

微扰法在衍射光栅分析中的应用

范丽晶, 陈树强, 燕宇杰, 马 磊

(电子科技大学物理电子学院, 四川成都 610054)

摘 要: 在微电子结构中常见的二维衍射光栅的分析中, 严格耦合波分析法(Rigorous Coupled Wave Analysis, RCWA)方法计算耗时, 占用内存比较大. 本文将微扰法与 RCWA 相结合的算法应用于二维衍射光栅分析中, 以提高其计算效率. 求解非矩形光栅问题时, 需将光栅做阶梯近似. 通过 RCWA 求解参考层的本征值, 其余层的本征值可通过微扰法得到. 实验表明, 微扰法满足计算精度要求, 且计算效率也能得到提高. 对于本文中的例子, 当光栅的截断阶数选为 12 时, 计算时间可以节省 45%.

关键词: 光栅; 微扰法; 衍射; RCWA

中图分类号: O438.2

文献标识码: A

文章编号: 0372-2112 (2016)09-2046-05

电子学报 URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.3969/j.issn.0372-2112.2016.09.003

Application of Perturbation Method in the Analysis of Diffraction Gratings

FAN Li-jing, CHEN Shu-qiang, YAN Yu-jie, MA Lei

(School of Physical Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu, Sichuan 610054, China)

Abstract: In the analysis of two-dimension diffraction gratings, rigorous coupled wave analysis (RCWA) takes a long time and a large computer memory. The perturbation method (PM) is combined with RCWA to enhance its computational speed for the analysis of two-dimension structures. In the analysis of the non-rectangular gratings, the grating is approximated by a stack of lamellar gratings. We obtain the eigenvalues of the reference layers by RCWA firstly, and then get the eigenvalues of the rest layers by PM. It shows that PM can shorten the calculation efficiency at the basis of achieving the calculation accuracy. For the simulation example, when the truncation order is 12, the calculation time saves 45%.

Key words: gratings; perturbation method; diffraction; RCWA

1 引言

在半导体测量技术中, 散射度量术是比较常用的方法之一. 散射度量术的诞生可以追溯到 1978 年, Kleinknecht 和 Meier 提出可以通过测量夫琅禾费衍射来测量线宽^[1]. 散射度量术是光学关键尺寸 (Optical Critical Dimension, OCD) 测量技术中一个很重要的应用. 而严格耦合波分析法 (Rigorous Coupled Wave Analysis, RCWA) 是散射度量术中最常用的方法之一. RCWA 是 20 世纪 80 年代最先提出来, 并在 1995 年被 M. G. Moharam 和 Gaylord 等进一步推广为较稳定的算法^[2]. 最先用于分析一维矩形光栅结构, 后来 M. G. Moharam 又通过增强透射矩阵的使用^[3], 将 RCWA 用于分析多

层衍射光栅结构. 后又被广泛应用于分析二维光栅结构. 但是 RCWA 也存在一定问题, 尤其是在二维光栅的分析中, 占用的内存比较大, 且计算效率很低.

Kofi Edee 等人于 2010 年提出可将微扰算法与 RCWA 相结合来提高一维光栅的计算效率^[4]. 2011 年 Kofi 又将微扰法和 S 矩阵法^[5]相结合得到了更加精确的微扰矩阵表示方法. 本文首次将这种改进的 RCWA 方法应用于二维光栅的分析中. 在二维光栅的分析中, 由于需要计算的矩阵维数巨大. 尤其是在二维非矩形光栅的计算中, 需要将光栅分成若干小层来计算, 这就需要耗费更多的时间和内存. 本文将微扰法应用于二维光栅分析中, 使得算法在达到计算精度要求的前提下, 起到节省时间的目的. 这在二维光栅的分析中是非常有

意义的. 本文主要将微扰法应用于 OCD 的模拟计算中, 但是该方法不应仅局限于 OCD 技术的应用. 还可应用于其他周期性结构的分析中, 尤其是对于实时性要求较高的应用, 该方法是很有应用价值的.

2 二维 RCWA 简介

2.1 入射波

如图 1 所示, 图形为二维矩形光栅的基本结构, 坐标轴方向的选取如图 1 所示. 假设 MM 和 NN 分别代表 x 方向和 y 方向的截断阶数, 令 $M = 2 * MM + 1, N = 2 * NN + 1$.

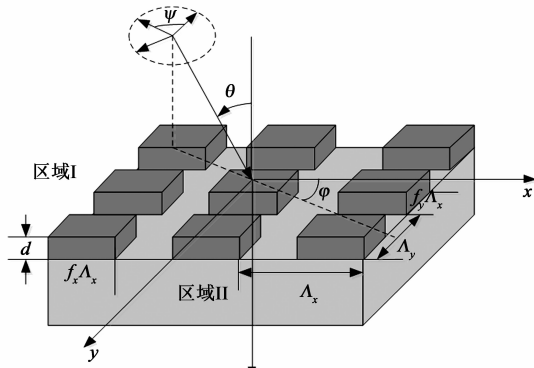


图1 二维矩形光栅的几何图形

当 $\varphi = 0^\circ$ 时, 电场矢量为:

$$\mathbf{E}_{\text{inc}} = \mathbf{u} \exp(-j\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) = \mathbf{u} \exp[-jk_0 n_i (\sin\theta \cdot x + \cos\theta \cdot z)] \quad (1)$$

其中, $\psi = 0^\circ$ 和 $\psi = 90^\circ$ 分别对应 TM 偏振和 TE 偏振. 区域 I, II 的归一化电场可表示为:

$$\mathbf{E}_I = \mathbf{E}_{\text{inc}} + \sum_{m,n} \mathbf{R}_{m,n} \exp(-j\mathbf{k}_{I,mn} \cdot \mathbf{r}) \quad (2)$$

$$\mathbf{E}_{II} = \sum_{m,n} \mathbf{T}_{m,n} \exp[-j\mathbf{k}_{II,mn} (\mathbf{r} - \mathbf{d})] \quad (3)$$

在光栅区, 电场和磁场的 x 和 y 分量可以被写为:

$$\begin{aligned} E_x \mathbf{e}_x + E_y \mathbf{e}_y &= \sum_{m,n} [S_{x,mn}(z) \mathbf{e}_x + S_{y,mn}(z) \mathbf{e}_y] \\ &\cdot \exp(-j\boldsymbol{\sigma}_{mn} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} H_x \mathbf{e}_x + H_y \mathbf{e}_y &= -j \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{m,n} [U_{x,mn}(z) \mathbf{e}_x + U_{y,mn}(z) \mathbf{e}_y] \\ &\cdot \exp(-j\boldsymbol{\sigma}_{mn} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (5)$$

2.2 矩阵方程

在光栅区, 光栅的相对介电常数函数和相对反介电常数函数可以写为:

$$\epsilon(x, y) = \sum_{g,h} \epsilon_{gh} \exp[j(gK_x x + hK_y y)] \quad (6)$$

$$\epsilon(x, y)^{-1} = \sum_{g,h} a_{gh} \exp[j(gK_x x + hK_y y)] \quad (7)$$

将麦克斯韦方程展开后, 消去 z 分量. 又根据式 (4), 式 (5), 最后可将方程写为矩阵形式:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z'} \begin{pmatrix} S_y \\ S_x \\ U_y \\ U_x \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y \mathbf{E}_{\text{inv}} \mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y \mathbf{E}_{\text{inv}} \mathbf{K}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x \mathbf{E}_{\text{inv}} \mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x \mathbf{E}_{\text{inv}} \mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x \mathbf{K}_y & \mathbf{E} - \mathbf{K}_y^2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E} & -\mathbf{K}_x \mathbf{K}_y & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} S_y \\ S_x \\ U_y \\ U_x \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

其中, $z' = z/k_0, \mathbf{K}_x$ 和 \mathbf{K}_y 为对角矩阵, 为提高收敛速度, 可将式 (8) 写为:

$$\frac{\partial}{\partial z'} \begin{pmatrix} S_y \\ S_x \\ U_y \\ U_x \end{pmatrix} = \mathbf{B}_A \cdot \begin{pmatrix} S_y \\ S_x \\ U_y \\ U_x \end{pmatrix} \quad (9)$$

其中,

$$\mathbf{B}_A = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_2 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \alpha = \frac{f_y \Lambda_y}{f_x \Lambda_x + f_y \Lambda_y}$$

本征值方程可以写为:

$$\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2 \cdot \mathbf{W} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{Q} \quad (10)$$

2.3 衍射效率

将 $z = 0$ 和 $z = d$ 处的边界条件写为矩阵形式可得:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 \\ \mathbf{D}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -j\mathbf{Z}_I \end{pmatrix} \mathbf{R}_I = \begin{pmatrix} \mathbf{W} & \mathbf{WX} \\ \mathbf{V} & -\mathbf{VX} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}^+ \\ \mathbf{C}^- \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{WX} & \mathbf{W} \\ \mathbf{VX} & -\mathbf{V} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}^+ \\ \mathbf{C}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ \mathbf{Z}_{II} \end{pmatrix} \mathbf{T}_I$$

其中 \mathbf{X} 矩阵为对角元素为 $\exp(-k_0 q_i d)$ 的 $2MN * 2MN$ 阶的对角矩阵, 又令:

$$\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{1E} \\ \mathbf{D}_{1M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\psi \delta_{m0} \delta_{n0} \\ \cos\psi \cos\theta \delta_{m0} \delta_{n0} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}_2 = \begin{pmatrix} -j\mathbf{D}_{2E} \\ j\mathbf{D}_{2M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -jn_l \cos\psi \delta_{m0} \delta_{n0} \\ jn_l \sin\psi \cos\theta \delta_{m0} \delta_{n0} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}_I = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_y \\ \mathbf{R}_x \end{pmatrix}, \mathbf{T}_I = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_y \\ \mathbf{T}_x \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{Z}_I = \begin{pmatrix} -\mathbf{X}_{yI} & -\mathbf{X}_{xI} \\ \mathbf{Y}_I & \mathbf{X}_{yI} \end{pmatrix}, \mathbf{Z}_{II} = \begin{pmatrix} -\mathbf{X}_{yII} & -\mathbf{X}_{xII} \\ \mathbf{Y}_{II} & \mathbf{X}_{yII} \end{pmatrix}$$

$\mathbf{X}_{yII}, \mathbf{X}_{xII}$ 和 \mathbf{Y}_{II} 均为对角矩阵, 矩阵维数为 $2MN * 2MN$ 阶. 最终得到光栅衍射效率为:

$$\mathbf{C}_1^+ = (\mathbf{g}_1 + j\mathbf{Z}_I \mathbf{f}_1)^{-1} (\mathbf{D}_2 + j\mathbf{Z}_I \mathbf{D}_1) \quad (11)$$

$$\mathbf{R}_I = \mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{C}_1^+ - \mathbf{D}_1 \quad (12)$$

由以上的理论分析可知, 二维光栅的研究方法与一维类似, 但是矩阵的维数却增加到 $2MN * 2MN$ ^[6,7]. 在运用 RCWA 来求解二维非矩形光栅的衍射效率时,

需要将光栅简化为阶梯近似进行求解,会更加耗时. 本文提到的方法可避免多次求解特征值和特征向量,从而提高计算效率.

3 微扰法简介

3.1 本征问题简化

对于一维梯形结构的光栅结构,光栅表面可简化为阶梯近似. 考虑光栅结构中的任意一层,代表电磁场的函数 $F(x, y)$ 满足二阶微分方程:

$$\hat{L} \cdot F(x, y) = -\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} F(x, y) \quad (13)$$

其中 $F(x, y)$ 代表电场强度 E_z 和磁场强度 H_z , \hat{L} 代表算符. \hat{L} 在不同的极化状态下,代表不同的含义:

$$\text{TE: } \hat{L} = \frac{1}{k^2} \partial_x^2 + v^2(x) \quad (14a)$$

$$\text{TM: } \hat{L} = \frac{1}{k^2} v^2(x) \partial_x \frac{1}{v^2(x)} \partial_x + v^2(x) \quad (14b)$$

运用分离变量法,将 $F(x, y)$ 表示为:

$$F(x, y) = \psi(x) e^{\pm iky} \quad (15)$$

其中, $\psi(x)$ 为算符 \hat{L} 的本征函数,满足:

$$\hat{L}\psi(x) = r^2\psi(x) \quad (16)$$

$F(x, y)$ 可用本征矢量 $\psi(x)$ 表示成有限项的和^[4]:

$$F(x, y) = \sum_{m=1}^{m=2N+1} (A_m e^{ikr_x z} + B_m e^{-ikr_x z}) \psi_m(x) \quad (17)$$

3.2 微扰

假设式(16)中的本征值和本征函数已得到精确求解,上标(0)表示精确求解得到的参考层的值. 则

$$\hat{L}^{(0)} \psi_p^{(0)}(x) = \lambda_p^{(0)} \psi_p^{(0)}(x) \quad (18)$$

对于任意本征值用下角标 p 来标记. 对于任意层,假设折射率函数 $v(x)$ 和参考层的折射率 $v^{(0)}(x)$ 差别很小. 由此 \hat{L} 算符可以表示为 $\hat{L}^{(0)}$ 与一个修正项的叠加,修正项也即微扰项:

$$\hat{L} - \hat{L}^{(0)} = \hat{P}' = \zeta \hat{P}, \zeta \ll 1 \quad (19)$$

其中, ζ 是一个很小的实参数. \hat{P}' 算符是已知的. 将本征值 λ_p 和本征函数 ψ_p 展开成参数 ζ 的幂级数:

$$\lambda_p = \sum_n \zeta^n \lambda_p^{(n)}, \psi_p = \sum_n \zeta^n \psi_p^{(n)} \quad (20)$$

为求出微扰修正项,将式(20)代入式(16)中,可得:

$$(\hat{L}^{(0)} + \zeta \hat{P}') \sum_n \zeta^n \psi_p^{(n)} = \sum_{m,n} \zeta^{m+n} \lambda_p^{(m+n)} \psi_p^{(m+n)}$$

由等式两边 ζ 同次幂的系数相等,可得:

$$\hat{L}^{(0)} \psi_p^{(0)} = \lambda_p^{(0)} \psi_p^{(0)} \quad (21a)$$

$$\hat{L}^{(0)} \psi_p^{(1)} + \hat{P}' \psi_p^{(0)} = \lambda_p^{(0)} \psi_p^{(1)} + \lambda_p^{(1)} \psi_p^{(0)} \quad (21b)$$

在式(21b)两端乘以 $\psi_p^{(0)*}$, 利用归一化条件,可以求得任一层的本征值和本征函数一级近似如下^[4].

$$\lambda_p = \lambda_p^{(0)} + \langle \psi_p^{(0)} | \hat{P}' \psi_p^{(0)} \rangle \quad (22a)$$

$$\psi_p = \psi_p^{(0)} + \sum_{q \neq p} \frac{\langle \psi_q^{(0)} | \hat{P}' \psi_p^{(0)} \rangle}{\lambda_p^{(0)} - \lambda_q^{(0)}} \psi_q^{(0)} \quad (22b)$$

3.3 微扰法在二维光栅中的应用

假设二维光栅是由如图2所示的光栅单元组成. 其并不是严格的长方体单元. 光栅单元的厚度为 h , 假设光栅侧面是梯形,且梯形的高度均为 d , 则 $h = d * \sin\alpha$. (图2中的分层不代表实际的分层数)

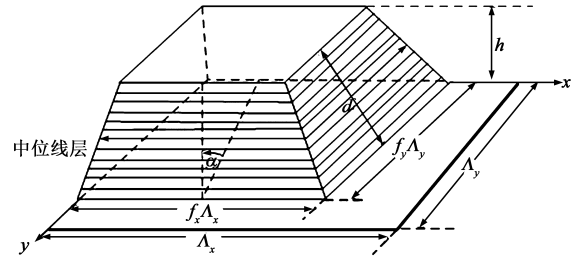


图2 二维非矩形光栅单元模型

求解衍射效率的步骤如下:(1)据二维 RCWA 方法求出指定层的本征值和本征向量,并得到由本征值的正平方根构成的对角矩阵 q_0, q_1 和本征向量矩阵 W_0, W_1 ; (2)得到微扰矩阵算符^[5] $\hat{P} = W_1 q_1 W_1^{-1} - W_0 q_0 W_0^{-1}$; (3)运用式(22)分别求得光栅中其他层的本征值和本征矢量的一级近似;(4)运用步骤(3)得到的本征值和本征矢量,根据本文第二部分的理论分析,也即式(11)和式(12)可最终求得光栅的衍射效率.

4 数值结果

用 Matlab 对于微扰法和 RCWA 法得到的结果进行仿真. Matlab 程序的具体结构图及说明如图3所示.

假设光栅区和基底材料均为 SiO_2 . 基本参数设定为:侧面梯形高度为 100nm , 二面角为 85° , x 方向和 y 方向的占空比都为 0.5 , 光栅周期为 200nm . 选取 x 方向和 y 方向的截断阶数为 3 , 入射角为 75° . 仿真得到的零级衍射效率全谱图如图4(a)所示. 其中在波长小于 300nm 时,将其放大如图4(b)所示.

从图4可以看出,在二维情况下,用微扰法得到的零级衍射效率图谱和用 RCWA 精确求解的图谱很接近. 在工程实际中,很多情况下一定程度上的误差是可以接受的.

如前所述,和一维衍射光栅相比,二维衍射光栅在维度上增加了一维. 但计算的矩阵维数增加到了 $2MN * 2MN$. 因此随着截断阶数的增加,其矩阵维数会成倍增加. 在求解衍射效率时,会非常耗时. 将微扰方法运用于二维光栅中就是希望能够节省时间. 定义函数:

$$t_\eta = 1 - \frac{t_{\text{PM}}}{t_{\text{RCWA}}}$$

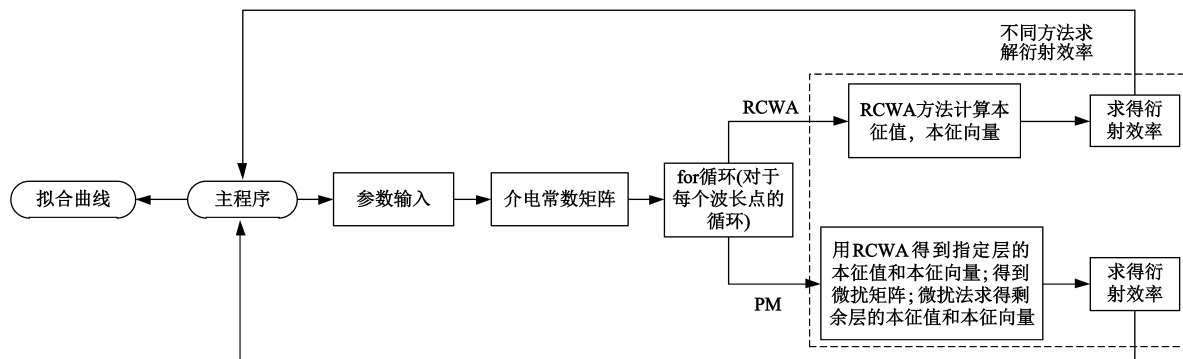


图3 Matlab程序结构及说明图

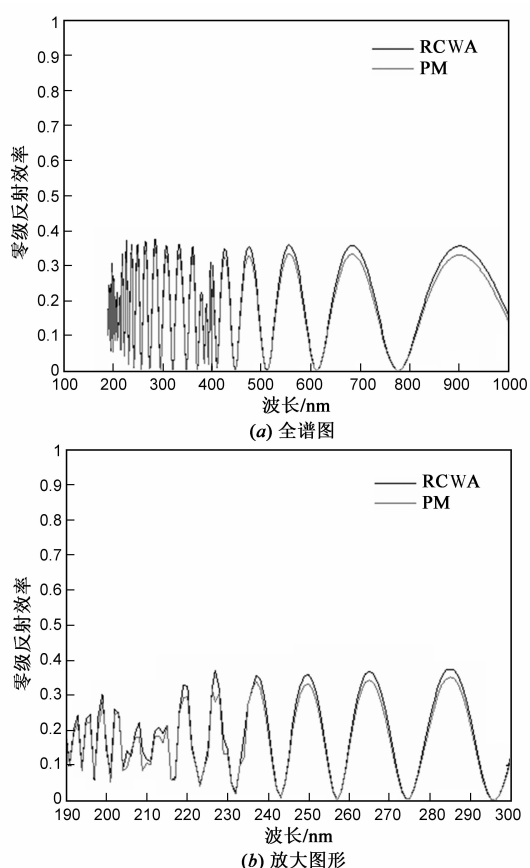


图4 零级衍射效率图

其中, t_{PM} 代表的是微扰方法的计算时间, t_{RCWA} 代表 RCWA 的计算时间, 则 t_{η} 表示的是微扰方法相比严格耦合波分析法的省时效率。

假设入射波长为 240nm, 介质的折射率为 1.5, 梯形高度为 200nm, 将光栅分为 200 层, 假设二面角角度和侧面梯形角度都为 88°。省时效率随着截断阶数的增加呈现出的结果如表 1 所示。

从表 1 中可以看出, 随着截断阶数的增加, 运用微扰法求解衍射效率的省时效率也越来越高。这一点对于节省 RCWA 的计算时间有着非常重要的意义。因为

单纯的运用 RCWA 方法来计算二维光栅的时候, 其计算过程非常耗时。而运用微扰法和 RCWA 方法相结合的方法, 因其不涉及更多的矩阵运算且公式也相对简单, 因此能有效缩短计算时间。这点当截断阶数比较大的时候体现的更加明显。

表 1 省时效率和截断阶数

MM, NN	t_{RCWA} (s)	t_{PM} (s)	t_{η}
3	12. 729068	11. 300899	11. 22%
4	44. 472316	39. 631318	10. 89%
5	139. 293781	137. 928080	0. 98%
6	385. 680612	354. 965904	7. 96%
7	1324. 779862	1007. 031882	23. 98%
8	2774. 785252	2398. 322310	13. 57%
9	5858. 788652	4036. 157665	31. 11%
10	10939. 637575	7138. 101616	34. 75%
11	20619. 636820	11728. 052852	43. 12%
12	34570. 427497	19014. 767300	45. 00%

5 结论

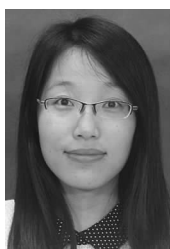
在二维光栅的分析中, 因为计算的矩阵阶数较大, 会非常耗时。本文通过微扰法和 RCWA 相结合的方法, 精确度能普遍达到。运用微扰法可以尽量避免求解更多层的本征值和本征矢量, 因此可以起到节省计算时间的目的。对于文中所提到的例子, 省时效率随着截断阶数的增大而越来越高。当选取的截断阶数为 12 时, 微扰法的计算时间可以节省 45%。随着截断阶数的增加, 省时效率还会进一步增加。

参考文献

[1] Christoter Raymond. Overview of scatterometry applications in high volume silicon manufacturing[A]. D G Seiler. Characterization and Metrology for ULSI Technology [C]. USA: AIP Publishing, 2005. 394 - 402.

- [2] M G Moharam, et al. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings[J]. Journal of Optical Society of America, 1995, 12(5): 1068 - 1076.
- [3] M G Moharam, et al. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach[J]. Journal of Optical Society of America, 1995, 12(5): 1077 - 1086.
- [4] Kofi Edee, J Plumey, G Granet, et al. Perturbation method for the rigorous coupled wave analysis of grating diffraction [J]. Optics Express, 2010, 18(25): 26274 - 26284.
- [5] Kofi Edee, et al. A scattering matrix interpolation from perturbation method; application to scatterometry for profile control[A]. Bernd Bodermann. Modeling Aspects in Optical Metrology III[C]. Munich: Proceedings of SPIE, 2011. 80830O-80830O-7.
- [6] M G Moharam. Coupled-wave analysis of two-dimensional dielectric gratings[A]. Ivan Cindrich. Holographic Optics: Design and Applications [C]. Munich: Proceedings of SPIE, 1988. 8 - 11.
- [7] Lalanne P. Improved formulation of the coupled-wave method for two-dimensional gratings[J]. Journal of Optical Society of America. 1997, 14(7): 1592 - 1598.

作者简介



范丽晶 女, 1988年2月出生于山西省平遥县. 电子科技大学硕士研究生. 主要研究方向为光通信及光信息传输与处理.
E-mail: flj1224@163.com



陈树强 男, 1960年2月出生于福建省福州市. 1992年底在电子科技大学获博士学位; 1993年初到1995年初北京邮电大学博士后; 1995年初到2000年底在北京邮电大学分别任光纤通信中心副教授、副主任、教授、主任. 2000年底应邀赴美国, 先后在位于加州 SpectraSwitch公司和加州硅谷的 N&K 技术公司任唯一的高级研究科学家, 并于2008年秋引进回电子科技大学任教授、博士生导师. 研究方向为微电子结构光学测量技术及光纤通信技术. 在国内外学术刊物及会议发表50多篇论文, 7项发明专利.
E-mail: chensq@uestc.edu.cn