных источников получено уравнение (22) с матрицей $V_{nm}^{c\beta}$ в форме (19) для случая непрерывно изменяющейся проницаемости и в форме (29) для случая наличия границ раздела различных сред.

3. Численное решение

Для вычисления интеграла в уравнении (22) разобьем плоский слой с дифракционной решеткой на достаточно большое число подслоев. Обозначим их количество как N_L . Предполагается, что все подслои имеют одинаковую толщину $\Delta h = h/N_L$, и амплитуды плоских гармоник представляются значениями $a_{nq}^{e,h\pm}$ в центральных точках подслоев z_q , где индекс n , как и раньше, нумерует дифракционные порядки, а индекс q – подслои: $q = 1, 2, \dots, N_L$, так что

$$z_q = z_0 + \left(q - \frac{N_L + 1}{2} \right) \Delta h. \quad (30)$$

Кроме того, как было указано в предыдущем разделе, будем учитывать конечное (от $-N_0$ до N_0) количество дифракционных порядков. Тогда уравнение (22) с соот-

ветственно выбранной матрицей V сведется к системе линейных алгебраических уравнений, позволяющих найти амплитуды ТЕ и ТМ гармоник в каждом подслое:

$$\begin{aligned} & \sum_q \sum_m A_{nmpq}^{\pm\pm} \mathbf{a}_{mq}^{\pm} \\ &= \sum_q \sum_m \left(I_{nmpq}^{\pm\pm} - \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{\beta=x,y,z} R_{npq}^{\pm} P_{n\alpha}^{\pm} V_{nmq}^{\alpha\beta} Q_{m\beta}^{\pm} \right) \mathbf{a}_{mq}^{\pm} \\ &= \delta_{n0} \mathbf{a}_{np}^{\text{inc}\pm}, \end{aligned} \quad (31)$$

где $I_{nmpq}^{\pm\pm} = \delta_{nm} \delta_{pq} \delta_{\pm eh}$ – единичная матрица. Матрицы $I_{nmpq}^{\pm\pm}$ и $A_{nmpq}^{\pm\pm}$ могут рассматриваться как квадратные блочные матрицы с $N_L \times N_L$ блоками, каждый из которых содержит $(2N_O + 1) \times (2N_O + 1)$ подблоков размером 4×4 .

Решение системы линейных уравнений (31) позволяет непосредственно рассчитать амплитуды дифракционных гармоник на границах рассматриваемого плоского слоя с решеткой. Обозначим z -координаты верхней и нижней границ этого слоя $z_1 = -h/2$ и $z_2 = h/2$ соответственно. Тогда из (22) и (31) получим

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_n^{\pm}(z_1, z_2) &= \delta_{n0} \mathbf{a}_n^{\text{inc}\pm}(z_1, z_2) \\ &+ \sum_q \sum_m \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{\beta=x,y,z} T_{nq}^{\pm} P_{n\alpha}^{\pm} V_{mq}^{\alpha\beta} Q_{m\beta}^{\pm} (A_{nmpq}^{\pm\pm})^{-1} \\ &\times \delta_{m0} \mathbf{a}_{mq}^{\text{inc}\pm}(z_1, z_2), \end{aligned} \quad (32)$$

где $\mathbf{a}_n^{\pm}(z_1, z_2)$ – вектор амплитуд ТЕ и ТМ гармоник на границах слоя; $\mathbf{a}_0^{\text{inc}\pm}(z_1, z_2)$ – аналогичный вектор амплитуд падающего поля; матрица T описывает распространение плоских гармоник из каждого подслоя к границам всего слоя $z_{1,2}$. Ее явный вид зависит от сред, окружающих слой с решеткой.

Напомним, что соотношения (31) и (32) выведены из следующего предположения: с обеих сторон решетки находится среда с диэлектрической проницаемостью ε_b . В этом случае матрица T имеет простой вид, и ее компоненты могут быть записаны как

$$\begin{aligned} T_{nq}^+ &= \Delta h \exp[ik_{zn} \Delta h (N_L + 1/2 - q)], \\ T_{nq}^- &= \Delta h \exp[ik_{zn} \Delta h (q - 1/2)]. \end{aligned} \quad (33)$$

Если же изучаемый слой находится между двумя различными средами с проницаемостями $\varepsilon_{1,2}$, то необходимо учитывать дополнительные волны, возникающие за счет переотражений на границах слоя. При этом, как можно видеть из структуры матриц, входящих в уравнения (31) и (32), изменятся лишь матрицы R и T . Обозначим коэффициенты отражения и преломления для волн, падающих изнутри слоя на границе $z = z_1$ между однородными средами с проницаемостями ε_1 и ε_b , как $r_{1n}^{\text{e,h}}$ и $t_{1n}^{\text{e,h}}$, а на границе $z = z_2$ – как $r_{2n}^{\text{e,h}}$ и $t_{2n}^{\text{e,h}}$. Тогда вместо выражения (33) необходимо использовать соотношения

$$\begin{aligned} T_{nq}^{(\text{e,h})(++)} &= \Delta h \frac{\exp[ik_{zn} \Delta h (N_L + 1/2 - q)]}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2k_{nz} h)}, \\ T_{nq}^{(\text{e,h})(+-)} &= \Delta h \frac{r_{1n}^{\text{e,h}} \exp[ik_{zn} \Delta h (2N_L + 1/2 - q)]}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2k_{nz} h)}, \end{aligned} \quad (34)$$

$$T_{nq}^{(\text{e,h})(-+)} = \Delta h \frac{r_{2n}^{\text{e,h}} \exp[ik_{zn} \Delta h (N_L + q - 1/2)]}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2k_{nz} h)},$$

$$T_{nq}^{(\text{e,h})(--)} = \Delta h \frac{\exp[ik_{zn} \Delta h (q - 1/2)]}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2k_{nz} h)}.$$

Новые выражения для компонент матрицы R , описывающей распространение гармоник между различными подслоями, принимают следующий вид:

$$R_{npq}^{(\text{e,h})(++)} = \Delta h \left[\theta_{p-q}^+ + \frac{r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2ik_{nz} h)}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2ik_{nz} h)} \right]$$

$$\times \exp[ik_{nz} \Delta h (p - q)],$$

$$R_{npq}^{(\text{e,h})(+-)} = \Delta h \frac{r_{1n}^{\text{e,h}} \exp[ik_{zn} \Delta h (2N_L + 1 - p - q)]}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2ik_{nz} h)}, \quad (35)$$

$$R_{npq}^{(\text{e,h})(-+)} = \Delta h \frac{r_{2n}^{\text{e,h}} \exp[ik_{zn} \Delta h (p + q - 1)]}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2ik_{nz} h)},$$

$$R_{npq}^{(\text{e,h})(--)} = \Delta h \left[\theta_{p-q}^- + \frac{r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2ik_{nz} h)}{1 - r_{1n}^{\text{e,h}} r_{2n}^{\text{e,h}} \exp(2ik_{nz} h)} \right]$$

$$\times \exp[-ik_{nz} \Delta h (p - q)].$$

Таким образом, определив все матрицы в уравнениях (31) и (32), необходимо построить алгоритм их численного решения. При этом сразу отметим, что размер матрицы A может быть очень большим (например, при $N_O, N_L \approx 10^3$ размер матрицы $\approx 10^6$), что исключает возможность ее прямого обращения. Для решения линейной системы (31) в данной работе применяется метод GMRES, поскольку он обладает наилучшей сходимостью среди всех методов решения линейных систем [14], что оказывается критичным при изучении достаточно сложных расщеплений $\varepsilon(x, z)$.

Каждая итерация GMRES содержит одно матрично-векторное умножение, которое является наиболее затратной по времени частью алгоритма. В общем случае эта операция требует $O(N^2)$ операций умножения (N – размер матриц), однако уравнения (31), (32) построены таким образом, что в данном случае можно существенно ускорить выполнение этой операции. Для этого нами используется тот факт, что произведение любой теплицевой матрицы на вектор можно вычислять с помощью быстрого преобразования Фурье (БПФ) за время $O(N \log N)$ путем «растяжения» соответствующей теплицевой матрицы в матрицу-циркулянт [15]. Покажем, что матрица A есть произведение лишь блочно-диагональных и теплицевых матриц. Матрицы P и Q – блочно-диагональные, что следует из определений (13) и (18). Матрица V – теплицева относительно индексов pq , т. к. состоит из фурье-образов диэлектрической проницаемости и тригонометрических функций угла ψ (см. (19) и (29)). Матрица R в виде (14) также является теплицевой относительно пространственных индексов pq , что следует из ее определения. В выражениях для модифицированной матрицы R (35) первая и последняя подматрицы имеют теплицевую структуру. Вторая и третья зависят от суммы индексов p и q , но их произведение на вектор также может быть представлено в

виде свертки путем замены знака у одного из индексов (при этом у соответствующих векторов необходимо изменить порядок элементов на обратный, а после умножения сделать обратное преобразование).

Таким образом, получается итеративный численный алгоритм, основанный на методе GMRES, в котором матрично-векторные умножения вычисляются с помощью БПФ. Метод является очень быстрым и обладает хорошей сходимостью. Для $(2N_o + 1)$ дифракционных порядков и N_L подслоев сложность алгоритма можно оценить как $O\{(2N_o + 1)N_L \log[(2N_o + 1)N_L]\}$ (для больших значений N_o и N_L она может рассматриваться как сколь угодно близкая к линейной относительно произведения $(2N_o + 1)N_L$). Таким образом, сложность рассматриваемого метода намного меньше, чем сложность алгоритма с прямым матрично-векторным умножением $O[(2N_o + 1)^2 N_L^2]$ или чем сложность МФМ $O[(2N_o + 1)^3 N_L]$.

4. Численные примеры

Как было указано во Введении, в настоящее время существуют несколько хорошо развитых и широко используемых методов расчета дифракционных решеток. Поэтому в рамках данной работы для проверки возможностей построенного метода было проведено его сравнение с МФМ для дифракции на голографических и прямоугольных решетках и с методом Рэлея для дифракции на синусоидальных решетках. Все вычисления проводились на персональном компьютере с частотой 2 ГГц и объемом оперативной памяти 8 ГБ. В процессе сравнения изучалась сходимость решения при изменении числа слоев, на которое разбивается решетка. При этом число дифракционных порядков является дополнительным параметром.

Для всех приводимых ниже расчетов выбиралась решетка с периодом 1 мкм и глубиной 0.5 мкм, длина волны падающего под углом 30° излучения составляла 0.6238 мкм. Ошибка определялась как усредненная абсолютная разность комплексных амплитуд дифрагированных волн в порядке от -5 до 5. Сходимость решения и его отличие от решения МФМ при дифракции на голографической решетке, задаваемой зависимостью диэлектрической проницаемости $\epsilon(x) = 6.25(1 + 0.1 \sin Kx)$ от координаты x , показана на рис. 2. На данные зависимости практически не влияет число дифракционных порядков, а значит, решение, полученное предлагаемым методом, совпадает с решением МФМ в пределе бесконечного числа слоев. Ана-

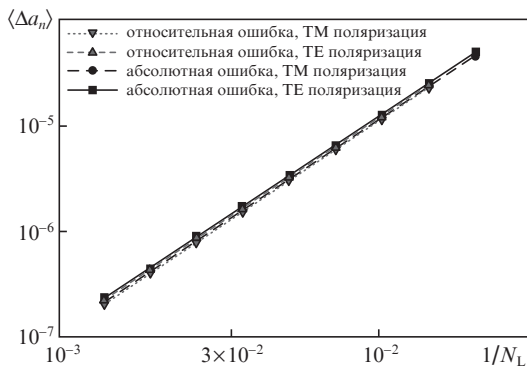


Рис.2. Сходимость метода GSM (относительная ошибка) и его сравнение с методом МФМ (абсолютная ошибка) при увеличении числа слоев, на которые разбивается слой с решеткой. Диэлектрическая проницаемость подложки равна 6.25, покрытие - 1.

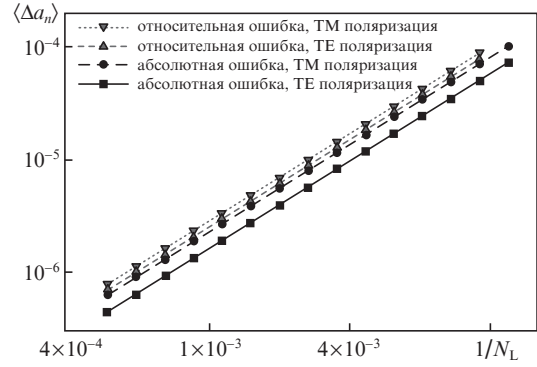


Рис.3. То же, что и на рис.2, но для решетки с прямоугольным профилем, коэффициентом заполнения 0.5 и диэлектрической проницаемостью 6.25.

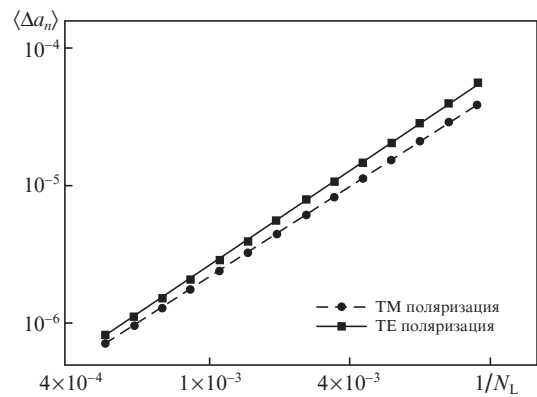


Рис.4. Сходимость метода при расчете дифракции на синусоидальной решетке. Параметры расчетов те же, что и в случае прямоугольной решетки (рис. 3).

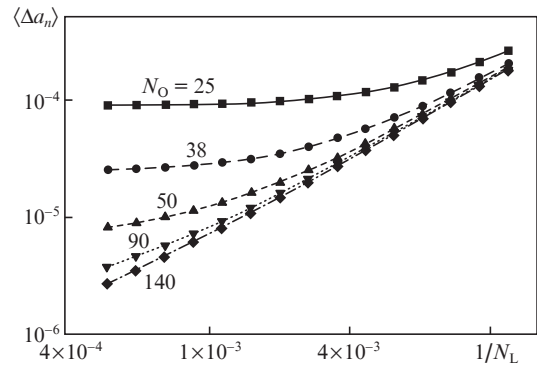


Рис.5. Сравнение рассматриваемого метода с методом Рэлея при дифракции ТЕ поляризованной волны на синусоидальной решетке. Зависимость усредненной разности решений приведена для различного числа дифракционных порядков, использованных при расчетах. Параметры расчетов те же, что и в предыдущих случаях.

логичный вывод можно сделать на основании сравнения результатов расчета дифракции на прямоугольной решетке (рис. 3).

В случае синусоидальной решетки, как можно видеть из рис.4–6, сходимость решения слабо отражает истинную ошибку. Сравнение здесь проводилось с методом Рэлея, который дает точное решение [12]. При каждом фиксированном числе дифракционных порядков и достаточно большом числе слоев предложенный метод дает некоторую постоянную ошибку, которая уменьшается с

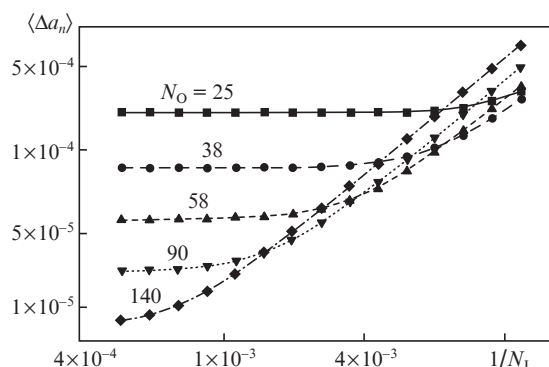


Рис.6. То же, что и на рис.5, но для ТМ поляризации.

уменьшением числа порядков. Поэтому в случае решеток сложной формы для получения точности, достаточной для практического использования результатов, необходимо, чтобы число дифракционных порядков превышало 100.

Примерное число итераций GMSRES для голографической решетки равно 20, для решетки с прямоугольным профилем – 50 и для синусоидальной решетки – 150. Выигрыш во времени счета по сравнению с МФМ для указанной синусоидальной решетки начинался с размера матриц для GSM порядка 10^5 , причем точность обоих методов составляла 10^{-4} . Это соответствует учету приблизительно 50 дифракционных порядков и разбиению решетки на 350 слоев при времени расчета дифракции ТЕ поляризации ~ 15 с, а ТМ поляризации – 50 с. В процессе численного моделирования нами были также выявлены следующие закономерности. При достаточно большом числе дифракционных порядков для получения разумной точности число слоев должно в 5–10 раз превышать число порядков. Толщина одного слоя составляет при этом десятые доли нанометра и менее. Требуемое же число дифракционных порядков сильно зависит от периода решетки и контраста диэлектрической проницаемости и растет с увеличением этих параметров. В итоге при конфигурации, аналогичной вышеприведенной, на персональном компьютере можно рассчитывать дифракцию на решетках, глубина и период которых равны нескольким длинам волн, а контраст примерно равен приведенному в примерах.

5. Заключение

Разработан новый численный метод для расчета дифракции на диэлектрических решетках. Метод можно рассматривать как альтернативу широко используемому на сегодняшний день МФМ для расчета решеток со сложным профилем. МФМ оказывается более предпочтитель-

ным в случае, когда распределение диэлектрической проницаемости не зависит от координаты z , т. к. при этом не требуется разбиения решетки на слои. Однако в общем случае, когда такое разбиение необходимо, эффективность предложенного метода растет с увеличением глубины и периода решетки. Действительно, увеличение глубины решетки требует увеличения N_L , а увеличение периодов – увеличения N_0 , поэтому за счет меньшей сложности вычислений новый метод позволяет рассматривать большие значения этих параметров и, следовательно, решетки с большей толщиной, периодом и более сложным распределением диэлектрической проницаемости. Что же касается изменения геометрических характеристик решеток в сторону уменьшения, то предложенный метод, как и МФМ, работает тем лучше, чем тоньше решетка, меньше период и контраст.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты № 09-07-00285-а и 09-07-12144-офи_м), а также Федерального агентства по науке и инновациям (контракт № 02.740.11.5058).

- Loewen E.G., Popov E. *Diffraction Gratings and their Applications* (New York: Marcel Dekker, 1997).
- Layet B., Taghizadeh M.R. *J. Opt. Soc. Am. A*, **14**, 1554 (1997).
- Glytsis E.N. *J. Opt. Soc. Am. A*, **19**, 702 (2002).
- Levy U., Mendlovic D., Marom E. *J. Opt. Soc. Am. A*, **18**, 86 (2001).
- Silberstein E., Lalanne P., Hugonin J.-P., Cao Q. *J. Opt. Soc. Am. A*, **18**, 2865 (2001).
- Knop K. *J. Opt. Soc. Am.*, **68**, 1206 (1978).
- Lalanne P., Morris G.M. *J. Opt. Soc. Am. A*, **13**, 779 (1996).
- Moharam M.G., Gaylord T.K. *J. Opt. Soc. Am.*, **71**, 811 (1981).
- Petit R. *Electromagnetic Theory of Gratings* (Berlin–New York: Springer–Verlag, 1980).
- Botten L.C., Craig M.S., McPhedran R.C., Adams J.L., Andrewartha J.R. *Optica Acta*, **28**, 413 (1981).
- Chandezon J., Maystre D., Raoult G. *J. Optics (Paris)*, **11**, 235 (1980).
- Tishchenko A.V. *Opt. Express*, **17**, 17102 (2009).
- Tishchenko A.V. *Opt. Quantum Electron.*, **32**, 1971 (2000).
- Saad Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (Philadelphia: SIAM, 2003).
- Блейхут Р. *Быстрые алгоритмы цифровой обработки сигналов* (М.: Мир, 1989).
- Котляр В.В., Налимов А.Г., Скиданов Р.В. *Оптич. журн.*, **72** (5), 55 (2005).
- Ахмеджанов И.М., Тищенко А.В., Щербаков А.А. *Оптика и спектроскопия*, **105**, 1034 (2008).
- Морс Ф.М., Фешбах Г. *Методы теоретической физики* (М.: ИЛ, 1958, т. 1).
- Шварц Л. *Математические методы для физических наук* (М.: Мир, 1964).
- Gotz P., Schuster T., Frenner K., Rafler S., Osten W. *Opt. Express*, **16**, 17295 (2008).
- Weiss T., Granet G., Gippius N.A., Tikhodeev S.G., Giessen H. *Opt. Express*, **17**, 8051 (2009).