

## 研究

## 損失を持つ金属格子による平面波回折問題の 数値解析アルゴリズム

松田 豊稔\*・奥野 洋一\*\*

\* 熊本電波工業高等専門学校 〒861-11 熊本県菊池郡西合志町須屋 2659-2

\*\* 熊本大学工学部電気情報工学科 〒860 熊本市黒髪 2-39-1

(1992年3月2日受付, 1992年5月25日受理)

### Numerical Algorithm for Analysis of Plane-Wave Diffraction from a Metallic Grating with Losses

Toyonori MATSUDA\* and Yoichi OKUNO\*\*

\* Kumamoto National College of Technology, 2659-2, Suya,  
Nishigoshi-cho, Kikuchi-gun, Kumamoto 861-11

\*\* Department of Electrical Engineering and Computer Science, Kumamoto University,  
2-39-1, Kurokami, Kumamoto 860

(Received March 2, 1992; Accepted May 25, 1992)

A computer-aided algorithm for numerical solution of plane-wave diffraction by a metallic grating with losses is presented. The algorithm, which is based on the Yasuura method, is applicable to problems of arbitrarily shaped metal gratings in the infrared or visible region. The algorithm is an usual least-squares method and is easy to implement on a small-sized computer such as a workstation. By using the present algorithm, diffraction efficiencies of Fourier gratings, whose profiles are represented by a superposition of sinusoidal waves, are calculated and the influence of the finite conductivity of metal on the efficiencies is investigated. As a result, the differences between the efficiencies of metallic gratings and those of perfectly conducting gratings are demonstrated numerically: reduction of efficiencies, shifting of the blaze wavelength and reduction of the blaze-width, and appearance of resonance anomalies in p-polarization.

#### 1. ま え が き

金属からなる反射型平面格子 (以下, 金属格子と呼ぶ)<sup>1,2)</sup> は, 古くから分光器に用いられてきたが, 最近では, レーザ-共振器や光分 (合) 波器など光通信用デバイスの分散素子としてもその応用が注目されている<sup>3)</sup>.

このようなことから, 金属格子の回折特性を精密に解析するための数値解法の開発が, 重要な課題となっている。

金属格子の回折特性の解析はこれまで数多く行われているが<sup>4-14)</sup>,\*1, その多くは金属格子を理想的な完全導体格子として取り扱ったものである。ところが, 入射波の波長が赤外から可視領域近くになると金属の損失が無視

できなくなり, この損失が回折特性に大きく影響することが知られている<sup>4)</sup>。このため, 赤外より短波長の領域で金属格子の回折特性を精密に求めるには, 金属格子による回折問題を2媒質境界値問題<sup>6,7)</sup>として厳密に定式化し, 解析する必要がある<sup>4-7,10-14)</sup>,\*2。

この2媒質境界問題を解析するための数値解法の一つに, 安浦の方法 (モード整合法)<sup>10,15,16)</sup>がある。安浦の

\*1 回折格子の特性解析に関する詳細な文献表については, 文献 4), 5) を参照されたい。ここでは, 損失を考慮した金属格子の解析法に関する文献の引用に留めた。

\*2 表面インピーダンス近似による解析法<sup>8,9,13)</sup>も提案されているが, この近似は比較的溝が浅い金属格子に対して有効であり, 溝が深い格子や格子断面に端点がある場合には回折特性を精度良く求めることが難しくなる<sup>9)</sup>。

方法は、もともと完全導体格子による平面波回折問題の数値解法として提案されたものであるが<sup>17-19)</sup>、その後2媒質境界値問題が解析できるように解法理論が拡張されている<sup>10,15,16)</sup>。安浦の方法は、次に示すような特長を有しており、金属格子の回折特性を算出するための標準的な数値解法として利用することができる<sup>10,15,16)</sup>。

(1) 厳密性(近似解の真の解への収束が保証されていること)と汎用性(任意の溝形状を有する金属格子の問題に適用できること)が理論的に証明されている。

(2) 数値計算の方法が格子表面上の最小2乗法に帰着するため、計算機の利用に適している。

筆者らは、これまで安浦の方法を用いて完全導体格子による回折問題を解析してきた<sup>18-20)</sup>。特に、文献20)では安浦の方法における数値計算の実行方法(数値解析のためのアルゴリズム)を改良し、安浦の方法により解析できる回折問題の範囲(安浦の方法の適用範囲)を改良前の数値計算法に比べて大幅に拡張している。この結果、安浦の方法に基づく完全導体格子解析用の汎用プログラムの作成が容易となり、安浦の方法の特長である汎用性や簡便性が数値計算の段階で発揮されるようになった。

さて、損失を考慮した金属格子の安浦の方法による解析は、基本的には文献10), 16)の手法を用いて実行できる。ところが、これらの文献は、安浦の方法の理論的な側面を中心に記述されており、数値計算の実行方法についての詳細な検討が不足している。たとえば、文献10), 16)は、安浦の方法において最近行われている数値計算法の改良<sup>20)</sup>を含んでいないため、計算精度の劣化が問題になることがある。また、文献10), 16)の内容から金属格子解析用の汎用プログラムを書くことは非常に煩雑である。

そこで、本論文では、安浦の方法を金属格子による平面波回折問題に適用したときの数値解析のためのアルゴリズムを導くこととする。このアルゴリズムは、直ちにプログラミングできる形で記述されており、ワークステーションなどの小型計算機で簡単に実行できる。また、安浦の方法の適用範囲を明確にするために、本論文のアルゴリズムにより実際に解析できる回折問題の範囲を具体的に求めている。この結果、安浦の方法が、通常用いられている金属格子の、赤外から可視領域における回折特性解析に有効であることが示される。ここで、通常用いられている金属格子とは、金やアルミニウムなどの貴金属で作られた、溝がそれほど深くない(例えば、溝の深

さを  $H$ 、格子の周期を  $d$  としたとき  $H/d < 0.4$  を満たすような)反射型平面格子のことである。最後に、数値例として溝形状が正弦波の重ね合わせで表されるフーリエ格子<sup>1,2)</sup>の回折効率を求め、金属の損失が回折効率に及ぼす影響を、共鳴アノマリー(resonance anomaly)<sup>1,2,4)</sup>まで含めて調べている。

## 2. 問題の設定

ここでは、金属で作られた無限格子による平面波の回折問題を、2媒質境界値問題として定式化する。金属格子は、Fig. 1に示すように  $X$  方向に周期  $d$  をもち、 $Z$  方向には一様な形状であるとする。格子表面  $C$  上の点を  $s(x, y)$  で表し、格子の溝形状は滑らかな関数<sup>\*3</sup>

$$y = \eta(x) : \eta(x+d) = \eta(x) \quad (1)$$

で与えられるものとする。格子表面  $C$  の上方の半無限領域を  $S_1$ 、下方の金属で占められた領域を  $S_2$  とする。領域  $S_1$  は、損失のない誘電体で満たされているものとし、その屈折率を  $n_1$  とする。領域  $S_2$  は、損失をもつ金属から成るものとし、その複素屈折率を  $n_2$  とする。また、領域  $S_1$  および  $S_2$  内の点は、 $P(X, Y)$  で表す。

この格子に、領域  $S_1$  側から、 $s$  波(格子の溝方向に偏波した平面電磁波: E 波)あるいは  $p$  波(溝と垂直方向に偏波した平面電磁波: H 波)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}^i \\ \mathbf{H}^i \end{pmatrix} (P) = \mathbf{i}_z F(P), \quad \begin{matrix} (s \text{ 波}) \\ (p \text{ 波}) \end{matrix} \quad (2)$$

$$F(P) = \exp(i k_1 X \sin \theta - i k_1 Y \cos \theta) \exp(-i \omega t) \quad (3)$$

が入射した時の回折波を求める問題を考えよう。ここに、 $\theta$  は  $Y$  軸から反時計回りを正として計った入射角であり、 $k_1$  は領域  $S_1$  における波数である。領域  $S_q$  ( $q=1, 2$ ) における波数は、真空中の波数  $k (= 2\pi/\lambda)$  と屈折率  $n_q$  を用いて  $k_q = n_q k$  で与えられる。以後、時間因子

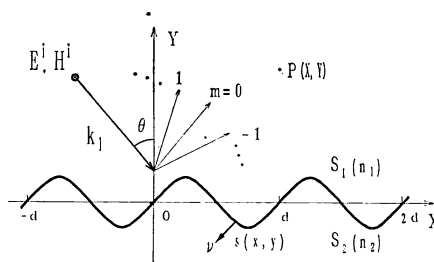


Fig. 1 The cross section of a metallic grating and coordinate system.

\*3  $\eta(x)$  が端点を有しこの仮定を満たさない場合は、第3章で用いている平滑化操作<sup>19,21)</sup>の代わりに特異平滑化操作<sup>19)</sup>を用いれば安浦の方法に基づく数値解析のためのアルゴリズムを導くことができる。

$\exp(-i\omega t)$  は記述から省略する。

この入射波により生じる回折波としては、領域  $S_1$  における反射波と領域  $S_2$  における透過波が存在する。s 波が入射したときの回折問題では、反射波と透過波の電界の  $Z$  成分を求めれば良く、これらを、それぞれ  $\Psi_1(P)$  と  $\Psi_2(P)$  で表す。また、p 波入射の場合は、 $\Psi_1(P)$  と  $\Psi_2(P)$  は、反射波と透過波の磁界の  $Z$  成分を表すものとし、以降では両偏波の回折問題を統一して取り扱う。

回折波  $\Psi_q(P)(q=1, 2)$  は、領域  $S_q(q=1, 2)$  における波動関数であり、次に示す各条件を満足している：

(i) Helmholtz 方程式

$$(\nabla^2 + k_q^2)\Psi_q(P) = 0 \quad (P \in S_q, \quad q=1, 2); \quad (4)$$

(ii) 周期条件

$$\Psi_q(X+d, Y) = \exp(i k_1 d \sin \theta) \Psi_q(X, Y); \quad (5)$$

(iii) 放射条件  $\Psi_1(P)$  [あるいは  $\Psi_2(P)$ ] は、 $Y$  の正 [あるいは負] の方向に伝搬または減衰する；

(iv) 境界条件 (格子表面  $C$  上での電磁界の連続条件)

$$\Psi_1(s) - \Psi_2(s) + F(s) = 0 \quad (6)$$

$$\partial \Psi_1(s) / \partial \nu - r \partial \Psi_2(s) / \partial \nu + \partial F(s) / \partial \nu = 0 \quad (7)$$

$$r = 1 \text{ (s 波)}; \quad (n_1/n_2)^2 \text{ (p 波)}. \quad (8)$$

ここで、 $\partial/\partial \nu$  は、点  $s$  における法線方向微分を表す：

$$\begin{aligned} \partial \Psi_1(s) / \partial \nu = & (ds/dx)^{-1} [-\eta'(x) \partial \Psi_1(x, y) / \partial x \\ & + \partial \Psi_1(x, y) / \partial y]_{y=\eta(x)} \end{aligned} \quad (9)$$

ただし、 $\eta'(x) = d\eta(x)/dx$ ,  $ds/dx = [1 + [\eta'(x)]^2]^{1/2}$ 。

したがって、金属格子による平面波回折問題は、周期条件(5)、放射条件および境界条件(6)、(7)の下に、Helmholtz 方程式(4)を解くことに帰着する。

### 3. 安浦の方法による解析

安浦の方法を用いて、前章で定式化した回折問題を解析する時の数値計算の方法について述べる。安浦の方法の解法理論については文献(15)を、またその格子回折問題への適用については文献(10)、(16)を参照されたい。

#### 3.1 モード関数と近似波動関数

各領域  $S_q(q=1, 2)$  における Helmholtz 方程式の変数分離解で周期条件および放射条件を満たす関数系は、

$$\phi_{1,m}(P) = \exp(i\alpha_m X + i\beta_{1,m} Y), \quad (P \in S_1) \quad (10)$$

$$\phi_{2,m}(P) = \exp(i\alpha_m X - i\beta_{2,m} Y), \quad (P \in S_2) \quad (11)$$

$$\alpha_m = k_1 \sin \theta - 2m\pi/d, \quad (12)$$

$$\beta_{q,m}^2 = k_q^2 - \alpha_m^2, \quad \text{Re}(\beta_{q,m}) \geq 0, \quad \text{Im}(\beta_{q,m}) \geq 0 \quad (13)$$

$$(m=0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (q=1, 2)$$

で与えられる<sup>10)</sup>。この関数をモード関数<sup>10),15),\*4</sup>と呼び、モード関数の有限項の一次結合で、回折波の近似波動関

数

$$\begin{aligned} \Psi_{q,N}(P) = & \sum_{m=-N}^N A_{q,m}(N) \phi_{q,m}(P) \\ (P \in S_q; \quad q=1, 2) \end{aligned} \quad (14)$$

を作る<sup>10)</sup>。

安浦の方法では、近似波動関数  $\Psi_{q,N}(P)$  が境界条件(6)、(7)を二乗平均の意味で近似的に満たすように展開係数  $\{A_{q,m}(N): m=0, \pm 1, \dots, \pm N\}$  ( $q=1, 2$ ) を決定する<sup>10),16)</sup>。このとき、波動関数はいずれも周期条件(5)を満たしていることから、解析の対象となる領域は格子表面上の1周期に帰着される<sup>10)</sup>。そこで、各波動関数から作られる格子表面上の周期関数を次のように定義しておく：

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_{q,m}(x) = & \exp(-i k_1 x \sin \theta) \phi_{q,m}[x, \eta(x)], \\ (q=1, 2) \end{aligned} \quad (15)$$

$$\tilde{e}(x) = -\exp(-i k_1 x \sin \theta) F[x, \eta(x)], \quad (16)$$

$$\tilde{\xi}_{1,m}(x) = \exp(-i k_1 x \sin \theta) \partial \phi_{1,m}[x, \eta(x)] / \partial \nu, \quad (17)$$

$$\tilde{\xi}_{2,m}(x) = r \exp(-i k_1 x \sin \theta) \partial \phi_{2,m}[x, \eta(x)] / \partial \nu, \quad (18)$$

$$\tilde{h}(x) = -\exp(-i k_1 x \sin \theta) \partial F[x, \eta(x)] / \partial \nu. \quad (19)$$

#### 3.2 数値解析のためのアルゴリズム

安浦の方法の数値計算法は、格子表面上で定義される連続関数に対する最小2乗法に帰着する<sup>10),16)</sup>。ところが、計算機を用いた数値計算では、連続関数を直接取り扱うことができないため、連続関数を離散化する必要がある。ここでは、まず連続関数を離散化する方法について述べ、次に安浦の方法の離散形を示す。

##### 3.2.1 離散化の方法

離散化する関数 [(15)~(19)] が連続で周期関数であることから、 $x$  の区間  $[0, d]$  を  $J$  等分

$$x_j = (j/J)d \quad (j=1, 2, \dots, J) \quad (20)$$

し、境界上の点  $s(x_j, \eta(x_j))$  を標本点とする\*5。なお、分割数  $J$  はこれまでの数値計算の結果から、各近似波動関数のモード数の倍

$$J = 2M \quad (M = 2N + 1) \quad (21)$$

\*4: 領域  $S_1$  におけるモード関数  $\phi_{1,m}(P)$  の  $Y$  方向の伝搬定数  $\beta_{1,m}$  は、 $m$  の値により  $\text{Re}(\beta_{1,m}) \geq 0$  か  $\text{Im}(\beta_{1,m}) \geq 0$  のいずれかを満たしている。  $\text{Re}(\beta_{1,m}) \geq 0$  が成立するとき、モード関数  $\phi_{1,m}(P)$  は  $\alpha_m = k_1 \sin \theta_{1,m}$  で定まる角度  $\theta_{1,m}$  の方向に伝搬する  $m$  次の回折波 (Fig. 1 参照) を表している。また、 $\text{Im}(\beta_{1,m}) \geq 0$  のとき、モード関数  $\phi_{1,m}(P)$  は  $X$  方向に進行し  $Y$  の正方向には指数関数的に減衰するエバネッセント波となる。

\*5: 溝形状  $y=\eta(x)$  が  $x$  に関する多価関数の場合は、格子表面上の1周期の弧長を等分割して標本点を定める<sup>19)</sup>。

程度で良いことが知られている<sup>17,20)</sup>.

実際の数値計算では、連続関数の代りに  $J$  個の標本点における関数値の集合を用いることになる。この集合を連続関数の離散形と呼び、 $J$  次元の複素縦ベクトルで表現する。例えば、連続関数  $\tilde{e}(x)$  の離散形  $\mathbf{e}$  は、 $\top$  を転置を表す記号として

$$\mathbf{e} = [\tilde{e}(x_1), \tilde{e}(x_2), \dots, \tilde{e}(x_j), \dots, \tilde{e}(x_J)]^\top \quad (22)$$

で与えられる。同様に、連続関数  $\tilde{h}(x)$  の離散形を  $\mathbf{h}$  で表す。次に、 $J$  次元の複素ベクトル空間を  $C^J$  とし、 $C^J$  における内積およびノルムを次のように定義する：

$$(\mathbf{e}, \mathbf{h})_J = \mathbf{e}^* \mathbf{h} \quad (\mathbf{e}, \mathbf{h} \in C^J) \quad (23)$$

$$\|\mathbf{e}\|_J^2 = (\mathbf{e}, \mathbf{e})_J \quad (24)$$

ただし、 $\mathbf{e}^*$  は  $\mathbf{e}$  の共役転置を表す。

### 3.2.2 平滑化操作を伴う安浦の方法

安浦の方法では、前章で定式化した2媒質境界値問題を解析する解法として、通常の安浦の方法と平滑化操作を伴う安浦の方法がある<sup>10,16)</sup>。通常の安浦の方法は、近似波動関数が境界条件を最小2乗的に満足するように展開係数を決定する算法である<sup>10,15,16)</sup>。ところが、この通常の安浦の方法により求められる近似解の系列は、格子の溝が深い場合や入射波の波長に比べて格子の周期が大きい場合に、真の解への収束が遅くなることがある<sup>10,16)</sup>。そこで、安浦の方法では、収束の速度を改善するために平滑化操作<sup>21)</sup>が導入されている。平滑化操作を伴う安浦の方法は、平滑化作用素と呼ばれる重みを付けて近似波動関数を境界条件に整合させるもので、その数値計算の方法は荷重付きの最小2乗法に帰着する<sup>21)</sup>。平滑化作用素は反復して作用させることも可能であり、原理的には、この高次の平滑化操作を伴う安浦の方法<sup>19)</sup>により、より速く収束する近似解の系列を得ることができる<sup>19)</sup>。

本論文では、高精度の近似解を算出できるように、高次の平滑化操作を伴う安浦の方法を適用するが、その数値計算法を示す前に、平滑化操作について述べておこう。 $p$  次の平滑化作用素の離散形は、 $J \times J$  の行列

$$\mathbf{K}^p = (1/J)[K^p_{ij}] \quad (i, j = 1, 2, \dots, J) \quad (25)$$

で与えられる。ここでは、実用されることが多い2次から4次までの  $\mathbf{K}^p$  の要素  $K^p_{ij}$  ( $p=2, 3, 4$ ) を示しておく：

$$K^2_{ij} = -[\chi_{ij}^2 - \chi_{ij} + 1/6]/2$$

$$K^3_{ij} = -\text{sign}(i-j)[\chi_{ij}^3 - (3/2)\chi_{ij}^2 + (1/2)\chi_{ij}]/6$$

$$K^4_{ij} = -[\chi_{ij}^4 - 2\chi_{ij}^3 + \chi_{ij}^2 - 1/30]/24 \quad (26)$$

$$\chi_{ij} = |i-j|/J \quad (27)$$

ただし、 $\text{sign}(i-j) = 1(i > j)$ ;  $0(i=j)$ ;  $-1(i < j)$ 。なお、これ以外の  $K^p_{ij}$  については文献 19) を参照されたい。

以上の準備を行えば、 $p$  次の平滑化操作を伴う安浦の

方法の離散形は、次のように記述することができる：

[ $p$  次の平滑化操作を伴う安浦の方法<sup>19,21)</sup>]

条件

$$\sum_{m=-N}^N A_{1,m}(N)(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}_{1,m})_J - \sum_{m=-N}^N A_{2,m}(N)(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}_{2,m})_J = (\mathbf{I}, \mathbf{e})_J \quad (28)$$

$$\sum_{m=-N}^N A_{1,m}(N)(\mathbf{I}, \boldsymbol{\xi}_{1,m})_J - \sum_{m=-N}^N A_{2,m}(N)(\mathbf{I}, \boldsymbol{\xi}_{2,m})_J = (\mathbf{I}, \mathbf{h})_J \quad (29)$$

の下に、次に示す重み付きの2次形式を最小とするように展開係数  $\{A_{q,m}(N)\}$  ( $q=1, 2$ )<sup>\*6</sup> を定めよ：

$$\begin{aligned} I_N &= \omega_1^2 \|\mathbf{K}^p \left[ \sum_{m=-N}^N A_{1,m}(N) \boldsymbol{\phi}_{1,m} - \sum_{m=-N}^N A_{2,m}(N) \boldsymbol{\phi}_{2,m} - \mathbf{e} \right]\|_J^2 \\ &+ \omega_2^2 \|\mathbf{K}^p \left[ \sum_{m=-N}^N A_{1,m}(N) \boldsymbol{\xi}_{1,m} - \sum_{m=-N}^N A_{2,m}(N) \boldsymbol{\xi}_{2,m} - \mathbf{h} \right]\|_J^2 \end{aligned} \quad (30)$$

ここに、 $\boldsymbol{\phi}_{q,m}$  と  $\boldsymbol{\xi}_{q,m}$  は関数  $\tilde{\phi}_{q,m}(x)$  と  $\tilde{\xi}_{q,m}(x)$  の離散形であり、 $\mathbf{I}$  はすべての成分が1である  $J$  次元のベクトル ( $\mathbf{I} = [1, 1, \dots, 1]^\top$ ) である。荷重  $\omega_1$  と  $\omega_2$  の具体的表現は、次に述べる数値計算の実行方法のところで与える。

### 3.2.3 数値計算の実行方法

$p$  次の平滑化操作を伴う安浦の方法の解法は、条件付きの最小2乗問題として定式化される。この条件付きの最小2乗問題は、ラグランジュの未定乗数法により解くことができる<sup>10,16)</sup>。ところが、この手法は、正規方程式を解くことに帰着するため数値計算上好ましくない<sup>22)</sup>。そこで、条件(28)および(29)を利用して展開係数  $A_{1,0}(N)$  および  $A_{2,0}(N)$  を消去する。この結果、陽な形の条件を含まない最小2乗問題が得られる。当然、この最小2乗問題は、条件(28)と(29)の下に式(30)を最小とする問題と同等である。以下、このことについて述べよう。

式(28)と(29)から、 $A_{1,0}(N)$  および  $A_{2,0}(N)$  は、

\*6 数値計算により求められる展開係数は分割数  $J$  にも依存するので  $A_{q,m}(N, J)$  と書くべきであるが、 $J$  を  $2M$  以上 ( $J \geq 2M$ ) に選んでおけば、 $A_{q,m}(N, J)$  は  $A_{q,m}(N)$  を十分良く近似している。したがって、本論文では、数値計算により求められる展開係数も  $A_{q,m}(N)$  と記すことにする。

$$A_{1,0}(N) = g_1 - \left[ \sum_{m=-N}^N b_{1,m} A_{1,m}(N) - \sum_{m=-N}^N b_{2,m} A_{2,m}(N) \right] \quad (31)$$

$$A_{2,0}(N) = g_2 - \left[ \sum_{m=-N}^N c_{1,m} A_{1,m}(N) - \sum_{m=-N}^N c_{2,m} A_{2,m}(N) \right] \quad (32)$$

と表される。ここで、 $\sum'$  は  $m=0$  を除く総和を表す記号であり、 $b_{q,m}$ ,  $c_{q,m}$ ,  $g_1$  および  $g_2$  は、それぞれ次のように定義されている：

$$b_{q,m} = \{(\mathbf{I}, \xi_{q,m})_J(\mathbf{I}, \phi_{2,0})_J - (\mathbf{I}, \phi_{q,m})_J(\mathbf{I}, \xi_{2,0})_J\} / \Delta, \quad (33)$$

$$c_{q,m} = \{(\mathbf{I}, \xi_{q,m})_J(\mathbf{I}, \phi_{1,0})_J - (\mathbf{I}, \phi_{q,m})_J(\mathbf{I}, \xi_{1,0})_J\} / \Delta, \quad (34)$$

$(m \neq 0, q=1, 2)$

$$g_1 = \{(\mathbf{I}, \mathbf{h})_J(\mathbf{I}, \phi_{2,0})_J - (\mathbf{I}, \mathbf{e})_J(\mathbf{I}, \xi_{2,0})_J\} / \Delta, \quad (35)$$

$$g_2 = \{(\mathbf{I}, \mathbf{h})_J(\mathbf{I}, \phi_{1,0})_J - (\mathbf{I}, \mathbf{e})_J(\mathbf{I}, \xi_{1,0})_J\} / \Delta \quad (36)$$

$$\Delta = (\mathbf{I}, \xi_{1,0})_J(\mathbf{I}, \phi_{2,0})_J - (\mathbf{I}, \phi_{1,0})_J(\mathbf{I}, \xi_{2,0})_J \quad (37)$$

式(31)および(32)を式(30)の2次形式  $I_N$  に代入して、これをベクトル・行列表現すると最終的に  $I_N$  は  $2J$  次元の複素ベクトルのノルムの2乗

$$I_N = \|\Phi \mathbf{A} - \mathbf{f}\|_{2J}^2 \quad (38)$$

として表される。ここに、 $\mathbf{A}$  は展開係数を成分とする  $2(M-1)$  次元の解ベクトル

$$\mathbf{A} = [A_{1,-N}(N), \dots, A_{1,-1}(N), A_{1,1}(N), \dots, A_{1,N}(N), A_{2,-N}(N), \dots, A_{2,-1}(N), A_{2,1}(N), \dots, A_{2,N}(N)]^T \quad (39)$$

である。なお、ベクトル  $\mathbf{A}$  が、 $A_{1,0}(N)$  と  $A_{2,0}(N)$  をその要素に含まないことに注意されたい。また、 $\Phi$  は、 $2J \times 2(M-1)$  の行列

$$\Phi = \begin{bmatrix} \overbrace{\Phi_{11} \dots \Phi_{12}}^{M-1} \\ \dots \\ \Phi_{21} \dots \Phi_{22} \end{bmatrix} \Bigg\} J \quad (40)$$

であり、その部分行列は次式で与えられる：

$$\Phi_{1q} = w_1 \mathbf{K}^p [\phi_{q,-N}, \dots, \phi_{q,-1}, \phi_{q,1}, \dots, \phi_{q,N}] \quad (41)$$

$$\phi_{q,m} = \phi_{q,m} - b_{q,m} \phi_{1,0} + c_{q,m} \phi_{2,0} \quad (42)$$

$(m \neq 0, q=1, 2)$

$$\Phi_{2q} = w_2 \mathbf{K}^p [\zeta_{q,-N}, \dots, \zeta_{q,-1}, \zeta_{q,1}, \dots, \zeta_{q,N}] \quad (43)$$

$$\zeta_{q,m} = \xi_{q,m} - b_{q,m} \xi_{1,0} + c_{q,m} \xi_{2,0} \quad (44)$$

$(m \neq 0, q=1, 2)$

なお、 $\mathbf{f}$  は、 $2J$  次元の複素ベクトル

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} w_1 \mathbf{K}^p \mathbf{u} \\ \dots \\ w_2 \mathbf{K}^p \mathbf{v} \end{bmatrix} \Bigg\} J \quad (45)$$

であり、 $\mathbf{u}$  と  $\mathbf{v}$  は、

$$\mathbf{u} = \mathbf{e} - g_1 \phi_{1,0} + g_2 \phi_{2,0} \quad (46)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{h} - g_1 \xi_{1,0} + g_2 \xi_{2,0} \quad (47)$$

で与えられる。なお、荷重  $w_1$  と  $w_2$  は、 $\mathbf{f}$  のノルムが1となるように ( $\|\mathbf{f}\|_{2J}=1$ ) 選ばれる：

$$w_1 = 1/\|\mathbf{K}^p \mathbf{u}\|_J, w_2 = 1/\|\mathbf{K}^p \mathbf{v}\|_J. \quad (48)$$

この結果、先に述べた  $p$  次の平滑化操作を伴う安浦の方法の数値解法は、次に示すアルゴリズムに帰着する：

[アルゴリズム]

$I_N = \|\Phi \mathbf{A} - \mathbf{f}\|_{2J}$  を最小とするように  $\mathbf{A}$  を定め、式(31), (32)により  $A_{1,0}(N)$ ,  $A_{2,0}(N)$  を求めよ。

このアルゴリズムの最小2乗問題は、ヤコビアン行列が  $\Phi$  で、定数ベクトルが  $\mathbf{f}$  の標準的な最小2乗問題<sup>22)</sup> であり、ヤコビアン行列  $\Phi$  を直交分解する数値解法 (QR 分解法や特異値分解法)<sup>22)</sup> により解くことができる<sup>\*7</sup>。特異値分解法は、最小2乗問題の性質をある程度定量的に把握できるという利点があるが、数値処理量がQR分解法に比べて多い<sup>22)</sup>。このため、上記の最小2乗問題の数値解法としては、QR分解法を用いることとする。ただし、ヤコビアン行列  $\Phi$  の条件数<sup>22)</sup> を求め最小2乗問題の性質を定量的に調べるときは、特異値分解法を用いる必要がある<sup>20)</sup>。

#### 4. 金属フーリエ格子の回折特性解析

真空中 ( $n_1=1$ ) から、溝形状が正弦波の重ね合わせで表される金属フーリエ格子<sup>25)</sup> に平面波が入射したときの反射波の回折効率を、前章で述べた数値解析アルゴリズムを用いて求めてみる。

##### 4.1 準備

ここでは、基本波と第2調波からなるフーリエ格子

$$y = \eta(x) = h \{ \sin 2\pi x/d + \gamma \sin(4\pi x/d + \delta) \} \quad (49)$$

を考える。格子の材質は金またはアルミニウムとし、この金属の複素屈折率  $n_2$  として文献 23) の測定値を用いる。なお、回折効率の波長特性を計算する場合は、文献 23) の複素屈折率の値を波長  $\lambda$  の関数としてスプライン補間した値を用いる。

展開係数が求められると、反射波  $\Psi_{1,N}(P)$  の伝搬モード ( $\beta_{1,m} > 0$ ) の回折効率は次式で計算できる<sup>24)</sup>：

$$\rho_m = |A_{1,m}(N)|^2 \beta_{1,m} / \beta_{1,0} \quad (50)$$

\*7 最小2乗問題の数値解法としては、正規方程式  $[\Phi^* \Phi \mathbf{A} = \Phi^* \mathbf{f}]$  を解く方法が良く知られているが、正規方程式を解くことは数値的に不安定であり、最小2乗問題の数値解法としては好ましくない<sup>22)</sup>。

#### 4.2 近似解の収束状況と適用範囲

前章で述べたアルゴリズムにより求められる近似解の収束状況および精度について考察する。一般に、 $p$ 波入射の問題が  $s$  波入射の場合よりも数値解析することが難しいので、ここでは  $p$  波入射について検討する。

同一格子による回折問題を平滑化の次数が異なる手法 ( $p=1, 2, \dots, 5$ ) により解析し、近似波動関数の断り切り項数  $N$  (全モード数  $4N+2$ ) を増した時のノルム  $I_N$  が減少する様子および展開係数  $A_{1,0}(N)$  の絶対値が収束する状況を Fig. 2 に示す。この数値例では、格子の溝形状は正弦波で、格子の材質は金としている。Fig. 2 において、項数  $N$  の増加とともにノルム  $I_N$  の値が一樣に減少しているところでは、最小 2 乗問題が正確に解けており展開係数が一定の値に収束している。ところが、項数  $N$  がある程度以上大きくなると (例えば、 $p=1$  では  $N>34$ )、ノルムが一樣に減少しなくなる。これは、 $N$  の増加とともに最小 2 乗問題が悪条件<sup>22)</sup> となり最小 2 乗解が正確に求まっていないことが原因である。平滑化の次数を増すと近似解の収束する速度は速くなるが、4 次以上では改善の効果がそれほど見られず、逆に早く (つまり項数  $N$  が小さいところで) 最小 2 乗問題

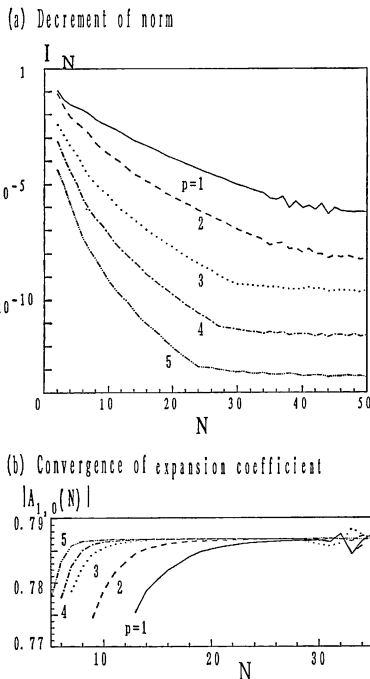


Fig. 2 Convergence of approximate solutions obtained by the present algorithms with  $p=1, 2, \dots, 5$  ( $d=0.556 \mu\text{m}$ ,  $h/d=0.2$ ,  $\gamma=0$ ,  $\lambda=0.650 \mu\text{m}$ ,  $n_1=1$ ,  $n_2=0.142+i3.374$ ).

が悪条件となる。このようなことから、実際の数値計算では、平滑化の次数は 2 次から 4 次までのいずれかが妥当である。平滑化の次数が 4 次以下であると、断り切り項数  $N$  が 20 程度までは最小 2 乗問題の悪条件の問題はほとんど生じない。

Fig. 3 は、Fig. 2 の数値計算をワークステーション SUN 4/2 [28.5 MIPS] で行ったときの計算時間を示したものである。計算時間は項数  $N$  でほぼ決まり、他のパラメータ (例えば、平滑化の次数  $p$  など) にはほとんど依存しない。項数  $N$  が 20 のとき計算時間は約 13 秒であり、実用的な観点からも項数  $N$  は 20 程度が最大であると思われる。

以上の考察から、平滑化操作の次数は 3 次 ( $p=3$ )、最大項数は  $20(N \leq 20)$  を一つの目安として数値計算を行うことにする。なお、高精度の近似解を算出するために、次数  $p$  を 4 以上にして項数  $N$  を大きく (例えば、 $N>25$ ) 選ぶことも可能ではあるが、この場合は最小 2 乗問題が精度良く解けているかどうか注意する必要がある。

次に、 $p=3$  で  $N=20$  のときの安浦の方法により解析できる回折問題の範囲を求めてみよう。金属格子の回折問題では損失を考慮しているために、エネルギー保存則に関する誤差<sup>24)</sup> を容易に計算できない。そこで、本論文では、近似解の精度を評価する量として反射波の 0 次の展開係数の項数  $N$  に関する収束状況から導かれる相対誤差

$$E_N = |A_{1,0}(N) - A_{1,0}(N-1)| / |A_{1,0}(N)| \quad (51)$$

を用いる。Fig. 4 は、 $p=3$  で  $N=20$  のときに  $E_N < 0.1\%$  を満足する正弦波状格子の最大振幅  $h/d$  を波長の関数として表したものである。Fig. 4 は、安浦の方法 ( $p=3$  および  $N=20$ ) により正弦波状格子の回折問題を解析するときの一つの適用範囲と考えてよい。なお、材質の違いにより適用範囲が異なるのは、以下の理由による。金属の消衰係数<sup>23)</sup> (複素屈折率の虚数部) が大き

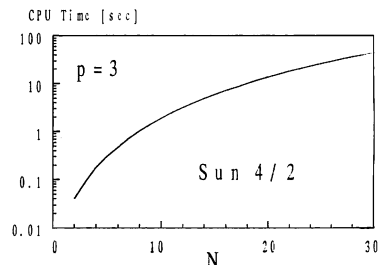
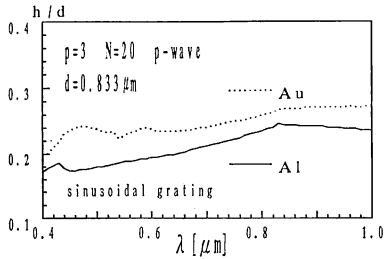


Fig. 3 CPU time as functions of  $N$ . The parameters are the same as in Fig. 2.

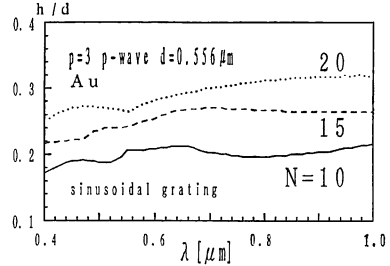
いと伝搬定数  $\beta_{2,m}$  の虚数部が大きくなり、モード関数の境界値  $\phi_{2,m}(x)$  の振幅がモード番号の絶対値  $|m|$  の増加とともに急速に増大するようになる。このため、消衰係数が大きい金属では、境界条件を整合することが難

しくなり、適用範囲は限定される。可視領域ではアルミニウムの消衰係数は金に比べて大きく<sup>23)</sup>、適用範囲に差が生じている。

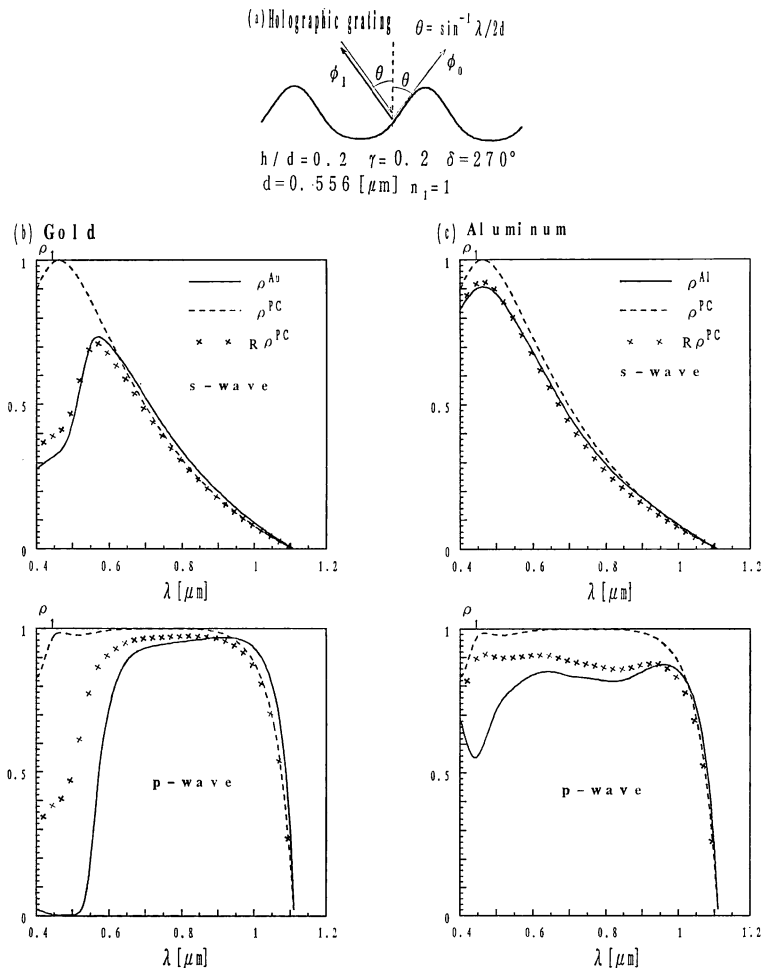
Fig. 4 は、 $N=20$  として適用範囲を求めたものであ



**Fig. 4** The range of application of the present algorithm ( $p=3$ ,  $N=20$ ,  $d=0.833 \mu\text{m}$ ,  $\gamma=0$ ,  $n_1=1$ ).



**Fig. 5** The range of application of the present algorithm for several  $N$ 's. The parameters are the same as in Fig. 4 except for  $d=0.556 \mu\text{m}$ .



**Fig. 6** Efficiency curves in the 1st-order Littrow mounting for metallic gratings and perfectly conducting gratings ( $p=3$ ,  $N=20$ ).

るが、溝が浅い格子に対しては項数  $N$  を大きくする必要はない。Fig. 5 は、項数  $N$  の値が  $N=10, 15, 20$  のときに  $E_N < 0.1\%$  を満たす正弦波状格子の最大振幅  $h/d$  を求めたものであり、項数  $N$  を与えるときの一つの目安として利用できる。なお、Fig. 5 のパラメータの値は、格子の周期が  $d=0.556 \mu\text{m}$  で材質が金に限ることを除けば、Fig. 4 のそれと同じである。

### 4.3 金属フーリエ格子の回折効率

Fig. 6 は、1次のリトロ配置<sup>24)</sup> ( $\theta = \sin^{-1} \lambda/2\pi$ ) の下に波長  $\lambda$  を変化させた時の金属格子 [Fig. 6 (a) 参照] の1次の回折効率  $\rho_1$  を示したものである。実線は本論文のアルゴリズム ( $p=3$  および  $N=20$ ) により求めた金属格子の回折効率であり、破線は格子の材質を完全導体としたとき文献 20) のアルゴリズム (安浦の方法) から求めた回折効率である。また、×印は、完全導体格子の回折効率に金属の反射率<sup>23)</sup>  $R$  を掛けたものである。金属格子の回折効率の波長特性では、完全導体格子の特性に比べてブレイズ波長の移動やブレイズ幅の減少が観測され、可視領域においては、金属の損失が回折効率に大きく影響することが確かめられる。この影響は、入射波の偏波や溝の形状により異なるものである\*8。例えば、s波入射では金属格子の回折効率は、完全導体格子の効率に金属の反射率を掛けたものでよく近似できる<sup>4,5)</sup>。ところが、p波入射の場合は、金属格子の回折効率を完全導体格子の効率から推定することは難しく、金属の損失が回折効率に及ぼす影響を定量的に把握することはできない<sup>4,5)</sup>。

金属の損失が回折効率に及ぼす影響として、p波入射時の共鳴アノマリー<sup>1,2,4)</sup> が知られている。Fig. 7 および Fig. 8 は、本論文のアルゴリズムにより求めた正弦波状格子における共鳴アノマリーの計算例であり、縦軸は反射波の回折効率の総和  $\rho^{\text{Total}}$  を表している。Fig. 7 は、金でできた金属格子の  $\rho^{\text{Total}}$  と金の反射率  $R$  の波長特性を比較したものであり、波長が異なる2箇所 (Fig. 7 の矢印) で共鳴アノマリーが発生していることがわかる。 $\lambda=0.63 \mu\text{m}$  付近のアノマリーは1次の回折波が、 $\lambda=0.56 \mu\text{m}$  付近のアノマリーは-1次の回折波が表面プラズモン<sup>1,4)</sup> と共鳴して生じたものである。また、Fig. 8 は  $\rho^{\text{Total}}$  の入射角特性を正弦波状格子の振幅 ( $h/d$ ) を変化させて求めたものであり、共鳴アノマリーに基づく入射角の吸収 (異常共鳴吸収)<sup>1,4)</sup> の強度が溝の深さにより変化することが確かめられる。なお、こ

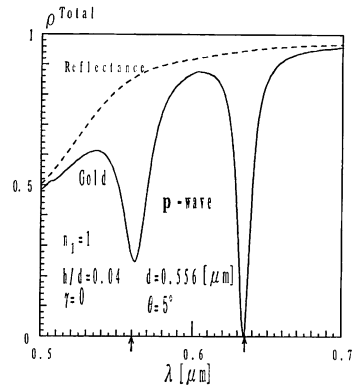


Fig. 7 Total efficiency  $\rho^{\text{Total}}$  as functions of the wavelength for a shallow gold grating ( $p=3, N=10$ ).

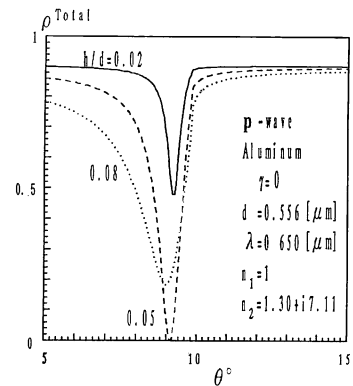


Fig. 8 Total efficiency  $\rho^{\text{Total}}$  as functions of the angle of incidence for shallow aluminum gratings ( $p=3, N=10$ ).

のときのアノマリーは、いずれも1次の回折波の共鳴によるものである。

## 5. む す び

滑らかな溝形状を有する金属格子の回折特性を算出するための、安浦の方法に基づく数値解析アルゴリズムを示し、このアルゴリズムが可視領域における反射型金属格子の特性解析に有効であることを実証した。数値例として、金属の損失が回折効率に及ぼす影響について調べたが、その結果はこれまで報告されている結論<sup>4,5)</sup>と一致している。

本論文で示したアルゴリズムは、金属格子の設計や性能評価を行うときに生じるより実用的な問題 (例えば、溝形状が関数ではなく離散点のデータとして与えられる場合、入射波を平面波ではなくビーム波とした場合など) にも適用することができる。また、このアルゴリズ

\*8 詳細については、文献 4) の 198~199 ページ、文献 5) の 1133 ページを参照されたい。



ムを利用して共鳴アノマリーに基づく現象である異常共鳴吸収<sup>1)</sup>が解析でき、入射光の完全吸収点の推定<sup>1)</sup>も可能である。このような本論文のアルゴリズムの応用については、別の機会に改めて報告する予定である。

本論文のアルゴリズムは、格子表面から離れた所での回折界を求めることに限れば、溝形状に端点を有する格子に対しても有効である。例えば、エシレット格子やラメラ格子の回折効率を求める場合、その溝形状をフーリエ級数展開しそのときの基本波と数項の高調波で作られるフーリエ格子を考え、このフーリエ格子の回折効率を本論文のアルゴリズムにより求める。このフーリエ格子の回折効率は、元の端点を持つ格子の回折効率とほとんど変わらない<sup>26,27)</sup>。なお、格子表面の近傍の電磁界を求めるときには端点の存在を考慮した安浦の方法が必要となるが、このときの数値解析のためのアルゴリズムは本論文のアルゴリズムから容易に導くことができる(脚注 \*3 参照)。

日頃ご指導いただき、熊本大学板倉徳也教授、生野浩正教授に深謝します。また、本研究の一部は文部省科学研究補助金(奨励研究 A 03750031)の援助のもとに行われたことを記し、謝意を表する。

## 文 献

- 1) M. C. Hutley: *Diffraction Gratings* (Academic Press, London, 1982) pp. 71-127, 176-213.
- 2) 永田 浩: “回折格子”, 光工学ハンドブック, 小瀬輝次, 齊藤弘義, 田中俊一, 辻内順平, 波岡 武編 (朝倉書店, 東京, 1986) pp. 527-544.
- 3) 小林巧郎: “光微小回路”, 光通信ハンドブック, 柳井久義編 (朝倉書店, 東京, 1982) pp. 314-334.
- 4) D. Maystre, M. Nevière and R. Petit: “Experimental verifications and applications of the theory,” *Electromagnetic Theory of Gratings*, ed. R. Petit (Springer-Verlag, Berlin, 1980) pp. 159-225.
- 5) S. L. Chuang and J. A. Kong: “Scattering of waves from periodic surfaces,” *Proc. IEEE*, **69** (1981) 1132-1144.
- 6) D. Maystre: “Integral methods,” *Electromagnetic Theory of Gratings*, ed. R. Petit (Springer-Verlag, Berlin, 1980) pp. 63-100.
- 7) P. Vincent: “Differential methods,” *Electromagnetic Theory of Gratings*, ed. R. Petit (Springer-Verlag, Berlin, 1980) pp. 101-121.
- 8) R. A. Depine: “Scattering of a wave at a periodic boundary: analytical expression for the surface impedance,” *J. Opt. Soc. Am. A*, **5** (1988) 507-510.
- 9) P. Peterson and A. Gavrielides: “Power losses in lamellar gratings subject to mixed boundary conditions,” *Appl. Opt.*, **23** (1984) 4045-4050.
- 10) 安浦亀之助, 村山正直: “損失を考慮に入れた正弦波状格子による回折問題の数値解析”, 電子通信学会論文誌 B, **J 69-B** (1986) 198-205.
- 11) D. Agassi and T. F. George: “Convergent scheme for light scattering from an arbitrary deep metallic grating,” *Phys. Rev. B*, **33** (1986) 2393-2400.
- 12) M. G. Moharam and T. K. Gaylord: “Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A*, **3** (1986) 1780-1787.
- 13) 中田康則, 小柴正則: “任意の複素誘電率を有する金属格子による平面波回折の有限要素法解析”, 電子情報通信学会論文誌 C, **J 70-C** (1987) 1513-1522; “任意の複素誘電率を有する金属格子による平面波回折の境界要素法解析”, *ibid.*, **J 71-C** (1988) 1412-1418.
- 14) R. Petit and M. Cadilhac: “Electromagnetic theory of gratings: some advances and some comments on the use of the operator formalism,” *J. Opt. Soc. Am. A*, **7** (1990) 1666-1674.
- 15) 富田正治, 安浦亀之助: “2媒質境界値問題における Rayleigh の展開定理”, 九大工学集報, **52** (1979) 149-156.
- 16) 安浦亀之助, 富田正治: “誘電体格子による平面波回折の数値解析”, 電子通信学会論文誌 B, **J 61-B** (1978) 662-669.
- 17) H. Ikuno and K. Yasuura: “Improved point-matching method with application to scattering from a periodic surface”, *IEEE Trans. Antennas Propag.*, **AP-21** (1973) 657-662.
- 18) 奥野洋一, 安浦亀之助: “端点を有する反射形格子の数値解法”, 電子通信学会論文誌 B, **J 61-B** (1978) 503-510.
- 19) Y. Okuno and T. Matsuda: “Mode-matching method with a higher-order smoothing procedure for the numerical solution of diffraction by a grating,” *J. Opt. Soc. Am.*, **73** (1983) 1305-1311.
- 20) T. Matsuda and Y. Okuno: “Computer-aided algorithm based on the Yasuura method for analysis of diffraction by a grating,” *J. Opt. Soc. Am. A*, **7** (1990) 1693-1700.
- 21) H. Ikuno and K. Yasuura: “Numerical calculation of the scattered field from a periodic deformed cylinder using the smoothing process on the mode-matching method,” *Radio Sci.*, **13** (1978) 937-946.
- 22) C. L. Lawson and R. J. Hanson: *Solving Least Squares Problems* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1974).
- 23) G. Hass and L. Hadley: “Optical properties of metals,” *American Institute of Physics Handbook*, 2nd ed., D. E. Gray (McGraw-Hill, New York, 1963) pp. 6-107.
- 24) R. Petit: “A tutorial introduction,” *Electromagnetic Theory of Gratings*, ed. R. Petit (Springer-Verlag, Berlin, 1980) pp. 1-52.
- 25) P. Bliiek, R. Deleuil, M. Bredine and D. Maystre: “Microwave verification of a numerical optimization of Fourier gratings,” *Appl. Phys.*, **24** (1981) 147-150.
- 26) M. Breiden and D. Maystre: “Equivalence of ruled, holographic, lamellar gratings in constant deviation mountings,” *Appl. Opt.*, **19** (1980) 1812-1821.
- 27) 松田豊稔, 奥野洋一: “完全導体フーリエ格子における回折効率の制御”, 光学, **19** (1990) 161-168.