



---

Diplomarbeit

# Berechnung anisotroper periodischer Strukturen mittels Differentieller Methode

Matthias Petschow

13.10.2008

betreut durch Dipl.-Phys. Stephan Rafler

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Elektrodynamik</b>	<b>4</b>
2.1	Wellenausbreitung in homogenen isotropen Medien . . . . .	6
2.2	Wellenausbreitung in homogenen anisotropen Medien . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Li-Regeln der Fourier-Faktorisierung</b>	<b>11</b>
<b>4</b>	<b>Die Differentielle Methode</b>	<b>14</b>
4.1	Übersicht . . . . .	14
4.2	Liniengitter . . . . .	16
4.2.1	Liniengitter aus anisotropen Materialien . . . . .	16
4.2.2	Aufstellen des Normalenvektorfeldes . . . . .	23
4.2.3	Nichtmagnetische Materialien . . . . .	23
4.2.4	Isotrope Materialien . . . . .	24
4.2.5	Konstante Koeffizienten und RCWA . . . . .	25
4.3	Kreuzgitter . . . . .	27
4.3.1	Kreuzgitter aus anisotropen Materialien . . . . .	27
4.3.2	Aufstellen des Normalenvektorfeldes . . . . .	31
4.3.3	Nichtmagnetische Materialien . . . . .	31
4.3.4	Isotrope Materialien . . . . .	32
4.3.5	Konstante Koeffizienten und RCWA . . . . .	32
<b>5</b>	<b>Numerische Integration und S-Matrix Algorithmus</b>	<b>34</b>
5.1	Lösen des Randwertproblems und numerische Integrationsverfahren . . . . .	34
5.2	S-Matrix Algorithmus . . . . .	38
5.2.1	S-Matrix Algorithmus für die Differentielle Methode . . . . .	38
5.2.2	S-Matrix Algorithmus für die RCWA . . . . .	40
5.3	Sonderfall: anisotropes Substrat . . . . .	44
<b>6</b>	<b>Berechnung der Beugungseffizienzen</b>	<b>47</b>
<b>7</b>	<b>Nahfeldberechnung</b>	<b>50</b>
7.1	Allgemeines Vorgehen . . . . .	50
7.2	Entwicklung mittels stetiger Funktionen . . . . .	51

<b>8</b>	<b>Anwendungsbeispiele</b>	<b>54</b>
8.1	Performance-Vergleich anhand zweier Berechnungsbeispiele . . . . .	54
8.1.1	Sinusförmiges Liniengitter aus Aluminium . . . . .	54
8.1.2	Kreuzgitter: Photonischer Kristall . . . . .	57
8.2	Metamaterialien und ihre Anwendungen . . . . .	60
8.2.1	Zylinderförmige Hyperlinse . . . . .	61
8.2.2	Elektromagnetische Abschirmung . . . . .	65
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>67</b>
<b>A</b>	<b>Validierung des Codes</b>	<b>69</b>
A.1	Energieerhaltung und Reziprozitäts-Theorem . . . . .	69
A.2	Vergleich mit Berechnungen aus der Literatur . . . . .	70
A.2.1	Liniengitter aus Kobalt . . . . .	70
A.2.2	Liniengitter aus Mica und KTP . . . . .	74
A.2.3	Beschichtetes Lamellengitter . . . . .	76
A.2.4	Kreuzgitter aus anisotropen Materialien . . . . .	78
<b>B</b>	<b>Darstellung der Felder durch ihre z-Komponenten</b>	<b>81</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>82</b>

# 1 Einleitung

Periodische Strukturen und ihre optischen Eigenschaften sind von großem Nutzen und Interesse in Wissenschaft und Technik [1, 2]. Im Rahmen dieser Arbeit sollen vor allem periodische Strukturen mit Perioden im Bereich der Beleuchtungswellenlänge des sichtbaren Lichts mit angrenzendem Ultraviolett und Infrarot betrachtet werden. Die bekanntesten solcher periodischer Strukturen sind klassische Beugungsgitter, die aufgrund ihrer Periodizität einfallendes Licht nur in ganz bestimmte Richtungen, die Beugungsordnungen des Gitters, reflektieren oder transmittieren. Da die Richtungen der Beugungsordnungen von der Wellenlänge des Lichts abhängen, werden diese häufig im Bereich der Spektroskopie eingesetzt [1, 2]. Photonische Kristalle sind periodische Strukturen mit Periodizität im Bereich der Beleuchtungswellenlänge, die in einem bestimmten Wellenlängenbereich, den sog. Bandlücken, keine Transmission zulassen. Sie werden deshalb auch *Photonic band gap structures* genannt und es besteht eine große Analogie zu den *electronic band gaps* in der Festkörperphysik [1]. Photonische Kristalle sind aufgrund ihrer Eigenschaften besonders im Bereich der Lichtformung und -leitung von Bedeutung. Werden die Strukturperioden wesentlich kleiner als die Wellenlänge, kann die Struktur als kontinuierliches Medium mit bestimmten elektromagnetischen Eigenschaften betrachtet werden. Man spricht dann im Allgemeinen von sog. *Metamaterialien* [3]. Da die elektromagnetischen Eigenschaften von der makroskopischen Struktur abhängen, ist es somit möglich Materialien mit bestimmten Eigenschaften zu entwickeln. Von großem Interesse in den letzten Jahren sind z.B. Metamaterialien, die effektiv einen negativen Brechungsindex besitzen, da kein natürlich vorkommendes Material eine solche Eigenschaft besitzt. Eine Anwendung solcher speziell entwickelter Metamaterialien verspricht unter anderem Abbildungen weit unterhalb der Beugungsbegrenzung zu ermöglichen [4]. Da die Herstellung solcher Materialien für sichtbares Licht jedoch noch immer eine große Herausforderung ist, sind die tatsächlichen Anwendungsgebiete von Metamaterialien im Bereich der Optik jedoch noch nicht endgültig abzusehen.

Die Möglichkeit, auch optisch anisotrope Materialien bei den Untersuchungen periodischer Strukturen berücksichtigen zu können, ist daher nicht nur wichtig, weil alle Strukturen natürlicherweise auch aus optisch anisotropen Materialien hergestellt werden können, sondern auch, weil Metamaterialien im Allgemeinen anisotrope Eigenschaften aufweisen. Möchte man diese also bei der Modellierung einer zu untersuchenden Situation als kontinuierliches Medium behandeln, ist es als optisch anisotropes Material zu modellieren. Dieses trifft z.B. ebenso für klassische Beugungsgitter mit Gitterperioden sehr viel kleiner als die Beleuchtungswellenlänge zu, wenn man das Gitter als effektive anisotrope Schicht modellieren möchte bzw. Strukturen mit Eigenschaften entwickeln möchte, die denen einer solchen Schicht entsprechen [5, 6, 7, 8]. Auch Oberflächenrauheiten isotroper Materialien können in guter Näherung als dünne anisotrope Schicht betrachtet werden.

Um die optischen Eigenschaften solcher periodischer Strukturen zu untersuchen, ist das Lösen der Maxwellgleichungen in Materie notwendig. Materie wird dabei als kontinuierliches Medium betrachtet und die Wechselwirkung von Licht mit Materie phänomenologisch durch die induzierte Polarisierung und Magnetisierung berücksichtigt [9]. Während das Problem für Strukturen mit im Vergleich zur Wellenlänge großen Periodenabmessungen durch verschiedene Näherungen,

wie z.B. eine skalare Betrachtung, erleichtert werden kann, ist dies für die hier zu betrachteten Strukturen nicht der Fall [10, 11]. Die Methode der *Vectorial thin-element approximation* (VTEA) ist ein Beispiel für eine solche Näherungsrechnung [12, 13, 14].

Für das Lösen der Maxwellgleichungen wird im Rahmen dieser Arbeit die sog. *Differentielle Methode* verwendet, welche speziell für periodische Strukturen anwendbar ist. Alternative Methoden werden u.a. in Ref. [2, 10, 15, 16] näher erläutert. Die Differentielle Methode gehört wohl zu den einfachsten und verbreitetsten Methoden, die Maxwellgleichungen für periodische Strukturen zu lösen [1]. Die gekoppelten partiellen Differentialgleichungen werden durch Fourierreihenentwicklung der Felder in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen der Fourierkoeffizienten überführt. Durch das Schießverfahren wird das Randwertproblem in ein Anfangswertproblem umgewandelt. Das gewöhnliche Differentialgleichungssystem kann nun mittels bekannter Differenzenverfahren zur numerischen Integration solcher Systeme gelöst werden. Um numerische Probleme bei der Integration zu vermeiden, muss die Struktur möglicherweise in Schichten unterteilt werden, und der S-Matrix Algorithmus oder alternativ der R-Matrix Algorithmus ist zu verwenden [17, 18]. Eine Verbesserung der Konvergenzrate der Methode konnte durch die Fourier-Faktorisierungs-Regeln im reduzierten Fourierraum von Lifeng Li erzielt werden [19, 20]. Die Anwendung dieser Regeln wird häufig als *Fast Fourier Factorization* (FFF) bezeichnet. Allerdings kann es aufgrund der Limitierungen der FFF bei der Anwendung auf Strukturen aus stark leitfähigen Materialien zu Instabilitäten kommen, deren Ursache derzeit Gegenstand näherer Untersuchungen sind [21, 22, 23, 24].

In dem Spezialfall, dass das System gewöhnlicher Differentialgleichungen konstante Koeffizienten besitzt, kann eine numerische Integration durch das Lösen eines Eigenwertproblems ersetzt werden. Obwohl es sich dabei um einen Spezialfall der Differentiellen Methode handelt, wird in diesem Fall aus historischen Gründen von der *rigorous coupled-wave analysis* (RCWA) [25] oder alternativ der *Fourier modal method* (FMM) gesprochen. Um auch in diesem Fall numerische Schwierigkeiten zu umgehen, kann wiederum der S-Matrix Algorithmus oder eine Variante Namens *Enhanced Transmittance Matrix Approach* (ETMA) [26, 27] verwendet werden. Strukturen beliebiger Form werden häufig in Treppenstufenform angenähert und mittels RCWA berechnet. Untersuchungen in Ref. [28, 29] zeigen jedoch, dass aufgrund von Felderhöhungen an den Ecken metallischer Materialien, bei einer solchen Näherung, eine schlechtere Konvergenz in Abhängigkeit der berücksichtigten Modenanzahl als ohne eine solche Näherung erzielt wird.

Die Differentielle Methode, sowie ihre Vor- und Nachteile, wird ausgiebig in Ref. [1] behandelt. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Differentielle Methode lediglich zur Lösung des Beugungsproblems bei Liniengittern (1-dimensional-periodisch) und Kreuzgittern (2-dimensional-periodisch) verwendet. Es existiert jedoch ebenfalls eine Formulierung der Differentiellen Methode für nicht-periodische Strukturen [1, 30, 31]. Ebenso kann die Methode zur Untersuchung nichtlinearer Effekte wie z.B. der Frequenzverdoppelung verwendet werden [1, 15]. In dieser Arbeit wird jedoch stets davon ausgegangen, dass nichtlineare Effekte zu vernachlässigen sind. Diese Annahme ist im Regelfall im Bereich der optischen Messtechnik gerechtfertigt. Häufig wird bei optischen Frequenzen auch davon ausgegangen, dass alle Materialien nichtmagnetisch sind und damit auch nicht anisotrop in ihren magnetischen Eigenschaften. Diese Annahme soll jedoch nicht getroffen werden, da insbesondere bei der Entwicklung von Metamaterialien und ihrer Beschreibung als kontinuierliches Medium diese Annahme oftmals nicht zutreffend ist. Ein Beispiel dafür ist die später näher erläuterte elektromagnetische Abschirmung, auch *invisibility cloak* genannt.

Die Arbeit ist dabei wie folgt gegliedert: Im zweiten Abschnitt werden kurz einige erforderliche Grundlagen der Elektrodynamik zusammengefasst. Im dritten Abschnitt werden die Ergebnisse aus Ref. [19, 20] zu den Li-Regeln der Fourier-Faktorisierung zusammengefasst, welche eine

wichtige Grundlage für die Formulierung der Differentiellen Methode darstellen. Die Formulierung der Differentiellen Methode erfolgt dann im vierten Abschnitt, wobei die Umwandlung des partiellen Differentialgleichungssystem der Maxwellgleichungen in ein System gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen im Vordergrund steht. Das Lösen dieses gewöhnlichen Differentialgleichungssystems unter Berücksichtigung der Randwerte wird dann im fünften Abschnitt beschrieben. Oftmals interessierende Größen einer betrachteten Struktur sind die Effizienzen der verschiedenen Beugungsordnungen, d.h. welcher Anteil der einfallenden Energie diese transportieren. Die Berechnung der Beugungseffizienzen wird deshalb im sechsten Abschnitt genauer erläutert. In einigen Fällen ist man ebenso an der Feldverteilung innerhalb der Struktur interessiert, weshalb die Nahfeldberechnung im siebten Abschnitt beschrieben wird. Am Ende sollen noch einige Anwendungsbeispiele betrachtet werden.

## 2 Grundlagen der Elektrodynamik

Die Grundlage zur Berechnung elektrischer und magnetischer Felder und damit die Basis der klassischen Elektrodynamik sind die vier *Maxwellgleichungen in Materie*, welche sich in SI-Einheiten in der folgenden Form schreiben lassen [32, 33]:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j}. \quad (2.4)$$

Durch sie werden die Felder von elektrischer Feldstärke  $\mathbf{E}$ , elektrischer Verschiebungsdichte  $\mathbf{D}$ , magnetischer Feldstärke  $\mathbf{H}$  und magnetischer Flussdichte  $\mathbf{B}$  miteinander verknüpft. Alle Felder sind dabei Funktionen von Raum und Zeit:  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ .

Die freie Ladungsdichte wird durch  $\rho(\mathbf{r}, t)$  und die freie Stromdichte durch  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  beschrieben. Sämtliche Größen sind dabei als räumliche Mittelwerte<sup>1</sup> über mikroskopisch große, makroskopisch kleine Volumina aufzufassen [34].

Die vier Gln. (2.1–2.4) sind erst durch die Angabe von sog. *Materialgleichungen* der Form  $\mathbf{D} = \mathbf{D}(\mathbf{E})$  und  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{H})$  festgelegt.

Die elektrische Verschiebungsdichte  $\mathbf{D}$  ist definitionsgemäß durch

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (2.5)$$

gegeben. Die Polarisationsdichte  $\mathbf{P}$  stellt die makroskopische Reaktion des Mediums auf ein elektrisches Feld dar [9].

Analog ist die magnetische Feldstärke  $\mathbf{H}$ , auch magnetische Erregung genannt, durch

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M} \quad (2.6)$$

definiert [34]. Die Magnetisierungsdichte  $\mathbf{M}$  ist, analog zu  $\mathbf{P}$ , die Reaktion des Mediums auf ein magnetisches Feld. In Abwesenheit von Materie ist  $\mathbf{P} = \mathbf{M} = \mathbf{0}$  und bei den Feldern handelt es sich auch ohne Mittelung um zeitlich und räumlich glatte Funktionen [34].

Bei  $\varepsilon_0$  handelt es sich um die Vakuum-Permittivität und bei  $\mu_0$  um die Vakuum-Permeabilität<sup>2</sup>.

Die Größen  $\mathbf{P}$  und  $\mathbf{M}$  werden im Folgenden als linear abhängig von den jeweiligen Feldstärken  $\mathbf{E}$  bzw.  $\mathbf{H}$  angenommen<sup>3</sup>,  $\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E}$  und  $\mathbf{M} = \kappa \mathbf{H}$ , ebenso der Zusammenhang von

<sup>1</sup>Die räumlichen Mittelwerte entsprechen den zeitlichen Mittelwerten [34].

<sup>2</sup>Bei allen Berechnungen wird mit  $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$ , d.h. in den sog. *natürlichen Einheiten*, gerechnet. Aus diesem Grund sind alle numerischen Angaben von  $\varepsilon$  und  $\mu$  eigentlich Angaben von  $\varepsilon_r$  und  $\mu_r$  aus Gln. (2.8) und (2.9).

<sup>3</sup>Diese Annahme gilt nur bei kleinen Feldstärken, bei denen nichtlineare Effekte zu vernachlässigen sind. Bei Berücksichtigung nichtlinearer Prozesse gilt allgemein  $\mathbf{D} = \mathbf{D}(\mathbf{E})$  und  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{H})$ .

elektrischer Feldstärke und der durch sie hervorgerufenen Stromdichte. In diesem Fall lassen sich Gln. (2.5) und (2.6) in folgender Form schreiben:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0(\mathbf{I} + \chi)\mathbf{E} = \varepsilon_0\varepsilon_r\mathbf{E} = \varepsilon\mathbf{E}, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{I} + \kappa)\mathbf{H} = \mu_0\mu_r\mathbf{H} = \mu\mathbf{H}. \quad (2.9)$$

Bei Gl. (2.7) handelt es sich um das lokale Ohm'sche Gesetz.

Die Größen  $\varepsilon_r$  und  $\mu_r$  werden relative Permittivität und relative Permeabilität genannt. Bei der elektrischen Leitfähigkeit  $\sigma$ , elektrischen Suszeptibilität  $\chi$  und magnetischen Suszeptibilität  $\kappa$  handelt es sich im Allgemeinen um Tensoren zweiter Stufe, und damit auch bei der Permittivität und der Permeabilität. Im Falle isotroper Materialien werden alle Größen zu Skalaren.

Die makroskopischen elektromagnetischen Eigenschaften eines Materials sind damit durch die Materialparameter Permittivität  $\varepsilon$  und Permeabilität  $\mu$  bestimmt. Sie sind im Allgemeinen frequenzabhängig, d.h.  $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$  und  $\mu = \mu(\omega)$ .

Um die Gln. (2.1–2.4) weiter zu vereinfachen wird im Folgenden davon ausgegangen, dass keine freien Ladungen vorhanden sind. Damit wird  $\rho = 0$ . Desweiteren sollen nur zeitharmonische Felder mit der Zeitabhängigkeit  $\exp(-i\omega t)$  betrachtet werden. Das bedeutet, die Differentiation nach der Zeit in Gln. (2.3) und (2.4) kann durch Multiplikation mit  $-i\omega$  ersetzt werden. Es handelt sich dabei lediglich um eine Spektralzerlegung, d.h. Fouriertransformation, in der Form

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{U}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t) d\omega. \quad (2.10)$$

Alle Felder sind somit im Folgenden Funktionen des Ortes  $\mathbf{r}$  und der Kreisfrequenz  $\omega$ , ohne dass dies jedoch explizit angegeben wird:  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{U}(\mathbf{r}, \omega)$ . Wegen der Zeitabhängigkeit  $\exp(-i\omega t)$ , handelt es sich bei den Feldern  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, \omega)$  um komplexe Größen [9, 32, 33]. Die Felder verschiedener Frequenzen sind im linearen Fall nicht gekoppelt, da elektrische und magnetische Suszeptibilität keine Funktionen der Feldstärke sind, und können daher getrennt betrachtet werden.

Die Leitfähigkeit eines Materials kann durch eine Neudefinition von  $\varepsilon$  berücksichtigt werden, sodass  $\mathbf{j} = 0$  gesetzt werden kann. Einsetzen von Gl. (2.7) in Gln. (2.3) führt zur neuen Definition  $\hat{\varepsilon} = \varepsilon + i\sigma/\omega$ .

Die zu lösenden quellenfreien Maxwellgleichungen für zeitharmonische Felder werden damit zu

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (2.11)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.12)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mathbf{B}, \quad (2.13)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\mathbf{D}. \quad (2.14)$$

Wie oben im Text erwähnt, handelt es sich bei den Feldern um Funktionen vom Ort  $\mathbf{r}$  und der Kreisfrequenz  $\omega$ :  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, \omega)$ . Die Gleichungen werden vervollständigt durch die Materialgleichungen (2.8) und (2.9).

Durch Gln. (2.11–2.14) ist das Verhalten der Felder an einer Grenzfläche zweier homogener Medien gegeben. Durch Anwenden des Gaußschen Integralsatzes auf (2.11) und (2.12) bzw. des Stokesschen Integralsatzes auf (2.13) und (2.14) kann gezeigt werden, dass es sich unter der oben gemachten Annahme der Quellenfreiheit bei



- der Normalkomponente von  $\mathbf{D}$ :  $D_n$ ,
- der Normalkomponente von  $\mathbf{B}$ :  $B_n$ ,
- der Tangentialkomponente von  $\mathbf{E}$ :  $E_t$ ,
- der Tangentialkomponente von  $\mathbf{H}$ :  $H_t$

um stetige Feldkomponenten handelt [33, 34, 35].

Da  $\forall \mathbf{a} : \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{a}) = 0$  gilt, erfüllen Lösungen der Gln. (2.13) und (2.14) automatisch Gln. (2.11) und (2.12). Ebenso sind die Randbedingungen der Stetigkeiten von  $D_n$  und  $B_n$  implizit in Gln. (2.11) und (2.12) enthalten [9].

Mit den oben gemachten Annahmen reduziert sich somit die Lösung von Gln. (2.1–2.4) auf die Lösung der Gln. (2.13) und (2.14) unter Berücksichtigung der Materialgleichungen (2.8) und (2.9).

## 2.1 Wellenausbreitung in homogenen isotropen Medien

Ein homogenes isotropes Medium zeichnet sich dadurch aus, dass es sich bei seinen elektromagnetischen Eigenschaften,  $\varepsilon$  und  $\mu$ , bei gegebener Frequenz um skalare Konstanten handelt.

Aus Gln. (2.11–2.14) kann in diesem Fall für jede Feldkomponente  $U(\mathbf{r}, \omega)$  eine zeitfreie skalare Wellengleichung, auch *Helmholtzgleichung* genannt, der Form

$$(\nabla^2 + k^2)U = 0 \quad (2.15)$$

hergeleitet werden [33].

Dazu bildet man die Rotation von (2.13) und verwendet die Vektoridentität  $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{a}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla^2 \mathbf{a}$ . Wegen konstantem  $\varepsilon$  ergibt sich aus (2.11) mit (2.8), dass  $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$  gilt. Einsetzen von (2.14) unter Berücksichtigung von (2.8) und (2.9) ergibt

$$(\nabla^2 + \omega^2 \varepsilon \mu) \mathbf{E} = 0. \quad (2.16)$$

Aus Gl. (2.8) ergibt sich sofort, dass Gl. (2.16) ebenfalls für die elektrische Verschiebungsdichte  $\mathbf{D}$  gilt, d.h. wenn  $\mathbf{E}$  durch  $\mathbf{D}$  ersetzt wird.

Analog kann durch Bilden der Rotation von Gl. (2.14) unter Berücksichtigung, dass  $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$  gilt, eine mit Gl. (2.16) identische Gleichung erhalten werden, in der  $\mathbf{E}$  durch  $\mathbf{H}$  bzw.  $\mathbf{B}$  ersetzt ist.

Alle Feldkomponenten erfüllen damit Gl. (2.15) mit der Dispersionsrelation

$$k^2 = \omega^2 \varepsilon \mu. \quad (2.17)$$

Da es sich bei Gl. (2.15) um eine Wellengleichung für zeitharmonische Felder handelt, ist  $k^2$  in der Form  $k^2 = \omega^2/v^2$  gegeben [32]. Bei  $v$  handelt es sich um die Wellengeschwindigkeit im Medium. Ein Vergleich mit Gl. (2.16) gibt für diese

$$v = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon \mu}}. \quad (2.18)$$

Im Vakuum gilt  $\varepsilon = \varepsilon_0$  und  $\mu = \mu_0$  und damit ergibt sich die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum  $c$  zu

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}. \quad (2.19)$$

Durch Definition eines Brechungsindex des Mediums  $n$  durch

$$n^2 = \varepsilon_r \mu_r \quad (2.20)$$

und damit für alle natürlichen Materialien<sup>4</sup>

$$n = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r} \quad (2.21)$$

kann Gl. (2.18) in der Form  $v = c/n$  geschrieben werden, und die Dispersionsrelation (2.17) wird zu

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} n^2. \quad (2.22)$$

Die Dispersionsrelation (2.22) ist somit nur vom in Gl. (2.20) definierten Quadrat des Brechungsindex abhängig [36].

Ein vollständiger Satz von Basisfunktionen der Lösung der Helmholtzgleichung (2.15) stellen ebene Wellen der Form

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{k}, \omega) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.23)$$

dar [9], wobei der Betrag von  $|\mathbf{k}| = k$  durch Gl. (2.22) mit der Kreisfrequenz  $\omega$  verbunden ist. Es handelt sich dabei um eine räumliche Fouriertransformation der Form

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{k}, \omega) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{k} \quad (2.24)$$

des Feldes.

Einsetzen von Gl. (2.24) in Gl. (2.10) zeigt, dass es sich bei der Berechnung der Felder im  $(\mathbf{r}, t)$ -Raum um eine Planwellenzerlegung handelt. Die Planwellen haben dabei die Form

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{k}, \omega) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t). \quad (2.25)$$

Ebenen konstanter Phase sind durch  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \text{konst.}$  gekennzeichnet. Der Wellenvektor  $\mathbf{k}$ , dessen Betrag durch (2.22) festgelegt ist, zeigt dabei in Richtung der Wellenausbreitung. Die Wellenlänge der ebenen Welle ist nach (2.25) durch

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|} \quad (2.26)$$

gegeben.

Die komplexen Amplituden  $\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{k}, \omega)$  der Planwellen sind jedoch nicht unabhängig voneinander, sondern durch die Maxwellgleichungen (2.11–2.14) miteinander verknüpft. Einsetzen der Feldkomponenten in der Form (2.23) in (2.11–2.14) liefert für die Amplituden der Planwellen die Beziehungen

$$\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{D}} = 0, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{B}} = 0, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{E}} = \omega \tilde{\mathbf{B}}, \quad (2.29)$$

$$\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{H}} = -\omega \tilde{\mathbf{D}}. \quad (2.30)$$

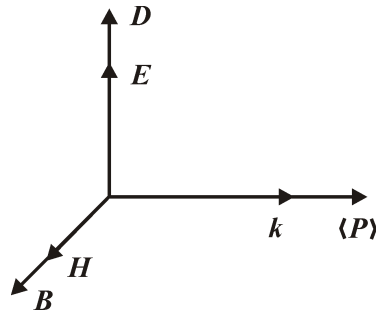
---

<sup>4</sup>Es können Metamaterialien hergestellt werden, bei denen  $n = -\sqrt{\varepsilon_r \mu_r}$  gilt [36, 3].

Formal ist also der Übergang von  $(\mathbf{r}, t)$ - zum  $(\mathbf{k}, \omega)$ -Raum durch  $\partial/\partial t \rightarrow -i\omega$  und  $\nabla \rightarrow i\mathbf{k}$  in den Maxwellgleichungen zu erreichen.

Um die Notation zu entlasten soll bei den weiteren Betrachtungen der Ausbreitung ebener Wellen in einem homogenen Medium die Tilde über den Feldgrößen weggelassen werden.

Aus der Materialgleichung (2.8) für ein homogenes isotropes Medium ist vorgegeben, dass die elektrische Feldstärke  $\mathbf{E}$  und die elektrische Verschiebungsdichte  $\mathbf{D}$  parallel sind. Dasselbe gilt nach Gl. (2.9) für die magnetische Feldstärke  $\mathbf{H}$  und die magnetische Flussdichte  $\mathbf{B}$ . Da nach Gln. (2.27) und (2.28)  $\mathbf{D}$  und  $\mathbf{B}$  orthogonal zum Wellenvektor  $\mathbf{k}$  sind, trifft dies ebenfalls für  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  zu. Die Felder sind somit transversal zur Ausbreitungsrichtung  $\mathbf{k}/|\mathbf{k}|$  der Ebenen konstanter Phase. Nach Gl. (2.29) bilden  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$  ein Rechtssystem und sind paarweise orthogonal. Dies gilt nach Gl. (2.30) ebenso für  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{D}$  und  $\mathbf{H}$ . Insgesamt ergeben sich die in Abb. 2.1 dargestellten Beziehungen.



**Abb. 2.1:** Orientierung der Felder einer ebenen Welle im homogenen isotropem Medium. Dabei wird angenommen, dass  $\varepsilon$  und  $\mu$  reell und positiv sind.

Der mittlere Poyntingvektor  $\langle \mathbf{P} \rangle$ , welcher die mittlere Energieflussdichte des elektromagnetischen Feldes beschreibt, ist durch

$$\langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) \quad (2.31)$$

gegeben [32, 9, 33]. Der Stern representiert dabei das komplex konjugierte der Größe. Der mittlere Poyntingvektor ist somit parallel zum Wellenvektor  $\mathbf{k}$ .

In Abb. 2.1 ist angenommen, dass es sich bei  $\varepsilon$  und  $\mu$  um reelle positive Werte handelt. In diesem Fall bilden  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  ein Rechtssystem. Sind dagegen  $\varepsilon$  und  $\mu$  reell und negativ bilden  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  ein Linkssystem [3, 36]. Als Konsequenz ist der mittlere Poyntingvektor  $\langle \mathbf{P} \rangle$  in entgegengesetzter Richtung zum Wellenvektor  $\mathbf{k}$ . Bei der Propagation in verlustbehafteten Medien werden die Amplituden der ebenen Wellen exponentiell gedämpft [33].

## 2.2 Wellenausbreitung in homogenen anisotropen Medien

Im homogenen anisotropen Medium sind die elektromagnetischen Parameter,  $\varepsilon$  und  $\mu$ , ebenfalls räumlich konstant. Es handelt sich jedoch um Tensoren zweiter Stufe. Das elektromagnetische Feld kann wiederum durch Planwellen der Form von Gl. (2.25) dargestellt werden, wobei die Amplituden der Wellen durch Gln. (2.27–2.30) miteinander verknüpft sind.

Aus Gln. (2.29) und (2.30), zusammen mit den Materialgleichungen (2.8) und (2.9), kann die Dispersionsrelation für allgemeine anisotrope Materialien hergeleitet werden. Ist der Wellenvektor  $\mathbf{k} = (\alpha, \beta, \gamma)$ , wird der Operator  $\mathbf{k} \times$  durch

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma & \beta \\ \gamma & 0 & -\alpha \\ -\beta & \alpha & 0 \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

repräsentiert. Damit müssen

$$\mathbf{K}\mathbf{E} = \omega\mu\mathbf{H} \quad (2.33)$$

und

$$\mathbf{K}\mathbf{H} = -\omega\varepsilon\mathbf{E} \quad (2.34)$$

erfüllt werden. Auflösen von Gl. (2.33) nach  $\mathbf{H}$  und Einsetzen in Gl. (2.34) und analog Auflösen von Gl. (2.34) nach  $\mathbf{E}$  und Einsetzen in Gl. (2.33), liefert die Bedingungen [37]

$$(\mathbf{K}\mu^{-1}\mathbf{K} + \omega^2\varepsilon)\mathbf{E} = 0 \quad (2.35)$$

und

$$(\mathbf{K}\varepsilon^{-1}\mathbf{K} + \omega^2\mu)\mathbf{H} = 0. \quad (2.36)$$

Im Fall eines isotropen Mediums ergibt sich aus Gl. (2.35) und Gl. (2.36) wieder Gl. (2.17). Ansonsten ist die Dispersionsrelation  $\omega = f(\mathbf{k})$  durch

$$\det(\mathbf{K}\mu^{-1}\mathbf{K} + \omega^2\varepsilon) = 0 \quad (2.37)$$

oder

$$\det(\mathbf{K}\varepsilon^{-1}\mathbf{K} + \omega^2\mu) = 0 \quad (2.38)$$

festgelegt. Gln. (2.37) und (2.38) sind nach Ref. [37] äquivalent. Dort findet sich auch eine vollständige Darstellung der Gleichungen in kartesischen Koordinaten. Sofort zu erkennen ist, dass sich die Dispersionsrelation bei  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  nicht ändert.

Aus Gln. (2.27) und (2.28) folgt, dass  $\mathbf{D}$  und  $\mathbf{B}$  orthogonal zum Wellenvektor  $\mathbf{k}$  sind und damit in den Ebenen konstanter Phase liegen. Dies gilt im Allgemeinen nicht für  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$ , die damit sowohl eine Transversal- als auch eine Longitudinalkomponente besitzen. Aus Gln. (2.29) und (2.30) folgt jedoch, dass  $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$  und  $\mathbf{D} \perp \mathbf{H}$  gelten muss. Aus der Definition des Poyntingvektors in Gl. (2.31) folgt, dass dieser im Allgemeinen nicht parallel zur Ausbreitungsrichtung der Phasenfronten  $\mathbf{k}/|\mathbf{k}|$  ist.

In kartesischen Koordinaten ist die Permittivität  $\varepsilon$  durch

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

gegeben. Analoges ergibt sich für die Permeabilität  $\mu$ . Im Allgemeinen handelt es sich bei den Elementen  $\varepsilon_{ij}$  und  $\mu_{ij}$  um komplexe Größen [1].

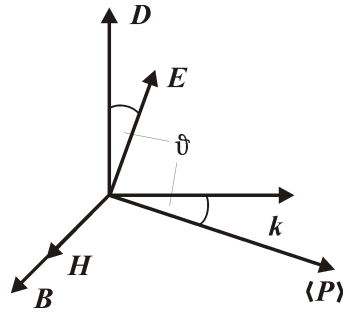
Da die Ausbreitung im homogenen anisotropen Medium nur im Spezialfall von Abschnitt 5.3 von Bedeutung ist und dort nochmals dargestellt wird, soll an dieser Stelle nur der wichtige Fall eines verlustfreien homogenen anisotropen nichtmagnetischen Mediums kurz betrachtet werden. Ausführlichere Darstellungen für diesen Fall finden sich in Ref. [32, 9]. Da das Medium nichtmagnetisch ist, ist die Permeabilität ein Skalar:  $\mu = \mu_0$ . Bei optischen Frequenzen trifft

dieses für natürliche Materialien im Allgemeinen zu [1, 9]. Der Permittivitätstensor in Gl. (2.39) ist in diesem Fall symmetrisch, d.h.  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ , und seine Elemente sind reell [9]. In diesem Fall ist  $\varepsilon$  diagonalisierbar und kann durch

$$\varepsilon = \varepsilon_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T + \varepsilon_2 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2^T + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3 \mathbf{v}_3^T \quad (2.40)$$

dargestellt werden. Die reellen positiven Größen  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  und  $\varepsilon_3$  werden als Hauptpermittivitäten bezeichnet. Die Richtungsvektoren  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}_2$  und  $\mathbf{v}_3$  sind die dazugehörigen Hauptachsen. Die Hauptachsen bilden eine orthogonale Basis in  $\mathbb{R}^3$ . Sind alle drei Hauptpermittivitäten unterschiedlich, ist das Medium biaxial. Wenn zwei Hauptpermittivitäten gleich sind, ist das Medium uniaxial. Sind alle Größen identisch ist das Medium isotrop und  $\varepsilon$  ist ein Skalar.

Nach den oben gemachten Bemerkungen über die Orientierung der Felder und der Tatsache, dass  $\mathbf{H}$  und  $\mathbf{B}$  im nichtmagnetischen Medium parallel sind, ergibt sich die in Abb. 2.2 dargestellte Orientierung der Felder. Die elektrische Feldstärke  $\mathbf{E}$  hat sowohl eine Transversal- als auch



**Abb. 2.2:** Orientierung der Felder im homogenen anisotropen nichtmagnetischen Medium, [9].  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{k}$  und  $\langle \mathbf{P} \rangle$  liegen in einer Ebene,  $\mathbf{B}$  und  $\mathbf{H}$  senkrecht dazu. Die Ebenen konstanter Phase sind orthogonal zum Wellenvektor  $\mathbf{k}$ .

eine Logitudinalkomponente [9]. Später wird wichtig sein, dass der mittlere Poyntingvektor  $\langle \mathbf{P} \rangle$  und damit die Richtung des Energietransports im Allgemeinen nicht parallel zur Ausbreitungsrichtung der Phasenfronten  $\mathbf{k}/|\mathbf{k}|$  ist und daher auch nicht aus dem Wellenvektor  $\mathbf{k}$  bestimmt werden kann.

Nach Ref. [9, 32] bekommt man für jede mögliche Richtung  $\mathbf{s}$  des Wellenvektors  $\mathbf{k} = nk_0 \mathbf{s}$  durch die Dispersionsgleichung im anisotropen Medium zwei mögliche Werte für  $n_{1,2}$  und damit für die möglichen Phasengeschwindigkeiten  $v_{1,2} = c/n_{1,2}$  der ebenen Wellen in dieser Richtung. Die zu den beiden Phasengeschwindigkeiten gehörenden Polarisierungen ergeben sich dann aus Gl. (2.35). Die Felder im homogenen anisotropen Medium lassen sich damit ebenfalls als Superposition ebener Wellen darstellen, wobei in jeder Ausbreitungsrichtung der Phasenfronten  $\mathbf{s}$  das elektromagnetische Feld als Superposition zweier ebener Wellen unterschiedlicher Polarisierung und Ausbreitungsgeschwindigkeit gegeben ist. Die Polarisierungen, die bei der Ausbreitung unverändert bleiben, sind orthogonal [9].

Sowohl in homogenen isotropen wie auch anisotropen Medien ist das elektromagnetische Feld somit in der Form einer Superposition von ebenen Wellen darstellbar. Während in isotropen Medien alle Felder orthogonal zur Phasenausbreitungsrichtung  $\mathbf{k}/|\mathbf{k}|$  sind und der Energietransport in Form des Poyntingvektors parallel dazu ist, ist dies in anisotropen Medien nicht der Fall.

### 3 Li-Regeln der Fourier-Faktorisierung

Ziel der Fourier-Faktorisierung ist es, die Fourierkoeffizienten einer periodischen Funktion  $h(x) = f(x)g(x)$  durch die Fourierkoeffizienten seiner Produkte  $f(x)$  und  $g(x)$  darzustellen.

Bei  $f(x)$  und  $g(x)$  handelt es sich um quadratintegrierbare, stückweise stetige und periodische Funktionen mit der Periode  $2\pi$ . Dies gilt damit auch für  $h(x)$ .

Die Faltungsregel besagt, dass die Fourierkoeffizienten  $h_n$  von  $h(x)$  in

$$h(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} h_n \exp(inx) \tag{3.1}$$

durch

$$h_n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_{n-m}g_m = \sum_{m=-\infty}^{\infty} g_{n-m}f_m \tag{3.2}$$

gegeben sind [20]. Oder in Matrixschreibweise

$$[h] = \llbracket f \rrbracket [g] = \llbracket g \rrbracket [f] , \tag{3.3}$$

wobei  $[h]$  einen Vektor mit den Fourierkoeffizienten  $h_n$  und das Symbol  $\llbracket f \rrbracket$  eine Toeplitz-Matrix<sup>1</sup> aus den Fourierkoeffizienten der Funktion  $f(x)$  darstellt, mit  $(\llbracket f \rrbracket)_{nm} = f_{n-m}$ . Für  $[g]$ ,  $[f]$  und  $\llbracket g \rrbracket$  gilt analoges. Gl. (3.2) wird auch als *Laurent-Regel* bezeichnet.

In praktischen Berechnungen werden jedoch die unendlichen Fourierreihen durch endliche Reihen angenähert. Oder anders ausgedrückt, die Dimension im Fourierraum durch Projektion auf einen Unterraum reduziert. Die Reduktion auf ein endlich-dimensionales Problem ist jedoch nur möglich, wenn seine Lösung beim Erhöhen der Dimension zur Lösung des exakten Problems konvergiert [20, 38]. Soll die Fourierdarstellung von  $h(x)$  in Gl. (3.1) durch eine Summation von  $n = -N$  bis  $n = N$  angenähert werden, geht es bei der Fourier-Faktorisierung somit darum, die Fourierkoeffizienten  $h_n$  aus einer vergleichbaren Anzahl Fouriermoden von  $f(x)$  und  $g(x)$  zu ermitteln, sodass die endliche Fourierreihe mit den so ermittelten Fourierkoeffizienten uniform gegen die endliche Fourierreihe mit den exakten Fourierkoeffizienten konvergiert, wenn mehr Fourierkoeffizienten von  $f(x)$  und  $g(x)$  berücksichtigt werden [20]. Eine genaue Untersuchung über die Fourier-Faktorisierung in einem solchen Fall ist in Ref. [19, 20] zu finden, während im Folgenden nur die Ergebnisse von dort aufgeführt werden sollen. Dabei werden in Ref. [19, 20] drei Fälle unterschieden.

1. Haben  $f(x)$  und  $g(x)$  keine gemeinsamen Unstetigkeitsstellen  $x_p$ , können die Fourierkoeffizienten  $h_n$  durch eine endliche Version der Laurent-Regel

$$h_n = \sum_{m=-N}^N f_{n-m}g_m \tag{3.4}$$

---

<sup>1</sup>Matrix, dessen Haupt- und Nebendiagonalen konstant sind.

ermittelt werden. Die so ermittelte endliche Fourierreihe konvergiert punktweise für  $N \rightarrow \infty$  zu der endlichen Fourierreihe  $h(x)$ , ermittelt mit den exakten Fourierkoeffizienten. In Matrixschreibweise ist Gl. (3.4) durch

$$[h] = \llbracket f \rrbracket [g] \quad (3.5)$$

gegeben. Es ist zu beachten, dass im endlichen Fall im Allgemeinen  $\llbracket f \rrbracket [g] \neq \llbracket g \rrbracket [f]$  ist. Wenn eine der beiden Funktionen  $f(x)$  und  $g(x)$  stetig ist und die jeweils andere unstetig, sollte die unstetige Funktion die Einträge der Toeplitz-Matrix ausmachen, da so mehr ihrer Fourierkoeffizienten bei der Berechnung verwendet werden [1].

2. Haben  $f(x)$  und  $g(x)$  gemeinsame Unstetigkeitsstellen  $x_p$ , bei ihrem Produkt  $h(x)$  handelt es sich jedoch um eine stetige Funktion, können die Fourierkoeffizienten  $h_n$  in den meisten Fällen durch die sog. *Inversen-Regel* bestimmt werden. Da in diesem Fall für das Produkt

$$g(x) = \frac{1}{f(x)} h(x) \quad (3.6)$$

die Laurent-Regel gilt, ist

$$[g] = \llbracket \frac{1}{f} \rrbracket [h] \quad (3.7)$$

und man erhält durch Multiplikation mit  $\llbracket 1/f \rrbracket^{-1}$  die Inversen-Regel

$$[h] = \llbracket \frac{1}{f} \rrbracket^{-1} [g] \quad (3.8)$$

bzw.

$$h_n = \sum_{m=-N}^N \left( \llbracket \frac{1}{f} \rrbracket^{-1} \right)_{nm} g_m. \quad (3.9)$$

Die endliche Fourierreihe mit  $h_n$  aus Gl. (3.9) als Koeffizienten konvergiert wiederum punktweise gegen die endliche Fourierreihe von  $h(x)$  mit den exakten Fourierkoeffizienten, wenn  $N \rightarrow \infty$ .

Der Beweis für die Gültigkeit der Inversen-Regel in Ref. [20] ist dabei noch an folgende Bedingung geknüpft: „Sei  $S$  ein Subintervall oder eine Sammlung von Subintervallen von  $[0, 2\pi)$  und  $\bar{S}$  sein Komplement,  $S$  oder  $\bar{S}$  können leer sein, muss stets  $f(x) \neq 0$  und eine der beiden Bedingungen

- $\text{Re}[1/f]$  hat keinen Vorzeichenwechsel in  $[0, 2\pi)$ ,  $\text{Re}[1/f] \neq 0$  in  $S$ , und  $\text{Im}[1/f]$  hat keinen Vorzeichenwechsel in  $\bar{S}$ ,
- $\text{Im}[1/f]$  hat keinen Vorzeichenwechsel in  $[0, 2\pi)$ ,  $\text{Im}[1/f] \neq 0$  in  $S$ , und  $\text{Re}[1/f]$  hat keinen Vorzeichenwechsel in  $\bar{S}$ ,

erfüllt sein“ [20]. Diese Bedingungen sind hinreichend, aber nicht notwendig.

3. Haben  $f(x)$  und  $g(x)$  gemeinsame Unstetigkeitsstellen  $x_p$ , ihr Produkt  $h(x)$  ist jedoch an diesen Stellen unstetig, kann  $h(x)$  weder durch die Laurent-Regel noch durch die Inversen-Regel Fourier-faktoriert werden [1].

Im weiteren werden Produkte, die die Bedingung von Punkt eins erfüllen, als Typ 1 Produkte bezeichnet. Für diese kann somit die Laurent-Regel verwendet werden. Die Inversen-Regel ist

bei Produkten vom Typ 2 zu verwenden und Produkte vom Typ 3 sollten vermieden werden, da sie nicht Fourier-faktoriert werden können.

Die Anwendung der hier aufgeführten Regeln wird auch als *Fast Fourier Factorization* (FFF) bezeichnet [1, 39].

Alle in diesem Abschnitt gemachten Aussagen sind auch für mehrdimensionale Fourierreihenentwicklungen gültig, da diese als eine Reihe von eindimensionalen Fourierreihenentwicklungen angesehen werden können.



# 4 Die Differentielle Methode

In den folgenden beiden Abschnitten soll die Differentielle Methode näher erläutert werden. Als Hauptreferenz dient [1], weshalb die Notation weitestgehend der dort verwendeten entspricht. In Abschnitt 4 wird gezeigt, wie aus dem System partieller Differentialgleichungen der Maxwellgleichungen durch Fourierreihenentwicklung der Felder ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung für ihre Fourierkoeffizienten entsteht. Das Lösen dieses Differentialgleichungssystems unter Beachtung der Randbedingungen wird dann in Abschnitt 5 näher erläutert.

In Abschnitt 4.1 wird eine kurze Übersicht über das Verfahren der Differentiellen Methode gegeben. Die Abschnitte 4.2 und 4.3 enthalten dann eine detailliertere Darstellung. Der Abschnitt 4.1 stellt somit lediglich eine kompakte Zusammenfassung der Ergebnisse der danach folgenden Abschnitte dar.

## 4.1 Übersicht

Die Differentielle Methode löst die Maxwellgleichungen (2.13) und (2.14) für periodische Strukturen. Im Rahmen dieser Arbeit sollen dabei Strukturen mit Periodizität in einer und Invarianz in einer zweiten Raumrichtung, im weiteren auch als *Liniengitter* oder *eindimensional-periodische Gitter*, und mit Periodizität in zwei Raumrichtungen, im weiteren auch als *Kreuzgitter* oder *zweidimensional-periodische Gitter* bezeichnet, betrachtet werden<sup>1</sup>. In der dritten Raumrichtung wird davon ausgegangen, dass ausserhalb eines endlichen Bereichs, dem modulierten Bereich, alle elektromagnetischen Parameter konstant sind. Ausserhalb des modulierten Bereichs kann das Feld deshalb nach Abschnitt 2.1 und 2.2 durch Superposition ebener Wellen, der *Rayleigh-Entwicklung*, dargestellt werden. Alle drei Raumrichtungen werden als orthogonal angenommen. Die Wahl der Orientierung der Koordinatenachsen ist in Abb. 4.1 dargestellt..

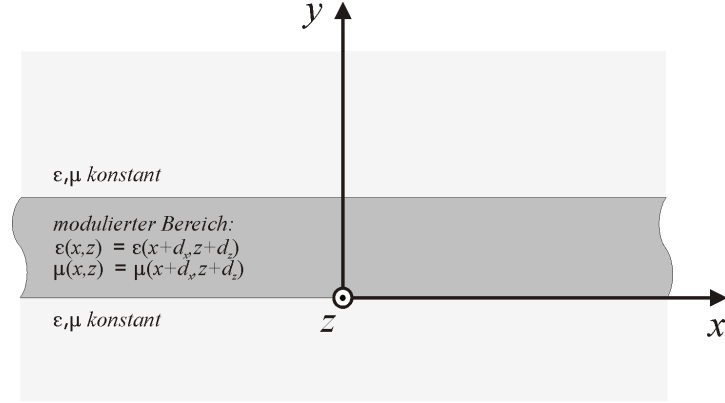
Innerhalb des modulierten Bereichs müssen die Felder Gl. (2.13) und (2.14) erfüllen, welche in kartesischen Koordinaten die folgende Form besitzen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= i\omega B_x, & \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} &= -i\omega D_x, \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} &= i\omega B_y, & \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} &= -i\omega D_y, \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= i\omega B_z, & \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} &= -i\omega D_z. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Da die Strukturen periodisch sind, handelt es sich bei den Feldern um pseudoperiodische Funktionen von  $x$  und  $z$ , die als Fourierreihen entwickelt werden können [1, 10]. Durch Einführen

---

<sup>1</sup>Periodische Strukturen werden im weiteren allgemein auch als Gitter bezeichnet. Obwohl die Formulierungen ein- bzw. zweidimensional-periodische Gitter allgemeiner ist, sollen im weiteren Liniengitter und Kreuzgitter als synonyme Bezeichnungen verwendet werden.



**Abb. 4.1:** Orientierung des kartesischen Koordinatensystems bei der Betrachtung von Linien- und Kreuzgittern mit der Differentiellen Methode.

von Vektoren  $[U]$ , welche die Fourierkoeffizienten der Feldkomponenten enthalten, können Gln. (4.1) im Fourierraum aufgrund der Linearität der Differentiation in der Form

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial [E_z]}{\partial y} - \frac{\partial [E_y]}{\partial z} &= i\omega [B_x], & \frac{\partial [H_z]}{\partial y} - \frac{\partial [H_y]}{\partial z} &= -i\omega [D_x], \\
 \frac{\partial [E_x]}{\partial z} - \frac{\partial [E_z]}{\partial x} &= i\omega [B_y], & \frac{\partial [H_x]}{\partial z} - \frac{\partial [H_z]}{\partial x} &= -i\omega [D_y], \\
 \frac{\partial [E_y]}{\partial x} - \frac{\partial [E_x]}{\partial y} &= i\omega [B_z], & \frac{\partial [H_y]}{\partial x} - \frac{\partial [H_x]}{\partial y} &= -i\omega [D_z]
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

geschrieben werden.

Für die hier betrachteten Gitter werden die Felder in den Ebenen parallel zur  $xz$ -Ebene als Fourierreihen entwickelt (siehe Abb. 4.1). Ihre Fourierkoeffizienten sind damit noch Funktionen der kontinuierlichen Ortskoordinate  $y$ .

Da die Differentiationen im Fourierraum für die hier betrachteten Gitter in den zwei Raumrichtungen  $x$  und  $z$  explizit bekannt sind<sup>2</sup>, werden die Gln. (4.2) in ein System gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen erster Ordnung überführt.

Um das Gleichungssystem lösen zu können, müssen die Materialgleichungen (2.8) und (2.9) ebenfalls im Fourierraum ausgedrückt werden. Dabei ist zu beachten, dass aufgrund der endlichen Basis, d.h. endlichen Anzahl von Fourierkoeffizienten der Felder, in jeder auf dem Computer durchgeführten Rechnung, die Produkte in Gln. (2.8) und (2.9) nach den Fourierfaktorisierungs-Regeln von Li [19, 20] berechnet werden sollten. Diese sind in Abschnitt 3 aufgeführt. Letztlich erhält man die Beziehungen

$$\begin{pmatrix} [D_x] \\ [D_y] \\ [D_z] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{xx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{xz}^{(e)} \\ \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{yy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} \\ \mathbf{Q}_{zx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{zy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{zz}^{(e)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [E_z] \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

<sup>2</sup>Da die Exponentialfunktionen, die als Basis zur Darstellung der Felder dienen, Eigenfunktionen der Differentiation sind.

und

$$\begin{pmatrix} [B_x] \\ [B_y] \\ [B_z] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{xx}^{(h)} & \mathbf{Q}_{xy}^{(h)} & \mathbf{Q}_{xz}^{(h)} \\ \mathbf{Q}_{yx}^{(h)} & \mathbf{Q}_{yy}^{(h)} & \mathbf{Q}_{yz}^{(h)} \\ \mathbf{Q}_{zx}^{(h)} & \mathbf{Q}_{zy}^{(h)} & \mathbf{Q}_{zz}^{(h)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [H_x] \\ [H_y] \\ [H_z] \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Unter Verwendung dieser Materialgleichungen im reduzierten Fourierraum wird durch Eliminieren der  $y$ -Komponenten das gewöhnliche Differentialgleichungssystem in der Form

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} & \mathbf{M}_{13} & \mathbf{M}_{14} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} & \mathbf{M}_{23} & \mathbf{M}_{24} \\ \mathbf{M}_{31} & \mathbf{M}_{32} & \mathbf{M}_{33} & \mathbf{M}_{34} \\ \mathbf{M}_{41} & \mathbf{M}_{42} & \mathbf{M}_{43} & \mathbf{M}_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

oder kurz

$$\frac{d}{dy} \mathbf{f}(y) = i\mathbf{M}(y)\mathbf{f}(y) \quad (4.6)$$

erhalten.

Die Matrizen der Materialgleichungen (4.3) und (4.4), sowie die Matrix  $\mathbf{M}(y)$  in Gl. (4.6) sind dabei abhängig von dem zu lösenden Problem und werden in den folgenden beiden Abschnitten für Linien- und Kreuzgitter hergeleitet.

Das Problem ist damit auf eine numerische Integration der Gl. (4.6) unter Berücksichtigung der Randwerte an Ober- und Unterseite des modulierten Bereichs reduziert. Die Randwerte sind die Amplituden der ebenen Wellen zur Darstellung der Felder in Cover und Substrat.

Das Randwertproblem wird dabei mittels Schießverfahren auf ein Anfangswertproblem zurückgeführt. Die numerische Integration wird, um numerische Probleme durch exponentiell wachsende Terme zu vermeiden, mittels S-Matrix-Algorithmus durchgeführt.

## 4.2 Liniengitter

### 4.2.1 Liniengitter aus anisotropen Materialien

#### Problemstellung

Für ein Liniengitter ist die Geometrie des zu lösenden Problems in Abb. 4.2 dargestellt<sup>3</sup>. Beleuchtet wird das Gitter durch eine ebene monochromatische Welle mit Wellenvektor  $\mathbf{k}_i = (\alpha_0, -\beta_0, \gamma_0)$  aus dem Cover. Das Cover ist durch  $y > a$  gekennzeichnet. Es wird angenommen, dass es sich um ein homogenes isotropes Medium mit den Eigenschaften  $\varepsilon_c$  und  $\mu_c$  handelt. Beliebige einfallende Felder können dann später durch Summation einer endlichen Anzahl einfallender monochromatischer ebener Wellen mit verschiedenen Einfallrichtungen und Frequenzen angenähert werden<sup>4</sup>.

Die Komponenten des Wellenvektor  $\mathbf{k}_i$  sind durch den Polarwinkel  $\phi$  und den Azimuthwinkel  $\psi$  gegeben durch

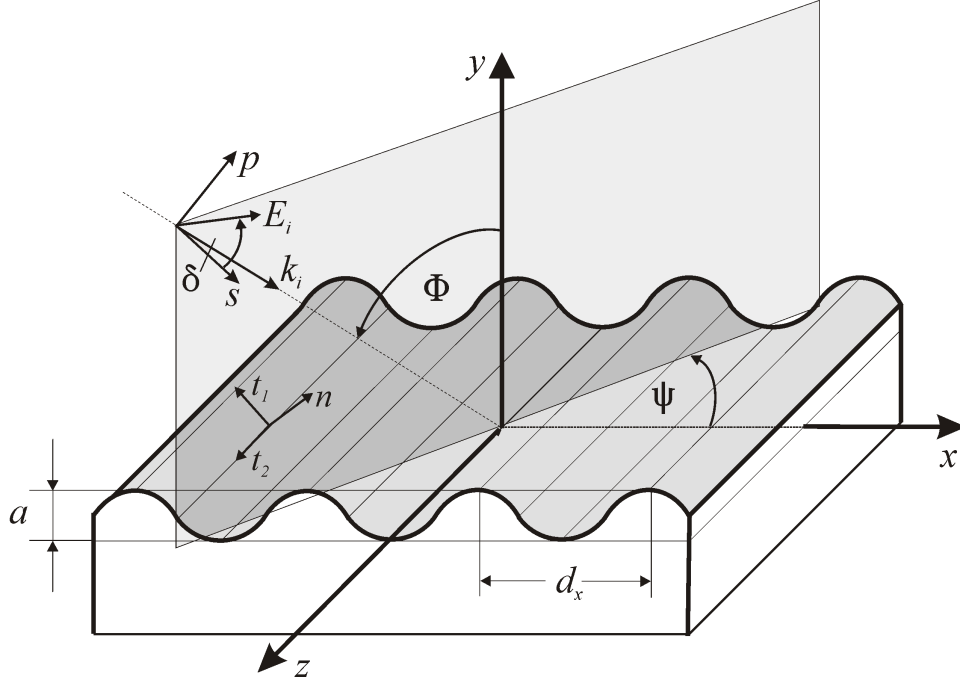
$$\alpha_0 = n_c k_0 \sin \phi \cos \psi, \quad (4.7)$$

$$\beta_0 = n_c k_0 \cos \phi, \quad (4.8)$$

$$\gamma_0 = -n_c k_0 \sin \phi \sin \psi. \quad (4.9)$$

<sup>3</sup>Dieser Abschnitt ist stark an [40] und [41] angelehnt.

<sup>4</sup>In Ref. [42, 43] finden sich Anwendungsbeispiele der Differentiellen Methode, bei denen das einfallende Feld ein 3D-Gauss-Strahl ist.



**Abb. 4.2:** Geometrie eines Liniengitters. Dargestellt ist ein klassisches Relief-Beugungsgitter.

Bei  $k_0$  handelt es sich um die Wellenzahl aus Gl. (2.22) mit  $n = 1$ . Nach Gl. (2.26) gilt daher  $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ , mit der Wellenlänge  $\lambda_0$  im Vakuum.

Die Polarisation der einfallenden Welle wird durch den Winkel  $\delta$  festgelegt. Im Fall  $\delta = 0^\circ$  spricht man von  $s$ - oder TE-Polarisation und bei  $\delta = 90^\circ$  von  $p$ - oder TM-Polarisation. Beliebige Polarisationen können durch Superposition zweier Wellen mit TE- bzw. TM-Polarisation erreicht werden.

Der Bereich  $y < 0$  wird als Substrat bezeichnet. Wie im Cover sind dort die elektromagnetischen Eigenschaften konstant und durch  $\varepsilon_s$  und  $\mu_s$  gegeben, wobei es sich bei diesen Größen um Tensoren zweiter Stufe handeln kann.

Die Amplituden der kartesischen Feldkomponenten des einfallenden Feldes sind für eine ebene Welle mit normierter Amplitude  $|\mathbf{E}^{(i)}| = 1$  gegeben durch

$$E_x^{(i)} = \sin \delta \cos \phi \cos \psi + \cos \delta \sin \psi, \quad (4.10)$$

$$E_y^{(i)} = \sin \delta \sin \phi, \quad (4.11)$$

$$E_z^{(i)} = \cos \delta \cos \psi - \sin \delta \cos \phi \sin \psi. \quad (4.12)$$

Die Feldkomponenten von  $\mathbf{H}^{(i)}$  ergeben sich dann aus Gl. (2.29) mit Gl. (2.9) zu

$$\mathbf{H}^{(i)} = \frac{1}{\omega \mu_c} (\mathbf{k}_i \times \mathbf{E}^{(i)}). \quad (4.13)$$

### Rayleigh-Entwicklung in Cover und Substrat

Im Bereich des Covers und des Substrats, welches vorläufig als isotrop angenommen wird, müssen alle Feldkomponenten  $U(\mathbf{r}, \omega)$  des elektromagnetischen Feldes nach Abschnitt 2.1 die Helm-

holtzgleichung (2.15) erfüllen. Die einzelnen Feldkomponenten sind dabei, wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, durch Gln. (2.27–2.30) verknüpft. Aufgrund der Geometrie des Problems sind die Felder bis auf einen Phasenfaktor durch den schrägen Einfall periodisch in  $x$  mit der Gitterperiode  $d_x$ . Die Funktionen  $V(x, y)$ , welche die Feldkomponenten mit korrigierter Phase darstellen, sind somit strikt periodisch und können als Fourierreihen

$$V(x, y) = \exp(-i\alpha_0 x - i\gamma_0 z) U(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n(y) \exp(in \frac{2\pi}{d_x} x) \quad (4.14)$$

entwickelt werden. Oder anders ausgedrückt, die Feldkomponenten sind pseudoperiodische Funktionen von  $x$

$$U(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n(y) \exp(i\alpha_n x + i\gamma_0 z) \quad (4.15)$$

mit

$$\alpha_n = \alpha_0 + n \frac{2\pi}{d_x}. \quad (4.16)$$

Einsetzen von Gl. (4.15) in die Helmholtzgleichung (2.15) liefert

$$\left( \frac{d^2}{dy^2} + \beta_{j,n}^2 \right) U_n(y) = 0 \quad (4.17)$$

mit

$$\beta_{j,n}^2 = k_j^2 - \alpha_n^2 - \gamma_0^2 = n_j^2 k_0^2 - \alpha_n^2 - \gamma_0^2 \quad (4.18)$$

und  $j = c, s$  als Index für Cover bzw. Substrat und  $n_j$  dem in Gl. (2.21) definierten Brechungsindex.

Die allgemeine Lösung von Gl. (4.17) lautet

$$U_n(y) = a_n^{(j)} \exp(-i\beta_{j,n} y) + b_n^{(j)} \exp(i\beta_{j,n} y) \quad (4.19)$$

mit den unbekanntenen Konstanten  $a_n^{(j)}$  und  $b_n^{(j)}$ . Somit folgt aus Gl. (4.15) mit Gl. (4.19) für die Felder in Cover und Substrat die als *Rayleigh-Entwicklung* bekannte Darstellungsform

$$U^{(j)}(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n^{(j)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_{j,n} y + i\gamma_0 z) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n^{(j)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_{j,n} y + i\gamma_0 z) \quad (4.20)$$

Die Entwicklungskoeffizienten in Gl. (4.20) werden deshalb auch *Rayleigh-Koeffizienten* genannt. Der erste Teil von Gl. (4.20) ist mit in negative  $y$ -Achsenrichtung propagierenden oder evaneszenten Wellen verknüpft, während der zweite Teil in positive  $y$ -Achsenrichtung propagierende oder evaneszente Wellen beschreibt.

Die Feldkomponenten im Cover lassen sich somit als Superposition einer einfallenden ebenen Welle und reflektierten ebenen Wellen mit den unbekanntenen Amplituden  $b_n^{(c)}$ , also als

$$U^{(c)}(x, y, z) = a_0^{(c)} \exp(i\alpha_0 x - i\beta_0 y + i\gamma_0 z) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n^{(c)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_{r,n} y + i\gamma_0 z) \quad (4.21)$$

schreiben. Die Koeffizienten  $a_0^{(c)}$  der einzelnen Feldkomponenten sind dabei durch Gln. (4.10–4.12) und Gl. (4.13) gegeben. Nach Gl. (4.18) handelt es sich bei  $\alpha_n^2 + \gamma_0^2 > n_c^2 k_0^2$  um evaneszente

Beugungsordnungen, da  $\beta_{r,n}$  in Gl. (4.21) rein imaginär ist. Im Substrat ist das Feld als Summe der transmittierten Wellen

$$U^{(s)}(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n^{(s)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_{t,n} y + i\gamma_0 z) \quad (4.22)$$

darzustellen. Bei  $\alpha_n^2 + \gamma_0^2 > n_s^2 k_0^2$  handelt es sich um evaneszente Beugungsordnungen. Die Wellenvektoren der reflektierten Beugungsordnungen  $\mathbf{k}_{r,n} = (\alpha_n, \beta_{r,n}, \gamma_0)$  und der transmittierten Beugungsordnungen  $\mathbf{k}_{t,n} = (\alpha_n, \beta_{t,n}, \gamma_0)$  sind somit durch Gl. (4.16), (4.18) und (4.9) festgelegt.

Bei einem anisotropen Substrat wird  $f(\omega, \alpha_n, \beta_{t,n}, \gamma_0) = 0$ , durch Gl. (2.37) verlangt. Es handelt sich für jedes Paar  $(\alpha_n, \gamma_0)$  um ein Polynom 4. Ordnung in  $\beta_{t,n}$ . Zwei Lösungen sind dabei mit ebenen Wellen verbunden, die Energie in negative  $y$ -Achsenrichtung transportieren oder evaneszent sind. Bei ihnen handelt es sich also um die transmittierten Beugungsordnungen. Die Behandlung eines anisotropen Substrats erfolgt detailliert in Abschnitt 5.3.

### Propagation im modulierten Bereich

Im modulierten Bereich ( $0 \leq y \leq a$ ) müssen Gln. (4.1) erfüllt werden. Aus dem gleichen Grund wie bei der Rayleigh-Entwicklung handelt es sich bei den Feldkomponenten um pseudoperiodische Funktionen von  $x$  [1, 10], welche in der Form von Gl. (4.15) dargestellt werden können. Berücksichtigt man nur eine endliche Zahl von Fouriermoden lassen sich die Felder also durch

$$U(x, y, z) \approx \sum_{n=-N}^N U_n(y) \exp(i\alpha_n x + i\gamma_0 z) \quad (4.23)$$

mit  $\alpha_n$  aus Gl. (4.16) annähern, wobei  $U$  für alle in Gln. (4.1) vorkommenden Feldkomponenten steht und die Zahl  $N$  die Anzahl der berücksichtigten Fourierkoeffizienten beschränkt. Durch Einführen von Vektoren  $[U] \in \mathbb{C}^K$  mit den  $K = 2N + 1$  Fourierkoeffizienten als Komponenten in der Form

$$[U] = \left( U_{-N}(y) \ \dots \ U_0(y) \ \dots \ U_N(y) \right)^T \quad (4.24)$$

werden Gln. (4.1) aufgrund der Linearität der Differentiation zu Gln. (4.2).

Wie man an Gl. (4.23) sieht, wird die Differentiation nach  $x$  im Fourierraum zu einer Multiplikation von  $U_n$  mit  $i\alpha_n$ , analog eine Differentiation nach  $z$  zu einer Multiplikation mit  $i\gamma_0$ .

Gln. (4.2) werden damit für ein Liniengitter zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial [E_z]}{\partial y} - i\gamma_0 [E_y] &= i\omega [B_x], & \frac{\partial [H_z]}{\partial y} - i\gamma_0 [H_y] &= -i\omega [D_x], \\ i\gamma_0 [E_x] - i\alpha [E_z] &= i\omega [B_y], & i\gamma_0 [H_x] - i\alpha [H_z] &= -i\omega [D_y], \\ i\alpha [E_y] - \frac{\partial [E_x]}{\partial y} &= i\omega [B_z], & i\alpha [H_y] - \frac{\partial [H_x]}{\partial y} &= -i\omega [D_z], \end{aligned} \quad (4.25)$$

mit der Diagonalmatrix  $\alpha$  mit den Diagonalelementen  $\alpha_n$  aus Gl. (4.16).

Bei Gln. (4.25) handelt es sich um ein gewöhnliches lineares Differentialgleichungssystem 1. Ordnung. Zu seiner Lösung müssen die Materialgleichungen (2.8) und (2.9) ebenfalls im

reduzierten Fourierraum ausgedrückt werden.

Im Ortsraum sind diese durch

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx}(x, y) & \varepsilon_{xy}(x, y) & \varepsilon_{xz}(x, y) \\ \varepsilon_{yx}(x, y) & \varepsilon_{yy}(x, y) & \varepsilon_{yz}(x, y) \\ \varepsilon_{zx}(x, y) & \varepsilon_{zy}(x, y) & \varepsilon_{zz}(x, y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

und

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_{xx}(x, y) & \mu_{xy}(x, y) & \mu_{xz}(x, y) \\ \mu_{yx}(x, y) & \mu_{yy}(x, y) & \mu_{yz}(x, y) \\ \mu_{zx}(x, y) & \mu_{zy}(x, y) & \mu_{zz}(x, y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

gegeben.

Bei den Elementen  $\varepsilon_{ij}$  und  $\mu_{ij}$  handelt es sich um periodische Funktionen in  $x$ . Da an Grenzflächen zwischen zwei Materialien  $\varepsilon_{ij}$ ,  $\mu_{ij}$ , sowie die  $x$ - und  $y$ -Komponenten von  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  im Allgemeinen unstetig sind, handelt es sich bei ihren Produkten im Allgemeinen um Produkte vom Typ 3 in Li's Klassifizierung [19].

Das Vorgehen, um Gl. (4.26) und (4.27) ohne das Auftreten von Produkten unstetiger Funktionen vom Typ 3 zu formulieren, soll nun anhand von Gl. (4.26) dargestellt werden. Das Vorgehen bei Gl. (4.27) ist völlig analog.

Nach Abschnitt 2 handelt es sich an Grenzflächen zweier Materialien bei der Tangentialkomponente von  $\mathbf{E}$  und der Normalkomponente von  $\mathbf{D}$  um stetige Felder. Führt man an den Grenzflächen einen Normalenvektor  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, 0)$ , sowie die Tangentialvektoren  $\mathbf{t}_1 = (n_y, -n_x, 0)$  und  $\mathbf{t}_2 = (0, 0, 1)$  ein (siehe Abb. 4.2), sind die Beträge dieser Feldkomponenten gegeben durch

$$E_{t_1} = \mathbf{t}_1^T \mathbf{E}, \quad (4.28)$$

$$D_n = \mathbf{n}^T \mathbf{D} = \mathbf{n}^T \varepsilon \mathbf{E}, \quad (4.29)$$

$$E_{t_2} = \mathbf{t}_2^T \mathbf{E} = E_z, \quad (4.30)$$

oder in Matrixschreibweise unter Berücksichtigung der Definition des Normalenvektors bzw. der Tangentialvektoren

$$\begin{pmatrix} E_{t_1} \\ D_n \\ E_{t_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_y & -n_x & 0 \\ n_x \varepsilon_{xx} + n_y \varepsilon_{yx} & n_x \varepsilon_{xy} + n_y \varepsilon_{yy} & n_x \varepsilon_{xz} + n_y \varepsilon_{yz} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Durch Definition kann Gl. (4.31) abgekürzt als

$$\mathbf{f}^{(e)} = \mathbf{A}^{(e)-1} \mathbf{E} \quad (4.32)$$

geschrieben werden, wobei die Definition von  $\mathbf{f}^{(e)}$ ,  $\mathbf{A}^{(e)-1}$  durch Vergleich mit Gl. (4.31) deutlich wird.

Um die Gültigkeit von Gl. (4.32) auf den Bereich abseits der Grenzflächen zu erweitern, müssen die Vektoren  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{t}_1$  und  $\mathbf{t}_2$  im ganzen Raum definiert werden. Dabei ist zu beachten, dass diese stetig im Bereich der Grenzflächen sind und es sich stets um Einheitsvektoren handelt [1].

Multiplikation von Gl. (4.32) mit  $\mathbf{A}^{(e)}$  gibt

$$\mathbf{E} = \mathbf{A}^{(e)} \mathbf{f}^{(e)} \quad (4.33)$$

oder ausgeschrieben

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{x1}^{(e)} & a_{x2}^{(e)} & a_{x3}^{(e)} \\ a_{y1}^{(e)} & a_{y2}^{(e)} & a_{y3}^{(e)} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{t_1} \\ D_n \\ E_{t_2} \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

mit<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} a_{x1}^{(e)} &= \frac{1}{\xi^{(e)}}(n_x \varepsilon_{xy} + n_y \varepsilon_{yy}), & a_{x2}^{(e)} &= \frac{n_x}{\xi^{(e)}}, & a_{x3}^{(e)} &= -\frac{n_x}{\xi^{(e)}}(n_x \varepsilon_{xz} + n_y \varepsilon_{yz}), \\ a_{y1}^{(e)} &= -\frac{1}{\xi^{(e)}}(n_x \varepsilon_{xx} + n_y \varepsilon_{yx}), & a_{y2}^{(e)} &= \frac{n_y}{\xi^{(e)}}, & a_{y3}^{(e)} &= -\frac{n_y}{\xi^{(e)}}(n_x \varepsilon_{xz} + n_y \varepsilon_{yz}) \end{aligned}$$

und

$$\xi^{(e)} = \det(\mathbf{A}^{(e)-1}) = \varepsilon_{xx} n_x^2 + (\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}) n_x n_y + \varepsilon_{yy} n_y^2.$$

Aus Gl. (4.33) folgt

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{A}^{(e)} \mathbf{f}^{(e)} = \mathbf{B}^{(e)} \mathbf{f}^{(e)} \quad (4.35)$$

oder ausgeschrieben

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{x1}^{(e)} & b_{x2}^{(e)} & b_{x3}^{(e)} \\ b_{y1}^{(e)} & b_{y2}^{(e)} & b_{y3}^{(e)} \\ b_{z1}^{(e)} & b_{z2}^{(e)} & b_{z3}^{(e)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{t_1} \\ D_n \\ E_{t_2} \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

mit den Komponenten  $b_{ij}^{(e)}$  der Matrix  $\mathbf{B}^{(e)} = \varepsilon \mathbf{A}^{(e)}$ , die sich ergeben zu

$$b_{ik} = \varepsilon_{ix} a_{xk}^{(e)} + \varepsilon_{iy} a_{yk}^{(e)} \quad (4.37)$$

$$b_{i3} = \varepsilon_{ix} a_{x3}^{(e)} + \varepsilon_{iy} a_{y3}^{(e)} + \varepsilon_{iz} \quad (4.38)$$

mit  $i = x, y, z$  und  $k = 1, 2$  [40].

Da es sich bei den Komponenten von  $\mathbf{f}^{(e)}$  um stetige Funktionen handelt, sind alle Produkte in Gl. (4.34) und Gl. (4.36) vom Typ 1 und können deshalb im reduzierten Fourierraum durch die Laurent Regel (3.4) dargestellt werden. Aus ihnen erhält man somit die Materialgleichung (4.26) im reduzierten Fourierraum

$$\begin{pmatrix} [D_x] \\ [D_y] \\ [D_z] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{xx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{xz}^{(e)} \\ \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{yy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} \\ \mathbf{Q}_{zx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{zy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{zz}^{(e)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [E_z] \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

Diese kann kompakt in der Form

$$[\mathbf{D}] = \mathbf{Q}^{(e)} [\mathbf{E}] \quad (4.40)$$

geschrieben werden. Der Vektor  $[\mathbf{U}] \in \mathbb{C}^{3K}$  ist somit aus den Vektoren  $[U_x]$ ,  $[U_y]$  und  $[U_z]$  zusammengesetzt.

Die Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$  ist nach Gl. (4.34) und Gl. (4.36) gegeben durch

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \begin{pmatrix} \llbracket b_{x1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{x2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{x3}^{(e)} \rrbracket \\ \llbracket b_{y1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{y2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{y3}^{(e)} \rrbracket \\ \llbracket b_{z1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{z2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{z3}^{(e)} \rrbracket \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \llbracket a_{x1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{x2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{x3}^{(e)} \rrbracket \\ \llbracket a_{y1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{y2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{y3}^{(e)} \rrbracket \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (4.41)$$

Um Gl. (4.27) im reduzierten Fourierraum ebenfalls in der Form

$$[\mathbf{B}] = \mathbf{Q}^{(h)} [\mathbf{H}] \quad (4.42)$$

---

<sup>5</sup>Die Elemente von  $\mathbf{A}^{(e)}$  ergeben sich durch Inversion von  $\mathbf{A}^{(e)-1}$  in Gl. (4.31). Das Ergebnis ist u.a. zu finden in [1, 39, 40, 41].



zu erhalten, ist das Vorgehen völlig analog. Durch Einführen der kontinuierlichen Funktionen  $H_{t_1}$ ,  $B_n$  und  $H_{t_2}$  erhält man analoge Gleichungen zu Gln. (4.28–4.41) mit folgenden Änderungen:  $\varepsilon \rightarrow \mu$ ,  $E \rightarrow H$ ,  $D \rightarrow B$  und Index  $e \rightarrow h$ .

Die Materialgleichungen der Form (4.40) und (4.42) können nun in Gln. (4.25) eingesetzt werden.

Beachtet man, dass sich aus ihnen

$$[E_y] = \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \left( [D_y] - \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} [E_x] - \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} [E_z] \right), \quad (4.43)$$

und

$$[H_y] = \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \left( [B_y] - \mathbf{Q}_{yx}^{(h)} [H_x] - \mathbf{Q}_{yz}^{(h)} [H_z] \right) \quad (4.44)$$

ergibt, und die Größen  $[D_y]$  und  $[B_y]$  in Gln. (4.25) in Abhängigkeit von  $x$ - und  $z$ -Feldkomponenten gegeben sind, können die  $y$ -Feldkomponenten in Gln. (4.25) eliminiert werden.

Es ergibt sich folgendes System von Differentialgleichungen

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} & \mathbf{M}_{13} & \mathbf{M}_{14} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} & \mathbf{M}_{23} & \mathbf{M}_{24} \\ \mathbf{M}_{31} & \mathbf{M}_{32} & \mathbf{M}_{33} & \mathbf{M}_{34} \\ \mathbf{M}_{41} & \mathbf{M}_{42} & \mathbf{M}_{43} & \mathbf{M}_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

mit den Submatrizen der Matrix  $\mathbf{M}(y)$  durch

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{11} &= -\alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} - \mathbf{Q}_{zy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \gamma_0, \\ \mathbf{M}_{12} &= -\alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} + \mathbf{Q}_{zy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \alpha, \\ \mathbf{M}_{13} &= -\frac{1}{\omega} \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \gamma_0 + \omega \mathbf{Q}_{zy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(h)} - \omega \mathbf{Q}_{zx}^{(h)}, \\ \mathbf{M}_{14} &= \frac{1}{\omega} \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \alpha + \omega \mathbf{Q}_{zy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(h)} - \omega \mathbf{Q}_{zz}^{(h)}, \\ \mathbf{M}_{21} &= -\gamma_0 \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} + \mathbf{Q}_{xy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \gamma_0, \\ \mathbf{M}_{22} &= -\gamma_0 \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} - \mathbf{Q}_{xy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \alpha, \\ \mathbf{M}_{23} &= -\frac{\gamma_0}{\omega} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \gamma_0 - \omega \mathbf{Q}_{xy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(h)} + \omega \mathbf{Q}_{xx}^{(h)}, \\ \mathbf{M}_{24} &= \frac{\gamma_0}{\omega} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \alpha - \omega \mathbf{Q}_{xy}^{(h)} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(h)} + \omega \mathbf{Q}_{xz}^{(h)}, \\ \mathbf{M}_{31} &= -\omega \mathbf{Q}_{zy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} + \omega \mathbf{Q}_{zx}^{(e)} + \frac{1}{\omega} \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \gamma_0, \\ \mathbf{M}_{32} &= -\omega \mathbf{Q}_{zy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} + \omega \mathbf{Q}_{zz}^{(e)} - \frac{1}{\omega} \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \alpha, \\ \mathbf{M}_{33} &= -\mathbf{Q}_{zy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \gamma_0 - \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(h)}, \\ \mathbf{M}_{34} &= \mathbf{Q}_{zy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \alpha - \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(h)}, \\ \mathbf{M}_{41} &= \omega \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} - \omega \mathbf{Q}_{xx}^{(e)} + \frac{\gamma_0}{\omega} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \gamma_0, \\ \mathbf{M}_{42} &= \omega \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} - \omega \mathbf{Q}_{xz}^{(e)} - \frac{\gamma_0}{\omega} \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \alpha, \\ \mathbf{M}_{43} &= \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \gamma_0 - \gamma_0 \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(h)}, \\ \mathbf{M}_{44} &= -\mathbf{Q}_{xy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \alpha - \gamma_0 \mathbf{Q}_{yy}^{(h)-1} \mathbf{Q}_{yz}^{(h)}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Diese Gleichung kann abgekürzt als

$$\frac{d}{dy}\mathbf{f}(y) = i\mathbf{M}(y)\mathbf{f}(y) \quad (4.47)$$

geschrieben werden. Der Vektor  $\mathbf{f}(y) \in \mathbb{C}^{4K}$  ist somit aus den  $y$ -abhängigen Fourierkoeffizienten  $[E_x]$ ,  $[E_z]$ ,  $[H_x]$  und  $[H_z]$  zusammengesetzt.

Bei Gl. (4.47) bzw. (4.45) mit Gln. (4.46) handelt es sich um die allgemeinste Formulierung der Differentiellen Methode für ein Liniengitter. Werden  $\mathbf{Q}^{(e)}$  und  $\mathbf{Q}^{(h)}$  in der Form von (4.41) bei der Auswertung von Gl. (4.47) verwendet, wird die Propagation für Liniengitter aus anisotropen Materialien beschrieben.

Das gesamte Beugungsproblem besteht somit darin, Gl. (4.47) unter Beachtung der Randbedingungen an Ober- und Unterseite des modulierten Bereichs zu lösen. Bevor jedoch weitere Betrachtungen zur Lösung des Problems in Abschnitt 5 angestellt werden, sollen noch einige Anmerkungen gemacht und Spezialfälle betrachtet werden. Der Spezialfall eines anisotropen Substrats sowie die Berechnung von Nahfeldern werden in den Abschnitten 5.3 und 7 behandelt.

### 4.2.2 Aufstellen des Normalenvektorfeldes

Wie oben im Text erwähnt, muss ein Normalenvektor im gesamten modulierten Bereich definiert werden, nicht nur an den Grenzflächen zweier Medien. Ist im Bereich  $y_j \leq y \leq y_{j+1}$  die Grenzfläche zweier Medien durch eine Funktion  $g(x)$  vorgegeben, kann in diesem ein Normalenvektor

$$\mathbf{n} = \frac{(-\frac{dg}{dx}, 1, 0)}{\sqrt{1 + (\frac{dg}{dx})^2}} \quad (4.48)$$

definiert werden [1, 44]. Die Komponenten des Normalenvektors sind dabei insbesondere keine Funktionen von  $y$ . Besonders im Fall isotroper Medien müssen deshalb in diesem Bereich die Normalenvektor-Toeplitzmatrizen der Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$  in Gl. (4.57) nur einmal bestimmt werden. Ist ein Aufstellen eines Normalenvektorfeldes auf diese Weise nicht möglich, kann numerisch ein möglichst glattes Feld generiert werden. Mögliche Vorgehensweisen dafür sind in Ref. [45, 46, 47, 48, 49] beschrieben.

### 4.2.3 Nichtmagnetische Materialien

Wenn  $\mu$  Diagonalform besitzt, mit konstantem  $\mu_{ii}$  für konstantes  $y$ , fällt in Gln. (4.46) fast die Hälfte der Terme weg, denn es gilt

$$\mathbf{Q}_{ij}^{(h)} = \begin{cases} \mathbf{0} & i \neq j \\ \mu_{ii}\mathbf{I} & i = j \end{cases} \quad (4.49)$$

Darunter fällt vor allem der Spezialfall nichtmagnetischer Materialien mit  $\mu = \mu_0\mathbf{I}$ . Dieser Fall ist besonders bei optischen Frequenzen von besonderer Bedeutung, da nahezu alle natürlichen Materialien in diesem Frequenzbereich als nichtmagnetisch anzusehen sind [32, 9].

#### 4.2.4 Isotrope Materialien

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, welche Änderungen sich ergeben, wenn lediglich isotrope Materialien betrachtet werden. Da in der Regel alle Materialien bei optischen Frequenzen als nichtmagnetisch betrachtet werden können, wird diese Eigenschaft in diesem Abschnitt für alle Materialien angenommen. Eine Erweiterung auf magnetische Materialien ist aufgrund der Symmetrie der Gleichungen jedoch ohne Probleme durchzuführen.

Während somit nach Abschnitt 4.2.3  $\mathbf{Q}^{(h)} = \mu_0 \mathbf{I}$  ist und fast die Hälfte der Terme in Gl. (4.46) wegfällt, muss nun lediglich noch die Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$  für den Fall isotroper Materialien ermittelt werden. Diese kann als Spezialfall von Gl. (4.41) betrachtet werden [1, 39]. Sie kann jedoch auch leicht unter Beachtung von Li's Regeln der Fourier-Faktorisierung hergeleitet werden. Nach Gl. (2.8) gilt bei konstantem  $y$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{E}_t + \varepsilon \mathbf{E}_n \quad (4.50)$$

mit  $\varepsilon = \varepsilon(x)$  als skalarer Funktion von  $x$ . Die elektrische Feldstärke  $\mathbf{E}$  wurde dabei in eine Tangential- und eine Normalkomponente aufgeteilt. Diese sind mit dem Normalenvektor aus Abb. 4.2 gegeben durch

$$\mathbf{E}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \mathbf{E}, \quad (4.51)$$

$$\mathbf{E}_n = \mathbf{nn}^T \mathbf{E}. \quad (4.52)$$

Wie oben im Text beschrieben, wird das Normalenvektorfeld im ganzen Raum definiert und ist zumindest an den Grenzflächen zweier Materialien stetig. Bei der Tangentialkomponente  $\mathbf{E}_t$  handelt es sich nach Abschnitt 2 um eine an den Grenzflächen stetige Funktion. Beim ersten Teil in Gl. (4.50) handelt es sich somit um ein Produkt vom Typ 1. Der zweite Teil stellt die Normalkomponente der elektrischen Verschiebungsdichte  $\mathbf{D}_n$  dar, welche nach Abschnitt 2 stetig an Grenzflächen ist. Es handelt sich also um ein stetiges Produkt zweier unstetiger Funktionen, d.h. ein Typ 2 Produkt, weshalb die Inversen-Regel zur Fourier-Faktorisierung verwendet werden sollte. Aus Gl. (4.50) wird damit

$$[\mathbf{D}] = [\varepsilon] [\mathbf{E}_t] + \left[ \frac{1}{\varepsilon} \right]^{-1} [\mathbf{E}_n] \quad (4.53)$$

mit

$$[\mathbf{E}_t] = ([\mathbf{I}] - [\mathbf{nn}^T]) [\mathbf{E}], \quad (4.54)$$

$$[\mathbf{E}_n] = [\mathbf{nn}^T] [\mathbf{E}]. \quad (4.55)$$

Einsetzen von Gl. (4.54) und (4.55) in (4.53) liefert

$$[\mathbf{D}] = \mathbf{Q}^{(e)} [\mathbf{E}] \quad (4.56)$$

mit der gesuchten Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$ , die ausgeschrieben die Form

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \begin{pmatrix} [\varepsilon][n_y^2] + [1/\varepsilon]^{-1}[n_x^2] & -([\varepsilon] - [1/\varepsilon]^{-1})[n_x n_y] & \mathbf{0} \\ -([\varepsilon] - [1/\varepsilon]^{-1})[n_x n_y] & [\varepsilon][n_x^2] + [1/\varepsilon]^{-1}[n_y^2] & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & [\varepsilon] \end{pmatrix} \quad (4.57)$$

hat [1, 39]. Dabei wurde ausgenutzt, dass  $n_x^2 + n_y^2 = 1$  gilt [1].

Die Matrix  $\mathbf{M}(y)$  ist durch Gl. (4.46) gegeben und die Matrizen  $\mathbf{Q}_{ij}^{(e)}$  sind durch Gl. (4.57)

festgelegt. Aufgrund von  $\mathbf{Q}_{xz}^{(e)} = \mathbf{0} = \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} = \mathbf{Q}_{zx}^{(e)} = \mathbf{Q}_{zy}^{(e)}$  ist  $\mathbf{M}_{12} = \mathbf{0} = \mathbf{M}_{22} = \mathbf{M}_{33} = \mathbf{M}_{34}$ . Es ergibt sich somit

$$\mathbf{M}(y) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{M}_{13} & \mathbf{M}_{14} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{0} & \mathbf{M}_{23} & \mathbf{M}_{24} \\ \mathbf{M}_{31} & \mathbf{M}_{32} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{M}_{41} & \mathbf{M}_{42} & \mathbf{M}_{43} & \mathbf{M}_{44} \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{11} &= -\alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(e)}, & \mathbf{M}_{13} &= -\frac{\gamma_0}{\omega} \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1}, \\ \mathbf{M}_{14} &= \frac{1}{\omega} \alpha \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \alpha - \omega \mu_0 \mathbf{I}, & \mathbf{M}_{21} &= -\gamma_0 \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(e)}, \\ \mathbf{M}_{23} &= -\frac{\gamma_0^2}{\omega} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} + \omega \mu_0 \mathbf{I}, & \mathbf{M}_{24} &= \frac{\gamma_0}{\omega} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \alpha, \\ \mathbf{M}_{31} &= \frac{\gamma_0 \alpha}{\omega \mu_0}, & \mathbf{M}_{32} &= \omega \mathbf{Q}_{zz}^{(e)} - \frac{\alpha^2}{\omega \mu_0}, \\ \mathbf{M}_{41} &= \omega \left( \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} - \mathbf{Q}_{xx}^{(e)} \right) + \frac{\gamma_0^2}{\omega \mu_0} \mathbf{I}, & \mathbf{M}_{42} &= -\frac{\gamma_0 \alpha}{\omega \mu_0}, \\ \mathbf{M}_{43} &= \gamma_0 \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1}, & \mathbf{M}_{44} &= -\mathbf{Q}_{xy}^{(e)} \mathbf{Q}_{yy}^{(e)-1} \alpha. \end{aligned}$$

Wenn zusätzlich der Azimuthwinkel  $\psi = 0^\circ$  ist, und damit nach Gl. (4.9)  $\gamma_0 = 0$ , ist zusätzlich  $\mathbf{M}_{13} = \mathbf{0} = \mathbf{M}_{21} = \mathbf{M}_{24} = \mathbf{M}_{31} = \mathbf{M}_{42} = \mathbf{M}_{43}$  und Gl. (4.47) mit  $\mathbf{M}(y)$  nach Gl. (4.58) entkoppelt in zwei Teilsysteme für TE- und TM-Polarisation [1, 39, 41].

#### 4.2.5 Konstante Koeffizienten und RCWA

Ist in einem Bereich die Permittivität  $\varepsilon$  keine Funktion von  $y$ , ist ein Normalenvektor in diesem durch  $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$  gegeben. Alle Grenzflächen zwischen Materialien sind damit parallel zur  $zy$ -Ebene. Damit sind in diesem Bereich die Matrizen  $\mathbf{Q}^{(e)}$  und  $\mathbf{M}$  konstant. Weiterhin werden alle Materialien als nichtmagnetisch betrachtet, so dass Gl. (4.49) gilt. Gl. (4.47) hat damit in diesem Bereich konstante Koeffizienten.

Um die konstante Matrix  $\mathbf{M}$  zu bestimmen, muss somit noch die konstante Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$  ermittelt werden.

#### Anisotrope Materialien

Es ergibt sich nach Ref. [50] ohne Herleitung

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{xx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{xz}^{(e)} \\ \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{yy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} \\ \mathbf{Q}_{zx}^{(e)} & \mathbf{Q}_{zy}^{(e)} & \mathbf{Q}_{zz}^{(e)} \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}_{xx}^{(e)} &= \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1}, & \mathbf{Q}_{yy}^{(e)} &= \left[ \frac{\varepsilon_{yx}}{\varepsilon_{xx}} \right] \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1} \left[ \frac{\varepsilon_{xy}}{\varepsilon_{xx}} \right] + \left[ \frac{\varepsilon_{xx}\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{yx}\varepsilon_{xy}}{\varepsilon_{xx}} \right], \\
\mathbf{Q}_{xy}^{(e)} &= \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1} \left[ \frac{\varepsilon_{xy}}{\varepsilon_{xx}} \right], & \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} &= \left[ \frac{\varepsilon_{yx}}{\varepsilon_{xx}} \right] \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1} \left[ \frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_{xx}} \right] + \left[ \frac{\varepsilon_{xx}\varepsilon_{yz} - \varepsilon_{yx}\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_{xx}} \right], \\
\mathbf{Q}_{xz}^{(e)} &= \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1} \left[ \frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_{xx}} \right], & \mathbf{Q}_{zy}^{(e)} &= \left[ \frac{\varepsilon_{zx}}{\varepsilon_{xx}} \right] \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1} \left[ \frac{\varepsilon_{xy}}{\varepsilon_{xx}} \right] + \left[ \frac{\varepsilon_{xx}\varepsilon_{zy} - \varepsilon_{zx}\varepsilon_{xy}}{\varepsilon_{xx}} \right], \\
\mathbf{Q}_{yx}^{(e)} &= \left[ \frac{\varepsilon_{yx}}{\varepsilon_{xx}} \right] \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1}, & \mathbf{Q}_{zz}^{(e)} &= \left[ \frac{\varepsilon_{zx}}{\varepsilon_{xx}} \right] \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1} \left[ \frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_{xx}} \right] + \left[ \frac{\varepsilon_{xx}\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{zx}\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_{xx}} \right], \\
\mathbf{Q}_{zx}^{(e)} &= \left[ \frac{\varepsilon_{zx}}{\varepsilon_{xx}} \right] \left[ \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \right]^{-1}.
\end{aligned}$$

Alternativ kann auch Gl. (4.41) zur Bestimmung von  $\mathbf{Q}^{(e)}$  verwendet werden. Die hier angegebene Variante erfordert jedoch weniger Rechenoperationen.

### Isotrope Materialien

Nach Abschnitt 2 handelt es sich bei  $E_y$  und  $E_z$  um stetige Feldkomponenten, während  $E_x$  unstetig ist. Das Produkt  $\varepsilon E_x = D_x$  ist jedoch eine stetige Funktion. Bei den Produkten  $[D_i] = [\varepsilon E_i]$  handelt es sich damit für  $i = y, z$  um Typ 1 Produkte und  $i = x$  um ein Typ 2 Produkt und die Inversen-Regel sollte verwendet werden. Die Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$  ist somit durch

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \begin{pmatrix} \llbracket 1/\varepsilon \rrbracket^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \llbracket \varepsilon \rrbracket & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \llbracket \varepsilon \rrbracket \end{pmatrix} \quad (4.60)$$

gegeben. Gl. (4.60) kann auch als Spezialfall von Gl. (4.59) angesehen werden, mit  $\varepsilon_{ii} = \varepsilon$  und  $\varepsilon_{ij} = 0, i \neq j$ . Ebenso handelt es sich um den Spezialfall von Gl. (4.57) mit  $n_x = 1$  und  $n_y = 0$ .

### Modale Darstellungsform

Die Einträge der konstanten Matrix  $\mathbf{M}$  finden sich dann in beiden Fällen mit den oben aufgeführten Matrizen  $\mathbf{Q}^{(e)}$  und  $\mathbf{Q}^{(h)}$  aus Gl. (4.49) durch Gln. (4.46). Das gewöhnliche Differentialgleichungssystem hat konstante Koeffizienten und kann, unter der Annahme, dass  $\mathbf{M}$  diagonalisierbar ist, durch Bestimmen der Eigenwerte und -vektoren von  $\mathbf{M}$  gelöst werden.

Handelt es sich bei dem Bereich speziell um den gesamten modulierten Bereich  $[0, a]$  ergibt sich

$$\mathbf{f}(y) = \exp(i\mathbf{M}y)\mathbf{f}(0) = \mathbf{W} \exp(i\mathbf{\Lambda}y)\mathbf{W}^{-1}\mathbf{f}(0). \quad (4.61)$$

Dabei hat die Matrix  $\mathbf{W}$  die Eigenvektoren von  $\mathbf{M}$  als Spalten und  $\exp(i\mathbf{\Lambda}y)$  ist eine Diagonalmatrix mit den Elementen  $\exp(i\lambda_m y)$ , wobei es sich bei  $\lambda_m$  um den  $m$ -ten Eigenwert von  $\mathbf{M}$ , zugehörig zur  $m$ -ten Spalte von  $\mathbf{W}$ , handelt. Das gesamte Übertragungsverhalten des modulierten Bereichs ist somit durch  $\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{W} \exp(i\mathbf{\Lambda}a)\mathbf{W}^{-1}$  gegeben.

Beliebige Profilformen können durch ein stufenförmiges Profil so angenähert werden, dass in den einzelnen Teilbereichen  $y_j \leq y \leq y_{j+1}$  die Matrix  $\mathbf{M}$  konstant ist. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(y) &= \exp(i\mathbf{M}_j(y - y_j)) \cdots \exp(i\mathbf{M}_2 a_2) \exp(i\mathbf{M}_1 a_1) \mathbf{f}(0) \\
&= \mathbf{W}^{(j)} \exp(i\mathbf{\Lambda}_j(y - y_j)) \mathbf{W}^{(j)-1} \cdots \mathbf{W}^{(2)} \exp(i\mathbf{\Lambda}_2 a_2) \mathbf{W}^{(2)-1} \mathbf{W}^{(1)} \exp(i\mathbf{\Lambda}_1 a_1) \mathbf{W}^{(1)-1} \mathbf{f}(0).
\end{aligned} \quad (4.62)$$

Die Größe  $a_j = y_{j+1} - y_j$  stellt die Länge des  $j$ -ten Teilintervalls dar. Innerhalb eines jeden Teilintervalls wird somit das Problem durch Lösen eines Eigenwertproblems dargestellt. Durch Anwenden von Gl. (4.62) kann somit das Übertragungsverhalten des gesamten modulierten Bereichs ohne numerische Integration ermittelt werden. Da es jedoch im Allgemeinen zu numerische Problemen aufgrund von exponentiell wachsenden Termen kommt, die mit Eigenwerten mit negativem Imaginärteil verbunden sind, muss zur Lösung ebenfalls eine Variante des S-Matrix Algorithmus verwendet werden [17, 18, 26, 27]. Dieses wird detaillierter in Abschnitt 5 erläutert.

Wird Gl. (4.47) ohne numerische Integration gelöst, wird das Verfahren auch *rigorous-coupled wave analysis* (RCWA) oder *Fourier modal method* (FMM) genannt. Eine gute Konvergenz der Ergebnisse bei einer stufenförmigen Approximation glatter Grenzflächen ist jedoch aufgrund von Felderhöhungen des elektrischen Feldes an den Ecken metallischer Strukturen nicht immer gegeben und wird in Ref. [29] anhand eines sinusförmigen Aluminiumgitters als Beispiel untersucht. Dieses Beispiel wird ebenfalls in Abschnitt 8.1.1 betrachtet.

### 4.3 Kreuzgitter

Die Behandlung von Kreuzgittern erfolgt im Wesentlichen völlig analog zu der von Liniengittern. Aus diesem Grund wird die Behandlung von Kreuzgittern in diesem Abschnitt nicht so detailliert wie für Liniengitter ausgeführt. Es sollen viel mehr lediglich die Unterschiede herausgestellt werden. Die Betrachtungen folgen der Darstellung in Abschnitt 4.2 für Liniengitter.

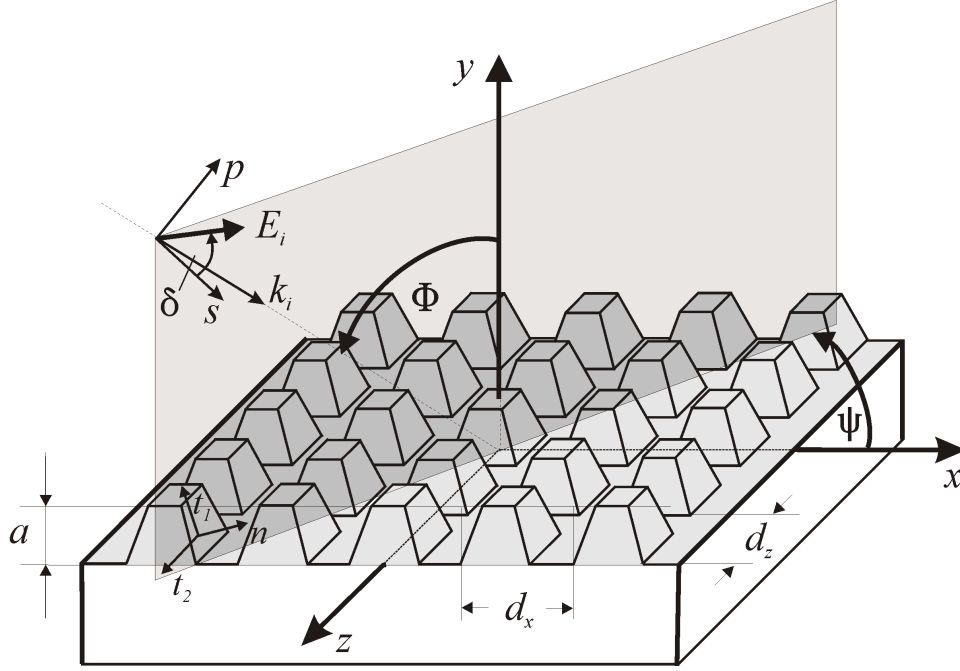
Obwohl die Formulierung für Liniengitter ohne große Probleme auf Kreuzgitter erweitert werden kann, ist die Behandlung von Kreuzgittern auch heute noch mit großen Schwierigkeiten verbunden [51]. Der Grund ist der stark erhöhte Rechenzeit- und Speicherbedarf im Vergleich zu Liniengittern. Dies gilt in verstärktem Maße für Kreuzgitter aus anisotropen Materialien [51]. Der hohe Speicherbedarf beschränkt die maximale Anzahl der berücksichtigten Fouriermoden, so dass möglicherweise kein konvergiertes Ergebnis zu erhalten ist. Eine Behandlung von Kreuzgittern aus stark metallischen Materialien ist daher im Allgemeinen problematisch. Der hohe Rechenzeitbedarf bei einer großen Anzahl berücksichtigter Moden begrenzt die praktische Anwendbarkeit der Methode zum Lösen realer Probleme, da dort meist viele Rechnungen durchgeführt werden müssen.

#### 4.3.1 Kreuzgitter aus anisotropen Materialien

Die Geometrie des Problems für Kreuzgitter ist in Abb. 4.3 dargestellt. Die Beleuchtung erfolgt wiederum aus dem Cover ( $y > a$ ) durch eine ebene monochromatische Welle mit Wellenvektor  $\mathbf{k}_i = (\alpha_0, -\beta_0, \gamma_0)$ , dessen Komponenten durch Gln. (4.7–4.9) gegeben sind. Die Amplituden der Feldkomponenten der einfallenden Welle sind durch Gln. (4.10–4.12) und Gl. (4.13) festgelegt. Das Substrat ( $y < 0$ ) wird vorläufig als isotrop angenommen. Eine Behandlung des anisotropen Falls findet in Abschnitt 5.3 statt.

#### Rayleigh-Entwicklung in Cover und Substrat

Die Felder im isotropen homogenen Bereich des Covers und Substrats müssen die Helmholtzgleichung (2.15) erfüllen. Aufgrund der Geometrie des Gitters sind alle Feldkomponenten pseu-



**Abb. 4.3:** Geometrie eines Kreuzgitters. Dargestellt ist ein klassisches Relief-Beugungsgitter.

doperiodische Funktionen von  $x$  und  $z$  und lassen sich durch

$$U(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} U_{nm}(y) \exp(i\alpha_n x + i\gamma_m z) \quad (4.63)$$

mit

$$\alpha_n = \alpha_0 + n \frac{2\pi}{d_x}, \quad (4.64)$$

$$\gamma_m = \gamma_0 + m \frac{2\pi}{d_z} \quad (4.65)$$

darstellen. Die Größen  $d_x$  und  $d_z$  sind dabei die Gitterperioden in  $x$ - bzw.  $z$ -Achsenrichtung. Einsetzen von Gl. (4.63) in die Helmholtzgleichung (2.15) führt, wie im Fall eines Liniengitters, zur Rayleigh-Entwicklung. Für den Bereich des Covers ( $y > a$ ) ergibt sich

$$U^{(c)}(x, y, z) = a_0^{(c)} \exp(i\alpha_0 x - i\beta_0 y + i\gamma_0 z) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} b_{nm}^{(c)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_{r,nm} y + i\gamma_m z) \quad (4.66)$$

mit

$$\beta_{r,nm} = \sqrt{n_c^2 k_0^2 - \alpha_n^2 - \gamma_m^2} \quad (4.67)$$

und den unbekanntenen Rayleigh-Koeffizienten  $b_{nm}^{(c)}$ , die die Amplituden reflektierter ebener Wellen beschreiben. Für  $\alpha_n^2 + \gamma_m^2 > n_c^2 k_0^2$  handelt es sich um evaneszente Beugungsordnungen. Im Substrat ( $y < 0$ ) lautet die Rayleigh-Entwicklung

$$U^{(s)}(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{nm}^{(s)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_{t,nm} y + i\gamma_m z) \quad (4.68)$$

mit

$$\beta_{t,nm} = \sqrt{n_s^2 k_0^2 - \alpha_n^2 - \gamma_m^2} \quad (4.69)$$

und den Rayleigh-Koeffizienten  $a_{nm}^{(s)}$ , die Amplituden von transmittierten Wellen darstellen. Für  $\alpha_n^2 + \gamma_m^2 > n_s^2 k_0^2$  handelt es sich um evaneszente Ordnungen.

### Propagation im modulierten Bereich

Im modulierten Bereich ( $0 \leq y \leq a$ ) müssen die Feldkomponenten die Maxwellgleichungen (4.1) mit den Materialgleichungen (2.8) und (2.9) erfüllen. Die Feldkomponenten, die pseudoperiodische Funktionen von  $x$  und  $z$  sind, lassen sich mit einer endlichen Anzahl von Fouriermoden durch

$$U(x, y, z) \approx \sum_{n=-N_x}^{N_x} \sum_{m=-N_z}^{N_z} U_{nm}(y) \exp(i\alpha_n x + i\gamma_m z) \quad (4.70)$$

annähern. Die Zahlen  $N_x$  und  $N_z$  beschränken die bei der Rechnung berücksichtigte Anzahl von Moden. Wie bei Liniengittern werden Vektoren  $[U] \in \mathbb{C}^K$ , mit den  $K = (2N_x + 1)(2N_z + 1)$  Fourierkoeffizienten der Feldkomponenten, eingeführt. Die Darstellung der Fourierkoeffizienten  $U_{nm}(y)$  in Spaltenvektoren geschieht durch geeignete Bijektionen [1]. Eine einfache Möglichkeit ist das zweidimensionale Array  $U_{nm}$  zeilenweise in der Form

$$[U] = \left( U_{(-N_x, -N_z)} \ U_{(-N_x, -N_z+1)} \ \dots \ U_{(-N_x, N_z)} \ U_{(-N_x+1, -N_z)} \ \dots \ U_{(N_x, N_z)} \right)^T \quad (4.71)$$

in Vektoren  $[U]$  zu schreiben. Einsetzen von Gl. (4.70) mit Gl. (4.71) in Gl. (4.1) führt zu einem Differentialgleichungssystem der Fourierkoeffizienten, welches formal Gln. (4.25) entspricht, wenn die Größe  $\gamma_0$  durch eine Diagonalmatrix  $\gamma$  ersetzt wird. Die Diagonalmatrizen  $\alpha$  und  $\gamma$  sind in diesem Fall durch

$$\alpha = \text{diag} \left( \underbrace{\alpha_{-N_x}, \dots, \alpha_{-N_x}}_{2N_x+1}, \dots, \underbrace{\alpha_{N_x}, \dots, \alpha_{N_x}}_{2N_x+1} \right) \quad (4.72)$$

und

$$\gamma = \text{diag} \left( \underbrace{\gamma_{-N_z}, \dots, \gamma_{N_z}}_{2N_z+1}, \dots, \underbrace{\gamma_{-N_z}, \dots, \gamma_{N_z}}_{2N_z+1} \right) \quad (4.73)$$

gegeben.

Wiederum müssen die Materialgleichungen (2.8) und (2.9) bei konstantem  $y$  im reduzierten Fourierraum formuliert werden. Ebenfalls wird hier lediglich die Formulierung von Gl. (2.8) im reduzierten Fourierraum betrachtet, da das Vorgehen bei Gl. (2.9) analog erfolgt. Wie bei Liniengittern werden dazu die an den Grenzflächen zweier Materialien stetigen Felder  $E_{t_1}$ ,  $D_n$  und  $E_{t_2}$  eingeführt. Die Beträge dieser Feldkomponenten sind durch Projektionen auf die Vektoren  $\mathbf{t}_1$ ,  $\mathbf{n}$  und  $\mathbf{t}_2$  in Gln. (4.28–4.30) gegeben. Normalen- und Tangentialvektor sind wiederum im gesamten modulierten Bereich definiert und damit in der hier betrachteten  $xz$ -Ebene. Sie sind stetig an den Grenzflächen der Materialien. Damit ergibt aus sich Gln. (4.28–4.30) in Matrixschreibweise

$$\begin{pmatrix} E_{t_1} \\ D_n \\ E_{t_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{1,x} & t_{1,y} & t_{1,z} \\ (\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon})_x & (\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon})_y & (\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon})_z \\ t_{2,x} & t_{2,y} & t_{2,z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (4.74)$$



Diese Gleichung kann kompakt in der Form von Gl. (4.32) geschrieben werden. Dies führt zu Gl. (4.33),  $\mathbf{E} = \mathbf{A}^{(e)}\mathbf{f}^{(e)}$ , welche ausgeschrieben die Form

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{x1}^{(e)} & a_{x2}^{(e)} & a_{x3}^{(e)} \\ a_{y1}^{(e)} & a_{y2}^{(e)} & a_{y3}^{(e)} \\ a_{z1}^{(e)} & a_{z2}^{(e)} & a_{z3}^{(e)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{t_1} \\ D_n \\ E_{t_2} \end{pmatrix} \quad (4.75)$$

hat. Die Elemente  $a_{ij}$  sind dabei durch

$$\begin{aligned} a_{x1}^{(e)} &= \frac{1}{\xi^{(e)}} [(\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon}) \times \mathbf{t}_2]_x, & a_{x2}^{(e)} &= \frac{n_x}{\xi^{(e)}}, & a_{x3}^{(e)} &= -\frac{1}{\xi^{(e)}} [(\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon}) \times \mathbf{t}_1]_x, \\ a_{y1}^{(e)} &= \frac{1}{\xi^{(e)}} [(\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon}) \times \mathbf{t}_2]_y, & a_{y2}^{(e)} &= \frac{n_y}{\xi^{(e)}}, & a_{y3}^{(e)} &= -\frac{1}{\xi^{(e)}} [(\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon}) \times \mathbf{t}_1]_y, \\ a_{z1}^{(e)} &= \frac{1}{\xi^{(e)}} [(\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon}) \times \mathbf{t}_2]_z, & a_{z2}^{(e)} &= \frac{n_z}{\xi^{(e)}}, & a_{z3}^{(e)} &= -\frac{1}{\xi^{(e)}} [(\mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon}) \times \mathbf{t}_1]_z \end{aligned}$$

gegeben [1, 39]. Die Größe  $\xi^{(e)}$  ist dabei wiederum die Determinante der Inversen von  $\mathbf{A}^{(e)}$ . Es gilt  $\xi^{(e)} = \mathbf{n}^T \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{n}$  [1, 39].

Aus Gl. (4.35), welche ausgeschrieben die Form von Gl. (4.36) annimmt, folgt, dass die Elemente von  $\mathbf{B}^{(e)} = \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{A}^{(e)}$  gegeben sind durch

$$b_{ij} = \varepsilon_{ix} a_{xj} + \varepsilon_{iy} a_{yj} + \varepsilon_{iz} a_{zj} \quad (4.76)$$

mit  $i = x, y, z$  und  $j = 1, 2, 3$ .

Aus Gl. (4.75) und (4.36) folgt mit demselben Argument wie bei Liniengittern

$$[\mathbf{D}] = [\mathbf{B}^{(e)}][\mathbf{A}^{(e)}]^{-1} [\mathbf{E}] = \mathbf{Q}^{(e)} [\mathbf{E}] \quad (4.77)$$

mit

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \begin{pmatrix} \llbracket b_{x1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{x2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{x3}^{(e)} \rrbracket \\ \llbracket b_{y1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{y2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{y3}^{(e)} \rrbracket \\ \llbracket b_{z1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{z2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket b_{z3}^{(e)} \rrbracket \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \llbracket a_{x1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{x2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{x3}^{(e)} \rrbracket \\ \llbracket a_{y1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{y2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{y3}^{(e)} \rrbracket \\ \llbracket a_{z1}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{z2}^{(e)} \rrbracket & \llbracket a_{z3}^{(e)} \rrbracket \end{pmatrix}^{-1}. \quad (4.78)$$

Die Block-Toeplitzmatrizen  $\llbracket f \rrbracket$  stellen dabei eine Variante der endlichen Laurent-Regel für die zweidimensionale Faltung dar. Es ist

$$h_{uv} = \sum_{n=-N_x}^{N_x} \sum_{m=-N_z}^{N_z} f_{u-n, v-m} g_{nm}. \quad (4.79)$$

Dies kann in Matrixform als

$$[h] = \llbracket f \rrbracket [g] \quad (4.80)$$

geschrieben werden. Durch die Definition der Vektoren  $[h]$ ,  $[g]$  in Gl. (4.71) sind die Einträge der Matrix  $\llbracket f \rrbracket$  bestimmt.

Um die Gl.

$$[\mathbf{B}] = \mathbf{Q}^{(h)} [\mathbf{H}] \quad (4.81)$$

zu erhalten, ist das Vorgehen wiederum völlig analog. Durch Einführen der kontinuierlichen Funktionen  $H_{t_1}$ ,  $B_n$  und  $H_{t_2}$  erhält man analoge Gleichungen zu Gln. (4.74–4.78) mit folgenden Änderungen:  $\varepsilon \rightarrow \mu$ ,  $E \rightarrow H$ ,  $D \rightarrow B$  und Index  $e \rightarrow h$ .

Die Materialgleichungen aus Gl. (4.77) und (4.81) können nun verwendet werden, um das System gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen 1. Ordnung der Form von Gl. (4.45) herzuleiten. Das Vorgehen entspricht dem bei Liniengittern. Es werden wiederum mittels Gl. (4.43) und (4.44) die  $y$ -Komponenten der Felder eliminiert. Die Submatrizen von  $\mathbf{M}$  in Gl. (4.45) entsprechen formal Gln. (4.46), wenn  $\gamma_0$  durch die Diagonalmatrix  $\gamma$  ersetzt wird. Man erhält somit wiederum ein System von Differentialgleichungen der Form

$$\frac{d}{dy}\mathbf{f}(y) = i\mathbf{M}(y)\mathbf{f}(y), \quad (4.82)$$

wobei  $\mathbf{M}(y) \in \mathbb{C}^{4K \times 4K}$  mit  $K = (2N_x + 1)(2N_z + 1)$  ist.

Die Gleichungen für Kreuzgitter haben somit formal dieselbe Form wie die Gleichungen für Liniengitter. Aus diesem Grund werden in späteren Abschnitten aus Übersichtsgründen stets Liniengitter betrachtet. Eine Betrachtung von Kreuzgittern erfolgt jedoch völlig analog.

Die Lösung des erhaltenen Differentialgleichungssystems mit Randwertbedingungen wird in Abschnitt 5 näher erläutert. Wie bei der Behandlung von Liniengittern sollen an dieser Stelle jedoch noch einige Anmerkungen gegeben und Spezialfälle betrachtet werden.

### 4.3.2 Aufstellen des Normalenvektorfeldes

Ist im Intervall  $y_j \leq y \leq y_{j+1}$  die Grenzfläche zweier Medien durch eine Funktion  $g(x, z)$  gegeben, kann in diesem ein Normalenvektor

$$\mathbf{n} = \frac{\left(-\frac{\partial g}{\partial x}, 1, -\frac{\partial g}{\partial z}\right)}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial g}{\partial z}\right)^2}} \quad (4.83)$$

definiert werden [1]. Der Normalenvektor ist diesem Bereich ist keine Funktion von  $y$ .

Die Komponenten der Tangentialvektoren  $\mathbf{t}_1$  und  $\mathbf{t}_2$  lassen sich durch die Komponenten des Normalenvektors darstellen [1]. Wird  $\mathbf{t}_1$  in der  $xy$ -Ebene gewählt, ergibt sich

$$\mathbf{t}_1 = \left( \frac{n_y}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}}, \frac{-n_x}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}}, 0 \right) \quad (4.84)$$

und aus  $\mathbf{t}_2 = \mathbf{t}_1 \times \mathbf{n}$

$$\mathbf{t}_2 = \left( \frac{-n_x n_z}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}}, \frac{-n_y n_z}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}}, \frac{n_x^2 + n_y^2}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} \right). \quad (4.85)$$

Ist ein Aufstellen eines Normalenvektorfeldes auf diese Weise nicht möglich, kann numerisch ein möglichst glattes Feld generiert werden. Es sei an dieser Stelle nochmals auf Ref. [45, 46, 47, 48, 49] verwiesen. In Ref. [48, 49] ist die Abhängigkeit des Konvergenzverhalten der RCWA vom verwendeten Normalenvektorfeld genauer untersucht.

### 4.3.3 Nichtmagnetische Materialien

Für nichtmagnetische Materialien gilt das in Abschnitt 4.2.3 aufgeführte, d.h.

$$\mathbf{Q}_{ij}^{(h)} = \begin{cases} \mathbf{0} & i \neq j \\ \mu_0 \mathbf{I} & i = j. \end{cases} \quad (4.86)$$

Bei der Berechnung von  $\mathbf{M}(y)$  fällt daher nahezu die Hälfte der Terme weg.

#### 4.3.4 Isotrope Materialien

Werden nur isotrope nichtmagnetische Materialien betrachtet, kann wie in Abschnitt 4.2.4 vorgegangen werden. Aus Gl. (4.50) mit  $\varepsilon = \varepsilon(x, z)$  und dem Normalenvektor  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$  folgt aus Gln. (4.53–4.55)

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \llbracket \varepsilon \rrbracket - \left( \llbracket \varepsilon \rrbracket - \left[ \frac{1}{\varepsilon} \right]^{-1} \right) \llbracket \mathbf{n} \mathbf{n}^T \rrbracket \quad (4.87)$$

und damit ausgeschrieben [1, 39]

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \begin{pmatrix} \llbracket \varepsilon \rrbracket - \Delta \llbracket n_x^2 \rrbracket & -\Delta \llbracket n_x n_y \rrbracket & -\Delta \llbracket n_x n_z \rrbracket \\ -\Delta \llbracket n_x n_y \rrbracket & \llbracket \varepsilon \rrbracket - \Delta \llbracket n_y^2 \rrbracket & -\Delta \llbracket n_y n_z \rrbracket \\ -\Delta \llbracket n_x n_z \rrbracket & -\Delta \llbracket n_y n_z \rrbracket & \llbracket \varepsilon \rrbracket - \Delta \llbracket n_z^2 \rrbracket \end{pmatrix} \quad (4.88)$$

mit

$$\Delta = \llbracket \varepsilon \rrbracket - \left[ \frac{1}{\varepsilon} \right]^{-1}. \quad (4.89)$$

Mit  $\mathbf{Q}^{(e)}$  aus Gl. (4.88) und  $\mathbf{Q}^{(h)}$  aus Gl. (4.86) ergibt sich die Matrix  $\mathbf{M}(y)$  aus Gln. (4.46). Dabei wird  $\gamma_0$  durch die Diagonalmatrix  $\gamma$  aus Gl. (4.73) ersetzt, und  $\alpha$  ist durch Gl. (4.72) gegeben.

#### 4.3.5 Konstante Koeffizienten und RCWA

Sind in einen Bereich die Permittivität und Permeabilität keine Funktionen von  $y$  handelt es sich bei der Matrix  $\mathbf{M}$  in diesem Bereich um eine konstante Matrix. Eine numerische Integration von Gl. (4.82) kann, wie in Abschnitt 4.2.5 erläutert, vermieden werden, da das Differentialgleichungssystem konstante Koeffizienten hat. Die Lösung von Gl. (4.82) ist entweder durch Gl. (4.61) gegeben, oder kann durch stufenförmige Approximation des Gitters durch Gl. (4.62) ermittelt werden. Im Allgemeinen ist jedoch aus numerischen Gründen der S-Matrix Algorithmus oder eine Variante davon zu verwenden. Eine Form des S-Matrix Algorithmus für die RCWA wird in Abschnitt 5.2.2 beschrieben.

#### Anisotrope Materialien

Für anisotrope Materialien sind die konstanten Matrizen  $\mathbf{Q}^{(e)}$  und  $\mathbf{Q}^{(h)}$  in Abschnitt 4.3.1 gegeben und müssen nur einmal bestimmt werden. Eine alternative Formulierung der RCWA für Kreuzgitter aus anisotropen Materialien findet sich in Ref. [51]. Bei der dortigen Formulierung müssen die Koordinatenachsen des Gitters nicht orthogonal sein, die Wände der Gitterstruktur jedoch parallel zu den Ebenen der Koordinatenachsen.

#### Isotrope Materialien

Für isotrope nichtmagnetische Materialien ist die Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$  durch Gl. (4.88) und die Matrix  $\mathbf{Q}^{(h)}$  durch Gl. (4.86) gegeben. Das Normalenvektorfeld ist ebenso keine Funktion von  $y$  und es

kann so gewählt werden, dass  $n_y = 0$  gilt. Es ergibt sich dann aus Gl. (4.88)

$$\mathbf{Q}^{(e)} = \begin{pmatrix} \llbracket \varepsilon \rrbracket - \Delta \llbracket n_x^2 \rrbracket & \mathbf{0} & -\Delta \llbracket n_x n_z \rrbracket \\ \mathbf{0} & \llbracket \varepsilon \rrbracket & \mathbf{0} \\ -\Delta \llbracket n_x n_z \rrbracket & \mathbf{0} & \llbracket \varepsilon \rrbracket - \Delta \llbracket n_z^2 \rrbracket \end{pmatrix} \quad (4.90)$$

Wegen  $\mathbf{Q}_{xy}^{(e)} = \mathbf{0} = \mathbf{Q}_{yx}^{(e)} = \mathbf{Q}_{yz}^{(e)} = \mathbf{Q}_{zy}^{(e)}$  hat die Matrix  $\mathbf{M}$  in diesem Fall die Form [1]

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{M}_{13} & \mathbf{M}_{14} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{M}_{23} & \mathbf{M}_{24} \\ \mathbf{M}_{31} & \mathbf{M}_{32} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{M}_{41} & \mathbf{M}_{42} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (4.91)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{13} &= -\frac{1}{\omega} \alpha \llbracket \varepsilon \rrbracket^{-1} \gamma, & \mathbf{M}_{14} &= \frac{1}{\omega} \alpha \llbracket \varepsilon \rrbracket^{-1} \alpha - \omega \mu_0 \mathbf{I}, \\ \mathbf{M}_{23} &= -\frac{1}{\omega} \gamma \llbracket \varepsilon \rrbracket^{-1} \gamma + \omega \mu_0 \mathbf{I}, & \mathbf{M}_{24} &= \frac{1}{\omega} \gamma \llbracket \varepsilon \rrbracket^{-1} \alpha, \\ \mathbf{M}_{31} &= \frac{\alpha \gamma}{\omega \mu_0} - \omega \Delta \llbracket n_x n_z \rrbracket, & \mathbf{M}_{32} &= \omega (\llbracket \varepsilon \rrbracket - \Delta \llbracket n_z^2 \rrbracket) - \frac{\alpha^2}{\omega \mu_0}, \\ \mathbf{M}_{41} &= -\omega (\llbracket \varepsilon \rrbracket - \Delta \llbracket n_x^2 \rrbracket) + \frac{\gamma^2}{\omega \mu_0}, & \mathbf{M}_{42} &= \omega \Delta \llbracket n_x n_z \rrbracket - \frac{\gamma \alpha}{\omega \mu_0}. \end{aligned}$$

In Abschnitt 5.2.2 wird gezeigt, dass sich die Eigenwerte und -vektoren der Matrix  $\mathbf{M}$  in der Form von Gl. (4.91) durch Lösen eines Eigenwertproblems einer halb so großen Matrix finden lassen.

Die hier angegebene Formulierung der Matrix  $\mathbf{M}$  für die RCWA entspricht der Formulierung in Ref. [47, 49], in denen das Normalenvektorfeld zur Konvergenzverbesserung der RCWA verwendet wird.

# 5 Numerische Integration und S-Matrix Algorithmus

In diesem Abschnitt soll das System gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen 1. Ordnung der Form

$$\frac{d}{dy}\mathbf{f}(y) = i\mathbf{M}(y)\mathbf{f}(y), \quad (5.1)$$

wie es in den vorherigen Abschnitten 4.2 und 4.3 für Liniengitter und Kreuzgitter hergeleitet wurde, unter Beachtung der Randbedingungen gelöst werden. Die Propagationsmatrix  $\mathbf{M}(y)$  wird dabei vorläufig explizit als Funktion von  $y$  angenommen, sodass sich die Lösung des Problems nicht auf ein Eigenwertproblem zurückführen lässt. Wäre dies der Fall, würde man von der RCWA sprechen, d.h. die Differentielle Methode im engeren Sinn ist die Lösung von Gl. (5.1) mit Hilfe numerischer Integrationsverfahren [28].

Aus Übersichtsgründen soll vorläufig davon ausgegangen werden, dass eine numerische Integration über den gesamten modulierten Bereich  $[0, a]$  ohne numerische Schwierigkeiten möglich ist.

## 5.1 Lösen des Randwertproblems und numerische Integrationsverfahren

Da ein linearer Zusammenhang zwischen den Feldern an Ober- und Unterseite,  $\mathbf{f}(a)$  und  $\mathbf{f}(0)$ , besteht, kann die Lösung des Problems mittels Schießverfahren auf ein Anfangswertproblem zurückgeführt werden [1]. Die Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}$  in

$$\mathbf{f}(a) = \hat{\mathbf{T}}\mathbf{f}(0) \quad (5.2)$$

kann, wenn  $\mathbf{M}(y) \in \mathbb{C}^{4K \times 4K}$ , durch  $4K$  Integrationen von Gl. (5.1) mit Anfangswerten  $\mathbf{f}_p(0) = \delta_p$ ,  $p = 1, \dots, 4K$ , ermittelt werden. Die  $p$ -te Spalte von  $\hat{\mathbf{T}}$  ist damit durch  $\mathbf{f}_p(a)$  gegeben.

Da es sich bei Gl. (5.1) um ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen handelt, dessen Anfangswerte durch das Schießverfahren festgelegt sind, können alle numerischen Integrationsverfahren für eben solche Systeme angewendet werden. Ref. [52] bietet eine kompakte Übersicht der gängigsten Verfahren. Eine Untersuchung verschiedener Verfahren speziell bei Anwendung für die Differentielle Methode findet sich in Ref. [28]. Das Hauptergebnis in Ref. [28] ist jedoch lediglich, dass implizite gegenüber expliziten Verfahren zu bevorzugen sind, da sie noch bei großen Schrittweiten numerisch stabil sind.

Das am weitesten verbreitete Verfahren ist sicherlich das explizite Runge-Kutta Verfahren 4. Ordnung, welches jedoch hier nicht aufgeführt werden soll, da andere Verfahren sich als geeigneter erwiesen haben [28]. Sattdessen werden lediglich das Trapezverfahren, das implizite Mittelpunktverfahren<sup>1</sup> (IMS) und das 2-stufige implizite Runge-Kutta (IRK) Verfahren 4. Ordnung, welches zu den Gauss-Legendre Verfahren zählt, an dieser Stelle näher erläutert.

<sup>1</sup>Da die englische Bezeichnung *implicit midpoint scheme* lautet, wird im Weiteren auch die Abkürzung IMS verwendet.

Bei Differenzmethoden zur numerischen Integration wird die Differentiation durch eine endliche Differenz approximiert. Erst in diesem Schritt wird also die bis hierhin als kontinuierlich betrachtete  $y$ -Koordinate in Gl. (5.1) im Ortsraum diskretisiert. Die Hauptanforderung an alle Verfahren ist eine Konvergenz zur wahren Lösung, wenn die Schrittweite der Integration gegen Null geht [52].

Beim Trapezverfahren ergibt sich für Gl. (5.1) speziell

$$\frac{\mathbf{f}_\mu - \mathbf{f}_{\mu-1}}{\Delta y} = \frac{1}{2} (i\mathbf{M}_\mu \mathbf{f}_\mu + i\mathbf{M}_{\mu-1} \mathbf{f}_{\mu-1}), \quad (5.3)$$

wobei  $\mathbf{M}_\mu = \mathbf{M}(y_q + \mu\Delta y)$ ,  $\mathbf{f}_\mu = \mathbf{f}(y_q + \mu\Delta y)$  und  $y_q$  der Startpunkt mit dem Startwert  $\mathbf{f}(y_q)$  der Integration ist. Als Näherung für die konstante Steigung innerhalb des Schrittintervalls wird der Mittelwert der Steigungen an den jeweiligen Stützstellen verwendet. Das Verfahren ist implizit, da die rechte Seite in Gl. (5.3) von  $\mathbf{f}_\mu$  abhängt. Auflösen von Gl. (5.3) nach  $\mathbf{f}_\mu$  ergibt

$$\mathbf{f}_\mu = \left( \mathbf{I} - \frac{i\Delta y}{2} \mathbf{M}_\mu \right)^{-1} \left( \mathbf{I} + \frac{i\Delta y}{2} \mathbf{M}_{\mu-1} \right) \mathbf{f}_{\mu-1}, \quad (5.4)$$

mit  $\mu = 1, \dots, L$  kann also die Integration von  $y_q$  bis  $y_q + L\Delta y$  ausgeführt werden. Eine Integration von Gl. (5.1) über den gesamten modulierten Bereich  $[0, a]$  würde also bedeuten, dass  $y_q = 0$  und  $L\Delta y = a$  ist. Damit die Integration der  $4K$  Vektoren  $\mathbf{f}_p$  beim Schießverfahren gleichzeitig durchgeführt wird, ist  $\mathbf{f}_0 = \mathbf{f}(y_q) = \mathbf{I}$  zu setzen.

Das Trapezverfahren ist 2. Ordnung, d.h. der durch die Diskretisierung eingeführte Fehler ist von der Form  $e = c \cdot (\Delta y)^p$  mit der Ordnung  $p = 2$  und einer Konstanten  $c$  [52].

Eine ähnliche Approximation liefert das implizite Mittelpunktverfahren, wobei Gl. (5.4) durch

$$\mathbf{f}_\mu = \left( \mathbf{I} - \frac{i\Delta y}{2} \mathbf{M}_{\mu-1/2} \right)^{-1} \left( \mathbf{I} + \frac{i\Delta y}{2} \mathbf{M}_{\mu-1/2} \right) \mathbf{f}_{\mu-1} \quad (5.5)$$

zu ersetzen ist [28]. Das Verfahren ist ebenfalls 2. Ordnung [52].

Das 2-stufige IRK-Verfahren 4. Ordnung ist durch

$$\mathbf{f}_\mu = \left( \mathbf{I} + i \frac{\Delta y}{2} (\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2) \right) \mathbf{f}_{\mu-1} \quad (5.6)$$

gegeben [28, 40], mit

$$\mathbf{K}_1 = \left( \mathbf{R}_1 - \frac{\Delta y^2}{48} \mathbf{R}_2^{-1} \right)^{-1} \left( \mathbf{I} + i \frac{3 - 2\sqrt{3}}{12} \Delta y \mathbf{R}_2^{-1} \right), \quad (5.7)$$

$$\mathbf{K}_2 = \mathbf{R}_2^{-1} \left( \mathbf{I} + i \frac{3 + 2\sqrt{3}}{12} \Delta y \mathbf{K}_1 \right), \quad (5.8)$$

$$\mathbf{R}_1 = \left( \mathbf{M}_{\mu - (3 + \sqrt{3})/6} \right)^{-1} - i \frac{\Delta y}{4} \mathbf{I}, \quad (5.9)$$

$$\mathbf{R}_2 = \left( \mathbf{M}_{\mu - (3 - \sqrt{3})/6} \right)^{-1} - i \frac{\Delta y}{4} \mathbf{I}. \quad (5.10)$$

Bei allen drei hier aufgeführten Verfahren handelt es sich um Einschrittverfahren, da in den Rekursionsformeln (5.4), (5.5) bzw. (5.6) die neuen Werte  $\mathbf{f}_\mu$  nur von den Werten der vorangegangenen Stützstellen  $\mathbf{f}_{\mu-1}$  abhängen. Die drei Verfahren sind absolut stabil, d.h. ihre Stabilität ist nicht von der Schrittweite  $\Delta y$  abhängig [52]. Trapezverfahren und IMS sind beide 2. Ordnung. Das IMS hat jedoch gegenüber dem Trapezverfahren den Vorteil, dass die Matrix  $\mathbf{M}(y)$

in jedem Integrationsschritt nur einmal gespeichert werden muss. Das hier angeführte IRK-Verfahren ist 4. Ordnung, d.h es kann, um dieselbe Genauigkeit zu erzielen wie die anderen Methoden, eine größere Integrationsschrittweite verwendet werden. Dafür steigt der Rechenaufwand pro Integrationsschritt, da vier Matrixinvertierungen durchgeführt werden müssen.

Wie in Abschnitt 4.2.1 und 4.3.1 dargestellt, lassen sich die Felder in Cover und Substrat dagegen durch Rayleigh-Entwicklung darstellen. Die  $z$ -Komponenten der Felder sind dort, im Falle eines Liniengitters und von isotropen Medien, nach Gl. (4.20) gegeben durch

$$E_z^{(j)}(x, y, z) = \sum_{n=-N}^N \left[ a_{e,z,n}^{(j)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_{j,n} y + i\gamma_0 z) + b_{e,z,n}^{(j)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_{j,n} y + i\gamma_0 z) \right] \quad (5.11)$$

und

$$H_z^{(j)}(x, y, z) = \sum_{n=-N}^N \left[ a_{h,z,n}^{(j)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_{j,n} y + i\gamma_0 z) + b_{h,z,n}^{(j)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_{j,n} y + i\gamma_0 z) \right] \quad (5.12)$$

wobei  $j = c, s$  für Cover bzw. Substrat steht. Die Zahl  $N$ , welche die Anzahl an Rayleigh-Koeffizienten beschränkt, entspricht aus numerischen Gründen der Zahl  $N$  in Gl. (4.23) für die Fourierentwicklung der Felder im modulierten Bereich. Fällt nur eine ebene Welle aus dem Cover auf das Gitter, ist  $a_{e,z,n}^{(c)} = a_{e,z,0}^{(c)} \delta_0$  und  $a_{h,z,n}^{(c)} = a_{h,z,0}^{(c)} \delta_0$  für elektrisches und magnetisches Feld, und  $b_{e,z,n}^{(s)} = b_{h,z,n}^{(s)} = 0$ .

Die  $x$ -Komponenten der Felder,  $E_x$  und  $H_x$ , lassen sich in Abhängigkeit der  $z$ -Komponenten darstellen<sup>2</sup>. Es ergibt sich

$$E_x^{(j)}(x, y, z) = \frac{1}{k_j^2 - \gamma_0^2} \left( i\gamma_0 \frac{\partial E_z}{\partial x} + i\omega\mu_j \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \quad (5.13)$$

und

$$H_x^{(j)}(x, y, z) = \frac{1}{k_j^2 - \gamma_0^2} \left( -i\omega\varepsilon_j \frac{\partial E_z}{\partial y} + i\gamma_0 \frac{\partial H_z}{\partial x} \right). \quad (5.14)$$

Wiederum steht der Index  $j = c, s$  für Cover bzw. Substrat. Daher ist  $k_j = 2\pi n_j / \lambda_0$  die Wellenzahl in Cover bzw. Substrat und bei  $\varepsilon_j$  und  $\mu_j$  handelt es sich um die jeweilige Permittivität und Permeabilität.

Damit ergibt sich direkt aus Gln. (5.11) und (5.12) und durch Einsetzen derselben in Gln. (5.13) und (5.14) folgender linearer Zusammenhang zwischen den Fourierkoeffizienten in  $\mathbf{f}(y)$  und den Rayleigh-Koeffizienten der  $z$ -Komponenten der Felder in Cover und Substrat

$$\begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{J}_e & \mathbf{P} & -\mathbf{J}_e \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{J}_h & \mathbf{P} & -\mathbf{J}_h & \mathbf{P} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_e^{(j)} \\ \mathbf{a}_h^{(j)} \\ \mathbf{b}_e^{(j)} \\ \mathbf{b}_h^{(j)} \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

<sup>2</sup>Eine Herleitung findet sich in Ref. [1]. Die Darstellung der  $x$ - und  $y$ -Feldkomponenten in Abhängigkeit der  $z$ -Komponenten ist zur Vollständigkeit ebenfalls in Anhang B aufgeführt.

mit

$$(\mathbf{P})_{nm} = \frac{-\gamma_0 \alpha_n}{k_j^2 - \gamma_0^2} \delta_{nm}, \quad (5.16)$$

$$(\mathbf{J}_e)_{nm} = \frac{\omega \mu_j \beta_{j,n}}{k_j^2 - \gamma_0^2} \delta_{nm}, \quad (5.17)$$

$$(\mathbf{J}_h)_{nm} = \frac{-\omega \varepsilon_j \beta_{j,n}}{k_j^2 - \gamma_0^2} \delta_{nm}. \quad (5.18)$$

Der Vektor  $\mathbf{a}_e^{(j)}$  hat dabei die Komponenten  $a_{e,z,n}^{(j)} \exp(-i\beta_{j,n}y)$ , enthält also die exponentielle Abhängigkeit der Rayleigh-Koeffizienten von  $y$  in Cover und Substrat. Analog sind die Komponenten von  $\mathbf{a}_h^{(j)}$ ,  $\mathbf{b}_e^{(j)}$  und  $\mathbf{b}_h^{(j)}$  mit der exponentiellen Abhängigkeit von  $y$  aus Gl. (5.11) bzw. (5.12) definiert.

Gl. (5.15) kann in verkürzter Form als

$$\mathbf{f}(y) = \mathbf{W}^{(j)} \mathbf{v}^{(j)} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11}^{(j)} & \mathbf{W}_{12}^{(j)} \\ \mathbf{W}_{21}^{(j)} & \mathbf{W}_{22}^{(j)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(j)}(y) \\ \mathbf{b}^{(j)}(y) \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

geschrieben werden. Die Definition der Matrix  $\mathbf{W}^{(j)}$  und der Vektoren  $\mathbf{v}^{(j)}$ ,  $\mathbf{a}^{(j)}$  und  $\mathbf{b}^{(j)}$  wird durch Vergleich mit Gl. (5.15) deutlich.

Aus Gl. (5.2) mit (5.19) erhält man

$$\mathbf{v}^{(c)} = \mathbf{W}^{(c)-1} \hat{\mathbf{T}} \mathbf{W}^{(s)} \mathbf{v}^{(s)} = \mathbf{T} \mathbf{v}^{(s)} \quad (5.20)$$

oder in Blockform

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(c)}(a) \\ \mathbf{b}^{(c)}(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11} & \mathbf{T}_{12} \\ \mathbf{T}_{21} & \mathbf{T}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(s)}(0) \\ \mathbf{b}^{(s)}(0) \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Die Matrix  $\mathbf{W}^{(c)-1}$  kann dabei analytisch bestimmt werden und ist durch

$$\mathbf{W}^{(c)-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{J}_h^{-1} & -\mathbf{J}_h^{-1} \mathbf{P} \\ \mathbf{J}_e^{-1} & -\mathbf{J}_e^{-1} \mathbf{P} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & -\mathbf{J}_h^{-1} & \mathbf{J}_h^{-1} \mathbf{P} \\ -\mathbf{J}_e^{-1} & \mathbf{J}_e^{-1} \mathbf{P} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

gegeben [1]. Da alle invertierten Matrizen Inverse von Diagonalmatrizen sind, sind diese explizit durch Kehrwertbildung ihrer Diagonalelemente gegeben.

In dem angenommenen Fall, dass keine ebenen Wellen aus dem Substrat einfallen, d.h.  $\mathbf{b}^{(s)} = 0$  ist, ergeben sich nach Gl. (5.21) die gesuchten Rayleigh-Koeffizienten in Cover und Substrat zu

$$\mathbf{a}^{(s)} = \mathbf{T}_{11}^{-1} \mathbf{a}^{(c)}, \quad (5.23)$$

$$\mathbf{b}^{(c)} = \mathbf{T}_{21} \mathbf{T}_{11}^{-1} \mathbf{a}^{(c)}. \quad (5.24)$$

Die Matrix  $\mathbf{T}_{11}^{-1}$  wird häufig auch als Transmissionsmatrix und die Matrix  $\mathbf{T}_{21} \mathbf{T}_{11}^{-1}$  als Reflexionsmatrix bezeichnet. Durch diese sind somit nach Gl. (5.23) und Gl. (5.24) die Rayleigh-Koeffizienten der ausfallenden Beugungsordnungen für jedes in der Form

$$E_z^{(i)}(x, y, z) = \sum_{n=-N}^N a_{e,z,n}^{(i)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_{i,n} y + i\gamma_0 z), \quad (5.25)$$

$$H_z^{(i)}(x, y, z) = \sum_{n=-N}^N a_{h,z,n}^{(i)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_{i,n} y + i\gamma_0 z) \quad (5.26)$$



gegebene einfallende Feld festgelegt [1]. Alle Elemente des Vektors  $\mathbf{a}^{(c)}$  könnten also von Null verschieden sein. Für eine einfallende ebene Welle sind jedoch höchstens zwei Elemente von  $\mathbf{a}^{(c)}$  von Null verschieden.

Wie in Abschnitt 4.2.5 aufgeführt, ist die Matrix  $\hat{\mathbf{T}}$  in Gl. (5.20) bei der RCWA durch Gl. (4.61) oder bei Stufenapproximation der Struktur durch Gl. (4.62) ohne numerische Integration gegeben (siehe dazu auch Abschnitt 4.2.5).

Sind die Rayleigh-Koeffizienten der  $z$ -Komponenten der Felder bekannt, ist das Beugungsproblem gelöst und sämtliche sonstige interessierenden Größen können aus ihnen berechnet werden. Insbesondere lassen sich im homogenen isotropen Medium von Cover und Substrat die Rayleigh-Koeffizienten der anderen Feldkomponenten berechnen, da diese dort in Abhängigkeit der  $z$ -Komponenten dargestellt werden können. Dies ist in Anhang B näher erläutert.

## 5.2 S-Matrix Algorithmus

Leider ist eine numerische Integration über den gesamten modulierten Bereich  $[0, a]$  in vielen Fällen aufgrund von numerischen Instabilitäten nicht möglich. Diese Instabilitäten sind mit exponentiell wachsenden Termen verbunden. Die Instabilitäten treten ab einer bestimmten Anzahl berücksichtigter Beugungsordnungen auf, bei metallischen Strukturen früher als bei dielektrischen [1]. Das Auftreten von exponentiell wachsenden Termen ist vor allem in der Formulierung der RCWA in Gl. (4.61) sichtbar, bei der die  $y$ -Abhängigkeit der Felder im modulierten Bereich explizit gegeben ist. Die exponentiell wachsenden Terme sind dort mit Eigenwerten mit negativem Imaginärteil verbunden. Obwohl bei der Differentiellen Methode die  $y$ -Abhängigkeit der Felder im Allgemeinen nicht explizit bekannt ist, ist ihr Verhalten jedoch asymptotisch dasselbe wie bei der RCWA [17].

Um die damit verbundenen numerischen Schwierigkeiten zu beseitigen, wird häufig der S-Matrix Algorithmus eingesetzt. Verschiedene Varianten des S-Matrix Algorithmus und andere rekursive Matrix Algorithmen zur Lösung des Problems finden sich in der Literatur [17, 18, 26, 27, 53, 54]. An dieser Stelle sollen lediglich Varianten des S-Matrix Algorithmus, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurden, aufgeführt werden. Diese entsprechen der Darstellung in Ref. [1, 17, 18].

### 5.2.1 S-Matrix Algorithmus für die Differentielle Methode

Als erstes soll der S-Matrix Algorithmus für die Differentielle Methode betrachtet werden. Wie in Abb. 5.1 dargestellt, wird dabei das Gitter in  $M$  dünne Schichten aufgeteilt. Diese werden im Folgenden auch als S-Matrix Schichten bezeichnet und müssen nicht zwangsweise dieselbe Dicke besitzen.

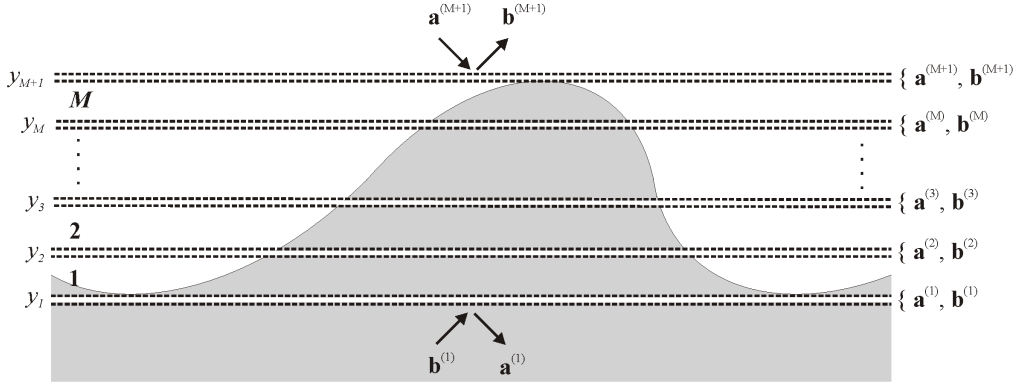
Vorläufig soll zwischen den einzelnen Schichten eine unendlich dünne Schicht des isotropen Mediums des Covers mit  $n_c$  als Brechungsindex angenommen werden. Diese Annahme wird lediglich zur physikalischen Anschaulichkeit benutzt und später fallengelassen.

Die S-Matrix der  $q$ -ten Schicht,  $q = 1, \dots, M$ , ist durch

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(q+1)} \\ \mathbf{a}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(q)} & \mathbf{S}_{12}^{(q)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(q)} & \mathbf{S}_{22}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(1)} \\ \mathbf{a}^{(q+1)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{(q)} \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(1)} \\ \mathbf{a}^{(q+1)} \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

definiert.

Die Größen  $\mathbf{a}^{(1)}$ ,  $\mathbf{b}^{(1)}$  entsprechen den vorher definierten Rayleigh-Koeffizienten  $\mathbf{a}^{(s)}$ ,  $\mathbf{b}^{(s)}$  im



**Abb. 5.1:** Aufteilen eines Intervalls, hier des gesamten modulierten Bereichs, in S-Matrix Schichten.

Substrat. Analog sind  $\mathbf{a}^{(q+1)}$ ,  $\mathbf{b}^{(q+1)}$  Rayleigh-Koeffizienten in der unendlich dünnen Zwischenschicht über der S-Matrix Schicht  $q$ , oder anders ausgedrückt, die Rayleigh-Koeffizienten im Cover, wenn alle Schichten oberhalb der  $q$ -ten durch das Material des Covers ersetzt würden. Für  $q = M$  sind also die Rayleigh-Koeffizienten  $\mathbf{a}^{(M+1)}$ ,  $\mathbf{b}^{(M+1)}$  identisch mit den oben definierten Rayleigh-Koeffizienten  $\mathbf{a}^{(c)}$ ,  $\mathbf{b}^{(c)}$  im Cover des tatsächlichen Problems.

Die S-Matrix  $\mathbf{S}^{(q)}$  liefert also die ausfallenden Wellen in Cover und Substrat, wenn die einfallenden Wellen gegeben sind, und alle S-Matrix Schichten oberhalb der  $q$ -ten durch das Material des Covers ersetzt werden. Aus diesem Grunde können die einzelnen Bestandteile der S-Matrix  $\mathbf{S}^{(q)}$  physikalisch interpretiert werden. Die Matrizen  $\mathbf{S}_{11}^{(q)}$  und  $\mathbf{S}_{22}^{(q)}$  können als Transmissionsmatrizen interpretiert werden, während es sich bei  $\mathbf{S}_{12}^{(q)}$  und  $\mathbf{S}_{21}^{(q)}$  um Reflexionsmatrizen handelt [17]. In dieser Arbeit wird immer davon ausgegangen, dass kein einfallendes Feld im Substrat existiert und somit  $\mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}^{(s)} = \mathbf{0}$  ist. Damit sind nach Gl. (5.27) lediglich die Matrizen  $\mathbf{S}_{12}^{(q)}$  und  $\mathbf{S}_{22}^{(q)}$  von Interesse.

Wird nun wie in Gl. (5.2) eine Matrix  $\hat{\mathbf{T}}^{(q)}$  der  $q$ -ten S-Matrix Schicht mittels numerischer Integration von  $y_q$  bis  $y_{q+1}$  bestimmt, sodass

$$\mathbf{f}(y_{q+1}) = \hat{\mathbf{T}}^{(q)} \mathbf{f}(y_q) \quad (5.28)$$

gilt, ist nach Gl. (5.19) eine Matrix  $\mathbf{T}^{(q)}$ , die die Rayleigh-Koeffizienten bei  $y_q$  und  $y_{q+1}$  verbindet durch

$$\mathbf{T}^{(q)} = \begin{cases} \mathbf{W}^{(c)-1} \hat{\mathbf{T}}^{(q)} \mathbf{W}^{(s)} & q = 1 \\ \mathbf{W}^{(c)-1} \hat{\mathbf{T}}^{(q)} \mathbf{W}^{(c)} & q > 1 \end{cases} \quad (5.29)$$

gegeben. Die Matrizen  $\mathbf{W}^{(j)}$  sind in Gl. (5.15) definiert, die Matrix  $\mathbf{W}^{(c)-1}$  in Gl. (5.22). Es folgt somit

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(q+1)} \\ \mathbf{b}^{(q+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11}^{(q)} & \mathbf{T}_{12}^{(q)} \\ \mathbf{T}_{21}^{(q)} & \mathbf{T}_{22}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(q)} \\ \mathbf{b}^{(q)} \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Durch Gl. (5.27) für  $q$  und  $(q-1)$  und Gl. (5.30) können die Matrizen  $\mathbf{S}_{ij}^{(q)}$  durch die Matrizen  $\mathbf{S}_{ij}^{(q-1)}$  und  $\mathbf{T}_{ij}^{(q)}$  ausgedrückt werden [1]. Man erhält folgende Rekursionsformeln für  $\mathbf{S}_{12}^{(q)}$  und  $\mathbf{S}_{22}^{(q)}$

$$\mathbf{S}_{12}^{(q)} = \left( \mathbf{T}_{21}^{(q)} + \mathbf{T}_{22}^{(q)} \mathbf{S}_{12}^{(q-1)} \right) \mathbf{Z}^{(q)}, \quad (5.31)$$

$$\mathbf{S}_{22}^{(q)} = \mathbf{S}_{22}^{(q-1)} \mathbf{Z}^{(q)} \quad (5.32)$$

mit

$$\mathbf{z}^{(q)} = \left( \mathbf{T}_{11}^{(q)} + \mathbf{T}_{12}^{(q)} \mathbf{S}_{12}^{(q-1)} \right)^{-1}. \quad (5.33)$$

Lediglich zur vollständigen Darstellung sind die Rekursionsformeln für  $\mathbf{S}_{11}^{(q)}$  und  $\mathbf{S}_{21}^{(q)}$  gegeben durch

$$\mathbf{S}_{11}^{(q)} = \left( \mathbf{T}_{22}^{(q)} - \mathbf{S}_{12}^{(q)} \mathbf{T}_{12}^{(q)} \right) \mathbf{S}_{11}^{(q-1)}, \quad (5.34)$$

$$\mathbf{S}_{21}^{(q)} = \mathbf{S}_{21}^{(q-1)} - \mathbf{S}_{22}^{(q)} \mathbf{T}_{12}^{(q)} \mathbf{S}_{11}^{(q-1)}. \quad (5.35)$$

Aus Gl. (5.27) folgt, dass die Rekursion durch Gl. (5.31) und (5.32) mit  $\mathbf{S}_{12}^{(0)} = \mathbf{0}$  und  $\mathbf{S}_{22}^{(0)} = \mathbf{I}$  gestartet werden kann. Für die erste Schicht ergibt sich somit  $\mathbf{S}_{12}^{(1)} = \mathbf{T}_{21}^{(1)} \mathbf{T}_{11}^{(1)-1}$  und  $\mathbf{S}_{22}^{(1)} = \mathbf{T}_{11}^{(1)-1}$ , wie es weiter oben im Text in Gl. (5.23) und (5.24) schon für die Reflexions- und Transmissionsmatrizen einer Schicht bestimmt wurde. Ist  $q = M$  folgt aus Gl. (5.27)

$$\mathbf{b}^{(M+1)} = \mathbf{S}_{12}^{(M)} \mathbf{a}^{(M+1)}, \quad (5.36)$$

$$\mathbf{a}^{(1)} = \mathbf{S}_{22}^{(M)} \mathbf{a}^{(M+1)} \quad (5.37)$$

und die gesuchten Rayleigh-Koeffizienten sind wegen  $\mathbf{b}^{(M+1)} = \mathbf{b}^{(c)}$  und  $\mathbf{a}^{(1)} = \mathbf{a}^{(s)}$  durch gegebene Rayleigh-Koeffizienten des einfallenden Feldes  $\mathbf{a}^{(M+1)} = \mathbf{a}^{(c)}$  ausgedrückt. Die Matrix  $\mathbf{S}_{12}^{(M)}$  entspricht somit der Reflexionsmatrix des Gitters und  $\mathbf{S}_{22}^{(M)}$  der Transmissionsmatrix.

Wie oben im Text erwähnt ist die Einführung unendlich dünner Schichten vom Material des Covers lediglich zur physikalischen Deutung des Problems interessant. Wird die Matrix  $\mathbf{T}^{(q)}$  durch

$$\mathbf{T}^{(q)} = \begin{cases} \hat{\mathbf{T}}^{(q)} \mathbf{W}^{(s)} & q = 1 \\ \mathbf{W}^{(c)-1} \hat{\mathbf{T}}^{(q)} & q = M \\ \hat{\mathbf{T}}^{(q)} & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.38)$$

definiert, arbeitet der S-Matrix Algorithmus direkt mit den Feldern. Diese Formulierung spart einige Matrixmultiplikationen. Da die Matrizen  $\mathbf{W}^{(j)}$  und  $\mathbf{W}^{(c)-1}$  jedoch relativ dünn besetzt sind, ist die Zeitersparnis bei der Rechnung gering.

Die Formulierung des S-Matrix Algorithmus durch Gl. (5.31) und (5.32) ist jedoch nur numerisch stabil, wenn die S-Matrix Schichten eine bestimmte Dicke nicht überschreiten [17]. Auf die maximale Dicke der S-Matrix Schichten wird in Ref. [1] näher eingegangen.

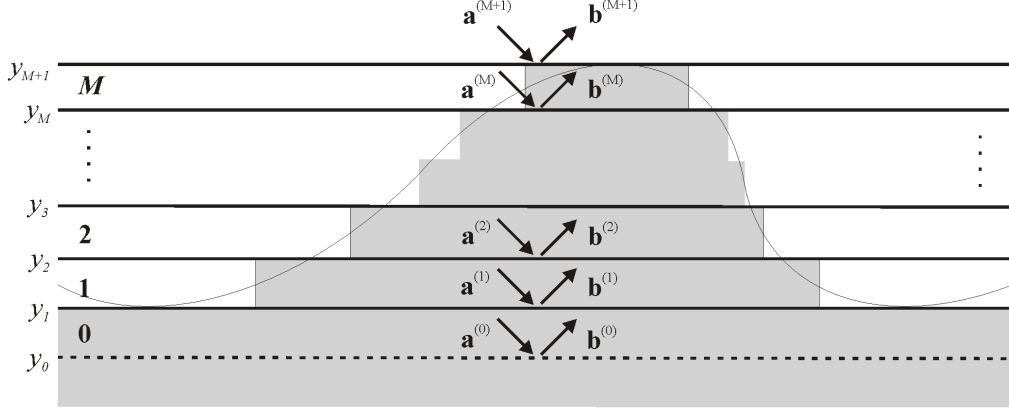
### 5.2.2 S-Matrix Algorithmus für die RCWA

Wird statt mit der Differentiellen Methode mit der RCWA gerechnet, ist die Matrix  $\mathbf{M}$  in Gl. (5.1) entweder über den gesamten modulierten Bereich konstant oder das Profil wird durch ein stufenförmiges Profil angenähert<sup>3</sup>. Dies wird in Abb. 5.2 gezeigt.

Die Felder in jedem Teilintervall mit konstantem  $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{4K \times 4K}$  können, wie in Gl. (4.61), via Diagonalisierung durch Eigenwerte und -vektoren von  $\mathbf{M}$  ausgedrückt werden. Für den S-Matrix Algorithmus ist es wichtig, die Eigenwerte in solche mit negativem und solche mit positivem Imaginärteil zu trennen, da negative Imaginärteile der Eigenwerte mit exponentiell wachsenden Termen verbunden sind. Eine solche Trennung ist immer möglich, da die Anzahl der Eigenwerte mit (positivem) negativem Imaginärteil immer kleiner  $2K$  ist. Die Diagonalmatrizen  $\mathbf{\Lambda}_{\pm}$  mit

<sup>3</sup>Wenn es nicht sowieso stufenförmig ist.

den Eigenwerten mit (positivem) negativem Imaginärteil werden mit reellen Eigenwerten aufgefüllt, sodass sie  $2K$  Diagonalelemente haben. Die Aufteilung erfolgt beliebig und hat keinerlei numerische Konsequenzen [50].



**Abb. 5.2:** Jedes Intervall mit konstantem  $M$  entspricht einer S-Matrix Schicht.

Für die  $q$ -te Schicht kann dann Gl. (4.61) in der Form

$$\mathbf{f}(y_{q+1}) = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11}^{(q)} & \mathbf{W}_{12}^{(q)} \\ \mathbf{W}_{21}^{(q)} & \mathbf{W}_{22}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{-}^{(q)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Phi_{+}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(q)} \\ \mathbf{b}^{(q)} \end{pmatrix} \quad (5.39)$$

geschrieben werden. Dabei ist  $\Phi_{\pm}^{(q)} = \exp(i\Lambda_{\pm}^{(q)} a_q)$ , mit  $a_q = y_{q+1} - y_q$ , und unbekanntem Konstanten  $\mathbf{a}^{(q)}$  und  $\mathbf{b}^{(q)}$ , die  $\mathbf{W}^{(q)-1} \mathbf{f}(y_q)$  in Gl. (4.61) entsprechen.

An den Grenzen der Teilintervalle ist  $\mathbf{f}(y)$  stetig und bei  $y = y_{q+1}$  ergibt sich

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11}^{(q+1)} & \mathbf{W}_{12}^{(q+1)} \\ \mathbf{W}_{21}^{(q+1)} & \mathbf{W}_{22}^{(q+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(q+1)} \\ \mathbf{b}^{(q+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11}^{(q)} & \mathbf{W}_{12}^{(q)} \\ \mathbf{W}_{21}^{(q)} & \mathbf{W}_{22}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{-}^{(q)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Phi_{+}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(q)} \\ \mathbf{b}^{(q)} \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

oder durch Definition in kompakter Schreibweise

$$\mathbf{W}^{(q+1)} \mathbf{v}^{(q+1)} = \mathbf{W}^{(q)} \Phi^{(q)} \mathbf{v}^{(q)}. \quad (5.41)$$

Aus Gl. (5.41) folgt sofort

$$\mathbf{v}^{(q+1)} = \mathbf{W}^{(q+1)-1} \mathbf{W}^{(q)} \Phi^{(q)} \mathbf{v}^{(q)} = \tilde{\mathbf{T}}^{(q)} \Phi^{(q)} \mathbf{v}^{(q)} = \mathbf{T}^{(q)} \mathbf{v}^{(q)} \quad (5.42)$$

und insbesondere

$$\tilde{\mathbf{T}}^{(q)} = \mathbf{W}^{(q+1)-1} \mathbf{W}^{(q)}. \quad (5.43)$$

Gl. (5.42) ist in Blockform

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(q+1)} \\ \mathbf{b}^{(q+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{T}}_{11}^{(q)} & \tilde{\mathbf{T}}_{12}^{(q)} \\ \tilde{\mathbf{T}}_{21}^{(q)} & \tilde{\mathbf{T}}_{22}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{-}^{(q)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Phi_{+}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(q)} \\ \mathbf{b}^{(q)} \end{pmatrix}. \quad (5.44)$$

Aus Gl. (5.44) und der hier durch

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(q+1)} \\ \mathbf{a}^{(q)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(q)} & \mathbf{S}_{12}^{(q)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(q)} & \mathbf{S}_{22}^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(q)} \\ \mathbf{a}^{(q+1)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{(q)} \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(q)} \\ \mathbf{a}^{(q+1)} \end{pmatrix} \quad (5.45)$$

definierten S-Matrix für  $q$  und  $(q - 1)$  folgen wiederum Rekursionsformeln für die einzelnen Blöcke von  $\mathbf{S}^{(q)}$  [17].

Diese lauten

$$\mathbf{S}_{12}^{(q)} = \left( \tilde{\mathbf{T}}_{21}^{(q)} + \tilde{\mathbf{T}}_{22}^{(q)} \boldsymbol{\Omega}^{(q)} \right) \mathbf{Z}^{(q)}, \quad (5.46)$$

$$\mathbf{S}_{22}^{(q)} = \mathbf{S}_{22}^{(q-1)} \left( \boldsymbol{\Phi}_-^{(q)} \right)^{-1} \mathbf{Z}^{(q)} \quad (5.47)$$

mit

$$\mathbf{Z}^{(q)} = \left( \tilde{\mathbf{T}}_{11}^{(q)} + \tilde{\mathbf{T}}_{12}^{(q)} \boldsymbol{\Omega}^{(q)} \right)^{-1}, \quad (5.48)$$

$$\boldsymbol{\Omega}^{(q)} = \boldsymbol{\Phi}_+^{(q)} \mathbf{S}_{12}^{(q-1)} \left( \boldsymbol{\Phi}_-^{(q)} \right)^{-1} \quad (5.49)$$

und nur zur Vollständigkeit

$$\mathbf{S}_{11}^{(q)} = \left( \tilde{\mathbf{T}}_{22}^{(q)} - \mathbf{S}_{12}^{(q)} \tilde{\mathbf{T}}_{12}^{(q)} \right) \boldsymbol{\Phi}_+^{(q)} \mathbf{S}_{11}^{(q-1)}, \quad (5.50)$$

$$\mathbf{S}_{21}^{(q)} = \mathbf{S}_{21}^{(q-1)} - \mathbf{S}_{22}^{(q)} \tilde{\mathbf{T}}_{12}^{(q)} \boldsymbol{\Phi}_+^{(q)} \mathbf{S}_{11}^{(q-1)}. \quad (5.51)$$

Die Rekursion von Gl. (5.46) und (5.47) kann für  $q = 0, \dots, M$  ausgeführt werden. Aus der Definition der Matrix  $\mathbf{S}^{(q)}$  in Gl. (5.45) folgt, dass die Startwerte  $\mathbf{S}_{12}^{(-1)} = \mathbf{0}$  und  $\mathbf{S}_{22}^{(-1)} = \mathbf{I}$  sind. Ausserdem ist  $\boldsymbol{\Phi}_\pm^{(0)} = 1$ , da die nullte Schicht unendlich dünn ist. Aus den Definitionen in Gl. (5.39) und (5.19) folgt, dass  $\mathbf{W}^{(0)} = \mathbf{W}^{(s)}$  und  $\mathbf{W}^{(M+1)} = \mathbf{W}^{(c)}$  ist.

Trotz der großen Ähnlichkeit von Gl. (5.46) und (5.47) mit Gl. (5.31) und (5.32) ist ein wesentlicher Unterschied, dass der S-Matrix Algorithmus durch Gl. (5.46) und (5.47) unabhängig von der Dicke der S-Matrix Schichten numerisch stabil ist [17].

Nach  $(M + 1)$  Rekursionsschritten erhält man somit nach Gl. (5.45)

$$\mathbf{b}^{(M+1)} = \mathbf{S}_{12}^{(M)} \mathbf{a}^{(M+1)}, \quad (5.52)$$

$$\mathbf{a}^{(0)} = \mathbf{S}_{22}^{(M)} \mathbf{a}^{(M+1)} \quad (5.53)$$

die gesuchten Rayleigh-Koeffizienten in Cover  $\mathbf{b}^{(c)} = \mathbf{b}^{(M+1)}$  und Substrat  $\mathbf{a}^{(s)} = \mathbf{a}^{(0)}$  in Abhängigkeit von den bekannten Koeffizienten  $\mathbf{a}^{(c)} = \mathbf{a}^{(M+1)}$ . Die Matrizen  $\mathbf{S}_{12}^{(M)}$  und  $\mathbf{S}_{22}^{(M)}$  entsprechen wiederum der Reflexions- bzw. Transmissionsmatrix des Gitters.

Es sei an dieser Stelle noch erwähnt, dass in Ref. [18] noch eine Variante des S-Matrix Algorithmus aufgeführt ist, die die Rekursionsformeln nicht über eine Matrix  $\tilde{\mathbf{T}}^{(q)}$ , sondern direkt mit Hilfe von  $\mathbf{W}^{(q+1)}$  und  $\mathbf{W}^{(q)}$  ausdrückt. Diese Variante wird hier nicht aufgeführt, wurde jedoch ebenfalls getestet und stellt eine Alternative zu der obigen Formulierung dar. Speziell bei isotropen Materialien kann jedoch eine Symmetrie der Matrizen  $\mathbf{W}^{(q)}$  ausgenutzt werden und die hier angegebene Formulierung ist dann vorteilhafter [18]. Für weitere Informationen zum S-Matrix Algorithmus, z.B. seine Stabilität und die Anzahl der für ihn benötigten Rechenoperationen sei an dieser Stelle auf Ref. [17, 18] verwiesen.

## Isotrope nichtmagnetische Materialien

Im Falle isotroper nichtmagnetischer Materialien hat die Matrix  $\mathbf{M}$  jeder S-Matrix Schicht die Form

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{M}_{13} & \mathbf{M}_{14} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{M}_{23} & \mathbf{M}_{24} \\ \mathbf{M}_{31} & \mathbf{M}_{32} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{M}_{41} & \mathbf{M}_{42} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (5.54)$$

Für Liniengitter ist  $\mathbf{M}$  durch Gl. (4.58) mit den darunter stehenden Elementen gegeben. Die Matrix  $\mathbf{Q}^{(e)}$  ist dabei in Gl. (4.57) mit  $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$  bzw. durch Gl. (4.60) festgelegt. Das bedeutet, dass  $\mathbf{M}_{11} = \mathbf{0} = \mathbf{M}_{21} = \mathbf{M}_{43} = \mathbf{M}_{44}$ . Für Kreuzgitter ist  $\mathbf{M}$  durch Gl. (4.91) mit den darunter stehenden Elementen gegeben.

Damit hat die Matrix  $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{4K \times 4K}$  in beiden Fällen die Form von Gl. (5.54). Für Liniengitter ist  $K = 2N + 1$  und für Kreuzgitter ist  $K = (2N_x + 1)(2N_z + 1)$ .

Für jedes Teilintervall mit konstantem  $\mathbf{M}$  müssen die Eigenwerte und -vektoren gefunden werden<sup>4</sup>. Zu Lösen ist somit

$$\mathbf{M}\mathbf{W} = \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}. \quad (5.55)$$

Diese Gleichung kann mit  $\mathbf{M}$  in der Form von Gl. (5.54) als

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{M}_1 \\ \mathbf{M}_2 & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11} & \mathbf{W}_{12} \\ \mathbf{W}_{21} & \mathbf{W}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11} & \mathbf{W}_{12} \\ \mathbf{W}_{21} & \mathbf{W}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{\Lambda}_{22} \end{pmatrix} \quad (5.56)$$

geschrieben werden [55]. Die Matrizen  $\mathbf{M}_1$  und  $\mathbf{M}_2$  stellen dabei die Blöcke aus Gl. (5.54) dar. Gl. (5.56) führt mittels einfacher Matrixoperationen zu

$$\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2\mathbf{W}_{11} = \mathbf{W}_{11}\mathbf{\Lambda}_{11}^2, \quad (5.57)$$

$$\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2\mathbf{W}_{12} = \mathbf{W}_{12}\mathbf{\Lambda}_{22}^2. \quad (5.58)$$

Beide Gleichungen beschreiben das Eigenwertproblem für die Matrix  $\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2 \in \mathbb{C}^{2K \times 2K}$ . Daraus folgt

$$\mathbf{W}_{11} = \mathbf{W}_{12}, \quad (5.59)$$

$$\mathbf{\Lambda}_{22} = -\mathbf{\Lambda}_{11}. \quad (5.60)$$

Ebenso folgt aus Gl. (5.56) mit Gl. (5.60)

$$\mathbf{W}_{21} = \mathbf{M}_2\mathbf{W}_{11}\mathbf{\Lambda}_{11}^{-1}, \quad (5.61)$$

$$\mathbf{W}_{22} = -\mathbf{W}_{21}. \quad (5.62)$$

Durch Lösen des Eigenwertproblems von  $\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2 \in \mathbb{C}^{2K \times 2K}$  in Gl. (5.57) können somit mittels Gln. (5.59–5.62) die Eigenwerte und -vektoren von  $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{4K \times 4K}$  bestimmt werden. Damit wird die Rechenzeit zum Lösen des Eigenwertproblems, die ansonsten proportional zu  $(4K)^3$  wäre, um den Faktor 8 reduziert [55]. Ebenso wird der Arbeitsspeicherbedarf reduziert.

Die hier beschriebene Vorgehensweise nach Ref. [55] entspricht der Umwandlung von Gl. (5.1) in ein System 2. Ordnung und Lösen des Eigenwertproblems für die Blockdiagonale Matrix  $-\mathbf{M}^2$  [21, 56].

<sup>4</sup>Im Code wird tatsächlich das Eigenwertproblem für  $\mathbf{G} = i\mathbf{M}$  gelöst. Die im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Trennung der Eigenwerte geschieht dabei automatisch, da die durch Wurzelziehen gefundenen Eigenwerte positive Realteile haben [21].

Für Liniengitter bei Beleuchtung mit  $\psi = 0^\circ$  lässt sich das Eigenwertproblem von  $\mathbf{M}$  auf zwei Eigenwertprobleme der Größe  $K \times K$  reduzieren<sup>5</sup>. Eine detaillierte Darstellung des Vorgehens findet sich in Ref. [55].

Die Matrix  $\mathbf{W}$  hat damit folgende Symmetrie [18]

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{W}_1 \\ \mathbf{W}_2 & -\mathbf{W}_2 \end{pmatrix}. \quad (5.63)$$

Die Matrix  $\tilde{\mathbf{T}}^{(q)}$  in Gl. (5.43) bzw. (5.44) ist somit für  $1 \leq q < M$  gegeben durch [18]

$$\tilde{\mathbf{T}}_{11}^{(q)} = \frac{1}{2} \left[ \left( \mathbf{W}_1^{(q+1)} \right)^{-1} \mathbf{W}_1^{(q)} + \left( \mathbf{W}_2^{(q+1)} \right)^{-1} \mathbf{W}_2^{(q)} \right], \quad (5.64)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}_{12}^{(q)} = \frac{1}{2} \left[ \left( \mathbf{W}_1^{(q+1)} \right)^{-1} \mathbf{W}_1^{(q)} - \left( \mathbf{W}_2^{(q+1)} \right)^{-1} \mathbf{W}_2^{(q)} \right] \quad (5.65)$$

und zusätzlich gilt  $\tilde{\mathbf{T}}_{21}^{(q)} = \tilde{\mathbf{T}}_{12}^{(q)}$  und  $\tilde{\mathbf{T}}_{22}^{(q)} = \tilde{\mathbf{T}}_{11}^{(q)}$ .

### 5.3 Sonderfall: anisotropes Substrat

Bei einem anisotropen Substrat handelt es sich bei  $\varepsilon_s$  und  $\mu_s$  um Konstanten. Mindestens eine der Größen ist ein Tensor. Bei optischen Frequenzen ist in der Regel  $\mu_s = \mu_0 \mathbf{I}$  [1].

Das Substrat kann generell als unendlich ausgedehnte homogene Schicht betrachtet werden. Die Propagationsmatrix  $\mathbf{M}$  ist konstant und das Feld im Substrat ( $y < 0$ ) ist, analog zu Gl. (4.61), gegeben durch

$$\mathbf{f}(y) = \mathbf{W}^{(s)} \exp(i\boldsymbol{\beta}y) \mathbf{c}, \quad (5.66)$$

wobei es sich bei  $\mathbf{c}$  um noch unbekannte Koeffizienten handelt. Die Matrix  $\mathbf{W}^{(s)}$  besteht wiederum aus den Eigenvektoren von  $\mathbf{M}$ . Die Matrix  $\boldsymbol{\beta}$  hat die dazugehörigen Eigenwerte  $\beta_m$  als Diagonalelemente. Die Matrix  $\mathbf{M}$  könnte wie in den Abschnitten 4.2 und 4.3 beschrieben ermittelt werden. Da jedoch  $\varepsilon_s$  und  $\mu_s$  konstant sind, ist  $\mathbf{Q}_{ij}^{(e)} = \varepsilon_{ij} \mathbf{I}$  und  $\mathbf{Q}_{ij}^{(h)} = \mu_{ij} \mathbf{I}$  mit  $i, j = x, y, z$ . Aus diesem Grund handelt es sich bei den Submatrizen  $\mathbf{M}_{rk}$ ,  $r, k = 1, \dots, 4$ , um Diagonalmatrizen und die Eigenwerte und -vektoren von  $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{4K \times 4K}$  lassen sich durch Lösen von  $K$  Eigenwertproblemen von  $4 \times 4$  Matrizen  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{4 \times 4}$  bestimmen [57]. Die Matrizen  $\mathbf{A}$  haben also die Form

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}. \quad (5.67)$$

Die Elemente  $a_{rk}$  entsprechen  $\mathbf{M}_{rk}$  in Gln. (4.46), wenn man  $\mathbf{Q}_{ij}^{(e)}$  durch  $\varepsilon_{ij}$ ,  $\mathbf{Q}_{ij}^{(h)}$  durch  $\mu_{ij}$  und  $\alpha$  durch  $\alpha_n$  ersetzt. Für Kreuzgitter ist ebenfalls  $\gamma_0$  durch  $\gamma_m$  zu ersetzen. Aus Gründen der Übersicht beschränken sich die weiteren Überlegungen auf Liniengitter. Eine Behandlung von Kreuzgittern erfolgt analog.

Für jedes Paar  $(\alpha_n, \gamma_0)$ ,  $n = 1, \dots, K$ , gibt es somit eine Matrix  $\mathbf{A}$ , deren Eigenwerte  $\beta_\ell$ ,  $\ell = 1, \dots, 4$ , durch  $\det(\mathbf{A} - \beta \mathbf{I})$  gegeben sind. Diese stimmen mit den Lösungen der Dispersionsgleichung (2.37) überein [50, 58]. Zu jedem Eigenwert  $\beta_\ell$  erhält man einen Eigenvektor der

<sup>5</sup>Dies wurde jedoch bisher nicht implementiert.

Form  $\tilde{\mathbf{w}}_\ell = (E_{x,\ell}, E_{z,\ell}, H_{x,\ell}, H_{z,\ell})$ . Es kann gezeigt werden, dass zwei Lösungen mit einfallenden und zwei mit ausfallenden ebenen Wellen zu verbinden sind [58]. Aus Gl. (5.66) ist zu erkennen, dass alle Lösungen mit  $\text{Im}(\beta_\ell) < 0$  evaneszent sind, während Lösungen mit  $\text{Im}(\beta_\ell) > 0$  exponentiell wachsen und zu den einfallenden Wellen gezählt werden [50, 58]. Für reelle Eigenwerte, die mit propagierenden Wellen verbunden sind, ist es nach Abschnitt 2.2 jedoch im Allgemeinen nicht so einfach zu sagen, ob es sich um einfallende oder ausfallende Wellen handelt. Für reelle Lösungen  $\beta_\ell$  muss deshalb der mit ihnen verbundene mittlere Poyntingvektor  $\langle \mathbf{P} \rangle_\ell$  gebildet werden. Bei

$$\hat{\mathbf{y}}^T \langle \mathbf{P} \rangle_\ell < 0, \quad (5.68)$$

mit  $\hat{\mathbf{y}} = (0, 1, 0)$ , handelt es sich um die gesuchten Lösungen, da Energie in negative  $y$ -Achsenrichtung transportiert wird. Der mittlere Poyntingvektor ist nach Gl. (2.31) gegeben durch

$$\langle \mathbf{P} \rangle_\ell = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E}_\ell \times \mathbf{H}_\ell^*) = \frac{c_\ell c_\ell^*}{2} \text{Re}(\mathbf{e}_\ell \times \mathbf{h}_\ell^*). \quad (5.69)$$

Der Vektor  $\mathbf{e}_\ell$  stellt den normalisierten  $\mathbf{E}_\ell$ -Feldvektor dar und  $\mathbf{h}_\ell$  den dazugehörigen  $\mathbf{H}_\ell$ -Feldvektor. Bei  $c_\ell$  handelt es sich um die noch unbekannte komplexe Amplitude.

Für jeden reellen Eigenwert  $\beta_\ell$  findet sich aus Gl. (2.35) mit  $E_{x,\ell}$  und  $E_{z,\ell}$  aus dem bekannten Eigenvektor  $\tilde{\mathbf{w}}_\ell$  die Komponente  $E_{y,\ell}$ . Durch Normierung ergibt sich  $\mathbf{e}_\ell$ . Aus Gl. (2.33) folgt dann

$$\mathbf{h}_\ell = \frac{1}{\omega} \mu^{-1} \mathbf{K} \mathbf{e}_\ell. \quad (5.70)$$

Wegen  $\langle \mathbf{P} \rangle_\ell \propto \text{Re}(\mathbf{e}_\ell \times \mathbf{h}_\ell^*)$  und  $c_\ell c_\ell^* \geq 0$  kann mittels Gl. (5.68) das Vorzeichen des mittleren Poyntingvektors ermittelt werden.

Per Definition wird festgelegt, dass die Eigenwerte und -vektoren für jedes Paar  $(\alpha_n, \gamma_0)$  so sortiert werden, dass es sich bei  $\ell = 1, 2$  um die gesuchten ausfallenden Beugungsordnungen im Substrat handelt. Nach Konvention ist  $\text{Re}(\beta_1) > \text{Re}(\beta_2)$ . Gl. (5.66) lässt sich nun für  $y = 0$  in der Form

$$\mathbf{f}(0) = \mathbf{W}^{(s)} \mathbf{c} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11}^{(s)} & \mathbf{W}_{12}^{(s)} \\ \mathbf{W}_{21}^{(s)} & \mathbf{W}_{22}^{(s)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}^- \\ \mathbf{c}^+ \end{pmatrix} \quad (5.71)$$

schreiben. Bei  $\mathbf{c}^- = (\mathbf{c}_1^T \mathbf{c}_2^T)^T$ , bestehend aus  $c_{1,n}$  und  $c_{2,n}$ ,  $n = 1, \dots, K$ , handelt es sich um die gesuchten Amplituden der ausfallenden Wellen. Da keine einfallenden Wellen aus dem Substrat betrachtet werden, gilt  $\mathbf{c}^+ = \mathbf{0}$ . Die Matrix  $\mathbf{W}^{(s)}$  ergibt sich damit zu

$$\mathbf{W}^{(s)} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{1,x} & \mathbf{e}_{2,x} & \mathbf{e}_{3,x} & \mathbf{e}_{4,x} \\ \mathbf{e}_{1,z} & \mathbf{e}_{2,z} & \mathbf{e}_{3,z} & \mathbf{e}_{4,z} \\ \mathbf{h}_{1,x} & \mathbf{h}_{2,x} & \mathbf{h}_{3,x} & \mathbf{h}_{4,x} \\ \mathbf{h}_{1,z} & \mathbf{h}_{2,z} & \mathbf{h}_{3,z} & \mathbf{h}_{4,z} \end{pmatrix}, \quad (5.72)$$

wobei es sich bei  $\mathbf{e}_{1,x}$  um eine Diagonalmatrix mit den Elementen  $e_{1,x,n}$  handelt [50]. Für die anderen Einträge gilt analoges. Wegen  $\mathbf{c}^+ = \mathbf{0}$  kann die rechte Hälfte der Matrix jedoch auch gleich Null gesetzt werden.

Ein Vergleich von Gl. (5.71) mit Gl. (5.19) zeigt, dass wenn die in Gl. (5.72) aufgeführte Matrix  $\mathbf{W}^{(s)}$  für den S-Matrix Algorithmus in Abschnitt 5.2.1 oder 5.2.2 verwendet wird, es sich bei der Lösung statt um  $\mathbf{a}^{(s)}$  um die in diesem Abschnitt aufgeführten Koeffizienten  $\mathbf{c}^-$  handelt.

Die Rayleigh-Entwicklung im Substrat ( $y < 0$ ) für Liniengitter lautet dann [50, 58]

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \sum_{n=-N}^N \sum_{\ell=1}^2 c_{\ell,n} \mathbf{e}_{\ell,n} \exp(i\alpha_n x + i\beta_{\ell,n} y + i\gamma_0 z) \quad (5.73)$$



und

$$\mathbf{H}(x, y, z) = \sum_{n=-N}^N \sum_{\ell=1}^2 c_{\ell,n} \mathbf{h}_{\ell,n} \exp(i\alpha_n x + i\beta_{\ell,n} y + i\gamma_0 z). \quad (5.74)$$

Durch Lösen des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems (5.1) unter Beachtung der Randbedingungen lassen sich somit die Amplituden der ausfallenden ebenen Wellen bestimmen. Aus numerischen Gründen muss dabei im Allgemeinen der hier beschriebene S-Matrix Algorithmus verwendet werden. Die  $z$ -Komponenten der ausfallenden ebenen Wellen ergeben sich dann aus Gln. (5.36) und (5.37) bzw. Gln. (5.52) und (5.53). Die  $x$ - und  $y$ -Komponenten der Felder können im isotropen Medium aus ihnen ermittelt werden, da sich die Felder in Abhängigkeit von den  $z$ -Komponenten darstellen lassen. Im anisotropen Substrat erhält man als Lösung elektrische Feldstärkeamplituden, die zu Wellen mit ebenfalls ermittelter Polarisation gehören.

## 6 Berechnung der Beugungseffizienzen

Sind die Rayleigh-Koeffizienten in Cover und Substrat bestimmt, ist das Beugungsproblem gelöst. Durch sie sind die Amplituden und Phasen der einzelnen Beugungswellen gegeben. Aus ihnen lassen sich nun andere interessierende Größen der optischen Messtechnik, z.B. Parameter der Ellipsometrie und Polarimetrie bestimmen. Zur Anwendung der Differentiellen Methode bzw. RCWA in der optischen Messtechnik sei an dieser Stelle auf Ref. [13, 49] verwiesen. In diesem Abschnitt wird erläutert, wie sich die Beugungseffizienzen aus den Rayleigh-Koeffizienten berechnen lassen.

Im Allgemeinen ist die Beugungseffizienz der  $(n, m)$ -ten Beugungsordnung durch

$$e^{(n,m)} = \left| \frac{\hat{\mathbf{y}}^T \langle \mathbf{P} \rangle_{nm}}{\hat{\mathbf{y}}^T \langle \mathbf{P} \rangle_i} \right| \quad (6.1)$$

definiert [1, 58].

Es handelt sich um die mittlere Energieflussdichte der  $(n, m)$ -ten Beugungsordnung bezogen auf eine Einheitsfläche parallel zur  $xz$ -Ebene und normiert mit der einfallenden mittleren Energieflussdichte. Dabei wird der mittlere Poyntingvektor, welcher durch Gl. (2.31) gegeben ist, auf den Einheitsvektor  $\hat{\mathbf{y}}$  in  $y$ -Achsenrichtung projiziert.

An dieser Stelle soll das allgemeine Vorgehen anhand der Berechnung der Transmissionseffizienzen für ein isotropes und ein anisotropes Substrat beschrieben werden. Es soll dabei ein Liniengitter betrachtet werden, bei dem der Index  $m$  in der obigen Gleichung wegfällt. Die Berechnung der Reflexionseffizienzen des als isotrop angenommenen Covers und die Berechnung im Falle eines Kreuzgitters erfolgt jedoch analog.

### Isotropes Medium

Zunächst soll ein isotropes Substrat mit  $\varepsilon_s$  und  $\mu_s$  betrachtet werden. Die  $n$ -te Beugungsordnung mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k}_{t,n} = (\alpha_n, \beta_{t,n}, \gamma_0)$  hat die elektrische Feldstärke  $\mathbf{E}_n$  und die magnetische Feldstärke  $\mathbf{H}_n$ . Diese sind durch die Rayleigh-Koeffizienten gegeben durch

$$\mathbf{E}_n = (a_{e,x,n}^{(s)}, a_{e,y,n}^{(s)}, a_{e,z,n}^{(s)}), \quad (6.2)$$

$$\mathbf{H}_n = (a_{h,x,n}^{(s)}, a_{h,y,n}^{(s)}, a_{h,z,n}^{(s)}). \quad (6.3)$$

Es handelt sich, wie in Abschnitt 2.1 erläutert, um eine ebene Welle.

Jede beliebige Polarisation kann als Superposition zweier orthogonaler Polarisationen dargestellt werden [35, 32]. Wird ein Einheitsvektor

$$\hat{\mathbf{e}}_s = \frac{\mathbf{k}_{t,n} \times \hat{\mathbf{y}}}{\|\mathbf{k}_{t,n} \times \hat{\mathbf{y}}\|} \quad (6.4)$$

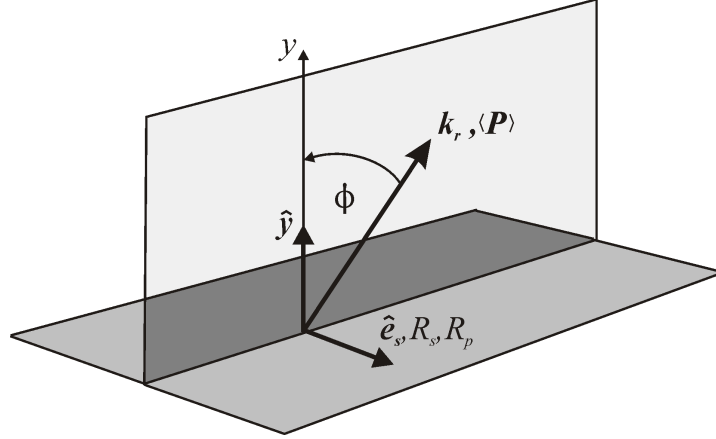
eingeführt, können durch Projektion von  $\mathbf{E}_n$  und  $\mathbf{H}_n$  auf diesen, die Amplituden zweier ebener Wellen mit orthogonaler Polarisation bestimmt werden. Diese werden als TE- bzw. TM-

Polarisation oder synonym als  $s$ - bzw.  $p$ -Polarisation bezeichnet. Es ist somit

$$T_{s,n} = \hat{\mathbf{e}}_s^T \mathbf{E}_n, \quad (6.5)$$

$$T_{p,n} = \hat{\mathbf{e}}_s^T \mathbf{H}_n. \quad (6.6)$$

Im Cover ergeben sich auf dieselbe Weise die Reflexionsamplituden  $R_s$  und  $R_p$  (siehe Abb. 6.1). Bei den  $s$ -polarisierten Beugungswellen handelt es sich bei  $R_s$  und  $T_s$  somit um elektrische Feldstärkeamplituden, wogegen  $R_p$  und  $T_p$  magnetische Feldstärkeamplituden sind. Der Ener-



**Abb. 6.1:** Orientierung der Größen für eine reflektierte Beugungsordnung. Diese wird als Superposition zweier orthogonaler Polarisationen mit komplexen Amplituden  $R_s$  und  $R_p$  angesehen.

giefluss beider Polarisationen wird durch den Poyntingvektor nach Gl. (2.31) beschrieben. Im Falle des isotropen Mediums kann dieser durch die elektrische oder die magnetische Feldstärke allein ausgedrückt werden. Aus Gl. (2.29) mit Gl. (2.9) und Gl. (2.17) ergibt sich

$$|\mathbf{H}| = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} |\mathbf{E}| = \frac{1}{Z} |\mathbf{E}|. \quad (6.7)$$

Die Größe  $Z$  wird als Impedanz des Mediums oder Wellenwiderstand bezeichnet [33]. Für ein nichtmagnetisches Medium ist  $Z = Z_0/n$  mit der Vakuumimpedanz<sup>1</sup>  $Z_0 = (\mu_0/\varepsilon_0)^{1/2}$  und dem Brechungsindex  $n$ . Im Folgenden wird zur besseren Übersicht von einem nichtmagnetischen Material ausgegangen<sup>2</sup>.

Es ergibt sich

$$\hat{\mathbf{y}}^T \langle \mathbf{P} \rangle = |\langle \mathbf{P} \rangle| \cos \phi = \frac{\operatorname{Re}(\beta)}{2k_0 Z_0} |\mathbf{E}|^2 = \frac{\operatorname{Re}(\beta) Z_0}{2n^2 k_0} |\mathbf{H}|^2 \quad (6.8)$$

wobei  $\operatorname{Re}(\beta) = nk_0 \cos \phi$  die  $y$ -Komponente des Wellenvektors der propagierenden Beugungsordnungen ist. Aus der Definition der Effizienz in Gl. (6.1) mit Gl. (6.8) und unter der Annahme dass  $|\mathbf{E}_i| = 1$  ist, folgen die Effizienzen der  $s$ - bzw.  $p$ -polarisierten Beugungswellen zu

$$e_{r,s}^{(n)} = \frac{\operatorname{Re}(\beta_{r,n})}{\beta_0} |R_{s,n}|^2, \quad e_{r,p}^{(n)} = \frac{\operatorname{Re}(\beta_{r,n})}{n_c^2 \beta_0} |R_{p,n}|^2, \quad (6.9)$$

$$e_{t,s}^{(n)} = \frac{\operatorname{Re}(\beta_{t,n})}{\beta_0} |T_{s,n}|^2, \quad e_{t,p}^{(n)} = \frac{\operatorname{Re}(\beta_{t,n})}{n_s^2 \beta_0} |T_{p,n}|^2. \quad (6.10)$$

<sup>1</sup>Bei den zur Berechnung verwendeten Einheiten ist wegen  $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$  auch immer  $Z_0 = 1$ .

<sup>2</sup>Andernfalls bekommt am Ende  $e_{t,s}^{(n)}$  noch den Vorfaktor  $(\mu_{r,c}/\mu_{r,s})$  und  $e_{t,p}^{(n)}$  den Vorfaktor  $\mu_{r,c} \mu_{r,s}$ , welche beide für den Fall nichtmagnetischer Materialien gleich eins sind.

Die Gesamtbeugungseffizienz der  $n$ -ten Beugungsordnung in Reflexion  $e_r^{(n)}$  und in Transmission  $e_t^{(n)}$  ergeben sich dann zu

$$e_r^{(n)} = e_{r,s}^{(n)} + e_{r,p}^{(n)}, \quad (6.11)$$

$$e_t^{(n)} = e_{t,s}^{(n)} + e_{t,p}^{(n)}. \quad (6.12)$$

### Anisotropes Medium

Im Falle eines anisotropen Substrats handelt es sich nach Abschnitt 5.3 bei der Rayleigh-Entwicklung nach Gln. (5.73) und (5.74) bei  $\text{Im}(\beta_{\ell,n}) = 0$ ,  $\ell = 1, 2$ , um propagierende Wellen mit  $\mathbf{E}_{\ell,n} = c_{\ell,n} \mathbf{e}_{\ell,n}$  und  $\mathbf{H}_{\ell,n} = c_{\ell,n} \mathbf{h}_{\ell,n}$ . Bei der Projektion des dazugehörigen mittleren Poyntingvektors nach Gl. (5.69) handelt es sich somit um

$$\hat{\mathbf{y}}^T \langle \mathbf{P} \rangle_{\ell,n} = \frac{1}{2} |c_{\ell,n}|^2 \text{Re}(e_{x,\ell,n} h_{z,\ell,n}^* - e_{z,\ell,n} h_{x,\ell,n}^*), \quad (6.13)$$

während für die einfallende Welle aus dem isotropen Cover mit normierter elektrischer Feldstärkeamplitude nach Gl. (6.8)

$$\hat{\mathbf{y}}^T \langle \mathbf{P} \rangle_i = \frac{\beta_0}{2k_0 Z_0}, \quad (6.14)$$

gilt [58].

Durch Gl. (6.1) mit Gln. (6.13) und (6.14) sind die Transmissionseffizienzen damit durch

$$e_{t,\ell}^{(n)} = \frac{k_0 Z_0 |c_{\ell,n}|^2 \text{Re}(e_{x,\ell,n} h_{z,\ell,n}^* - e_{z,\ell,n} h_{x,\ell,n}^*)}{\beta_0} \quad (6.15)$$

gegeben [50, 58].

### Anmerkung zur Konvergenz der Ergebnisse

Die Anzahl der berücksichtigten Fouriermoden zur Darstellung der Felder ist, um sinnvolle Ergebnisse bei einer Rechnung zu erhalten, hoch genug zu wählen. Im Allgemeinen ist die interessierende Größe dabei in Abhängigkeit der Anzahl berücksichtigter Fouriermoden zu betrachten. Ändert sich der errechnete Wert beim Erhöhen der Anzahl der Moden nicht mehr signifikant, ist das Ergebnis konvergiert. Was jedoch eine signifikante Änderung ist muss dabei noch im Einzelfall definiert werden.

Da auch der konvergierte Wert mit einem Fehler behaftet ist (Rundungsfehler, Diskretisierungsfehler, etc.), wäre eine Möglichkeit den Fehler abschätzen zu können sehr interessant. Anscheinend gibt es jedoch bisher in dieser Richtung keine Untersuchungen in der Literatur. Häufig findet man jedoch, dass die Ergebnisse der Differentiellen Methode bzw. RCWA mit Ergebnissen aus Experimenten und anderen numerischen Methoden verglichen werden.

Eine Konvergenzrate kann definiert werden, indem man die Modenzahl betrachtet, bei der das Ergebnis einen Wert innerhalb eines Vertrauensintervalls um das „richtige“ Ergebnis annimmt, ohne dieses Intervall beim Erhöhen der Anzahl von Moden zu verlassen. Da im Allgemeinen das „richtige“ Ergebnis nicht bekannt ist, wird häufig ein Wert genommen, der mit einer sehr hohen Anzahl von Fouriermoden berechnet wurde.

## 7 Nahfeldberechnung

In diesem Abschnitt wird die Nahfeldberechnung für die Differentielle Methode mit S-Matrix Algorithmus nach Abschnitt 5.2.1 beschrieben. Die geeignete Berechnung der Nahfelder für die RCWA wird in Ref. [59] für Liniengitter detailliert behandelt. Die Darstellung in Abschnitt 7.1 folgt Ref. [1].

### 7.1 Allgemeines Vorgehen

Nachdem die Rayleigh-Koeffizienten in Cover und Substrat bestimmt wurden, können die Fourierkoeffizienten der  $x$ - und  $z$ -Komponenten der Felder  $\mathbf{f}(y)$  durch eine zusätzliche Integration von Gl. (5.1) mit bekannten Startwerten für jede S-Matrix Schicht ermittelt werden. Die Integration kann mittels Gl. (5.4), (5.5) oder (5.6) durchgeführt werden. An dieser Stelle müssen somit noch die Felder  $\mathbf{f}(y_q)$  an den Grenzen  $y = y_q$ ,  $q = 1, \dots, M$  der S-Matrix Schichten als Anfangswerte ermittelt werden (siehe Abb. 5.1).

Für die unterste Schicht,  $q = 1$ , ergibt sich  $\mathbf{f}(y_1) = \mathbf{f}(0)$  aus Gl. (5.19) mit  $j = s$ . Für  $q > 1$  werden die Felder wie folgt berechnet:

Nach Gl. (5.27) folgt mit  $\mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{0}$

$$\mathbf{b}^{(q)} = \mathbf{S}_{12}^{(q-1)} \mathbf{a}^{(q)}, \quad (7.1)$$

$$\mathbf{a}^{(1)} = \mathbf{S}_{22}^{(q-1)} \mathbf{a}^{(q)}. \quad (7.2)$$

Daraus würde sich

$$\mathbf{a}^{(q)} = \left( \mathbf{S}_{22}^{(q-1)} \right)^{-1} \mathbf{a}^{(1)} \quad (7.3)$$

ergeben. Die Matrix  $\mathbf{S}_{22}^{(q-1)}$  ist jedoch häufig nahezu singularär und eine Invertierung der Matrix daher problematisch. Durch Gl. (5.32) ist jedoch

$$\left( \mathbf{S}_{22}^{(q-1)} \right)^{-1} = \mathbf{Z}^{(q)} \left( \mathbf{S}_{22}^{(q)} \right)^{-1} \quad (7.4)$$

$$= \mathbf{Z}^{(q)} \mathbf{Z}^{(q+1)} \dots \mathbf{Z}^{(M)} \left( \mathbf{S}_{22}^{(M)} \right)^{-1}. \quad (7.5)$$

Einsetzen von Gl. (7.5) in Gl. (7.3) ergibt mit Gl. (7.3) für  $q = M + 1$

$$\mathbf{a}^{(q)} = \mathbf{Z}^{(q)} \mathbf{Z}^{(q+1)} \dots \mathbf{Z}^{(M)} \left( \mathbf{S}_{22}^{(M)} \right)^{-1} \mathbf{a}^{(1)} \quad (7.6)$$

$$= \mathbf{Z}^{(q)} \mathbf{Z}^{(q+1)} \dots \mathbf{Z}^{(M)} \mathbf{a}^{(M+1)}. \quad (7.7)$$

und damit sind  $\mathbf{a}^{(q)}$ ,  $q = 2, \dots, M$ , durch die bekannten Rayleigh-Koeffizienten im Cover  $\mathbf{a}^{(M+1)}$  dargestellt. Die Größe  $\mathbf{b}^{(q)}$  ergibt sich dann aus Gl. (7.1). Während der Berechnung der Rayleigh-Koeffizienten in Cover und Substrat sind also die Matrizen  $\mathbf{Z}^{(q)}$  und  $\mathbf{S}_{12}^{(q)}$  zwischenspeichern, wenn man die Felder bei  $y = y_q$  später berechnen und zur Nahfeldberechnung verwenden

möchte. Ist die Matrix  $\mathbf{T}^{(q)}$  mit Gl. (5.29) berechnet, handelt es sich bei  $\mathbf{a}^{(q)}$  und  $\mathbf{b}^{(q)}$  um Rayleigh-Koeffizienten der unendlich dünnen Zwischenschicht aus dem Material des Covers bei  $y = y_q$ . Diese müssen durch Multiplikation mit  $\mathbf{W}^{(c)}$  nach Gl. (5.19) in die Fourierkoeffizienten der Felder  $\mathbf{f}(y_q)$  umgewandelt werden. Wird dagegen mit  $\mathbf{T}^{(q)}$  aus Gl. (5.38) gearbeitet, handelt es sich bei dem Vektor  $\mathbf{v}^{(q)}$  aus Abschnitt 5.1, bestehend aus  $\mathbf{a}^{(q)}$  und  $\mathbf{b}^{(q)}$ , direkt um  $\mathbf{f}(y_q)$ .

Die Integration in den einzelnen Schichten kann nun so durchgeführt werden, dass die Schrittweite der Integration nahezu die der gewünschten Auflösung des Nahfeldbildes entspricht. Die benötigten Werte von  $\mathbf{f}(y)$  ergeben sich dann durch Interpolation der berechneten und gespeicherten Werte der Integration. Die  $y$ -Komponenten der Felder ergeben sich dann aus Gl. (4.43) und Gl. (4.44), wobei  $[D_y]$  und  $[B_y]$  in Gl. (4.25) für Liniengitter und, nach Ersetzen von  $\gamma_0$  durch  $\gamma$ , auch für Kreuzgitter in Abhängigkeit von den Fourierkoeffizienten der  $x$ - und  $z$ -Komponenten gegeben sind.

Alle Feldkomponenten innerhalb des modulierten Bereichs lassen sich dann als Fourierreihen der Form von Gl. (4.23) bzw. (4.70) entwickeln. Ausserhalb des modulierten Bereichs sind die Felder durch Rayleigh-Entwicklung, jedoch mit endlicher Anzahl von Summanden, mit den berechneten Rayleigh-Koeffizienten gegeben.

## 7.2 Entwicklung mittels stetiger Funktionen

In Ref. [59] wird die Nahfeldberechnung für die RCWA für Liniengitter aus isotropen nicht-magnetischen Materialien beschrieben. Dabei werden lediglich stetige Feldkomponenten durch Fourierreihen entwickelt. Bei der RCWA handelt es sich in diesem Fall um  $D_x$ ,  $E_y$ ,  $E_z$  und alle Komponenten der magnetischen Feldstärke  $\mathbf{H}$ . Im Ortsraum ergibt sich dann aus der Materialgleichung (2.8)

$$E_x = \frac{D_x}{\varepsilon(x)}. \quad (7.8)$$

Ähnliche Überlegungen für Liniengitter mit beliebigen Profilverformen führen dazu, dass  $x$ - und  $y$ -Komponenten der stetigen Feldanteile  $\mathbf{D}_n = \varepsilon(x)\mathbf{E}_n$  und  $\mathbf{E}_t$  durch Fourierreihen entwickelt werden, während die  $z$ -Komponente  $E_{t,z} = E_z$  ebenfalls stetig ist. Im Ortsraum ist dann

$$\mathbf{E}_n = \frac{1}{\varepsilon(x)}\mathbf{D}_n \quad (7.9)$$

und

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_n + \mathbf{E}_t. \quad (7.10)$$

Die Projektion von  $\mathbf{D}$  auf den Normalenvektor ist durch

$$\mathbf{D}_n = \mathbf{nn}^T\mathbf{D} \quad (7.11)$$

gegeben. Wegen der Stetigkeit von  $\mathbf{n}(x)$  an den Materialgrenzflächen folgt daraus, analog zu Gl. (4.55), im Fourierraum

$$[\mathbf{D}_n] = [\mathbf{nn}^T][\mathbf{D}] \quad (7.12)$$

und daher für das hier betrachtete Liniengitter mit  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, 0)$

$$[D_{n,x}] = \llbracket n_x^2 \rrbracket [D_x] + \llbracket n_x n_y \rrbracket [D_y] \quad (7.13)$$

$$[D_{n,y}] = \llbracket n_x n_y \rrbracket [D_x] + \llbracket n_y^2 \rrbracket [D_y]. \quad (7.14)$$

Die Größe  $[D_y]$  ist dabei durch Gl. (4.25) gegeben und für  $[D_x]$  ergibt sich aus Gl. (4.39)

$$[D_x] = \mathbf{Q}_{xx}^{(e)} [E_x] + \mathbf{Q}_{xy}^{(e)} [E_y] \quad (7.15)$$

und  $\mathbf{Q}_{xx}^{(e)}$  und  $\mathbf{Q}_{xy}^{(e)}$  aus Gl. (4.57).

Die Größe  $[\mathbf{E}_t]$  ist durch Gl. (4.54) gegeben. Es folgt

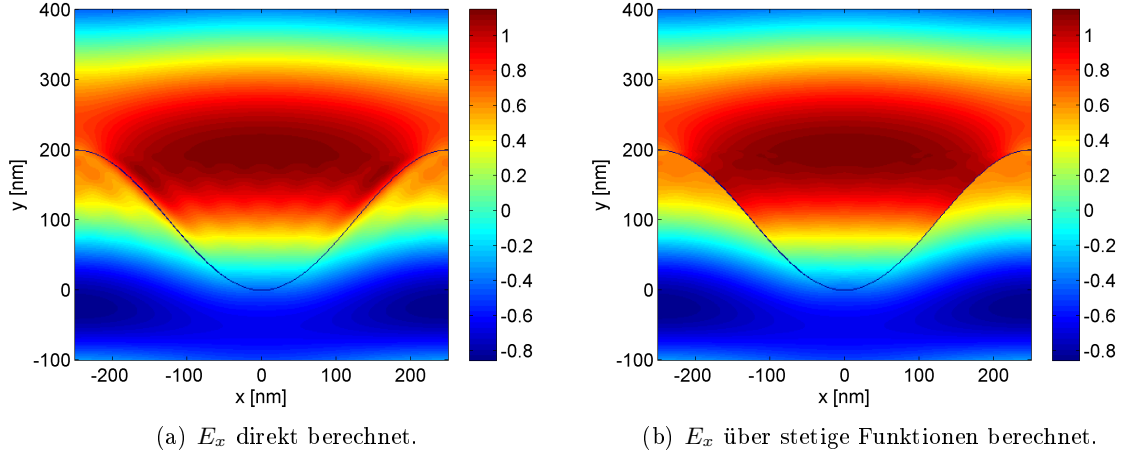
$$[E_{t,x}] = \llbracket n_y^2 \rrbracket [E_x] - \llbracket n_x n_y \rrbracket [E_y] \quad (7.16)$$

$$[E_{t,y}] = -\llbracket n_x n_y \rrbracket [E_x] + \llbracket n_x^2 \rrbracket [E_y] . \quad (7.17)$$

Damit sind die Fourierkoeffizienten der stetigen Komponenten von  $\mathbf{D}_n$  und  $\mathbf{E}_t$  gegeben und können nach Gl. (4.23) durch Fourierreihen mit endlicher Modenzahl angenähert werden. Mit Hilfe von Gl. (7.9) und (7.10) ergeben sich dann die Komponenten von  $\mathbf{E}$  im Ortsraum.

Als Beispiel für die hier beschriebene Art der Feldberechnung soll folgendes sinusförmiges Gitter betrachtet werden: Das Profil wird durch  $g(x) = (a/2) [1 + \cos(2\pi x/d_x)]$  beschrieben, mit der Gitterperiode  $d_x = 500\text{nm}$  und Gitterhöhe  $a = 200\text{nm}$ . Die Beleuchtung erfolgt durch eine ebene Welle aus dem Cover ( $n_c = 1$ ) mit Einfallswinkeln  $\phi = \psi = 0^\circ$  und TM-Polarisation. Für  $y \leq g(x)$  handelt es sich um ein Dielektrikum mit Brechungsindex  $n = 1.6$ . Die Beleuchtungswellenlänge beträgt  $\lambda_0 = 632.8\text{nm}$ .

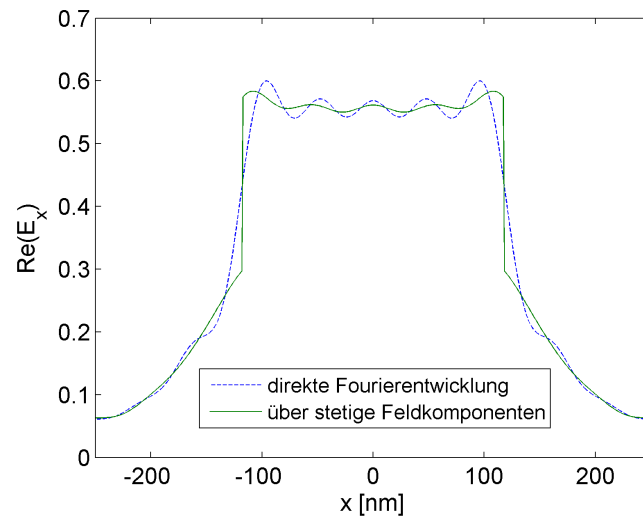
In Abb. 7.1 ist  $E_x$  mit  $N = 10$  Moden dargestellt. In dem linken Bild ist  $E_x$  direkt durch die Fourierkoeffizienten  $[E_x]$  nach Gl. (4.23) berechnet. Beim rechten Bild wurde  $E_x$  in der in diesem Abschnitt beschriebenen Weise berechnet.



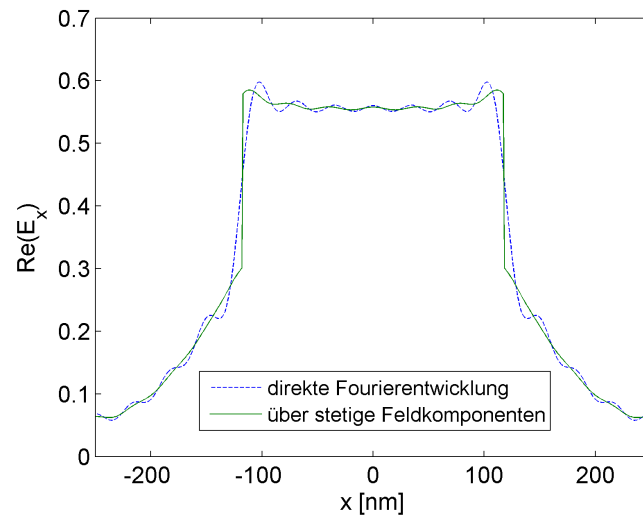
**Abb. 7.1:** Vergleich der verschiedenen Arten der Nahfeldberechnung mit  $N = 10$ .

Gut zu erkennen in Abb. 7.1 sind die Gibbschen Überschwinger und deren Abschwächung bei der Entwicklung von stetigen Funktionen mit der gleichen Modenzahl. Dies wird besonders auch in Abb. 7.2 und Abb. 7.3, in der  $E_x$  bei  $y = 100\text{nm}$  für  $N = 10$  und  $N = 15$  gezeigt wird, deutlich. Ebenso sind die Stetigkeitsbedingungen von  $E_x$  in Abb. 7.1 (b) gut zu erkennen, während dies in (a) nicht der Fall ist.

Die hier beschriebene Weise der Feldberechnung liefert jedoch nur bei Dielektrika und nicht zu stark leitenden Materialien gute Ergebnisse und wurde deshalb nicht weiter verfolgt. Sie ist deshalb nur als Zusatz bei Liniengittern aus isotropen nichtmagnetischen Materialien implementiert.



**Abb. 7.2:** Vergleich der x-Komponente der elektrischen Feldstärke bei  $y = 100\text{nm}$  mit  $N = 10$ .



**Abb. 7.3:** Vergleich der x-Komponente der elektrischen Feldstärke bei  $y = 100\text{nm}$  mit  $N = 15$ .



# 8 Anwendungsbeispiele

## 8.1 Performance-Vergleich anhand zweier Berechnungsbeispiele

In diesem Abschnitt werden zwei Gitter als Beispiele betrachtet, um die Rechenzeit der Differentiellen Methode für Linien- und Kreuzgitter aus isotropen bzw. anisotropen Materialien zu vergleichen. Die Beispiele sind jedoch keineswegs repräsentativ für ihre Klasse, sondern sollen lediglich ein Gefühl für die Größenordnungen der benötigten Rechenzeiten vermitteln. Es handelt sich um Gitter aus isotropen Materialien, die sowohl mit dem implementierten Code für isotrope Materialien als auch für anisotrope Materialien berechnet werden können. Daraus kann geschlossen werden in welchem Verhältnis Rechenzeiten von isotropen und anisotropen Gittern stehen.

### 8.1.1 Sinusförmiges Liniengitter aus Aluminium

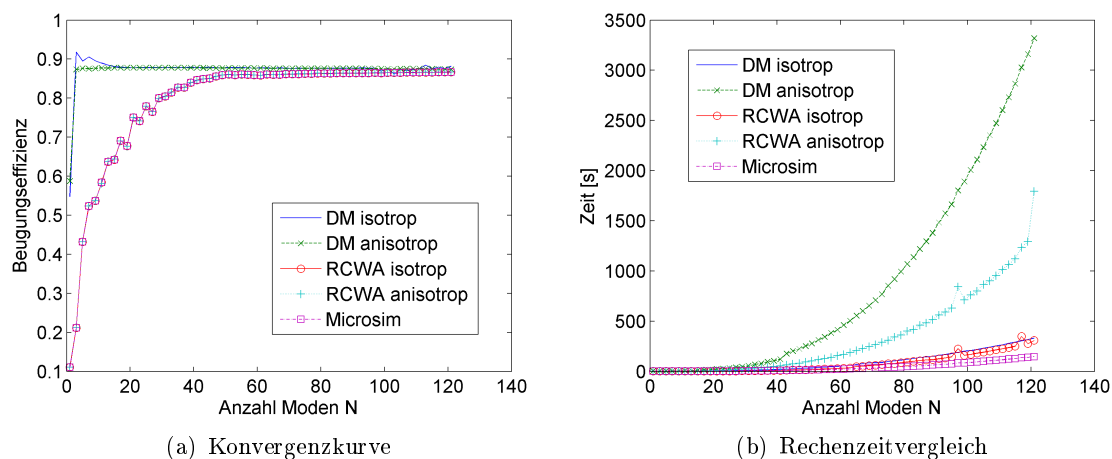
Bei diesem Beispiel handelt es sich um das sinusförmige Liniengitter aus Ref. [1, 29]. Die Situation entspricht der in Abb. 4.2 gezeigten. Die Beleuchtung des Gitters erfolgt durch eine TM-polarisierte ebene monochromatische Welle mit Vakuumwellenlänge  $\lambda_0 = 632.8\text{nm}$ . Die Einfallswinkel betragen  $\phi = 40^\circ$  und  $\psi = 0^\circ$ . Die Einfallsebene der Welle liegt damit in der  $xy$ -Ebene. Oberhalb der Grenzflächenfunktion  $g(x) = (a/2)[1 + \cos(2\pi x/d_x)]$ , mit  $d_x = 500\text{nm}$  und  $a = 200\text{nm}$ , befindet sich Luft mit Brechungsindex  $n_c = 1$ . Für  $y \leq g(x)$  handelt es sich bei dem Material um Aluminium mit Brechungsindex  $n_s = 1.3 + 7.6i$ .

Es sei angemerkt, dass es sich bei diesem Beispiel gleich in mehrfacher Hinsicht um einen Spezialfall handelt. Zum einen ist der Azimutwinkel  $\psi = 0^\circ$ , weshalb nach Abschnitt 4.2.4 das zu lösende System von Differentialgleichungen in zwei Teilsysteme für TE- und TM-polarisierte einfallende Felder entkoppelt. In der Integration des Systems im Code der Differentiellen Methode für isotrope Materialien ist daher die Matrix  $\mathbf{M}(y)$  im Vergleich zum allgemeinen Fall halbiert. Das Lösen der Eigenwertprobleme der Schichten im Code der RCWA mit S-Matrix Algorithmus könnte nach Abschnitt 5.2.2 gemäss Ref. [55] ebenfalls noch beschleunigt werden. Der Spezialfall von  $\psi = 0^\circ$ , bei dem das Eigenwertproblem der Matrix  $\mathbf{M}$  der Größe  $4K \times 4K$  zu zwei Eigenwertproblemen der Größe  $K \times K$  wird, ist im Code bisher jedoch nicht berücksichtigt. Auch handelt es sich um nichtmagnetische Materialien, weshalb die Matrix  $\mathbf{Q}^{(h)}$  im Code für anisotrope Materialien nicht berechnet wird, sondern explizit gegeben ist. Ebenso handelt es sich um ein Beispiel, das sehr geeignet für die Differentielle Methode ist, während die Stufenapproximation der RCWA zu einer schlechten Konvergenzrate der Methode führt. Der Grund dafür sind Felderhöhungen des elektrischen Feldes an den Ecken des stufenförmigen Profils, die eine große Anzahl von Fouriermoden zur Darstellung der elektrischen Feldkomponenten erforderlich machen [1, 29]. Dies gilt auch im Fall anisotroper leitfähiger Materialien<sup>1</sup> [28, 40]. Durch die sinusförmige Profilform handelt es sich bei den Komponenten des Normalenvektors in der Differentiellen Methode ebenfalls um einfache harmonische Funktionen, die sich damit optimal als Fourierreihe darstellen lassen.

---

<sup>1</sup>Beispiele dafür finden sich in Anhang A.

In Abb. 8.1 (a) ist die Konvergenzkurve für die -1. Beugungsordnung in Reflexion dargestellt. Dabei wurde das Gitter mit der Differentiellen Methode für isotrope und anisotrope Materialien, der RCWA für isotrope und anisotrope Materialien und dem Programmpaket *Microsim* des *Instituts für Technische Optik Stuttgart* berechnet. Der Kern von *Microsim* ist die RCWA mit ETMA, weshalb zur besseren Unterscheidung im Folgenden nur von RCWA gesprochen wird, wenn es sich um die RCWA mit S-Matrix Algorithmus handelt. Bei allen Berechnungen mit *Microsim* und der RCWA wurde das Gitter durch 21 Schichten angenähert. Bei der Berechnung mit der Differentiellen Methode wurde das IRK-Verfahren mit  $ML = 100$  Integrationschritten verwendet. An der Konvergenzkurve ist zu erkennen, dass *Microsim* und die RCWA für isotrope



**Abb. 8.1:** Reflexionseffizienz der -1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Anzahl berücksichtigter Fouriermoden und die jeweils benötigte Rechenzeit in Sekunden. Alle Methoden liefern dasselbe Endergebnis, die benötigte Rechenzeit unterscheidet sich jedoch stark.

und anisotrope Materialien dieselben Ergebnisse liefert. Wäre das Gitter in der Differentiellen Methode ebenfalls stufenförmig, würde diese gleiche Ergebnisse liefern, da die Propagationsmatrix  $\mathbf{M}$  in diesem Fall übereinstimmt [1]. Die Rechnungen mit den unterschiedlichen Codes konvergieren alle in etwa zu demselben Ergebnis. Die Konvergenzrate bei der Differentiellen Methode ist dabei wesentlich besser.

In Abb. 8.1 (b) ist die benötigte Rechenzeit in Abhängigkeit von der Anzahl der Fouriermoden dargestellt. Die Rechnung wurde auf einem Desktop-PC mit Intel Pentium 4 3GHz und 1GB Arbeitsspeicher durchgeführt.

Deutlich zu erkennen ist, dass der Code für anisotrope Materialien mehr Rechenzeit benötigt als der für isotrope. Die RCWA ist dabei jeweils schneller als die Differentielle Methode. Dies ist in diesem Beispiel für den Code für isotrope Materialien jedoch nicht so ausgeprägt, da auch für die Integration die Matrix  $\mathbf{M}(y)$  halbiert ist. Im Allgemeinen wird sich jedoch immer ergeben, dass *Microsim* etwas schneller als die RCWA mit S-Matrix Algorithmus ist, und die Differentielle Methode nochmals langsamer. Werden Probleme aus anisotropen Materialien betrachtet ist die Rechenzeit im Allgemeinen höher als für Gitter aus nur isotropen Materialien.

In Tab. 8.1 sind die Rechenzeiten, auf die Zeiten von *Microsim* normiert, für verschiedene Anzahlen von Moden dargestellt. Jeweils in Klammern ist der errechnete Wert der -1. Beugungsordnung aus Abb. 8.1 (a) angegeben. Die absoluten Werte betragen bei der jeweiligen Anzahl von Moden 0.7s, 3.5s, 20.7s und 149.2s für *Microsim*. Die Absolutwerte der anderen

N	Microsim	RCWA isotrop	DM isotrop	RCWA anisotrop	DM anisotrop
15	1.0 (0.6423)	1.0 (0.6423)	3.1 (0.8810)	4.3 (0.6438)	14.2 (0.8777)
30	1.0 (0.8032)	1.1 (0.8032)	2.7 (0.8785)	6.4 (0.8036)	14.4 (0.8777)
60	1.0 (0.8581)	1.6 (0.8581)	2.5 (0.8774)	8.0 (0.8579)	21.2 (0.8774)
120	1.0 (0.8665)	2.0 (0.8665)	2.2 (0.8750)	9.2 (0.8667)	20.9 (0.8738)

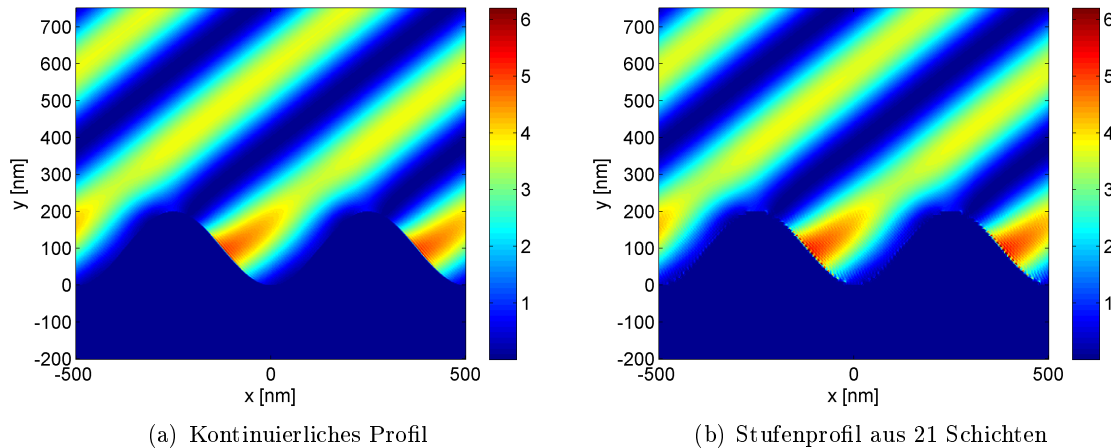
**Tab. 8.1:** Relative Rechenzeiten bezogen auf Microsim für verschiedene Anzahlen von Moden. In Klammern dahinter das jeweilige Ergebnis der Effizienz für die  $-1$ . Beugungsordnung.

Codes ergeben sich dann aus Tab. 8.1.

Wichtig an diesem Beispiel ist, dass eine einzelne Rechnung für einfache Liniengitter je nach Modenzahl im Bereich einiger weniger Sekunden bis Minuten liegt. Im Falle von anisotropen Materialien und großer Anzahl von Moden kann eine Rechnung jedoch wesentlich mehr Zeit in Anspruch nehmen. Sowohl der Bedarf an Rechenzeit als auch an Speicher ist für Liniengitter im Allgemeinen unproblematisch. Es kann auch mit einer größeren Anzahl von Fouriermoden als der hier dargestellten gerechnet werden. Nur für Liniengitter aus anisotropen Materialien steigt die Rechenzeit dann auf einem gewöhnlichen Desktop-PC stark an, was für die praktische Anwendbarkeit problematisch sein könnte.

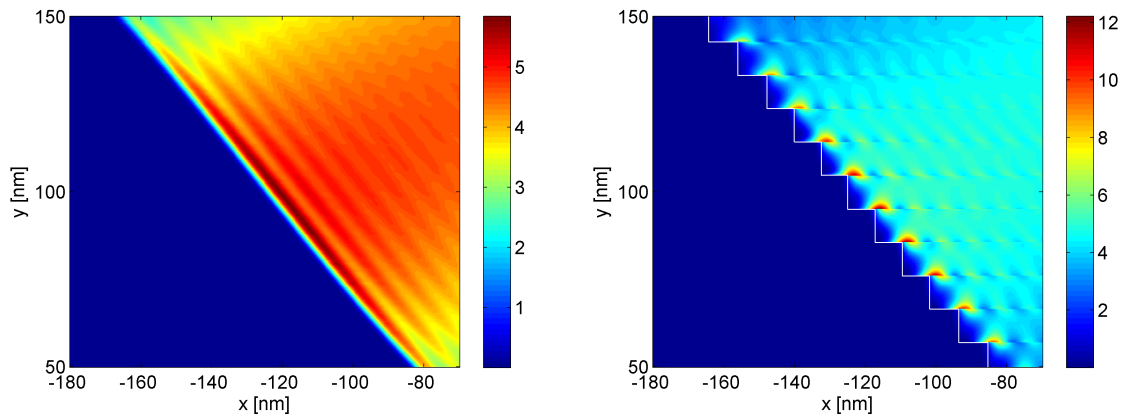
Da auch die Nahfeldberechnung für die Differentielle Methode Teil dieser Arbeit ist, sind in Abb. 8.2 noch die Nahfelder der Intensitätsverteilung  $|\mathbf{E}|^2$  für das kontinuierliche und das stufenförmig angenäherte Profil im  $xy$ -Schnitt dargestellt. Es wurde dabei mit  $N = 60$  gerechnet. Es ist zu erkennen, dass bei ausreichender Anzahl von Moden und Schichten die stufenförmige Annäherung des Profils gut mit dem Ergebnis des kontinuierlichen Profils übereinstimmt.

In der Detailansicht von Abb. 8.3 sieht man den Grund für die schlechte Konvergenzrate bei



**Abb. 8.2:** Intensitätsverteilung des Aluminiumgitters, berechnet als kontinuierliches Profil und als stufenförmige Annäherung mit 21 Schichten.

einer stufenförmigen Annäherung des Profils. Dabei ist zu beachten, dass die Bilder (a) und (b) in Abb. 8.3 nicht gleich skaliert sind. Die Felderhöhungen bei der stufenförmigen Annäherung des Profils sind in Abb. 8.3 (b) gut zu erkennen. In beiden Detailbildern erkennt man ausserdem die Gibbschen Überschwinger der Darstellung des Feldes durch eine endliche Anzahl von Fouriermoden.



(a) Detaildarstellung des kontinuierlichen Profils

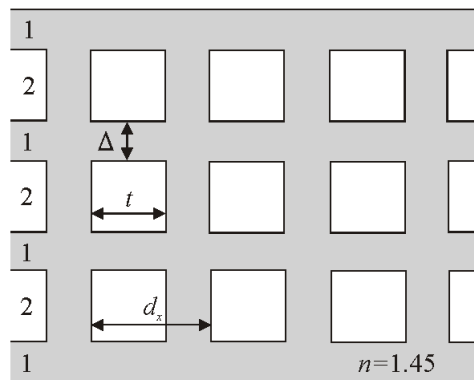
(b) Detaildarstellung des stufenförmigen Profils

**Abb. 8.3:** Detailansicht der Abbildungen oben. Zu erkennen sind die Felderhöhungen an den Ecken des stufenförmig angenäherten Profils und Gibbsche Überschwinger durch die Annäherung des Feldes mit einer endlichen Anzahl von Fouriermoden. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Bilder.

In Anhang A finden sich eine Reihe von Berechnungsbeispielen für Liniengitter aus anisotropen Materialien.

### 8.1.2 Kreuzgitter: Photonischer Kristall

Betrachtet sei der Photonische Kristall<sup>2</sup> aus Ref. [60]. Dieser ist in Abb. 8.4 skizziert. Er be-

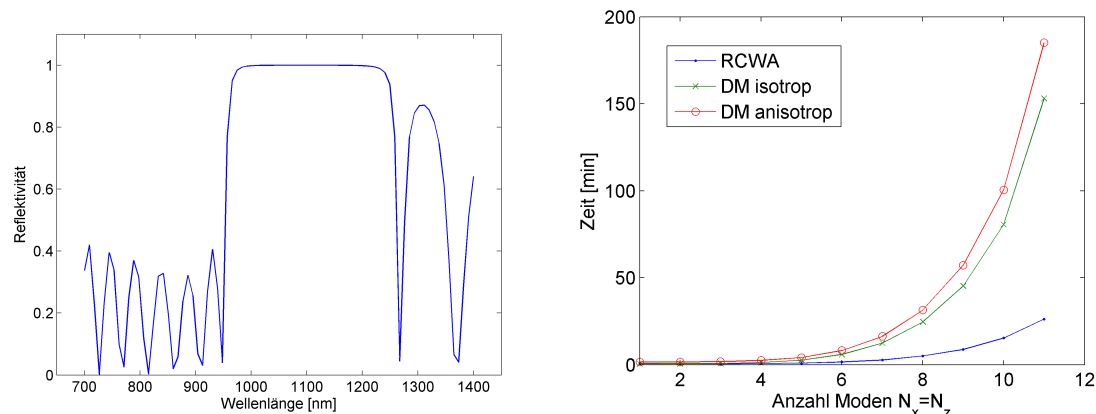


**Abb. 8.4:** Skizze des Photonischen Kristalls nach Ref. [60].

steht aus würfelförmigen Lufteinschlüssen ( $n = 1$ ) mit Seitenlänge  $t = 224.8\text{nm}$  in Silizium ( $n = 1.45$ ). Die Periodizität des Gitters ist durch  $d_x = d_z = 281\text{nm}$  gegeben. Insgesamt werden in diesem Beispiel 10 Schichten mit Lufteinschlüssen (Schichttyp 2) betrachtet. Diese sind jeweils durch eine homogene Schicht aus Silizium (Schichttyp 1) mit der Dicke  $\Delta = 350\text{nm}$

<sup>2</sup>Die allgemeine Behandlung von Photonischen Kristallen mittels Differentieller Methode findet sich in Ref. [1, 11]. In der Literatur finden sich ebenfalls eine Reihe von Untersuchungen von Photonischen Kristallen mittels Differentieller Methode [61, 62, 63, 64].

getrennt. Insgesamt handelt es sich damit um 21 Schichten, in denen jeweils der Brechungsindex in  $y$ -Achsenrichtung konstant ist. Die Beleuchtung erfolgt durch eine TE-polarisierte ebene monochromatische Welle mit Einfallswinkel  $\phi = 70.9^\circ$  und Azimutwinkel  $\psi = 0^\circ$ . In Abb. 8.5 (a) ist die Reflexionseffizienz der 0. Beugungsordnung, der einzigen propagierenden, in Abhängigkeit von der Beleuchtungswellenlänge dargestellt. Gerechnet wurde dabei mit  $N_x = N_z = 6$  Moden und der Brechungsindex von Silizium wurde als konstant angenommen. Zu erkennen ist die Bandlücke des Kristalls im Bereich von etwa 1000nm bis 1200nm. In diesem Bereich beträgt die Reflektivität mehr als 99.9%. Innerhalb der Bandlücke ist die Periodenabmessung des Kristalls lediglich etwa  $\lambda/4$ . Aus diesem Grund, und der Tatsache, dass es sich um ein Gitter aus einem Dielektrikum handelt, konvergieren die Ergebnisse einer Rechnung schon bei Berücksichtigung einiger weniger Moden. Bei einer Beleuchtungswellenlänge von 1053nm beträgt die errechnete Reflektivität 99.97%. Dieser Wert wird bei Verwendung des Codes für isotrope Materialien schon bei  $N_x = N_z = 3$  erreicht. Beim Code für anisotrope Materialien beträgt, bei  $N_x = N_z = 11$ , der errechnete Wert 99.98%. In Abb. 8.5 (b) sind die Rechenzeiten in Abhängigkeit der Moden für  $N_x = N_z$  dargestellt. Gezeigt werden diese für die RCWA mit S-Matrix Algorithmus für isotrope Materialien und die Differentielle Methode für isotrope und anisotrope Materialien. Die Rechnungen wurden auf dem oben erwähnten Desktop-PC mit 3GHz und 1GB Arbeitsspeicher durchgeführt. Die Integration bei der Differentiellen Methode wurde mit  $ML = 222$  Integrationschritten durchgeführt.



(a) Reflektivität in Abhängigkeit der Wellenlänge (b) Rechenzeit bei  $N_x = N_z$  in Abhängigkeit der Anzahl von Moden.

**Abb. 8.5:** Links: Reflexionseffizienz der (0,0)-ten Beugungsordnung des Photonischen Kristalls in Abhängigkeit von der Beleuchtungswellenlänge. Im Bereich von etwa 1000nm bis 1200nm besitzt der Kristall eine Bandlücke. Rechts: Benötigte Rechenzeit in Abhängigkeit von den berücksichtigten Moden. Ein starker Anstieg der Rechenzeit im Vergleich zum eindimensional-periodischen Gitter in Abb. 8.1 ist zu erkennen.

Wiederum handelt es sich bei dem betrachteten Gitter jedoch um einen Spezialfall. Zum einen sind innerhalb der einzelnen Schichttypen 1 und 2 die elektromagnetischen Parameter jeweils konstant in  $y$ -Achsenrichtung, und die RCWA ist damit optimal anzuwenden. Zum anderen handelt es sich um immer wiederkehrende Schichttypen, für die Eigenwerte und Eigenvektoren bzw. die Matrix  $\hat{\mathbf{T}}^{(a)}$  aus Gl. (5.28) bestimmt werden müssen<sup>3</sup>. Beides müsste im Grunde genommen für jeden Schichttyp nur einmal vorgenommen werden, und die Ergebnisse dann

<sup>3</sup>Ebenso wie das Eigenwertproblem in der RCWA durch betrachten des Systems gewöhnlicher DGLn 2. Ordnung

gespeichert werden. Dies wurde jedoch in Abb. 8.5 (b) und Tab. 8.2 zum Zeitvergleich der Methode *nicht* gemacht. Würde diese Tatsache ausgenutzt, ist sicherlich in diesem Fall mit einer drastischen Reduzierung der Rechenzeit zu rechnen. Zu beachten ist jedoch, dass es sich so, wie im vorangegangenen Beispiel des sinusförmigen Aluminiumgitters, wiederum um 21 Schichten handelt, für die im Fall der RCWA ein Eigenwertproblem gelöst werden muss, oder im Fall der Differentiellen Methode eine Integration durchzuführen ist. Damit ist ein Vergleich der Geschwindigkeit für Liniengitter in Abb. 8.1 (b) und Kreuzgitter in Abb. 8.5 (b) für die RCWA durchaus möglich. Dabei fällt auf wie stark die benötigte Rechenzeit beim Übergang von eindimensional-periodischen zu zweidimensional-periodischen Problemen ansteigt. Was jedoch bei der Berechnung des Photonischen Kristalls stets ausgenutzt wurde, ist die Tatsache, dass bei konstanten Parametern in  $y$ -Richtung, wenn dieser Bereich künstlich in S-Matrix Schichten aufgeteilt wird, nur für jeweils die erste Schicht die Integration tatsächlich durchgeführt wird. In Tab. 8.2 sind die Rechenzeiten, normiert auf die RCWA für isotrope Materialien angegeben. Die absoluten Werte betragen 54s für  $N_x = N_z = 5$  und 920s für  $N_x = N_z = 10$ . In Klammer dahinter sind die Ergebnisse der Reflektivität bei 1053nm angegeben.

$N_x = N_z$	RCWA isotrop	DM isotrop	DM anisotrop
5	1.0 (0.9997)	2.9 (0.9997)	4.6 (1.0005)
10	1.0 (0.9997)	5.3 (0.9997)	6.6 (0.9995)

**Tab. 8.2:** Relative Rechenzeiten bezogen auf die RCWA für isotrope Materialien für verschiedene Anzahlen von Moden. In Klammern dahinter das jeweilige Ergebnis der Reflektivität bei  $\lambda = 1053\text{nm}$ .

Auch bei diesem Beispiel geht es im Wesentlichen darum, die Größenordnung der Rechenzeiten von zweidimensional-periodischen Strukturen aufzuzeigen. Bei diesen kann in Abhängigkeit der Anzahl berücksichtigter Moden im Allgemeinen schon für geringe Anzahlen von Moden und einer einfachen Rechnung mit einer einzigen einfallenden ebenen Welle mit Rechenzeiten im Bereich einiger weniger Minuten bis einiger Stunden gerechnet werden. Werden daher für eine Anwendung viele Moden benötigt, um ein konvergiertes Ergebnis zu erzielen, oder müssen viele Rechnungen durchgeführt werden, kann die dafür benötigte Rechenzeit durchaus zu Problemen führen. Eine Beschleunigung der Rechnung, z.B. durch Parallelisierung der Rechnungen [66] oder dem Ausnutzen von Symmetrien in Struktur und Beleuchtung [61, 67, 68], ist daher zur praktischen Anwendbarkeit auf zweidimensional-periodische Strukturen äusserst wichtig. Zusätzlich kommt hinzu, dass der verfügbare Arbeitsspeicher die maximale Anzahl von Moden bei der Rechnung begrenzt<sup>4</sup>. Daher ist es wichtig, dass die Methode schnell konvergiert und man bei Spezialfällen ausnutzt, dass sich die Dimension des Problems reduzieren lässt [96, 61, 67, 68].

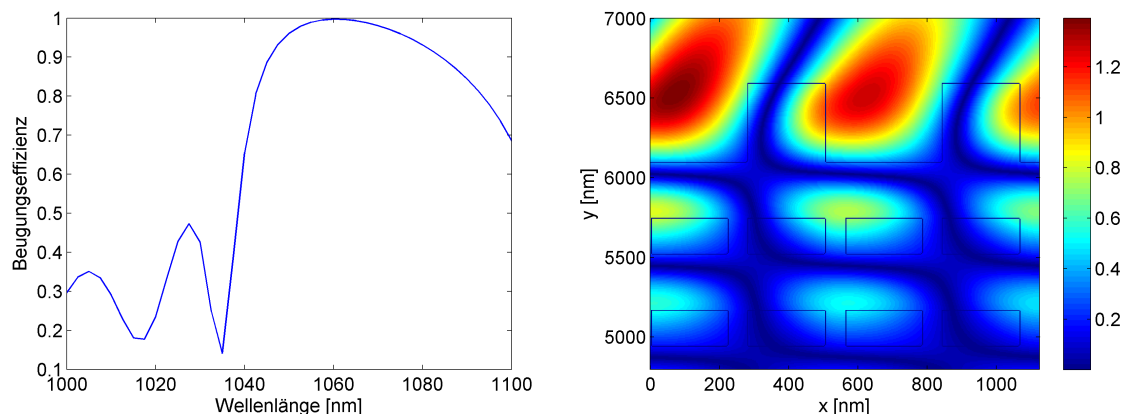
In Ref. [60] geht es darum, ein Gitter zu entwerfen, das eine möglichst hohe Beugungseffizienz in der -1. Beugungsordnung in Reflexion besitzt. Dieses kann dann zur Pulskomprimierung von Hochleistungs-Laserpulsen verwendet werden [2]. Dafür wird über dem Photonischen Kristall noch ein binäres Liniengitter aus Silizium und Luft mit einer Höhe von 500nm angebracht.

---

(äquivalent den Anmerkungen zur Reduktion des Problems in Abschnitt 5.2.2) reduziert wird, könnte möglicherweise die Integration in der DM in diesem Fall mittels Numerov Algorithmus eine Rechenzeitreduzierung bringen [10, 65].

<sup>4</sup>In dem Falle des hier benutzten Desktop-PCs mit 1GB Arbeitsspeicher konnte zum Beispiel maximal mit 11x11 Moden bei der Differentiellen Methode und 15x15 Moden bei der RCWA gerechnet werden.

Der Füllfaktor der Luft beträgt dabei  $340\text{nm}/d_x$ . Für einen Einfallswinkel von  $77.2^\circ$  wird in diesem Fall in Abb. 8.6 (a) die Reflexionseffizienz der -1. Ordnung des Gitters in Abhängigkeit der Wellenlänge dargestellt. Bei einer Wellenlänge von  $1060\text{nm}$  ist diese größer  $99,7\%$ . Dieses Maximum wird in Ref. [60] bei  $1053\text{nm}$  gefunden. Die Beugungseffizienz der -1. Ordnung ist dabei unempfindlich bezüglich einer Änderung des Einfallswinkels [60]. In Abb. 8.6 (b) ist noch der Betrag des elektrischen Feldes im oberen Teil des Gitter gezeigt.



(a) Beugungseffizienz in Abhängigkeit der Wellenlänge (b) Nahfeldbild mit  $\lambda = 1060\text{nm}$  und  $\phi = 77.2^\circ$ .

**Abb. 8.6:** Links: Beugungseffizienz der -1. Ordnung in Reflexion des Gitters in Abhängigkeit der Wellenlänge. Dabei wurde der Brechungsindex von Silizium als konstant angenommen. Rechts: Betrag der elektrischen Feldstärke im oberen Teil des Gitters.

Weitere Hintergründe zu dem Design des Gitters finden sich in Ref. [60]. Ein Beispiel eines Kreuzgitters aus anisotropen Materialien findet sich in Anhang A.

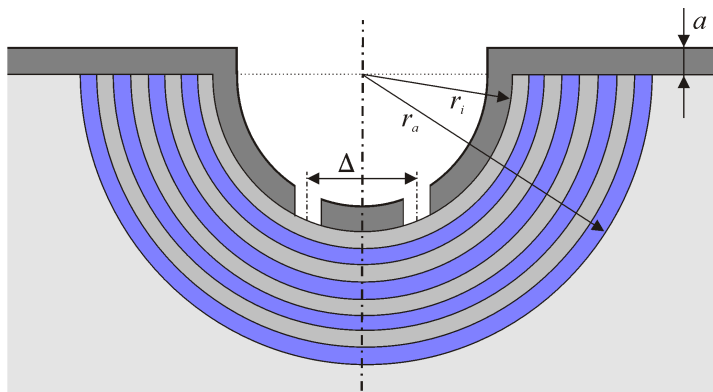
## 8.2 Metamaterialien und ihre Anwendungen

Seit den Untersuchungen von *Ernst Abbe* zur optischen Abbildung mit Linsen im Jahre 1873 galt, dass die Auflösung eines Abbildungssystems stets in der Größenordnung der halben Wellenlänge begrenzt ist [69]. Man spricht auch von der *Beugungsbegrenzung* eines Abbildungssystems. Der Grund ist, dass feine Strukturdetails mit evaneszenten Wellen verbunden sind, die nicht durch Abbildung mittels konventionellen Linsen erfasst werden können. Aus dieser Erkenntnis heraus wurde das sog. *near-field scanning microscope* (SNOM) entwickelt, bei dem eine Faser Spitze nah über das Objekt gefahren wird, um so Informationen über das evaneszente Feld zu sammeln. Dieser Scanvorgang ist jedoch nur in der Lage nahezu stationäre Vorgänge zu erfassen. Ein anderes sehr erfolgreiches Konzept, Abbildungen unterhalb der Beugungsbegrenzung zu erhalten, ist das sog. *stimulated emission depletion fluorescence microscope* [70], welches jedoch ebenfalls einen Scanvorgang erfordert [69]. Viel Aufmerksamkeit wurde in den letzten Jahren, seit den Untersuchungen von John Pendry im Jahre 2000 [4], Linsen aus Metamaterialien geschenkt. In Ref. [4] wird herausgestellt, dass mit der schon in Ref. [36] untersuchten Schicht eines Materials mit Brechungsindex  $n = -1$ , eine perfekte Abbildung erzielt werden kann. Das Besondere daran ist, dass die Auflösung damit nur eine Frage davon ist, wie genau

ein solches Metamaterial hergestellt werden kann. Der Effekt wurde für den quasistatischen Grenzfall experimentell mit einer Schicht aus Silber [71] und einer Schicht aus SiC [72] demonstriert. Mögliche Anwendungen einer solcher Superlinse liegen in der Nahfeldmikroskopie [72] und der Photolithographie [73]. Das Problem einer solchen Superlinse ist, dass zwar theoretisch eine perfekte Abbildung des Feldes erzielt werden könnte, jedoch evaneszente Felder in der Abbildungsebene weiterhin evaneszent sind, und somit feine Strukturdetails weiterhin nicht durch ein konventionelles Abbildungssystem aufzulösen sind. Aus diesem Grund entstand in den letzten Jahren eine Reihe von Konzepten wie man die evaneszenten Felder eines Objekts in eindeutiger Weise in propagierende Wellen umwandeln kann [74, 75, 76]. Eines davon, die sog. *Hyperlinse*, soll im nächsten Abschnitt etwas näher betrachtet werden.

### 8.2.1 Zylinderförmige Hyperlinse

In diesem Abschnitt soll die zylinderförmige Hyperlinse nach Ref. [77, 78] betrachtet werden. In Abb. 8.7 ist die Situation dargestellt. Die zugrundeliegende Theorie einer solchen Linse wird in Ref. [74, 75] erläutert.



**Abb. 8.7:** Skizze der Hyperlinse nach Ref. [77, 78].

Die eigentliche Linse besteht aus halbkreisförmigen Schichten aus Aluminiumoxid ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) und Silber (Ag). Sie hat einen Innendurchmesser  $r_i = 240\text{nm}$  und Aussendurchmesser  $r_a = 800\text{nm}$ . Die Schichten der Linse sind jeweils  $35\text{nm}$  dick, sodass sie aus jeweils 8 Schichten Aluminiumoxid gefolgt von Silber besteht. Unterhalb der Linse befindet sich Quarz. Die Linse ist mit einer  $a = 50\text{nm}$  dicken Chromschicht beschichtet. In dieser befinden sich zwei  $50\text{nm}$  breite Spalte, welche  $\Delta = 150\text{nm}$  voneinander entfernt sind. Diese Spalte dienen als abzubildendes Objekt. Über der Chromschicht befindet sich Luft mit Brechungsindex  $n = 1$ . Die Beleuchtung geschieht durch eine TM-polarisierte ebene Welle mit der Wellenlänge  $\lambda_0 = 365\text{nm}$ . Die Permittivitäten der verwendeten Materialien sind damit gegeben durch: Silber  $\epsilon_m = -2.4012 + 0.2488i$ , Aluminiumoxid  $\epsilon_d = 3.217$ , Quarz  $\epsilon_{qtz} = 2.174$  und Chrom<sup>5</sup>  $\epsilon_{cr} = (1.4022 + 3.2564i)^2$  [78]. Grundlage für die Wahl der Materialien ist dabei die Theorie der *Effektiven Medium Approximation* (EMA). Nach dieser kann ein Schichtsystem, mit Schichtdicken sehr viel kleiner als die Wellenlänge, als kontinuierliches anisotropes Medium betrachtet werden [80]. Für den hier

<sup>5</sup>Die Permittivität von Chrom wurde aus der Brechungsindexbibliothek von Microsim übernommen. Diese basiert auf Ref. [79].



betrachteten Fall, bei dem die Schichten konzentrische Ringe bilden, ergibt sich in Zylinderkoordinaten  $(r, \theta, z)$

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{f \varepsilon_d + (1 - f) \varepsilon_m}, \quad (8.1)$$

$$\varepsilon_\theta = \varepsilon_z = f \varepsilon_m + (1 - f) \varepsilon_d \quad (8.2)$$

für die Radial- und Tangentialkomponenten der Permittivität [5, 74, 75, 78]. Die Größe  $f$  stellt dabei den Füllfaktor der Metallschicht dar, in diesem Beispiel ist daher  $f = 0.5$ . Um die gewünschte hyperbolische Dispersionscharakteristik des Metamaterials zu erzielen, werden die Materialien so ausgewählt, dass  $\text{Sign}(\varepsilon_r) \neq \text{Sign}(\varepsilon_\theta)$  erfüllt wird [74, 78]. Ausserdem wird versucht die Tangentialkomponenten der Permittivität nahezu verschwinden zu lassen, im Idealfall also  $\varepsilon_m = (f - 1)\varepsilon_d/f$  [74]. Materialien mit negativem Realteil können bei optischen Frequenzen unter den Edelmetallen gefunden werden. Reale Materialien haben jedoch immer Verluste, weshalb die ideale Bedingung nur näherungsweise erfüllt werden kann [74]. Die hohen Ortsfrequenzen der Struktur propagieren in einem solchen Medium in radialer Richtung. Die Vergrößerung der Linse ist daher etwa  $r_a/r_i$ , in dem betrachteten Beispiel also 3.3. Das Winkelspektrum der Struktur wird so weit vergrößert, dass die hohen Ortsfrequenzen, die zur Auflösung der Struktur benötigt werden, im Medium unterhalb der Linse propagieren können. Die Linse konvertiert somit evaneszente Beugungsordnungen in propagierende. Diese können dann mit Hilfe eines konventionellen Abbildungssystems dargestellt werden.

Da es sich bei einer einzelnen Linse nicht um eine periodische Struktur handelt, muss das Problem periodisiert werden, damit es mit der hier dargestellten Form der Differentiellen Methode betrachtet werden kann. Es wird also im Grunde genommen ein Array von Linsen betrachtet. Dabei sind die Linsen so weit voneinander entfernt, dass sie vernachlässigbar wenig Einfluss aufeinander haben<sup>6</sup>.

In Abb. 8.8 (a) ist die magnetische Feldstärke unterhalb der Chromschicht für die oben beschriebene Situation dargestellt. Diese entspricht qualitativ der Finite-Elemente-Berechnung mit *COMSOL Multiphysics* derselben Situation in Ref. [78]. In Abb. 8.8 (b) und (c) sind die Schichtdicken der Linse jeweils halbiert, ihre Anzahl jedoch verdoppelt. Die Abb. 8.8 (d) zeigt das Feld, wenn das Schichtsystem als effektives anisotropes Medium betrachtet wird. Die in Zylinderkoordinaten durch Gln. (8.1) und (8.2) gegebene Permittivität ist dabei in kartesischen Koordinaten durch

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_r \cos^2 \theta + \varepsilon_\theta \sin^2 \theta, \quad (8.3)$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = (\varepsilon_r - \varepsilon_\theta) \sin \theta \cos \theta, \quad (8.4)$$

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_r \sin^2 \theta + \varepsilon_\theta \cos^2 \theta, \quad (8.5)$$

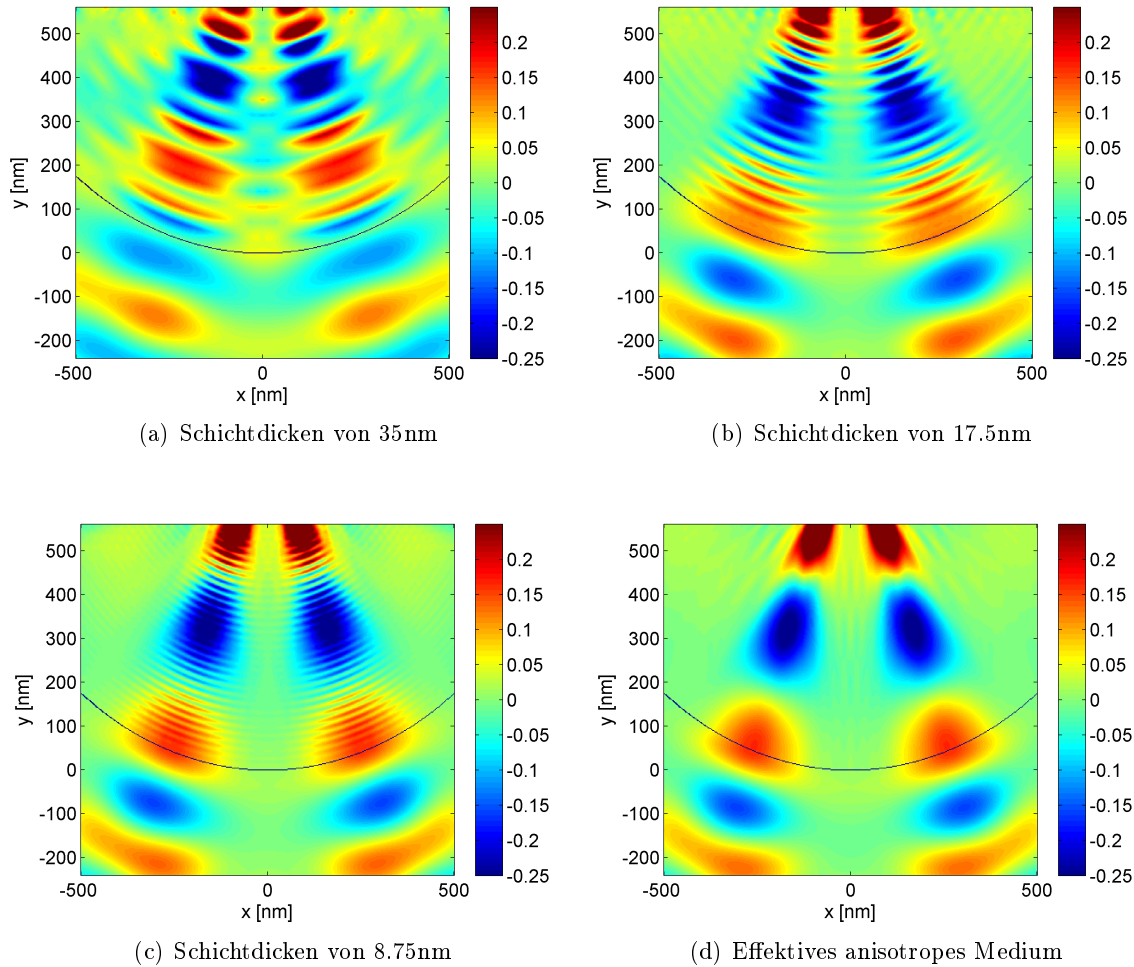
und  $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_z$  und  $\varepsilon_{xz} = 0 = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{zy}$  gegeben.

Aus Übersichtsgründen ist jeweils nur die unterste Grenzfläche der Linsen eingezeichnet. Gut zu erkennen ist, dass die Propagation innerhalb der Linse durch die Anregung gekoppelter Oberflächenplasmonen an den Silberschichten geschieht [77]. Ebenfalls ist zu sehen, dass die Behandlung als effektives Medium den Grenzwert für unendlich dünne Schichten darstellt.

In Abb. 8.9 ist die berechnete Fernfeldverteilung in der Ebene direkt unterhalb der Linse ( $y = 0$ ) dargestellt. Diese entspricht der Summation aller im Substrat propagierenden Beugungsordnungen und somit der Situation, dass die Ebene mit einem konventionellen Mikroskop mit  $\text{NA} \approx 1.5$  betrachtet würde. Die benötigte NA ist mittels Ölimmersion zu erreichen [78].

Zu erkennen ist, dass die beiden Spalte gut aufgelöst sein sollten, vorausgesetzt der Detektor

<sup>6</sup>Es wurde mit einer Periode von  $2.2\mu\text{m}$  und  $N = 100$  gerechnet. Die Rechnungen mit EMA sind jeweils mit  $N = 80$  durchgeführt worden.

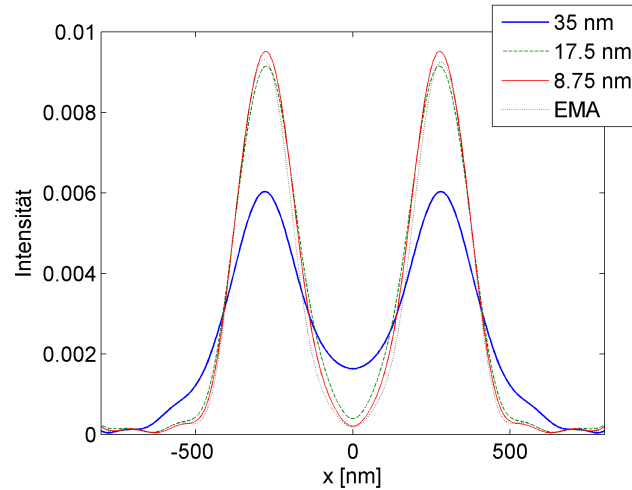


**Abb. 8.8:** Berechnete magnetische Feldstärke der Hyperlinse für verschiedene Schichtdicken.

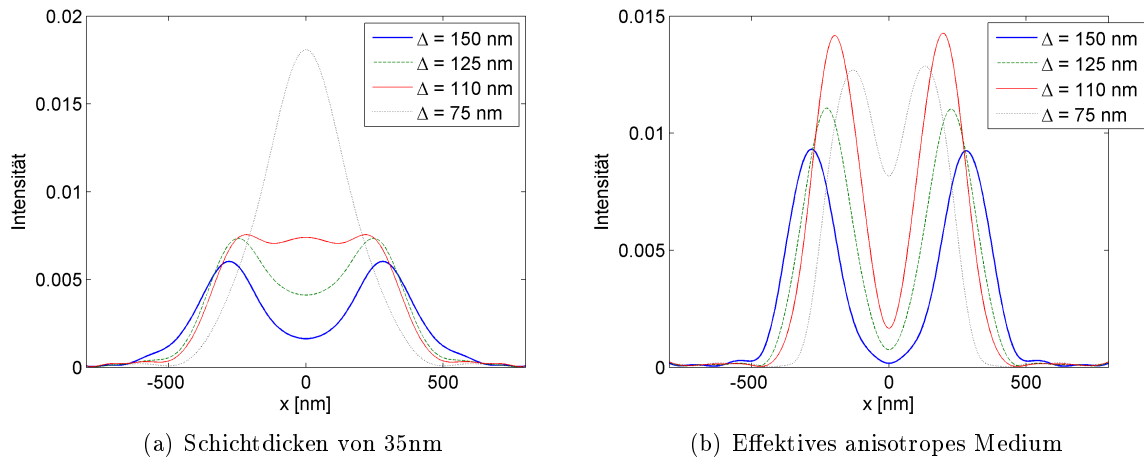
ist genügend empfindlich und rauscharm. Schichten dünner als 35 nm sind nach Abb. 8.9 geeigneter, da die Verluste in diesem Fall geringer sind [74, 80]. Eine Herstellung solcher dünnen Schichten ist jedoch mit dem derzeitigen Stand der Technik problematisch [78]. Das Ergebnis der EMA stimmt nahezu mit denen der Schichtdicken 17.5 nm und 8.75 nm überein.

In Abb. 8.10 (a) ist für die Linse mit Schichtdicken von 35 nm die Fernfeldintensitätsverteilung für verschiedene Abstände der Spalte  $\Delta$  dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Auflösungsgrenze der Linse irgendwo zwischen  $\Delta = 125$  nm und  $\Delta = 110$  nm liegen müsste. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit dem Experiment in Ref. [78], bei dem ein Spaltabstand von  $\Delta = 125$  nm aufgelöst werden konnte. Dieser Wert ist in diesem Aufbau zu vergleichen mit dem Wert der Auflösungsgrenze nach der Abbesche Abbildungstheorie  $\lambda/NA \approx 240$  nm. Berechnungen mit der EMA in Abb. 8.10 (b) zeigen, dass im Falle dünnerer Schichten die Auflösung nochmals stark verbessert werden könnte.

An dieser Stelle sei noch kurz ein anderes vielversprechendes Konzept aus Ref. [69, 76, 81] erwähnt. In diesem wird ein Liniengitter so entworfen, dass einfallende evaneszente Felder mit  $|\alpha_0| > n_c k_0$ , die von einem streuenden Objekt stammen, in eindeutiger Weise zu propagierenden Wellen der  $\pm 1$ . Beugungsordnung des Gitters im Substrat umgewandelt werden. Durch Messen



**Abb. 8.9:** Fernfeldintensitätsverteilung der Hyperlinse für verschiedene Schichtdicken. Diese entsprechen der Abbildung durch ein konventionelles Mikroskop, das auf die Ebene unterhalb der Hyperlinse fokussiert ist.



**Abb. 8.10:** Berechnete Fernfeldintensität für verschiedene Abstände  $\Delta$  der Spalte.

des Winkelspektrums und der Kenntnis des Übertragungsverhaltens des Gitters können nun Aussagen über die Feldamplituden der hohen Ortsfrequenzen getroffen werden, und somit eine Auflösung unterhalb der Beugungsbegrenzung erzielt werden. Da es sich um die Auslegung eines dafür geeigneten Liniengitters handelt, ist die Differentielle Methode bzw. RCWA in diesem Fall besonders geeignet. Diese wird auch in Ref. [69, 76, 81] zur Auslegung des Gitters verwendet.

## 8.2.2 Elektromagnetische Abschirmung

Das wohl derzeit bekannteste Beispiel für eine mögliche Anwendung von Metamaterialien stellt die elektromagnetische Abschirmung dar. Das Ziel ist, Objekte mit Hohlraum zu entwickeln, die ein Eindringen eines einfallenden elektromagnetischen Feldes in sein Inneres verhindern, ohne dabei das einfallende Feld in seiner späteren Ausbreitung zu ändern [82]. Könnte ein solches Verhalten im Bereich sichtbaren Lichts erreicht werden, wäre das Innere des Objekts von aussen unsichtbar, weshalb ein solches Objekt im Folgenden auch als Tarnkappe oder nach der englischen Bezeichnung als *invisibility cloak* bezeichnet wird.

Obwohl sich die nötigen elektromagnetischen Materialparameter von Tarnkappen beliebiger Form durch Koordinatentransformation finden lassen [83, 84], soll an dieser Stelle nur der einfachste Fall eines zylinderförmigen Objekts mit idealen Parametern betrachtet werden. Unter anderem in Ref. [85, 86, 87, 88] finden sich Untersuchungen von komplizierter geformten Objekten.

Nach Ref. [82] müsste ein solches zylinderförmiges Objekt mit Innenradius  $R_i$  und Aussenradius  $R_a$  in Zylinderkoordination  $(r, \theta, z)$  im Idealfall folgende Permittivität und Permeabilität besitzen:

$$\varepsilon_r(r) = \mu_r(r) = \frac{r - R_i}{r}, \quad (8.6)$$

$$\varepsilon_\theta(r) = \mu_\theta(r) = \frac{r}{r - R_i}, \quad (8.7)$$

$$\varepsilon_z(r) = \mu_z(r) = \left( \frac{R_a}{R_a - R_i} \right)^2 \frac{r - R_i}{r}. \quad (8.8)$$

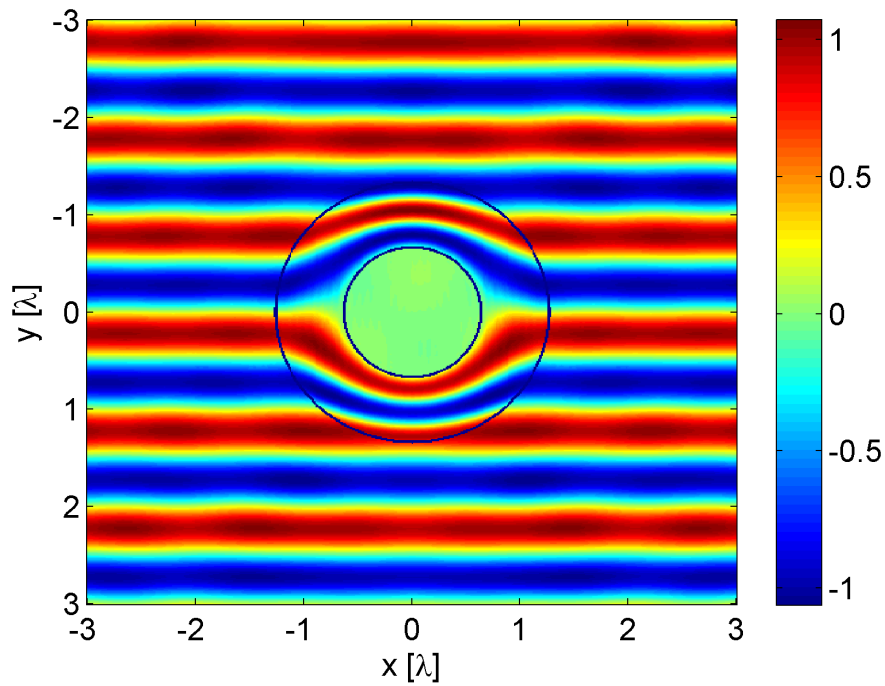
Permittivität und Permeabilität in kartesischen Koordinaten ergeben sich dann, wie im Fall der Hyperlinse, aus Gln. (8.3–8.5) mit dem darunter stehenden Text und  $\mu = \varepsilon$ .

Die elektromagnetischen Eigenschaften sind nur Funktionen der Geometrie und somit im speziellen keine Funktionen der Frequenz. Die Tarnkappeneigenschaften würden daher unabhängig von der Wellenlänge des einfallenden Feldes erzielt. Da jedoch eine tatsächliche Realisierung notwendigerweise aus natürlichen Materialien aufgebaut ist, dessen Eigenschaften von der Frequenz abhängen, würde eine Tarnkappenwirkung auf ein bestimmtes Frequenzband limitiert sein [82, 89]. Es ist damit Ziel des Metamaterial-Designs, dass dieses Band möglichst groß ist [82]. Auch werden natürliche Materialien einen Teil der einfallenden Energie absorbieren, und somit den Tarnkappeneffekt reduzieren. Eine numerische Untersuchung mittels Finite-Elemente-Berechnungen von realistischeren Materialparametern als Gln. (8.6–8.8) findet sich in Ref. [82].

Für die Untersuchung der zylinderförmigen Tarnkappe mit idealen Parametern mit Hilfe der hier beschriebenen Form der Differentiellen Methode, ist wiederum die Periodisierung des Problems notwendig. Es soll daher folgende Situation betrachtet werden: Beleuchtet wird mit einer TE-polarisierten ebenen Welle mit der Wellenlänge  $\lambda_0$ . Aussen- und Innendurchmesser des hohlen Zylinders sind durch  $R_a = 2R_i = (8/3)\lambda_0$  gegeben. Ausser- und innerhalb des Zylinders befindet sich Luft mit Brechungsindex  $n = 1$ . Die Periode beträgt  $8\lambda_0$ .

In Abb. 8.11 ist die mittels Differentieller Methode berechnete elektrische Feldstärke dargestellt. Die Berechnung wurde mit  $N = 100$  durchgeführt. Ausserhalb der Tarnkappe ist das Feld nahezu so, als wenn kein streuendes Objekt vorhanden wäre. In Ref. [82] befindet sich eine Berechnung dieser Struktur mit dem Softwarepaket *COMSOL Multiphysics*.

Technisch wurde eine ähnliche Tarnkappe bereits für Mikrowellen realisiert [90]. Ebenso wurde über eine experimentelle Realisierung im sichtbaren Frequenzbereich berichtet [91].



**Abb. 8.11:** Invisibility cloak mit idealen Parametern. Dargestellt ist die elektrische Feldstärke.

Die Beispiele der zylinderförmigen Hyperlinse und der zylinderförmigen Tarnkappe zeigen, dass man mit der implementierten Form der Differentiellen Methode grundsätzlich in der Lage ist, solche nichtperiodischen Strukturen untersuchen zu können. Im Allgemeinen wird jedoch die hier vorgestellte Form der Differentiellen Methode nicht die beste Methode zur Untersuchung von nichtperiodischen Strukturen sein.

## 9 Zusammenfassung und Ausblick

Die Differentielle Methode stellt eine Möglichkeit dar die Maxwellgleichungen in Materie für periodische Strukturen zu lösen. Die einzigen Näherungen bei der Berechnung sind dabei, dass in dieser Arbeit stets angenommen wird, dass nichtlineare Effekte der Materialien zu vernachlässigen sind und keine freien Ladungen vorhanden sind. Beide Annahmen sind jedoch im Bereich der optischen Messtechnik im Allgemeinen gerechtfertigt. Ansonsten können die Strukturen aus optisch anisotropen Materialien mit beliebiger Permittivität und Permeabilität aufgebaut sein. Dazu werden die Felder durch endliche Fourierreihen dargestellt. Aus dem zu lösenden partiellen Differentialgleichungssystem wird dadurch ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung der Fourierkoeffizienten. Im homogenen Medium ist die Lösung der Maxwellgleichungen als eine Superposition ebener Wellen darstellbar. Ist die Periodizität der Struktur daher auf ein endliches Intervall beschränkt, können durch numerische Integration des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems der Fourierkoeffizienten, unter Berücksichtigung der Randwerte, die Amplituden der ausfallenden Wellen in Abhängigkeit der einfallenden Wellen ermittelt werden. Beliebige auf die periodische Struktur einfallende Felder können dann durch Superposition von ebenen Wellen verschiedener Einfallrichtung und Frequenz angenähert werden.

Wird das System von gewöhnlichen Differentialgleichungen der Fourierkoeffizienten nicht durch numerische Integration gelöst, sondern durch das Lösen von Eigenwertproblemen ersetzt, spricht man von der *rigorous coupled-wave analysis* (RCWA). In verschiedenen speziellen Situationen, wenn z.B. nur nichtmagnetische isotrope Materialien betrachtet werden, vereinfachen sich die Gleichungen und die Rechnungen können wesentlich beschleunigt werden. Anhand zweier Berechnungsbeispiele wurde gezeigt, dass eine Berechnung eines Gitters aus anisotropen Materialien mehr Rechenzeit in Anspruch nimmt als Gitter aus isotropen Materialien. Auch wurde gezeigt, dass die Rechenzeit beim Übergang von eindimensional-periodischen zu zweidimensional-periodischen Strukturen stark ansteigt. Aus diesem Grund wäre es bei der Behandlung von zweidimensional-periodischen Problemen wichtig, die Zeiten der Rechnungen zu verkürzen. Eine Möglichkeit ist die Parallelisierung der Rechnungen auf verschiedene CPUs [66]. Zumindest in speziellen Situationen lassen sich auch Symmetrien in Beleuchtung und Struktur ausnutzen um die Dimension des Problems zu reduzieren [61, 67, 68]. Dieses ist nicht nur wichtig, um die Rechenzeiten zu reduzieren, sondern auch, weil die maximale Anzahl von Fouriermoden durch den Arbeitsspeicher des Rechners begrenzt ist. Kann also die Dimension des Problems in speziellen Situationen reduziert werden, kann mit mehr Fouriermoden gerechnet werden. In einigen Fällen ist nur so ein konvergiertes Ergebnis zu erzielen. Da bisher im implementierten Code der Differentiellen Methode keine Symmetrien ausgenutzt werden, ist dieses sicherlich ein Ansatzpunkt für einen weiteren Ausbau des existierenden Codes. Auch einige kleinere Ergänzungen, wie die Berechnung des Nahfeldes bei Rechnungen mit der RCWA und der Spezialfall von Liniengittern mit  $xy$ -Einfallsebene bei der RCWA, können noch hinzugefügt werden. Zusätzlich ist ein Ausbau von voreingestellten speziellen Strukturen zur schnellen Modellierung oder die Optimierung des Codes in Geschwindigkeit und Speicherbedarf immer wünschenswert. Ebenso existiert eine Formulierung der Differentiellen Methode für nichtperiodische Strukturen [1, 30, 31] und zur Untersuchung nichtlinearer Effekte [1, 15]. Beides könnte für spezielle Anwendungen von Interesse sein.

Bisher ist es auch nicht möglich, etwas über die Größenordnung des Fehlers im berechneten Ergebnis auszusagen. Eine Möglichkeit, diesen abschätzen zu können, wäre daher ebenfalls ein Ansatzpunkt für weitere Arbeiten. Ein weiteres ungelöstes Problem sind die Instabilitäten, die bei Strukturen aus stark leitenden Materialien auftreten [21, 22, 23, 24]. Ebenso wäre ein Vergleich der Differentiellen Methode mit anderen verbreiteten Methoden wie der Finiten-Elemente- oder Finite-Differenzen-Methode sicherlich interessant. Auch eine genauere Untersuchung, wann eine stufenförmige Approximation von schrägen Oberflächen mit der RCWA gerechtfertigt ist und damit möglicherweise erhebliche Rechenzeit gespart werden kann und wann dieses Vorgehen nicht sinnvoll ist, wäre für praktische Anwendungen informativ. Auch von der Anwendung der RCWA in Kombination mit *Perfectly Matched Layers* (PML) ist in letzter Zeit häufiger die Rede [92, 93, 94, 95]. Diese scheint im Bereich der Berechnung von Wellenleitern eingesetzt zu werden. Möglicherweise könnte die Technik daher bei einigen anderen Anwendungen ebenfalls von Interesse sein.

# A Validierung des Codes

## A.1 Energieerhaltung und Reziprozitäts-Theorem

### Energieerhaltung

Besteht die Struktur nur aus verlustfreien Materialien muss aufgrund der Energieerhaltung die Summe aller Beugungseffizienzen gleich eins sein [1, 10, 58], d.h.

$$\sum_n e_r^{(n)} + \sum_n e_t^{(n)} = 1. \quad (\text{A.1})$$

Diese Gleichung muss somit bei genügend hoher Anzahl berücksichtigter Fouriermoden erfüllt werden. Ist für eine bestimmte Situation die Summe größer eins, ist das Ergebnis somit entweder noch nicht konvergiert oder der Code fehlerhaft.

Für verlustbehaftete Materialien gibt die Differenz von eins und der Summe aller Beugungseffizienzen den Anteil dissipierter Energie an [1]. Die Summe aller Beugungseffizienzen ist daher stets kleiner eins.

### Reziprozitäts-Theorem

Das Reziprozitäts-Theorem lautet: Für eine ebene einfallende Welle mit Wellenvektor  $\mathbf{k}_i$  sei  $e_r^{(n)}$  die Reflexionseffizienz der  $n$ -ten Beugungsordnung mit Wellenvektor  $\mathbf{k}_{r,n}$ . Dann ist für den umgekehrten Fall einer einfallenden Welle mit Wellenvektor  $-\mathbf{k}_{r,n}$  die Effizienz der  $n$ -ten Beugungsordnung mit Wellenvektor  $-\mathbf{k}_i$  ebenfalls der Wert  $e_r^{(n)}$  der vorher betrachteten Situation. Analoges gilt für die Transmissionseffizienzen [1].

Die nötige Einhaltung der Energieerhaltung und des Reziprozitäts-Theorems stellt somit zwei Möglichkeiten dar, die Plausibilität eines Ergebnisses zu überprüfen.

Um weiteres Vertrauen in die Ergebnisse der Differentiellen Methode zu bekommen ist auch ein Vergleich mit anderen zuverlässigen numerischen Methoden und dem Experiment äusserst wichtig. Auch analytische Lösungen, soweit vorhanden, müssen nachvollzogen werden können.

Zur Überprüfung des implementierten Codes wurde ebenfalls die Abwärtskompatibilität benutzt. Damit ist gemeint, dass sich isotrope Materialien mit dem Code für anisotrope Materialien berechnen lassen, Liniengitter im Code für Kreuzgitter modellieren lassen und spezielle analytische Profiltypen als beliebige Profiltypen mit numerisch generiertem Normalenvektorfeld behandeln lassen. In all diesen Fällen müssen die errechneten Ergebnisse übereinstimmen.

Ein weiterer wichtiger Bestandteil der Validierung des implementierten Codes besteht darin, Ergebnisse aus der Literatur nachzuvollziehen. Im Folgenden Abschnitt sind daher einige in der Literatur vorhandene Resultate aufgeführt.



## A.2 Vergleich mit Berechnungen aus der Literatur

### A.2.1 Liniengitter aus Kobalt

In Ref. [1, 28, 40, 44, 41] wird ein sinusförmiges Liniengitter aus Kobalt mit folgenden Gitterparametern untersucht: Beleuchtungswellenlänge  $\lambda_0 = 632.8\text{nm}$ , Einfallswinkel  $\phi = 30^\circ$ , Gitterperiode  $d_x = 600\text{nm}$  und Grenzflächenfunktion  $g(x) = (a/2)[1 + \cos(2\pi x/d_x)]$ . Das Cover ist Luft, d.h.  $\varepsilon_c = \mu_c = 1$ , und Kobalt wird durch  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = -8.19 + 16.38i$ ,  $\varepsilon_{xz} = -\varepsilon_{zx} = -0.495 - 0.106i$ ,  $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = 0$  und  $\mu = \mathbf{I}$  charakterisiert.

In Ref. [41] sind für eine Gitterhöhe  $a = 100\text{nm}$  und Einfallsebene senkrecht zur Gitterstruktur, d.h.  $\psi = 0^\circ$ , die Reflexionseffizienzen der -1. und 0. Beugungsordnung für verschiedene Modenzahlen  $N$  tabellarisch angegeben. In Tabelle A.1 sind die Werte<sup>1</sup> für  $N = 14$  aus Ref. [41] und die Ergebnisse mit dem im Rahmen dieser Arbeit entstandenen Code angegeben<sup>2</sup>. Wie in Ref. [41] wird das Differentialgleichungssystem (5.1) in 80 Schritten integriert<sup>3</sup>.

$\delta$	Methode	$e_{r,s}^{(-1)}$	$e_{r,p}^{(-1)}$	$e_{r,s}^{(0)}$	$e_{r,p}^{(0)}$
0	DM	0.1050	$5.4 \cdot 10^{-6}$	0.5430	$1.4 \cdot 10^{-5}$
	[41]	0.1049	$5.4 \cdot 10^{-6}$	0.5432	$1.4 \cdot 10^{-5}$
90	DM	$5.5 \cdot 10^{-6}$	0.251	$1.4 \cdot 10^{-5}$	0.306
	[41]	$5.5 \cdot 10^{-6}$	0.251	$1.4 \cdot 10^{-5}$	0.306

**Tab. A.1:** Vergleich der Reflexionseffizienzen eines sinusförmigen Liniengitters aus Kobalt mit Höhe  $a = 100\text{nm}$  mit Werten aus Ref. [41].

In Ref. [1, 41] sind zusätzlich für eine Gitterhöhe von  $a = 500\text{nm}$  und einfallender TM-polarisierter Welle ( $\delta = 90^\circ$ ) die Konvergenzkurven für die in Tabelle A.1 angegebenen Reflexionseffizienzen dargestellt. Da dabei der TE-polarisierte Anteil der Beugungseffizienzen in der Größenordnung von  $10^{-6}$  liegt und daher nicht sehr aussagekräftig ist, sind in Abb. A.1 die Konvergenzkurven der Gesamteffizienzen  $e_r^{(-1)}$  und  $e_r^{(0)}$  bei TE- und TM-polarisierter einfallender Welle dargestellt. Bei der Berechnung wurden 40 S-Matrix-Schichten mit jeweils 4 Integrationsritten verwendet.

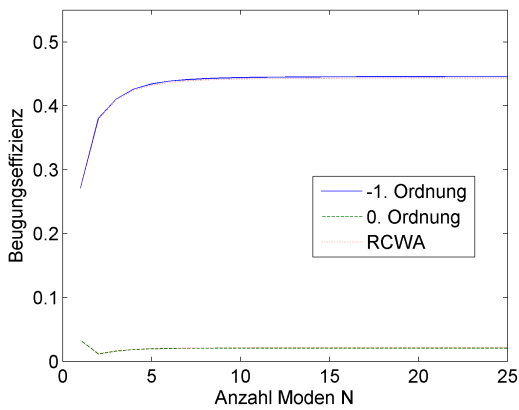
Zusätzlich sind in Abb. A.1 die Ergebnisse der RCWA bei einer 50 stufigen Approximation der Gitters eingezeichnet. Während die Ergebnisse für die TE-polarisierte einfallende Welle exakt mit denen der Differentiellen Methode übereinstimmen, zeigt sich, dass die Ergebnisse der RCWA für TM-Polarisation deutlich langsamer konvergieren, wobei bei unzureichender Anzahl von Schichten nicht derselbe Endwert erreicht wird. Dieses Verhalten liegt wiederum an den Felderhöhungen an den Ecken der stufenförmigen metallischen Struktur, die eine hohe Anzahl von Moden in einer Fourierreihenentwicklung erfordert [1, 29]. Ausser bei lamellen- und stufenförmigen Gittern ist deshalb die Differentielle Methode der RCWA vorzuziehen [1], oder zumindest sollte die Gültigkeit der Stufenapproximation überprüft werden. Eine Ausnahme bildet z.B. der Fall  $\psi = 0^\circ$  und  $\delta = 0^\circ$  bei nichtmagnetischen Materialien, wie in Abb. A.1 zu sehen ist. Auch für Dielektrika und schwach leitende Materialien ist eine Stufenapproximation des Profils unproblematisch.

Für dasselbe Gitter in konischer Beugung mit  $\psi = -20^\circ$  sind in Ref. [28, 40, 44] Reflexionseffizienzen angegeben. Abb. A.2 zeigt die Konvergenzkurven, die mit dem implementierten Code

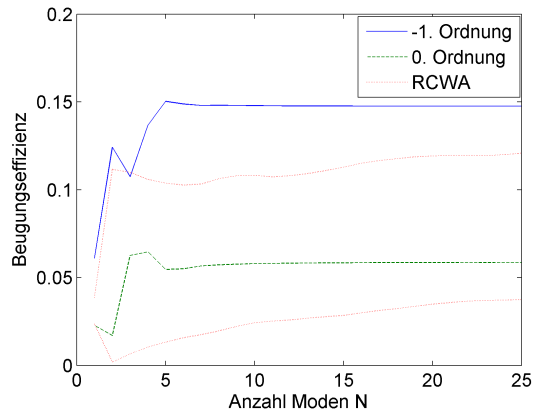
<sup>1</sup>Die Anzahl der angegebenen Dezimalstellen entspricht denen in Ref. [41].

<sup>2</sup>Dieser wird im Folgenden als DM bezeichnet.

<sup>3</sup>In Ref. [41] wird ebenfalls die Differentielle Methode verwendet. Wenn nicht anders angegeben, wird zur Integration das IRK-Verfahren verwendet.



(a) TE-polarisierte einfallende Welle

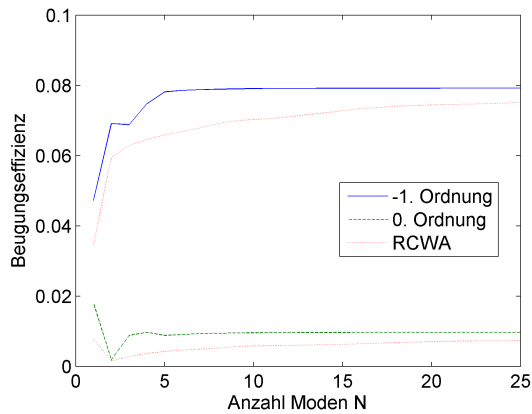


(b) TM-polarisierte einfallende Welle

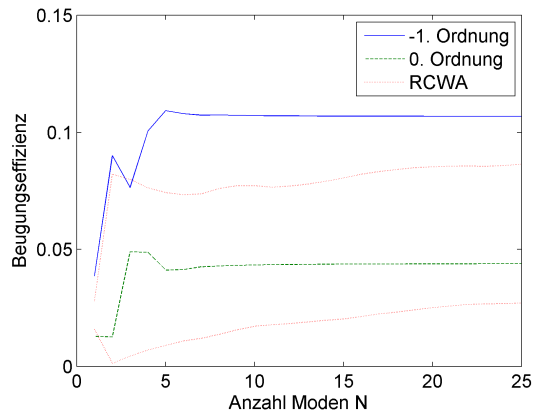
**Abb. A.1:** Konvergenz der Reflexionseffizienzen für die -1. und 0. Beugungsordnung für das Kobalt-Sinusgitter mit  $a = 500\text{nm}$ .

berechnet wurden. Ebenfalls eingezeichnet sind die Ergebnisse der RCWA bei einer 50 stufigen Annäherung des Profils.

Die errechneten Werte bei  $N = 25$  sind in Tab. A.2 wiedergegeben<sup>4</sup>. In Abb. A.3 sind für das-



(a) TE-polarisierte Beugungswellen



(b) TM-polarisierte Beugungswellen

**Abb. A.2:** Konvergenz der Reflexionseffizienzen für die -1. und 0. Beugungsordnung bei konischer Beugung.

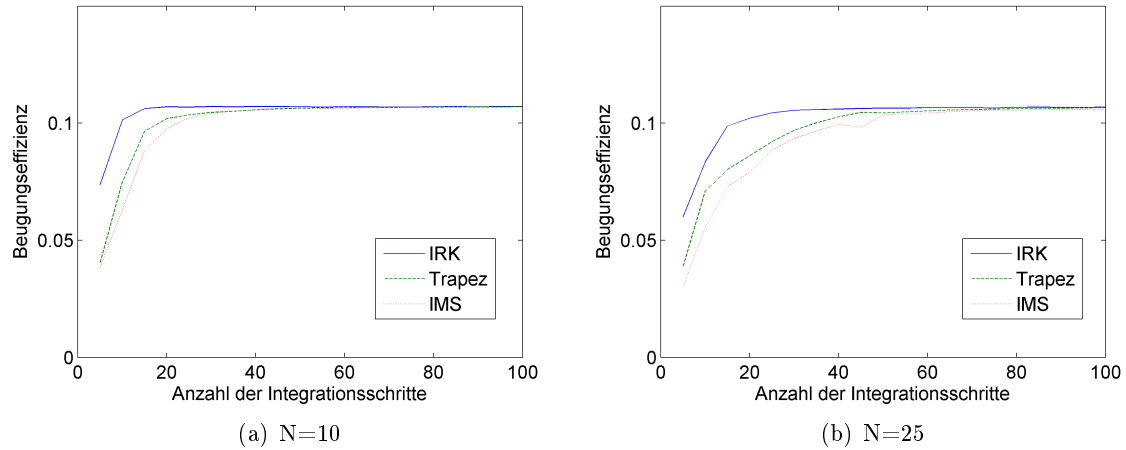
selbe Gitter die Konvergenz der TM-polarisierten Beugungswellen -1. Ordnung in Abhängigkeit von der Anzahl von Integrationsschritten für die drei in Abschnitt 5 aufgeführten Integrationsverfahren dargestellt. Dabei wurde mit festem  $L = 5$  und variablem  $M = 1 \dots 20$  gerechnet. Die Abb. entspricht der Abb. 6 in Ref. [28].

Als ein Beispiel für ein unsymmetrisches Liniengitter, bei dem auch die Komponenten des Normalenvektorfeldes nicht einfache harmonische Funktionen sind, dient ein Kobaltgitter mit dreiecksförmigem Profil aus Ref. [44]. Alle Parameter, bis auf die Profilform, sind dieselben wie

<sup>4</sup>Die Werte sind in Ref. [44] nicht angegeben. Sie stammen von Koki Watanabe. Bei den Ergebnissen in Tab. A.2 wurden  $ML = 100$  Integrationsschritte verwendet.

Ordnung	Methode	TM→TE	TM→TM
-1.	DM	0.07921	0.10687
	[44]	0.07921	0.10687
0.	DM	0.00971	0.04384
	[44]	0.00971	0.04378

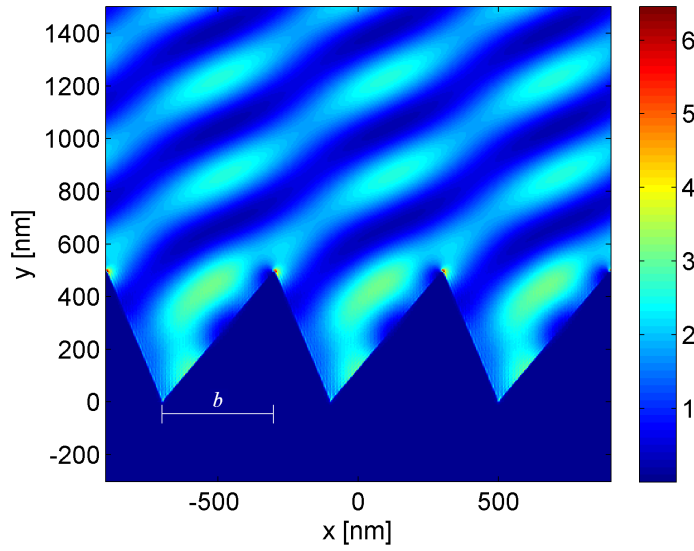
**Tab. A.2:** Vergleich der Reflexionseffizienzen des Sinusgitters aus Kobalt bei konischer Beleuchtung.



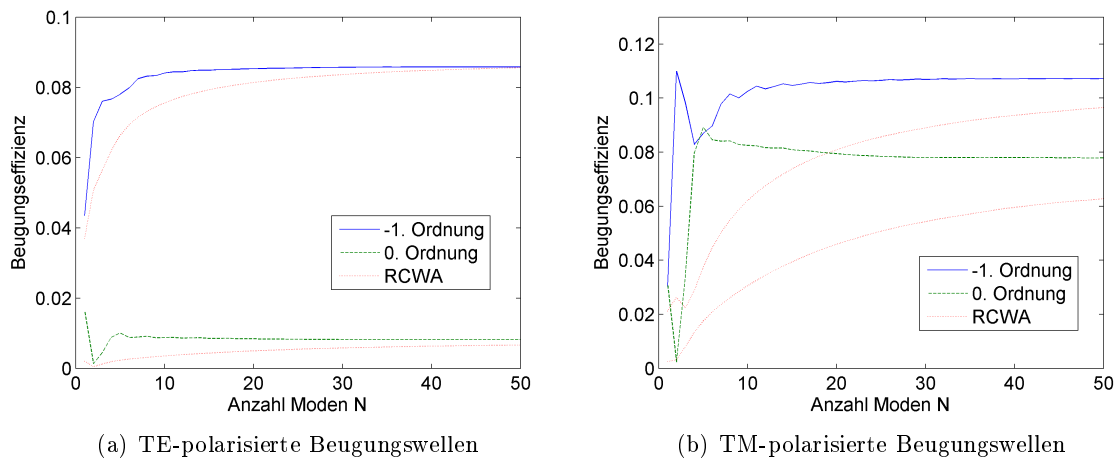
**Abb. A.3:** Konvergenz in Abhängigkeit der Anzahl der Integrationsschritte.

im vorangegangenen Beispiel. In Abb. A.4 ist die mit  $N = 50$  berechnete Intensitätsverteilung  $|\mathbf{E}|^2$  gezeigt. Dort ist auch die Profilform zu erkennen. Der Parameter  $b$  ist 400nm. Deutlich zu erkennen sind die Felderhöhungen an den Spitzen der Struktur.

In Abb. A.5 sind die Konvergenzkurven für die -1. und 0. Beugungsordnung, aufgeteilt in TE- und TM-polarisierten Anteil, dargestellt. Ebenfalls eingezeichnet sind die Ergebnisse der RCWA bei einer Annäherung des Profils durch 100 Schichten.



**Abb. A.4:** Intensitätsverteilung für das Kobaltgitter mit Dreieckprofil.



**Abb. A.5:** Konvergenz der Reflexionseffizienzen für die -1. und 0. Beugungsordnung für das Kobaltgitter mit Dreieckprofil.

## A.2.2 Liniengitter aus Mica und KTP

In Ref. [50, 58] sind Beugungseffizienzen für die -1. und 0. Beugungsordnung für eine einfallende ebene Welle (Cover:  $\varepsilon_c = \mu_c = 1$ , Einfallswinkel  $\phi = 30^\circ$  und  $\psi = -40^\circ$ ) auf ein sinusförmiges Gitter bestehend aus einem biaxialen Kristall (Mica) mit den Hauptpermittivitäten  $\varepsilon_1 = 2.4087$ ,  $\varepsilon_2 = 2.5027$ ,  $\varepsilon_3 = 2.5217$  und den Hauptachsenrichtungen  $\mathbf{v}_1 = (1, 1, 1)$ ,  $\mathbf{v}_3 = (-1, 2, -1)$  und  $\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_3 \times \mathbf{v}_1$  aufgeführt<sup>5</sup>.

In Tabelle A.3 sind die Effizienzen für verschiedene Verhältnisse von  $\lambda_0/d_x$  angegeben. Dabei wird die Notation von Ref. [50, 58] übernommen, d.h. bei  $r_{mk}^{(n)}$  handelt es sich um die Reflexions-effizienz der  $n$ -ten Beugungsordnung bei  $m$ -polarisierter ( $m = 1 = TE$  und  $m = 2 = TM$ ) einfallender Welle und  $k$ -polarisierter Beugungswelle.

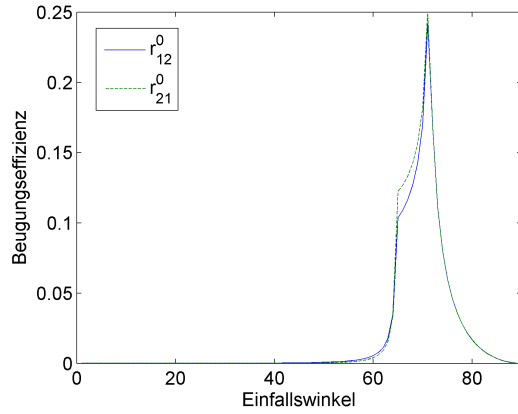
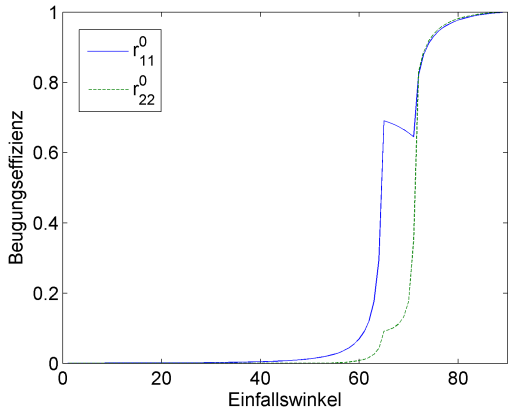
Die Werte der Methode DM und aus Ref. [58] sind dabei mit  $N = 15$  berechnet. In Ref. [50] wird das Gitterprofil durch eine Stufenapproximation aus 50 Schichten angenähert und mit  $N = 31$  gerechnet. Bei allen Berechnungen in DM wurden  $L = 5$  Integrations-schritte pro S-Matrix-Schicht verwendet. Das Gitter wurde in  $M = 4, 10, 20$  S-Matrix-Schichten aufgeteilt.

$a/d_x$	Polarisation	Methode	$r_{m1}^0$	$r_{m2}^0$	$t_{m1}^0$	$t_{m2}^0$	$r^{-1}$
0.3	TE	DM	$1.715 \cdot 10^{-2}$	$8.150 \cdot 10^{-4}$	$8.218 \cdot 10^{-1}$	$5.320 \cdot 10^{-3}$	$1.795 \cdot 10^{-2}$
		[58]	$1.716 \cdot 10^{-2}$	$8.156 \cdot 10^{-4}$	$8.218 \cdot 10^{-1}$	$5.320 \cdot 10^{-3}$	$1.796 \cdot 10^{-2}$
		[50]	$1.705 \cdot 10^{-2}$	$8.493 \cdot 10^{-4}$	$8.218 \cdot 10^{-1}$	$5.477 \cdot 10^{-3}$	$1.796 \cdot 10^{-2}$
	TM	DM	$8.358 \cdot 10^{-4}$	$3.284 \cdot 10^{-3}$	$9.498 \cdot 10^{-3}$	$8.479 \cdot 10^{-1}$	$2.375 \cdot 10^{-2}$
		[58]	$8.364 \cdot 10^{-4}$	$3.286 \cdot 10^{-3}$	$9.495 \cdot 10^{-3}$	$8.479 \cdot 10^{-1}$	$2.377 \cdot 10^{-2}$
		[50]	$8.705 \cdot 10^{-4}$	$3.255 \cdot 10^{-3}$	$9.656 \cdot 10^{-3}$	$8.482 \cdot 10^{-1}$	$2.370 \cdot 10^{-2}$
1	TE	DM	$3.023 \cdot 10^{-3}$	$1.027 \cdot 10^{-4}$	$4.087 \cdot 10^{-1}$	$1.913 \cdot 10^{-2}$	$5.287 \cdot 10^{-3}$
		[50]	$2.992 \cdot 10^{-3}$	$9.334 \cdot 10^{-5}$	$4.085 \cdot 10^{-1}$	$1.959 \cdot 10^{-2}$	$5.251 \cdot 10^{-3}$
	TM	DM	$1.288 \cdot 10^{-4}$	$1.213 \cdot 10^{-3}$	$3.235 \cdot 10^{-2}$	$4.251 \cdot 10^{-1}$	$4.719 \cdot 10^{-3}$
		[50]	$1.176 \cdot 10^{-4}$	$1.225 \cdot 10^{-3}$	$3.278 \cdot 10^{-2}$	$4.248 \cdot 10^{-1}$	$4.631 \cdot 10^{-3}$
	TE	DM	$1.821 \cdot 10^{-3}$	$2.224 \cdot 10^{-4}$	$1.127 \cdot 10^{-1}$	$7.043 \cdot 10^{-2}$	$2.307 \cdot 10^{-3}$
		[50]	$1.768 \cdot 10^{-3}$	$2.053 \cdot 10^{-4}$	$1.131 \cdot 10^{-1}$	$7.142 \cdot 10^{-2}$	$2.205 \cdot 10^{-3}$
TM	DM	$2.436 \cdot 10^{-4}$	$6.124 \cdot 10^{-4}$	$8.126 \cdot 10^{-2}$	$4.927 \cdot 10^{-2}$	$1.805 \cdot 10^{-3}$	
	[50]	$2.191 \cdot 10^{-4}$	$5.988 \cdot 10^{-4}$	$8.201 \cdot 10^{-2}$	$4.921 \cdot 10^{-2}$	$1.665 \cdot 10^{-3}$	

**Tab. A.3:** Vergleich der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten mit Werten aus Ref. [58] und Ref. [50].

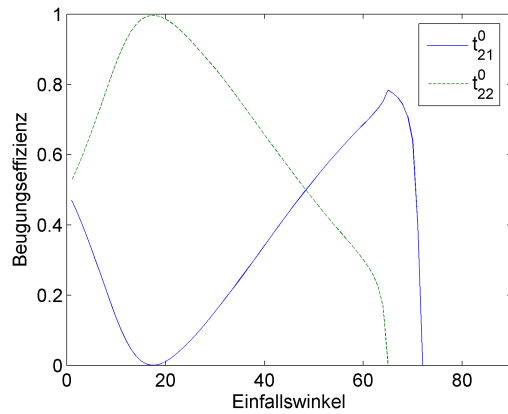
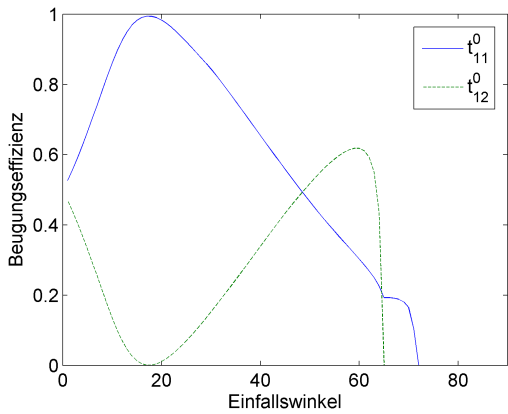
Als ein Beispiel, in dem auch Transmissionseffizienzen bei einem anisotropen Substrat berechnet werden, dient ein sinusförmiges Profil, welches ein isotropes Medium mit  $\varepsilon_c = 3.84$  und ein biaxialen Kristall (KTP) mit Hauptpermittivitäten  $\varepsilon_1 = 3.1216$ ,  $\varepsilon_2 = 3.1557$  und  $\varepsilon_3 = 3.5034$  trennt. Die Hauptachsen entsprechen denen des vorangegangenen Beispiels und es handelt sich um nichtmagnetische Materialien. Die Periode des Gitters entspricht der Wellenlänge im Vakuum,  $d_x = \lambda_0$ , und die Höhe ist durch  $a = 0.1d_x$  gegeben. Die Einfallsebene ist orthogonal zur  $z$ -Achse, d.h.  $\psi = 0^\circ$ , und die Beleuchtung erfolgt aus dem isotropem Medium. In Abb. A.6 und A.7 sind die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten in Abhängigkeit des Einfallswinkels  $\phi$  dargestellt. Für weitere Informationen zu diesem Beispiel sei auf Ref. [58] verwiesen.

<sup>5</sup>In Ref. [50] wird  $\mathbf{v}_2 = (-1, 2, -1)$  angegeben, während dies ursprünglich in Ref. [58]  $\mathbf{v}_3$  ist. Möglicherweise sind daher die Berechnungen in Ref. [50] mit  $\varepsilon_2 \leftrightarrow \varepsilon_3$  durchgeführt.



(a) Reflexionsanteil bei gleichbleibender Polarisation (b) Reflexionsanteil bei orthogonaler Polarisation

**Abb. A.6:** Reflexionseffizienzen für das sinusförmige Liniengitter aus dem biaxialen Kristall KTP. Die Ergebnisse entsprechen denen in Ref. [58].



(a) TE-polarisierte einfallende Welle

(b) TM-polarisierte einfallende Welle

**Abb. A.7:** Transmissionseffizienzen für das sinusförmige Liniengitter aus dem biaxialen Kristall KTP. Die Ergebnisse entsprechen denen in Ref. [58].

### A.2.3 Beschichtetes Lamellengitter

In Ref. [50] wird ein metallisches lamellenförmiges Gitter, welches mit einem anisotropen Material beschichtet wurde, untersucht. Aufgrund der Geometrie des Problems handelt es sich um ein ideales Anwendungsbeispiel der RCWA. An dieser Stelle sollen jedoch die Ergebnisse der DM mit denen der RCWA aus Ref. [50] verglichen werden, um zu zeigen, dass das Problem in diesem Falle für beide Methoden identisch ist, d.h. die Propagationsmatrix  $\mathbf{M}$  übereinstimmt. Die Methode der RCWA ist jedoch in diesem Fall vorzuziehen, da sie keine Einteilung in künstliche S-Matrix Schichten und weniger Rechenzeit benötigt.

Die Permittivität des Covers ist  $\varepsilon_c = 1$  und des Substrats  $\varepsilon_s = (0.22 + i6.71)^2$ . Das Binärgitter besteht zur Hälfte aus dem Material des Substrats und des eines biaxialen Kristalls mit  $\varepsilon_{xx} = 2.25$ ,  $\varepsilon_{yy} = 2.56$ ,  $\varepsilon_{zz} = 2.89$ ,  $\varepsilon_{xy} = 0.04$ ,  $\varepsilon_{yz} = 0.16$  und  $\varepsilon_{xz} = 0.36$ . Ausserdem gilt  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ . Dieses Binärgitter hat die Periode  $d_x$  und die Höhe  $a_1$ , beide entsprechen der Wellenlänge des einfallenden Lichts  $\lambda_0$ . Über dem Binärgitter befindet sich noch eine Schicht der Höhe  $a_2 = \lambda_0$  des biaxialen Kristalls<sup>6</sup>. Die Permeabilität ist überall gleich eins. Die Einfallrichtung der ebenen Welle ist durch  $\phi = 30^\circ$  und  $\psi = 0^\circ$  festgelegt.

In Tab. A.4 sind die Beugungseffizienzen der -1. und 0. Beugungsordnung aufgelistet. Jeweils für die Einfallspolarisation TE bzw. TM sind die Beugungseffizienzen, aufgeteilt in TE- und TM-polarisierten Anteil, angegeben. Bei der DM wurde das System gewöhnlicher Differentialgleichungen mit 200 Integrationschritten gelöst, wobei jeweils nur die erste von 20 S-Matrix-Schichten des Binärgitters und der homogenen anisotropen Schicht integriert wurde. Die angegebenen Werte sind bei  $N = 100$  berechnet. Die Werte aus Ref. [50] sind Mittelwerte der Ergebnisse mit  $N = 199$  und  $N = 201$ .

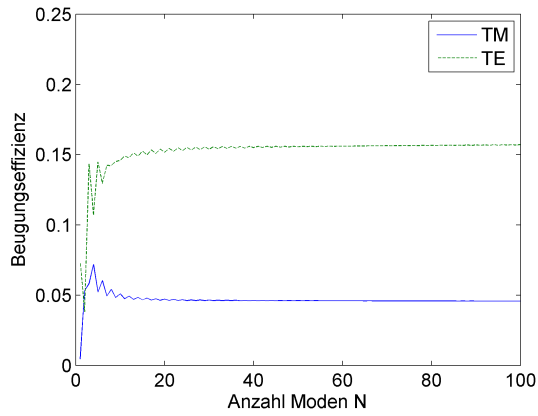
Die Konvergenzkurven zu den oben angegebenen Werten sind in Abb. A.8 für eine TE-

Ordnung	Methode	TE→TE	TE→TM	TM→TE	TM→TM
-1.	DM	0.57441	0.06449	0.06441	0.61135
	[50]	0.57434	0.06446	0.06446	0.61133
0.	DM	0.15701	0.04574	0.03323	0.03227
	[50]	0.15692	0.04577	0.03322	0.03227

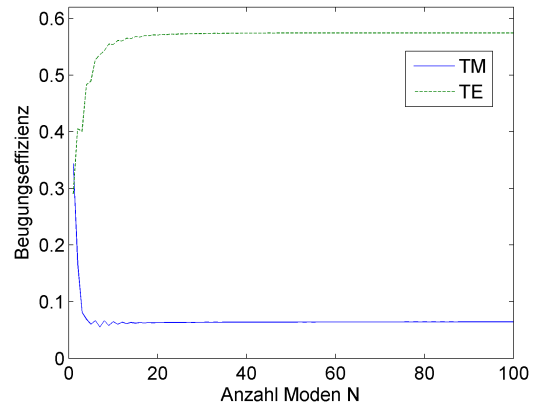
**Tab. A.4:** Vergleich der Reflexionseffizienzen für das mit einem biaxialen Kristall beschichtete metallische Binärgitter mit Werten aus Ref. [50].

polarisierte einfallende Welle und in Abb. A.9 für eine TM-polarisierte einfallende Welle gezeigt. Diese entsprechen den Konvergenzkurven bei Verwendung der RCWA, welche in Ref. [50] dargestellt sind.

<sup>6</sup>In Ref. [50] findet sich eine Skizze des Gitters.

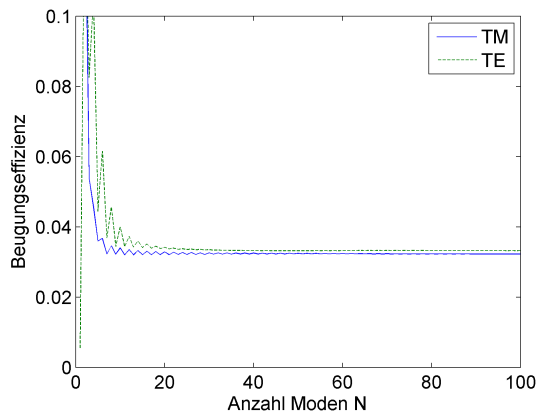


(a) 0. Beugungsordnung

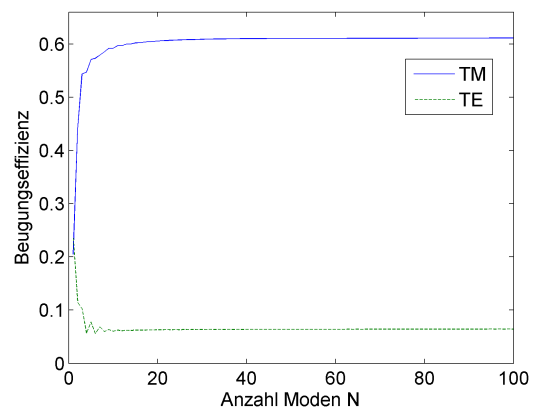


(b) -1. Beugungsordnung

**Abb. A.8:** Konvergenzkurven für eine TE-polarisierte einfallende Welle bei dem Beispiel eines mit einem biaxialen Kristall beschichteten Liniengitters.



(a) 0. Beugungsordnung



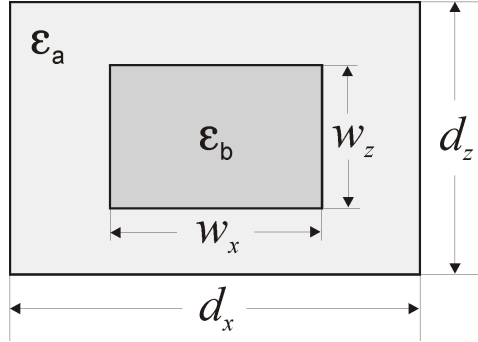
(b) -1. Beugungsordnung

**Abb. A.9:** Konvergenzkurven für eine TM-polarisierte einfallende Welle bei dem Beispiel eines mit einem biaxialen Kristall beschichteten Liniengitters.



## A.2.4 Kreuzgitter aus anisotropen Materialien

Als Beispiel für ein Kreuzgitter aus anisotropen Materialien sei ein Beispiel aus Ref. [51] betrachtet. In Abb. A.10 ist eine Skizze des Gitters von oben dargestellt. Die Materialien sind nichtmagnetisch und die Permittivität ist in  $y$ -Richtung konstant.

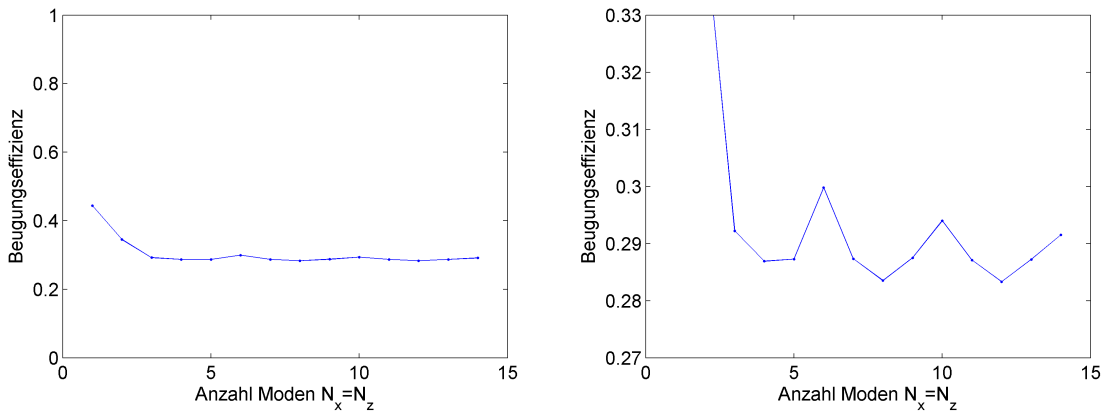


**Abb. A.10:** Ansicht des betrachteten Kreuzgitters aus anisotropen Materialien von oben.

Das Gitter hat folgende Daten: Die Periodizität ist  $d_x = 2.4\lambda_0$  und  $d_z = 1.4\lambda_0$ . Die Höhe beträgt  $a = \lambda_0$  und es gilt  $w_x/d_x = w_z/d_z = 0.5$ . Das Cover hat  $n_c = 1$  und das Substrat  $n_s = 1 + 5i$ . Die einfallende Welle ist TM-polarisiert, bei normalem Einfall ( $\phi = \psi = 0^\circ$ ). Die Permittivitäten sind  $\varepsilon_{a,xx} = \varepsilon_{a,yy} = \varepsilon_{b,xx} = \varepsilon_{b,yy} = 2.25$ ,  $\varepsilon_{a,zz} = \varepsilon_{b,zz} = 2$ ,  $\varepsilon_{a,xy} = \varepsilon_{b,yx} = 0.5i$  und  $\varepsilon_{a,yx} = \varepsilon_{b,xy} = -0.5i$ .

Die Konvergenzkurve ( $N_x = N_z$ ) der Effizienz für die (0,0)-te Beugungsordnung in Reflexion ist in Abb. A.11 (a) dargestellt. Berechnet wurde sie mit der Differentiellen Methode und  $ML = 80$  Integrationsschritten. Daneben in Abb. A.11 (b) ist dieselbe Kurve bei veränderter Achsenskalierung dargestellt.

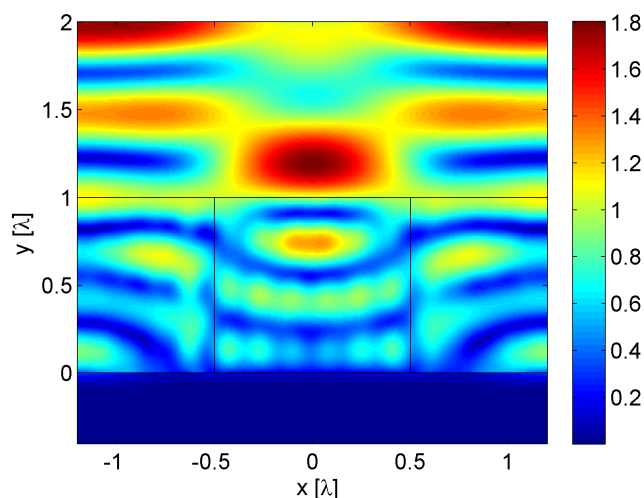
Ein Vergleich mit der entsprechenden Konvergenzkurve in Ref. [51] zeigt, dass die dortige For-



(a) Konvergenzkurve der (0,0)-ten Beugungsordnung in Reflexion (b) Darstellung bei veränderter Achsenskalierung

**Abb. A.11:** Konvergenzkurve für  $N_x = N_z$ . In (b) ist die Kurve als Detailansicht gezeigt. Ein Vergleich mit Ref. [51] zeigt, dass die dortige Formulierung der RCWA ein besseres Konvergenzverhalten zeigt.

mulierung der RCWA wesentlich besser konvergiert. Der dortige Wert der Effizienz beträgt etwa 0.298. Die Formulierung in Ref. [51] ist zwar nicht auf beliebige Profilformen anwendbar, jedoch in diesem Beispiel der implementierten Version der Differentiellen Methode klar überlegen. Auch handelt es sich bei diesem Beispiel um einen Spezialfall bei dem die Matrix  $\mathbf{M}$  die Form von Gl. (5.54) annimmt und sich somit die Größe des Eigenwertproblems bei der RCWA halbiert [51]. Diese Tatsache ist bisher im implementierten Code für anisotrope Materialien nicht ausgenutzt. Da dieses Beispiel das einzige hier aufgeführte Beispiel für ein Kreuzgitter aus anisotropen Materialien ist, sollen an dieser Stelle noch ein mit der Differentiellen Methode berechnetes Nahfeldbild gezeigt werden. In Abb. A.12 ist der Betrag der elektrischen Feldstärke im  $xy$ -Schnitt bei  $z = 0$  dargestellt. Es wurde dabei mit  $N_x = 14$  und  $N_z = 10$  gerechnet. Das betrachtete

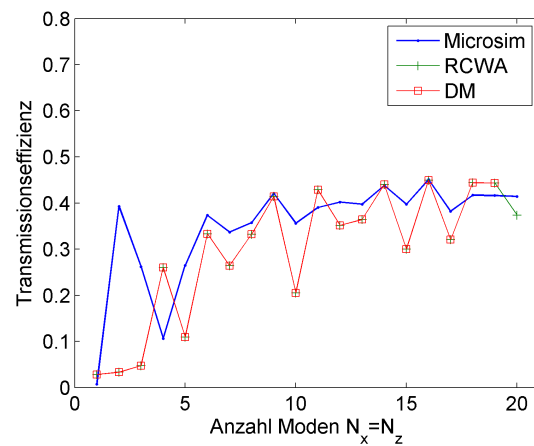


**Abb. A.12:** Betrag des elektrischen Feldes im  $xy$ -Schnitt bei  $z = 0$  berechnet mit der Differentiellen Methode.

Beispiel verdeutlicht das allgemeine Problem, dass bei Kreuzgittern aus leitfähigen Materialien häufig, mit der durch den Arbeitsspeicher limitierten maximal möglichen Anzahl von Moden, kein konvergiertes Ergebnis erzielt werden kann<sup>7</sup>. Aus diesem Grund ist es gerade bei Kreuzgittern wichtig möglichst eine schnelle Konvergenz zu bekommen oder das Problem zu reduzieren, um mit mehr Moden rechnen zu können. Zum Beispiel ist bei Li's Zickzack-Methode [96] die Konvergenz bei spezieller Geometrie scheinbar besser als mit der Normalenvektormethode. So konnte z.B. für die aussergewöhnliche Lichtdurchlässigkeit durch Metallgitter mit Löchern in Ref. [1, 97, 98] mit der derzeit implementierten Formulierung kein konvergiertes Ergebnis erzielt werden. Bei numerischen Untersuchungen mittels RCWA werden jedoch die in Experimenten meist runden Löcher in der Regel einfach als quadratisch behandelt. In diesem Fall scheint die Formulierung von Li mit der Zickzack-Methode besser zu sein als die Formulierung mit Normalenvektorfeld. Ausserdem handelt es sich dann um eine spezielle Situation, bei der die Größe des Problems nochmals stark reduziert werden kann [67]. Für eine generelle Aussage über das Konvergenzverhalten fehlt jedoch eine genauere Untersuchung. Solche Untersuchungen zum Vergleich der Berechnung mit Normalenvektorfeld und Li's Zickzack-Methode finden sich jedoch in Ref. [48, 49].

<sup>7</sup>Das hier aufgeführte Beispiel wurde jedoch auf einem gewöhnlichen Desktop-PC berechnet, so dass mit Rechnern mit mehr Arbeitsspeicher durchaus noch mit mehr Moden gerechnet werden können. In Ref. [51] wurde z.B. bis 27x27 Moden gerechnet.

In Abb. A.13 ist noch eine Konvergenzkurve der (0,0)-ten Ordnung in Transmission für ein Beispiel der aussergewöhnlichen Lichtdurchlässigkeit bei der Resonanzfrequenz dargestellt. Es handelt sich um quadratische Löcher. In diesem Fall scheint die Formulierung mit Li's Zickack-Methode, die bei der Berechnung mit Microsim verwendet wurde, besser zu konvergieren. Es kann jedoch auch mit  $N_x = N_z = 20$  kein konvergiertes Ergebnis erzielt werden.



**Abb. A.13:** Konvergenz der (0,0)-ten Ordnung in Transmission für ein Beispiel der aussergewöhnlichen Lichtdurchlässigkeit bei Resonanzfrequenz.

## B Darstellung der Felder durch ihre $z$ -Komponenten

Im homogenen isotropen Cover ( $j = c$ ) und Substrat ( $j = s$ ) lassen sich die elektrischen und magnetischen Feldstärken durch ihre  $z$ -Komponenten darstellen. Für ein Liniengitter ergibt sich

$$E_x^{(j)}(x, y, z) = \frac{1}{k_j^2 - \gamma_0^2} \left( i\gamma_0 \frac{\partial E_z}{\partial x} + i\omega\mu_j \frac{\partial H_z}{\partial y} \right), \quad (\text{B.1})$$

$$E_y^{(j)}(x, y, z) = \frac{1}{k_j^2 - \gamma_0^2} \left( i\gamma_0 \frac{\partial E_z}{\partial y} - i\omega\mu_j \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (\text{B.2})$$

$$H_x^{(j)}(x, y, z) = \frac{1}{k_j^2 - \gamma_0^2} \left( -i\omega\varepsilon_j \frac{\partial E_z}{\partial y} + i\gamma_0 \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (\text{B.3})$$

$$H_y^{(j)}(x, y, z) = \frac{1}{k_j^2 - \gamma_0^2} \left( i\omega\varepsilon_j \frac{\partial E_z}{\partial x} + i\gamma_0 \frac{\partial H_z}{\partial y} \right). \quad (\text{B.4})$$

Die Herleitung dieser Beziehungen findet sich in Ref. [1]. Für ein Kreuzgitter ergeben sich ähnliche Beziehungen. Dazu ist  $\gamma_0$  durch  $\gamma_m$  zu ersetzen und über den Index  $m$  zu summieren.

Gln. (B.1) und (B.3) entsprechen den Gln. (5.13) und (5.14) mit denen in Abschnitt 5.1 die Fourierkoeffizienten der  $x$ - und  $z$ -Feldkomponenten als Linearkombination der Rayleigh-Koeffizienten der  $z$ -Feldkomponenten dargestellt werden.

Die Beziehungen (B.1–B.4) werden ebenfalls verwendet um aus den Rayleigh-Koeffizienten der  $z$ -Feldkomponenten die Rayleigh-Koeffizienten der  $x$ - und  $y$ -Komponenten zu berechnen. Dazu ist zu beachten, dass das Feld im homogenen isotropen Cover bzw. Substrat in der Rayleigh-Entwicklung eine exponentielle Abhängigkeit von  $y$  besitzt. Alle räumlichen partiellen Differentiationen werden somit zu einfachen Multiplikationen.

# Literaturverzeichnis

- [1] NEVIERE, M.; POPOV, E.: *Light Propagation in Periodic Media*. Marcel Dekker Inc., 2003.
- [2] LOEWEN, E.; POPOV, E.: *Diffraction Gratings and Applications*. Marcel Dekker Inc., 1997.
- [3] RAMAKRISHNA, S. A.: *Physics of negative refractive index materials*. Rep. Prog. Phys. Vol. 68, 2005.
- [4] PENDRY, J.: *Negative Refraction Makes a Perfect Lens*. Physical Review Letters Vol. 85, 2000.
- [5] FOLDYNA, M. et al.: *Effective medium approximation of anisotropic lamellar nanogratings based on Fourier factorization*. Optics Express Vol. 14, 2006.
- [6] KIKUTA, H. et al.: *Effective medium theory of two-dimensional subwavelength gratings in the non-quasi-static limit*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 15, 1998.
- [7] LALANNE, P. et al.: *On the effective medium theory of subwavelength periodic structures*. J. of Mod. Opt. Vol. 43, 1996. J. of Mod. Opt. Vol. 43, 1996.
- [8] GRANN, E. et al.: *Artificial uniaxial and biaxial dielectrics with use of two-dimensional subwavelength binary gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 11, 1994.
- [9] REIDER, G.: *Photonik*. Springer-Verlag, 1997.
- [10] PETIT, R. (Hrsg.): *Electromagnetic Theory of Gratings*. Topics in Current Physics Vol. 22, Springer-Verlag, 1980.
- [11] POPOV, E.; BOZHKO, B.: *Differential method applied for photonic crystals*. Applied Optics Vol. 39, 2000.
- [12] KERWIEN, N. et al.: *Vectorial thin-element approximation: a semirigorous determination of Kirchhoff's boundary conditions*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 24, 2007.
- [13] KERWIEN, N.: *Zum Einfluss von Polarisierungseffekten in der Bildentstehung*. Dissertation, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, 2007.
- [14] PETSCHOW, M.: *Implementierung der Vektorial Kirchhoffschen Näherung (VKA) zur Nahfeldberechnung in Microsim*. Studienarbeit, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, 2006.
- [15] NEVIERE, M. et al.: *Electromagnetic Resonances in Nonlinear Optics*. Gordon and Breach Science Publishers, 2000.
- [16] DELORT, T.; MAYSTRE, D.: *Finite-element method for gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 10, 1993.

- [17] LI, L.: *Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 13, 1995.
- [18] LI, L.: *Note on the S-matrix propagation algorithm*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 20, 2003.
- [19] LI, L.: *Use of Fourier Series in the Analysis of Discontinuous Periodic Structures*. J. of Mod. Opt. Vol. 13, 1996.
- [20] LI, L.: *Mathematical Reflections on the Fourier Modal Method in Grating Theory* in Mathematical Modeling in Optical Science. SIAM Frontiers in Applied Mathematics, 2001.
- [21] POPOV, E. et al.: *Differential theory: application to highly conducting gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 21, 2004.
- [22] WATANABE, K.: *Study of the differential theory of lamellar gratings made of highly conducting materials*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 23, 2006.
- [23] LYNDIN, N. et al.: *Modal analysis and suppression of the Fourier modal method instabilities in highly conductive gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 12, 2007.
- [24] MEHRANY, K. et al.: *Study of the numerical artifacts in differential analysis of highly conducting gratings*. Optics Letters Vol. 38, 2008.
- [25] MOHARAM, M. et al.: *Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 12, 1995.
- [26] MOHARAM, M. et al.: *Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 12, 1995.
- [27] TAN, E.: *Note on formulation of the enhanced scattering-(transmittance-)matrix approach*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 19, 2002.
- [28] WATANABE, K.: *Numerical integration schemes used on the differential theory for anisotropic gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 19, 2002.
- [29] POPOV, E. et al.: *Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 19, 2002.
- [30] BONOD, N. et al.: *Differential theory of diffraction by finite cylindrical objects*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 22, 2005.
- [31] STOUT, B. et al.: *Light diffraction by a three-dimensional object: differential theory*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 22, 2005.
- [32] SALEH, B.; TEICH, M.: *Fundamentals of Photonics*. John-Wiley and Sons Inc., 1991.
- [33] CHENG, D.: *Field and Wave Electromagnetics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1989.
- [34] REBHAN, E.: *Theoretische Physik: Elektrodynamik*. Spektrum Akademischer Verlag, 2007.
- [35] BORN, M.; WOLF, E.: *Principles of Optics*. Cambridge University Press, 1980.

- [36] VESELAGO, V.: *The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of  $\epsilon$  and  $\mu$* . Soviet Physics Uspekhi Vol. 10, 1968.
- [37] DAMASKOS, N. et al.: *Dispersion Relation for General Anisotropic Media*. IEEE transactions on antennas and propagation Vol. AP-30 No. 5, 1981.
- [38] LI, L.: *Justification of matrix truncation in the modal methods of diffraction gratings*. J. Opt. A: Pure Appl. Opt. Vol. 1, 1999.
- [39] POPOV, E.; NEVIERE, M.: *Maxwell equations in Fourier space: fast-converging formulation for diffraction by arbitrary shaped, periodic, anisotropic media*. J. of Mod. Opt. Vol. 18, 2001.
- [40] WATANABE, K.: *Numerical techniques of the Differential Method for surface-relief gratings made of anisotropic and conducting materials*. Unveröffentlicht.
- [41] WATANABE, K.: *Differential theory of gratings made of anisotropic materials*. J. Opt. Soc. Am. Vol. 19, 2002.
- [42] WU, S. et al.: *Three-dimensional converging-diverging Gaussian beam diffraction by a volume grating*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 22, 2005.
- [43] GONZALEZ, M. et al.: *Design, near-field characterization, and modeling of  $45^\circ$  surface-plasmon Bragg mirrors*. Physical Review B 73, 2006.
- [44] WATANABE, K.: *Fast converging and widely applicable formulation of the differential theory for anisotropic gratings*. Progress In Electromagnetics Research 48, 2004.
- [45] RAFLER, S. et al.: *Investigation of methods to set up the normal vector field for the differential method*. Proc. of SPIE Vol. 6995, 2008.
- [46] GÖTZ, P. et al.: *Simulating Grating Diffraction Using the Normal Vector Method*. DGaO Proc., 2008.
- [47] SCHUSTER, T. et al.: *Normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 24, 2007.
- [48] GÖTZ, P.: *Simulation von Gitterbeugung mit der Normalenvektormethode*. Diplomarbeit, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, 2008.
- [49] SCHUSTER, T.: *Simulation von Beugung an Kreuzgitter-Strukturen und deren Anwendung*. Dissertation, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, voraussichtlich 2009.
- [50] LI, L.: *Reformulation of the Fourier Modal Method for surface-relief gratings made with anisotropic materials*. J. of Mod. Opt. Vol. 45, 1998.
- [51] LI, L.: *Fourier Modal Method for crossed anisotropic gratings with arbitrary permittivity and permeability tensors*. J. Opt. A: Pure and applied Optics, 2003.
- [52] ISERLES, A.: *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge Texts in Applied Mathematics, 1996.
- [53] TAN, E.: *Hybrid-matrix algorithm for rigorous coupled-wave analysis of multilayered diffraction gratings*. J. of Mod. Opt. Vol. 53, 2006.

- [54] TAN, E.: *Enhanced R-matrix algorithms for multilayered diffraction gratings*. Applied Optics Vol. 45, 2006.
- [55] PENG, M.; MORRIS, G.: *Efficient implementation of rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 12, 1995.
- [56] LALANNE, P.; MORRIS, G.: *Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM-polarization*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 13, 1996.
- [57] MORI, S. et al.: *Analysis of dielectric lamellar gratings coated with anisotropic layers*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 7, 1990.
- [58] DEPINE, R.; GIGLI M.: *Diffraction from corrugated gratings made with biaxial crystals: Rayleigh Methods*. Opt. Commun. 130, 1996.
- [59] LALANNE, P.; JUREK, M.: *Computation of near-field pattern with the coupled-wave method for transverse magnetic polarization*. J. of Mod. Opt. Vol. 45, 1998.
- [60] BONOD, N.; NEAUPORT, J.: *Design of a full-silicia pulse-compression grating*. Optics Letters Vol. 33, 2008.
- [61] MATIAS, I. et al.: *Comparative study of the modeling of three-dimensional photonic bandgap structures*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 20, 2003.
- [62] WADDIE, A.: *Comparison of one- and two-dimensional dielectric reflector geometries for high-energy laser pulse compression*. Optics Letters Vol. 30, 2005.
- [63] LOPEZ, A.: *Reformulation of the rigorous coupled-wave analysis (RCWA) equations: Photonic crystals applications*. Dissertation, Cornell University, 2000.
- [64] LALANNE, P.: *Effective medium theory applied to photonic crystals composed of cubic or square cylinders*. Applied Optics Vol. 35, 1996.
- [65] GONZALEZ, J.; THOMPSON, D.: *Getting started with Numerov's method*. Computers in Physics Vol. 11, 1997.
- [66] KIM, H. et al.: *Extended scattering-matrix method for efficient full parallel implementation of rigorous coupled-wave analysis*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 24, 2007.
- [67] ZHOU, C.; LI, L.: *Formulation of the Fourier modal method for symmetric crossed gratings in symmetric mountings*. J. of Opt.: Pure and Applied Optics Vol. 6, 2004.
- [68] BAI, B.; LI, L.: *Reduction of computation time for crossed-grating problems: a group-theoretic approach*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 21, 2004.
- [69] ZHANG, X. et al.: *Far-Field Optical Superlens*. Nano Letters Vol. 7, 2007.
- [70] HELL, S.; WICHMANN, J.: *Breaking the diffraction resolution limit by stimulated emission: stimulated-emission-depletion fluorescence microscopy*. Optics Letters Vol. 19, 1994.
- [71] MELVILLE, D. et al.: *Submicron imaging with planar silver lens*. Applied Physics Letters Vol. 84, 2004.
- [72] TAUBNER, T. et al.: *Near-Field Microscopy Through a SiC Superlens*. Science Vol. 313, 2006.



- [73] BLAIKIE, R.; McNAB, S.: *Simulation study of perfect lenses for near-field optical nanolithography*. Microelectronic Engineering, 2002.
- [74] SALANDRINO, A.; ENGHETA, N.: *Far-field subdiffraction optical microscopy using metamaterial crystals: Theory and simulations*. Physical Review B Vol. 74, 2006.
- [75] JACOB, Z. et al.: *Optical Hyperlens: Far-field imaging beyond the diffraction limit*. Optic Express Vol. 14, 2006.
- [76] DURANT, S. et al.: *Theory of the transmission properties of an optical far-field superlens for imaging beyond the diffraction limit*. J. Opt. Soc. Am. B Vol. 23, 2006.
- [77] LIU, Z. et al.: *Far-Field Optical Hyperlens Magnifying Sub-Diffraction-Limited Objects*. Science Vol. 315 no. 5819, 2007.
- [78] ZHANG, X. et al.: *Development of optical hyperlens for imaging below the diffraction limit*. Optics Express Vol. 15, 2007.
- [79] PALIK, E.: *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press Handbook Series, 1997.
- [80] RAMAKRISHNA, S. et al.: *Imaging near field*. J. of Mod. Opt. Vol. 50, 2003.
- [81] ZHANG, X. et al.: *Tuning the far-field superlens: from UV to visible*. Optics Express Vol. 15, 2007.
- [82] CUMMER, S. et al.: *Full-wave simulations of electromagnetic cloaking structures*. Physical Review E Vol. 74, 2006.
- [83] PENDRY, J. et al.: *Controlling electromagnetic fields*. Science Vol. 312, 2006.
- [84] LEONHARDT, U.; PHILBIN, T.: *General relativity in electrical engineering*. New Journal of Physics Vol. 8, 2006.
- [85] YOU, Y. et al.: *Invisibility cloaks for irregular particles using coordinate transformations*. Optics Express Vol. 16, 2008.
- [86] RAHM, M. et al.: *Design of electromagnetic cloaks and concentrators using form-invariant coordinate transformations of Maxwell's equations*. Photonics and Nanostructures Vol. 6, 2008.
- [87] KWON, D.; WERNER, D.: *Two-dimensional eccentric elliptic electromagnetic cloaks*. Applied Physics Letters 92, 2008.
- [88] MA, H. et al.: *Material parameter equation for elliptical cylindrical cloaks*. Physical Review A Vol. 77, 2008.
- [89] CHEN, H. et al.: *Extending the bandwidth of electromagnetic cloaks*. Physical Review B Vol. 76, 2007.
- [90] SCHURIG, D. et al.: *Metamaterial Electromagnetic Cloak at Microwave Frequencies*. Science Vol. 314, 2006.
- [91] SMOLYANINOV, I. et al.: *Electromagnetic cloaking in the visible frequency range*. Unveröffentlicht.

- [92] CAO, Q.: *Stable and efficient Bloch-mode computational method for one-dimensional grating waveguides*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 19, 2002.
- [93] GREENWELL, A. et al. *Multiple wavelength resonant grating filters at oblique incidence with broad angular acceptance*. Optics Express Vol. 15, 2007.
- [94] KIM, S. et al. *Off-axis directional beaming of optical field diffracted by a single subwavelength metal slit with asymmetric dielectric surface gratings*. Appl. Phys. Lett. Vol. 90, 2007.
- [95] LEE, B. et al: *Focusing properties of surface plasmon polariton floating dielectric lenses*. Optics Express Vol. 16, 2008.
- [96] LI, L.: *New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings*. J. Opt. Soc. Am. A Vol. 14, 1997.
- [97] BONOD, N. et al.: *Resonant optical transmission through thin metallic films with and without holes*. Optics Express Vol. 11, 2003.
- [98] POPOV, E. et al.: *Theory of light transmission through subwavelength periodic hole arrays*. Physical Review B Vol. 62, 2000.