

# フーリエ解析から見た スカラー回折とベクトル回折

*Scalar diffraction and vector diffraction using Fourier analysis*

高木康博

*Yasuhiro Takaki*

東京農工大学工学部

*Tokyo University of Agriculture & Technology*

*Faculty of Technology*

回折光学に期待されていること

微細加工技術の進歩を背景として

消極的要請・・・微細構造を含む光学素子の評価

積極的要請・・・微細構造による光学機能の発現

微細構造はベクトル回折による取り扱いが必要

スカラー回折とベクトル回折

スカラー回折・・・フレネル近似、フラウンホーファー近似  
フーリエ解析で容易に理解できる

ベクトル回折・・・*Maxwell*方程式

*RCWA*では物質の記述にフーリエ解析を利用

フーリエ解析に主眼を置くことで、ベクトル回折の理解を  
深める

# スカラー回折とベクトル回折

Maxwell方程式

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} = \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) &= 0 & \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0 & \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \sigma \mathbf{E} + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}$$

$\varepsilon$  は物質構造を表し、空間の関数である

電場と磁場は時間に対しては調和振動する  $\mathbf{H} = \vec{H} \exp(j\omega t)$   $\mathbf{E} = \vec{E} \exp(j\omega t)$

ベクトル回折の基本式

$$\nabla^2 \vec{E} + \nabla \left( \vec{E} \cdot \frac{\nabla \varepsilon}{\varepsilon} \right) + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon \vec{E} = 0 \quad \nabla^2 \vec{H} + \frac{\nabla \varepsilon}{\varepsilon} \times \nabla \times \vec{H} + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon \vec{H} = 0$$

$\nabla \varepsilon$  が他の項に比べて小さい、物質構造の変化が小さい

$$\nabla^2 \vec{E} + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon \vec{E} = 0 \quad \nabla^2 \vec{H} + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon \vec{H} = 0$$

電場と磁場で  $x, y, z$  成分による違いがないから、各成分をスカラー関数  $g(x, y, z)$  で代表させる

スカラー回折の基本式, Helmholtz方程式

$$(\nabla^2 + k^2)g(x, y, z) = 0$$

波数  $k = 2\pi/\lambda$

# フーリエ解析によるスカラー回折の解法

Helmholtz方程式  $(\nabla^2 + k^2)g(x, y, z) = 0$

位置 $z$ での波面 $g(x, y; z)$ をフーリエ変換 $G(\nu_x, \nu_y; z)$ を用いて表す

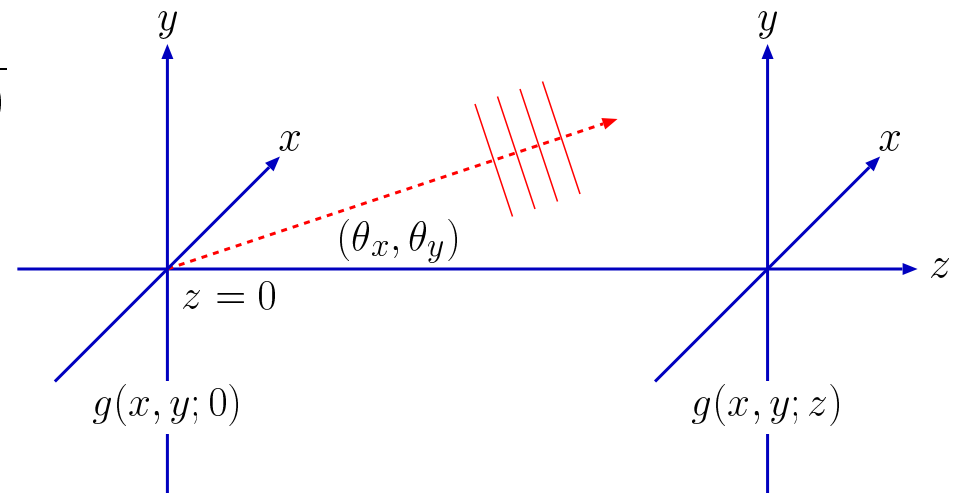
$$g(x, y; z) = \int \int_{-\infty}^{\infty} G(\nu_x, \nu_y; z) e^{j2\pi(x\nu_x + y\nu_y)} d\nu_x d\nu_y \quad \nu_x \text{と} \nu_y \text{は空間周波数}$$

Helmholtz方程式に代入

$$k^2[1 - \lambda^2(\nu_x^2 + \nu_y^2)]G(\nu_x, \nu_y; z) + \frac{\partial^2 G(\nu_x, \nu_y; z)}{\partial z^2} = 0$$

$$G(\nu_x, \nu_y; z) = G(\nu_x, \nu_y; 0) e^{jkz\sqrt{1 - \lambda^2(\nu_x^2 + \nu_y^2)}}$$

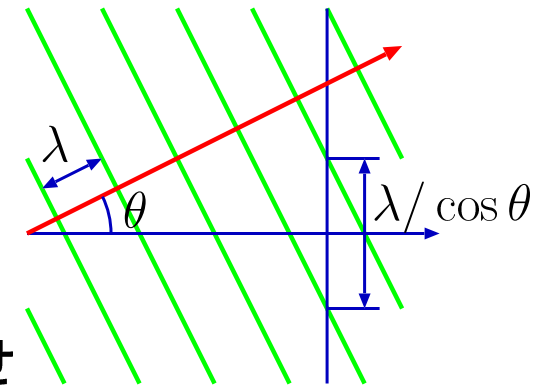
ただし、 $G(\nu_x, \nu_y; 0)$  は、 $z=0$ での波面 $g(x, y; 0)$ のフーリエ変換



# 角スペクトルを用いたスカラー回折式

Helmholtz方程式を厳密に満たす回折式

$$g(x, y; z) = \iint_{-\infty}^{\infty} G(\nu_x, \nu_y; 0) e^{jkz\sqrt{1-\lambda^2(\nu_x^2+\nu_y^2)}} \times e^{j2\pi(\nu_x x + \nu_y y)} d\nu_x d\nu_y$$



$x$ 方向と $y$ 方向に空間周波数 $\nu_x$ と $\nu_y$ をもつ多数の平面波の重ね合わせ

$$\nu_x = (\lambda / \cos \theta_x)^{-1} \quad \nu_y = (\lambda / \cos \theta_y)^{-1}$$

空間周波数 $\nu_x$ と $\nu_y$ をもつ平面波は $x$ 軸と $y$ 軸に対して $\theta_x$ と $\theta_y$ だけ傾いて進むので、 $G(\nu_x, \nu_y; 0)$ は**角スペクトル**と呼ばれる

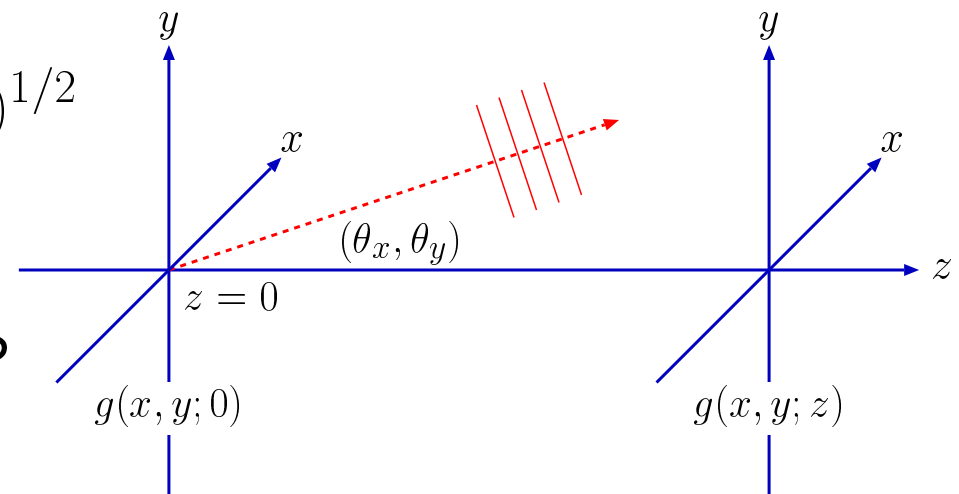
各平面波の位相は  $kz(1 - \cos^2 \theta_x - \cos^2 \theta_y)^{1/2}$

$\nu_x^2 + \nu_y^2 < 1/\lambda^2$  の場合

$e^{jkz\sqrt{1-\lambda^2(\nu_x^2+\nu_y^2)}}$  は複素数で、**進行波**となる

$\nu_x^2 + \nu_y^2 > 1/\lambda^2$  の場合

$e^{jkz\sqrt{1-\lambda^2(\nu_x^2+\nu_y^2)}}$  は実数で、**減衰波 = エバネッセント波**となる



# スカラー回折の制限

## スカラー回折の前提

$\nabla\varepsilon$  は無視できるほど小さい

物質構造に起因する回折を厳密に扱うことはできない

## スカラー近似の条件

物質構造の細かさが波長に比べて大きく厚さが薄い

物質構造が光の分布に直接的に反映されるとしてよい

物質の構造を波面  $g(x, y; 0)$ 、およびそのフーリエ変換  $G(\nu_x, \nu_y; 0)$  に置き換えることができる

→ 物質構造のフーリエ変換から回折波を直接的に知ることができる

$$g(x, y; z) = \iint_{-\infty}^{\infty} G(\nu_x, \nu_y; 0) e^{jkz\sqrt{1-\lambda^2(\nu_x^2+\nu_y^2)}} \\ \times e^{j2\pi(\nu_x x + \nu_y y)} d\nu_x d\nu_y$$

フレネル近似、フラウンホーファ近似の導出は資料参照

# ベクトル波としての扱い

## ベクトル回折の基本式

$$\nabla^2 \vec{E} + \nabla \left( \vec{E} \cdot \frac{\nabla \varepsilon}{\varepsilon} \right) + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon \vec{E} = 0 \quad \nabla^2 \vec{H} + \frac{\nabla \varepsilon}{\varepsilon} \times \nabla \times \vec{H} + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon \vec{H} = 0$$

$\nabla \varepsilon \neq 0$  であることから、電場と磁場の  $x, y, z$  成分を独立に扱うことができない  
→ ベクトル波として扱う必要がある

## TE (Transverse Electric) モード

入射角  $\theta$  によらず、電場は常に  $y$  成分のみをもつ

$$\vec{E} = (0, E_y(x, z), 0)$$

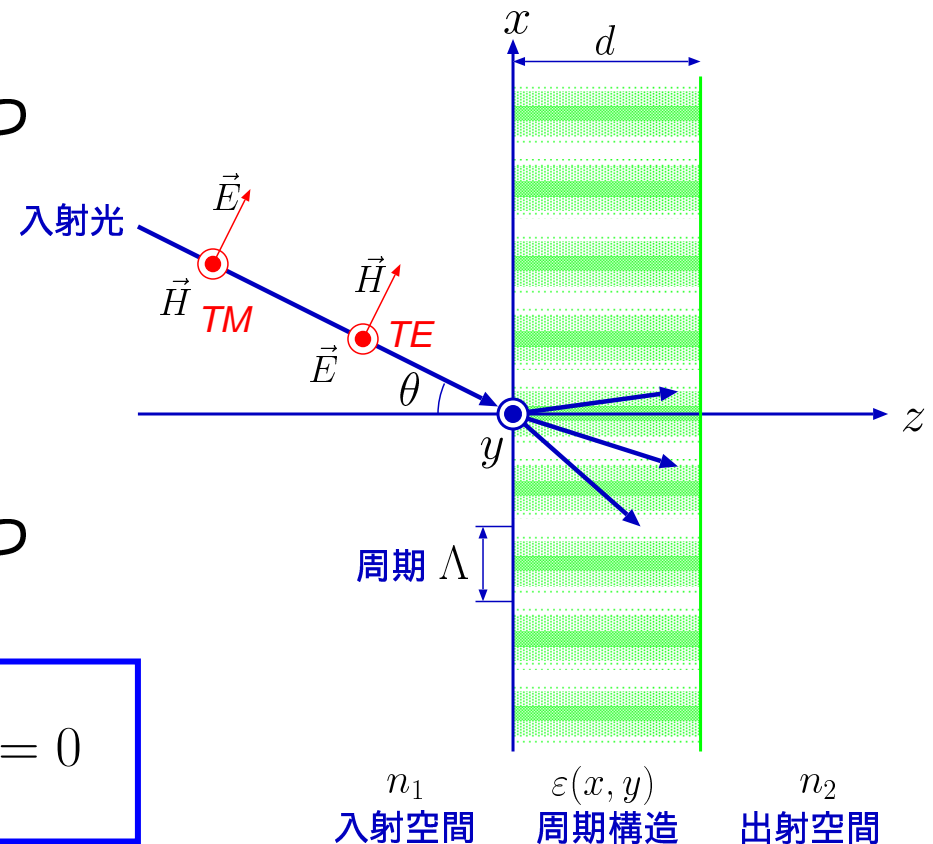
$$\nabla^2 E_y + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon(x, z) E_y = 0$$

## TM (Transverse Magnetic) モード

入射角  $\theta$  によらず、磁場は常に  $y$  成分のみをもつ

$$\vec{H} = (0, H_y(x, z), 0)$$

$$\nabla^2 H_y - \left( \frac{\nabla \varepsilon(x, z)}{\varepsilon(x, z)} \cdot \nabla \right) H_y + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \varepsilon(x, z) H_y = 0$$



TE, TM に分けて考えることで、方程式を簡単にできる

# フーリエ解析によるベクトル回折の解法

*Rigorous Coupled-Wave Analysis (RCWA)*にもとづく説明

TE(Transverse Electric)モード  $\nabla^2 E_y + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \varepsilon(x, z) E_y = 0$

周期的な物質構造をフーリエ級数で表す

$$\varepsilon(x) = \sum_h \varepsilon_h e^{j2\pi h x / \Lambda} \quad \Lambda: \text{周期}, \quad \varepsilon_h: \text{フーリエ係数}$$

電場も同様な周期性をもつ

$$E_y(x, z) = \sum_i S_i(z) e^{-j k_{x,i} x} \quad S_i: i\text{次の回折次数の振幅}$$

これらを代入する

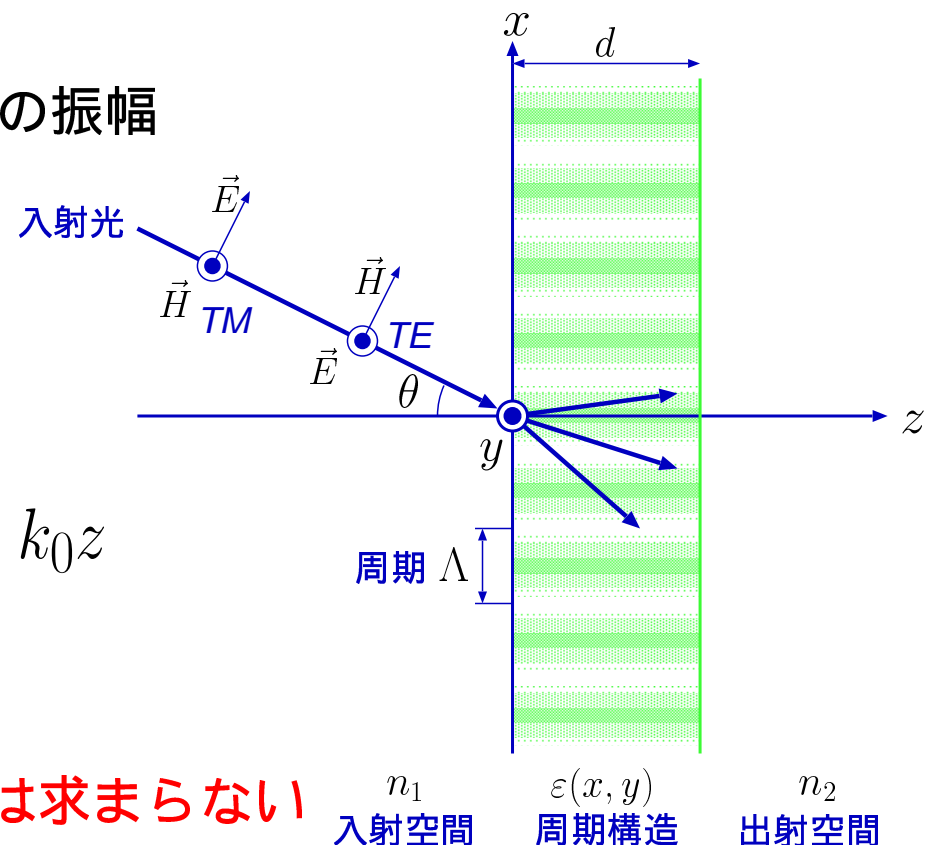
$$\frac{\partial^2 S_i(z')}{\partial z'^2} = \left(\frac{k_{x,i}}{k_0}\right)^2 S_i(z') - \sum_p \varepsilon_{i-p} S_p(z')$$

ただし、  $k_{x,i} = k_0(n_0 \sin \theta - i\lambda_0/\Lambda)$   $z' = k_0 z$

$\varepsilon_{i-p}$ があることから、連立微分方程式である

→ 回折次数の間のcouplingがある

フーリエ係数 $\varepsilon_i$ から、回折次数の振幅 $S_i$ がすぐには求まらない





# 固有値問題への置き換え

## 連立微分方程式の解法

$$\frac{\partial^2 S_i(z')}{\partial z'^2} = \left(\frac{k_{x,i}}{k_0}\right)^2 S_i(z') - \sum_p \varepsilon_{i-p} S_p(z')$$

行列で表す

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \vdots \\ S_i(z') \\ \vdots \end{bmatrix} \downarrow i \quad \mathbf{K}_x = \begin{matrix} & i \rightarrow \\ \cdots & & 0 \\ & k_{x,i}/k_0 & \\ 0 & & \cdots \end{matrix} \quad \mathbf{E} = \begin{matrix} & p \rightarrow \\ \cdots & & \\ & \varepsilon_{i-p} & \\ & & \cdots \end{matrix}$$

固有値方程式が得られる

$$\frac{\partial^2}{\partial z'^2} \mathbf{S} = (\mathbf{K}_x \mathbf{K}_x - \mathbf{E}) \mathbf{S}$$

固有方程式 (大学の線形代数)

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \alpha \mathbf{x}$$

$\mathbf{K}_x \mathbf{K}_x - \mathbf{E}$  の固有値を  $q_m$  で、固有ベクトル  $\mathbf{w}_m$  の要素を  $w_{i,m}$  で表す

$$S_i(z') = \sum_m w_{i,m} \left[ c_m^+ e^{-q_m z'} + c_m^- e^{q_m(z' - k_0 d)} \right]$$

$c_m^+$ ,  $c_m^-$  は、物質構造と空間との境界条件で決る

# 数値計算ライブラリーの利用

## 固有値方程式

$$TM\text{モード} \quad \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \mathbf{S} = (\mathbf{K}_x \mathbf{K}_x - \mathbf{E}) \mathbf{S}$$

$$TE\text{モード} \quad \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \mathbf{U} = (\mathbf{E} \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{E}) \mathbf{U}$$

$$\text{ただし、} \quad H_y(x, z) = \sum_i U_i(z) e^{-jk_{x,i}x} \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \vdots \\ U_i(z) \\ \vdots \end{bmatrix} \downarrow i$$

固有値問題は理工学の各所で共通に現われる基本的な問題であるので、これを解くための数値計算ライブラリーが多数存在する。

LAPACK (CLAPACK): <http://www.netlib.org>, <http://www.phase.etl.go.jp/netlib>

*The Netlib repository contains freely available software, documents, and databases of interest to the numerical, scientific computing, and other communities. The repository is maintained by AT&T Bell Laboratories, the University of Tennessee and Oak Ridge National Laboratory, and by colleagues world-wide. The collection is replicated at several sites around the world, automatically synchronized, to provide reliable and network efficient service to the global community.*

# 物質構造の細かさに関する比較

矩形構造

$$n(x) = \begin{cases} n_1 & ((h - 1/4)\Lambda \leq x \leq (h + 1/4)\Lambda) \\ n_2 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

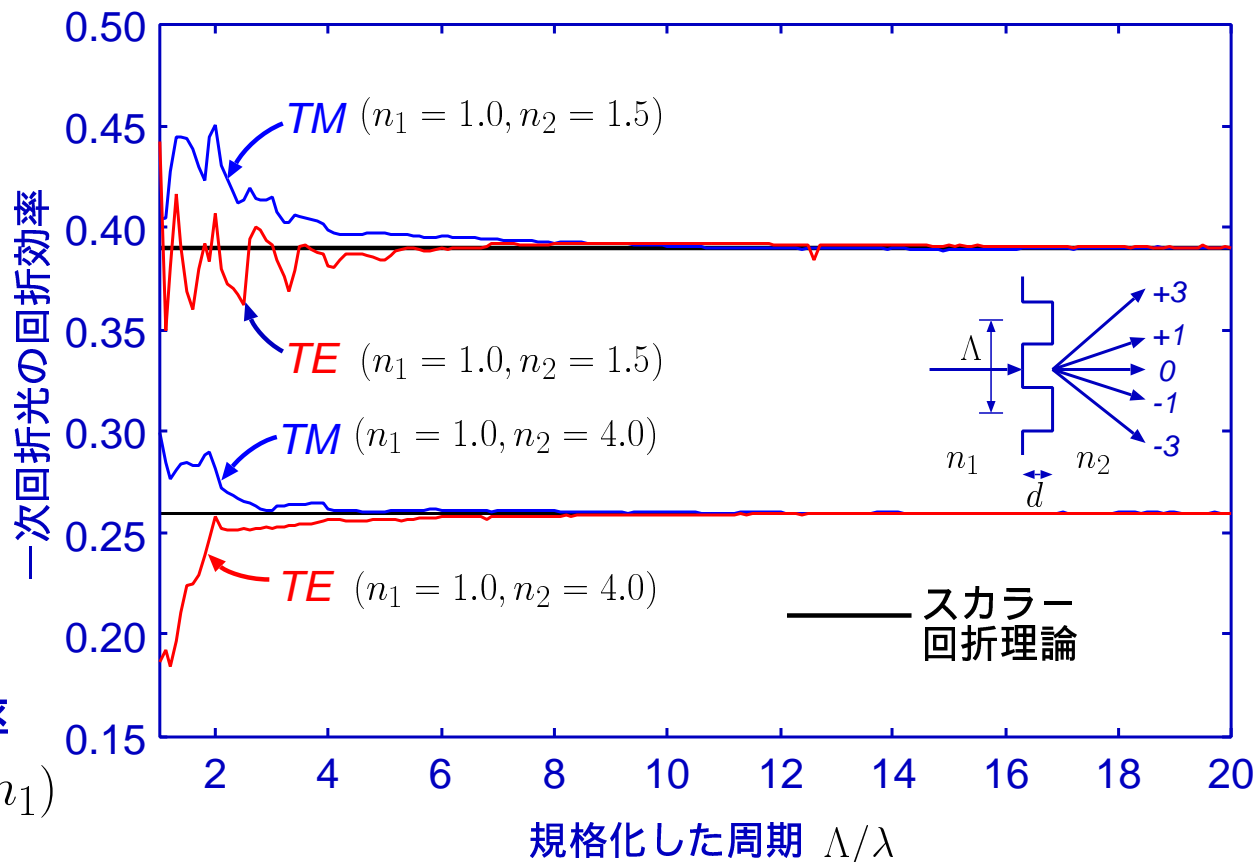
TMモード

$$\frac{\partial^2}{\partial z'^2} \mathbf{S} = (\mathbf{K}_x \mathbf{K}_x - \mathbf{E}) \mathbf{S}$$

TEモード

$$\frac{\partial^2}{\partial z'^2} \mathbf{U} = (\mathbf{E} \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{E}) \mathbf{U}$$

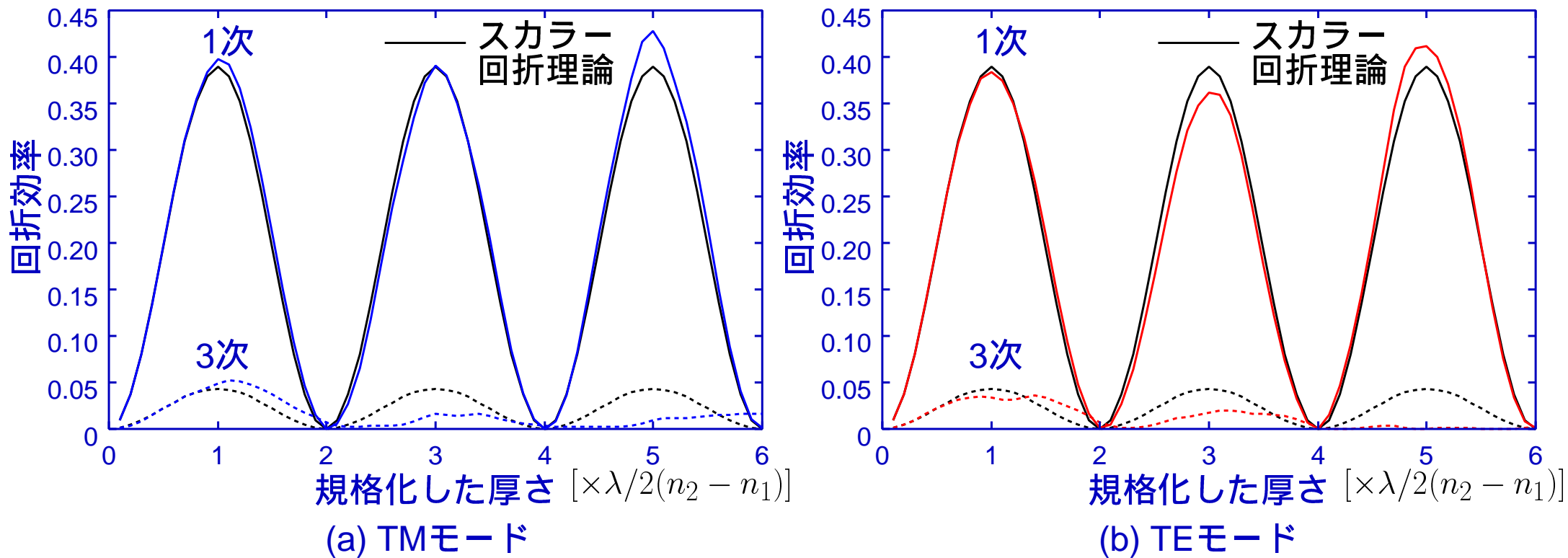
$$\mathbf{K}_x = \begin{matrix} & i \rightarrow \\ i \downarrow & \begin{bmatrix} \cdots & & 0 \\ & n_0 \sin \theta - i\lambda_0/\Lambda & \\ 0 & & \cdots \end{bmatrix} \end{matrix}$$



構造の周期と一次回折効率

$$\theta = 0^\circ, \lambda = 0.633 \mu\text{m}, d = \lambda/2(n_2 - n_1)$$

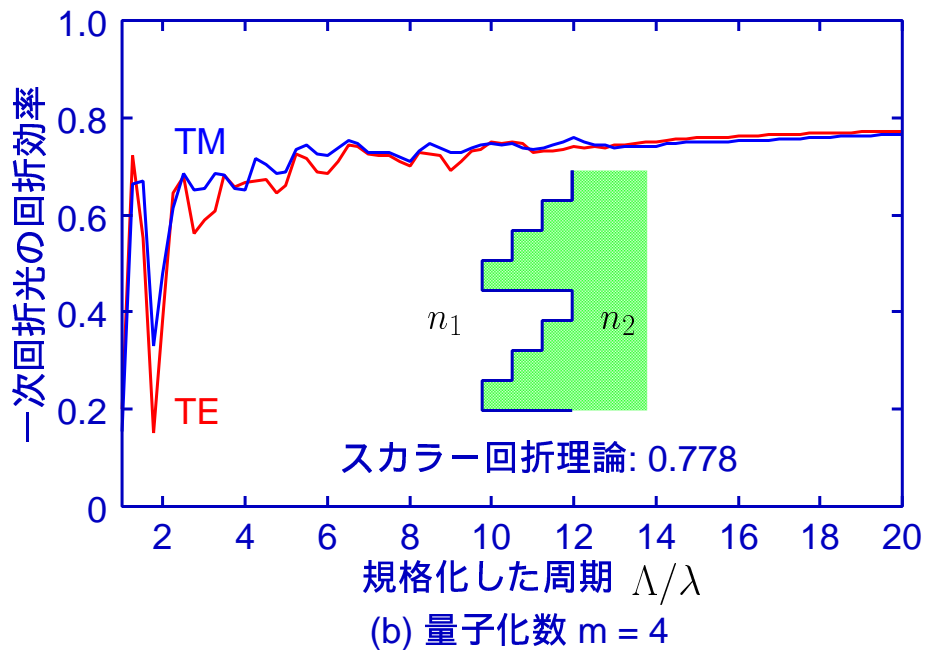
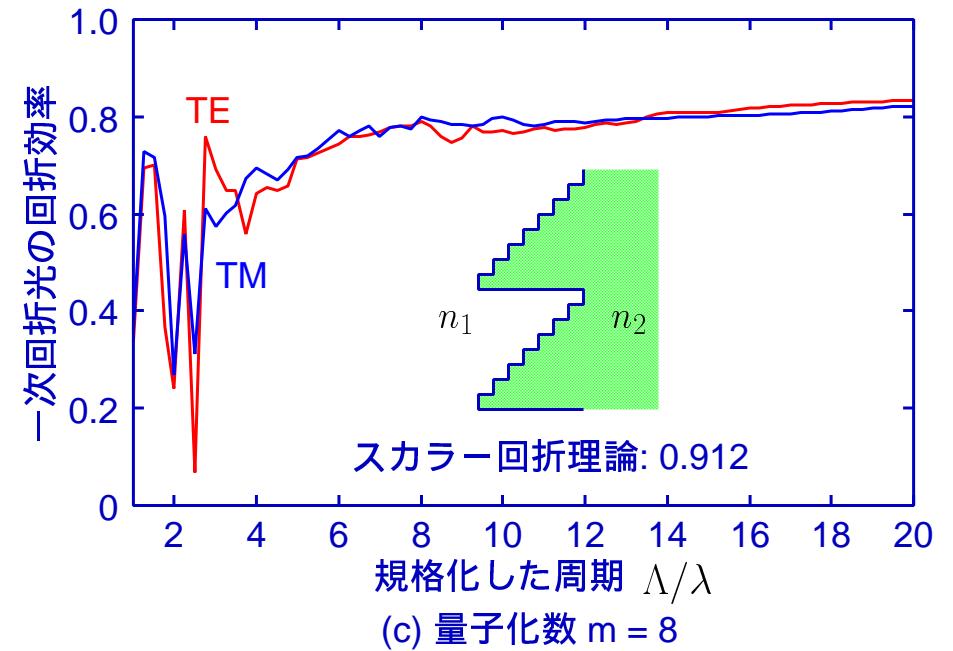
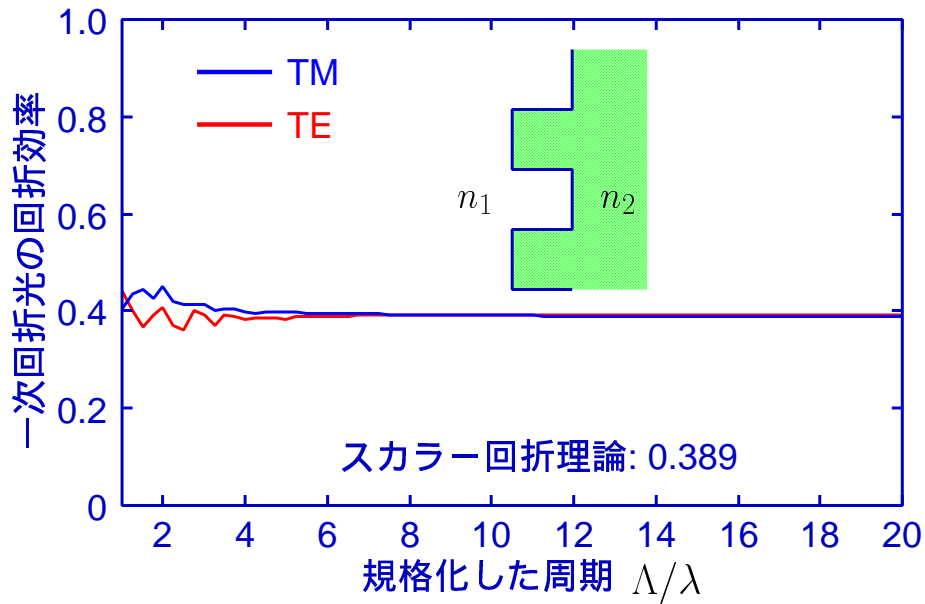
# 物質構造の厚さに関する比較



## 構造の厚さと回折特性

$$\theta = 0^\circ, \lambda = 0.633 \mu\text{m}, \Lambda = 5\lambda, n_1 = 1.0, n_2 = 1.5$$

# 量子化数に関する比較

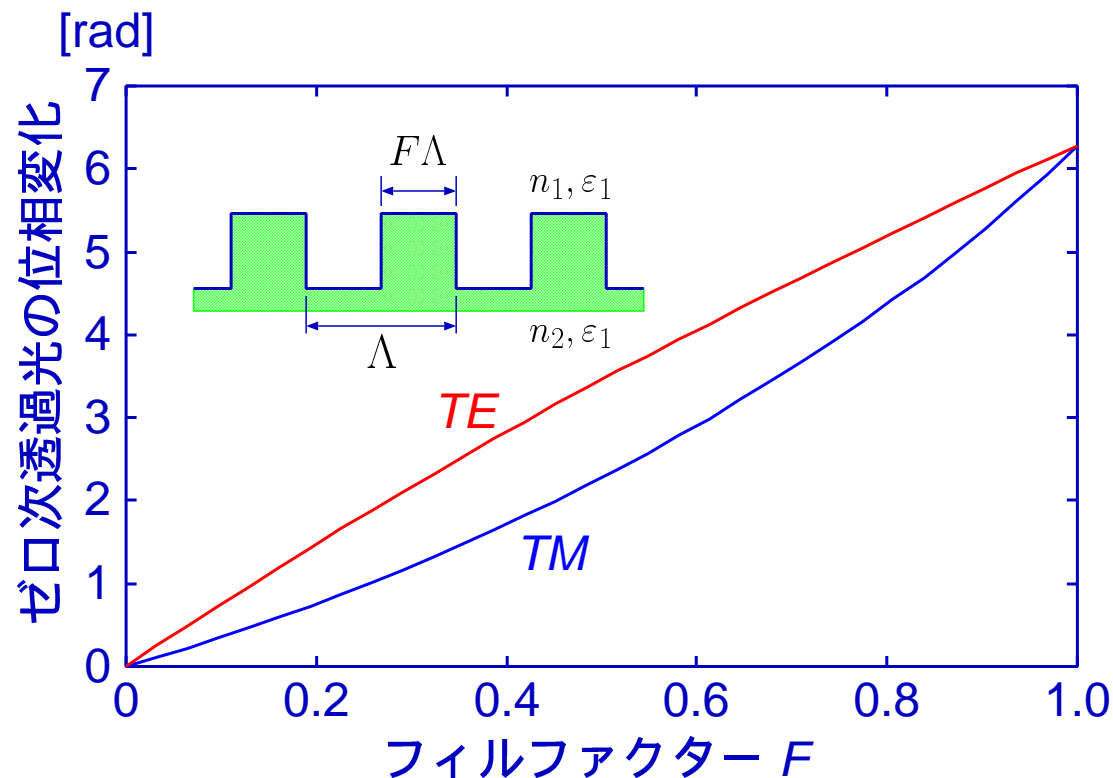


## 量子化数 $m$ に対する回折特性

$$\theta = 0^\circ, \lambda = 0.633 \mu\text{m}, n_1 = 1.0, n_2 = 1.5,$$

$$d = (m/(m + 1))\lambda/(n_2 - n_1)$$

# バイナリー格子による位相変調



有効屈折率

$$\epsilon_{TE} = F\epsilon_2 + (1 - F)\epsilon_1$$

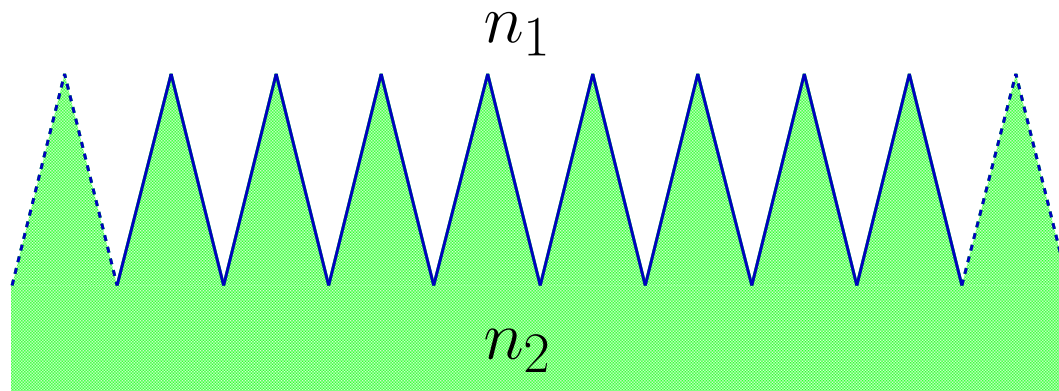
$$\epsilon_{TM} = \frac{\epsilon_1\epsilon_2}{F\epsilon_1 + (1 - F)\epsilon_2}$$

バイナリー格子による位相変調

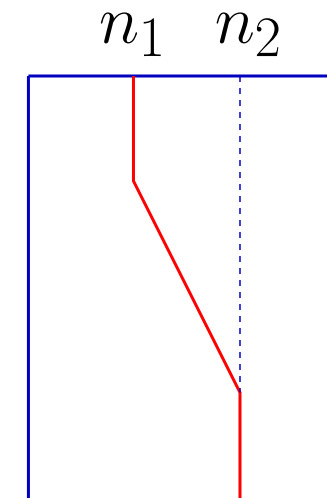
$$\theta = 0^\circ, \lambda = 0.633 \mu\text{m}, d = \lambda / (n_2 - n_1), \Lambda = 0.1\lambda$$

# 波長以下の周期構造による反射防止

三角波状の形状は、ふたつの物質の屈折率をなめらかに接続する効果をもつため、屈折率の不連続性がなくなり表面での反射を小さくできる

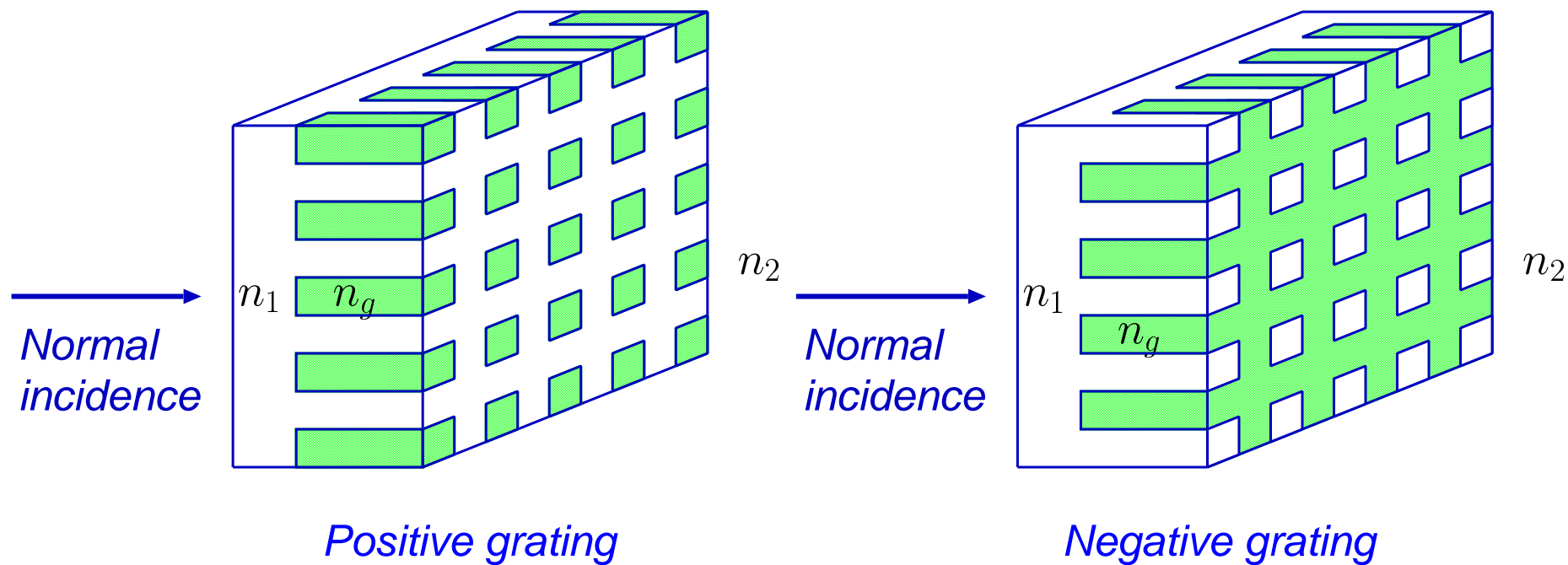


## 有効屈折率



# バイナリー格子による複素振幅変調

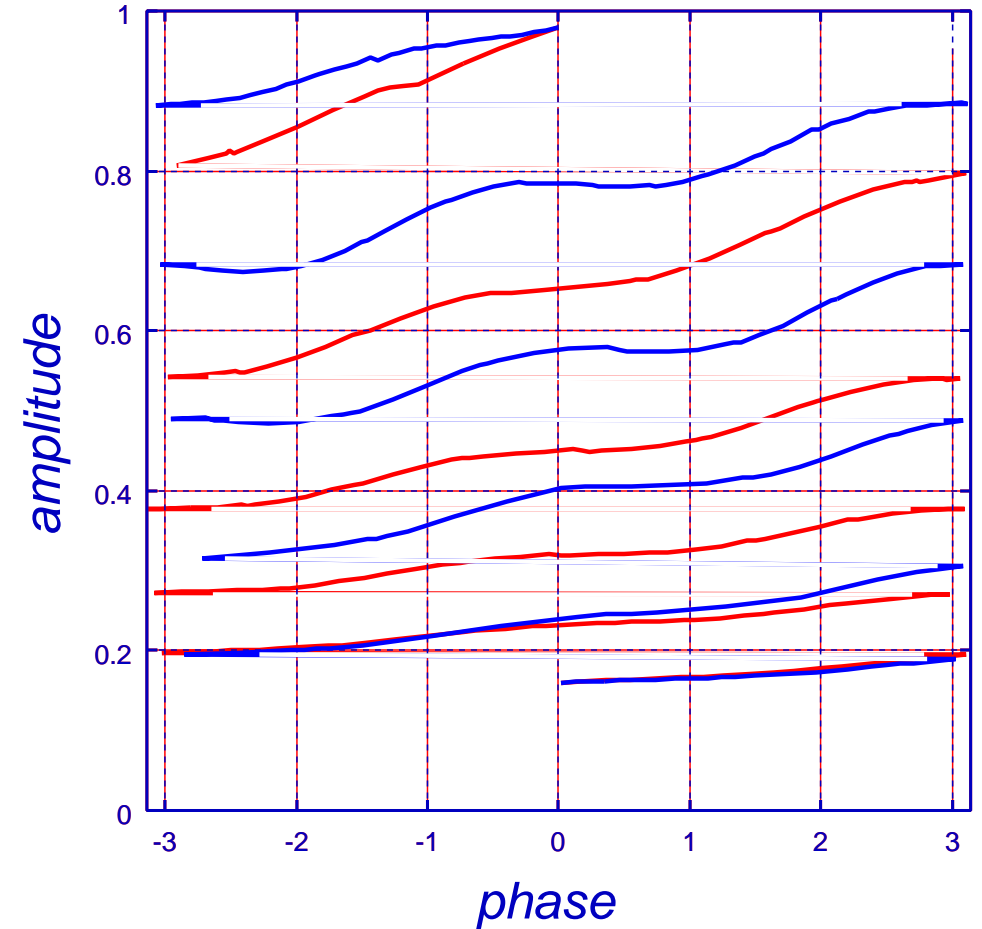
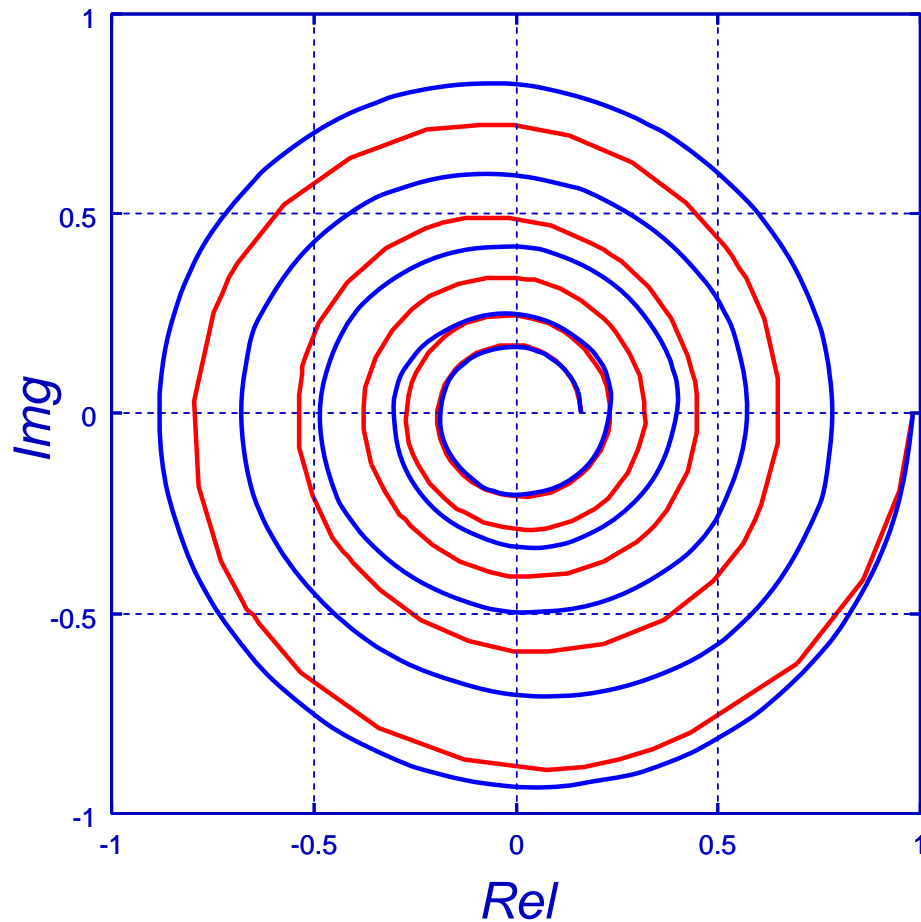
吸収のある材料を用いた光波の複素振幅変調



$$\begin{aligned}n_1 &= 1.5 \\n_g &= 4.0 - i 0.12 \quad (\text{Si}, \lambda = 0.6199 \mu\text{m}) \\n_2 &= 1.0 \\d &= 2 \lambda\end{aligned}$$



# バイナリー格子による複素振幅変調

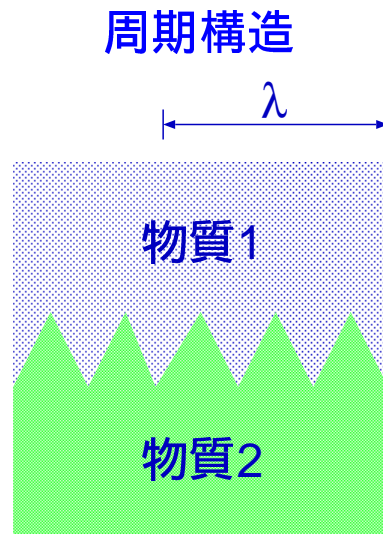


ピッチ  $p = 0.1 \lambda$   
fill factor = 0~1

— Positive grating  
— Negative grating

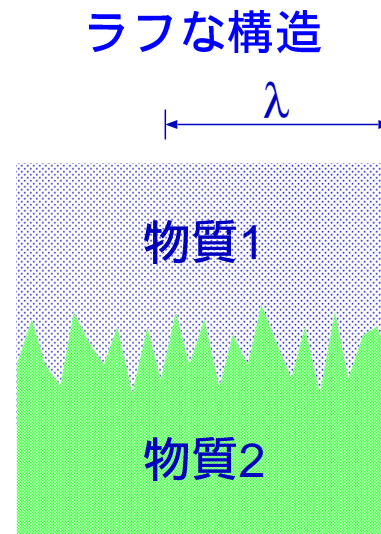
# 波長以下のラフな構造の利用

周期構造を用いずとも、空間周波数が波長以下であれば、同様な効果が得られる。



電子ビーム描画装置  
半導体露光装置

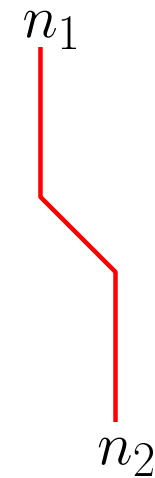
高価なプロセス  
大面積不可



化学プロセス  
プラズマエッチング

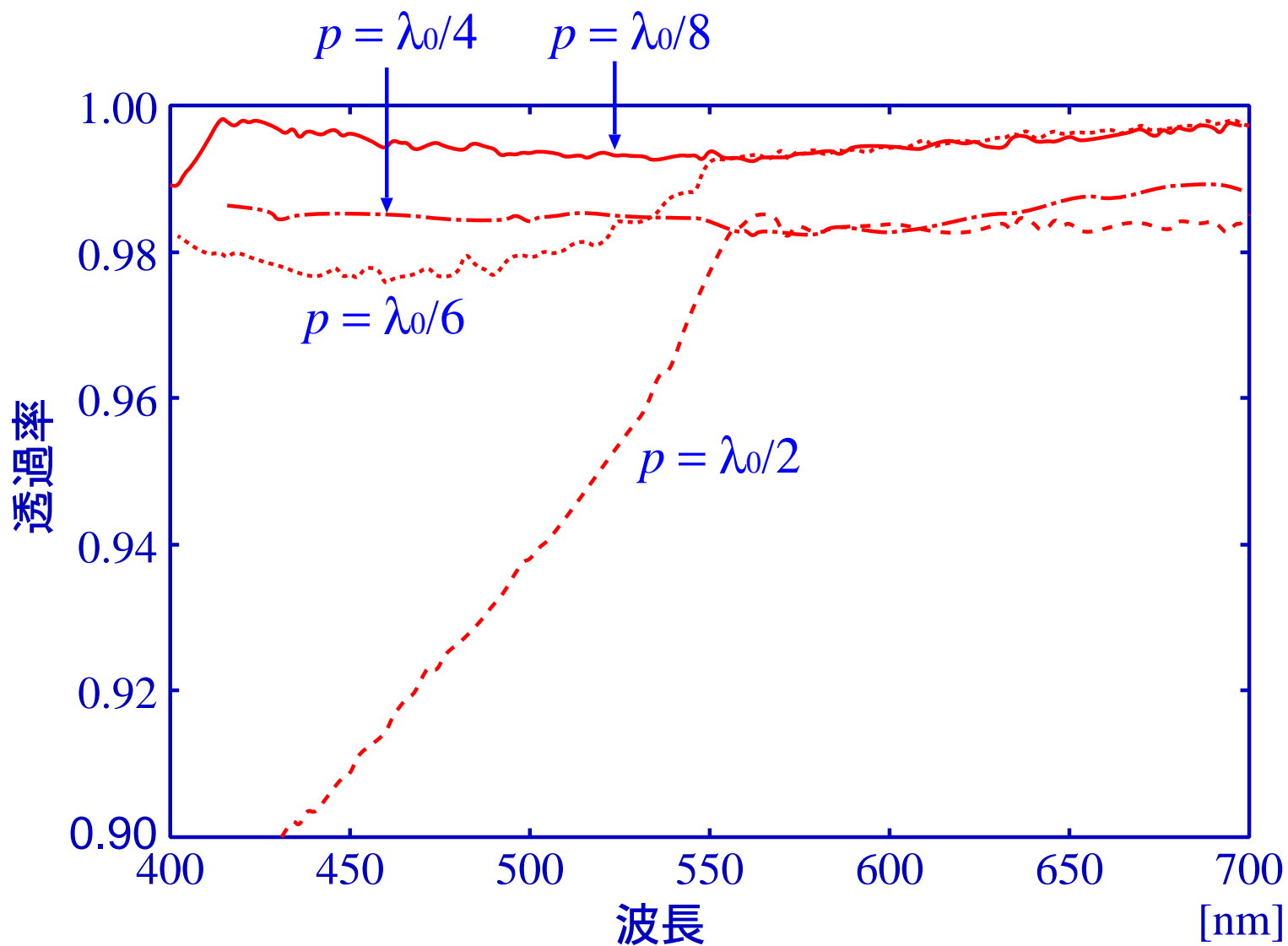
安価なプロセス  
大面積可

屈折率



反射防止機能

# 表面粗さと透過率



中心波長  $\lambda_0 = 550$  nm

膜厚  $d = 0.5 \lambda_0$

フーリエ解析に主眼をおいて、スカラー回折計算とベクトル回折計算の違いについて述べた。

スカラー回折とベクトル回折の違いを計算例を用いて示した。

今後、回折計算のベクトル的取り扱いの重要度が増すことが予想される。

白色光用ハイブリッドレンズの実用化

光ディスク用ピックアップレンズの形状の複雑化