

Адаптивное пространственное разрешение в методе фурье-мод для структур с одномерной периодичностью, реализованное в виде преобразования координат на основе функции ошибок

Е.А. Безус^{1,2}, Е.А. Кадомина¹, Л.Л. Досколович^{1,2}

¹Институт систем обработки изображений РАН - филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Молодогвардейская 151, Самара, Россия, 443001

²Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Метод фурье-мод – один из наиболее развитых и широко используемых методов численного решения уравнений Максвелла, предназначенных для моделирования дифракции света на периодических структурах. Для улучшения сходимости метода используется так называемое адаптивное пространственное разрешение, реализованное в виде специального нелинейного преобразования координат. В настоящей работе предложена форма такого преобразования координат на основе функции ошибки (erf) для структур с одномерной периодичностью и продемонстрирована ее высокая эффективность.

1. Введение

Одним из самых известных, хорошо развитых и широко используемых методов для численного решения задач дифракции (численного решения уравнений Максвелла) на периодических структурах является метод фурье-мод (англ. Fourier modal method и rigorous coupled-wave analysis), впервые описанный в [1]. В рамках метода компоненты электромагнитного поля и тензоров диэлектрической и магнитной проницаемостей структуры представляются в виде отрезков рядов Фурье, при этом решение задачи дифракции сводится к решению задач на собственные значения и собственные векторы в каждом из слоев структуры и к решению системы линейных алгебраических уравнений, описывающей граничные условия (непрерывность тангенциальных компонент электромагнитного поля) на границах слоев структуры. Для улучшения сходимости и обеспечения устойчивости метода был предложен ряд подходов, в частности, улучшенный алгоритм матрицы пропускания для моделирования многослойных структур [2], а также т. н. корректные правила факторизации рядов Фурье, позволяющие существенно ускорить сходимость в случае ТМ-поляризации падающего излучения при моделировании структур, содержащих перфорированные металлические слои [3, 4].

В [5] был предложен способ ускорения сходимости, основанный на переходе к новой системе координат $x = F(u)$, в которой улучшается «пространственное разрешение» в окрестности разрывов функции диэлектрической проницаемости решетки. Этот метод, известный как

адаптивное пространственное разрешение (АПР), получил развитие в работах [6,7], однако при этом вид функции $x = F(u)$ оставался фактически неизменным.

В настоящей работе предложена новая функция преобразования координат $x = F(u)$ на основе функции ошибок (erf), отличная от функций, используемых в работах [5-7], и продемонстрирована ее эффективность в задаче ускорения сходимости метода фурье-мод.

2. Адаптивное пространственное разрешение

Геометрия задачи представлена на рисунке 1. На дифракционную решётку с периодом d , высотой h и коэффициентом заполнения (скважностью) $\tau = w/d$ (w – ширина ступеньки дифракционной решётки) под углом θ падает плоская электромагнитная волна с длиной волны λ . Обозначим через ε_{in} , ε , ε_{out} диэлектрические проницаемости области над решёткой, материала решётки и области под решёткой соответственно.

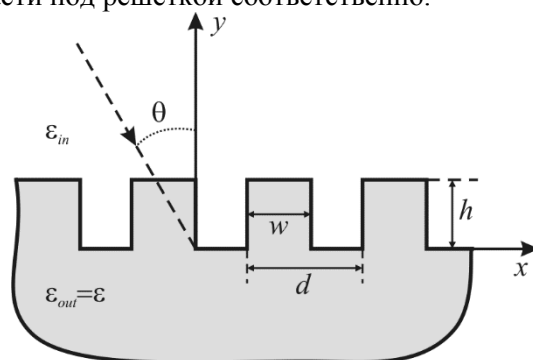


Рисунок 1. Геометрия структуры.

Введем функцию преобразования координат $x = F(u)$. В случае ТМ поляризации задача на собственные значения с АПР принимает вид [7]:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}_z}{\partial y^2} = -\gamma^2 \mathbf{H}_z = 1/\varepsilon^{-1} \left\{ f \alpha \varepsilon^{-1} f \alpha - k_0^2 I_d \right\} \mathbf{H}_z, \quad (1)$$

где $f(u) = [F'(u)]^{-1}$, – теплицева матрица, \mathbf{H}_z – вектор фурье-коэффициентов разложения z-компоненты напряженности магнитного поля, $\alpha = \text{diag}(\alpha_n)$, $\alpha_n = k_0 \sqrt{\varepsilon_{in}} \sin(\theta) + 2\pi n/d$ ($n \in \mathbf{Z}$), I_d – единичная матрица, $k_0 = 2\pi/\lambda$. Запишем предлагаемую функцию преобразования координат на основе функции ошибок:

$$x = F(u) = \text{Cerf} \left[k(u - u_0) \right] + \Delta x + x_1, \quad (2)$$

где $u_0 = (u_1 + u_2)/2$, $\Delta x = (x_2 - x_1)/2$, а значения C и k находятся из условий:

$$x(u_1) = x_1, \quad x(u_2) = x_2, \quad \left. \frac{dx}{du} \right|_{u=u_1} = \left. \frac{dx}{du} \right|_{u=u_2} = G, \quad (3)$$

где G – параметр преобразования координат. Запишем выражения для $f(u)$:

$$f(u) = \left(\frac{dx}{du} \right)^{-1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2Ck} \exp \left([k(u - u_0)]^2 \right) \quad (4)$$

Используя (2) и (4), запишем коэффициенты ряда Фурье, необходимые для построения теплицевой матрицы f в (1):

$$\hat{f}_n = \frac{i\pi}{4ck^2} \exp \left[(k\Delta u)^2 \right] \left\{ \exp \left(-\frac{2i\pi n u_2}{d} \right) w \left(i \frac{\pi n}{dk} - k\Delta u \right) - \exp \left(\frac{2i\pi n u_1}{d} \right) w \left(i \frac{\pi n}{dk} + k\Delta u \right) \right\}, \quad (5)$$

где $\Delta u = (u_2 - u_1)/2$, w – функции Фадеевой.

3. Результаты численного эксперимента

Для оценки эффективности предлагаемой функции преобразования координат промоделируем пример, приведенный в статье [7], тремя способами: обычным методом фурье-мод, методом фурье-мод с адаптивным пространственным разрешением с функцией преобразования координат из [5] и с предлагаемой функцией преобразования координат на основе функции ошибок. Моделирование дифракции на дифракционной решётке проводилось с помощью собственного программного обеспечения, разработанного в среде MATLAB и реализующего метод фурье-мод (англ. rigorous coupled-wave analysis, Fourier modal method). Программное обеспечение было предварительно протестировано с помощью коммерческих пакетов GSolver (также реализует метод фурье-мод) и COMSOL Multiphysics (реализует метод конечных элементов). При расчетах параметр преобразования координат будем полагать $G=0.001$. Данные расчетов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Сравнение результатов работы трех методов при расчете примера из статьи [7], со следующими параметрами: $\lambda = 0.6328$ мкм, $h=0.5$ мкм, $d=0.5$ мкм, $\theta = 30^\circ$, $\varepsilon_m = 1$, $\varepsilon = \varepsilon_{out} = -100$. Моделирование проводилось для 400 точек, равномерно расположенных в интервале $\tau \in [0.01; 0.99]$. «Эталонным» считалось значение, рассчитанное при числе фурье-гармоник, равном $N=400$.

	Число гармоник	Время на вычисление 400 точек, с	Минимальная ошибка	Средняя ошибка	Максимальная ошибка
Метод фурье-мод	$N=15$	1.3	$3,5 \cdot 10^{-6}$	0.11	0.53
	$N=40$	5.3	$4,7 \cdot 10^{-7}$	0.04	0.44
	$N=80$	22.5	$2,6 \cdot 10^{-7}$	0.03	0.54
Адаптивное разрешение [5]	$N=15$	3.4	$1 \cdot 10^{-7}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	0.01
	$N=40$	13.8	$2,9 \cdot 10^{-8}$	$2,6 \cdot 10^{-5}$	0.002
	$N=80$	47.3	$2,5 \cdot 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$2,1 \cdot 10^{-4}$
Метод с функцией ошибок	$N=15$	6.8	$3,1 \cdot 10^{-7}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$	0.01
	$N=40$	15.25	$1 \cdot 10^{-11}$	$4,8 \cdot 10^{-7}$	$5,7 \cdot 10^{-5}$
	$N=80$	44.5	$8,9 \cdot 10^{-12}$	$3,2 \cdot 10^{-7}$	$5,7 \cdot 10^{-5}$

Из таблицы 1 следует, что предложенный метод, основанный на функции ошибок, обладает более быстрой сходимостью, чем метод из [5]. Из таблицы 1 также следует, что для небольших значений числа коэффициентов Фурье предложенный метод проигрывает по времени, а с увеличением числа гармоник – работает быстрее, чем метод из [5].

Рассмотрим близкий к предыдущему, но более реалистичный пример для длины волны света $\lambda = 1.55$ мкм. Параметры решётки зададим следующим образом: $h=1.23$ мкм, $d=1.23$ мкм, рассматриваемый интервал $\tau \in [0.01; 0.99]$. За материал дифракционной решётки примем серебро, которое на этой длине волны имеет диэлектрическую проницаемость $\varepsilon = -129 + 3.28i$. Под решёткой находится слой серебра толщиной 2λ . Диэлектрические проницаемости над и под структурой – $\varepsilon_{in} = \varepsilon_{out} = 1$. На рисунке 2 приведены зависимости значений коэффициента отражения в -1 порядке дифракции R_{-1} от значений коэффициента заполнения, рассчитанные тремя способами. Визуально на рисунке 2б все три графика совпадают, что свидетельствует о сходимости всех трёх методов к одному решению при увеличении числа фурье-гармоник.

На рисунке 3 приведены зависимости максимальной и средней ошибок расчетов от числа фурье-гармоник. За «эталонные» принимались значения, рассчитанные при 701 фурье-гармонике.

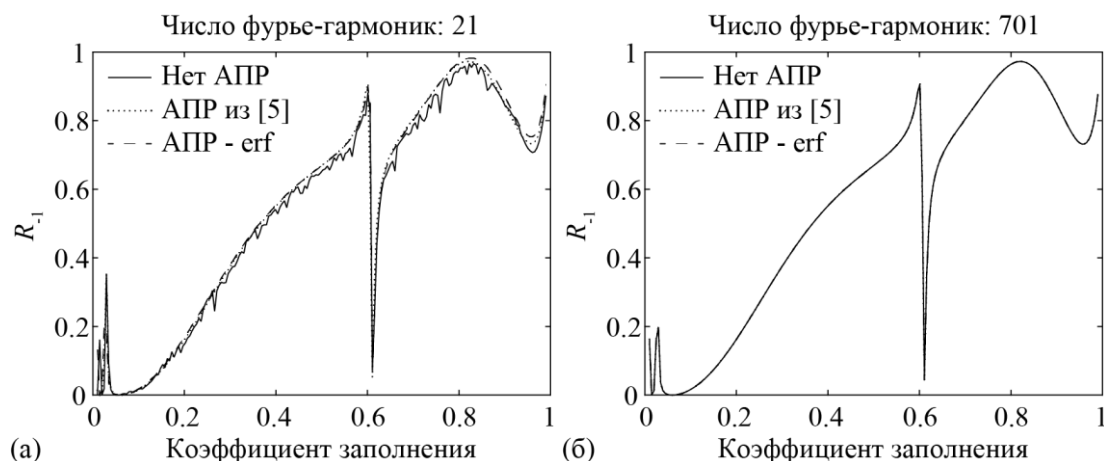


Рисунок 2. Зависимости значений коэффициента отражения R_{-1} от значений коэффициента заполнения при общем числе гармоник Фурье $2N + 1 = 21$ (а) и $2N + 1 = 701$ (б). Сплошной линией показан обычный метод фурье-мод, точечной – с АПР с функцией преобразования координат из [5], пунктирная линия – с предлагаемой функцией преобразования координат на основе функции ошибок.

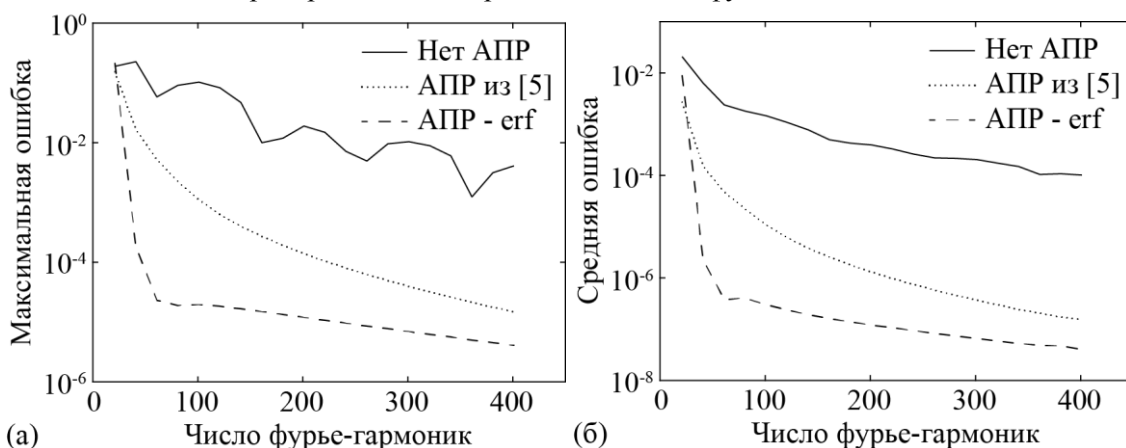


Рисунок 3. Зависимости максимальной (а) и средней (б) ошибок от числа фурье-гармоник, рассчитанные тремя способами. Сплошной линией показан обычный метод фурье-мод, точечной – с АПР с функцией преобразования координат из [5], пунктирная линия – с предлагаемой функцией преобразования координат на основе функции ошибок.

Рисунки 2 и 3 подтверждают, что и для этого примера метод преобразования координат, основанный на функции ошибок, сходится быстрее, чем метод из [5]. На рисунке 4 показаны временные характеристики трех методов. Из сравнения рисунков следует, что метод, основанный на функции ошибок, обладает наименьшим отношением величины ошибки ко времени, затраченному на вычисление точки. Следовательно, его можно рассматривать как хорошую альтернативу методу [5].

4. Заключение

В работе предложена функция преобразования координат для реализации т. н. адаптивного пространственного разрешения в методе фурье-мод, предназначенном для численного моделирования дифракции света на дифракционных решетках с одномерной периодичностью. Предложенная функция преобразования координат основана на функции ошибок. На основе численных экспериментов показана работоспособность и эффективность предложенной функции. Результаты работы будут использованы для получения функции преобразования координат, объединяющей адаптивное пространственное разрешение и идеально согласованные поглощающие слои. Разработка такой функции актуальна для

«непериодической» модификации метода фурье-мод, применяющейся в задачах интегральной оптики.

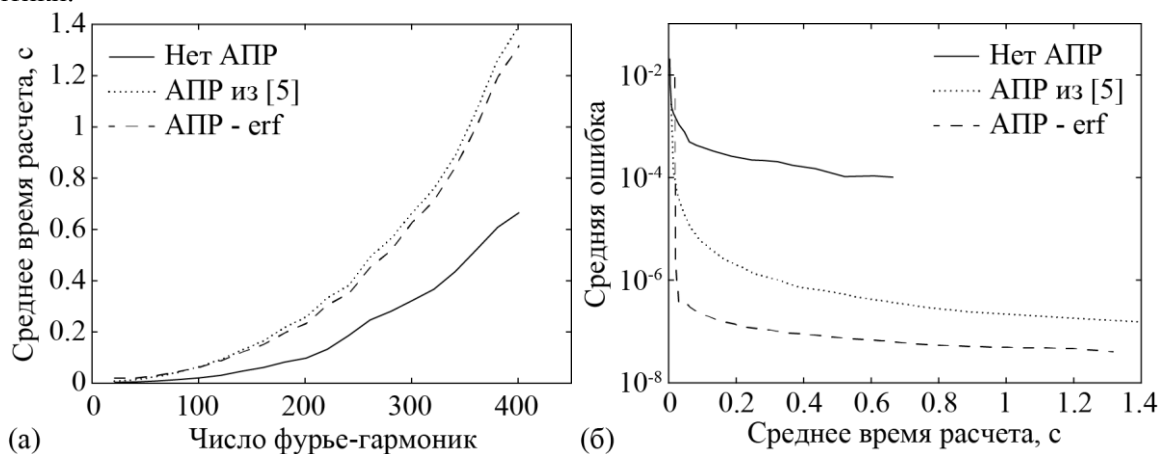


Рисунок 4. Зависимости времени вычисления одной точки от числа фурье-гармоник (а) и средней ошибки от времени вычисления точки (б). Сплошной линией показан обычный метод фурье-мод, точечной – с АПР с функцией преобразования координат из [5], пунктирная линия – с предлагаемой функцией преобразования координат на основе функции ошибок.

5. Литература

- [1] Moharam, M.G. Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings / M.G. Moharam, T.K. Gaylord // *J. Opt. Soc. Am.* – 1982. – Vol. 72. – P. 1385-1392.
- [2] Moharam, M.G. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach / M.G. Moharam, D.A. Pommet, E.B. Grann, T.K. Gaylord // *J. Opt. Soc. Am. A.* – 1995. – Vol. 12. – P. 1077-1086.
- [3] Granet, G. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization / G. Granet, B. Guizal // *J. Opt. Soc. Am. A.* – 1996. – Vol. 13(5). – P. 1019-1023.
- [4] Li, L. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures / L. Li // *J. Opt. Soc. Am. A.* – 1996. – Vol. 13(9). – P. 1870-1876.
- [5] Granet, G. Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution / Gerard Granet // *J. Opt. Soc. Am. A.* – 1999. – Vol. 16(10). – P. 2510-2516.
- [6] Vallius, T. Reformulation of the Fourier modal method with adaptive spatial resolution: application to multilevel profiles / T. Vallius, M. Honkanen // *Optics Express.* – 2002. – Vol. 10(1). – P. 24-34.
- [7] Guizal, B. Reformulation of the eigenvalue problem in the Fourier modal method with spatial adaptive resolution / B. Guizal, H. Yala, D. Felbacq // *Optics Letters.* – 2009. – Vol. 34(18). – P. 2790–2792.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (разработка и реализация моделирующего программного обеспечения), грантов РФФИ 18-37-20038, 16-29-11683 (получение функции преобразования координат на основе функции ошибок) и гранта Президента РФ НШ-6307.2018.8 (проведение численных исследований).

Adaptive spatial resolution in Fourier modal method for 1D-periodic structures implemented as a coordinate transform based on the error function

Е.А. Bezus^{1,2}, Е.А. Kadomina¹, L.L. Doskolovich^{1,2}

¹Image Processing Systems Institute of RAS - Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Molodogvardejskaya street 151, Samara, Russia, 443001

²Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. Fourier modal method is one of the most well-developed and widely used methods for the numerical solution of Maxwell's equations, intended for the simulation of the diffraction of light on periodic structures. In order to improve the convergence of the method, so-called adaptive spatial resolution implemented as a special nonlinear coordinate transformation is used. In the present work, a form of such a coordinate transformation based on the error function (erf) for structures with 1D-periodicity is proposed, and its high efficiency is demonstrated.