

# 2次元 Helmholtz 方程式における周期多重極法と その光学問題への応用

## APPLICATION OF PERIODIC FMM FOR HELMHOLTZ' EQUATION IN 2D TO OPTICAL PROBLEMS

大谷 佳広<sup>1)</sup>, 西村 直志<sup>2)</sup>

Yoshihiro OTANI and Naoshi NISHIMURA

- 1) 京都大学大学院情報学研究所 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: otani@mbox.kudpc.kyoto-u.ac.jp)  
日本学術振興会特別研究員  
2) 京都大学大学院情報学研究所 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)

This paper presents some optical applications of the periodic FMM for two dimensional Helmholtz' equation proposed by the present authors. We first validate the periodic FMM by comparing numerical solutions with analytic solutions. We then apply the periodic FMM to electromagnetic problems related to semiconductor lithography. We calculate TE and TM electromagnetic fields around a metallic mask, which is used for the projection exposure of semiconductors.

**Key Words:** FMM, Periodic Boundary Value Problems, Maxwell's equations, Lithography

### 1. はじめに

高速多重極法 (FMM) の導入以来、境界要素法はかなり大規模な問題へと適用されてきた。近年では、より速く、より大きな規模の標準問題を解こうとするベンチマーク的的努力に加えて、工学的に有用なさまざまな問題に高速多重極境界要素法<sup>(1, 2)</sup>を適用しようとする試みもなされている。特に、注目に値するのは複合材料の挙動を解析する場合など、工学分野の様々な場面で現れる周期境界値問題における多重極法である。

Laplace 方程式の周期境界値問題における多重極法は、Greengard らの有名な最初の論文<sup>(1)</sup>から扱われてきたテーマであり、そこで見られた数学的な曖昧さは著者らのグループにより取り除かれた<sup>(3)</sup>。更に静弾性問題への拡張がなされている<sup>(4)</sup>。

一方、波動に関わる周期境界値問題も種々の応用を有しており、興味深いテーマである。既に大谷・西村はクラック問題における周期多重極法 (periodic FMM) を取り上げている<sup>(5)</sup>。波動問題の多重極法の応用として、近年関心が集まっているフォトニック結晶などに代表される光学の諸問題への応用はとりわけ有望である。

波動問題の周期多重極法は、Laplace 方程式とは異なって周期 Green 関数が存在するため、積分方程式を得るのは簡単であるが、一方周期 Green 関数を高速に計算するには工

夫を要する。本研究では前報<sup>(5)</sup>に引続き、周期 Green 関数の評価に Fourier 解析を用いる。更に、周期多重極法の工学的応用として、半導体の製造に用いるステップに関係する境界値問題への適用例を示す。この結果、周期多重極法は、高い実用性を有していることが示される。

### 2. 定式化

#### 2.1. Maxwell 方程式

まず、周波数域における Maxwell 方程式を示す。いま、電場を  $E$ 、磁場を  $H$  とし、誘電率を  $\epsilon$ 、透磁率を  $\mu$  とする。また、角周波数を  $\omega$  とする。この時、Maxwell 方程式は次のように表される。

$$\nabla \times H = -i\omega\epsilon E \quad \text{in } D \in \mathbb{R}^3 \quad (1)$$

$$\nabla \times E = i\omega\mu H \quad \text{in } D \in \mathbb{R}^3 \quad (2)$$

次に、異なる媒質間の境界条件を示す。いま、Fig. 1 で示すように、領域  $D_1$  と  $D_2$  が境界  $C$  を介して接しているとする。このとき、境界を流れる表面電流が 0 であると仮定すると、次の境界条件が成り立つことがわかる。

$$\hat{n} \times H^1 - \hat{n} \times H^2 = 0 \quad \text{on } C \quad (3)$$

$$\hat{n} \times E^1 - \hat{n} \times E^2 = 0 \quad \text{on } C \quad (4)$$

ここに、 $H^i$ 、 $E^i$  はそれぞれ領域  $i$  の磁場、電場の境界値であり、 $\hat{n}$  は  $C$  上の法線ベクトルである。

本研究では、2次元問題を考え、TM wave、TE wave<sup>(6)</sup>の2通りを扱う。

$$\text{TM wave} \quad H_3 \neq 0, H_1 = H_2 = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial x_3} = \frac{\partial H}{\partial x_3} = 0 \quad (5)$$

$$\text{TE wave} \quad E_3 \neq 0, E_1 = E_2 = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial x_3} = \frac{\partial H}{\partial x_3} = 0 \quad (6)$$

ここに、 $E_i$ 、 $H_i$ はそれぞれ、電場、磁場の $i$ 成分を表す。

TM waveの場合、式(1)、(2)、(5)から、 $H_3$ は次の2次元 Helmholtz 方程式を満たすことが分かる。

$$\Delta H_3 + k^2 H_3 = 0 \quad \text{in } D \in \mathbb{R}^2 \quad (7)$$

ここに、 $k = \omega\sqrt{\epsilon\mu}$ である。次に、異なる媒質間の境界条件を示す。いま、領域 $D^i$ の誘電率、透磁率をそれぞれ $\epsilon^i$ 、 $\mu^i$ と書くことにする。すると、式(1)、(3)、(4)から、領域 $D^1$ と $D^2$ の境界 $C$ において、以下の境界条件が成り立つ。

$$H_3^1 = H_3^2 \quad \text{on } C \quad (8)$$

$$\frac{1}{\epsilon^1} \left( \frac{\partial H_3}{\partial n} \right)^1 = -\frac{1}{\epsilon^2} \left( \frac{\partial H_3}{\partial n} \right)^2 \quad \text{on } C \quad (9)$$

ここに、 $\left( \frac{\partial H_3}{\partial n} \right)^i$ は $C$ における、領域 $i$ からの $H_3$ の法線微分の極限值である。

TE waveの場合も、 $E_3$ は以下の2次元 Helmholtz 方程式を満たす。

$$\Delta E_3 + k^2 E_3 = 0 \quad \text{in } D \in \mathbb{R}^2 \quad (10)$$

また、領域 $D^1$ と $D^2$ の境界 $C$ において、以下の境界条件が成り立つ。

$$E_3^1 = E_3^2 \quad \text{on } C \quad (11)$$

$$\left( \frac{\partial E_3}{\partial n} \right)^1 = -\left( \frac{\partial E_3}{\partial n} \right)^2 \quad \text{on } C \quad (12)$$

ここに、 $\left( \frac{\partial E_3}{\partial n} \right)^i$ は $C$ における、領域 $i$ からの $E_3$ の法線微分の極限值である。

なお、本研究では $\mu = 1$ 、 $\omega = 2\pi$ として固定する。

## 2.2. 周期境界条件

本研究で取り扱う問題の概念図を、Fig. 2に示す。異種の誘電体からなる構造体に、入射波が角度 $\phi$ をもって入射する。本研究では、入射波として次の平面波を考える。

$$u^I(\mathbf{x}) = e^{ik\mathbf{v}\cdot\mathbf{x}} \quad (13)$$

ここに、 $\mathbf{v} = (\sin\phi, -\cos\phi)$ である。さらに、 $x = \pm L/2$ において、周期境界条件を課す。周期境界値条件は以下のよう

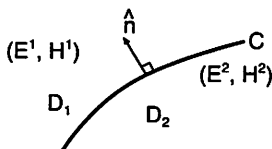


Fig. 1 Boundary of two domains

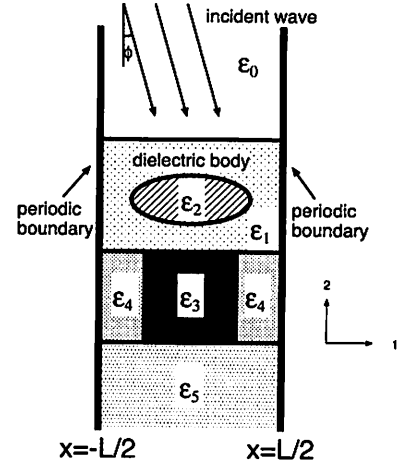


Fig. 2 BVP under consideration

に表される。

$$u(L/2, *) = e^{i\beta} u(-L/2, *) \quad (14)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_1}(L/2, *) = e^{i\beta} \frac{\partial u}{\partial x_1}(-L/2, *) \quad (15)$$

ここに、 $u$ は $H_3$ あるいは $E_3$ のいずれかである。また、 $*$ は任意の実数を表す。 $\beta$ は入射角 $\phi$ と以下の関係を満たす。

$$\beta = Lk \sin\phi \quad (16)$$

## 3. 周期境界値問題における多重極法

本節では周期境界値問題における多重極法について概説する。詳細は大谷・西村<sup>(5)</sup>を参照されたい。ただし、本論文ではクラックでない通常の境界値問題を扱い、実部が負の誘電率や、複素数の波数を許容する点で大谷・西村<sup>(5)</sup>の解析と異なっている。

周期境界値問題のGreen関数を $G^p$ とすると、領域毎に次のような境界積分方程式が得られる。

$$\frac{u(\mathbf{x})}{2} = u^I(\mathbf{x}) + \int_C G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u}{\partial n_y}(\mathbf{y}) dS_y - \int_C \frac{\partial G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u(\mathbf{y}) dS_y \quad (17)$$

ここに $C$ は周期境界以外の領域界面である。内部領域では入射波 $u^I$ の項はない。Green関数 $G^p$ は次のように求められる。

$$G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\beta n} G(\mathbf{x} - \mathbf{y} - nLe_1) \quad (18)$$

ただし、 $e_1 = (1, 0)$ であり、 $G$ は2次元 Helmholtz 方程式の基本解である。Fourier 解析により次のような $G^p$ の積分表現を得る。

$$G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{n=-a+1}^{a-1} G(\mathbf{x} - \mathbf{y} - nLe_1) + \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{e^{ia\beta + i(x_2 - y_2)\xi - (y_1 - x_1 + a)\sqrt{\xi^2 - k^2 L^2}}}{2\sqrt{\xi^2 - k^2 L^2}(1 - e^{i\beta - \sqrt{\xi^2 - k^2 L^2}})} + \frac{e^{-ia\beta + i(x_2 - y_2)\xi - (x_1 - y_1 + a)\sqrt{\xi^2 - k^2 L^2}}}{2\sqrt{\xi^2 - k^2 L^2}(1 - e^{-i\beta - \sqrt{\xi^2 - k^2 L^2}})} \right) d\xi \quad (19)$$

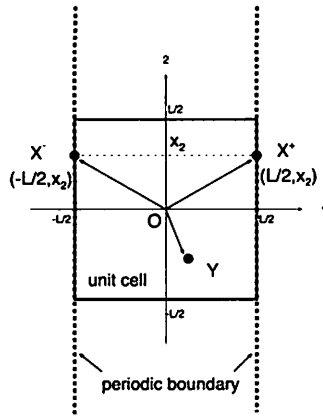


Fig. 3 Verification of the periodicity of  $G^P$

ここに、 $a$  は任意の自然数である。

### 3.1. 周期多重極法

周期多重極法においては、 $(\pm L/2, \pm L/2)$  を頂点とする正方形領域を繰り返し単位すなわちユニットセルとし、これを多重極法の level 0 のセルとする。

そして、周期境界値問題における Green 関数  $G^P$  をユニットセルの近傍からの影響を表す  $G^N$  と、ユニットセルの遠方からの影響を表す  $G^F$  に分けて考える。 $G^N$  はユニットセル自身とユニットセルに隣接するレプリカセルからの影響に対応し、 $G^F$  は、ユニットセルに隣接しないレプリカセルからの影響に対応する。

$G^N$  に関しては従来の多重極法をそのまま適用することが可能である。 $G^F$  の影響については多重極展開で評価し、具体的にはレベル 0 のセルの局所展開の係数として表現する。

レベル 0 のセルの局所展開の係数はレベル 0 のセルの多重極モーメントと M2L 公式で結ばれるが、その変換係数はいわゆる格子和を含んでいる。Helmholtz 方程式の格子和は収束が悪く、その計算は古くから取り組まれたテーマである。その評価法には種々の選択肢があるが、ここでは Fourier 積分表示を数値積分する方法を採用した。詳細は大谷・西村<sup>(5)</sup>を参照されたい。

なお、複素数の波数や負の誘電率に対応するためには Bessel 関数などのルーチンで複素数の引数を許容するものを使用しなければならない。

## 4. 数値解析

### 4.1. 周期 Green 関数の周期性の検証

実際のモデルを扱う数値解析に先立ち、周期 Green 関数  $G^P$  の周期性が数値的にどの程度満たされているかの検証を行った。

いま、Fig. 3 で示されるようなユニットセルを考え、その内部にソース点  $y$  と、観測点  $x^+$ 、 $x^-$  を取る。ソース点は下に示すような  $N_y$  通りの座標を取るものとし、

$$y = \left( \frac{L(1-\delta)i}{2(N_y-1)}, \frac{L(1-\delta)j}{2(N_y-1)} \right) \quad (20)$$

$$0 \leq i, j \leq N_y - 1 \quad (21)$$

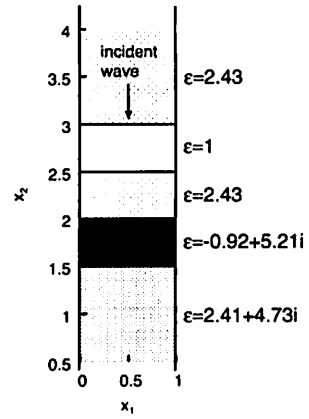


Fig. 4 Laminated dielectric bodies

その各々に対し、次のような  $N_x$  組の観測点を取る。

$$x^\pm = \left( \pm \frac{L}{2}, \frac{i}{L(N_x-1)} - \frac{L}{2} \right) \quad (22)$$

$$0 \leq i \leq N_x - 1 \quad (23)$$

そして、それら全ての観測点、ソース点の組み合わせについて相対誤差を計算し、それら全ての相対誤差の最大値を求めた。なお、相対誤差は

$$\frac{|G^P(x^+ - y) - e^{i\beta} G^P(x^- - y)|}{|G^P(x^- - y)|} \quad (24)$$

によって定義した。

本解析では  $N_x = 30$ 、 $N_y = 5$ 、 $\delta = 10^{-6}$  とし、後出の数値解析で用いる全ての  $L$ 、 $\epsilon$ 、 $\beta$  に対し誤差の計算を行った。その結果、いずれの場合においても相対誤差の最大値は  $10^{-7}$  以下であった。

### 4.2. 誘電体積層モデルにおける解析解との比較

Fig. 4 で示されるような積層誘電体に TM wave が垂直に入射するモデルの解析を行った。この問題では解析解を容易に求めることができるため、数値解を解析解と比較し精度の検証を行った。

数値解析の概要を示す。入射波は  $u^i = e^{-ik_y y}$  であり、垂直入射であるから、 $\beta = 0$  である。また、繰り返し周期を  $L = 0.99$  とした。境界要素数は、境界 1 本当たり  $N$  点とし、内点は  $0 \leq x_1 \leq L$ 、 $1.5 \leq x_2 \leq 4$  の領域に等間隔に  $20 \times 70$  点配置した。数値解の誤差は次式で定義した。

$$\text{error} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_i} |u^{\text{ref}}(x_i) - u^{\text{num}}(x_i)|^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_i} |u^{\text{ref}}(x_i)|^2}} \quad (25)$$

ここに、 $N_i$  は内点の総数 ( $20 \times 70$ ) であり、 $x_i$  は内点の座標である。また、 $u^{\text{ref}}$  は解析解、 $u^{\text{num}}$  は数値解である。

Fig. 5 に、 $N$  に対する数値解の誤差を示す。両対数グラフ上で、誤差は  $N$  に対して線形に減少していることが分かる。

### 4.3. マスクモデルの解析

本節では、本研究の目的である工学的な問題への周期多重極法の適用性を検討する。扱うモデルとして、半導体リソグラフィ<sup>(7)</sup>において用いられるステップのマスクのモデルの解

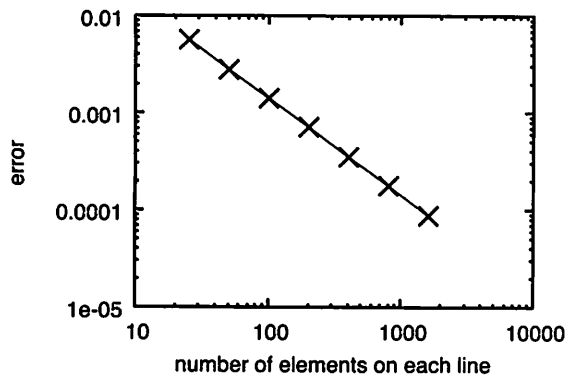


Fig. 5 Error of the numerical solutions

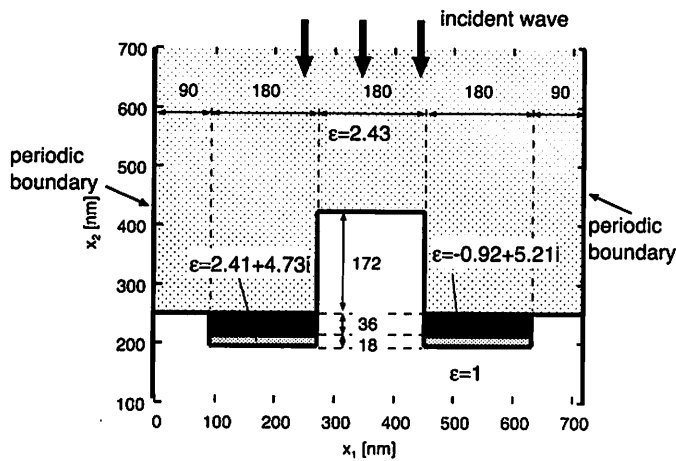


Fig. 6 Mask model

析を扱う。モデルの詳細を Fig. 6 に示す。このモデルは、シリコン基盤にパターンを描く状況をシミュレートしており、クロム製のマスクの開口部を通過した光によってパターンが描かれる。メモリのような同一の構造が繰り返す場合には、周期境界値問題としての定式化を行うことが現実的である。

このモデルに入射波 (TM、TE) が垂直に入射する問題を解析した。入射波の波長は 193nm である。

一般に、実部が負の誘電率を持つ散乱体に TM wave が入射する問題は、TE wave が入射する問題に比べ、解の勾配が局所的に大きくなるなど、解の性質が悪いことが知られている。また、実部が負の誘電率を持つ散乱体に TM wave が入射すると、散乱体表面には表面プラズモン<sup>(6)</sup>と呼ばれる表面波が生じることがあるが、これは TE wave の場合には見られない現象である。このように、TM wave、TE wave の両問題は互いに性質が異なるため、本研究ではこれら両方の解析を行った。

実際の解析においては、入射波が存在する層の誘電率を 1、入射波の波長を 1 と正規化して計算している。TM wave の場合の  $|E|^2$ 、 $|H|^2$ 、ならびに Poynting ベクトルの絶対値を Fig. 7、8、9 に示す。また、TE wave の場合の  $|E|^2$ 、 $|H|^2$ 、ならびに Poynting ベクトルの実部の絶対値を Fig. 10、11、

12 に示す。ここに、Poynting ベクトルは電磁波のエネルギー伝播を表しており、周波数域においては  $\frac{1}{2}\Re(\mathbf{E} \times \mathbf{H})$  で計算される。なお、図示されている  $|E|^2$ 、 $|H|^2$ 、Poynting ベクトルは、入射波が存在する層の誘電率を 1 と正規化して求めたものである。

図 7-12 から TE wave の場合と TM wave の場合を比較すると、TE wave の場合にはマスク下面、横面の輪郭がはっきりしないのに対し、TM wave の場合ではマスクの輪郭が鮮明である。このように、TE wave の場合と TM wave の場合では、解の挙動が異なっている。

本モデルの境界要素数は 3582 であり、内点は  $0 \leq x_1 \leq 720$ 、 $140 \leq x_2 \leq 700$  の領域に等間隔に  $360 \times 360$  点配置した。境界要素の長さは、波長のおよそ 1/100 である。

数値解析は京都大学学術情報メディアセンターの HPC2500 にて 8cpu で行った。計算時間、反復解法 GMRES の反復回数は Table 1 の通りである。なお、反復解法の前処理は point jacobi 法である。TM wave の反復回数は TE wave の約 2.5 倍であり、先に述べたような TM wave 問題の性質の悪さが係数行列の性質に悪影響を与えていると考えられる。

Table 1 Computation time and the number of iterations

| type | 積分方程式<br>求解時間 | 内点<br>計算時間 | GMRES<br>反復回数 |
|------|---------------|------------|---------------|
| TM   | 35s           | 74s        | 178 回         |
| TE   | 18s           | 75s        | 71 回          |

次に、TE wave の場合において、周期多重極法による数値解を FDTD 法 (Finite Difference Time Domain Method) による数値解と比較する。 $y = 140$  を観測線とし、この上で周期多重極法によって得られた  $|E|^2$  と FDTD 法によって得られた  $|E|^2$  を比較したのが Fig. 13 である。図より、これらの結果は良く一致することがわかり、多重極法の有効性が結論される。

## 5. 結言

本研究では周期境界値問題における高速多重極法 (periodic FMM) の工学的応用の試みとして、Helmholtz 方程式における 2 次元 1 周期問題を取り上げ、半導体の製造に用いるステップに関係する境界値問題への適用例を示すことができた。

今後の課題として、3D の Maxwell 方程式における定式化や、さらなる実問題への適用を検討している。

## 謝辞

京都大学情報学研究科複雑系基礎論分野の池田健二氏にはメッシュ作成を担当して頂いた。ここに謝意を表す。

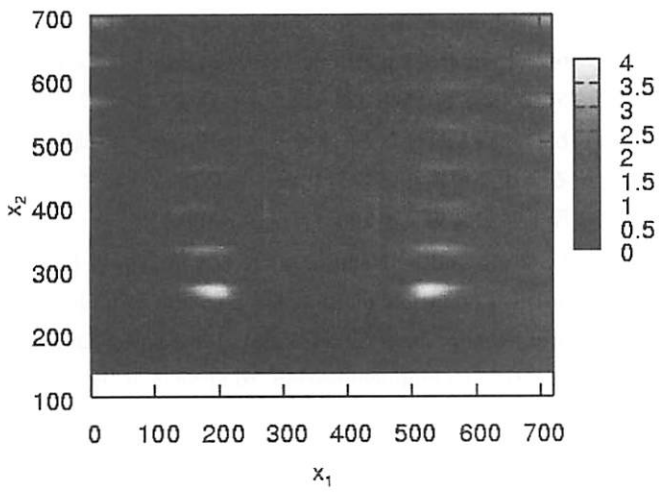


Fig. 7  $|E|^2$  (TM wave)

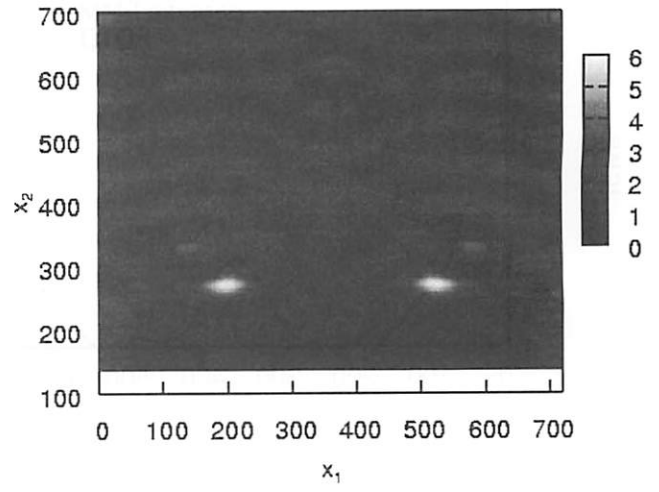


Fig. 10  $|E|^2$  (TE wave)

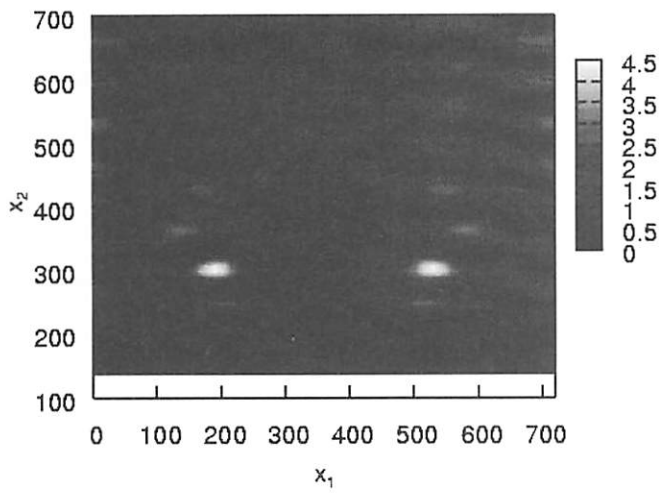


Fig. 8  $|H|^2$  (TM wave)

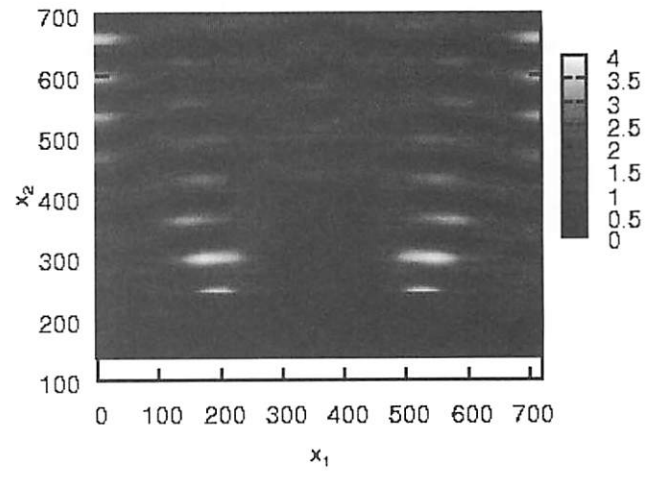


Fig. 11  $|H|^2$  (TE wave)

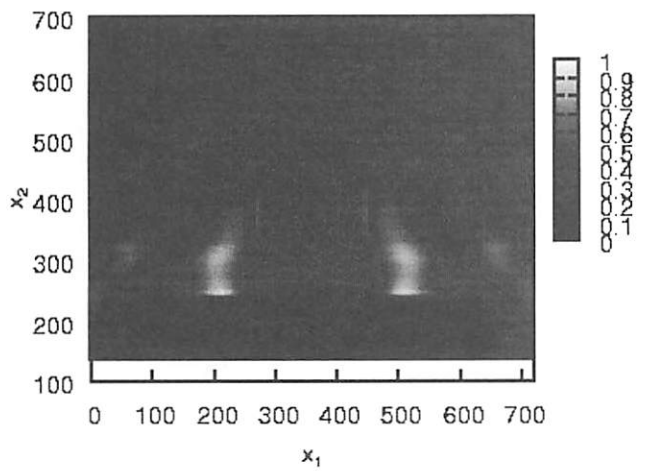


Fig. 9 Poynting vector (TM wave)

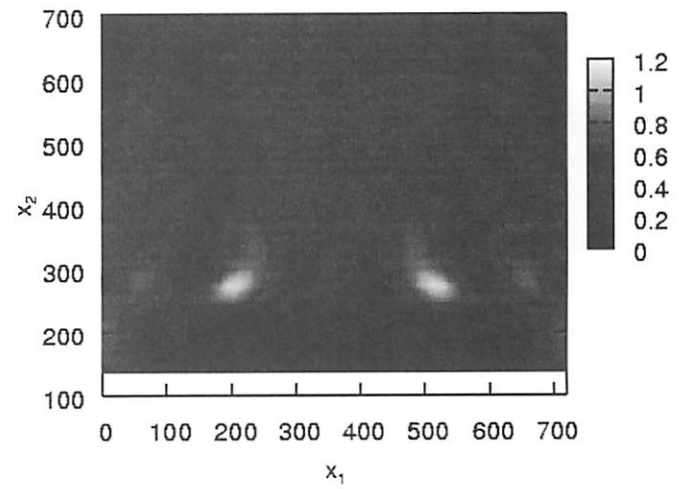


Fig. 12 Poynting vector (TE wave)

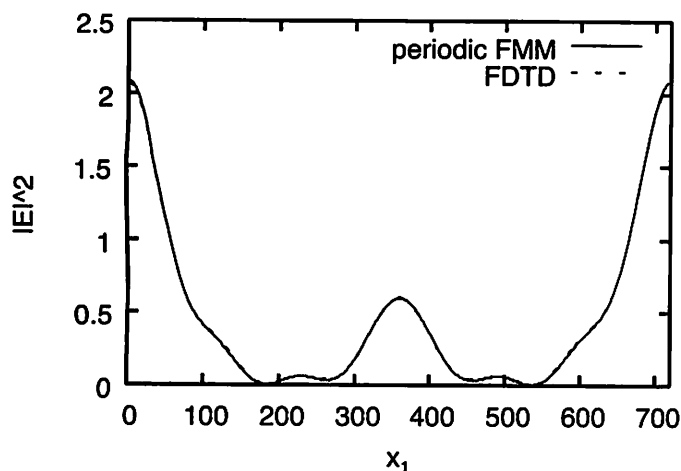


Fig. 13  $|E|^2$  obtained with periodic FMM and FDTD (TE wave)

参考文献

(1) L. Greengard and V. Rokhlin: A fast algorithm for particle simulations, *Journal of Computational Physics*,

73(1987), pp.325-348.

(2) N. Nishimura: Fast multipole accelerated boundary integral equation methods, *Applied Mechanics Reviews*, 55(2002), pp.299-324.

(3) 松村知樹・西村直志: クラックの周期境界値問題における高速多重極法と均質化法への応用について、*計算数理工学論文集*、4(2004)、pp.95-100.

(4) Y. Otani and N. Nishimura: A fast multipole boundary integral equation method for periodic boundary value problems in three dimensional elastostatics and its application to homogenisation, to appear in *International Journal for Multiscale Computational Engineering*

(5) 大谷佳広, 西村直志: 2次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題における高速多重極境界要素法, *応用力学論文集 9* (2006), pp.261-271.

(6) W. C. Chew : *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*, (1995), IEEE Press, New York.

(7) 岡崎信次・鈴木章義・上野巧: はじめての半導体リソグラフィ技術, (2004), 工業調査会.