

표면양각회절격자에 대한 엄밀한 3차원벡터 결합파해석의 고유값문제

조 두 진

아주대학교 자연과학대학 물리학과

(1994년 6월 30일 받음)

임의의 2차원 표면양각 유전회절격자에 의한 일반적인 회절현상을 엄밀한 3차원벡터 결합파해석으로 다루는데 있어서 핵심적인 역할을 하는 행렬의 고유값문제가 항상 $1/4$ 크기의 행렬에 대한 것으로 단순화되어, 컴퓨터의 계산시간과 기억용량의 요구를 현저히 줄일 수 있다는 것을 보였다. 한편 체적형 회절격자에 있어서는 이와 같이 단순화할 수 없음을 논의하였다.

I. 서 론

회절격자는 1785년에 D. Rittenhouse에 의해 처음 제작된 아래로 음향광학, 접적광학, 홀로그래피, 광정보처리, 광계산, 분광학 등을 포함하는 광범위한 분야에서 핵심적인 역할을 담당하고 있다.^[1,3] 따라서 수 많은 이론적 및 실험적 연구의 대상이 되어 왔으며, 최근에 각광받고 있는 2차광학소자(binary optics)를 포함하는 회절광학소자(diffractive optical elements)의 가장 단순한 형태로서 활발히 연구되고 있다. 특히 표면양각(surface-relief) 회절격자의 경우, 높은 회절효율과 최근의 반도체 VLSI기술, 레이저직접기록, 다이어몬드선반 등의 제작 기술의 발전으로 인하여 주목을 받고 있다.^[4,5]

회절격자의 중요한 특성, 즉 회절효율 등을 엄밀하게 계산하는 데에는 정확한 해가 존재하는 특수한 경우를 제외하고는 적분법, 미분법, 모우드법(modal method), 결합파법(coupled-wave method) 등을 기초로 한 수치적 방법들을 사용하는데,^[2,3] 결합파법이 비교적 단순한 수치적 방법을 사용하는 것, 그리고 결과가 직접 측정되는 회절차수(diffracted order)로 표현된다는 장점을 가지고 있다.^[3,6,7] 결합파법의 가장 일반화된 형태인 R3DVCWA (Rigorous three-dimensional vector coupled-wave analysis)^[8,9]는 임의의 표면양각 형태를 갖는 회절격자에 임의의 입사파가 입사했을 때의 회절효율을 엄밀하게 계

산할 수 있으므로, 널리 사용되어 왔으며 최근에는 상용 프로그램^[10]이 개발된 바 있다. 이 방법은 표면양각회절격자의 경우, 표면양각 부위를 여러 층으로 나누어 각 층 내부에서의 전자기장을 공간조화파(space harmonics)로 전개하고 맥스웰 방정식을 적용시킨 다음 상태변수법(state-variable method)를 사용하게 되는데, 이때 행렬의 고유값문제의 해결에 컴퓨터의 많은 기억용량과 계산시간을 요하게 된다. 그리고 각 층에 경계조건을 적용시키므로써 반사회절파와 투과회절파에 대한 회절효율을 얻게 된다. 한편, 체적형 회절격자의 경우에는 회절격자 내부에 층을 나누지 않고 위의 과정을 동일하게 적용시키게 된다.^[8] 사용된 공간조화파의 차수가 증가함에 따라 계산결과의 정밀도는 높아지지만 소요시간과 기억용량에 대한 요구가 급격하게 증가하는데, 표면양각회절격자의 경우에는 나누어진 층수가 더욱 큰 부담을 주게 된다. 일반적으로 결합파법은 여러가지 수치적방법을 사용할 수 있으나, 본 논문에서는 널리 쓰이는 상태변수법을 사용하는 경우에만 국한한다는 점을 부인한다.

본 논문에서는 R3DVCWA의 수치적 적용에 있어서 핵심적인 역할을 하는 위에서 언급한 행렬의 고유값문제가 표면양각회절격자의 경우에 항상 원래 행렬의 $1/4$ 크기인 행렬에 대한 것으로 매우 단순화될 수 있으나 체적형 회절격자의 경우에는 그렇지 않다는 것을 밝히고자 한다. 2절에서는 R3DVCWA에 대한 논의를 하고, 3절에서 고유값문제에 대해 논의한다.

*본 연구는 교육부 기초과학연구 활성화 연구비(BSRI 93-237) 지원에 의하여 수행되었음.

II. R3DVCWA 이론

표면양각회절격자에 대한 R3DVCWA는 몇몇의 비정규적인 논문^[9,11]에 발표되었고, 입사파가 임의의 편광상태를 가지는 경우에 대해서는 발표된 바가 없으므로 여기에 논의하고자 한다. 이는 체적형 회절격자에 관한 것과 많은 유사성을 가지므로 표기법에 관해서는 가능한 한 Moharam과 Gaylord^[8]를 따르도록 한다. 일반적인 2차원 회절격자에 의한 3차원 회절현상을 그림 1에 보였는데, 회절격자는 xy -평면에 있으며 그 회절격자 벡터는 $\mathbf{K} = (K_x, K_y)$ 이고 요철부분의 깊이(groove depth)는 z 축 방향으로 d 이다. 여기에서는 2차원 회절격자의 주기적인 배치가 직사각형인 경우를 고려하였는데,

$$K_x = \frac{2\pi}{\Lambda_x}$$

$$K_y = \frac{2\pi}{\Lambda_y}$$

로서 Λ_x 와 Λ_y 는 각각 x 방향과 y 방향의 주기를 나타낸다.

회절격자는 $z < 0$ (입사파영역, I), $0 \leq z \leq d$ (요철영역, II), $z > d$ (투과파영역, III)의 세 영역으로 나누어 지는데 I과 III영역의 복소유전상수를 ϵ_1 과 ϵ_3 이라 한다. 요철영역 (II)의 복소유전상수 ϵ_2 는 (x, y, z) 의 함수로서, 이 영역을 N 개의 층으로 분할하여 ϵ_2 가 층 내부에서 z 방향으로 변화하지 않는다고 가정하면 i 번째 층 ($z_i = id/N$, $i = 0, 1, \dots, (N-1)$)의 복소유전상수 $\epsilon_{2,i}(x, y) = \epsilon_2(x, y, z_i)$ 는 다음과 같은 푸리에급수로 나타낼 수 있다:

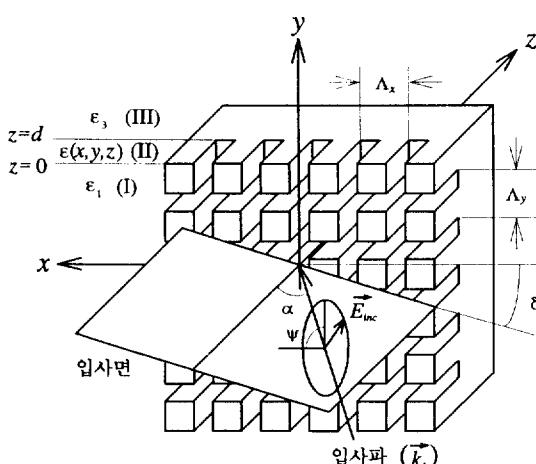


그림 1. 2차원 표면양각회절격자에 의한 3차원 회절.

$$\epsilon_{2,i}(x, y) = \sum_{p, q} \tilde{\epsilon}_{i, pq} e^{j(pK_x x + qK_y y)} \quad (1a)$$

그리고 그 역수는

$$\frac{1}{\epsilon_{2,i}(x, y)} = \sum_{p, q} \widetilde{\epsilon}_{i, pq} e^{-j(pK_x x + qK_y y)} \quad (1b)$$

로 나타낼 수 있다. 본 논문에서는 $j = \sqrt{-1}$ 으로 하고 전자기장의 시간적 변화는 $e^{j\omega t}$ 로 가정한다.

입사파는 그 전기장 벡터가

$$\mathbf{E}_{inc} = \hat{\mathbf{u}} e^{-jk_1 r} \quad (2)$$

로서 k_1 벡터는 그 크기가 $\frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\epsilon_1}$ (λ 는 진공중 파장)이

고 입사파의 진행방향 (α, δ)를 가지며, $\hat{\mathbf{u}}$ 는

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}} = [(\cos\gamma\cos\psi - j\sin\gamma\sin\psi)\cos\alpha\cos\delta - (\cos\gamma\sin\psi \\ + j\sin\gamma\cos\psi)\sin\delta]\hat{x} + [(\cos\gamma\cos\psi - j\sin\gamma\sin\psi) \\ \cos\alpha\sin\delta + (\cos\gamma\sin\psi + j\sin\gamma\cos\psi)\cos\delta]\hat{y} \\ - (\cos\gamma\cos\psi - j\sin\gamma\sin\psi)\sin\alpha\hat{z} \end{aligned} \quad (3)$$

로 주어지는 단위편광벡터이다. 여기에서 입사면은 x 축과 δ , 입사방향은 z 축과 α 의 각을 이루며, ψ 는 타원편광의 장축과 입사면 사이의 각을 나타내고 $\tan\gamma$ 는 장축에 대한 단축의 비를 나타내는데, $|\gamma| \leq 45^\circ$ 의 범위를 가지며 γ 가 양(+)일때 오른손편광을 나타낸다.

R3DVCWA에서는 앞에서 언급한 회절격자의 세 영역에서 각각 맥스웰 방정식의 해를 구하고 각 경계면 $z = z_i$ ($i = 0, 1, \dots, N$)에서 전기장과 자기장의 접선성분에 대한 경계조건을 적용시키게 된다. 영역 I과 영역 III에서는 전기장 벡터를 평면파의 합으로 나타낼 수 있는데

$$\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_{inc} + \sum_{m, n} \mathbf{R}_{mn} e^{-jk_{1, mn} \cdot r} \quad (4a)$$

$$\mathbf{E}_3 = \sum_{m, n} \mathbf{T}_{mn} e^{-jk_{3, mn} \cdot (r + \hat{d}z)} \quad (4b)$$

가 되며 여기서 \mathbf{R}_{mn} 은 m, n 차 반사회절파의 규격화된 전기장벡터, \mathbf{T}_{mn} 은 m, n 차 투과회절파의 규격화된 전기장벡터를 나타낸다. 그리고 위상정합과 Floquet조건에 의하여

$$\mathbf{k}_{l, mn} = \mathbf{k}_{x, mn}\hat{x} + \mathbf{k}_{y, mn}\hat{y} + \mathbf{k}_{z, l, mn}\hat{z} \quad (l = 1, 3) \quad (5)$$

로 되는데, 여기서

$$k_{x, mn} = k_1 \sin\alpha \cos\delta - mK_x,$$

$$k_{y, mn} = k_1 \sin\alpha \sin\delta - nK_y,$$

$$k_{z,i,mn} = \sqrt{k_i^2 - k_{x,mn}^2 - k_{y,mn}^2} \quad (6)$$

으로 주어지고 $k_3 = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_3}$ 이며, 영역 I에서의 $k_{z,i,mn}$ 는 음(−)이거나 허수부가 양(+)인 순허수이고 영역 III에서의 $k_{z,3,mn}$ 는 양(+)이거나 허수부가 음(−)인 순허수이다. 한편, 각 영역에서의 자기장은

$$\mathbf{H} = \frac{j}{\omega \mu_0} \mathbf{V} \times \mathbf{E} \quad (7)$$

에 의하여 얻어지는데 μ_0 는 진공중 투자율로서 모든 영역에서 동일하다고 가정한다.

요철영역(II)의 i 번째 층에서는 전기장과 자기장을 공간조화파로서 전개하게 되는데,

$$\mathbf{E}_{2,i} = \sum_m \sum_n [S_{x,i,mn}(z)\hat{x} + S_{y,i,mn}(z)\hat{y} + S_{z,i,mn}(z)\hat{z}] e^{-jk_{2,i,mn} \cdot r} \quad (8a)$$

$$\mathbf{H}_{2,i} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_m \sum_n [U_{x,i,mn}(z)\hat{x} + U_{y,i,mn}(z)\hat{y} + U_{z,i,mn}(z)\hat{z}] e^{-jk_{2,i,mn} \cdot r} \quad (8b)$$

로 ε_0 는 진공중의 유전율이고, $S_{i,mn}(z)$ 와 $U_{i,mn}(z)$ 은 m, n 차 공간조화파의 규격화된 진폭을 나타내며, $k_{2,i,mn}$ 는 위상정합과 Floquet조건에 의하여

$$k_{2,i,mn} = k_{x,mn}\hat{x} + k_{y,mn}\hat{y} + k_{z,i}\hat{z} \quad (9a)$$

로 주어지는데 평균유전상수를 $\bar{\varepsilon}_{2,i}$ 라 하면 $k_{z,i}$ 는

$$k_{z,i} = \left[\left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \bar{\varepsilon}_{2,i} - k_1^2 \sin^2 \alpha \right]^{\frac{1}{2}} \quad (9b)$$

로 나타내진다. 맥스웰 방정식

$$\mathbf{V} \times \mathbf{E}_{2,i} = -j\omega \mu_0 \mathbf{H}_{2,i} \quad (10)$$

$$\mathbf{V} \times \mathbf{H}_{2,i} = j\omega \varepsilon_0 \varepsilon_{2,i}(x, y) \mathbf{E}_{2,i} \quad (11)$$

에 $\varepsilon_{2,i}$ 와 그 역수를 전개한 (1a, b)식, 그리고 (8a, b)식의 $\mathbf{E}_{2,i}$ 와 $\mathbf{H}_{2,i}$ 를 대입하여 정리하면

$$\begin{aligned} \frac{dS_{x,i,mn}}{dz} &= j \left[k_{z,i} S_{x,i,mn} - k U_{y,i,mn} + \frac{k_{x,mn}}{k} \sum_p \sum_q \bar{k}_{i,(m-p)(n-q)} \right. \\ &\quad \left. \times (k_{x,pq} U_{y,i,pq} - k_{y,pq} U_{x,i,pq}) \right] \end{aligned} \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dS_{y,i,mn}}{dz} &= j \left[k_{z,i} S_{y,i,mn} - k U_{x,i,mn} + \frac{k_{y,mn}}{k} \sum_p \sum_q \bar{k}_{i,(m-p)(n-q)} \right. \\ &\quad \left. \times (k_{x,pq} U_{y,i,pq} - k_{y,pq} U_{x,i,pq}) \right] \end{aligned} \quad (12b)$$

$$\begin{aligned} \frac{dU_{x,i,mn}}{dz} &= j \left[k_{z,i} U_{x,i,mn} + k \sum_p \sum_q \bar{E}_{i,(m-p)(n-q)} S_{y,i,pq} \right. \\ &\quad \left. + \frac{k_{x,mn}}{k} (k_{y,mn} S_{x,i,mn} - k_{x,mn} S_{y,i,mn}) \right] \end{aligned} \quad (12c)$$

$$\begin{aligned} \frac{dU_{y,i,mn}}{dz} &= j \left[k_{z,i} U_{y,i,mn} - k \sum_p \sum_q \bar{E}_{i,(m-p)(n-q)} S_{x,i,pq} \right. \\ &\quad \left. + \frac{k_{y,mn}}{k} (k_{y,mn} S_{x,i,mn} - k_{x,mn} S_{y,i,mn}) \right] \end{aligned} \quad (12d)$$

의 결합된 1계 상미분방정식들을 얻는데, 여기서 k 는 진공중 파수 ω/c 이고 $S_{x,i,mn}$ 과 $U_{x,i,mn}$ 은 위 식에서 나오는 x, y 성분들로부터 다음과 같이 얻어진다:

$$S_{z,i,mn} = \frac{1}{k} \sum_p \sum_q \bar{k}_{i,(m-p)(n-q)} (k_{y,pq} U_{x,i,pq} - k_{x,pq} U_{y,i,pq}) \quad (13a)$$

$$U_{z,i,mn} = \frac{1}{k} (k_{x,mn} S_{y,i,mn} - k_{y,mn} S_{x,i,mn}) \quad (13b)$$

계산에 사용된 m 과 n 의 최대값을 M 이라하면 $L = (2M+1)^2$ 은 계산에 사용되는 공간조화파의 수로서, 위의 (12a-d)식에 있는 결합된 1계 상미분방정식들은

$$\frac{dV_i}{dz} = j A_i V_i \quad (14)$$

의 형태로 나타낼 수 있는데, V_i 는 $4L \times 1$, A_i 는 $4L \times 4L$ 행렬로서

$$A_i = (S_{x,i}, S_{y,i}, U_{x,i}, U_{y,i})^T \quad (15)$$

$$A_i = k_{z,i} I + \begin{pmatrix} 0 & 0 & a_i & b_i \\ 0 & 0 & c_i & d_i \\ e & f_i & 0 & 0 \\ g_i & -e & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

이다. 여기에서 T 는 transpose, I 는 단위행렬, θ 는 영행렬을 나타내고, $S_{x,i}, S_{y,i}, U_{x,i}, U_{y,i}$ 는 각각 $1 \times L$ 행렬로서 그 요소들은

$$\begin{aligned} (S_{x,i})_{mn} &= S_{x,i,mn}(z) \\ (S_{y,i})_{mn} &= S_{y,i,mn}(z) \\ (U_{x,i})_{mn} &= U_{x,i,mn}(z) \\ (U_{y,i})_{mn} &= U_{y,i,mn}(z) \end{aligned} \quad (17)$$

로 주어지고, a_i 부터 g_i 는 각각 $L \times L$ 행렬로서 그 요소들은

$$(a_{ij})_{mn,pq} = -\frac{k_{x,mn}k_{y,pq}}{k}\tilde{K}_{i,(m-p)(n-q)} \quad (18a)$$

$$(b_{ij})_{mn,pq} = \frac{k_{x,mn}k_{x,pq}}{k}\tilde{K}_{i,(m-p)(n-q)} - k\delta_{mp}\delta_{nq} \quad (18b)$$

$$(c_{ij})_{mn,pq} = k\delta_{mp}\delta_{nq} - \frac{k_{y,mn}k_{y,pq}}{k}\tilde{K}_{i,(m-p)(n-q)} \quad (18c)$$

$$(d_{ij})_{mn,pq} = \frac{k_{x,pq}k_{y,mn}}{k}\tilde{K}_{i,(m-p)(n-q)} \quad (18d)$$

$$(e_{ij})_{mn,pq} = \frac{k_{x,mn}k_{y,mn}}{k}\delta_{mp}\delta_{nq} \quad (18e)$$

$$(f_{ij})_{mn,pq} = k\tilde{E}_{i,(m-p)(n-q)} - \frac{k_{z,mn}^2}{k}\delta_{mp}\delta_{nq} \quad (18f)$$

$$(g_{ij})_{mn,pq} = -\frac{k_{y,mn}^2}{k}\delta_{mp}\delta_{nq} - k\tilde{E}_{i,(m-p)(n-q)} \quad (18g)$$

인데 여기에서 δ_{mn} 는 Kronecker 델타 기호이다.

R3DVCWA에서는 (14)식을 상태변수법을 사용하여 풀게 되는데, A_i 의 고유값을 $\lambda_{i,r}$, 고유벡터를 $(W_{1,i,r}, W_{2,i,r}, W_{3,i,r}, W_{4,i,r})^T$ 라 하면

$$S_{x,i}(z) = \sum_{r=1}^{4L} C_{i,r} W_{1,i,r} e^{j\lambda_{i,r} z} \quad (19a)$$

$$S_{y,i}(z) = \sum_{r=1}^{4L} C_{i,r} W_{2,i,r} e^{j\lambda_{i,r} z} \quad (19b)$$

$$U_{x,i}(z) = \sum_{r=1}^{4L} C_{i,r} W_{3,i,r} e^{j\lambda_{i,r} z} \quad (19c)$$

$$U_{y,i}(z) = \sum_{r=1}^{4L} C_{i,r} W_{4,i,r} e^{j\lambda_{i,r} z} \quad (19d)$$

로 되며, 여기서 $C_{i,r}$ 은 미지의 적분상수들을 나타낸다. 이 후의 과정은 본 논문에 직접적인 관계가 없기 때문에 간략하게 논의하고자 한다. (4a, b), (7), (8a, b), (13a, b), (19a-d)식 들에 의하여 모든 영역에서의 전기장과 자기장이 결정되는데, 미지수는 (4a, b)식의 R_{mn} 과 T_{mn} (각각 $3L$ 개), (19a-d)식의 $C_{i,r}$ ($4NL$ 개)로 총 $(4N+6)L$ 개으로서, $z_i = id/N (i=0, 1, \dots, N)$ 의 $(N+1)$ 개 면에서의 E 와 H 의 접선성분에 관한 $4(N+1)L$ 개의 경계조건과 영역 I과 III에서의

$\nabla \cdot (\epsilon E) = 0$ 방정식, 즉

$$k_{1,mn} \cdot R_{mn} = k_{3,mn} \cdot T_{mn} = 0$$

의 $2L$ 개를 종합한 $(4N+6)L$ 조건을 가우스소거법을 사용하여 적용시키므로서 결정하게 된다. 따라서 임의의 표면양각형태를 갖는 회절격자에 대하여 사용된 총의 수와 공간조화파의 수에 의해서만 제한받는 엄밀한 결과를 얻게된다.

III. 고유값문제의 단순화

I절에서 논의한 바와 같이 R3DVCWA는 사용된 총의 수와 공간조화파의 갯수를 증가시키므로써, 반사파와 투파파의 전기장과 자기장을 매우 엄밀하게 계산할 수 있는데, 이때 컴퓨터의 많은 기억용량과 빠른 계산능력을 요구하게 된다. 일반적인 경우, 대부분의 소요시간은 (16)식의 A_i 행렬의 고유값과 고유벡터를 구하는데 사용하게 된다. 본 논문에서는 A_i 행렬이 특수한 형태를 가지고 있기 때문에 고유값문제가 $4L \times 4L$ 인 A_i 행렬의 1/4크기인 행렬 즉, $2L \times 2L$ 행렬에 관한 것으로 항상 귀착될 수 있음을 밝히고자 한다.

다음과 같은 형태의 행렬 A 를 고려해 보자:

$$A = \begin{pmatrix} \beta I & A_{s,1} \\ A_{s,2} & \beta I \end{pmatrix} \quad (20)$$

i) 행렬을 II절의 A_i 행렬과 비교하면 여기에서 β 는 k_z , I 는 $2L \times 2L$ 단위행렬, 그리고

$$A_{s,1} = \begin{pmatrix} a_i & b_i \\ c_i & d_i \end{pmatrix} \quad (21a)$$

$$A_{s,2} = \begin{pmatrix} e & f_i \\ g_i & -e \end{pmatrix} \quad (21b)$$

에 대응한다. 이제 A 의 고유값 방정식을

$$A \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \quad (22)$$

라 쓰면, λ 는 고유값, $(X_1^T X_2^T)^T$ 는 고유벡터를 나타내는데 (20)식을 사용하여 (22)식을 전개하면

$$A_{s,1} X_2 = (\lambda - \beta) X_1 \quad (23a)$$

$$A_{s,2} X_1 = (\lambda - \beta) X_2 \quad (23b)$$

을 얻는다. (23b)식에 $A_{s,1}$ 을 곱하여 (23a)식을 대입하면

$$A_{s,1} A_{s,2} X_1 = (\lambda - \beta)^2 X_1 \quad (24)$$

으로서, 이는 $A_{s,1}$ 과 $A_{s,2}$ 의 곱행렬 $A_{s,1} A_{s,2}$ 에 대한 고유값문제이다. 즉, $A_{s,1} A_{s,2}$ 의 고유값을 λ 라 하면, 원래 A 의

고유값은

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{\Delta} \quad (25)$$

로 주어지고, 고유벡터 X_1 에 대하여 행렬 A 의 고유벡터는

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} \pm \sqrt{\Delta} & X_1 \\ A_{s,2}X_1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

로 주어지게 된다. 결론적으로 II절의 A 에 대한 고유값 문제는

$$A_{s,1}A_{s,2} = \begin{pmatrix} a_i e + b_i g_i & a_i f_i - b_i e \\ c_i e + d_i g_i & c_i f_i - d_i e \end{pmatrix} \quad (27)$$

의 $2L \times 2L$ 행렬에 대한 고유값문제로 귀착되는데, (18a-g)식으로부터 이 곱행렬의 요소들은

$$\begin{aligned} (a_i e + b_i g_i)_{mn, pq} &= k^2 \tilde{E}_{i, (m-p)(n-q)} - k_{y, mn}^2 \delta_{mp} \delta_{nq} \\ &\quad - k_{x, mn} \sum_{p', q'} \tilde{K}_{i, (m-p')(n-q')} \tilde{E}_{i, (p'-p)(q'-q)} \\ (a_i f_i - b_i e)_{mn, pq} &= k_{x, mn} k_{y, mn} \delta_{mp} \delta_{nq} \\ &\quad - k_{x, mn} \sum_{p', q'} \tilde{K}_{i, (m-p')(n-q')} \tilde{E}_{i, (p'-p)(q'-q)} \\ (c_i e + d_i g_i)_{mn, pq} &= k_{x, mn} k_{y, mn} \delta_{mp} \delta_{nq} \\ &\quad - k_{y, mn} \sum_{p', q'} \tilde{K}_{i, (m-p')(n-q')} \tilde{E}_{i, (p'-p)(q'-q)} \\ (c_i f_i - d_i e)_{mn, pq} &= k^2 \tilde{E}_{i, (m-p)(n-q)} - k_{x, mn}^2 \delta_{mp} \delta_{nq} \\ &\quad - k_{y, mn} \sum_{p', q'} \tilde{K}_{i, (m-p')(n-q')} \tilde{E}_{i, (p'-p)(q'-q)} \end{aligned} \quad (28)$$

로 표현된다. 이와 같이 고유값문제가 단순화되는 것은 행렬의 구조에 있어서 대각블럭행렬들이 k_z, I 로서 단위 행렬에 비례한다는 사실에 전적으로 달려 있다. 체적형 회절격자의 경우에는 간단한 경우라도 이와 같지 않음을 알 수 있다. 즉, 참고문헌[12]에서는 TE편광에 국한된 상당히 단순한 회절문제를 다루었는데, 거기에 나타난 행렬((A5)식)은 위의 (16)식에 비하여 매우 단순해 보이지만 고유값문제의 단순화는 불가능함을 알 수 있다. 이것은 참고문헌[12]의 (1)식에 있는 유전상수 ε 이 z 에 관계되므로서, 행렬미분방정식 (7)식의 계수행렬 [b]의 대각성분에 공간조화파의 차수 i 에 관계되는 항((A4), (A5)식의 C_i)이 있어서 대각성분들이 서로 다르기 때문이다. 따라서 체적형 회절격자에 대해서는 매우 특수한 경우를 제외하고는 고유값문제의 단순화가 불가능한 것이다.

고유값문제의 이러한 단순화는 임의의 표면양각회절격자에 대한 회절계산에 매우 중요한데, 이는 컴퓨터의

막대한 기억용량에 대한 요구를 완화시키고, 보다 중요한 사실은 계산속도를 매우 증가시킨다는 것이다. 예를 들어 $M=4$ 즉, 81개의 공간조화파를 사용한 경우 A 는 324×324 행렬로서 이에 대한 고유값문제는 486DX2-33에서 netlib^[13]의 cg.for를 사용할 경우 2시간 36분이 소요되는 반면, 단순화된 162×162 행렬 $A_{s,1}A_{s,2}$ 과 (25), (26)식을 이용했을 때는 거의 10%인 16분이 소요될 따름이다. 따라서 많은 층을 요구하는 경우에 있어서는 계산시간에 엄청난 절감을 가져오게 된다. Yamakita와 Rokushima^[14] 그리고 Li와 Haggans^[7]가 보고한 바와 같이 결합파법의 수렴속도가 느린 경우가 있다는 점을 고려하면 본 논문에서 보인 고유값문제의 단순화는 큰 의미를 갖는다고 하겠다.

이 절에서 보인 바와 같이 고유값문제의 단순화는 비교적 쉽게 발견할 수 있는 것이지만, 임의의 표면양각회절격자에 대한 R3DVCWA에 있어서 적용되는 사실로서 이제까지의 문헌에 보고된 바가 없다. 그 이유는 결합파법이 이러한 단순화가 일반적으로 불가능한 체적형 회절격자에 먼저 적용^[12]되었기 때문인 것으로 판단된다. 즉, TE편광에 국한된 경우라도 고유값문제의 단순화가 불가능하기 때문에, 더욱 복잡한 3차원문제에 있어서는 체적형이거나 표면양각형이거나 행렬의 구조에 별로 관심을 기울이지 않은 것으로 보인다.

IV. 결 론

결합파법은 표면양각형 및 체적형 회절격자에 대한 염밀한 전자기적 회절계산을 가능케 하고 여러가지 장점들로 인하여 다른 방법들 보다 널리 쓰이고 있다. 본 논문에서는 임의의 표면양각 유전회절격자에 염밀한 3차원벡터 결합파해석을 적용시킬 때 컴퓨터의 기억용량과 계산속도에 큰 영향을 주는 고유값문제가 항상 1/4 크기의 행렬에 대한 것으로 단순화될 수 있음을 밝혔다. 한편 체적형 회절격자에 대해서는 단순한 경우에 있어서도 이와 같은 단순화가 일반적으로 불가능함을 지적하였다. 최근의 회절광학소자, 특히 표면양각형 소자의 많은 분야에의 기여를 보면, 본 연구는 비교적 쉽게 발견할 수 있는 것에 관한 것이지만 그 중요도가 크다고 하겠다.

참 고 문 헌

- [1] *Diffractraction grating handbook* (Bausch & Lomb, Inc., Rochester, NY, 1970).

- [2] R. Petit, Ed., *Electromagnetic Theory of Gratings, Topics in Current Physics*, vol. 22 (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
- [3] T. K. Gaylord and M. G. Moharam, Proc. IEEE **73**, 894 (1985).
- [4] Appl. Opt. **32**, No 14 (1993).
- [5] S. H. Lee, *Diffractive and Miniaturized Optics*, Critical reviews of optical science and technology vol. CR49 (SPIE, Washington, 1994).
- [6] M. G. Moharam and T. K. Gaylord, J. Opt. Soc. Am. **72**, 1385(1982).
- [7] L. Li and C.W. Haggans, J. Opt. Soc. Am. **A10**, 1184(1993).
- [8] M. G. Moharam and T. K. Gaylord, J. Opt. Soc. Am. **73**, 1105(1983).
- [9] M. G. Moharam, Proc. SPIE **883**, 8(1988).
- [10] GSOLVER, Grating Solver Development Co., Al- len, Texas, U.S.A.
- [11] S. A. Gaither, in *Binary Optics: A Diffraction Analysis*, MIT Lincoln Laboratory Project Report ODT-20(1989).
- [12] M. G. Moharam and T. K. Gaylord, J. Opt. Soc. Am. **71**, 811(1981).
- [13] netlib, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ri- dge, TN, U.S.A; 공개소프트웨어로서 netlib@ornl. gov에서 입수할 수 있음.
- [14] J. Yamakita and K. Rokushima, Proc. SPIE **503**, 239(1984).

Eigenvalue Problem Pertaining to the Rigorous Three-Dimensional Vector Coupled-Wave Analysis of Diffraction from Surface-Relief Gratings

Doo Jin Cho

Department of Physics, Ajou University, Suwon 442-749, Korea

(Received: June 30, 1994)

When diffraction by arbitrary two-dimensional surface-relief dielectric gratings is analyzed using the rigorous three-dimensional vector coupled-wave analysis, it is found that the matrix eigenvalue problem pertaining to the analysis can always be simplified to that for a matrix which has the dimension of a quarter of the original, so that computing time and memory requirements for computer may be greatly reduced. However this kind of simplification can not be obtained in the case of volume diffraction gratings.