

Алгоритм подхода к нахождению амплитуд прошедших дифракционных порядков в рамках строгого анализа связанных волн

А.И. Антонов¹

¹Пензенский государственный университет архитектуры и строительства, Германова-Титова 28, Пенза, Россия, 440028

Аннотация. На основании полной системы граничных условий для электромагнитного поля падающего на периодическую структуру, представлен алгоритм, позволяющий преобразовать такую систему, оставив только неизвестные амплитуды прошедших порядков дифракции. Показано, что результаты расчета дифракционной эффективности, полученные с помощью такого подхода полностью совпадают с результатами, полученными в рамках подходов целенаправленного преобразования матрицы пропускания и матрицы рассеяния.

1. Введение

Строгий анализ связанных волн (RCWA) позволяет определять дифракционную эффективность (ДЭ) микроструктуры периодической в двух взаимно перпендикулярных направлениях x и y путем решения системы граничных условий, полученных из уравнений Максвелла. Поэтому данный анализ относят к численно-аналитическим методам в рамках строгой теории дифракции. Большинство подходов к реализации RCWA не способны быть адаптированными к двумерным микроструктурам (например, [1]) или находят амплитуды как отраженных, так и прошедших порядков [2, 3]. Последнее не является необходимым для решения большинства оптических задач, особенно если не нужно проверять сходимость энергетического баланса.

В работе [4] описан подход для нахождения амплитуд отраженных порядков дифракции для периодических микроструктур и не представлен подход для нахождения амплитуд только прошедших порядков. Подход целенаправленного преобразования матрицы пропускания (ЦПП-подход), описанный в той же работе [4], находит одновременно амплитуды отраженных и прошедших порядков дифракции, однако в таком случае необходимо производить запоминание промежуточных матриц, что существенно нагружает виртуальную память машины при большом количестве учитываемых дифракционных порядков (I по оси x и L по оси y) и слоев разбиения микроструктуры вдоль оси z N [5]. Также преобразования данного подхода подразумевают множество матричных обращений, что может негативно сказаться на стабильности алгоритма.

Приведем описание подхода, который можно использовать для нахождения исключительно амплитуд прошедших дифракционных порядков. В работе [4] показана матричная форма системы граничных условий. Описываемый подход основан на последовательном избавлении данной системы от всех неизвестных констант и отраженных амплитуд. Он не требует

сохранения в памяти промежуточных матриц и для каждого слоя использует всего одну операцию обращения матриц содержащих экспоненты.

2. Описание подхода и его сравнение с ЦММ-подходом и подходом матрицы рассеяния

Полную систему граничных условий для микроструктуры, разбитой на N периодических слоев можно записать в виде [4]:

$$\mathbf{Inc} + \mathbf{AR} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{W}_1 \mathbf{X}_1 \\ -\mathbf{V}_1 & \mathbf{V}_1 \mathbf{X}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{bmatrix}, \quad (1)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_{n-1} \mathbf{X}_{n-1} & \mathbf{W}_{n-1} \\ -\mathbf{V}_{n-1} \mathbf{X}_{n-1} & \mathbf{V}_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_{n-1}^+ \\ \mathbf{c}_{n-1}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_n & \mathbf{W}_n \mathbf{X}_n \\ -\mathbf{V}_n & \mathbf{V}_n \mathbf{X}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_n^+ \\ \mathbf{c}_n^- \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_N \mathbf{X}_N & \mathbf{W}_N \\ -\mathbf{V}_N \mathbf{X}_N & \mathbf{V}_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_N^+ \\ \mathbf{c}_N^- \end{bmatrix} = \mathbf{BT}, \quad (3)$$

где \mathbf{Inc} – матрица-столбец со свободными членами в уравнениях граничных условий; \mathbf{A} и \mathbf{B} – матрицы множителей при элементах матриц-столбцов амплитуд отраженных \mathbf{R} и прошедших \mathbf{T} дифракционных порядков, соответственно; \mathbf{c}_n^\pm – столбцы неизвестных констант для n -го слоя; \mathbf{W}_n – матрица собственных векторов матриц $(\mathbf{Y}_n \mathbf{Q}_n)$, где \mathbf{Y}_n и \mathbf{Q}_n – соответственно, матрицы элементов при амплитудах составляющих магнитного и электрического полей в дифференциальных уравнениях для n -го слоя, полученных из системы уравнений Максвелла, преобразованной согласно основным принципам анализа связанных волн; $\mathbf{V}_n = \mathbf{Q}_n \mathbf{W}_n \mathbf{q}_n^{-1}$, где \mathbf{q}_n – диагональная матрица квадратных корней собственных чисел матрицы $(\mathbf{Y}_n \mathbf{Q}_n)$ $q_{n,m}$; \mathbf{X}_n – диагональная матрица с элементами $\exp[-q_{m,n} k_0 d_n]$, где $k_0 = 2\pi/\lambda$, d_n – толщина n -го слоя, λ – длина волны падающего излучения, d – глубина микроструктуры. Число элементов в \mathbf{Inc} , \mathbf{R} , \mathbf{T} и \mathbf{c}_n^\pm равно $2(I \cdot L)$, размер матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} – $2(I \cdot L) \times 4(I \cdot L)$.

Сделаем замену в уравнении (1): пусть $\mathbf{Inc} = \mathbf{f}_0$, $\mathbf{R} = \mathbf{c}_0^-$,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_0 \\ \mathbf{g}_0 \end{bmatrix}.$$

Тогда уравнение (1) по правилам линейной алгебры можно преобразовать:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_0^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 & -\mathbf{f}_0 \\ -\mathbf{V}_1 & -\mathbf{g}_0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -\mathbf{W}_1 \mathbf{X}_1 \\ -\mathbf{V}_1 \mathbf{X}_1 \end{bmatrix} \mathbf{c}_1^- + \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 & -\mathbf{f}_0 \\ -\mathbf{V}_1 & -\mathbf{g}_0 \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{f}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{bmatrix} \mathbf{c}_1^- + \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где для n от 1 до N введены обозначения

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_n & -\mathbf{f}_{n-1} \\ -\mathbf{V}_n & -\mathbf{g}_{n-1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -\mathbf{W}_n \mathbf{X}_n \\ -\mathbf{V}_n \mathbf{X}_n \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_n & -\mathbf{f}_{n-1} \\ -\mathbf{V}_n & -\mathbf{g}_{n-1} \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{f}_{n-1}.$$

Из уравнения (4) следует, что $\mathbf{c}_1^+ = \mathbf{a}_1 \mathbf{c}_1^- + \mathbf{a}_1$. Подставляя данное выражение в левую часть (2) для $n=2$, получим

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 \mathbf{X}_1 & \mathbf{W}_1 \\ -\mathbf{V}_1 \mathbf{X}_1 & \mathbf{V}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 (\mathbf{X}_1 \mathbf{a}_1 + \mathbf{I}) \\ -\mathbf{V}_1 (\mathbf{X}_1 \mathbf{a}_1 - \mathbf{I}) \end{bmatrix} \mathbf{c}_1^- + \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 \mathbf{X}_1 \\ -\mathbf{V}_1 \mathbf{X}_1 \end{bmatrix} \mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{g}_1 \end{bmatrix} \mathbf{c}_1^- + \mathbf{f}_1, \quad (5)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f}_n \\ \mathbf{g}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_n (\mathbf{X}_n \mathbf{a}_n + \mathbf{I}) \\ -\mathbf{V}_n (\mathbf{X}_n \mathbf{a}_n - \mathbf{I}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}_n = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_n \mathbf{X}_n \\ -\mathbf{V}_n \mathbf{X}_n \end{bmatrix} \mathbf{a}_n.$$

В таком случае уравнение (2) для $n=2$ будет иметь вид

$$\mathbf{f}_1 + \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{g}_1 \end{bmatrix} \mathbf{c}_1^- = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_2 & \mathbf{W}_2 \mathbf{X}_2 \\ -\mathbf{V}_2 & \mathbf{V}_2 \mathbf{X}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_2^+ \\ \mathbf{c}_2^- \end{bmatrix},$$

что по форме повторяет (1). Таким образом константы \mathbf{c}_1^+ и \mathbf{c}_0^- исключаются. Повторяя такую операцию для всех последующих слоев до N , доберемся до уравнения для нижней границы микроструктуры (3):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f}_N \\ \mathbf{g}_N \end{bmatrix} \mathbf{c}_N^- + \boldsymbol{\varphi}_N = \mathbf{B}\mathbf{T}.$$

Матрицы \mathbf{f}_N , \mathbf{g}_N и $\boldsymbol{\varphi}_N$ зависят от аналогичных матриц для предыдущего слоя (см. выражение (5)); те в свою очередь от матриц своего предыдущего и так далее. Преобразовав последнее матричное уравнение, найдем его решение относительно неизвестных \mathbf{c}_N^- и \mathbf{T} :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{c}_N^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B} & -\mathbf{f}_N \\ & -\mathbf{g}_N \end{bmatrix}^{-1} \boldsymbol{\varphi}_N.$$

Верхняя половина столбца-решения есть амплитуды прошедших дифракционных порядков. На рисунке 1 представлен возможный алгоритм реализации описанного подхода, где n_1 и n_{II} – показатели преломления сред из которой падает и куда проходит излучение, соответственно; μ_1 и μ_{II} – магнитные проницаемости сред из которой падает и куда проходит излучение, соответственно; θ и φ – углы падения излучения относительно нормали к микроструктуре и между проекцией волнового вектора и на плоскость слоев x - y и осью x ; Λ_x и Λ_y – периоды микроструктуры вдоль осей x и y . \mathbf{E} и \mathbf{M} – матрицы коэффициентов Фурье в разложении диэлектрической и магнитной проницаемостей слоев микроструктуры; \mathbf{K}_x , \mathbf{K}_y , $\mathbf{K}_{I,z}$, $\mathbf{K}_{II,z}$ – матрицы соответствующих проекций волновых векторов всех порядков дифракции, деленных на k_0 . Поскольку \mathbf{E} , \mathbf{M} , \mathbf{K}_x , \mathbf{K}_y , $\mathbf{K}_{I,z}$, $\mathbf{K}_{II,z}$, \mathbf{Y}_n и \mathbf{Q}_n имеют различный вид в зависимости от типа поляризации, в данной работе эти матрицы не расписываются подробно.

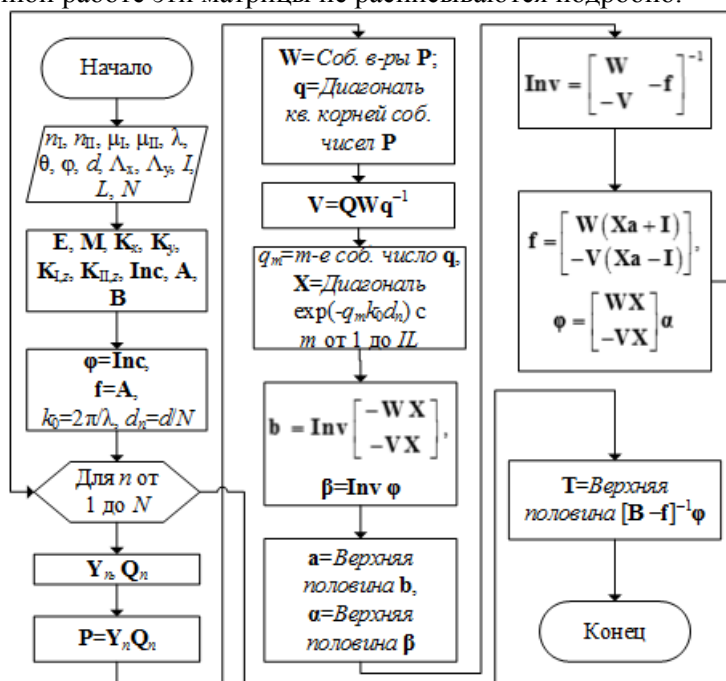


Рисунок 1. Блок-схема алгоритма подхода для нахождения амплитуд прошедших порядков дифракции.

Предложенный алгоритм последовательно для n от 1 до N присваивает значения \mathbf{W}_n единственной переменной \mathbf{W} . То же самое происходит и с остальными матрицами, зависящими от номера слоя. Чтобы рассчитать \mathbf{T} необходимы только вспомогательные матрицы последнего слоя. Таким образом, в отличие от ЦПМП-подхода [5], нет необходимости сохранять вспомогательные матрицы всех слоев тем самым нагружая оперативную память, и как следствие ограничивая максимально возможные количества учитываемых дифракционных порядков и слоев разбиения. В таблице 1 показаны рассчитанные тремя различными подходами значения ДЭ -1 -го порядка одномерной пилообразной микроструктуры для случая ТЕ-поляризации ($n_1=1,5$; $n_{II}=2$; $d=1$ мкм; $\Lambda_x=5$ мкм; $\Lambda_y=0$; $\lambda=0,5$ мкм; $\theta=15^\circ$; $\varphi=0^\circ$) для различного числа I . Поскольку волновой вектор падающего излучения не имеет проекции на ось y , число

$L=1$. Сравнивались значения, полученные описанным подходом, ЦПМП-подходом и подходом матрицы рассеяния (МР-подходом) [3]. Как видно из таблицы 1, значения ДЭ для одинаковых I идентичны у всех сравниваемых подходов.

Таблица 1. ДЭ рассчитанные различными подходами.

I	Описываемый подход	ЦПМП- подход	МР-подход
20	0,881249	0,881249	0,881249
40	0,881997	0,881997	0,881997
60	0,881788	0,881788	0,881788
80	0,881768	0,881768	0,881768
100	0,881764	0,881764	0,881764

Стоит отметить, что времена на расчет описываемым подходом и ЦПМП-подходом практически не отличаются, в то время как алгоритм МР-подхода [6] требует в среднем в 1,5 раза больше времени. МР-подход также является более нестабильным из-за большого количества матричных обращений.

3. Заключение

Описанный в данной работе подход позволяет получить амплитуды порядков дифракции, прошедших через дифракционную микроструктуру. Он сокращает по сравнению с ЦПМП-подходом число сохраняемых в памяти элементов, тем самым увеличивая максимальные I , L и N . Кроме того, число обращений матриц ограничивается одной такой операцией на слой, в отличие от ЦПМП- и МР-подходов, что положительно сказывается на стабильности. Результаты расчета ДЭ описанным алгоритмом не отличаются от результатов, полученных при помощи других подходов.

Таким образом, данный подход может быть использован для расчета ДЭ прошедших порядков дифракции при любой конфигурации двумерной периодической микроструктуры и при любом типе поляризации, когда не стоит задачи проверки энергетического баланса.

4. 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(10). – P. 1385-1392.
- [2] Moharam, M.G. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings / M.G. Moharam, E.B. Grann, D.A. Pommet, T.K. Gaylord // J. Opt. Soc. Am. – 1995. – Vol. 12(5). – P. 1068-1076.
- [3] Li, L. Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings // Journal of the Optical Society of America. – 1996. – Vol. 13(6). – P. 1024-1035.
- [4] Moharam, M.G. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach / M.G. Moharam, E.B. Grann, D.A. Pommet, T.K. Gaylord // J. Opt. Soc. Am. – 1995. – Vol. 12(5). – P. 1077-1086.
- [5] Антонов, А.И. Подходы к алгоритмизации строгого метода связанных волн / А.И. Антонов, Л.А. Васин, Г.И. Грейсх // Компьютерная оптика. – 2019. – Т. 43, № 2. – С. 209-219. DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-2-209-219.
- [6] SEM Lectures [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://emlab.utep.edu/academics.htm> (11.11.2019).

Approach for finding amplitude of the transmitted diffraction orders in the framework of a rigorous coupled-wave analysis

A.I. Antonov¹

¹Penza State University of Architecture and Construction, Germanova-Titova 28, Penza, Russia, 440028

Abstract. Based on a complete system of boundary conditions for an electromagnetic field incident on a periodic structure, an algorithm is presented that allows you to convert such a system, leaving only the unknown amplitudes of the past diffraction orders. It is shown that the results of calculating the diffraction efficiency obtained using this approach completely coincide with the results obtained in the framework of the enhanced transmittance matrix approach and the scattering matrix approach.