

ОБЪЕДИНЕННЫЙ МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ДИФРАКЦИИ СВЕТА НА ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТКАХ

Д.В. Нестеренко¹, В.В. Котляр^{1, 2}

¹ Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия,

² Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия

Аннотация

Рассматривается применение объединенного метода на основе конечных элементов и граничных элементов для анализа задачи дифракции электромагнитной волны на цилиндрическом периодическом объекте, период которого сравним с длиной волны. Результаты моделирования диэлектрических дифракционных решеток с различным периодом были сравнены с аналогичными результатами, полученными известным методом связанных волн.

Ключевые слова: дифракция, дифракционная решетка, метод конечных элементов, метод граничных элементов.

Введение

Теория рассеяния на периодических структурах, обычно называемых дифракционными решетками, имеет много применений в микрооптике, например, электромагнитные и оптические средства связи, средства визуализации, определение свойств объектов и поверхностей, электронные и оптические компоненты, фотонные кристаллы, дифракционные решетки [1]. Для моделирования дифракции света на дифракционных решетках были разработаны численные методы, среди которых известны дифференциальные и интегральные методы, методы, основанные на распространении Рэлеевских и собственных мод, вариационные и конечно-разностные методы: метод связанных волн (rigorous coupled wave analysis, RCWA) [2], С-метод [3], методы конечных элементов [4, 5, 6], интегральные методы [7], разностные (finite difference-time domain, FDTD) методы [8, 9].

Вариационные методы наиболее эффективны для неоднородных задач со сложными геометриями. Этот метод требует решения линейной системы уравнений с разреженными матрицами. Для уменьшения размера вычислительной области расчет поля вдали от области вычисления может быть осуществлен с применением интегрального соотношения. Материал периодической структуры может быть диэлектрическим, проводящим, сверхпроводящим, размеры неоднородностей могут быть сколь угодно малы. Углы в профиле геометрии структуры могут быть учтены в расчете соответствующим выбором сети дискретизации.

В качестве частного случая вариационных методов может быть рассмотрен метод конечных элементов (МКЭ), примененный к эллиптическому уравнению Гельмгольца в области расчета. Он включает выбор схемы дискретизации, построение и минимизацию функционального соотношения. Полученное соотношение преобразуется в систему линейных уравнений, являющуюся неполной без применения граничных условий.

К граничной задаче, удовлетворяющей условиям излучения Зоммерфельда, могут быть применены методы интегральных уравнений, соответственно стандартная

методика граничных элементов также может быть использована для периодических задач. Оба метода соединяются на границе между внешней и внутренней частями, с удовлетворением условий непрерывности поля. Использование метода конечных элементов для определения поля внутри объекта приводит к матрице трехдиагонального вида, что требует меньше компьютерной памяти и времени вычисления, чем методы объемных интегралов. Результатом использования метода граничных элементов для определения поля на границе является более точное решение, чем применение метода конечных элементов с условиями поглощающей границы из-за сильной зависимости последних от угла падения поля на границу.

В настоящей работе описывается формулировка объединенного метода для задач рассеяния света на периодических объектах на основе метода конечных элементов и метода граничных элементов (ПМКЭ-ГЭ). С помощью разработанного метода ПМКЭ-ГЭ и RCWA метода [10] было проведено сравнительное моделирование дифракции света на одномерной диэлектрической дифракционной решетке. Сравнение результатов моделирования приведено для ТЕ- и ТМ-поляризованных волн.

Дифракция на периодических структурах

Рассмотрим дифракцию плоской волны с волновым вектором $\mathbf{k} = k(\sin(\theta), -\cos(\theta), 0)$, $k = k_0\sqrt{\varepsilon}$ на диэлектрической периодической структуре с периодом d , k_0 – волновое число волны в свободном пространстве

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0},$$

где λ_0 – длина волны в свободном пространстве, ε – диэлектрическая проницаемость среды.

Свет, дифрагируя на структуре, создает рассеянное поле. Кроме некоторой затухающей части дифрагированный свет расщепляется на конечное число отраженных и прошедших поляризованных плоских волн, направление распространения которых не зависит от геометрии и материала периодической структуры, а только от периода решетки. Полное поле определяется

как сумма рассеянного и падающего полей. Цель задачи – определить амплитуду и фазу отраженных, прошедших и затухающих порядков.

Геометрия задачи приведена на рис. 1, где R_n и T_n – коэффициенты отражения и пропускания дифракционных порядков. Для приведенной геометрии задачи можно выделить три зоны с различной диэлектрической проницаемостью: область над структурой при $y > a$ (Ψ_1), где a – максимальная высота структуры с постоянной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = \varepsilon_1$, область структуры $0 < y < a$ с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = \varepsilon(x, y)$ и область $y < 0$ (Ψ_3) с постоянной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = \varepsilon_3$.

Задача дифракции плоской волны на одномерной периодической структуре сводится к рассмотрению двух независимых задач: задачи дифракции плоской волны с ТЕ-поляризацией ($E_z \neq 0, H_z = 0$) и задачи дифракции плоской волны с ТМ-поляризацией ($H_z \neq 0, E_z = 0$) [11].

Полное поле $u_\Omega(x, y)$ в области Ω ($0 < x < d, 0 < y < a$) должно удовлетворять уравнению [12]:

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{p(x, y)} \nabla u_\Omega(x, y) \right] + k_0^2 q(x, y) u_\Omega(x, y) = f_\Omega, \quad (1)$$

где $f_\Omega = jk_0 Z_0 J_z$, $p(x, y) = \mu_r$, $q(x, y) = \varepsilon_r$ для ТЕ - поляризации и $f_\Omega = - \left[\nabla \times \left(\frac{J^\Omega}{\varepsilon_\Omega} \right) \right] \cdot \mathbf{z}$, $p(x, y) = \varepsilon_r$, $q(x, y) = \mu_r$

для ТМ - поляризации. Константы μ_r и ε_r представляют собой отношение магнитной и диэлектрической проницаемостей среды к аналогичным показателям свободного пространства, т.е. $\mu_r = \mu / \mu_0$ и $\varepsilon_r = \varepsilon / \varepsilon_0$, $Z_0 = \sqrt{\mu_0 / \varepsilon_0}$ – импеданс свободного пространства, (J_x, J_y, J_z) – вектор плотности электрического тока источника в области Ω . Для ТЕ-поляризации комплексная амплитуда $u(x, y)$ обозначает полное электрическое поле $E_z(x, y)$, направленное вдоль оси z (вдоль образующей цилиндрического оптического элемента), координаты (x, y) лежат в плоскости нормального сечения. Для ТМ-поляризации комплексная амплитуда $u(x, y)$ обозначает полное магнитное поле $H_z(x, y)$.

Для решения уравнения (1) область расчета Ω должна быть ограничена введением искусственной границы $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4$ (см. рис. 1). Γ_1 и Γ_3 – фиктивные границы, бесконечно простирающиеся параллельно оси x по координатам $y = a$ и $y = 0$. Соответственно, для единственного решения задачи на данной искусственной границе должны быть введены граничные условия.

Так как пространство в зонах Ψ_1 и Ψ_3 однородное, то поле в них может быть определено в терминах граничных интегралов с соответствующей функцией Грина. Полное поле $u_\Psi(x, y)$ в этих зонах должно удовлетворять уравнению:

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{p} \nabla u_\Psi(\xi) \right] + k_0^2 q u_\Psi(\xi) = f_\Psi, \quad \xi \in \Psi, \quad (2)$$

где $f_\Psi = jk_0 Z_0 J_z^\Psi$, $p = \mu_\Psi$, $q = \varepsilon_\Psi$

для ТЕ-поляризации и $f_\Psi = - \left[\nabla \times \left(\frac{J^\Psi}{\varepsilon_\Psi} \right) \right] \cdot \mathbf{z}$, $p = \varepsilon_\Psi$,

$q = \mu_\Psi$ для ТМ - поляризации. J^Ψ – вектор плотности электрического тока источника в области Ψ , область $\Psi = \Psi_1, \Psi_3$.

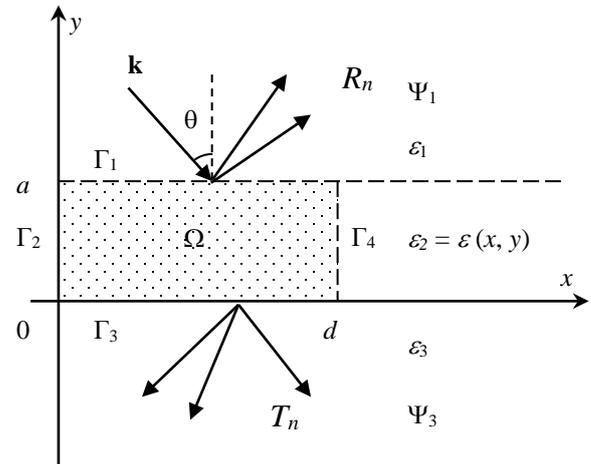


Рис. 1. Геометрия задачи дифракции на периодической диэлектрической структуре

Описание метода расчета

Метод решения уравнения Галеркина (1) основан на решении соотношений вида:

$$\iint_{\Omega} \left(-\frac{1}{p} \Delta u_\Omega \gamma - q k^2 u_\Omega \gamma - f_\Omega \gamma \right) \cdot d\Omega = 0, \quad (3)$$

где γ - произвольная функция из области определения уравнения (1).

Используя первую формулу Грина:

$$\iint_{\Omega} P \Delta Q d\Omega = \int_{\Gamma} P \frac{dQ}{dn} dl - \iint_{\Omega} \nabla P \nabla Q d\Omega,$$

для функций P и Q , где Ω – область плоскости x, y ; Γ – ее граница, обходимая против часовой стрелки;

$\frac{dQ}{dn}$ – производная в направлении внешней нормали к кривой Γ , получим:

$$\iint_{\Omega} \left(\frac{1}{p} \nabla u_\Omega(x, y) \nabla \gamma - q k^2 u_\Omega(x, y) \gamma \right) d\Omega - \int_{\Gamma} \frac{\gamma}{p} \frac{du_\Omega(x, y)}{dn} dl = \iint_{\Omega} f_\Omega \gamma d\Omega. \quad (4)$$

Систему базисных функций для Ω обозначим $\{ \omega_{k,l}^\Omega(x, y) \}_{k,l=0}^{N_x, N_y}$ и систему базисных функций для Γ обозначим $\{ \omega_m^\Gamma(x, y) \}_{m=1}^M$, где N_x, N_y – число узлов сеточного покрытия прямоугольной области Ω по

оси x и y соответственно, M – число узлов сеточного покрытия границы Γ .

Подставляя в соотношение (4) вместо произвольной функции γ систему базисных функций для метода Галеркина, можно записать систему линейных уравнений:

$$\mathbf{A}\mathbf{u} + \mathbf{B}\mathbf{v} = \mathbf{C}\mathbf{f}, \quad (5)$$

где $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_{N_x N_y})^T$ – вектор, составленный из коэффициентов $\left\{ u_{N_y(k)+l} \right\}_{k,l=0}^{N_x, N_y}$ разложения:

$$u^\Omega(x, y) = \sum_{k,l=0}^{N_x, N_y} u_{k,l} \omega_{k,l}^\Omega(x, y). \quad (6)$$

Вектор $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_{N_x N_y})^T$ – вектор, составленный из коэффициентов разложения:

$$f^\Omega(x, y) = \sum_{k,l=0}^{N_x, N_y} f_{k,l} \omega_{k,l}^\Omega(x, y). \quad (7)$$

Хотя равенства (6) и (7) действительны для всех точек (x, y) в области Ω , необходима отдельная обработка величин поля и его частных производных на границе Γ от значений во внутренней области. Разложение, аналогичное (6) и (7), для поля и его частных производных на границе имеет вид:

$$u^\Gamma(x, y) = \sum_{m=1}^M u_m \omega_m^\Gamma(x, y), \quad (8)$$

$$v^\Gamma(x, y) = \sum_{m=1}^M v_m \omega_m^\Gamma(x, y), \quad (9)$$

$$f^\Gamma(x, y) = \sum_{m=1}^M f_m \omega_m^\Gamma(x, y), \quad (10)$$

где $(x, y) \in \Gamma$, $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_M)^T$ – вектор, составленный из коэффициентов разложения v_k .

Элементы матрицы \mathbf{A} вычисляются по формулам:

$$a_{N_y(k)+l, N_y(i)+j} = \iint_{\Omega_{k,l}} \left[\frac{1}{p(x, y)} \left(\frac{\partial \omega_{k,l}^\Omega(x, y)}{\partial x} \frac{\partial \omega_{i,j}^\Omega(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial \omega_{k,l}^\Omega(x, y)}{\partial y} \frac{\partial \omega_{i,j}^\Omega(x, y)}{\partial y} \right) - k_0^2 q(x, y) \omega_{k,l}^\Omega(x, y) \omega_{i,j}^\Omega(x, y) \right] d\Omega, \quad (11)$$

$$k, i = [1, N_x]; l, j = [1, N_y],$$

где $\Omega_{k,l}$ – область разбиения области Ω , включающая узлы сети k и l .

Элементы матрицы \mathbf{B} вычисляются по формулам:

$$b_{m,s} = - \oint_{\Gamma_{m,s}} \omega_m^\Gamma \omega_s^\Gamma dl, \quad (12)$$

$$m, s = [1, M],$$

где $\Gamma_{m,s}$ – линейная область границы Γ , включающая узлы границы m и s .

Элементы матрицы \mathbf{C} вычисляются по формулам:

$$C_{N_y(k)+l, N_y(i)+j} = \iint_{\Omega_{k,l}} \omega_{k,l}^\Omega(x, y) \omega_{i,j}^\Omega(x, y) d\Omega, \quad (13)$$

$$k, i = [1, N_x]; l, j = [1, N_y],$$

где $\Omega_{k,l}$ – область разбиения области Ω , включающая узлы сети k и l .

В качестве кусочно-линейного базиса была определена функция вида:

$$\omega_{k,l}^\Omega(x, y) = \begin{cases} 1 - \frac{x_k - x}{h} - \frac{y_l - y}{h}, & \text{если } x, y \in \Omega_{k,l,1}^h \\ 1 - \frac{x_k - x}{h}, & \text{если } x, y \in \Omega_{k,l,2}^h \\ 1 + \frac{y_l - y}{h}, & \text{если } x, y \in \Omega_{k,l,3}^h \\ 1 + \frac{x_k - x}{h} + \frac{y_l - y}{h}, & \text{если } x, y \in \Omega_{k,l,4}^h \\ 1 + \frac{x_k - x}{h}, & \text{если } x, y \in \Omega_{k,l,5}^h \\ 1 - \frac{y_l - y}{h}, & \text{если } x, y \in \Omega_{k,l,6}^h \end{cases}, \quad (14)$$

где h – длина сегмента сети покрытия.

Элементы $(a_{k,l}^{i,j})$ матрицы \mathbf{A} , элементы $(b_{m,s})$ матрицы \mathbf{B} и элементы $(c_{k,l}^{i,j})$ матрицы \mathbf{C} вычисляются из уравнений (11), (12) и (13) соответственно. Тогда систему уравнений (5) можно представить в виде:

$$\begin{bmatrix} [\mathbf{A}_{\Omega,\Omega}] & [\mathbf{A}_{\Gamma,\Omega}] & 0 \\ [\mathbf{A}_{\Omega,\Gamma}] & [\mathbf{A}_{\Gamma,\Gamma}] & [\mathbf{B}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_\Omega \\ \mathbf{u}_\Gamma \\ \mathbf{v}_\Gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\mathbf{C}_{\Omega,\Omega}] & [\mathbf{C}_{\Gamma,\Omega}] \\ [\mathbf{C}_{\Omega,\Gamma}] & [\mathbf{C}_{\Gamma,\Gamma}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f}_\Omega \\ \mathbf{f}_\Gamma \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Система уравнений (15) не имеет единственного решения, так как она состоит из N равенств с $N+M$ неизвестными: $N = N_x N_y$ – общее число узловых величин поля $u_{k,l}(x, y)$ в области Ω и M производных по нормальным на граничных узлах $v_{k,l}(x, y)$.

Определим граничные условия для поля и его производных на границах Γ_1 и Γ_3 , удовлетворяющие уравнению (2).

Для построения граничного интегрального уравнения на основе уравнения (2) для поля и его нормальной производной введем функцию Грина u^* , удовлетворяющую условиям излучения Зоммерфельда и являющуюся фундаментальным решением уравнения Гельмгольца:

$$\nabla^2 u^*(\xi, \eta) + k^2 u^*(\xi, \eta) = -\delta(\xi, \eta), \quad \eta \in \Psi. \quad (16)$$

Фундаментальное решение для уравнения Гельмгольца в двумерном однородном пространстве известно и равно

$$u^*(\xi, \eta) = (i/4)H_0^{(1)}(kr), \tag{17}$$

где $r = \sqrt{[x(\eta) - x(\xi)]^2 + [y(\eta) - y(\xi)]^2}$,

$H_0^{(1)}(kr) = J_0(kr) + iY_0(kr)$ – функция Ханкеля первого рода и нулевого порядка, где J_0 – функция Бесселя первого рода нулевого порядка, Y_0 – функция Неймана нулевого порядка.

Для построения граничного интегрального уравнения для рассеянного поля и его нормальной производной в зонах Ψ_1 и Ψ_3 воспользуемся теоремой Грина в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \int_{\Psi} [\nabla^2 u^*(\xi, \eta) + k^2 u^*(\xi, \eta)] u(\eta) d\Psi = \\ & = - \int_{\Gamma'} v(\eta) u^*(\xi, \eta) d\Gamma + \\ & + \int_{\Gamma'} u(\eta) \frac{\partial u^*(\xi, \eta)}{\partial \mathbf{n}'} d\Gamma + \int_{\Psi} f_{\Psi}(\eta) u^*(\xi, \eta) d\Psi, \end{aligned} \tag{18}$$

где $v(\eta) = \frac{\partial u(\eta)}{\partial \mathbf{n}'}$ – нормальные производные поля,

под Γ' принимаются бесконечные границы $y = a$ и $y = 0$ для зон Ψ_1 и Ψ_3 соответственно.

Подставляя равенство (16) в уравнение (18) и осуществляя предельный переход точки наблюдения ξ из внутренней в граничную, найдем

$$\begin{aligned} c(\xi)u(\xi) &= - \int_{\Psi} f_{\Psi}(\eta) u^*(\xi, \eta) d\Psi + \\ & + \int_{\Gamma'} v(\eta) u^*(\xi, \eta) d\Gamma - \int_{\Gamma'} u(\eta) \frac{\partial u^*(\xi, \eta)}{\partial \mathbf{n}'} d\Gamma. \end{aligned} \tag{19}$$

Это уравнение обеспечивает связь между полем u и его нормальной производной v на границе Γ' . Функция $c(\xi)$ в уравнении (19) равна:

$$c(\xi) = 1 - \frac{1}{2\pi} \varphi, \tag{20}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} u_{\Gamma_i}(x_s) &= \sum_{m=1}^M h \left\{ v_{\Gamma_i}(x_m) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_0 \alpha_0 (x_m + nd)} \left[\int_{-1}^1 \omega^{\Gamma_i}(x_m + h\eta) u_{\Gamma_i}^*(x_m + nd - x_s + h\eta) d\eta \right] - \right. \\ & \left. - u_{\Gamma_i}(x_m) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_0 \alpha_0 (x_m + nd)} \left[\int_{-1}^1 \omega^{\Gamma_i}(x_m + h\eta) \frac{\partial u_{\Gamma_i}^*(x_m + nd - x_s + h\eta)}{\partial \mathbf{n}'} d\eta \right] \right\} + u_{\Gamma_i}^{in}(x_s), \end{aligned} \tag{24}$$

где $s = [1, N_x - 1]$, $i = 1, 3$.

Граничные условия на поле и его производные на границах Γ_2 и Γ_4 являются периодическими вида:

$$u_{\Gamma_4} = u_{\Gamma_2} e^{ik_0 \alpha_0 d}, \quad v_{\Gamma_4} = v_{\Gamma_2} e^{ik_0 \alpha_0 d}. \tag{25}$$

Разложения (8) и (9) и граничные условия (25) позволяют записать для коэффициентов поля и его производных на границах Γ_2 и Γ_4 :

$$u_{\Gamma_4}(x_s) = u_{\Gamma_2}(x_s) e^{ik_0 \alpha_0 d}, \quad v_{\Gamma_4}(x_s) = v_{\Gamma_2}(x_s) e^{ik_0 \alpha_0 d}, \tag{26}$$

где φ – внутренней угол кусочно-линейной границы в точке ξ . Первое слагаемое в правой части (19) является полем, создаваемым источником f_{Ψ} в свободном пространстве, и может быть обозначено как падающее поле u_{Ψ}^{in} .

Таким образом, уравнение (19) записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} c(\xi)u(\xi) &= \int_{\Gamma'} v(\eta) u^*(\xi, \eta) d\Gamma - \\ & - \int_{\Gamma'} u(\eta) \frac{\partial u^*(\xi, \eta)}{\partial \mathbf{n}'} d\Gamma + u_{\Psi}^{in}(\xi). \end{aligned} \tag{21}$$

Поле u и его производные v в случае дифракционной решетки являются квазипериодическими функциями [11, 13-15]:

$$\begin{aligned} u(x, y) &= \tilde{u}(x, y) e^{ik_0 \alpha_0 x}, \\ v(x, y) &= \tilde{v}(x, y) e^{ik_0 \alpha_0 x}, \end{aligned} \tag{22}$$

где $\tilde{u}(x, y)$ и $\tilde{v}(x, y)$ – периодические по x функции с периодом d .

Интегрирование по бесконечной границе Γ' в (21) можно заменить интегрированием по границам Γ_1 и Γ_3 :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} u(x_0, y) &= \\ &= \int_{\Gamma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{v}(x, y) e^{ik_0 \alpha_0 (x + nd)} u^*(x + nd - x_0) dx - \\ &- \int_{\Gamma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{u}(x, y) e^{ik_0 \alpha_0 (x + nd)} \frac{\partial u^*(x + nd - x_0)}{\partial \mathbf{n}'} dx + \\ &+ u^{in}(x_0, y), \quad x \in [0, d), \end{aligned} \tag{23}$$

где $\Gamma = \Gamma_1, \Gamma_3$, $y = a$ и $y = 0$ для границ Γ_1 и Γ_3 соответственно.

Подставляя вместо функции комплексной амплитуды в уравнении (23) на границе ее аппроксимацию базисными кусочно-линейными функциями (8) и (9), получим соотношение (24).

где $s = [1, N_y]$. Элементы матриц \mathbf{D} и \mathbf{G} , соответствующие границам Γ_2 и Γ_4 , записываются как:

$$\begin{aligned} d_2^s &= 1, \quad d_4^s = d_2^s e^{ik_0 \alpha_0 d}, \quad g_2^s = 1, \quad g_4^s = g_2^s e^{ik_0 \alpha_0 d}, \\ e_2^s &= 0, \quad e_4^s = 0, \quad s = [1, N_y]. \end{aligned} \tag{27}$$

Соотношения (24) могут быть представлены в матричном виде (30) с элементами матриц \mathbf{D} , \mathbf{G} и \mathbf{E} вида (27), (28) и (29). Бесконечные ряды в (28) и (29) аппроксимируются конечными суммами с относительной погрешностью менее 10^{-5} .

$$d_i^{s,m} = -h \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_0 \alpha_0 (x_m + nd)} \left[\int_{-1}^1 \omega^{\Gamma_i} (x_m + h\eta) \frac{\partial u_{\Gamma_i}^* (x_m + nd - x_s + h\eta)}{\partial \mathbf{n}'} d\eta \right] \right\}, \quad e_i^s = \frac{1}{2} \delta_{s,m}, \quad (28)$$

$$g_i^{s,m} = h \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_0 \alpha_0 (x_m + nd)} \left[\int_{-1}^1 \omega^{\Gamma_i} (x_m + h\eta) u_{\Gamma_i}^* (x_m + nd - x_s + h\eta) d\eta \right] \right\}, \quad (29)$$

$$m, s = [1, N_x - 1], \quad i = 1, 3.$$

$$[\mathbf{D}] \mathbf{u}_{\Gamma} + [\mathbf{G}] \mathbf{v}_{\Gamma} = [\mathbf{E}] \mathbf{u}_{\Gamma}^{in}. \quad (30)$$

Интегралы в равенствах (28) и (29) могут быть оценены численно. Объединяя системы уравнений (15) и (30), получим замкнутую систему линейных алгебраических уравнений для решения задачи дифракции плоской волны на периодическом двумерном микрообъекте (31).

$$\begin{bmatrix} [\mathbf{A}_{\Omega, \Omega}] & [\mathbf{A}_{\Gamma, \Omega}] & \mathbf{0} \\ [\mathbf{A}_{\Omega, \Gamma}] & [\mathbf{A}_{\Gamma, \Gamma}] & [\mathbf{B}] \\ \mathbf{0} & [\mathbf{D}] & [\mathbf{G}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Omega} \\ \mathbf{u}_{\Gamma} \\ \mathbf{v}_{\Gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\mathbf{C}_{\Omega, \Omega}] & [\mathbf{C}_{\Gamma, \Omega}] & \mathbf{0} \\ [\mathbf{C}_{\Omega, \Gamma}] & [\mathbf{C}_{\Gamma, \Gamma}] & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & [\mathbf{E}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{\Omega} \\ \mathbf{f}_{\Gamma} \\ \mathbf{u}_{\Gamma}^{in} \end{bmatrix}, \quad (31)$$

где подматрица $\mathbf{A}_{\Omega, \Omega}$ размерностью $(N - M) \times (N - M)$ включает в себя коэффициенты соотношений поля во внутренних узлах сети разбиения, подматрицы $\mathbf{A}_{\Omega, \Gamma}$ и $\mathbf{A}_{\Gamma, \Omega}$ размерностью $(N - M) \times M$ и $M \times (N - M)$ соответственно включают в себя коэффициенты связи поля в граничных и внутренних узлах, подматрица $\mathbf{A}_{\Gamma, \Gamma}$ размером $M \times M$ включает в себя коэффициенты связи поля в граничных узлах, подматрица \mathbf{B} размером $M \times M$ включает в себя коэффициенты соотношений между производными поля на границе и полем во внутренних узлах сети разбиения, подматрица \mathbf{D} размером $M \times M$ включает в себя коэффициенты связи поля свободного пространства в граничных узлах, подматрица \mathbf{G} размером $M \times M$ включает в себя коэффициенты соотношений между производными поля на границе и полем свободного пространства во внутренних узлах сети разбиения. Подматрица $\mathbf{C}_{\Omega, \Omega}$ размерностью $(N - M) \times (N - M)$ включает в себя коэффициенты соотношений источников поля во внутренних узлах сети разбиения, подматрицы $\mathbf{C}_{\Omega, \Gamma}$ и $\mathbf{C}_{\Gamma, \Omega}$ размерностью $(N - M) \times M$ и $M \times (N - M)$ соответственно включают в себя коэффициенты соотношений источников поля в граничных и внутренних узлах, подматрица $\mathbf{C}_{\Gamma, \Gamma}$ размером $M \times M$ включает в себя коэффициенты соотношений источников поля в граничных узлах. Подматрица \mathbf{E} имеет размер $M \times M$. Вектора \mathbf{u}_{Ω} и \mathbf{u}_{Γ} – вектора напряженности поля во внутренних и граничных узлах сети, \mathbf{v}_{Γ} – вектора нормальных производных поля в граничных узлах сети. Вектора \mathbf{f}_{Ω} и \mathbf{f}_{Γ} – вектора источников поля во внутренних и граничных узлах сети, \mathbf{u}_{Γ}^{in} – вектор напряженности внешнего падающего поля в граничных узлах сети. Таким образом, система (31) имеет $N + M$ уравнений и столько же неизвестных.

Поле в областях Ψ_1 и Ψ_3 может быть представлено в виде разложений Рэлея (суперпозиций плоских волн). В зоне Ψ_1 z -компоненты полей имеют вид:

$$u(x, y) = \exp(ik_0(\alpha_0 x - \beta_0 y)) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} R_n \exp(ik_0(\alpha_n x + \beta_n y)), \quad (32)$$

$$\text{где } \alpha_n = \sqrt{\varepsilon_1} \sin(\theta) + n \frac{\lambda_0}{d}, \quad \beta_n = \sqrt{\varepsilon_1 - \alpha_n^2}. \quad (33)$$

Функция $u(x, y)$ представляет компоненту $E_z(x, y)$ электрического поля для случая ТЕ-поляризации и компоненту $H_z(x, y)$ магнитного поля для случая ТМ-поляризации.

В зоне Ψ_3 z -компоненты имеют вид:

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n \exp(ik_0(\alpha_n x - \tilde{\beta}_n y)), \quad (34)$$

$$\text{где } \tilde{\beta}_n = \sqrt{\varepsilon_3 - \alpha_n^2}. \quad (35)$$

Разложения Рэлея (32), (34) являются решениями уравнения Гельмгольца

$$\Delta u + k^2 u = 0, \quad (36)$$

при $k^2 = k_0^2 \varepsilon_1$ и $k^2 = k_0^2 \varepsilon_3$, соответственно.

После определения значений поля в области Ω и его производных на границах Γ_1 и Γ_3 нормированные интенсивности отраженных и прошедших порядков рассчитываются следующим образом [1, 5, 6]:

$$I_n^R = |R_n|^2 \frac{\beta_n}{\beta_0}, \quad I_n^T = \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_1}} |T_n|^2 \frac{\tilde{\beta}_n}{\beta_0}, \quad \left(\sum_{n \in U_1} I_n^R + \sum_{n \in U_3} I_n^T = 1 \right). \quad (37)$$

$$I_n^R = |R_n|^2 \frac{\beta_n}{\beta_0}, \quad I_n^T = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_3}} |T_n|^2 \frac{\tilde{\beta}_n}{\beta_0}, \quad \left(\sum_{n \in U_1} I_n^R + \sum_{n \in U_3} I_n^T = 1 \right) \quad (38)$$

для ТЕ- и ТМ-поляризованных волн соответственно. Выражения (37), (38) определяют, какая часть энергии падающей волны перейдет к n -му порядку дифракции. Заметим, что интенсивности порядков распространения существуют для непоглощающих материалов, т.е. для $Im\sqrt{\varepsilon_i} = 0$. Множества U_1 и U_2 в (37) и (38) являются множествами индексов, соответствующих отраженным и прошедшим порядкам дифракции:

$$U_1 = \begin{cases} \left\{ n \in \mathbb{Z} : \frac{\alpha_n^2}{\varepsilon_1} < 1 \right\}, & \text{àñëè } \text{Im}\sqrt{\varepsilon_1} = 0 \\ 0, & \text{àñëè } \text{Im}\sqrt{\varepsilon_1} > 0 \end{cases}, U_3 = \begin{cases} \left\{ n \in \mathbb{Z} : \frac{\alpha_n^2}{\varepsilon_3} < 1 \right\}, & \text{àñëè } \text{Im}\sqrt{\varepsilon_3} = 0 \\ 0, & \text{àñëè } \text{Im}\sqrt{\varepsilon_3} > 0 \end{cases}. \quad (39)$$

Для определения коэффициентов отражения R_n и пропускания T_n воспользуемся дискретным преобразованием Фурье:

$$R_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} [u(x_k, a) - u^{in}(x_k, a)] \exp(-ik_0 \alpha_n x_k). \quad (40)$$

$$T_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} u(x_k, 0) \exp(-ik_0 \alpha_n x_k). \quad (41)$$

Эти коэффициенты описывают амплитуду и фазовый сдвиг распространяющихся плоских волн. Более точно, модули $|R_n|$ и $|T_n|$ – это амплитуды n -го отраженного и прошедшего порядков и $\arg[R_n/|R_n|]$ и $\arg[T_n/|T_n|]$ – фазовый сдвиг. Коэффициенты с $n \notin U_1, n \notin U_3$ описывают затухающие волны.

Результаты численного моделирования

Рассмотрим в качестве примера дифракцию плоской волны с длиной волны $\lambda_0 = 0,6$ мкм на бинарной диэлектрической дифракционной решетке с коэффициентом заполнения 0,25 с толщиной 0,24 мкм. Период решеток менялся от 0,2 мкм до 2 мкм. Соответственно при моделировании ПМКЭ-ГЭ длина сегмента сети покрытия h менялась от $\lambda_0 / 300$ до $\lambda_0 / 30$.

Рассмотрим пример. Плоская волна падает по нормали из воздуха ($\varepsilon_1 = 1$) на решетку ($\varepsilon_3 = 2,25$). На рис. 1 и 2 представлены зависимости эффективностей I_0^R и I_0^T порядков дифракции ТЕ- и ТМ-поляризованной волны соответственно от периода решетки.

Зависимости отклонений интенсивностей ΔI_0^R и ΔI_0^T ($\Delta I = |I_i^{RCWA} - I_i^{ПМКЭ-ГЭ}|$) нулевых порядков дифракции, рассчитанных RCWA и ПМКЭ-ГЭ методами, ТЕ- и ТМ-поляризованных волн от длины сегмента сети покрытия h метода ПМКЭ-ГЭ приведены на рис. 3. Трудно отметить явную зависимость отклонения для $h < \lambda_0 / 30$. Равномерная норма отклонения интенсивностей составляет $4 \cdot 10^{-3}$ и $2 \cdot 10^{-3}$ для ТЕ- и ТМ-поляризаций соответственно.

В следующем примере плоская волна падает по нормали из подложки решетки ($\varepsilon_1 = 2,25$) в воздух ($\varepsilon_3 = 1$). На рис. 4 и 5 представлены зависимости интенсивностей I_0^R и I_0^T порядков дифракции ТЕ- и ТМ-поляризованной волны от периода решетки.

Зависимости отклонений интенсивностей ΔI_0^R и ΔI_0^T порядков дифракции ТЕ- и ТМ-поляризованных волн от длины сегмента сети покрытия h приведены на рис. 6. Равномерная норма отклонения интенсивностей составляет $7 \cdot 10^{-3}$ и $8 \cdot 10^{-3}$ для ТЕ- и ТМ-поляризаций соответственно.

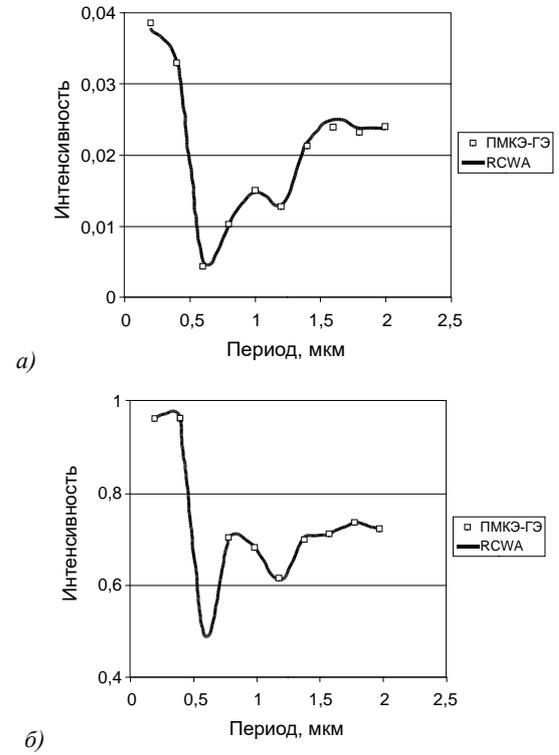


Рис. 2. Распределение эффективности нулевых порядков дифракции ТЕ-поляризованной волны: а) I_0^R , б) I_0^T

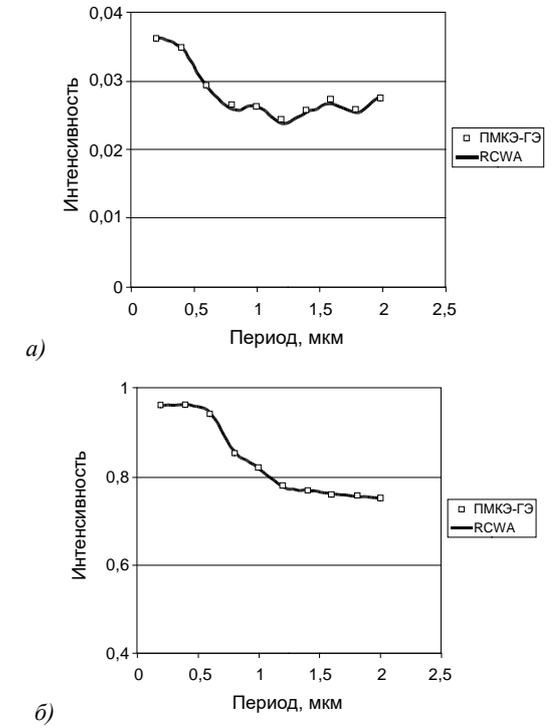
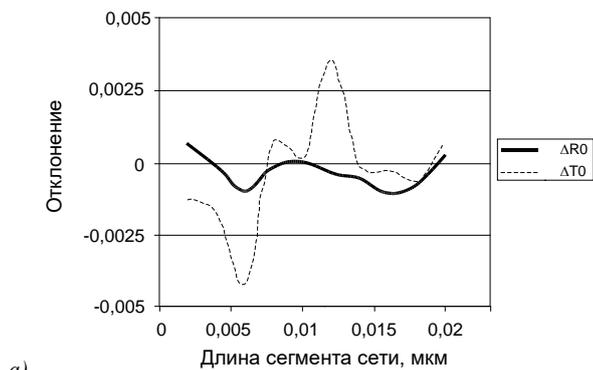
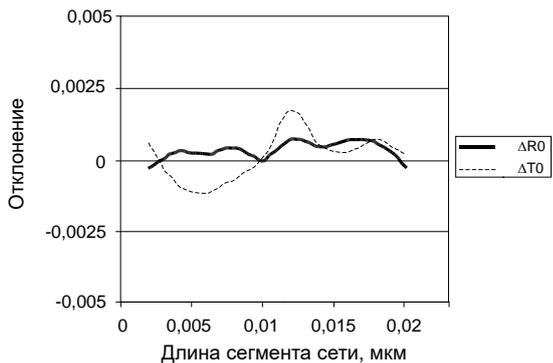


Рис.3. Распределение эффективности нулевых порядков дифракции ТМ-поляризованной волны: а) I_0^R , б) I_0^T

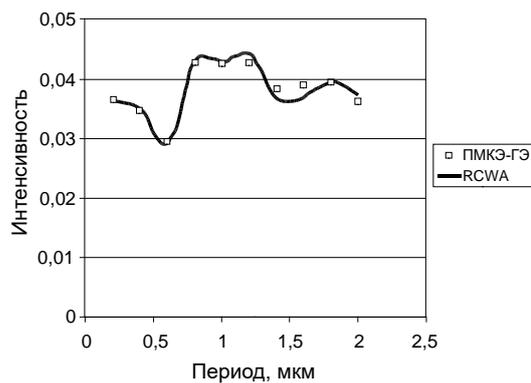


а)

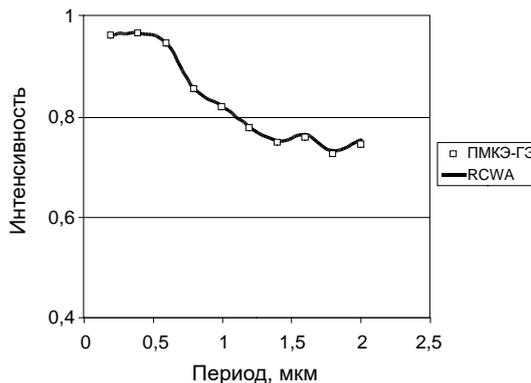


б)

Рис. 4. Зависимость отклонений эффективности нулевых порядков от параметра h : а) ТЕ-волны; б) ТМ-волны



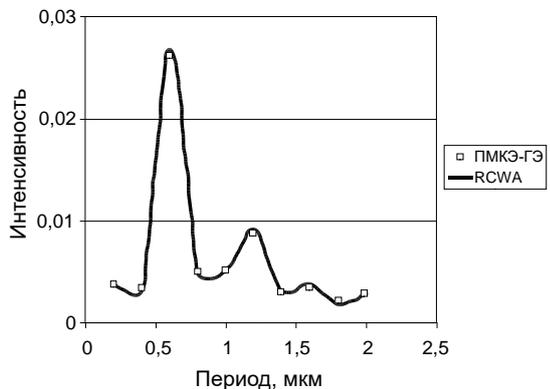
а)



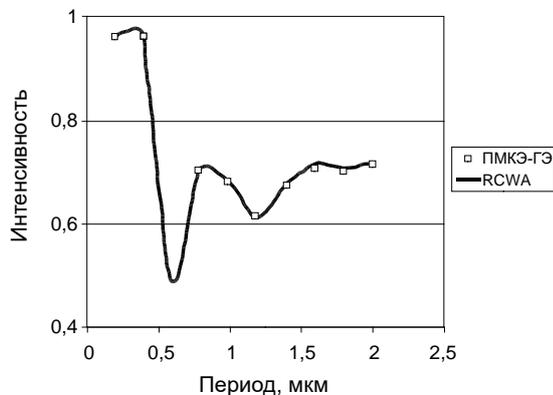
б)

Рис. 6. Распределение эффективности нулевых порядков дифракции ТМ-поляризованной волны:

а) I_0^R , б) I_0^T



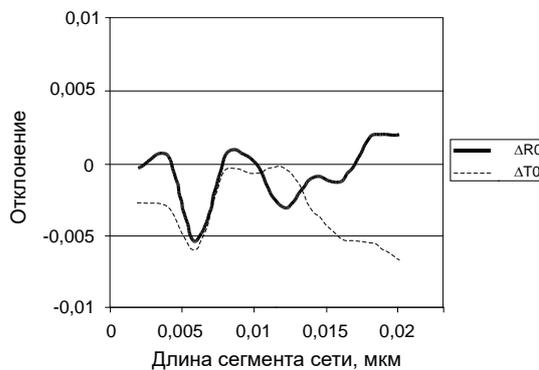
а)



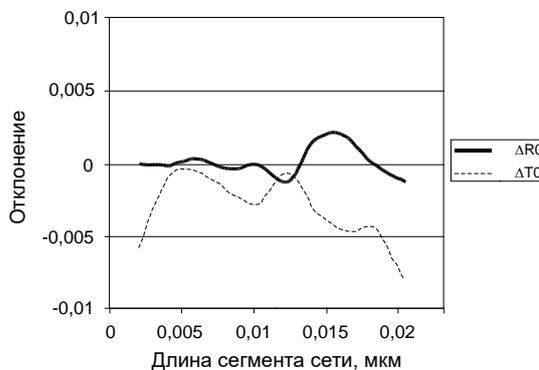
б)

Рис. 5. Распределение эффективности нулевых порядков дифракции ТЕ-поляризованной волны:

а) I_0^R , б) I_0^T



а)



б)

Рис. 7. Зависимость отклонений эффективности нулевых порядков от параметра h : а) ТЕ-волны; б) ТМ-волны

Таким образом, сравнение результатов, полученных разработанным ПМКЭ-ГЭ методом и RCWA методом, показало их хорошее соответствие.

Заключение

В данной работе представлен объединенный метод конечных элементов Галеркина и граничных элементов для решения задач дифракции плоской электромагнитной волны на периодических неоднородных двумерных (цилиндрических) объектах микрооптики, период которых сравним с длиной волны.

Проведено исследование зависимости относительной погрешности результатов моделирования от отношения длины волны падающего света к длине сегмента сети покрытия.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке российско-американской программы «Фундаментальные исследования и высшее образование» (грант CRDF RUX0-014-SA-06), гранта РФФИ 08-07-99007-р_офи, Фонда содействия отечественной науке и гранта Президента РФ поддержки ведущих научных школ (НШ-3086.2008.9).

Литература

1. Electromagnetic Theory of Gratings: Topics in current physics / Ed. by R. Petit // N.Y.: Springer-Verlag. – 1980.
2. **Moharam, M.G.** Rigorous coupled wave analysis of planar grating diffraction / M.G. Moharam [and others] // J. Opt. Soc. Amer. 71. – 1981. – P. 811–818.
3. **Chandezon, J.** A new theoretical method for diffraction gratings and its applications / J. Chandezon [and others] // J. Opt. (Paris), 11. – 1980. – P. 235–241.
4. **Urbach, H.P.** Convergence of the Galerkin method for two-dimensional electromagnetic problems / H.P. Urbach // SIAM J. Numer. Anal., 28. – 1991. – P. 697–710.
5. **Bao, G.** Finite element approximation of time harmonic waves in periodic structures / G. Bao [and others] // SIAM J. Numer. Anal., 32. – 1995. – P. 1155–1169.
6. **Elschner, J.** Finite element solution of conical diffraction problems / J. Elschner [and others] // Advances in Comp. Math., 16. – 2002. – P. 139–156.
7. **Prather, D.W.** Boundary integral methods to the analysis of diffractive optical elements / D.W. Prather [and others] // J. Opt. Soc. Am. A, 14. – 1997. – P. 34–42.
8. **Yee, K.** Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media / K. Yee // IEEE Trans. Antennas Propag. AP-14. – 1966. – P. 302–307.
9. **Saj, W.M.** FDTD simulations of 2D plasmon waveguide on silver nanorods in hexagonal lattice / W. M. Saj // Opt. Express 13. – 2005. – P. 4818–4827.
10. G Solver, rigorous diffraction grating analysis [Электронный ресурс]. <http://www.gsolver.com>. – Grating Solver Development Company.
11. Методы компьютерной оптики / под ред. В.А. Соифера. – М.: Физматлит, 2000. – 688 с.
12. **Неганов, В.А.** Линейная макроскопическая электродинамика / В.А. Неганов, С.Б. Раевский, Г.П. Яровой. – М.: Радио и Связь, 2000. – 509 с.
13. Methods For Computer Design of Diffractive Optical Elements / Ed. by V.A. Soifer // N.Y.: Wiley-Inter-science Publication John Wiley & Sons, Inc. – 2002.
14. **Moharam, M.G.** Formulation for Stable and Efficient Implementation of the Rigorous Coupled-Wave Analysis of Binary Gratings / M.G. Moharam [and others] // J. Opt. Soc. Amer. 12 (5). – 1995. – P. 1068–1076.
15. **Нестеренко, Д.В.** Анализ дифракции света на элементах цилиндрической микрооптики объединенным методом конечных элементов Галеркина и граничных элементов / Д.В. Нестеренко, В.В. Котляр // Компьютерная оптика, 32. – N1. – 2008. – С. 23–28.

HYBRID FINITE ELEMENT METHOD AND BOUNDARY ELEMENT METHOD FOR ANALYSIS OF LIGHT DIFFRACTION ON DIFFRACTION GRATINGS

D.V. Nesterenko¹, V.V. Kotlyar^{1,2}

¹Image Processing Systems Institute of the RAS, Samara, Russia,
²S.P. Korolyov Samara State Aerospace University, Samara, Russia

Abstract

The hybrid finite element method and boundary element method realization for the simulation of the diffraction by periodical optical elements is an efficient numerical tool in case of complex geometry elements. The implementation of the hybrid method is discussed. As example we present the comparison with RCWA method of the simulations of binary dielectric gratings which demonstrates the efficiency of our approach.

Key words: diffraction, diffraction grating, finite element method, boundary element method.

Citation: Nesterenko DV, Kotlyar VV. Hybrid finite element method and boundary element method for analysis of light diffraction on diffraction gratings. *Computer Optics* 2008; 32(3): 238-45.

Acknowledgements: The work was supported by the Russian-American program "Basic Research and Higher Education" (grant CRDF RUX0-014-SA-06), the grant RFFI 08-07-99007-r_ofi, Russian Science Support Foundation and a grant from the President of the Russian Federation for support of leading scientific schools (NSH-3086.2008.9).

References

- [1] Petit R. *Electromagnetic Theory of Gratings: Topics in current physics*. N.Y.: Springer-Verlag, 1980.
- [2] Moharam MG. Rigorous coupled wave analysis of planar grating diffraction. *J. Opt. Soc. A* 1981; 71: 811–818.
- [3] Chandezon J. A new theoretical method for diffraction gratings and its applications. *J. Opt. (Paris)* 1980; 11: 235–241.
- [4] Urbach HP. Convergence of the Galerkin method for two-dimensional electromagnetic problems. *SIAM J. Numer. Anal.* 1991; 28: 697–710.
- [5] Bao G. Finite element approximation of time harmonic waves in periodic structures. *SIAM J. Numer. Anal.* 1995; 32: 1155–1169.
- [6] Elschner J. Finite element solution of conical diffraction problems. *Advances in Comp. Math.* 2002; 16: 139–156.
- [7] Prather DW. Boundary integral methods to the analysis of diffractive optical elements. *J. Opt. Soc. Am. A* 1997; 14: 34–42.
- [8] Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas Propag.* 1966; AP-14: 302–307.
- [9] Saj WM. FDTD simulations of 2D plasmon waveguide on silver nanorods in hexagonal lattice. *Opt. Express* 2005; 13:4818–4827.
- [10] GSolver, rigorous diffraction grating analysis. URL: <http://www.gsolver.com>. – Grating Solver Development Company.
- [11] Soifer VA, ed. *Methods of Computer Optics* [In Russian]. Moscow: "Fizmatlit" Publisher; 2000: 688 p.
- [12] Neganov VA, Raevsky SB, Yarovoy GP. *Linear microscopic electrodynamics* [In Russian]. Moscow: "Radio i svyaz" Publisher 2000; 509 p.
- [13] *Methods For Computer Design of Diffractive Optical Elements*. Ed by Soifer VA. N.Y.: Wiley-Inter-science Publication John Wiley & Sons, Inc., 2002.
- [14] Moharam MG. Formulation for Stable and Efficient Implementation of the Rigorous Coupled-Wave Analysis of Binary Gratings. *J. Opt. Soc. A* 1995; 12(5): 1068-1076.
- [15] Nesterenko DV, Kotlyar VV. Light scattering in a dielectric cylinder consisting of metallic nanorod arrays [In Russian]. *Computer Optics* 2008; 32(1): 23-28.