

2D-RCWA

図1のように、回折格子が直交する二つの方向にある場合の反射率や回折効率を取り扱う方法として、二次元の厳密結合波解析法 (two dimensional rigorous coupled wave analysis) についてまとめる。深さ方向には回折格子の形状が変化しないと仮定する。主な参考文献は [1, 2]。

1 誘電率の展開

誘電率と逆誘電率を次のようにフーリエ級数展開する。

$$\epsilon(x, y) = \sum_{m, n=-\infty}^{\infty} \epsilon_{mn} \exp [+j(mK_x x + nK_y y)] \quad (1)$$

$$\frac{1}{\epsilon(x, y)} = \sum_{m, n=-\infty}^{\infty} \xi_{mn} \exp [+j(mK_x x + nK_y y)] \quad (2)$$

格子ベクトルの成分 K_x 、 K_y は x と y 方向の周期 Λ_x と Λ_y を用いて、

$$K_x = \frac{2\pi}{\Lambda_x}$$

$$K_y = \frac{2\pi}{\Lambda_y}$$

から定義され、展開係数 ϵ_{mn} 、 ξ_{mn} は

$$\epsilon_{mn} = \frac{1}{\Lambda_x \Lambda_y} \int_0^{\Lambda_x} \int_0^{\Lambda_y} \epsilon(x, y) \exp [-j(mK_x x + nK_y y)] dx dy \quad (3)$$

$$\xi_{mn} = \frac{1}{\Lambda_x \Lambda_y} \int_0^{\Lambda_x} \int_0^{\Lambda_y} \frac{1}{\epsilon(x, y)} \exp [-j(mK_x x + nK_y y)] dx dy \quad (4)$$

から計算できる。

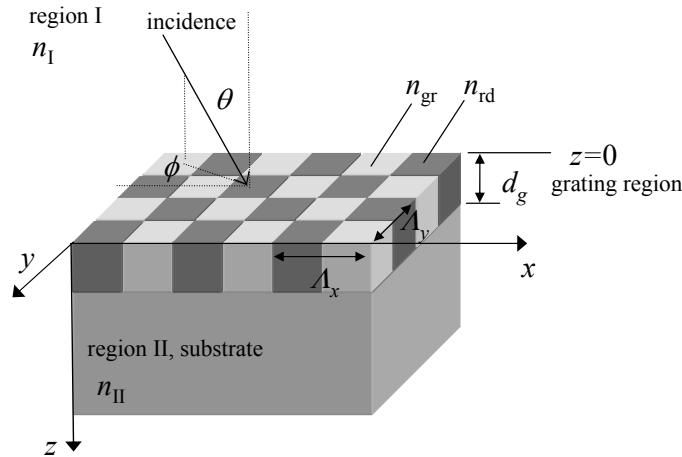


図1: グレーティングの配置と座標系の定義。屈折率は入射領域: n_I 、透過領域: n_{II} 、リッジ部分 n_{rd} 、凹み部分: n_{gr} 。 Λ_x と Λ_y はそれぞれ x 、 y 方向の周期。入射光の方向を極座標で表したときの天頂角と方位角が θ と ϕ 。回折格子のある領域の厚さが d_g 。

単純な例として、図2のように直方体の形が周期的に並んでいる場合には、式(3)-(4)の積分を実行すると、

$$\epsilon_{mn} = \epsilon_{gr}\delta_{mn0} + (\epsilon_{rd} - \epsilon_{gr}) \frac{\sin(m\pi f_x)}{m\pi} \frac{\sin(n\pi f_y)}{n\pi} \quad (5)$$

$$\xi_{mn} = \frac{1}{\epsilon_{gr}}\delta_{mn0} + \left(\frac{1}{\epsilon_{rd}} - \frac{1}{\epsilon_{gr}} \right) \frac{\sin(m\pi f_x)}{m\pi} \frac{\sin(n\pi f_y)}{n\pi} \quad (6)$$

のように展開係数が得られる。原点の取り方に依存する位相因子の任意性があるが、反射率の計算結果には影響をあたえない。

2 基本方程式

屈折率が空間的に変化する場合のマクスウェルの方程式を解くために、時間依存性として $\exp(+j\omega t)$ 、透磁率 $\mu = 1$ 、電流成分は無いと仮定する。電場 \vec{E} 、磁場 \vec{H} に関する方程式、

$$\nabla \times \vec{E} = -j\omega\mu_0\vec{H} \quad (7)$$

$$\nabla \times \vec{H} = j\omega\epsilon(x, y)\epsilon_0\vec{E} \quad (8)$$

には各成分で書くと合計6本の式が含まれている。これらから z 成分 (E_z と H_z) を消去し、左辺に z 微分が表れるように整理する (後で考える境界条件が、面に平行な成分のみを問題とするためである)。例えば E_y 成分に関しては、式(7)の x 成分から、

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -j\omega\mu_0 H_x \\ \frac{\partial E_y}{\partial z} &= +j\omega\mu_0 H_x + \frac{\partial E_z}{\partial y} \\ &= j\omega\mu_0 H_x + \frac{1}{j\omega\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] \\ \frac{1}{k_0} \frac{\partial E_y}{\partial z} &= \frac{j\omega\mu_0}{k_0} H_x - \frac{1}{j\omega\epsilon_0 k_0} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) \right] \end{aligned}$$

最後の式では両辺を真空中の波数ベクトル $k_0 = 2\pi/\lambda = \omega/c = \sqrt{\mu_0\epsilon_0}\omega$ で割り算した。右辺第一項の係数は $j\omega\mu_0/k_0 = j\sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ となり、第二項の係数は $-1/j\omega\epsilon_0 k_0 = +j/c\epsilon_0 k_0^2 = +j\sqrt{\mu_0/\epsilon_0}/k_0^2$ となる。空間座標を無次元化する変換 $k_0 x = x'$ 、 $k_0 y = y'$ 、 $k_0 z = z'$ を用いて、新しい変数 x' 、 y' 、 z' を定義すると、

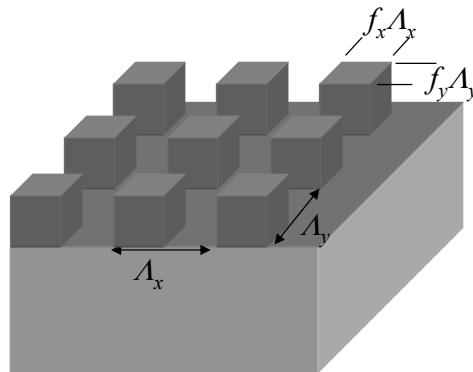


図2: 単純な例: 矩形の凸が周期的に並んだ場合

上の式は次のように変形できる。

$$\frac{\partial E_y}{\partial z'} = j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \left\{ H_x + \frac{\partial}{\partial y'} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial y'} - \frac{\partial H_y}{\partial x'} \right) \right] \right\} \quad (9)$$

同様に式 (7) の y 成分から、 E_x に関する式が次のように得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} &= -j\omega\mu_0 H_y \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} &= -j\omega\mu_0 H_y + \frac{\partial E_z}{\partial x} \\ &= -j\omega\mu_0 H_y + \frac{1}{j\omega\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] \\ \frac{1}{k_0} \frac{\partial E_x}{\partial z} &= j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \left\{ -H_y - \frac{1}{k_0^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] \right\} \\ \frac{\partial E_x}{\partial z'} &= j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \left\{ -H_y + \frac{\partial}{\partial x'} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial y'} - \frac{\partial H_y}{\partial x'} \right) \right] \right\} \end{aligned}$$

式 (8) の x 成分からは、

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

さらに、式 (8) の y 成分からは、

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} &= j\omega\epsilon\epsilon_0 E_y \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} &= +j\omega\epsilon\epsilon_0 E_y + \frac{\partial H_z}{\partial x} \\ \frac{1}{k_0} \frac{\partial H_x}{\partial z} &= +j \frac{\epsilon\epsilon_0}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}} E_y + \frac{1}{k_0} \frac{1}{(-)j\omega\mu_0} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \\ &= j\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \epsilon E_y + j \frac{1}{k_0^2} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \\ j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{\partial H_x}{\partial z'} &= -\epsilon E_y + \frac{\partial^2 E_x}{\partial x' \partial y'} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x'^2} \end{aligned}$$

以上まとめると、回折格子の領域の電磁場成分 E_x 、 E_y 、 H_x 、 H_y は次の 4 本の微分方程式で結びついている。

$$\frac{\partial E_y}{\partial z'} = j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \left[H_x + \frac{\partial}{\partial y'} \left\{ \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial y'} - \frac{\partial H_y}{\partial x'} \right) \right\} \right] \quad (10)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z'} = j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \left[-H_y + \frac{\partial}{\partial x'} \left\{ \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial y'} - \frac{\partial H_y}{\partial x'} \right) \right\} \right] \quad (11)$$

$$j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{\partial H_y}{\partial z'} = \epsilon E_x + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y'^2} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x' \partial y'} \quad (12)$$

$$j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{\partial H_x}{\partial z'} = -\epsilon E_y + \frac{\partial^2 E_x}{\partial x' \partial y'} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x'^2} \quad (13)$$

これらの式をみると、磁場を含む側には係数 $j\sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ が含まれている。次に磁場を級数展開する時には、この因子を含めて展開係数を定義することで関係式を単純化する。真空中を伝播する平面波の電場と磁場の振幅の比は $E/H = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ である。この量は真空の放射インピーダンスと呼ばれている。

3 展開係数の関係式を導出

回折格子の領域の電磁場を表すために、 x 成分と y 成分をブロッホの定理を用いて級数展開する。

$$E_x(x, y) = \sum_{mn} S_x^{mn}(z) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \quad (14)$$

$$E_y(x, y) = \sum_{mn} S_y^{mn}(z) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \quad (15)$$

$$H_x(x, y) = -j\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{mn} U_x^{mn}(z) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \quad (16)$$

$$H_y(x, y) = -j\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{mn} U_y^{mn}(z) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \quad (17)$$

$S_x^{mn}(z)$ 、 $S_y^{mn}(z)$ 、 $U_x^{mn}(z)$ 、 $U_y^{mn}(z)$ が展開係数で、 z 方向への伝播を考えるので、 z に依存する。展開に用いる空間波数 k_x^m 、 k_y^n は、入射波の波数ベクトルの x と y 成分 ($k_0 n_{\text{I}} \sin \theta \cos \phi$, $k_0 n_{\text{I}} \sin \theta \sin \phi$) に回折格子の格子ベクトルの整数倍が加わった次の式で与えられる。

$$k_x^m = k_0 n_{\text{I}} \sin \theta \cos \phi - m K_x \quad (18)$$

$$k_y^n = k_0 n_{\text{I}} \sin \theta \sin \phi - n K_y \quad (19)$$

n_{I} は入射媒質の屈折率で、極座標表示の天頂角 θ と方位角 ϕ を用いて表した。この定義から、 $m(n)$ が正の時には、 $x(y)$ の負方向に回折することになる。

式 (10) の各項をフーリエ級数で表し、展開係数の間に成立する関係式を求める。左辺は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_y}{\partial z'} &= \frac{\partial}{\partial z'} \sum_{mn} S_y^{mn}(z) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \\ &= \sum_{mn} \frac{\partial S_y^{mn}(z)}{\partial z'} \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \end{aligned}$$

右辺第一項は、

$$\begin{aligned} j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} H_x &= j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} (-j) \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{mn} U_x^{mn}(z) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \\ &= \sum_{mn} U_x^{mn}(z) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \end{aligned}$$

右辺第二項は

$$\begin{aligned} &j\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{\partial}{\partial y'} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial y'} - \frac{\partial H_y}{\partial x'} \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial y'} \left[\frac{1}{\epsilon} \sum_{pq} \left(\frac{\partial}{\partial y'} U_x^{pq} \exp[-j(k_x^p x + k_y^q y)] - \frac{\partial}{\partial x'} U_y^{pq} \exp[-j(k_x^p x + k_y^q y)] \right) \right] \\ &= -j \frac{\partial}{\partial y'} \left[\frac{1}{\epsilon} \sum_{pq} \left(\frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} - \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} \right) \exp[-j(k_x^p x + k_y^q y)] \right] \\ &= -j \frac{\partial}{\partial y'} \left[\sum_{st} \xi_{st} \exp[+j(sK_x x + tK_y y)] \sum_{pq} \left(\frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} - \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} \right) \exp[-j(k_x^p x + k_y^q y)] \right] \\ &= -j \sum_{st} \sum_{pq} \frac{\partial}{\partial y'} \left[\xi_{st} \left(\frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} - \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} \right) \exp[-j\{(k_x^p - sK_x)x + (k_y^q - tK_y)y\}] \right] \\ &= -j \sum_{st} \sum_{pq} \frac{\partial}{\partial y'} \left[\xi_{st} \left(\frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} - \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} \right) \exp[-j(k_x^{p+s} x + k_y^{q+t} y)] \right] \\ &= -j \sum_{mn} \sum_{pq} \frac{\partial}{\partial y'} \left[\xi_{m-p, n-q} \left(\frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} - \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} \right) \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)] \right] \end{aligned}$$

$$= -\sum_{mn} \frac{k_y^n}{k_0} \sum_{pq} \left[\xi_{m-p,n-q} \left(\frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} - \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} \right) \right] \exp[-j(k_x^m x + k_y^n y)]$$

mn 成分を比較して、

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_y^{mn}(z)}{\partial z'} &= U_x^{mn}(z) - \frac{k_y^n}{k_0} \sum_{pq} \left[\xi_{m-p,n-q} \left(\frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} - \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} \right) \right] \\ &= \frac{k_y^n}{k_0} \sum_{pq} \xi_{m-p,n-q} \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} + U_x^{mn}(z) - \frac{k_y^n}{k_0} \sum_{pq} \xi_{m-p,n-q} \frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} \end{aligned} \quad (20)$$

が得られる。同様に、式 (11)-(13) から次式が得られる。

$$\frac{\partial S_x^{mn}(z)}{\partial z'} = \frac{k_x^m}{k_0} \sum_{pq} \xi_{m-p,n-q} \frac{k_x^p}{k_0} U_y^{pq} - U_y^{mn}(z) - \frac{k_x^m}{k_0} \sum_{pq} \xi_{m-p,n-q} \frac{k_y^q}{k_0} U_x^{pq} \quad (21)$$

$$\frac{\partial U_y^{mn}(z)}{\partial z'} = \frac{k_y^n}{k_0} \frac{k_x^m}{k_0} S_y^{mn} + \sum_{pq} \varepsilon_{m-p,n-q} S_x^{pq} - \left(\frac{k_y^n}{k_0} \right)^2 S_x^{mn} \quad (22)$$

$$\frac{\partial U_x^{mn}(z)}{\partial z'} = \left(\frac{k_x^m}{k_0} \right)^2 S_y^{mn} - \sum_{pq} \varepsilon_{m-p,n-q} S_y^{pq} - \frac{k_y^n}{k_0} \frac{k_x^m}{k_0} S_x^{pq} \quad (23)$$

4 固有値問題

RCWA を coding する際には、線形な和で書かれる式 (20)-(23) を行列で表現し、固有値を求めることで方程式を解いていく。そのため、次のように添え字を減らす工夫が必要である。

$$\begin{aligned} u &= (m-1)s + n \\ v &= (p-1)s + q \end{aligned}$$

ここで s は有限に打ち切った展開のモード数で、 n と m それぞれに s 個の成分ある。したがって、 $S_x^{mn} = S_x^u$ のような置き換えを行ったときの添え字 u には s^2 個の成分がある。このような添え字の置き換えにより、次の s^2 個の成分を持つベクトルと、 $s^2 \times s^2$ 次元の行列を定義する。

$$\begin{aligned} S_x^{mn} &= S_x^u & \xi_{m-p,n-q} &= \Xi_{uv} \\ S_y^{mn} &= S_y^u & \varepsilon_{m-p,n-q} &= E_{uv} \\ U_x^{mn} &= U_x^u & k_x^m/k_0 \delta_{uv} &= K_x^{uv} \\ U_y^{mn} &= U_y^u & k_y^n/k_0 \delta_{uv} &= K_y^{uv} \end{aligned}$$

[追記] m, n は式 (18)-(19) において、回折の次数を表す整数として定義された。その展開は 0 次をはさんで正と負の両側で行うのが自然だろう。一方、 u と v を、コーディングした時の二次元配列の添え字だと思えば、 m や n も正や負の値を持つ展開の次数ではなく、格納してあるベクトル成分の要素番号だと思っただ方がわかりやすいようだ。

これらの定義を利用すると式 (20)-(23) は次のように書き表すことができる。

$$\begin{pmatrix} \bar{S}'_y \\ \bar{S}'_x \\ \bar{U}'_y \\ \bar{U}'_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_x & \hat{1} - \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_y \\ 0 & 0 & \hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_x - \hat{1} & -\hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_y \\ \hat{K}_x \hat{K}_y & \hat{E} - \hat{K}_y^2 & 0 & 0 \\ \hat{K}_x^2 - \hat{E} & -\hat{K}_x \hat{K}_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{S}_y \\ \bar{S}_x \\ \bar{U}_y \\ \bar{U}_x \end{pmatrix}$$

論文 [2] にあわせて、ベクトルには上棒 \bar{X} を、行列にはハット \hat{X} をつけて標記した。上の行列は二つの偏光モードを含んだ形になっているが、TM 偏光の収束性を改善するために、次の行列を用いて行列 \hat{E} を

置換することが有効であることが報告されている [3]。

$$\begin{aligned}\hat{E}_1 &= \alpha \hat{\Xi}^{-1} + (1 - \alpha) \hat{E} \\ \hat{E}_2 &= \alpha \hat{E} + (1 - \alpha) \hat{\Xi}^{-1}\end{aligned}$$

これらは展開次数を無限次元にまで広げれば行列 \hat{E} に等しい。この置き換えをすると解くべき方程式は次のようになる。

$$\begin{pmatrix} \bar{S}'_y \\ \bar{S}'_x \\ \bar{U}'_y \\ \bar{U}'_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_x & -\hat{D} \\ 0 & 0 & \hat{B} & -\hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_y \\ \hat{K}_x \hat{K}_y & \hat{E}_1 - \hat{K}_y^2 & 0 & 0 \\ \hat{K}_x^2 - \hat{E}_2 & -\hat{K}_x \hat{K}_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{S}_y \\ \bar{S}_x \\ \bar{U}_y \\ \bar{U}_x \end{pmatrix} \quad (24)$$

ここで、新たに二つの行列を定義した。

$$\begin{aligned}\hat{B} &= \hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_x - \hat{1} \\ \hat{D} &= \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_y - \hat{1}\end{aligned}$$

さらに、次のように二回微分の方程式を扱うことにすると、扱う行列のサイズが小さくなるので、計算時間の大幅に短縮することができる。

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \bar{S}_y}{\partial z'^2} \\ \frac{\partial^2 \bar{S}_x}{\partial z'^2} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_x & -\hat{D} \\ \hat{B} & -\hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{U}_y}{\partial z'} \\ \frac{\partial \bar{U}_x}{\partial z'} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_x & -\hat{D} \\ \hat{B} & -\hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{K}_x \hat{K}_y & \hat{E}_1 - \hat{K}_y^2 \\ \hat{K}_x^2 - \hat{E}_2 & -\hat{K}_x \hat{K}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{S}_y \\ \bar{S}_x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_x \hat{K}_x \hat{K}_y - \hat{D} \hat{K}_x^2 + \hat{D} \hat{E}_2 & \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_x (\hat{E}_1 - \hat{K}_y^2) + \hat{D} \hat{K}_x \hat{K}_y \\ \hat{B} \hat{K}_x \hat{K}_y - \hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_y (\hat{K}_x^2 - \hat{E}_2) & \hat{B} \hat{E}_1 - \hat{B} \hat{K}_y^2 + \hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_y \hat{K}_x \hat{K}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{S}_y \\ \bar{S}_x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{K}_x^2 + \hat{D} \hat{E}_2 & \hat{K}_y (\hat{\Xi} \hat{K}_x \hat{E}_1 - \hat{K}_x) \\ \hat{K}_x (\hat{\Xi} \hat{K}_y \hat{E}_2 - \hat{K}_y) & \hat{K}_y^2 + \hat{B} \hat{E}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{S}_y \\ \bar{S}_x \end{pmatrix}\end{aligned} \quad (25)$$

行列 \hat{K}_x と \hat{K}_y は対角行列なので、可換であることを用いた。同様に、

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \bar{U}_y}{\partial z'^2} \\ \frac{\partial^2 \bar{U}_x}{\partial z'^2} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \hat{K}_x \hat{K}_y & \hat{E}_1 - \hat{K}_y^2 \\ \hat{K}_x^2 - \hat{E}_2 & -\hat{K}_x \hat{K}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{S}_y}{\partial z'} \\ \frac{\partial \bar{S}_x}{\partial z'} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{K}_x \hat{K}_y & \hat{E}_1 - \hat{K}_y^2 \\ \hat{K}_x^2 - \hat{E}_2 & -\hat{K}_x \hat{K}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{\Xi} \hat{K}_x & -\hat{D} \\ \hat{B} & -\hat{K}_x \hat{\Xi} \hat{K}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U}_y \\ \bar{U}_x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{K}_y^2 + \hat{E}_1 \hat{B} & (\hat{K}_x - \hat{E}_1 \hat{K}_x \hat{\Xi}) \hat{K}_y \\ (\hat{K}_y - \hat{E}_2 \hat{K}_y \hat{\Xi}) \hat{K}_x & \hat{K}_x^2 + \hat{E}_2 \hat{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U}_y \\ \bar{U}_x \end{pmatrix}\end{aligned} \quad (26)$$

二つの式 (25)-(26) の両方で固有値問題を解く必要はない。例えば、式 (25) の右辺の行列の固有値問題を解き、右固有ベクトル (列ベクトル) を並べた行列を \hat{W} とする。固有値を λ_u とする表し、 $\sqrt{\lambda_u}$ を対角成分とする対角行列 \hat{Q} を定義すると、回折格子領域中の電場展開成分 \bar{S}_y と \bar{S}_x は次の展開で書ける。

$$\begin{pmatrix} \bar{S}_y \\ \bar{S}_x \end{pmatrix} \equiv \bar{S} = \hat{W} \left[\exp(-\hat{Q}z') \bar{c}^+ + \exp(+\hat{Q}(z' - k_0 h_g)) \bar{c}^- \right] \quad (27)$$

ここで h_g は回折格子の深さで、 \bar{c}^+ と \bar{c}^- は $+z$ と $-z$ 方向に進行する波の展開係数である。これらはモードの個数分の成分を持つベクトルである。行列 \hat{Q} が指数の上にあるが、 \hat{Q} は対角行列なので各対角成分の指数が対角に並んだ行列と考えればよい。

[追記] 式 (27) 中の係数 \bar{c}^+ と \bar{c}^- のとり方は論文 [2] の式 (56) と逆にしてある。記号なのでどちらでもかまわないが、+ と - の意味づけがしやすい。また、後に出てくる式との対応を考えると、[2] では誤って反対になっていると思われる。

式 (24) の上半分に注目してこの関係式を用いれば、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \bar{U}_y \\ \bar{U}_x \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \hat{K}_y \hat{\epsilon} \hat{K}_x & -\hat{D} \\ \hat{B} & -\hat{K}_x \hat{\epsilon} \hat{K}_y \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{S}_y}{\partial z'} \\ \frac{\partial \bar{S}_x}{\partial z'} \end{pmatrix} \\ &\equiv \hat{\Omega} \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{S}_y}{\partial z'} \\ \frac{\partial \bar{S}_x}{\partial z'} \end{pmatrix} \\ &= \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q} \left[-\exp(-\hat{Q}z') \bar{c}^+ + \exp(\hat{Q}(z' - k_0 h_g)) \bar{c}^- \right] \end{aligned}$$

のように \bar{U}_y 、 \bar{U}_x を得ることができる。

[追記] 式 (25) 中の行列の固有値は必ず実数になるのだろうか？実数であるとするとは分かりやすい。波数ベクトルは固有値の平方根なので、負の場合には伝播波、実の場合にはエバネッセント波となって、モードが伝播する様子と対応がつく。実際、一次元の RCWA で TE モードを表す行列はエルミートになっている。しかし、TM モードの行列は必ずしもエルミートではなく、二次元の場合もエルミートではないようだ。

5 入射媒質中の電磁場を展開

大きさを 1 に規格化した入射光の電場 \bar{E}_{inc} を次のように書き表す。

$$\bar{E}_{inc} = \bar{u} \exp[-jn_{\text{I}}k_0\bar{k}_0 \cdot \bar{x}] \quad (28)$$

$$= \bar{u} \exp[-jk_0n_{\text{I}}(\sin\theta \cos\phi x + \sin\theta \sin\phi y + \cos\theta z)] \quad (29)$$

\bar{k}_0 は入射方向を示す単位ベクトルで、極座標表示での天頂角 θ と方位角 ϕ を用いて表した。ベクトル \bar{x} は空間座標 $\bar{x} = (x, y, z)$ である。偏光方向を表す電場ベクトル \bar{u} は、

$$\bar{u} = (\cos\psi \cos\theta \cos\phi - \sin\psi \sin\phi, \cos\psi \cos\theta \sin\phi + \sin\psi \sin\phi, -\cos\psi \sin\theta) \quad (30)$$

のようにかける。この \bar{u} の定義式に含まれる角度 ψ は次のように考える。二つの直線偏光を表す電場ベクトルを \bar{e}_1 、 \bar{e}_2 であらわすと、自由空間の平面波なので、入射方向 \bar{k}_0 と \bar{e}_1 、 \bar{e}_2 は垂直である。さらに \bar{e}_1 は \bar{k}_0 と z 軸で作られる平面（入射面）内に存在するように選び、もう一つの \bar{e}_2 はその面に垂直であるとする。 \bar{x} 、 \bar{y} 、 \bar{z} を各座標方向に向いた単位ベクトルとして、

$$\begin{aligned} \bar{e}_2 &\propto (0, 0, 1) \times \bar{k}_0 \\ &\propto \begin{vmatrix} \bar{x} & \bar{y} & \bar{z} \\ 0 & 0 & 1 \\ \sin\theta \cos\phi & \sin\theta \sin\phi & \cos\theta \end{vmatrix} \\ &\propto (-\sin\theta \sin\phi, \sin\theta \cos\phi, 0) \\ \bar{e}_2 &= (-\sin\phi, \cos\phi, 0) \end{aligned} \quad (31)$$

のようにしてベクトル \bar{e}_2 が得られる。最後の行ではベクトルの長さが 1 になるように規格化した。 \bar{e}_1 に関しては、

$$\begin{aligned} \bar{e}_1 &= \bar{e}_2 \times \bar{k}_0 \\ &= \begin{vmatrix} \bar{x} & \bar{y} & \bar{z} \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ \sin\theta \cos\phi & \sin\theta \sin\phi & \cos\theta \end{vmatrix} \\ &= (\cos\theta \cos\phi, +\cos\theta \sin\phi, 0) \\ &= (\cos\theta \cos\phi, \cos\theta \sin\phi, -\sin\theta) \end{aligned} \quad (32)$$

である。一般の偏光方向が \bar{e}_1 と \bar{e}_2 の間にあるとき、角度 ψ だけ \bar{e}_1 方向から \bar{e}_2 方向に傾いているとすると、それぞれの方向に重み $\cos \psi$ 、 $\sin \psi$ をかけてベクトル和を計算することで

$$\begin{aligned}\bar{u} &= \cos \psi \bar{e}_1 + \sin \psi \bar{e}_2 \\ &= \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \theta \cos \phi - \sin \psi \sin \phi \\ \cos \psi \cos \theta \sin \phi + \sin \psi \cos \phi \\ -\cos \psi \sin \theta \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (33)$$

となって、式 (30) が得られる。

入射領域の電場 \bar{E}_I は、入射波と反射波による寄与をあわせて次のように書ける。

$$\bar{E}_I = \bar{E}_{inc} + \sum_u \bar{R}^u \exp(-j\bar{k}_{re}^u \cdot \bar{x}) \quad (34)$$

$$= \bar{u} \exp[-jn_I k_0 \bar{k}_0 \cdot \bar{x}] + \sum_u \bar{R}^u \exp(-j\bar{k}_{re}^u \cdot \bar{x}) \quad (35)$$

\bar{R}^u は u で表される方向に反射された光の電場ベクトルで、その方向を表すためのベクトル \bar{k}_{re}^u を次のように定義する。

$$\bar{k}_{re}^u = (k_x^m, k_y^n, -k_z^{I,u}) \quad (36)$$

z 成分の符号がマイナスになっているのは反射したことを表すためである。 z 成分 k_z^u は分散関係

$$(k_x^m)^2 + (k_y^n)^2 + (k_z^{I,u})^2 = (k_0 n_I)^2 \quad (37)$$

を用いて次のように計算される。

$$k_z^{I,u} \equiv k_z^{mn} = \begin{cases} +\sqrt{(k_0 n_I)^2 - (k_x^m)^2 - (k_y^n)^2} & \dots \quad (k_0 n_I)^2 > (k_x^m)^2 + (k_y^n)^2 \text{ のとき} \\ -j\sqrt{(k_x^m)^2 + (k_y^n)^2 - (k_0 n_I)^2} & \dots \quad (k_0 n_I)^2 < (k_x^m)^2 + (k_y^n)^2 \text{ のとき} \end{cases}$$

([追記] そもそも式 (35) で電場の偏光ベクトル \bar{R}^u に二つのモードを押し込めて定義したために、後の偏光特性に関する議論が面倒になっている。最初から電場の特定の偏光成分として s 偏光を、磁場の特定の成分で p 偏光を定義し、両者の和として反射波を表現しておけば後の議論は簡単にできそうだ。)

式 (35) で電場が与えられる場合の磁場を計算する。マクスウェルの方程式 (7) より

$$\begin{aligned}-j\omega\mu_0\bar{H} &= \nabla \times \bar{E} \\ \bar{H} &= -\frac{1}{j\omega\mu_0} \nabla \times \bar{E} \\ &= +j\frac{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}{\mu_0 k_0} \nabla \times \bar{E} \\ &= -j\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \left(-\frac{1}{k_0} \nabla \times \bar{E} \right)\end{aligned}$$

である。手前の因子は磁場の展開式 (16)-(17) にあわせた。入射光に関しては、

$$\begin{aligned}-\frac{1}{k_0} \nabla \times \bar{E}_{inc} &= -\frac{1}{k_0} \nabla \times \bar{u} \exp(-jn_I k_0 \bar{k}_0 \cdot \bar{x}) \\ &= -\frac{1}{k_0} (-jn_I k_0) \bar{k}_0 \times \bar{u} \exp(-jn_I k_0 \bar{k}_0 \cdot \bar{x}) \\ &= +jn_I \bar{k}_0 \times \bar{u} \exp(-jn_I k_0 \bar{k}_0 \cdot \bar{x})\end{aligned}$$

反射光に関しては、

$$-\frac{1}{k_0} \nabla \times \sum_u \bar{R}^u \exp(-j\bar{k}_{re}^u \cdot \bar{x}) = \frac{j}{k_0} \sum_u \bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u \exp(-j\bar{k}_{re}^u \cdot \bar{x}) \quad (38)$$

二つの項をあわせると、

$$\bar{H}_I = -j\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \left(jn_I \bar{k}_0 \times \bar{u} \exp(-jn_I k_0 \bar{k}_0 \cdot \bar{x}) + \frac{j}{k_0} \sum_u \bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u \exp(-j\bar{k}_{re}^u \cdot \bar{x}) \right) \quad (39)$$

となる。

6 境界条件 ($z = 0$)

入射領域と回折格子のある領域の境界条件を考える。式 (14)-(17) によって電場磁場の成分を展開したことを思い出すと、界面において接線成分が連続であることから次の境界条件が得られる。

$$\bar{u}_x \delta_{u0} + R_x^u = S_x^u(0) \quad (40)$$

$$\bar{u}_y \delta_{u0} + R_y^u = S_y^u(0) \quad (41)$$

$$jn_{\text{I}}(\bar{k}_0 \times \bar{u})_x \delta_{u0} + \frac{j}{k_0}(\bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u)_x = U_x^u(0) \quad (42)$$

$$jn_{\text{I}}(\bar{k}_0 \times \bar{u})_y \delta_{u0} + \frac{j}{k_0}(\bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u)_y = U_y^u(0) \quad (43)$$

波数成分で展開したそれぞれの項で連続であることから、それぞれの添え字 u (あるいは m と n) において上の式は成立する。左辺第一項の δ 関数は入射光が 0 次の場合にのみ存在することを表している。($\delta_{m0}\delta_{n0}$ と書くべきだろうか。)

反射の偏光特性を表すために、それぞれの回折方向において二つの偏光モードに対応する反射率が定義できると良いだろう (しかも、上の境界条件には \bar{R}^u の z 成分も含まれていて条件式が足りない)。そこで、回折 (反射) 方向を xy 平面内に射影したベクトルと x 軸と成す角度 φ_u を定義する。

$$\varphi_u = \tan^{-1} (k_y^n / k_x^m) \quad (44)$$

φ_u で表される方向に、電場 (あるいは磁場) が垂直である条件から二つの反射率を定義する。電場が垂直なモードが s 波 (TE 波)、一方磁場が垂直な場合が p 波 (TM 波) である。4 本の境界条件式 (40)-(43) の線形結合をとり、上の定義にあう反射率を直接計算する形に変形する。

([追記] 角度 φ_u は 0 から 2π までの範囲を持つべきなので、論文 [2] で採用されている上の定義式 (44) だと戻り値が半分の領域になるので正しくない。coding では四つの象限を含めた角度になるように定義するか、あるいは後で用いる φ_u の正弦と余弦をベクトルの成分から直接定義した方がよさそうだ。)

xy 平面内にあり角度 φ_u で表される方向を示す単位ベクトル \bar{p} と、それに直交するベクトル \bar{s} を次のように定義する。

$$\bar{p} = (\cos \varphi_u, \sin \varphi_u, 0) \quad (45)$$

$$\bar{s} = (-\sin \varphi_u, \cos \varphi_u, 0) \quad (46)$$

s 偏光の反射率 r_s^u は定義により次式で与えられる。

$$r_s^u \equiv \bar{s} \cdot (R_x^u, R_y^u, R_z^u) = -R_x^u \sin \varphi_u + R_y^u \cos \varphi_u \quad (47)$$

式 (40)-(41) から、上の形になるように電場の成分を計算すると、入射波の項に関しては、

$$\begin{aligned} \bar{u} \cdot \bar{s} &= (-\bar{u}_x \sin \varphi_u + \bar{u}_y \cos \varphi_u) \delta_{u0} \\ &= -\sin \phi (\cos \psi \cos \theta \cos \phi - \sin \psi \sin \phi) + \cos \phi (\cos \psi \cos \theta \sin \phi + \sin \psi \cos \phi) \\ &= +\sin \psi \end{aligned} \quad (48)$$

ここで、 δ 関数により $\varphi_u = \phi$ として置き換えた。(このとき $\bar{s} = \bar{e}_2$ だから、上の内積は計算せずとも式 (33) よりすぐに分かる。) したがって s 波の電場成分に関する境界条件は

$$\sin \psi \delta_{u0} + r_s^u = -S_x^u(0) \sin \varphi_u + S_y^u(0) \cos \varphi_u \quad (49)$$

となる。磁場に関する接続条件は、ベクトル \bar{p} に沿った方向を考えることで得られる。入射光に関しては式 (39) の右辺第一項から、

$$jn_{\text{I}}(\bar{k}_0 \times \bar{u}) \cdot \bar{p}$$

$$\begin{aligned}
&= jn_{\mathbf{I}} [(k_{0y}u_z - k_{0z}u_y) \cos \varphi_u + (k_{0z}u_x - k_{0x}u_z) \sin \varphi_u] \\
&= jn_{\mathbf{I}} \{ [-\sin \theta \sin \phi \cos \psi \sin \theta - \cos \theta (\cos \psi \cos \theta \sin \phi + \sin \psi \cos \phi)] \cos \varphi_u \\
&\quad + [\cos \theta (\cos \psi \cos \theta \cos \phi - \sin \psi \sin \phi) - \sin \theta \cos \phi (-\cos \psi \sin \theta)] \sin \varphi_u \} \\
&= jn_{\mathbf{I}} [-\sin \theta \sin \phi \cos \psi \sin \theta \cos \phi \\
&\quad - \cos \theta \cos \psi \cos \theta \sin \phi \cos \phi \\
&\quad - \cos \theta \sin \psi \cos \phi \cos \phi \\
&\quad + \cos \theta \cos \psi \cos \theta \cos \phi \sin \phi \\
&\quad - \cos \theta \sin \psi \sin \phi \sin \phi \\
&\quad + \sin \theta \cos \phi \cos \psi \sin \theta \sin \phi] \\
&= -jn_{\mathbf{I}} \cos \theta \sin \psi
\end{aligned}$$

入射波は0次方向のみしか存在しないことから、 $\varphi_u = \phi$ の置き換えを計算の途中で行った。第1項と第6項、第2項と第4項がキャンセルして最終結果になる。

[追加] 少しだけ簡単になる計算に気がついたので一応載せておく。

$$\begin{aligned}
&jn_{\mathbf{I}}(\bar{k}_0 \times \bar{u}) \cdot \bar{p} \\
&= jn_{\mathbf{I}}(\bar{p} \times \bar{k}_0) \cdot \bar{u} = jn_{\mathbf{I}} \begin{vmatrix} i & j & k \\ \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \end{vmatrix} \cdot \bar{u} \\
&= jn_{\mathbf{I}}(\cos \theta \sin \phi, -\cos \theta \sin \phi, 0) \cdot \bar{u} \\
&= jn_{\mathbf{I}}(-\cos \theta)(-\sin \phi, \cos \phi, 0) \cdot \bar{u} \\
&= -jn_{\mathbf{I}} \cos \theta (\bar{s} \cdot \bar{u}) \\
&= -jn_{\mathbf{I}} \cos \theta \sin \psi
\end{aligned}$$

最後の変形では式(48)を用いた。

反射波の磁場 (式(39)の右辺第二項) に関しては、

$$\begin{aligned}
&\frac{j}{k_0}(\bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u) \cdot \bar{p} \\
&= \frac{j}{k_0} [(k_{re,y}^u R_z^u - k_{re,z}^u R_y^u) \cos \varphi_u + (k_{re,z}^u R_x^u - k_{re,x}^u R_z^u) \sin \varphi_u] \\
&= \frac{j}{k_0} [-k_{re,z}^u (R_y^u \cos \varphi_u - R_x^u \sin \varphi_u) + R_z^u (k_{re,y}^u \cos \varphi_u - k_{re,x}^u \sin \varphi_u)] \\
&= \frac{j}{k_0} [-k_{re,z}^u r_s^u + R_z^u (k_x^m, k_y^n) \cdot \bar{s}] \\
&= \frac{j}{k_0} (-k_{re,z}^u r_s^u) \\
&= +\frac{j}{k_0} k_z^{I,u} r_s^u
\end{aligned}$$

ここで s 偏光反射率の定義式(47)と反射方向ベクトルの定義式(36)を用いた。途中の第二項は内積をとる二つのベクトルが垂直なので消える。後で気がついた別な計算だと、

$$\begin{aligned}
\frac{j}{k_0}(\bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u) \cdot \bar{p} &= \frac{j}{k_0}(\bar{p} \times \bar{k}_{re}^u) \cdot \bar{R}^u = \frac{j}{k_0} \begin{vmatrix} i & j & k \\ \cos \varphi_u & \sin \varphi_u & 0 \\ k_{||} \cos \varphi_u & k_{||} \sin \varphi_u & k_{re,z}^u \end{vmatrix} \cdot \bar{R}^u \\
&= \frac{j}{k_0} (k_{re,z}^u \sin \varphi_u, -k_{re,z}^u \cos \varphi_u, 0) \cdot \bar{R}^u \\
&= \frac{j}{k_0} k_{re,z}^u (-) \bar{s} \cdot \bar{R}^u = -\frac{j}{k_0} k_{re,z}^u r_s^u
\end{aligned}$$

$$= +\frac{j}{k_0} k_z^{\text{I},u} r_s^u$$

計算途中でベクトル \bar{k}_{re}^u の xy 面内での大きさ $k_{||}$ を導入した。

上の計算は図から導出することもできる。図 3 において、偏光ベクトル \bar{R}^u を $\bar{R}^u = r_s^u \bar{s} + r_n^u \bar{n}$ の二つの成分に分けて考えると、最後に \bar{p} と内積をとることから、 \bar{s} 成分しか残らない。また外積部分 $\bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u$ の大きさは $k_0 r_s^u$ になり、ベクトル \bar{p} となす角度の余弦は $k_{re,z}^u/k_0$ で与えられるので、両者の積をとることによって上の式が得られる。

以上により、式 (42)-(43) の線形結合として (ベクトル \bar{p} との内積を考えて)、

$$-jn_{\text{I}} \cos \theta \sin \psi + \frac{j}{k_0} k_z^{\text{I},u} r_s^u = U_x^u(0) \cos \varphi_u + U_y^u(0) \sin \varphi_u \quad (50)$$

が得られる。

同様に TM(p) 偏光に関しては磁場の \bar{s} 成分を定義するところから出発する。

$$-r_p^u \equiv \frac{j}{k_0} (\bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u) \cdot \bar{s} \quad (51)$$

上の定義でマイナスをつけるのは [1] に従った (この式に対応する [1] の式 (70) には、符号や添え字など数箇所の間違いがある)。入射磁場の \bar{s} 方向成分は、

$$\begin{aligned} & jn_{\text{I}} (\bar{k}_0 \times \bar{u}) \cdot \bar{s} \\ &= jn_{\text{I}} [-(k_{0y} \bar{u}_z - k_{0z} \bar{u}_y) \sin \varphi_u + (k_{0z} \bar{u}_x - k_{0x} \bar{u}_z) \cos \varphi_u] \\ &= jn_{\text{I}} [-\{-\sin \theta \sin \phi \cos \psi \sin \theta - \cos \theta (\cos \psi \cos \theta \sin \phi + \sin \psi \cos \phi)\} \sin \varphi_u \\ &\quad + \{\cos \theta (\cos \psi \cos \theta \cos \phi - \sin \psi \sin \phi) - \sin \theta \cos \phi (-\cos \psi \sin \theta)\} \cos \varphi_u] \\ &= jn_{\text{I}} [\sin \theta \sin \phi \cos \psi \sin \theta \sin \phi \\ &\quad + \cos \theta \cos \psi \cos \theta \sin \phi \sin \phi \\ &\quad + \cos \theta \sin \psi \cos \phi \sin \phi \\ &\quad + \cos \theta \cos \psi \cos \theta \cos \phi \cos \phi \\ &\quad - \cos \theta \sin \psi \sin \phi \cos \phi \\ &\quad + \sin \theta \cos \phi \cos \psi \sin \theta \cos \phi] \\ &= jn_{\text{I}} [\sin^2 \theta \sin^2 \phi \cos \psi + \cos^2 \theta \cos \psi \sin^2 \phi + \cos^2 \theta \cos \psi \cos^2 \phi + \sin^2 \theta \cos^2 \phi \cos \psi] \\ &= jn_{\text{I}} \cos \psi \end{aligned}$$

計算の途中では第 3 項と第 5 項がキャンセルし、入射波は 0 次項のみなので $\varphi_u = \phi$ とした。

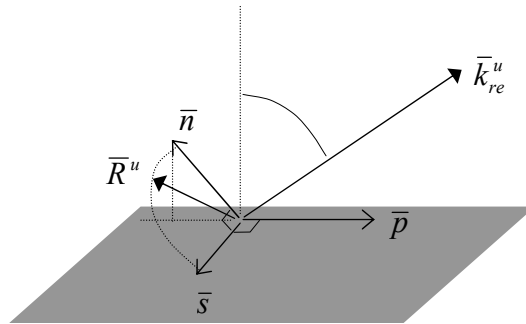


図 3: ベクトルの関係を表す図。

[追記] ベクトルの方向をちゃんと考えると上の計算は必要なかった。定義式 (31) により $\bar{e}_2 = \bar{s}$ 、さらに式 (32) より $\bar{e}_1 = \bar{e}_2 \times \bar{k}_0$ 、一方偏光は式 (33) により $\bar{u} = \cos \psi \bar{e}_1 + \sin \psi \bar{e}_2$ であることを思い出すと、

$$\begin{aligned} jn_{\mathbf{I}}(\bar{k}_0 \times \bar{u}) \cdot \bar{s} &= jn_{\mathbf{I}}(\bar{s} \times \bar{k}_0) \cdot \bar{u} \\ &= jn_{\mathbf{I}}(\bar{e}_2 \times \bar{k}_0) \cdot (\cos \psi \bar{e}_1 + \sin \psi \bar{e}_2) \\ &= jn_{\mathbf{I}}\bar{e}_1 \cdot (\cos \psi \bar{e}_1 + \sin \psi \bar{e}_2) \\ &= jn_{\mathbf{I}} \cos \psi \end{aligned}$$

となる。

以上より、式 (42)-(43) で表される磁場成分とベクトル \bar{s} の内積を取ること、

$$jn_{\mathbf{I}} \cos \psi \delta_{u0} - r_p^u = -U_x^u(0) \sin \varphi_u + U_y^u(0) \cos \varphi_u \quad (52)$$

が得られる。最後に p 偏光の電場成分についての境界条件を導出する。電場の \bar{p} 成分に注目して計算をすすめるが、入射波に関しては、

$$\begin{aligned} \bar{u} \cdot \bar{p} &= (\bar{u}_x \cos \varphi_u + \bar{u}_y \sin \varphi_u) \delta_{u0} \\ &= \cos \phi (\cos \psi \cos \theta \cos \phi - \sin \psi \sin \phi) + \sin \phi (\cos \psi \cos \theta \sin \phi + \sin \psi \cos \phi) \\ &= + \cos \psi \cos \theta \end{aligned}$$

反射波に関しては、

$$R_x^u \cos \varphi_u + R_y^u \sin \varphi_u = -j \frac{k_z^{\mathbf{I},u}}{n_{\mathbf{I}}^2 k_0} r_p^u \quad (53)$$

が成立するので、これを利用すると境界条件は

$$\cos \psi \cos \theta \delta_{u0} - j \frac{k_z^{\mathbf{I},u}}{n_{\mathbf{I}}^2 k_0} r_p^u = S_x^u(0) \cos \varphi_u + U_y^u(0) \sin \varphi_u \quad (54)$$

となる。式 (53) を式 (51) から導出しておく。

$$\begin{aligned} -r_p^u &= \frac{j}{k_0} (\bar{k}_{re}^u \times \bar{R}^u) \cdot \bar{s} \\ &= \frac{j}{k_0} (\bar{s} \times \bar{k}_{re}^u) \cdot \bar{R}^u \\ &= \frac{j}{k_0} \begin{vmatrix} i & j & k \\ -\sin \varphi_u & \cos \varphi_u & 0 \\ k_{||} \cos \varphi_u & k_{||} \sin \varphi_u & k_{re,z}^u \end{vmatrix} \cdot \bar{R}^u \\ &= \frac{j}{k_0} (k_{re,z}^u \cos \varphi_u, k_{re,z}^u \sin \varphi_u, -k_{||}) \cdot \bar{R}^u \\ &= \frac{j}{k_0} (k_{re,z}^u \cos \varphi_u R_x^u + k_{re,z}^u \sin \varphi_u R_y^u - k_{||} R_z^u) \\ -r_p^u \frac{k_0}{j} k_{re,z}^u &= (k_{re,z}^u)^2 (\cos \varphi_u R_x^u + \sin \varphi_u R_y^u) - k_{re,z}^u k_{||} R_z^u \\ +jr_p^u k_0 k_{re,z}^u &= ((k_0 n_{\mathbf{I}})^2 - (k_{||})^2) (\cos \varphi_u R_x^u + \sin \varphi_u R_y^u) - k_{re,z}^u k_{||} R_z^u \\ &= (k_0 n_{\mathbf{I}})^2 (\cos \varphi_u R_x^u + \sin \varphi_u R_y^u) - k_{||} (k_{||} \cos \varphi_u R_x^u + k_{||} \sin \varphi_u R_y^u + k_{re,z}^u R_z^u) \\ &= (k_0 n_{\mathbf{I}})^2 (\cos \varphi_u R_x^u + \sin \varphi_u R_y^u) - k_{||} \bar{k}_{re}^u \cdot \bar{R}^u \\ jr_p^u k_0 k_{re,z}^u &= (k_0 n_{\mathbf{I}})^2 (\cos \varphi_u R_x^u + \sin \varphi_u R_y^u) \\ jr_p^u \frac{k_{re,z}^u}{k_0 n_{\mathbf{I}}^2} &= \cos \varphi_u R_x^u + \sin \varphi_u R_y^u \end{aligned}$$

$$-jr_p^u \frac{k_z^{I,u}}{k_0 n_I^2} = \cos \varphi_u R_x^u + \sin \varphi_u R_y^u$$

途中で電磁場が横波である条件、 $\bar{k}_{re}^u \cdot \bar{R}^u = 0$ を用いた。直感的には図3のように、反射電場のベクトル二つにわけて考えると分かりやすい。もともとの r_p^u の定義式 (51) の計算において、外積の後に \bar{s} と内積をとるので、 \bar{s} に沿った成分は寄与しない。寄与するのは r_n^u であるがこの大きさは、 xy 平面に射影することで式 (53) の左辺が表れる。射影するときの角度の関係式として $k_{re,z}^u$ が現れる。

ここまで得られた $z = 0$ での境界条件をまとめて書くと、

$$\sin \psi \delta_{u0} + r_s^u = S_y^u(0) \cos \varphi_u - S_x^u(0) \sin \varphi_u \quad (55)$$

$$\cos \psi \cos \theta \delta_{u0} - j \frac{k_z^{I,u}}{n_I^2 k_0} r_p^u = S_y^u(0) \sin \varphi_u + S_x^u(0) \cos \varphi_u \quad (56)$$

$$-jn_I \cos \psi \delta_{u0} + r_p^u = -[U_y^u(0) \cos \varphi_u - U_x^u(0) \sin \varphi_u] \quad (57)$$

$$jn_I \cos \theta \sin \psi - \frac{j}{k_0} k_z^{I,u} r_s^u = -[U_y^u(0) \sin \varphi_u + U_x^u(0) \cos \varphi_u] \quad (58)$$

式 (27) より

$$\begin{pmatrix} \bar{S}_y(0) \\ \bar{S}_x(0) \end{pmatrix} = \hat{W} [\bar{c}^+ + \exp(-\hat{Q}k_0 h_g) \bar{c}^-]$$

であるので次の対角行列を定義すると後で便利である。

$$\hat{X} \equiv \exp(-\hat{Q}k_0 h_g)$$

対角要素は固有値を指数に持つ形、 $\exp[-h_g k_0 \sqrt{\lambda_u}]$ である。次に対角成分を $\cos \varphi_u$ とする s^2 次元の行列 $\cos \hat{\Phi}$ 、同じく $\sin \varphi_u$ を対角成分とする $\sin \hat{\Phi}$ 、そしてそれらを利用した $2s^2$ 次元の行列を定義する。

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} \cos \hat{\Phi} & -\sin \hat{\Phi} \\ \sin \hat{\Phi} & \cos \hat{\Phi} \end{pmatrix} \quad (59)$$

さらに、 s^2 次元の単位行列を $\hat{1}$ 、零行列を $\hat{0}$ とし、係数行列を次のように定義しする。

$$\hat{R}_S = \begin{pmatrix} -\hat{1} & \hat{0} \\ \hat{0} & jk_z^{I,u}/(k_0 n_I^2) \end{pmatrix}$$

$$\hat{R}_U = \begin{pmatrix} \hat{0} & -\hat{1} \\ jk_z^{I,u}/k_0 & \hat{0} \end{pmatrix}$$

さらに

$$\bar{S}_{inc} = \begin{pmatrix} \sin \psi \delta_{u0} \\ \cos \psi \cos \theta \delta_{u0} \end{pmatrix}$$

$$\bar{U}_{inc} = \begin{pmatrix} -jn_I \cos \psi \delta_{u0} \\ jn_I \sin \psi \cos \theta \delta_{u0} \end{pmatrix}$$

$$\bar{r} = \begin{pmatrix} \bar{r}_s \\ \bar{r}_p \end{pmatrix}$$

これらを用いると、境界条件 (55)-(56) は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \bar{S}_{inc} - \hat{R}_S \bar{r} &= \hat{F} \bar{S}(0) \\ &= \hat{F} \hat{W} (\bar{c}^+ + \hat{X} \bar{c}^-) \\ \bar{S}_{inc} &= \hat{R}_S \bar{r} + \hat{F} \hat{W} (\bar{c}^+ + \hat{X} \bar{c}^-) \end{aligned} \quad (60)$$

同様に (57)-(58) は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
\bar{U}_{inc} - \hat{R}_U \bar{r} &= -\hat{F} \bar{U}(0) \\
&= -\hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q}(-\bar{c}^+ + \hat{X} \bar{c}^-) \\
\bar{U}_{inc} &= \hat{R}_U \bar{r} + \hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q}(\bar{c}^+ - \hat{X} \bar{c}^-)
\end{aligned} \tag{61}$$

7 境界条件 ($z = d_g$)

$z = d_g$ での境界条件に関する議論は $z = 0$ の場合と同様に進む。まずは透過領域の電場を次のように表す。

$$\bar{E}_{\text{II}} = \sum_u \bar{T}^u \exp(-j \bar{k}_{tr}^u \cdot \bar{x}_d) \tag{62}$$

座標 $\bar{x}_d = (x, y, z - d_g)$ は、 $z = d_g$ の面が基準となるようにとってある。波数ベクトル \bar{k}_{tr}^u は

$$\bar{k}_{tr}^u = (k_x^m, k_y^n, k_z^{\text{II},u}) \tag{63}$$

で定義され、 z 成分 $k_z^{\text{II},u}$ の定義には透過領域の屈折率 n_{II} が現れる。

$$k_z^{\text{II},u} \equiv k_z^{mn} = \begin{cases} +\sqrt{(k_0 n_{\text{II}})^2 - (k_x^m)^2 - (k_y^n)^2} & \dots \quad (k_0 n_{\text{II}})^2 > (k_x^m)^2 + (k_y^n)^2 \text{ のとき} \\ -j\sqrt{(k_x^m)^2 + (k_y^n)^2 - (k_0 n_{\text{II}})^2} & \dots \quad (k_0 n_{\text{II}})^2 < (k_x^m)^2 + (k_y^n)^2 \text{ のとき} \end{cases}$$

この場合の磁場は、

$$\begin{aligned}
\bar{H}_{\text{II}} &= -j \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \left(-\frac{1}{k_0} \nabla \times \bar{E}_{\text{II}} \right) \\
&= -j \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \left\{ -\frac{1}{k_0} \sum_u \bar{T}^u \exp(-j \bar{k}_{tr}^u \cdot \bar{x}_d) \right\} \\
&= -j \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{j}{k_0} \left\{ \sum_u \bar{k}_{tr}^u \times \bar{T}^u \exp(-j \bar{k}_{tr}^u \cdot \bar{x}_d) \right\}
\end{aligned}$$

である。 $z = d_g$ での電磁場の接線成分が連続であることから、

$$T_x^u = S_x^u(d_g) \tag{64}$$

$$T_y^u = S_y^u(d_g) \tag{65}$$

$$\frac{j}{k_0} (\bar{k}_{tr}^u \times \bar{R}^u)_x = U_x^u(d_g) \tag{66}$$

$$\frac{j}{k_0} (\bar{k}_{tr}^u \times \bar{R}^u)_y = U_y^u(d_g) \tag{67}$$

の条件が得られる。反射波の場合と同様に回折方向に依存する座標系を考えて、境界条件を二つの偏光での透過率を含む形に書き直す。 s 偏光の場合には、電場の \bar{s} 方向成分を考えて

$$t_s^u \equiv \bar{T} \cdot \bar{s} = -\sin \varphi_u T_x + \cos \varphi_u T_y \tag{68}$$

$$= \cos \varphi_u S_y^u(d_g) - \sin \varphi_u S_x^u(d_g) \tag{69}$$

が得られる。この偏光に対応する磁場は \bar{p} 方向成分だから、

$$\begin{aligned}
j \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \bar{H}_{\text{II}} \cdot \bar{p} &= \frac{j}{k_0} (\bar{k}_{tr}^u \times \bar{T}^u) \cdot \bar{p} \\
&= \frac{j}{k_0} (\bar{p} \times \bar{k}_{tr}^u) \cdot \bar{T}^u
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{j}{k_0} \begin{vmatrix} i & j & k \\ \cos \varphi_u & \sin \varphi_u & 0 \\ k_{||} \cos \varphi_u & k_{||} \sin \varphi_u & k_{tr,z}^u \end{vmatrix} \cdot \bar{T}^u \\
&= \frac{j}{k_0} (k_{tr,z}^u \sin \varphi_u, -k_{tr,z}^u \cos \varphi_u, 0) \cdot \bar{T}^u \\
&= \frac{j}{k_0} k_{tr,z}^u (-) \bar{s} \cdot \bar{T}^u = -\frac{j}{k_0} k_{tr,z}^u t_s^u \\
&= -\frac{j}{k_0} k_z^{\text{II},u} t_s^u
\end{aligned}$$

これより、式 (66)-(67) の線形結合をとって、

$$-j \frac{k_z^{\text{II},u}}{k_0} t_s^u = \cos \varphi_u U_x^u(d_g) + \sin \varphi_u U_y^u(d_g) \quad (70)$$

が得られる。同様に p 偏光の透過率は、磁場の \bar{s} 成分で定義する。

$$-t_p^u \equiv \frac{j}{k_0} (\bar{k}_{tr}^u \times \bar{T}^u) \cdot \bar{s} \quad (71)$$

マイナスをつけ定義するのは [1] にしたがっている。これより、

$$-t_p^u = -\sin \varphi_u U_x(d_g) + \cos \varphi_u U_y(d_g)$$

が直接得られる。さらに t_p^u に関する計算を進めると、

$$\begin{aligned}
-t_p^u &= \frac{j}{k_0} (\bar{k}_{tr}^u \times \bar{T}^u) \cdot \bar{s} \\
&= \frac{j}{k_0} (\bar{s} \times \bar{k}_{tr}^u) \cdot \bar{T}^u \\
&= \frac{j}{k_0} \begin{vmatrix} i & j & k \\ -\sin \varphi_u & \cos \varphi_u & 0 \\ k_{||} \cos \varphi_u & k_{||} \sin \varphi_u & k_{tr,z}^u \end{vmatrix} \cdot \bar{T}^u \\
&= \frac{j}{k_0} (k_{tr,z}^u \cos \varphi_u, k_{tr,z}^u \sin \varphi_u, -k_{||}) \cdot \bar{T}^u \\
&= \frac{j}{k_0} (k_{tr,z}^u \cos \varphi_u T_x^u + k_{tr,z}^u \sin \varphi_u T_y^u - k_{||} T_z^u) \\
-\frac{k_0}{j} k_{tr,z}^u t_p^u &= (k_{tr,z}^u)^2 (\cos \varphi_u T_x^u + \sin \varphi_u T_y^u) - k_{tr,z}^u k_{||} T_z^u \\
+j t_p^u k_0 k_{tr,z}^u &= \{ (k_0 n_{\text{II}})^2 - (k_{||})^2 \} (\cos \varphi_u T_x^u + \sin \varphi_u T_y^u) - k_{tr,z}^u k_{||} T_z^u \\
&= (k_0 n_{\text{II}})^2 (\cos \varphi_u T_x^u + \sin \varphi_u T_y^u) \\
&\quad - k_{||} (k_{||} \cos \varphi_u T_x^u + k_{||} \sin \varphi_u T_y^u + k_{tr,z}^u T_z^u) \\
&= (k_0 n_{\text{II}})^2 (\cos \varphi_u T_x^u + \sin \varphi_u T_y^u) - k_{||} \bar{k}_{tr}^u \cdot \bar{T}^u \\
&= (k_0 n_{\text{II}})^2 (\cos \varphi_u T_x^u + \sin \varphi_u T_y^u) \\
+j t_p^u \frac{k_{tr,z}^u}{k_0 n_{\text{II}}^2} &= \cos \varphi_u T_x^u + \sin \varphi_u T_y^u \\
j \frac{k_z^{\text{II},u}}{k_0 n_{\text{II}}^2} t_p^u &= \cos \varphi_u T_x^u + \sin \varphi_u T_y^u \\
&= \bar{p} \cdot \bar{T}^u
\end{aligned}$$

が成立するので、式 (64)-(64) の線形結合をとると

$$j \frac{k_z^{\text{II},u}}{k_0 n_{\text{II}}^2} t_p^u = \cos \varphi_u S_x(d_g) + \sin \varphi_u S_y(d_g)$$

が得られる。

これまでの計算をまとめて $z = d_g$ における四本の境界条件をまとめると次のようになる。

$$t_s^u = \cos \varphi_u S_y^u(d_g) - \sin \varphi_u S_x^u(d_g) \quad (72)$$

$$j \frac{k_z^{\text{II},u}}{k_0 n_{\text{II}}^2} t_p^u = \sin \varphi_u S_y(d_g) + \cos \varphi_u S_x(d_g) \quad (73)$$

$$t_p^u = -[\cos \varphi_u U_y(d_g) - \sin \varphi_u U_x(d_g)] \quad (74)$$

$$j \frac{k_z^{\text{II},u}}{k_0} t_s^u = -[\sin \varphi_u U_y^u(d_g) + \cos \varphi_u U_x^u(d_g)] \quad (75)$$

上の境界条件を、次の行列とベクトルを導入して書き直す。

$$\begin{aligned} \hat{T}_S &= \begin{pmatrix} -\hat{1} & \hat{0} \\ \hat{0} & -jk_z^{\text{II},u}/(k_0 n_{\text{II}}^2) \end{pmatrix} \\ \hat{T}_U &= \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{1} \\ jk_z^{\text{II},u}/k_0 & \hat{0} \end{pmatrix} \\ \bar{t} &= \begin{pmatrix} \bar{t}_s \\ \bar{t}_p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

これらを用いると、境界条件 (72)-(73) は次のように書ける。

$$\begin{aligned} -\hat{T}_S \bar{t} &= \hat{F} \bar{S}(d_g) \\ \hat{T}_S \bar{t} + \hat{F} \hat{W} (\hat{X} \bar{c}^+ + \bar{c}^-) &= \bar{0} \end{aligned} \quad (76)$$

ここで $\bar{0}$ は 0 が並んだベクトルである。同様に (74)-(75) は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \hat{T}_U \bar{t} &= -\hat{F} \bar{U}(d_g) \\ &= -\hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q} (-\hat{X} \bar{c}^+ + \bar{c}^-) \\ \hat{T}_U \bar{t} - \hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q} (\hat{X} \bar{c}^+ - \bar{c}^-) &= \bar{0} \end{aligned} \quad (77)$$

8 展開係数の決定

境界条件から得られた四本の式 (60)-(61)、(76)-(77) をまとめて行列で表すと次式になる。

$$\begin{pmatrix} \hat{R}_S & \hat{0} & \hat{F} \hat{W} & \hat{F} \hat{W} \hat{X} \\ \hat{R}_U & \hat{0} & \hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q} & -\hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q} \hat{X} \\ \hat{0} & \hat{T}_S & \hat{F} \hat{W} \hat{X} & \hat{F} \hat{W} \\ \hat{0} & \hat{T}_U & -\hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q} \hat{X} & \hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{r} \\ \bar{t} \\ \bar{c}^+ \\ \bar{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \\ \bar{0} \\ \bar{0} \end{pmatrix} \quad (78)$$

簡単のために、 $\hat{A} = \hat{F} \hat{W}$ 、 $\hat{C} = \hat{F} \hat{\Omega} \hat{W} \hat{Q}$ を定義すると、上の式は、

$$\begin{pmatrix} \hat{R}_S & \hat{0} & \hat{A} & \hat{A} \hat{X} \\ \hat{R}_U & \hat{0} & \hat{C} & -\hat{C} \hat{X} \\ \hat{0} & \hat{T}_S & \hat{A} \hat{X} & \hat{A} \\ \hat{0} & \hat{T}_U & -\hat{C} \hat{X} & \hat{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{r} \\ \bar{t} \\ \bar{c}^+ \\ \bar{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \\ \bar{0} \\ \bar{0} \end{pmatrix} \quad (79)$$

となる。この方程式を効率的に解くために行列の次元を下げる工夫を行う。 \bar{r} と \bar{t} を消去した方程式をつくり、先に \bar{c}^+ と \bar{c}^- を決定する。

上側の二行から

$$\begin{pmatrix} \hat{R}_S \\ \hat{R}_U \end{pmatrix} \bar{r} + \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{A}\hat{X} \\ \hat{C} & -\hat{C}\hat{X} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{c}^+ \\ \bar{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{S}_{inc} \\ \bar{U}_{inc} \end{pmatrix} \quad (80)$$

この上側の式より、

$$\bar{r} = \hat{R}_S^{-1}(\bar{S}_{inc} - \hat{A}\bar{c}^+ - \hat{A}\hat{X}\bar{c}^-) \quad (81)$$

が得られる。 \hat{R}_S は対角行列なので安定に逆行列を計算できる。これを、下側の式に代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{R}_U \bar{r} + \hat{C}\bar{c}^+ - \hat{C}\hat{X}\bar{c}^- &= \bar{U}_{inc} \\ \hat{R}_U \hat{R}_S^{-1}(\bar{S}_{inc} - \hat{A}\bar{c}^+ - \hat{A}\hat{X}\bar{c}^-) + \hat{C}\bar{c}^+ - \hat{C}\hat{X}\bar{c}^- &= \bar{U}_{inc} \\ (\hat{C} - \hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \hat{A})\bar{c}^+ + (-\hat{C}\hat{X} - \hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \hat{A}\hat{X})\bar{c}^- &= -\hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \bar{S}_{inc} + \bar{U}_{inc} \\ (\hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \hat{A} - \hat{C})\bar{c}^+ + (\hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \hat{A}\hat{X} + \hat{C}\hat{X})\bar{c}^- &= \hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \bar{S}_{inc} - \bar{U}_{inc} \end{aligned}$$

がえられる。続いて式 (80) の下側から、

$$\begin{pmatrix} \hat{T}_S \\ \hat{T}_U \end{pmatrix} \bar{t} + \begin{pmatrix} \hat{A}\hat{X} & \hat{A} \\ -\hat{C}\hat{X} & \hat{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{c}^+ \\ \bar{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{0} \\ \bar{0} \end{pmatrix}$$

が得られ、上半分から \bar{t} について解くと、

$$\bar{t} = -\hat{T}_S^{-1}(\hat{A}\hat{X}\bar{c}^+ + \hat{A}\bar{c}^-)$$

となる。下側に代入して、

$$\begin{aligned} \hat{T}_U \bar{t} - \hat{C}\hat{X}\bar{c}^+ + \hat{C}\bar{c}^- &= \bar{0} \\ -\hat{T}_U \hat{T}_S^{-1}(\hat{A}\hat{X}\bar{c}^+ + \hat{A}\bar{c}^-) - \hat{C}\hat{X}\bar{c}^+ + \hat{C}\bar{c}^- &= \bar{0} \\ (-\hat{T}_U \hat{T}_S^{-1} \hat{A}\hat{X} - \hat{C}\hat{X})\bar{c}^+ + (-\hat{T}_U \hat{T}_S^{-1} \hat{A} + \hat{C})\bar{c}^- &= \bar{0} \\ (\hat{T}_U \hat{T}_S^{-1} \hat{A}\hat{X} + \hat{C}\hat{X})\bar{c}^+ + (\hat{T}_U \hat{T}_S^{-1} \hat{A} - \hat{C})\bar{c}^- &= \bar{0} \end{aligned}$$

これらより、

$$\begin{pmatrix} \hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \hat{A} - \hat{C} & \hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \hat{A}\hat{X} + \hat{C}\hat{X} \\ \hat{T}_U \hat{T}_S^{-1} \hat{A}\hat{X} + \hat{C}\hat{X} & \hat{T}_U \hat{T}_S^{-1} \hat{A} - \hat{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{c}^+ \\ \bar{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R}_U \hat{R}_S^{-1} \bar{S}_{inc} - \bar{U}_{inc} \\ \bar{0} \end{pmatrix}$$

が得られる。この一次方程式を解くことで \bar{c}^+ と \bar{c}^- が得られ、それを代入することで振幅反射率 \bar{r} と振幅透過率 \bar{t} が得られる。

最後にエネルギー反射率と透過率は、電場の振幅比で与えられる s 波では波数の z 成分の比になり、磁場の比で与えられる p 波では波数の z 成分を屈折率の二乗で割った形になる。

$$\begin{aligned} R_s^u &= \frac{\Re k_z^{\text{I},u}}{n_{\text{I}} k_0 \cos \theta} |r_s^u|^2 \\ R_p^u &= \frac{\Re k_z^{\text{I},u} / n_{\text{I}}^2}{k_0 \cos \theta / n_{\text{I}}} |r_p^u|^2 \\ T_s^u &= \frac{\Re k_z^{\text{II},u}}{n_{\text{I}} k_0 \cos \theta} |t_s^u|^2 \\ T_p^u &= \frac{\Re k_z^{\text{II},u} / n_{\text{II}}^2}{k_0 \cos \theta / n_{\text{I}}} |t_p^u|^2 \end{aligned}$$

([疑問] 論文 [1]、[2] とは、 n_{I} の入り方が少しだけ異なる。空気から入射する場合には $n_{\text{I}} = 1$ なので影響はないが、どちらが正しいのか。)

(130314 修正)

参考文献

- [1] Formulation of stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings, M. G. Moharam, E. B. Grann, and D. A. Pommet, J. Opt. Soc. Am. A 12, 1068 (1995).
- [2] Rigorous Coupled-wave analysis for two-dimensional gratings, Petre Cătălin Logofătu, Proc. SPIE 5972, 59720.
- [3] Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization, P. Lalanne and G. M. Morris, J. Opt. Soc. Am. A, 13, 779-784(1996).

誘電率フーリエ級数展開

周期 L を持つ周期関数 $f(x)$ のフーリエ級数展開は、

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) \\ a_n &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) dx \\ b_n &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) dx \end{aligned}$$

と表される。あるいは複素数を用いて表示すると、

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \exp\left(j\frac{2\pi n}{L}x\right) dx \\ c_0 &= \frac{1}{L} \int_0^L f(x) dx \\ c_n &= \frac{1}{L} \int_0^L f(x) \exp\left(-j\frac{2\pi n}{L}x\right) dx = \frac{a_n - b_n}{2} \end{aligned}$$

のように表すことができる。複素表示の場合には、級数展開が負の次数を含む。そのため積分の前の係数が実数表示の場合の半分になる。

例として、次のような一次元で矩形の回折格子の場合を考える。

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_{rd} \cdots 0 < |x| < Lf/2 \\ \varepsilon_{gr} \cdots Lf/2 < |x| < L/2 \end{cases} \quad (82)$$

波数 $k_x \equiv 2\pi/L$ を定義すると、 n 次の展開係数 ϵ_n は $n \neq 0$ の場合、

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \varepsilon(x) \exp(-jnk_x x) dx \\ &= \frac{\varepsilon_{gr}}{L} \int_{Lf/2 < |x| < L/2} \exp(-jnk_x x) dx + \frac{\varepsilon_{rd}}{L} \int_{0 < |x| < Lf/2} \exp(-jnk_x x) dx \\ &= \frac{\varepsilon_{gr}}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \exp(-jnk_x x) dx + \frac{\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}}{L} \int_{-Lf/2}^{Lf/2} \exp(-jnk_x x) dx \\ &= 0 + 2 \frac{\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}}{L} \int_0^{Lf/2} \cos(nk_x x) dx \\ &= 2 \frac{\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}}{L} \frac{1}{nk_x} [\sin(nk_x x)]_0^{Lf/2} \\ &= 2 \frac{\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}}{L} \frac{L}{n2\pi} \sin\left(n \frac{2\pi Lf}{L} \frac{1}{2}\right) \\ &= (\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}) \frac{\sin(n\pi f)}{n\pi} \end{aligned}$$

となる。ゼロ次の係数は、

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \frac{1}{L} \int \varepsilon(x) dx \\ &= f\varepsilon_{rd} + (1-f)\varepsilon_{gr} \end{aligned}$$

のようになる。

二次元の場合の単純な例として、四角形の形をした突起の場合を考える。周期は x と y 方向に関してそれぞれ Λ_x と Λ_y であるとする。

$$\varepsilon(x, y) = \begin{cases} \varepsilon_{rd} \cdots 0 < |x| < \Lambda_x f_x / 2 \text{ かつ } 0 < |y| < \Lambda_y f_y / 2 \\ \varepsilon_{gr} \cdots \text{それ以外の領域} \end{cases} \quad (83)$$

展開係数は次のように計算できる。

$$\begin{aligned} \epsilon_{mn} &= \frac{1}{\Lambda_x \Lambda_y} \int \int dx dy \varepsilon(x, y) \exp(-j(mk_x x + nk_y y)) \\ &= \frac{\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}}{\Lambda_x \Lambda_y} \int_{-\Lambda_x f_x / 2}^{\Lambda_x f_x / 2} \exp(-jmk_x x) dx \int_{-\Lambda_y f_y / 2}^{\Lambda_y f_y / 2} dy \varepsilon(x, y) \exp(-jnk_y y) \\ &= (\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}) \frac{\sin(m\pi f_x)}{n\pi} \frac{\sin(n\pi f_y)}{n\pi} \end{aligned}$$

$m = n = 0$ の場合には、

$$\begin{aligned} \epsilon_{00} &= \frac{1}{\Lambda_x \Lambda_y} \int \int \varepsilon(x, y) dx dy \\ &= f_x f_y \varepsilon_{rd} + (1 - f_x f_y) \varepsilon_{gr} \end{aligned}$$

である。

もう一つの単純な例として、円形の突起がある場合を考える。

$$\varepsilon(x, y) = \begin{cases} \varepsilon_{rd} \cdots \sqrt{x^2 + y^2} < r_0 \\ \varepsilon_{gr} \cdots \text{それ以外} \end{cases} \quad (84)$$

この場合には、

$$\begin{aligned} \epsilon_{mn} &= \frac{1}{\Lambda_x \Lambda_y} \int \int dx dy \varepsilon(x, y) \exp(-j(mk_x x + nk_y y)) \\ &= \frac{1}{\Lambda_x \Lambda_y} \left\{ \int \int dx dy \varepsilon_{gr} \exp(-j(mk_x x + nk_y y)) \right. \\ &\quad \left. + \int \int dx dy (\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}) \exp(-j(mk_x x + nk_y y)) \right\} \\ &= 0 + \frac{\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}}{\Lambda_x \Lambda_y} \int_0^{r_0} dr \int_0^{2\pi} d\theta r \exp(-jKr \cos \theta) \end{aligned}$$

となる。指数の肩は空間波数のベクトル $\bar{K} = (mk_x, nk_y)$ と空間座標 $\bar{r} = (x, y)$ の内積なので、 \bar{K} 大きさを K 、 \bar{K} と \bar{r} のなす角度を θ と定義して上のように書き表した。角度 θ に関する積分は先に実行することができる。ベッセル関数 $J_n(x)$ に関する関係式、

$$\begin{aligned} J_0(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(jx \sin \theta) d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(jx \cos \theta) d\theta \\ \frac{d}{dx} [x^n J_n(x)] &= x^n J_{n-1}(x) \\ \frac{d}{dx} [x J_1(x)] &= x J_0(x) \end{aligned}$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \epsilon_{mn} &= \frac{\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}}{\Lambda_x \Lambda_y} \int_0^{r_0} dr \int_0^{2\pi} d\theta r \exp(-jKr \cos \theta) \\ &= \frac{2\pi(\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr})}{\Lambda_x \Lambda_y} \int_0^{r_0} dr r J_0(Kr) \\ &= \frac{2\pi(\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr})}{\Lambda_x \Lambda_y} \frac{1}{K^2} [Kr J_1(Kr)]_0^{r_0} \\ &= \frac{2\pi(\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr})}{\Lambda_x \Lambda_y} r_0^2 \frac{J_1(Kr_0)}{Kr_0} \\ &= (\varepsilon_{rd} - \varepsilon_{gr}) \frac{2\pi r_0^2}{\Lambda_x \Lambda_y} \frac{J_1(Kr_0)}{Kr_0} \end{aligned}$$

のように計算できる。円形開口からの回折現象で知られているように、円のフーリエ係数には1次のベッセル関数 J_1 が現れる。また、中央の項は単位胞 ($\Lambda_x \times \Lambda_y$ の長方形) の中で円が占める面積の割合になる。

補足

2D-RCWA に登場する記号の次元をまとめておく。

$$\begin{aligned}
 s^2 \text{ベクトル} &: \bar{S}_x, \bar{S}_y, \bar{U}_x, \bar{U}_y, \bar{r}_s, \bar{r}_p, \bar{t}_s, \bar{t}_p \\
 2s^2 \text{ベクトル} &: \bar{c}^+, \bar{c}^-, \bar{S}, \bar{S}_{inc}, \bar{U}_{inc}, \bar{r}, \bar{t} \\
 s^2 \times s^2 \text{行列} &: \hat{E}, \hat{\varepsilon}, \hat{K}_x, \hat{K}_y, \hat{B}, \hat{D}, \cos \hat{\Phi}, \sin \hat{\Phi} \\
 2s^2 \times 2s^2 \text{行列} &: \hat{W}, \hat{\Omega}, \hat{Q}, \hat{X}, \hat{F}, \hat{R}_S, \hat{R}_U, \hat{T}_S, \hat{T}_U, \hat{A}, \hat{C}
 \end{aligned}$$

添え字の変換 ($mn \rightarrow u$)

$$\hat{S}_x^{mn} = \begin{pmatrix} S^{11} & S^{12} & S^{13} \\ S^{21} & S^{22} & S^{23} \\ S^{31} & S^{32} & S^{33} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} S^{11} \\ S^{12} \\ S^{13} \\ S^{21} \\ S^{22} \\ S^{23} \\ S^{31} \\ S^{32} \\ S^{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S^1 \\ S^2 \\ S^3 \\ S^4 \\ S^5 \\ S^6 \\ S^7 \\ S^8 \\ S^9 \end{pmatrix} = S^u$$

似たような対角行列 \hat{K}_x^{uv} と \hat{K}_y^{uv} では、成分の入りが異なることに注意。

$$\hat{K}_x^{uv} = \begin{pmatrix} k_x^1 & & & & & & & & & & \\ & k_x^1 & & & & & & & & & \\ & & k_x^1 & & & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & & & \\ & & & & k_x^2 & & & & & & \\ & & & & & k_x^2 & & & & & \\ & & & & & & k_x^2 & & & & \\ & & & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & & & k_x^3 & & \\ & & & & & & & & & k_x^3 & \\ & & & & & & & & & & k_x^3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{1} \\ j k_z^{\text{II},u}/k_0 & \hat{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\hat{1} & \hat{0} \\ \hat{0} & +j(k_0 n_{\text{II}}^2)/k_z^{\text{II},u} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \hat{0} & +j(k_0 n_{\text{II}}^2)/k_z^{\text{II},u} \\ -j k_z^{\text{II},u}/k_0 & \hat{0} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$