

Untersuchungen zum inversen,
elektromagnetischen
Gitterbeugungsproblem mit Anwendungen
in der Gittercharakterisierung

Inauguraldissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Universität Mannheim

vorgelegt von

Dipl.-Inf. Bastian Trauter

aus Mutlangen

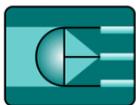
Mannheim, 2009

Dekan: Prof. Dr.-Ing. Felix Freiling, Universität Mannheim
Referent: Prof. Dr. Karl-Heinz Brenner, Universität Heidelberg
Korreferent: Prof. Dr. Wolfgang Osten, Universität Stuttgart

Tag der mündlichen Prüfung: 16.12.2008

Diese Arbeit entstand im Rahmen einer Kooperation der Universität Mannheim, Lehrstuhl für Optoelektronik und der Carl Zeiss SMT AG, Abteilung Optik Design und Simulation.

LEHRSTUHL FÜR
OPTOELEKTRONIK



UNIVERSITÄT
MANNHEIM



Zusammenfassung

In dieser Arbeit sollen das inverse, elektromagnetische Gitterbeugungsproblem und verschiedene Lösungsverfahren untersucht werden. Das inverse Problem muss einerseits bei Design- und Optimierungsproblemen betrachtet werden, kann aber andererseits auch zur Charakterisierung von Gittern aus Beugungseffizienzmessungen eingesetzt werden. Anhand von einigen Anwendungsbeispielen werden hier sowohl eindimensionale, als auch zweidimensionale Beugungsgitter betrachtet. Es wird zum einen ein iteratives Lösungsverfahren, das eine Erweiterung der RCWA ausnutzt, um die Ableitungen der Beugungseffizienz nach den Gitterparametern schneller zu berechnen, betrachtet. Außerdem wird ein Approximationsverfahren zur Lösung des inversen, elektromagnetischen Gitterbeugungsproblems eingesetzt. Am Beispiel der Gittercharakterisierung wird der Einfluss von Mess- und Modellfehlern, sowie die Eindeutigkeit des Verfahrens untersucht. Den Abschluss der Arbeit bildet eine experimentelle Untersuchung der Gittercharakterisierung mit den hier entwickelten Methoden.

In this work, the inverse electromagnetic grating diffraction problem and different solution methods are being examined. The inverse problem has to be considered on the one hand for design and optimization problems, but can otherwise be used for the characterization of diffraction gratings from diffraction efficiency measurements. By means of several examples of use, both one- and two-dimensional diffraction gratings are being considered here. On the one hand, an iterative approach, that uses an extension of the RCWA for a fast computation of the derivatives of the diffraction efficiency respect to the grating parameters, is being considered. Furthermore, an approximation method is being applied for the solution of the inverse, electromagnetic grating diffraction problem. Using grating characterization as example, the influence of measurement and model errors, as well as the uniqueness of the method is being examined. The ending forms an experimental analysis of the grating characterization with the methods developed here.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	i
1 Einleitung und Problemstellung	1
1.1 Motivation und Kontext der Arbeit	1
1.2 Gliederung der Arbeit	4
1.3 Problemstellung	5
1.3.1 Das inverse Gitterbeugungsproblem	5
1.3.2 Anwendungen für das inverse Problem	6
1.3.3 Lösungsverfahren für das inverse Problem	7
2 Vorwärtsproblem	10
2.1 Grundlagen	10
2.1.1 Elektromagnetische Theorie des Lichts	11
2.1.2 Beugung am Gitter	15
2.1.3 Skalare Beugungstheorie	20
2.1.4 Elektromagnetische Beugungstheorie	25
2.1.5 Gültigkeitsbereiche	44
2.2 Anwendungsgebiete von Beugungsgittern	47
2.2.1 Spektroskopie	47
2.2.2 Interferometrie	48
2.2.3 Chromatische Korrektur	49
2.2.4 Lithographie-Masken	51
2.2.5 Sub- λ Gitter als Entspiegelungsschicht	52
2.2.6 Diffraktiv geblazete Gitter	53
2.2.7 Zweidimensionale Gitter	56
2.3 Einfluss der Gitterstruktur	58
2.3.1 Gitterhöhe	58
2.3.2 Brechungsindex	62
2.3.3 Füllfaktor	63
2.3.4 Gitterperiode	64
2.3.5 Flankenwinkel	67
2.3.6 Füllfaktorvariation	71
3 Inverses Problem	74
3.1 Formulierung des inversen Problems	75

3.2	Iteratives Lösungsverfahren	76
3.2.1	Das Optimierungsverfahren	77
3.2.2	Analytische Berechnung der Gradienten	79
3.3	Approximation des Parameterraums	92
3.3.1	Das Approximationsverfahren	92
3.3.2	Anwendung des Verfahrens auf das inverse Gitterbeugungsproblem	95
3.3.3	Gradientenapproximation	97
3.4	Besonderheiten zweidimensionaler Gitter	103
4	Anwendungsbeispiele des inversen Gitterbeugungsproblems	105
4.1	Design und Optimierung von Beugungsgittern	105
4.1.1	Homogenisierung der Beugungseffizienz	105
4.1.2	Gitter zur Schrägbelichtung von Fotolackstrukturen	108
4.1.3	Diffraktive Polarisationsstrahlteiler	115
4.1.4	Effizienzsteigerung von Fotodetektoren	117
4.1.5	Ergebnis der Untersuchungen zu Design und Optimierung von Beugungsgittern	122
4.2	Charakterisierung von Beugungsgittern	123
4.2.1	Klassische Charakterisierungsmethoden	123
4.2.2	Inverse Charakterisierungsmethoden	127
4.2.3	Rekonstruktion durch Messung von Beugungseffizienzen	130
4.2.4	Gittercharakterisierung über Optimierungsverfahren	130
4.2.5	Profilformbestimmung mit approximierten Daten	132
4.2.6	Untersuchung der Eindeutigkeit	134
5	Experimentelle Untersuchungen zur Gittercharakterisierung	146
5.1	Messaufbau	146
5.1.1	Messung in Transmission	146
5.1.2	Messung in Reflexion	147
5.1.3	Messung mehrerer Beugungsordnungen	147
5.1.4	Experimentalaufbau	149
5.2	Numerische Simulationen zur Auswirkung von Messfehlern	155
5.2.1	Statistische Messfehler	155
5.2.2	Spektrum der Lichtquelle	159
5.2.3	Weitere Fehlerursachen	162
5.3	Rekonstruktion von 1D-Gittern	163
5.3.1	Eindimensionale Fotolackgitter	163
5.3.2	Eindimensionale Quarzgitter	168
5.4	Rekonstruktion von 2D-Gittern	171
5.4.1	Zweidimensionale Fotolackgitter	171
5.4.2	Zweidimensionale Quarzgitter	172
5.4.3	Diskussion der Messergebnisse	179

6 Zusammenfassung und Ausblick	180
Literatur	182
Abbildungsverzeichnis	193
Tabellenverzeichnis	197

1 Einleitung und Problemstellung

1.1 Motivation und Kontext der Arbeit

Mit der fortschreitenden Entwicklung der heutigen Herstellungstechnologien nimmt auch die Miniaturisierung der hergestellten Strukturen immer weiter zu. Das Schlagwort *Nano* ist in nahezu allen Forschungsdisziplinen wieder zu finden und so wird auch bereits zu Beginn dieses Jahrhunderts immer öfter vom *Nanozeitalter* gesprochen [1]. Sehr präsent ist diese Miniaturisierung vor allem im Bereich der Elektronik: Gordon Moores Gesetz [2] beschreibt seit nun mehr über 40 Jahren den fortwährenden Leistungszuwachs von Prozessoren und damit auch die zunehmende Miniaturisierung der Halbleiterstrukturen, die die fortschreitende Erhöhung der Rechenleistung des Prozessors ermöglichen. So ist es auch nicht verwunderlich, dass sich die Carl Zeiss SMT AG - Marktführer auf dem Gebiet der Objektive für Lithographiesysteme (Anlagen zur Herstellung von Mikrochips) - mit dem Slogan „Enabling the Nano-Age world“ schmückt.

Auf dem Gebiet der optischen Komponenten schreitet die Miniaturisierung ebenfalls fort, da die vorrangig für die Halbleiterindustrie entwickelten Technologien auch für die Herstellung von optischen Bauteilen eingesetzt werden können. So finden mikrooptische Komponenten, wie z.B. diffraktive Elemente, immer mehr Einzug in kommerzielle Produkte [3]. Durch die Miniaturisierung wächst das Potential diffraktiver Elemente; allerdings müssen auch die Werkzeuge zur Simulation solcher Elemente weiter entwickelt werden. Sind die Dimensionen solcher Elemente im Bereich von wenigen Wellenlängen, müssen vermehrt elektromagnetische Effekte berücksichtigt werden. So nahm die Zahl und die Verbreitung von elektromagnetischen Simulationsmethoden in den letzten Jahrzehnten immer mehr zu - zum einen auf Grund der gestiegenen Rechnerleistung, die solche Simulationen erst ermöglichte, zum anderen aber auch weil Verfahren zur genaueren Analyse der nun herstellbaren Strukturen notwendig geworden sind.

Auch wenn mit den verschiedenen Simulationsverfahren nun elektromagnetische Effekte für ein gegebenes Element berücksichtigt werden können, ist z.B. im Design von diffraktiven Elementen die umgekehrte Fragestellung viel wichtiger: Wie muss das Element aussehen, damit die gewünschte Performance erreicht wird - natürlich unter Berücksichtigung der auftretenden elektromagnetischen Effekte. Man spricht dann vom so genannten inversen Problem, also dem Weg von der gewünschten Wirkung eines Elements zur Ursache, der Geometrie des Elements. Das inverse Problem ist dabei deutlich komplexer als das Vorwärtsproblem, da keine direkten Lösungsverfahren existieren.

Zur Charakterisierung von diffraktiven Elementen können ebenfalls inverse Verfahren eingesetzt werden. Im Bereich der Halbleitertechnik ist die Scatterometrie bereits ein etabliertes Verfahren zur Prozesskontrolle [4]. Die Scatterometrie bietet alle Vorteile optischer Messverfahren, wie beispielsweise Robustheit und Zerstörungsfreiheit und dabei eine Auflösung von wenigen Nanometern. Durch den Vergleich des von den periodischen Halbleiterstrukturen gebeugten Lichts mit berechneten Daten kann die Form der Strukturen bestimmt werden, indem das inverse Problem gelöst wird. Dazu sind allerdings elektromagnetische Simulationen notwendig, um die Wechselwirkung der elektromagnetischen Lichtwelle mit den Strukturen korrekt zu modellieren. Solche Verfahren können auch zur Analyse diffraktiv optischer Elemente eingesetzt werden.

Da die Lösung des inversen, elektromagnetischen Beugungsproblems sehr rechenaufwändig ist, wird das Gebiet erst seit wenigen Jahren intensiv erforscht. Beispielsweise werden am Weierstraß-Institut in Berlin Lösungsverfahren für das inverse Gitterbeugungsproblem auf Basis von Finite-Elemente Methoden entwickelt [5, 6]. Auf dem Gebiet der Scatterometrie wurden z.B. von Raymond [7] verschiedene Verfahren zur Lösung des inversen Problems untersucht. In den meisten Fällen wurden aber nur eindimensionale Gitterstrukturen betrachtet. Zur Behandlung des inversen Problems für zweidimensionale Gitter gibt es bislang noch wenige Arbeiten, da schon das zweidimensionale Vorwärtsproblem einen erheblichen Rechen- und Speicherplatzbedarf benötigt. Erst in den letzten Jahren ermöglichte die vorhandene Rechenleistung erste Arbeiten auf dem Gebiet [8, 9]. Im Kontext dieser Arbeiten steht auch diese Dissertation, um Lösungsverfahren des inversen Problems genauer zu untersuchen.

In der vorliegenden Arbeit wurden zwei verschiedenen Lösungsansätze für das inverse, elektromagnetische Gitterbeugungsproblem untersucht. Zum einen wurde ein Approximationsverfahren auf Basis von verschobenen Basisfunktionen [10] zur Lösung des inversen Problems verwendet [11]. Diese Methode wurde nach Kenntnis des Verfassers erstmals in dieser Form eingesetzt und bietet einige Vorteile im Vergleich zur anderen Approximations- und Interpolationsverfahren. Zum anderen wurden iterative Methoden zur Lösung des inversen Problems in Form von Optimierungsalgorithmen betrachtet. Hierfür wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Verfahren von van der Aa [12, 13] weiterentwickelt, um die für die Optimierung notwendigen Gradienten direkt im RCWA-Algorithmus¹ zu berechnen [14]. Hierdurch kann die Rechenzeit des Verfahrens erheblich verkürzt werden.

Als Anwendungsbeispiel für das inverse Gitterbeugungsproblem dient in dieser Arbeit die Charakterisierung von Gittern durch die Messung von Beugungseffizienzen. Das Verfahren wurde hinsichtlich der Messgenauigkeit und der Eindeutigkeit untersucht. Mit experimentellen Untersuchungen wurde versucht das Potential der Methode aufzuzeigen.

¹Die Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA) ist das hier eingesetzte elektromagnetische Simulationsverfahren.

Es wurden ein- und zweidimensionale Beugungsgitter untersucht und die Messergebnisse mit anderen Messverfahren verglichen.

1.2 Gliederung der Arbeit

Zu Beginn der Arbeit soll zunächst die Problemstellung näher erläutert werden. Im Abschnitt 1.3 wird das inverse Gitterbeugungsproblem mit den möglichen Anwendungen und Lösungsansätzen vorgestellt. Bevor das inverse Problem betrachtet wird, soll dann zunächst das Vorwärtsproblem genauer analysiert werden. In Kapitel 2 werden zunächst die Grundlagen der elektromagnetischen Beugungstheorie betrachtet (Abschnitt 2.1). Anschließend werden einige Anwendungsgebiete von Beugungsgittern betrachtet, um die unterschiedlichen Anforderungen zu untersuchen (Abschnitt 2.2). Den Abschluss des Kapitels bildet eine Untersuchung des Einflusses verschiedener Gitterparameter auf die Beugungseffizienz und Phase (Abschnitt 2.3). Dies dient der Analyse der elektromagnetischen Effekte und der Bestimmung der sensitiven Parameter für die spätere Lösung des inversen Problems.

In Kapitel 3 wird dann das inverse Problem betrachtet. Es werden die beiden Methoden zur Lösung des Problems dargestellt. Zunächst das iterative Verfahren mit der Erweiterung der RCWA zur Berechnung der Gradienten zweidimensionaler Gitter (3.2) und anschließend die Approximation des Parameterraums durch verschobene Basisfunktionen (Abschnitt 3.3).

Das Kapitel 4 stellt dann die Anwendungsgebiete des inversen Problems dar. Zunächst werden einige Beispiele für Design- und Optimierungsprobleme vorgestellt (Abschnitt 4.1). Im zweiten Teil des Kapitels wird dann das Verfahren zur Charakterisierung von Beugungsgittern genauer beschrieben (Abschnitt 4.2). Ein Vergleich mit klassischen Messverfahren soll die Vorteile des Verfahrens darstellen, außerdem wird die Eindeutigkeit des inversen Problems untersucht.

Das letzte Kapitel (Kap. 5) behandelt die experimentellen Untersuchungen zur Gittercharakterisierung. Zunächst werden verschiedene Aufbauvarianten und die Realisierung des experimentellen Aufbaus beschrieben (Abschnitt 5.1). Anschließend folgt eine Analyse der Messgenauigkeit des Verfahrens (Abschnitt 5.2). Abschließend werden die Messergebnisse ein- und zweidimensionaler Beugungsgitter vorgestellt, die rekonstruierten Gitterparameter wurden mit anderen Messverfahren verglichen.

1.3 Problemstellung

Zunächst soll hier die Problemstellung der Arbeit erläutert werden. Dabei wird das inverse Gitterbeugungsproblem mit seinen Anwendungen und möglichen Lösungsansätzen dargestellt. Das Problem soll zunächst möglichst abstrakt betrachtet werden, die konkrete Betrachtung folgt dann später in Kapitel 3 dieser Arbeit.

1.3.1 Das inverse Gitterbeugungsproblem

Klassischerweise kennt man das Vorwärtsproblem der Gitterbeugung. Das heißt man möchte für eine gegebene Gittergeometrie die Stärke der einzelnen Beugungsordnungen, d.h. Beugungseffizienz und evtl. Phase, berechnen. Die Größen sollen beispielsweise in Abhängigkeit der Gitterperiode, Wellenlänge oder Polarisationsrichtung bestimmt werden, dies leisten elektromagnetische bzw. rigorose Berechnungsverfahren, die in Abschnitt 2.1.4.1 näher beschrieben werden.

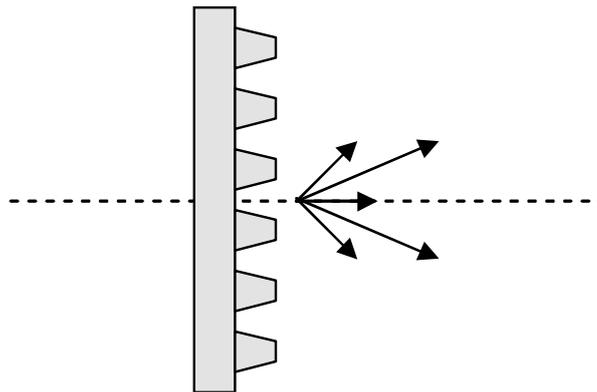


Abbildung 1.1: Klassisches Gitterbeugungsproblem

Wir betrachten hier nun das inverse Problem, d.h. wir möchten aus den Beugungsordnungen auf die Geometrie des Gitters schließen (Abb. 1.2).

Es ist augenscheinlich klar, dass dieses Problem zunächst nicht eindeutig und nicht direkt invertierbar ist, da es verschiedene Beugungsgitter geben kann, die die gleichen Beugungseffizienzen besitzen. Deswegen kommen für die Invertierung des Problems nur numerische Methoden in Frage. Außerdem muss durch eine geeignete Parametrisierung des Problems und möglichst viele Vorabinformationen der Parameterraum so weit eingeschränkt werden, dass das Problem eine eindeutige Lösung hat. Die Untersuchung der Eindeutigkeit des inversen Problems wird am Beispiel der Gittercharakterisierung in Abschnitt 4.2.6 untersucht.

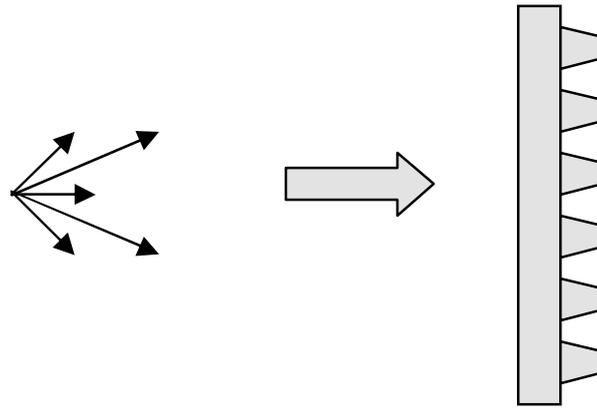


Abbildung 1.2: Inverses Gitterbeugungsproblem

Hier soll nun das inverse Gitterbeugungsproblem für ein- und zweidimensionale Beugungsgitter betrachtet werden. Als zweidimensionale Gitter werden hier Gitter bezeichnet, die in zwei Dimensionen periodisch sind (man spricht auch von gekreuzten Gittern). Insbesondere im Fall der zweidimensionalen Gitter ist zur Lösung des inversen Problems ein enormer Rechenaufwand notwendig.

1.3.2 Anwendungen für das inverse Problem

Beim inversen Gitterbeugungsproblem sucht man zu gegebenen Beugungseffizienzen die dazugehörige Gittergeometrie. Hierbei kommen im Wesentlichen zwei Anwendungen in Frage: zum einen das Design und die Optimierung von Gittern, zum anderen die Charakterisierung von Beugungsgittern bzw. diffraktiven Elementen.

1.3.2.1 Design- und Optimierung von Beugungsgittern

Eine Hauptanwendung bei der das inverse Gitterbeugungsproblem betrachtet wird, ist das Design und die Optimierung von Beugungsgittern. Gesucht wird dort ein Gitter, das bestimmte Kriterien erfüllt, wie z.B. eine bestimmte Verteilung der Intensität auf die einzelnen Beugungsordnungen. Ziel ist es nun ein Gitter zu finden, das die geforderten Kriterien möglichst gut erfüllt. Außer den Kriterien für die Beugungseffizienz des Gitters gibt es meist noch Randbedingungen für die Parameter des Gitters, z.B. aus dem zu verwendenden Herstellungsprozess. Es handelt sich also um ein klassisches Optimierungsproblem. Verschiedene Beispiele für solche Design- und Optimierungsprobleme werden im Abschnitt 4.1 betrachtet.

1.3.2.2 Charakterisierung von Beugungsgittern

Die zweite Anwendung des inversen Gitterbeugungsproblems ist die Charakterisierung von Beugungsgittern. Hier werden die Forderungen an die Beugungseffizienz des Gitters nicht vorgegeben, sondern stammen aus einer Messung. Nun sollen durch das Lösen des inversen Problems die Parameter des gemessenen Gitters bestimmt werden, so dass das Gitter auf diese Weise charakterisiert werden kann. Im Gegensatz zum oben beschriebenen Design- und Optimierungsproblem wird hier nicht nur ein Optimum gesucht, das die geforderten Bedingungen möglichst gut erfüllt, sondern idealerweise genau das Gitter, das die gemessenen Beugungseffizienzen besitzt. Die Charakterisierung von Beugungsgittern über die Lösung des inversen Problems wird in Abschnitt 4.2 genauer betrachtet. Im Kapitel 5 schließen sich dann experimentelle Untersuchungen des Verfahrens an.

1.3.3 Lösungsverfahren für das inverse Problem

Prinzipiell kommen für die Invertierung des Problems zwei verschiedene Ansätze in Betracht. Zum einen die iterative Invertierung des Problems über einen Optimierungsalgorithmus, zum anderen die Vorausberechnung der Daten für mögliche Gitterparameter. Beide Alternativen sollen nun kurz einander gegenüber gestellt werden:

1.3.3.1 Iterative Verfahren

Für die Invertierung des Gitterbeugungsproblems mit Hilfe von Optimierungsalgorithmen (siehe Abbildung 1.3) verwenden wir ein Modell, das uns zu gegebenen Parametern die zugehörigen Beugungseffizienzen liefert. Dies ist also das Vorwärtsproblem, wie oben beschrieben. Nun versuchen wir in einem iterativen Prozess die Differenz der berechneten und der gemessenen Daten zu minimieren, in dem wir die Gitter-Parameter im Modell variieren. Ist die Differenz hinreichend klein, haben wir die passenden Gitterparameter gefunden.

1.3.3.2 Vorausberechnung von Daten

Die zweite Möglichkeit der Invertierung ist das Erzeugen einer Datenbank (Abbildung 1.4). In einem ersten Schritt füllen wir eine Datenbank mit berechneten Daten - hierfür verwenden wir ebenfalls unser Modell (d.h. die Vorwärtsrechnung), um Daten für verschiedene Parameterkombinationen zu berechnen. Im zweiten Schritt können wir dann die Datenbank verwenden, um darin den Parametersatz zu suchen, der am besten zu den gemessenen Daten des unbekanntes Gitters passt. Für die Gittercharakterisierung kann man statt die Datenbank mit berechneten Daten zu füllen, auch auf Messdaten eines

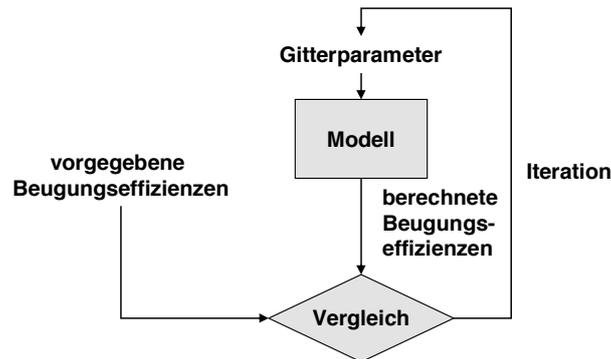


Abbildung 1.3: Invertierung des Gitterbeugungsproblems mit Hilfe von Optimierungsalgorithmen

anderen Messgeräts zurück greifen. Hierzu würde man dann beispielsweise die Gitterparameter mit AFM- oder SEM-Messungen bestimmen (vgl. 4.2.1) und dann die Daten aus den Beugungsmessungen derselben Gitter in der Datenbank ablegen. Anschließend kann man dann diese sozusagen empirisch bestimmten Daten verwenden, um die Parameter eines unbekannten Gitters zu bestimmen. Dies ist insbesondere hilfreich, wenn kein geeignetes Modell gefunden werden kann, oder wenn die Berechnung der Daten wie im Falle von zweidimensionalen Gittern sehr zeitaufwändig ist (vgl. z.B. Hatab [15]).

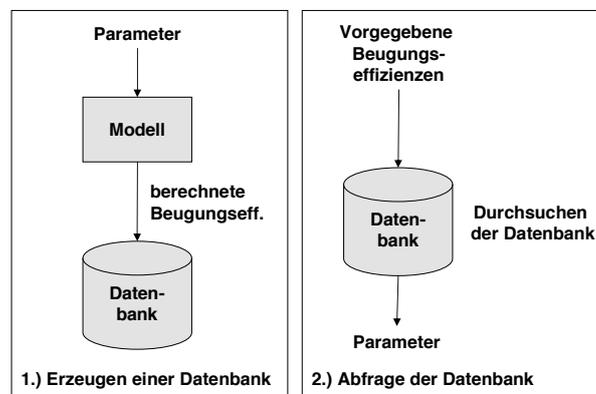


Abbildung 1.4: Invertierung des Gitterbeugungsproblems durch Vorausberechnung

1.3.3.3 Vergleich der beiden Verfahren

Die beiden betrachteten Verfahren haben Vor- und Nachteile hinsichtlich Geschwindigkeit des Verfahrens und Flexibilität. Diese sind in Tabelle 1.1 gegenüber gestellt. Je nach Anwendung muss daher das am besten geeignete Verfahren gewählt werden.

Vorausberechnung	Optimierungsverfahren
Schnelle Bestimmung der Gitterparameter	Bestimmung der Gitterparameter langsam, da mehrere rigorose Berechnungen durchgeführt werden müssen
Erzeugung der Datenbank zeitaufwändig	Keine Vorausberechnung notwendig
Globales Minimum kann leicht bestimmt werden und es können alle weiteren Minima betrachtet werden	Oft nur Bestimmung eines lokalen Minimums möglich. Ergebnis hängt ab vom Startpunkt der Optimierung
Parametrisierung durch die Datenbank festgelegt, daher fest	Modell ist leicht veränderbar, dadurch flexible Parametrisierung möglich

Tabelle 1.1: Vergleich der Verfahren

2 Vorwärtsproblem

Bevor wir das inverse Gitterbeugungsproblem genauer analysieren, soll zunächst das Vorwärtsproblem - also die Gitterbeugung und die Berechnung der Beugungseffizienzen genauer betrachtet werden. In diesem Kapitel sollen zunächst die theoretischen Grundlagen der elektromagnetischen Lichtausbreitung und der Gitterbeugung betrachtet werden. Am Ende des Grundlagenteils werden verschiedene elektromagnetische Methoden und insbesondere die „Rigorous Coupled Wave Analysis“, die hauptsächlich in dieser Arbeit eingesetzt wurde, dargestellt. Im zweiten Teil sollen dann die Anforderungen an Beugungsgitter in verschiedenen Anwendungsgebieten untersucht werden, um die Notwendigkeit der eingesetzten Methoden aufzuzeigen und die vielfältigen Einsatzgebiete diffraktiver Elemente vorzustellen. Abschließend soll dann mit Hilfe von elektromagnetischen Simulationen der Einfluss von bestimmten Gitterparametern auf die Performance der Elemente untersucht werden. Dies dient zum einen der Analyse der elektromagnetischen Beugungseffekte und zum anderen zur Bestimmung der sensitiven Parameter für das inverse Problem. Die Ergebnisse der elektromagnetischen Simulationen werden mit der skalaren Betrachtung verglichen, außerdem werden verschiedene elektromagnetische Simulationsmethoden miteinander verglichen.

2.1 Grundlagen

Im Abschnitt Grundlagen sollen die theoretischen Grundlagen der Gitterbeugung dargestellt werden. Ausgehend von den Maxwell'schen Gleichungen werden die elektromagnetische Behandlung der Lichtausbreitung und die Wellengleichung, sowie deren Lösungen genauer betrachtet. Anschließend werden dann Beugungsgitter und diffraktiv optische Elemente thematisiert. Des Weiteren werden verschiedene Verfahren zur Berechnung der Beugungseffizienz von Gittern vorgestellt. Es wird zunächst auf die skalare Beugungstheorie und später auf verschiedene elektromagnetische Verfahren eingegangen. Einen Schwerpunkt des Abschnitts bildet die Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA), die für die meisten elektromagnetischen Simulationen in dieser Arbeit verwendet wurde. Es wird gezeigt, wie sich mit Hilfe der RCWA die Maxwell'schen Gleichungen für ein- und zweidimensionale Beugungsgitter lösen lassen. Den Abschluss des Grundlagenteils bildet eine Betrachtung der Gültigkeitsbereiche der verschiedenen Methoden. Über die verschiedenen räumlichen Skalen wird gezeigt, wann Näherungsverfahren, wie

die Effektiv Medium Theorie oder die skalare Beugungstheorie gültig sind und wann elektromagnetische Methoden notwendig werden.

2.1.1 Elektromagnetische Theorie des Lichts

Hier soll nun eine kurze Darstellung der elektromagnetischen Theorie der Lichtausbreitung gegeben werden, für eine detailliertere Betrachtung sei aber auf die gängigen Lehrbücher verwiesen [16, 17]. Die elektromagnetische Theorie des Lichts basiert auf den Maxwell'schen Gleichungen: Ein elektromagnetisches Feld wird durch den elektrischen Feldstärkevektor \vec{E} und die magnetische Flussdichte \vec{B} beschrieben. Um die Wechselwirkung des Feldes mit Materie zu beschreiben, werden zusätzliche Größen eingeführt: Die elektrische Stromdichte \vec{j} , die elektrische Flussdichte \vec{D} und die magnetische Feldstärke \vec{H} . Die Beziehung der Größen wird durch die Maxwell'schen Gleichungen beschrieben:

Durchflutungsgesetz:

$$\operatorname{rot}\vec{H} = \vec{j} + \dot{\vec{D}} \quad (2.1)$$

Induktionsgesetz:

$$\operatorname{rot}\vec{E} = -\dot{\vec{B}} \quad (2.2)$$

$$\operatorname{div}\vec{B} = 0 \quad (2.3)$$

$$\operatorname{div}\vec{E} = \rho \quad (2.4)$$

2.1.1.1 Materialgleichungen

Durch die Materialgleichungen wird der weitere Zusammenhang der Größen beschrieben. Wir betrachten hier harmonische Felder in einem isotropen Medium. Dann gilt:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (2.5)$$

$$\vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E} \quad (2.6)$$

$$\vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H} \quad (2.7)$$

Dabei ist ϵ die Permittivität, ϵ_0 die elektrische Feldkonstante, μ die Permeabilität, μ_0 die magnetische Feldkonstante und σ der spezifische Leitwert des Mediums. Betrachten

wir nun einen ladungsträgerfreien Raum, so existiert kein Leitungsstrom: $\vec{j} = 0$. Dann können wir die Maxwell'schen Gleichungen nur mit dem E- und H-Feld formulieren:

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \epsilon \epsilon_0 \dot{\vec{E}} \quad (2.8)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\mu \mu_0 \dot{\vec{H}} \quad (2.9)$$

2.1.1.2 Die Wellengleichung

Betrachten wir die Maxwell'schen Gleichungen im ladungsträgerfreien Raum, ferner sei der Raum homogen, das heißt μ und ϵ seien zeitlich und örtlich konstant. Dann folgt aus Gl. 2.1:

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \dot{\vec{D}} \quad (2.10)$$

Mit den Materialgleichungen erhalten wir

$$\operatorname{rot} \left(\frac{1}{\mu \mu_0} \vec{B} \right) = \epsilon \epsilon_0 \dot{\vec{E}} \quad (2.11)$$

Wir leiten diese Gleichung ab und erhalten damit

$$\operatorname{rot} \dot{\vec{B}} = \mu \mu_0 \epsilon \epsilon_0 \ddot{\vec{E}} = \frac{\mu \epsilon}{c^2} \ddot{\vec{E}} \quad (2.12)$$

Mit Gleichung 2.2 erhalten wird dann also:

$$\operatorname{rot} \left(\operatorname{rot} \vec{E} \right) = \frac{\mu \epsilon}{c^2} \ddot{\vec{E}} \quad (2.13)$$

Da wir uns im ladungsträgerfreien Raum befinden ($\rho = 0$) verschwindet die Divergenz des E-Feldes, da nur nur Ladungen die Quellen des elektrischen Feldes sind. Wir erhalten dann mit Gl. 2.13 und der Beziehung $\operatorname{rot} \left(\operatorname{rot} \vec{E} \right) = \operatorname{grad} \left(\operatorname{div} \vec{E} \right) - \vec{\nabla}^2 \vec{E}$:

$$\frac{\mu \epsilon}{c^2} \ddot{\vec{E}} = -\vec{\nabla}^2 \vec{E} \quad (2.14)$$

Und somit:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} - \frac{\mu \epsilon}{c^2} \ddot{\vec{E}} = 0 \quad (2.15)$$

Dies ist die Wellengleichung im homogenen, ladungsträgerfreien Raum.

2.1.1.3 Ebene Wellen

Eine zulässige Lösung der Wellengleichung ist die vektorielle, komplexe ebene Welle, die zunächst allgemein wie folgt definiert ist:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} \quad (2.16)$$

Wir wollen dies nun in die Wellengleichung einsetzen und berechnen zunächst:

$$\nabla \vec{E} = -k^2 \vec{E} \quad (2.17)$$

$$\ddot{\vec{E}} = -\omega^2 \vec{E} \quad (2.18)$$

Damit erhalten wir:

$$-k^2 \vec{E} + \frac{\mu \epsilon}{c^2} \omega^2 \vec{E} = 0 \quad (2.19)$$

also mit $n^2 = \mu \epsilon$:

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{n^2 \omega^2}{c^2} \quad (2.20)$$

Wir können die Gleichung nun nach k_z auflösen und erhalten damit zwei Fälle für die Lösung der Wellengleichung:

$$k_z = \pm \sqrt{\frac{n^2 \omega^2}{c^2} - (k_x^2 + k_y^2)} \quad (2.21)$$

Das Vorzeichen steht dabei für eine Ausbreitung in positive bzw. negative z-Richtung.

Wird der Radikant negativ, so wird die z-Komponente imaginär. Man spricht dann von evaneszenten oder quergedämpften Wellen. Diese sind in z-Richtung nicht ausbreitungsfähig und ihre Amplituden fallen exponentiell ab.

Es sei wieder $\text{div} \vec{E} = 0$ und damit:

$$\text{div} \vec{E}_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} + \vec{E}_0 \cdot i \vec{k} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} = 0 \quad (2.22)$$

Da die Amplitude \vec{E}_0 konstant ist, ist folglich $\text{div} \vec{E}_0 = 0$, damit wird Gleichung 2.22 zu

$$\vec{E}_0 \cdot \vec{k} = 0 \quad (2.23)$$

Also gilt $\vec{E}_0 \perp \vec{k}$. Ferner kann man zeigen [18], dass

$$\vec{B} = \frac{1}{\omega} (\vec{k} \times \vec{E}) \quad (2.24)$$

und

$$\vec{E} = -\frac{\omega}{k^2} (\vec{k} \times \vec{B}) \quad (2.25)$$

Die ebene Welle ist also eine Transversalwelle, bei der \vec{E} , \vec{B} und der Ausbreitungsvektor \vec{k} stets ein senkrechtetes Rechtssystem bilden.

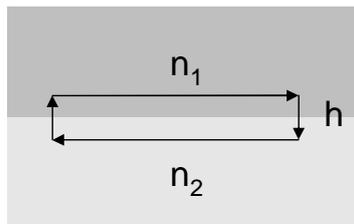
2.1.1.4 Licht an Grenzflächen

Die differentielle Form des Durchflutungsgesetzes (Gl. 2.1) und des Induktionsgesetzes (Gl. 2.2) können auch als Integralgleichungen formuliert werden (dies ist die ursprüngliche Formulierung der Sätze). Der Stokes'sche Satz zeigt, dass beide Formulierungen äquivalent sind. Die beiden Gleichungen lauten in Integralform:

$$\oint_S \frac{\vec{B}}{\mu\mu_0} d\vec{s} = \frac{d}{dt} \left(\iint \epsilon\epsilon_0 \vec{E} dA \right) + \iint j_L dA \quad (2.26)$$

$$\oint_S \vec{E} d\vec{s} = -\frac{d}{dt} \left(\iint \vec{B} dA \right) \quad (2.27)$$

Wobei $d\vec{s}$ ein infinitesimales Teilstück der geschlossenen Kurve S und \oint_S das geschlossene Kurvenintegral entlang der Kurve S ist. Wir wählen einen geschlossenen Weg an der Grenzfläche in folgender Weise:



Lassen wir h nun gegen 0 gehen, so geht auch die umschlossene Fläche gegen 0. Sofern die Integrale auf der rechten Seite der Gleichungen endlich bleiben (also $\frac{d}{dt} (\epsilon\epsilon_0 \vec{E}) + j_L$ und $\frac{d}{dt} \vec{B}$), verschwindet die rechte Seite. Vom Flussintegral auf der linken Seite verschwinden die Anteile, die senkrecht zur Grenzfläche stehen. Die tangentialen Anteile bleiben erhalten. Es folgt also:

Die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes \vec{E}_{tan} und die Tangentialkomponente des magnetischen Feldes $\frac{1}{\mu\mu_0} \vec{B}_{tan}$ sind an der Grenzfläche stetig.

Aus der Stetigkeit der Tangentialkomponente lassen sich nun für ebene Grenzflächen die bekannten Fresnel'schen Formeln herleiten.

2.1.1.5 Zeitharmonische Felder

E und H sind zeitharmonische Felder, also $E, H \propto e^{-i\omega t}$. Wir können die Ableitung nach t also durchführen und erhalten dann aus Gleichung 2.8 und 2.9

$$\nabla \times \vec{H} = -i\epsilon\epsilon_0\omega \vec{E} \quad (2.28)$$

$$\nabla \times \vec{E} = i\mu\mu_0\omega\vec{H} \quad (2.29)$$

Wenn wir die Kreuzprodukte ausführen, erhalten wir sechs Gleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial y} E_z - \frac{\partial}{\partial z} E_y = i\mu\mu_0\omega H_x \quad (2.30a)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} E_x - \frac{\partial}{\partial x} E_z = i\mu\mu_0\omega H_y \quad (2.30b)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} E_y - \frac{\partial}{\partial y} E_x = i\mu\mu_0\omega H_z \quad (2.30c)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} H_z - \frac{\partial}{\partial z} H_y = -i\epsilon\epsilon_0\omega E_x \quad (2.30d)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} H_x - \frac{\partial}{\partial x} H_z = -i\epsilon\epsilon_0\omega E_y \quad (2.30e)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} H_y - \frac{\partial}{\partial y} H_x = -i\epsilon\epsilon_0\omega E_z \quad (2.30f)$$

Betrachten wir die Wellengleichung (Gl. 2.15) für zeitharmonische Felder, dann können wir ebenfalls die Zeitableitung berechnen und erhalten dann:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} + \frac{\mu\epsilon}{c^2} \omega^2 \vec{E} = 0 \quad (2.31)$$

Setzen wir $\vec{k}^2 = \frac{n^2\omega^2}{c^2}$ ein, dann erhalten wir

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} + \vec{k}^2 \vec{E} = 0 \quad (2.32)$$

Diese spezielle Differentialgleichung wird auch die Helmholtz-Gleichung genannt.

2.1.2 Beugung am Gitter

Nun soll die Wechselwirkung der elektromagnetischen Wellen mit periodischen Elementen - also Beugungsgittern - betrachtet werden. Die Herleitung erfolgt dabei analog zu Petit [19] und soll daher hier nur kurz dargestellt werden. Abbildung 2.1 zeigt die betrachtete Geometrie eines eindimensionalen Gitters. Das Gitter sei dabei eine periodische Funktion $f(x)$, die die beiden Bereiche R und T voneinander trennt.

Hier soll exemplarisch der Fall der TE-Polarisation betrachtet werden: das E-Feld der einfallenden Welle stehe senkrecht zur Einfallsebene und besitzt daher nur eine y-Komponente. Wir nehmen zur Vereinfachung zudem an, dass das Material im Bereich T perfekt leitend ist und das Feld daher dort verschwindet. Die Betrachtung lässt sich leicht auf ein

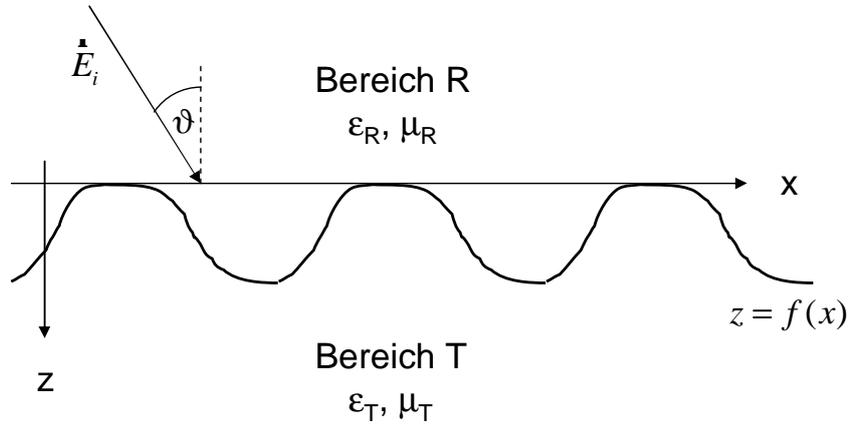


Abbildung 2.1: Betrachtete Gittergeometrie

dielektrisches Medium oder ein reales Metall erweitern, da hier aber nur die prinzipielle Herleitung gezeigt werden soll, sei für alle weiter gehenden Betrachtungen auf die Ausführungen von Petit verwiesen [19].

Wir betrachten nun das einfallende Feld und wollen die Beugung durch das Gitter bestimmen. Die einfallende Welle sei eine ebene Welle $\vec{E}_i = \vec{E} \cdot e^{i(k_{xi}x + k_{yi}y + k_{zi}z)}$, wobei $k_{yi} = 0$ und $k_{xi} = k_0 \epsilon_R \sin \vartheta$. Da das Feld nur eine y-Komponente besitzt betrachten nun nur diese Feldkomponente als skalare Größe $u = E_y$ ¹. Im Bereich R haben wir dann das gebeugte Feld u_d und das einfallende Feld. Das gesamte Feld ist also:

$$u_R(x, z) = u_d(x, z) + u_i(x, z)$$

Das Feld muss die Helmholtz-Gleichung erfüllen, außerdem liefern die Maxwell-Gleichungen eine Randbedingung für das Feld an der Gittergrenzfläche:

$$\vec{N} \times (\vec{E}_R - \vec{E}_T) = 0$$

\vec{N} ist dabei der Normalenvektor auf dem Gitter. Da wir ein perfekt leitendes Medium im Bereich T betrachten ist $\vec{E}_T = 0$ und somit gilt:

$$\vec{N} \times \vec{E}_R = 0$$

Hieraus folgt die Randbedingung, dass das Feld an der Grenzfläche verschwindet:

$$u_R(x, f(x)) = 0$$

Da die Helmholtzgleichung linear ist, muss nicht nur für das Gesamtfeld, sondern auch für das gebeugte Feld alleine gelten:

$$\vec{\nabla}^2 u_d + \vec{k}^2 u_d = 0$$

¹Für den TM-Fall kann eine analoge Betrachtung für $u = H_y$ durchgeführt werden, die bis auf die Randbedingung identisch mit dem TE-Fall ist

Für das gebeugte Feld an der Grenzfläche gilt damit:

$$u_d(x, f(x)) = -u_i(x, f(x))$$

Außerdem nehmen wir als zweite Randbedingung an, dass u_d für $z \rightarrow -\infty$ beschränkt ist und als Superposition von auslaufenden ebenen Wellen dargestellt werden kann. Diese Randbedingung wird auch als Abstrahlungsbedingung bezeichnet. Wir nehmen zudem an, dass es dann nur eine eindeutige Lösung der Helmholtz Gleichung und der Randbedingungen gibt.

Wir betrachten zunächst die Funktion

$$v(x, z) = u_d(x, z)e^{-ik_x x}$$

und wollen zeigen, dass die Funktion periodisch ist, also, dass $v(x + P) = v(x)$. Wenn $v(x, z)$ periodisch ist, muss also gelten

$$u_d(x + P, z)e^{-ik_x(x+P)}e^{-ik_x x} = u_d(x, z)e^{-ik_x x}$$

Also damit

$$\underbrace{u_d(x + P, z)e^{-ik_x(x+P)}}_{w(x, z)}e^{-ik_x x} = u_d(x, z)e^{-ik_x x} \quad (2.33)$$

Wenn also $w(x, z)$ die Randbedingungen und die Helmholtzgleichung erfüllt, ist damit auch die Periodizität von $v(x, z)$ gezeigt, da wir eine eindeutige Lösung angenommen haben. Da $u_d(x, z)$ die Helmholtzgleichung erfüllen muss, muss dies dann auch für $w(x, z)$ gelten. Wir müssen also nur noch zeigen, dass $w(x, z)$ auch die Randbedingung an der Grenzfläche erfüllt.

Für das einfallende Feld gilt offensichtlich:

$$u_i(x + P, z) = e^{i(k_x(x+P) + k_z z)} = e^{ik_x P} e^{i(k_x x + k_z z)} = e^{ik_x P} u_i(x, z)$$

Betrachten wir nur w auf der Grenzfläche, dann erhalten wir aus Gleichung 2.33:

$$\begin{aligned} w(x, f(x)) &= u_d(x + P, f(x))e^{-ik_x P} \\ &= -u_i(x + P, f(x))e^{-ik_x P} \\ &= -u_i(x, f(x)) \\ &= u_d(x, f(x)) \end{aligned}$$

Hiermit haben wir gezeigt, dass $u_d(x, z)$ das Produkt der periodischen Funktion $v(x, z)$ und einer ortsabhängigen Phase $e^{ik_x x}$ ist, das heißt $u_d(x, z)$ ist pseudo-periodisch.

2.1.2.1 Die Rayleigh-Zerlegung und die Gittergleichung

Die oben betrachtete periodische Funktion $v(x, z)$ können wir als Fourier-Reihe darstellen. Das gebeugte Feld u_d ist dann

$$u_d(x, z) = e^{ik_{xi}x} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} v_m(z) e^{2\pi i \frac{mx}{P}} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} v_m(z) e^{ik_{xm}x}$$

wobei

$$k_{xm} = k_{xi} + 2\pi i \frac{mx}{P} = k_0 \epsilon_R^2 \sin \vartheta + 2\pi i \frac{mx}{P}$$

Setzen wir die Reihenentwicklung von u_d in die Helmholtz-Gleichung ein, erhalten wir

$$(\vec{k}^2 - k_{xm}^2) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} v_m(z) + \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_m(z) = 0$$

Aus Orthogonalitätsgründen muss damit gelten

$$(\vec{k}^2 - k_{xm}^2) v_m(z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_m(z) = 0$$

Die Lösung der Differentialgleichung ist dann

$$v_m(z) = A_m e^{-ik_{zm}z} + B_m e^{ik_{zm}z}$$

mit $k_{zm} = \sqrt{\vec{k}^2 - k_{xm}^2}$.

Aus der Abstrahlungsbedingung muss folgen, dass $A_m = 0$ und damit

$$u_d(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} B_m e^{i(k_{xm}x + k_{zm}z)}$$

Dies ist die so genannte *Rayleigh-Zerlegung*.

Aus den obigen Betrachtungen ergibt sich auch direkt die bekannte Gittergleichung:

$$\sin \vartheta_m = \frac{k_{xm}}{\vec{k}} = \sin \vartheta + m \frac{2\pi}{P} \quad (2.34)$$

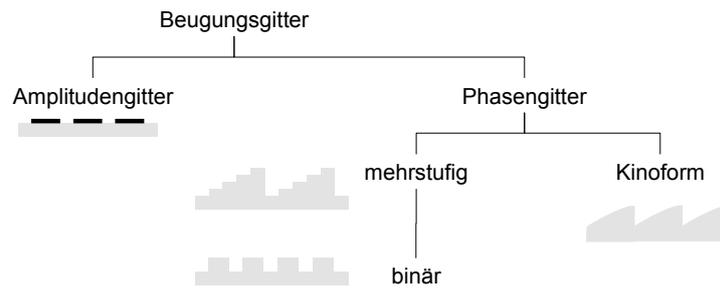


Abbildung 2.2: Skalare Klassifizierung von Beugungsgittern

2.1.2.2 Begriffserklärungen

Im Zusammenhang mit Beugungsgittern gibt es verschiedene Bezeichnungen für die verschiedenen Arten von Gittern und diffraktiven Elementen. Hier soll nun eine kurze Definition der in der Arbeit betrachteten Elemente gegeben werden. Im Folgenden betrachten wir eine Ebene, die durch die x - und y -Achse des kartesischen Koordinatensystems aufgespannt wird. Betrachten wir ein Gitter, so liege dieses in dieser Ebene. Wird das Gitter beleuchtet, so breitet sich das Licht hauptsächlich in Richtung der z -Achse des Koordinatensystems aus.

In Abbildung 2.2 ist eine Klassifizierung von Beugungsgittern im skalaren Sinne dargestellt. Als Gitter oder **Beugungsgitter** wird in dieser Arbeit eine Struktur verstanden, die in mindestens einer Koordinatenrichtung streng periodisch ist. Normalerweise wird das Gitter von einer monochromatischen Lichtquelle beleuchtet, so dass sich diskrete Beugungsordnungen ausbilden.

Als **eindimensionales Gitter** wird ein Gitter bezeichnet, das nur in eine Richtung eine Periodizität aufweist. In die andere Richtung sei das Gitter unendlich fortgesetzt. Als **zweidimensionales Gitter** oder **gekreuztes Gitter** wird ein Gitter bezeichnet, das in beide Koordinatenrichtungen eine Periodizität aufweist. In der Literatur werden zweidimensionale Gitter auch teilweise als dreidimensionale Gitter bezeichnet, da bei der elektromagnetischen Betrachtung das komplette dreidimensionale Beugungsproblem gelöst wird.

Bei der skalaren Betrachtung von Beugungsgittern als dünnes Element (siehe Abschnitt 2.1.3) unterscheidet man prinzipiell zwischen Amplituden- und Phasengittern. Als **Amplitudengitter** bezeichnen wir ein Gitter, das im Sinne der Kirchhoff'schen Näherung hauptsächlich die Amplitude des Lichts beeinflusst. Ein reales Beispiel für ein Amplitudengitter stellt ein Chrom-auf-Quarz-Gitter dar. Im Gegensatz dazu ist ein **Phasengitter** ein Gitter, das hauptsächlich die Phase des eingestrahnten Lichts beeinflusst.

Die Phasengitter wiederum lassen sich ebenfalls in verschiedene Kategorien einteilen. Zunächst unterscheidet man **mehrstufige** Elemente, die nur diskrete Phasenstufen besitzen und die so genannten **Kinoforn**-Elemente, die ein kontinuierliches Phasenprofil

aufweisen. Ein Spezialfall sind dann die **Binärgitter**, die nur eine Stufe und damit nur zwei Phasenniveaus aufweisen.

2.1.2.3 Diffraktiv optische Elemente

Im Gegensatz zu den oben beschriebenen Beugungsgittern stellen Diffraktive Optische Elemente (DOEs) einen Überbegriff von optischen Elementen dar, die das Licht durch Beugung ablenken (im Gegensatz zu refraktiven und reflektiven Elementen). Hier soll der Begriff für solche Elemente verwendet werden, die im Vergleich zu Beugungsgittern ein lokal variierende Periode aufweisen. Ein Beispiel für ein solches Element ist eine diffraktive Linse (Fresnel-Linse):



Abbildung 2.3: Schematische Darstellung einer diffraktiven Linse (Fresnel-Linse)

Durch die lokal variierende Periode ändert sich auch der Ablenkwinkel des Lichts und so können praktisch beliebige optische Funktionalitäten realisiert werden. Verschiedene Anwendungsgebiete von diffraktiven Elementen werden in Abschnitt 2.2 dieser Arbeit betrachtet. Da solche Elemente oft mehrere Zentimeter groß sind, ist die elektromagnetische Betrachtung eines gesamten Elements kaum möglich. Allerdings lassen sich solch große diffraktiv optische Elemente lokal als streng periodisches Beugungsgitter annähern. Man spricht dann von der „local grating assumption“. Diese kann angewendet werden, wenn sich die lokale Gitterperiode auf dem Element nur langsam ändert [20]. Dies kann bei vielen Anwendungen vorausgesetzt werden, daher werden die in dieser Arbeit betrachteten diffraktiv optischen Elemente lokal als Beugungsgitter betrachtet.

2.1.3 Skalare Beugungstheorie

Nun soll zunächst die skalare Beugungstheorie eingeführt werden, die in vielen Anwendungsgebieten der Optik weit verbreitet ist [21]. Die Darstellung folgt dabei weitestgehend den Ausführungen von Brenner [18]. In der skalaren Beugungstheorie betrachtet man an Stelle des vektoriellen Feldes ein skalares Lichtfeld. So lässt sich die Beugung einfacher beschreiben. Die Gültigkeit der skalaren Näherung wird im Abschnitt 2.1.5 näher betrachtet.

Betrachten wir zunächst nochmals die ebene Welle aus Abschnitt 2.1.1.3:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} \quad (2.16)$$

Vernachlässigen wir den vektoriellen Charakter des E-Feldes erhalten wir eine skalare Welle. Wir lassen außerdem zur besseren Übersichtlichkeit die Zeitabhängigkeit weg, da hier immer eine Zeitabhängigkeit $\propto e^{-i\omega t}$ angenommen werden kann:

$$u(\vec{r}) = u_0 e^{i(k_x x + k_y y)} e^{iz\sqrt{\left(\frac{n\omega}{c}\right)^2 - k_x^2 - k_y^2}} \quad (2.35)$$

Zur Vereinfachung definieren wir Querkoordinaten $\vec{r}_\perp = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ und $\vec{k}_\perp = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix}$ und erhalten dann:

$$u(\vec{r}_\perp, z) = u_0 e^{i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp)} e^{iz\sqrt{\left(\frac{n\omega}{c}\right)^2 - \vec{k}_\perp^2}} \quad (2.36)$$

Für $z = 0$ gilt:

$$u(\vec{r}_\perp, 0) = u_0 e^{i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp)} \quad (2.37)$$

Und damit:

$$u(\vec{r}_\perp, z) = u(\vec{r}_\perp, 0) \cdot e^{iz\sqrt{\left(\frac{n\omega}{c}\right)^2 - \vec{k}_\perp^2}} \quad (2.38)$$

Dies beschreibt die Ausbreitung des Feldes einer ebenen Welle bei $z = 0$ in den Raum $z > 0$. Die Feldverteilung können wir mit Hilfe der Fourier-Theorie als Superposition von trigonometrischen Verteilungen darstellen

$$u(\vec{r}_\perp, 0) = \iint \tilde{u}(\vec{\rho}_\perp, 0) \cdot e^{2\pi i \vec{\rho}_\perp \vec{r}_\perp} d^2 \vec{\rho}_\perp$$

mit

$$\vec{\rho}_\perp = \begin{pmatrix} \nu \\ \mu \end{pmatrix}$$

Wir definieren $\vec{k}_\perp = 2\pi \vec{\rho}_\perp$ und erhalten damit

$$u(\vec{r}_\perp, 0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \tilde{u}(\vec{k}_\perp, 0) \cdot e^{i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp} d^2 \vec{k}_\perp$$

Dies ist also eine Superposition von ebenen Wellen. Wie sich die ebenen Wellen ausbreiten wissen wir bereits, wir können also auf Grund der Linearität der Wellengleichung schreiben:

$$u(\vec{r}_\perp, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \tilde{u}(\vec{k}_\perp, 0) \cdot e^{i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp} \cdot e^{iz\sqrt{(nk_0)^2 - \vec{k}_\perp^2}} d^2 \vec{k}_\perp \quad (2.39)$$

Dies ist das Beugungsintegral nach **Rayleigh und Sommerfeld**. Aus der Fouriertransformierten der Verteilung bei $z = 0$ $\tilde{u}(\vec{k}_\perp, 0)$ können wir damit die Lichtausbreitung berechnen. Wir definieren

$$\tilde{G}(\vec{k}_\perp, z) := e^{iz\sqrt{(nk_0)^2 - \vec{k}_\perp^2}}$$

und erhalten damit

$$u(\vec{r}_\perp, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \tilde{u}(\vec{k}_\perp, 0) \cdot \tilde{G}(\vec{k}_\perp, z) \cdot e^{i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp} d^2 \vec{k}_\perp \quad (2.40)$$

Das ist die Fourier-Rücktransformation des Produkts $\tilde{u}(\vec{k}_\perp, 0) \cdot \tilde{G}(\vec{k}_\perp, z)$. Wir können das Beugungsintegral also leicht im Frequenzraum berechnen, in dem wir die Fourier-Transformierte von u berechnen, mit \tilde{G} multiplizieren und dann die Fourier-Rücktransformation anwenden.

Betrachtet man das Beugungsintegral im Ortsraum, drückt das Faltungsintegral das Huygens'sche Prinzip aus:

$$u(\vec{r}_\perp, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint u(\vec{r}'_\perp, 0) \cdot G(\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp, z) d^2 \vec{r}'_\perp$$

Wobei Weyl [22] gezeigt hat, dass $G(\vec{r}_\perp) = -\frac{in}{\lambda} \frac{e^{i\frac{n\omega}{c}|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}$, dies ist also die Huygens'sche Kugelwelle.

2.1.3.1 Paraxiale Näherung

In vielen Fällen kann das Ergebnis noch weiter vereinfacht werden. Für $\frac{k_\perp}{nk_0} \ll 1$ können wir $\tilde{G}(\vec{k}_\perp, z)$ nähern, mit der Näherung $\sqrt{1 + \varepsilon} \approx 1 + \frac{\varepsilon}{2}$:

$$\tilde{G}(\vec{k}_\perp, z) = e^{iz\sqrt{(nk_0)^2 - k_\perp^2}} \approx e^{iznk_0} \left(1 - \frac{k_\perp^2}{2(nk_0)^2}\right) \quad (2.41)$$

Das Beugungsintegral wird damit zu

$$u(\vec{r}_\perp, z) = e^{iznk_0} \iint \tilde{u}(\vec{\rho}_\perp) \cdot e^{-iz\pi \frac{\lambda_0}{n} \rho_\perp^2} \cdot e^{2\pi i \vec{\rho}_\perp r_\perp} d^2 \vec{\rho}_\perp \quad (2.42)$$

Mit $\tilde{G}_F = e^{iznk_0} e^{-iz\pi \frac{\lambda_0}{n} \rho_\perp^2}$ ist das wieder die Fourier-Transformierte eines Produkts. Dies ist das **Fresnel'sche Beugungsintegral** im Frequenzraum, im Ortsraum erhält man dann:

$$u(\vec{r}_\perp, z) = -\frac{in}{\lambda_0 z} e^{iznk_0} \iint u(\vec{r}'_\perp, 0) \cdot e^{i\pi \frac{n}{\lambda_0 z} (\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp)^2} d^2 \vec{r}'_\perp \quad (2.43)$$

2.1.3.2 Fernfeldnäherung

Für große Distanzen lässt sich das Fresnel-Integral noch weiter nähern. Aus dem Fresnel'schen Beugungsintegral erhalten wir

$$u(\vec{r}_\perp, z) = -\frac{in}{\lambda_0 z} e^{iznk_0} \cdot e^{i\pi \frac{n}{\lambda_0 z} \vec{r}_\perp^2} \iint u(\vec{r}'_\perp, 0) \cdot e^{-2\pi i \frac{n}{\lambda_0 z} \vec{r}_\perp \vec{r}'_\perp} \cdot e^{i\pi \frac{n}{\lambda_0 z} \vec{r}'_\perp^2} d^2 \vec{r}'_\perp$$

Für $r_\perp \ll z$ kann der quadratische Phasenfaktor im Integral zu 1 genähert werden:

$$u(\vec{r}_\perp, z) = -\frac{in}{\lambda_0 z} e^{ink_0 \left(z + \frac{\vec{r}_\perp^2}{2z}\right)} \cdot \iint u(\vec{r}'_\perp, 0) \cdot e^{-2\pi i \frac{n}{\lambda_0 z} \vec{r}_\perp \vec{r}'_\perp} d^2 \vec{r}'_\perp$$

Damit vereinfacht sich das Beugungsintegral zu einer Fourier-Transformation mit einem Phasenfaktor:

$$u(\vec{r}_\perp, z) = -\frac{in}{\lambda_0 z} e^{ink_0 \left(z + \frac{\vec{r}_\perp^2}{2z} \right)} \cdot \tilde{u} \left(\frac{n \vec{r}_\perp}{\lambda_0 z}, 0 \right) \quad (2.44)$$

Dies ist die so genannte Fernfeld- oder **Fraunhofer Näherung**.

2.1.3.3 Kirchhoff'scher Ansatz

Nun wollen wir den Kirchhoff'schen Ansatz betrachten. Für dünne optische Elemente betrachten wir die Wechselwirkung mit Licht als Amplitudenabschwächung $A(x, y)$ und Phasenverzögerung $\phi(x, y)$. Man spricht daher auch von der *dünne Element Näherung*, da das Objekt als infinitesimal dünnes Objekt betrachtet wird. Die Amplituden- und Phasenwirkung können zusammen durch eine komplexe Transmissionsfunktion ausgedrückt werden:

$$t(x, y) = A(x, y) \cdot e^{i\phi(x, y)}$$

Die skalare Wechselwirkung eines dünnen Transmissionselements können wir dann als Produkt der Feldverteilung vor dem Element mit der Transmissionsfunktion betrachten:

$$u(\vec{r}_\perp, 0_+) = t_A(x, y) \cdot u(\vec{r}_\perp, 0_-)$$

Betrachten wir nun ein dünnes Beugungsgitter, so kann die skalare, periodische Transmissionsfunktion als Fourier-Reihe dargestellt werden. Wenn $t(x) = t(x + nP), \forall n \in \mathbb{N}$ dann gilt:

$$t(x) = \sum_m c_m e^{2\pi i \frac{mx}{P}}$$

Die Koeffizienten sind dann

$$c_m = \frac{1}{P} \int_P t(x) e^{-2\pi i \frac{mx}{P}} dx$$

Für ein Beugungsgitter sind dies die Amplitudenkoeffizienten der einzelnen Beugungsordnungen [18, 21]. Vergleichen wir die Formel mit der Fourier-Transformation, so ist

$$c_m = \frac{1}{P} \tilde{t}(\nu), \text{ bei } \nu = \frac{m}{P}$$

Die skalare Beugungseffizienz ist dann das Betragsquadrat der Amplitude

$$\eta_m = |c_m|^2$$

Die Kirchhoff'sche Näherung ist eine brauchbare Näherung für große Gitterperioden - hier spielen die Kanteneffekte der Struktur eine untergeordnete Rolle und die reine

Phasen- bzw. Amplitudenwirkung des Objekts überwiegt. Der Vergleich der Aspektverhältnisse ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Betrachtet man zwei Gitter gleicher Höhe, so spielen die Kanten der Struktur beim Gitter mit kleiner Gitterperiode auf Grund des höheren Aspektverhältnisses eine größere Rolle, als im Fall der großen Gitterperiode.

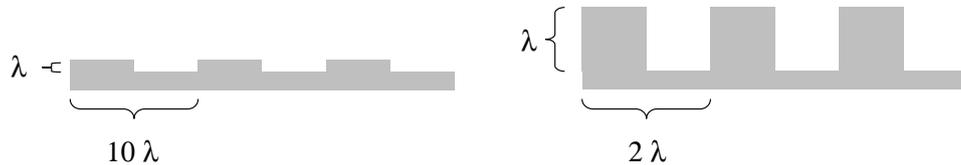


Abbildung 2.4: Vergleich der Aspektverhältnisse bei kleiner und großer Gitterperiode

2.1.3.4 „Vektorielle“ Erweiterung der Kirchhoff'schen Näherung

Eine Erweiterung der Kirchhoff'schen Näherung in der skalaren Theorie ist die so genannte Vektorielle Kirchhoff'sche Näherung (Vectorial Thin Element Approximation VTEA) [23]. Es handelt sich dabei nicht um eine komplett vektorielle Methode (wie der Name vermuten lässt), sondern eher um ein „semi-rigoroses“ Verfahren. Die skalare Theorie wird erweitert, indem die Transmission und die Reflexion des Gitters über die Mehrschichttheorie [16] analytisch berechnet werden (Abb. 2.5).

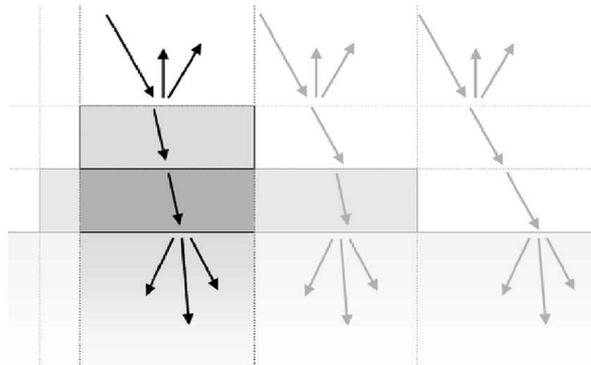


Abbildung 2.5: Modellierung des Beugungsgitters in der VTEA als Schichtstapel (Quelle: Kerwien [23])

Man betrachtet dabei Gitterstege und Lücken jeweils als unendlich ausgedehnt. Es handelt sich also wie auch bei der skalaren Theorie um eine Näherung für große Gitterperioden. Die Betrachtung des Gitters als Schichtstapel führt zur genaueren Berechnung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten (in Abhängigkeit der Polarisationsrichtung) - somit stimmt im Grenzfall großer Perioden die rigoros berechnete Beugungseffizienz mit der der VTEA überein. Die Genauigkeit des Verfahrens wird in Abschnitt 2.1.5 genauer betrachtet.

2.1.4 Elektromagnetische Beugungstheorie

Im vorherigen Abschnitt wurde die skalare Beugungstheorie betrachtet - hierbei wird aber der vektorielle Charakter des Lichts außer Acht gelassen. Zur exakten Lösung des Beugungsproblems müssen die Maxwell'schen Gleichungen für das vektorielle E- und H-Feld gelöst werden. Insbesondere bei kleinen Strukturen in der Größenordnung von wenigen Wellenlängen (z.B. Beugungsgitter mit sehr kleiner Periode) führt die skalare Näherung zu erheblichen Abweichungen im Vergleich zur korrekten elektromagnetischen Behandlung. Da die Maxwell'schen Gleichungen nur für wenige Spezialfälle (wie z.B. unendliche ausgedehnte Schichten) analytisch exakt lösbar sind, gibt es eine Vielzahl numerischer Methoden zur Lösung des elektromagnetischen Beugungsproblems, exemplarisch sollen im Folgenden einige der Verfahren kurz vorgestellt werden. Anschließend soll dann die in dieser Arbeit hauptsächlich verwendete Methode, die Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA), betrachtet werden. Den Abschluss dieses Abschnitts bildet eine Betrachtung der Gültigkeitsbereiche der verschiedenen Berechnungsmethoden in den verschiedenen räumlichen Skalen.

2.1.4.1 Numerische Methoden

Wie im Fall der ebenen Grenzfläche (siehe Abschnitt 2.1.1.4) muss auch an den Grenzflächen des Gitters an jeder Stelle die Stetigkeit der Tangentialkomponenten erfüllt sein. Im Allgemeinen lassen sich aber durch diese Forderung die elektrischen und magnetischen Felder nicht direkt bestimmen. Zur Lösung des Beugungsproblems sind also Näherungsverfahren notwendig. Hier seien nun beispielhaft einige Methoden vorgestellt. Ein guter Überblick über die rigorosen Verfahren findet sich z.B. bei Bao [24].

Finite Difference Time Domain method (FDTD)

Die Finite Difference Time Domain Method (FDTD) ist eine Zeitbereichsmethode. Die Maxwell'schen Gleichungen werden dabei durch eine räumliche und zeitliche Diskretisierung gelöst. Dazu wird der betrachtete Raum diskretisiert und die Ableitungen der Maxwell'schen Gleichungen durch Finite Differenzen ersetzt. In kleinen Zeitschritten wird jeweils aus dem elektrischen Feld das magnetische und umgekehrt berechnet. Eine umfangreiche Beschreibung der Methode findet sich bei Taflove [25].

Die FDTD ist nicht auf periodische Probleme beschränkt und ist daher auch weit verbreitet. Allerdings ist der Rechenaufwand relativ hoch, da sehr viele Zeitschritte berechnet werden müssen, bis sich ein stationärer Zustand einstellt. Wird also die zeitliche Information nicht benötigt (wenn z.B. nur die Beugungseffizienz eines Gitters berechnet werden soll), sind andere Verfahren daher geeigneter.

Ein weiterer Nachteil der FDTD ist der große Speicherbedarf - da jeweils das magnetische Feld aus dem elektrischen und umgekehrt berechnet wird, müssen immer zwei komplexe Felder gespeichert werden. Diesen Nachteil beseitigt die *Real FDTD* [26, 27]. Durch die Beschränkung auf reelle E-Felder kann der Speicherbedarf um den Faktor vier verkleinert werden.

Finite Elemente Methoden (FEM)

Finite Elemente Methoden werden in vielen Anwendungsgebieten zur Lösung von Differentialgleichungen eingesetzt. So können auch die Maxwell'schen Gleichungen mit Hilfe von Finite Elemente Methoden numerisch gelöst werden. Eine Implementierung der FEM für eindimensionale Gitterbeugungsprobleme ist das Programm DIPOG [28, 29], das für Vergleichsrechnungen mit der RCWA in dieser Arbeit verwendet wurde.

Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA)

Bei der RCWA (auch als Fourier Modal Method FMM bezeichnet) betrachtet man das Gitterbeugungsproblem im Frequenzraum und zerlegt die elektrischen und magnetischen Felder in Fourier-Moden. Unter Ausnutzung der periodischen Randbedingungen kann das Beugungsproblem dann über einen Eigenwert-Ansatz gelöst werden. Die ursprüngliche Idee der Methode stammt von Burkhardt [30] und wurde dann zunächst für Anwendungen in der Holographie eingesetzt [31, 32, 33]. Als Rigorous Coupled Wave Analysis wurde die Methode dann erstmals von Moharam und Gaylord bezeichnet [34]. Von denselben Autoren stammen auch die ersten Ausführungen über die Betrachtung von zweidimensionalen Beugungsgittern [35, 36]. Die RCWA ist zunächst eine Methode für Binärgitter, deren Dielektrizität sich in z-Richtung nicht ändert. Über eine Kopplung der Randbedingungen können aber auch Stapel von binären Gittern betrachtet und so praktisch beliebige Gitterprofile angenähert werden. Die RCWA wird im Abschnitt 2.1.4.3 genauer betrachtet.

Koordinatentransformationsmethode

Die Koordinatentransformationsmethode ist eng mit der RCWA verwandt. Durch eine Koordinatentransformation wird die Gitteroberfläche auf eine Ebene transformiert. Nun können die Randbedingungen der Maxwell'schen Gleichungen wie bei der RCWA über ein Eigenwertproblem gelöst werden. Anschließend werden die Ergebnisse dann wieder in das ursprüngliche Koordinatensystem zurück transformiert. Die Methode ist sowohl für eindimensionale [37], als auch für zweidimensionale Gitter anwendbar [38].

Differentielle Methode

Ähnlich wie bei der RCWA, verwendet die Differentielle Methode einen Fourier-Ansatz. Allerdings wird das auftretende Differentialgleichungssystem nicht über einen Eigenwert-Ansatz, sondern direkt durch numerische Integration gelöst. Dies hat den Vorteil, dass hier keine Approximation des Gitterprofils notwendig ist, sondern beliebige Geometrien betrachtet werden können. Die numerische Integration ist allerdings langsamer als das Lösen des Eigenwertproblems in der RCWA. Eine umfangreiche Darstellung der Methode findet sich in Nevière/Popov [39].

Integralgleichungsmethoden

Die Integralgleichungsmethoden gehören zu den ersten elektromagnetischen Methoden zur Berechnung der Beugungseffizienz von Gittern. Eine detaillierte Diskussion der Methoden findet sich bei Kleemann [40] und Maystre [41].

Alle Methoden haben verschiedene Vor- und Nachteile und daher alle ihre Berechtigung auf einem bestimmten Gebiet. Für eine bestimmte Anwendung muss daher die am besten geeignete Methode gefunden werden. Da in dieser Arbeit größtenteils binäre Gitterstrukturen betrachtet werden, wurde hier auf die RCWA zurück gegriffen. Diese zeichnet sich durch eine geringe Rechenzeit und in vielen Fällen eine schnelle Konvergenz aus.

2.1.4.2 Effektiv Medium Theorien

Eine spezielle Klasse von elektromagnetischen Methoden sind die so genannten Effektiv Medium Theorien EMT. Nun betrachten wir nicht wie bei der skalaren bzw. Kirchhoff'schen Näherung den Grenzfall großer Gitterperioden, sondern den umgekehrten Fall, nämlich eine sehr kleine Gitterperiode. Für den Grenzfall $\frac{P}{\lambda} \rightarrow 0$, kann die so genannte Effektiv Medium Theorie (EMT) 0. Ordnung angesetzt werden (man spricht auch vom „quasistatischen Limit“).

Wir betrachten ein Gitter mit den beiden Dielektrizitätskonstanten ϵ_1 und ϵ_2 . Wir betrachten das Gitter als in y- und z-Richtung unendlich ausgedehnte Schichten (siehe Abb. 2.6) der Dicke $f \cdot P$ bzw. $(1 - f) \cdot P$.

Betrachtet man nun ein elektrisches Feld senkrecht zum Gitter (also hier in x-Richtung), dann muss auf Grund der Maxwell'schen Stetigkeitsbedingungen die elektrische Verschiebung in den beiden Materialien gleich sein. Daher gilt für die beiden elektrischen

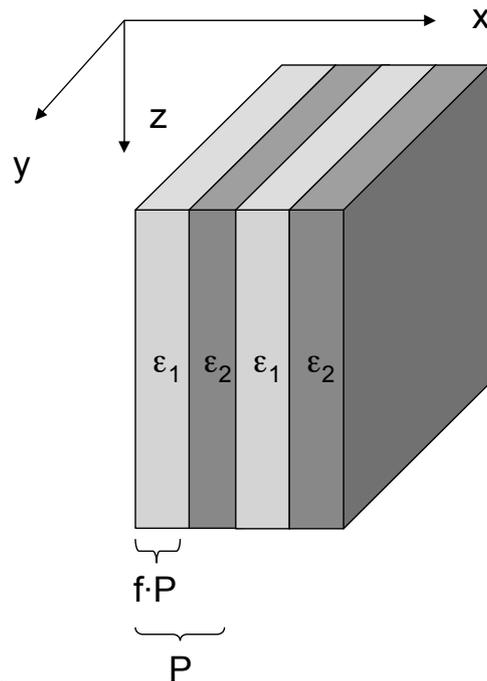


Abbildung 2.6: Modell für die Effektiv Medium Theorie 0. Ordnung

Felder:

$$\vec{E}_1 = \frac{\vec{D}}{\epsilon_1}, \quad \vec{E}_2 = \frac{\vec{D}}{\epsilon_2}$$

Das Gesamtfeld im gesamten Volumen ist der Mittelwert der Felder:

$$\vec{E} = \frac{fP\frac{\vec{D}}{\epsilon_1} + (1-f)P\frac{\vec{D}}{\epsilon_2}}{P}$$

Die effektive Dielektrizitätskonstante ist damit

$$\epsilon_{\perp} = \frac{\epsilon_1\epsilon_2}{(1-f)\epsilon_1 + f\epsilon_2} \quad (2.45)$$

Steht das elektrische Feld parallel zum Gitter (also in y-Richtung), muss die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes stetig sein. Dies führt dann mit einer analogen Betrachtung zu einer effektiven Dielektrizitätskonstante von:

$$\epsilon_{\parallel} = f\epsilon_1 + (1-f)\epsilon_2 \quad (2.46)$$

Die EMT 0. Ordnung gilt nur für sehr kleine Gitterperioden bezüglich der Wellenlänge (siehe auch Abschnitt 2.1.5), daher wurde von Rytov eine EMT 2. Ordnung entwickelt, die eine endliche Gitterperiode berücksichtigt [42].

Für die EMT 2. Ordnung erhalten wir dann die Dielektrizitätskonstanten

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}_{\perp} &= \epsilon_{\perp} + \frac{1}{3} \left(\frac{P}{\lambda} \right)^2 \pi^2 (1-f)^2 (\epsilon_2 - \epsilon_1)^2 \\ \bar{\epsilon}_{\parallel} &= \epsilon_{\parallel} + \frac{1}{3} \left(\frac{P}{\lambda} \right)^2 \pi^2 (1-f)^2 \left(\frac{1}{\epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_1} \right)^2 \cdot \epsilon_{\parallel}^3 \epsilon_{\perp}\end{aligned}\quad (2.47)$$

wobei ϵ_{\perp} und ϵ_{\parallel} die Dielektrizitätskonstanten aus der EMT 0. Ordnung sind.

Für den Grenzfall kleiner Gitterperioden können sub- λ Gitter also als homogenes Medium betrachtet werden. Die Effektiv-Medium Theorie führt aber für ein eindimensionales Gitter zu einer so genannten Form-Doppelbrechung. Anwendungen solcher sub- λ Strukturen sind beispielsweise Antireflexstrukturen oder diffraktiv geblazete Gitter, die im Abschnitt 2.2 betrachtet werden.

2.1.4.3 Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA)

Nun soll die oben bereits kurz erwähnte Rigorous Coupled Wave Analysis genauer betrachtet werden. Für die elektromagnetischen Berechnungen in dieser Arbeit wurde primär die RCWA in der Matlab-Implementierung Microsim [43] verwendet. Im Folgenden soll eine kurze Herleitung der RCWA Gleichungen dargestellt werden - die Ergebnisse werden später für die Herleitung der Gradientenberechnung im Abschnitt 3.2.2 benötigt. Die Ausführungen sind angelehnt an die Veröffentlichungen von Moharam [44, 45] und den vorgeschlagenen Modifikationen von Li zur Verbesserung der Konvergenz [46, 47].

1D-Gitter

Wir betrachten zunächst ein eindimensionales, binäres Gitter, wie in Abb. 2.7 dargestellt. In den Halbräumen I und III (Superstrat und Substrat) sind die Brechzahlen $n_I = \epsilon_I^2$ und $n_{III} = \epsilon_{III}^2$ konstant. Im Bereich II haben wir in x-Richtung eine periodische Verteilung der Dielektrizitätskonstante mit Periode P, die Gitterhöhe sei d. In y-Richtung sei das Gitter unendlich ausgedehnt, die betrachtete Dielektrizitätsverteilung ist unabhängig von z.

Wir betrachten nun den Bereich des Gitters II. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird, wenn möglich, auf den Index II verzichtet. Wenn kein Index angegeben ist, beziehen sich die Größen im Folgenden stets auf den Bereich II.

Da die Dielektrizitätsverteilung im Gitterbereich periodisch und in z-Richtung konstant ist, können wir eine Fourier-Reihenentwicklung ansetzen:

$$\epsilon(x) = \sum_l \tilde{\epsilon}_l \exp\left(2\pi i \frac{lx}{P}\right) \quad (2.48)$$

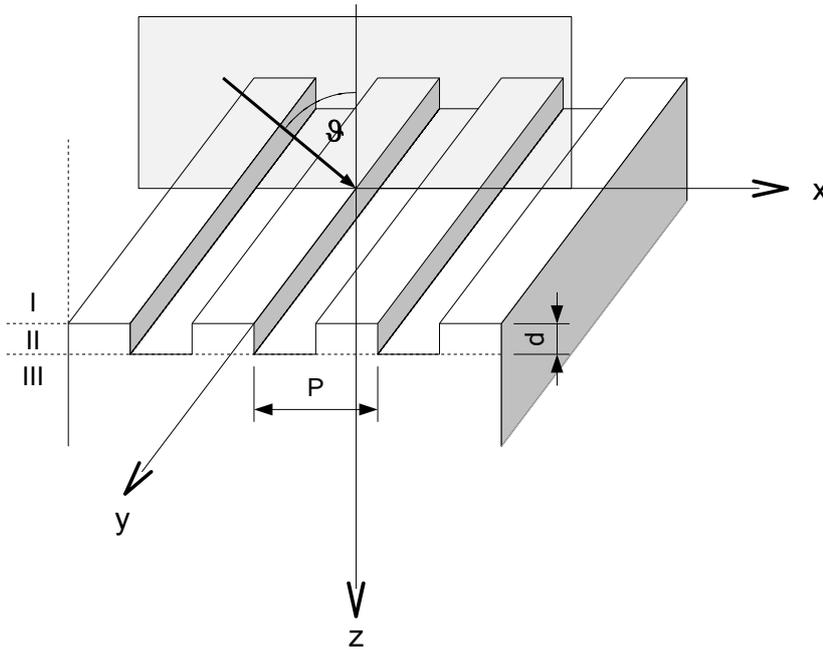


Abbildung 2.7: Gittergeometrie für die Betrachtung der klassischen Beugung

TE-Polarisation Betrachten wir nun exemplarisch den Fall der TE-Polarisation - für die Herleitung der Gleichungen für den TM-Fall und die konische Beugung sei auf die entsprechende Literatur verwiesen. Das einfallende elektrische Feld steht senkrecht zur Einfallsebene und besitzt nur eine y -Komponente. Das magnetische Feld ist orthogonal dazu:

$$\vec{E}_{inc} = \begin{pmatrix} 0 \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i(k_{xi}x + \gamma iz)} \cdot \vec{e}_z, \quad \vec{H}_{inc} = \begin{pmatrix} H_x \\ 0 \\ H_z \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

Eingesetzt in die ersten beiden Maxwell'schen Gleichungen (2.1 und 2.2) erhalten wir dann:

$$-\frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu\mu_0 H_x \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = i\omega\mu\mu_0 H_z \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = -i\omega\epsilon\epsilon_0 E_y + \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (2.52)$$

Wir eliminieren nun die z -abhängige Komponente H_x . Außerdem betrachten wir im Folgenden nichtmagnetische Materialien mit $\mu = 1$. Wir erhalten aus Gl. 2.51:

$$H_z = \frac{1}{i\omega\mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial x}$$

$$H_z = \frac{1}{ik_0 c \mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial x} = \frac{1}{ik_0 \sqrt{\frac{1}{\mu_0 \epsilon_0}} \mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial x} = -\frac{i}{k_0} \sqrt{\epsilon_0} \frac{\partial E_y}{\partial x} = -\frac{i}{k_0 Z_0} \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.53)$$

Mit der Freiraumimpedanz $Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$. Wir leiten die Gleichung ab und erhalten:

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = -\frac{i}{k_0 Z_0} \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2}$$

Eingesetzt in Gleichung 2.52 ergibt dies:

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = -i\epsilon(x) \frac{k_0}{Z_0} E_y - \frac{i}{k_0 Z_0} \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} \quad (2.54)$$

Auf Grund der periodischen Randbedingung durch das Gitter (siehe auch Abschnitt 2.1.2) können wir die Felder im Bereich *I* und *III* durch eine Rayleigh-Entwicklung darstellen:

$$\vec{E}_I = \vec{E}_{inc} + \sum_{m=-\infty}^{\infty} R_m \cdot e^{i(k_{xm}x + k_{ym}y - \gamma_I z)} \approx \vec{E}_{inc} + \sum_{m=-M_0}^{M_0} R_m \cdot e^{i(k_{xm}x + k_{ym}y - \gamma_I z)} \quad (2.55)$$

$$\vec{E}_{III} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} T_m \cdot e^{i(k_{xm}x + k_{ym}y + \gamma_{III}(z-d))} \approx \sum_{m=-M_0}^{M_0} T_m \cdot e^{i(k_{xm}x + k_{ym}y + \gamma_{III}(z-d))} \quad (2.56)$$

Dabei sind R_m und T_m die Reflexions- beziehungsweise Transmissionsamplituden der m -ten Beugungsordnung. Die unendliche Reihe brechen wir beim Index M_0 ab, man spricht daher von der Modenzahl M_0 . Die z -Komponente des k -Vektors ergibt sich aus

$$\gamma_l = \sqrt{(k_0 n_l)^2 - k_{xm}^2 - k_{ym}^2} \quad l = I, III \quad (2.57)$$

Der RCWA-Ansatz zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen besteht nun darin, dass auch die Felder im Gitter als Rayleigh-Reihe dargestellt werden. Wir können dann im Bereich des Gitters für die Tangentialkomponenten E_y und H_x auf Grund der Pseudo-Periodizität schreiben:

$$E_y = \sum_m S_{y,m} e^{ik_{xm}x} \quad (2.58)$$

$$H_x = \sum_m U_{x,m} e^{ik_{xm}x} \quad (2.59)$$

wobei $k_{xm} = k_{xi} + m \frac{2\pi}{P}$.

Die Reihenentwicklungen setzen wir nun in die zwei verbleibenden Maxwellschen Gleichungen ein, wir erhalten dann aus Gleichung 2.50:

$$-\frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_m S_{y,m} \exp [ik_{xm}x] \right) = ik_0 Z_0 \sum_m U_{x,m} \exp [ik_{xm}x]$$

Durch Koeffizientenvergleich muss $\forall m$ gelten:

$$-\frac{\partial}{\partial z} S_{y,m} = ik_0 Z_0 U_{x,m} \quad (2.60)$$

Aus 2.54 erhalten wir:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_m U_{x,m} \exp [ik_{xm}x] \right) = -i\epsilon(x) \frac{k_0}{Z_0} \sum_m S_{y,m} \exp [ik_{xm}x] - \frac{i}{k_0 Z_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\sum_m S_{y,m} \exp [ik_{xm}x] \right)$$

Führen wir die Ableitung nach x für den letzten Term aus, erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_m U_{x,m} \exp [ik_{xm}x] \right) = \frac{ik_{xm}^2}{k_0 Z_0} \sum_m S_{y,m} \exp [ik_{xm}x] - i\epsilon(x) \frac{k_0}{Z_0} \sum_m S_{y,m} \exp [ik_{xm}x]$$

Wir setzen die Fourierentwicklung von ϵ ein (Gl. 2.48):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_m U_{x,m} \exp [ik_{xm}x] \right) \\ &= \frac{ik_{xm}^2}{k_0 Z_0} \sum_m S_{y,m} \exp [ik_{xm}x] - i \sum_l \tilde{\epsilon}_l \exp \left(2\pi i \frac{lx}{P} \right) \frac{k_0}{Z_0} \sum_m S_{y,m} \exp [ik_{xm}x] \quad (2.61) \end{aligned}$$

Wir bilden nun auf beiden Seiten $\frac{1}{P} \int_0^P (\dots) e^{-2\pi i \frac{nx}{P}} dx$, dann erhalten wir:

$$\frac{\partial}{\partial z} U_{x,n} = \frac{ik_{xm}^2}{k_0 Z_0} S_{y,n} - \frac{ik_0}{Z_0} \sum_m \tilde{\epsilon}_{n-m} S_{y,m} \quad (2.62)$$

Außerdem leiten wir 2.60 nach z ab und benennen den Index um ($m \rightarrow n$) und erhalten dann:

$$-\frac{\partial^2}{\partial z^2} S_{y,n} = ik_0 Z_0 \frac{\partial}{\partial z} U_{x,n}$$

Wir setzen dies in 2.62 ein und erhalten dann die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} S_{y,n} = k_{xm}^2 S_{y,n} - k_0^2 \sum_m \tilde{\epsilon}_{n-m} S_{y,m} \quad (2.63)$$

bzw. in Matrix-Form:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} S_y = (\mathbf{K}_x^2 - k_0^2 \mathbf{E}) S_y \quad (2.64)$$

Dabei ist \mathbf{E} eine Toeplitzmatrix mit den Elementen ϵ_{n-m} und \mathbf{K}_x^2 eine Diagonalmatrix mit den Elementen $(k_{xm}/k_0)^2$. Wir definieren² $\mathbf{A} = (\mathbf{K}_x^2 - k_0^2 \mathbf{E})$ und erhalten dann die folgende Differentialgleichung:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} S_y - \mathbf{A} \cdot S_y = 0 \quad (2.65)$$

Die Gleichung lässt sich über die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix \mathbf{A} lösen. Die Lösung ist

$$S_y = \mathbf{W} \cdot C \quad (2.66)$$

wobei \mathbf{W} die Matrix der Eigenvektoren von \mathbf{A} ist. Der Vektor C muss folgende Eigenschaft besitzen:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} C = \mathbf{\Lambda} C \quad (2.67)$$

Dabei ist $\mathbf{\Lambda}$ eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten von \mathbf{A} . Um zu zeigen, dass dies wirklich eine Lösung der Differentialgleichung ist, setzen wir ein:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (\mathbf{W} \cdot C) - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} \cdot C &= \mathbf{W} \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2} C - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} \cdot C \\ &= \mathbf{W} (\mathbf{\Lambda} C) - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} \cdot C \\ &= (\mathbf{W} \mathbf{\Lambda} - \mathbf{A} \mathbf{W}) C \\ &= 0 \end{aligned}$$

Da \mathbf{W} die Eigenvektor- und $\mathbf{\Lambda}$ die Eigenwertmatrix von \mathbf{A} ist gilt $\mathbf{A} \mathbf{W} = \mathbf{W} \mathbf{\Lambda}$ und damit ist die Gleichung erfüllt. Der Vektor C ist einfach zu konstruieren - da jede Komponente die Ableitungseigenschaft erfüllen muss, betrachten wir eine Komponente von C , die wie folgt definiert ist:

$$C_j = c_j^+ e^{-z} \sqrt{\lambda_j} + c_j^- e^{(z-d)} \sqrt{\lambda_j} \quad (2.68)$$

Es gilt dann:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} C = \lambda_j \left(c_j^+ e^{-z} \sqrt{\lambda_j} + c_j^- e^{(z-d)} \sqrt{\lambda_j} \right) = \lambda_j C_j$$

Aus Gleichung 2.60 erhalten wir dann die Lösung für U :

$$U_x = -\frac{1}{ik_0 Z_0} \frac{\partial}{\partial z} S_y = -\frac{1}{ik_0 Z_0} \frac{\partial}{\partial z} (\mathbf{W} C) = -\frac{1}{ik_0 Z_0} \mathbf{W} \frac{\partial}{\partial z} C$$

und für $\frac{\partial}{\partial z} C$

$$\frac{\partial}{\partial z} C = -\sqrt{\lambda_j} D$$

²Um auf das Ergebnis von Moharam zu kommen, muss man z durch $z' = k_0 z$ substituieren.

Mit $D = \left(c_j^+ e^{-z\sqrt{\lambda_j}} - c_j^- e^{(z-d)\sqrt{\lambda_j}} \right)$. Und damit:

$$U_x = \frac{1}{ik_0 Z_0} \mathbf{W} \cdot \mathbf{Q} \cdot C \quad (2.69)$$

\mathbf{Q} ist die Matrix mit den Diagonalelementen $\sqrt{\lambda_j}$.

Also:

$$S_{y,m} = \sum_j w_{m,j} \left(c_j^+ e^{-z\sqrt{\lambda_j}} + c_j^- e^{(z-d)\sqrt{\lambda_j}} \right) \quad (2.70)$$

$$U_{x,m} = \frac{1}{ik_0 Z_0} \sum_j v_{m,j} \left(c_j^+ e^{-z\sqrt{\lambda_j}} - sc_j^- e^{(z-d)\sqrt{\lambda_j}} \right) \quad (2.71)$$

Wobei $v_{m,j}$ die Elemente der Matrix $\mathbf{V} = \mathbf{WQ}$ sind.

Die Unbekannten c_j^+ und c_j^- können wir bestimmen, indem wir die Randbedingungen an den Grenzflächen einsetzen. Die Tangentialkomponenten der Felder müssen stetig sein, also muss gelten:

$$\begin{aligned} E_{I,y} &= E_{II,y} = E_{III,y} \\ H_{I,x} &= H_{II,x} = H_{III,x} \end{aligned}$$

Betrachten wir zunächst die Grenzschicht zwischen I und II. Dort erhalten wir mit Gl. 2.55 und 2.58:

$$\sum_m S_{y,m} \exp[ik_{xm}x] = \exp[i(k_{xi}x + \gamma_i z)] + \sum_m R_m \exp[i(k_{xm}x - \gamma_I z)]$$

Der Koeffizientenvergleich liefert dann:

$$S_{y,m} = \delta_{m,0} \exp(i\gamma_i z) + R_m \exp(-i\gamma_I z) \quad (2.72)$$

Dabei ist $\delta_{k,l} = 0$ für $k \neq l$ und $\delta_{k,l} = 1$ für $k = l$. Aus Gl. 2.60 erhalten wir:

$$\begin{aligned} U_{x,m} &= \frac{i}{k_0 Z_0} \frac{\partial S_{y,m}}{\partial z} \\ &= -\frac{1}{k_0 Z_0} \delta_{m,0} \gamma_i \exp(i\gamma_i z) + \frac{1}{k_0 Z_0} \gamma_I R_m \exp(-i\gamma_I z) \end{aligned} \quad (2.73)$$

Für $z = 0$ erhalten wir damit

$$S_{y,m} = \delta_{m,0} + R_m \quad (2.74)$$

$$U_{x,m} = -\frac{1}{Z_0} \left(\delta_{m,0} \frac{\gamma_i}{k_0} - \frac{\gamma_I}{k_0} R_m \right) \quad (2.75)$$

Betrachten wir nun die Grenzfläche zwischen II und III, eine analoge Betrachtung liefert hier für die Stelle $z = d$:

$$S_{y,m} = T_m \quad (2.76)$$

$$U_{x,m} = -\frac{1}{Z_0} \frac{\gamma_{III}}{k_0} T_m \quad (2.77)$$

Setzen wir die Randbedingungen in die Lösung des Eigenwertproblems ein und kürzen, erhalten wir:

$$\begin{aligned} \delta_{m,0} + R_m &= \sum_j w_{m,j} [c_j^+ + c_j^- \exp(-d\sqrt{\lambda_j})] \\ i\delta_{m,0}\gamma_i - i\gamma_I R_m &= -\sum_j v_{m,j} [c_j^+ - c_j^- \exp(-d\sqrt{\lambda_j})] \\ T_m &= \sum_j w_{m,j} [c_j^+ \exp(-d\sqrt{\lambda_j}) + c_j^-] \\ -i\gamma_{III} T_m &= \sum_j v_{m,j} [c_j^+ \exp(-d\sqrt{\lambda_j}) - c_j^-] \end{aligned}$$

In Matrix-Form:

$$\begin{pmatrix} \delta_{m,0} \\ i\delta_{m,0}\gamma_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -\mathbf{Y}_I \end{pmatrix} \mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{W} & \mathbf{W}\mathbf{X} \\ -\mathbf{V} & \mathbf{V}\mathbf{X} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{pmatrix} \quad (2.78)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -\mathbf{Y}_{III} \end{pmatrix} \mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}\mathbf{X} & \mathbf{W} \\ \mathbf{V}\mathbf{X} & -\mathbf{V} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{pmatrix} \quad (2.79)$$

Mit $\mathbf{Y}_I = \text{diag}(i\gamma_I)$, $\mathbf{Y}_{III} = \text{diag}(i\gamma_{III})$, $\mathbf{X} = \text{diag}(e^{-d\sqrt{\lambda_j}})$ und $\mathbf{V} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{Q}$. Wir können nun - wie von Moharam [44] vorgeschlagen - zunächst R und T eliminieren und das Gleichungssystem für c^+ und c^- auflösen. Danach benutzen wir das Ergebnis um R und T zu bestimmen.

Wir können die beiden Gleichungen in Gl. 2.78 und 2.79 jeweils zusammenfassen und erhalten dann:

$$\delta_{m,0} \mathbf{Y}_I + i\delta_{m,0}\gamma_i = (\mathbf{Y}_I \mathbf{W} - \mathbf{V}) \mathbf{c}^+ + (\mathbf{Y}_I \mathbf{W}\mathbf{X} + \mathbf{V}\mathbf{X}) \mathbf{c}^- \quad (2.80)$$

$$\mathbf{0} = (\mathbf{Y}_{III} \mathbf{W}\mathbf{X} + \mathbf{V}\mathbf{X}) \mathbf{c}^+ + (\mathbf{Y}_{III} \mathbf{W} - \mathbf{V}) \mathbf{c}^- \quad (2.81)$$

Anschließend können wir wieder in Gl. 2.78 und 2.79 einsetzen:

$$\mathbf{R} = \mathbf{W} \mathbf{c}^+ + \mathbf{W}\mathbf{X} \mathbf{c}^- - \delta_{m,0} \quad (2.82)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{W}\mathbf{X} \mathbf{c}^+ + \mathbf{W} \mathbf{c}^- \quad (2.83)$$

Die Beugungseffizienz der reflektierten bzw. transmittierten Beugungsordnungen ist dann definiert als:

$$\eta_{R,m} = \Re \left(\frac{\gamma_I}{\gamma_i} \right) |R_m|^2 \quad (2.84)$$

$$\eta_{T,m} = \Re \left(\frac{\gamma_{III}}{\gamma_i} \right) |T_m|^2 \quad (2.85)$$

Aus Gründen der Energieerhaltung muss dann für $|\vec{E}_{inc}|^2 = 1$ und ein nicht absorbierendes Gittermaterial gelten:

$$\sum_m \eta_{R,m} + \sum_m \eta_{T,m} = 1 \quad (2.86)$$

Enhanced Transmittance Matrix Approach

Bis jetzt haben wir nur ein binäres Gitter betrachtet. Wenn wir eine z-Abhängigkeit der Dielektrizitätsverteilung betrachten möchten, so müssen wir das Gitter durch Schichten mit konstanter Dielektrizitätszahl in z-Richtung aufteilen (siehe Abbildung 2.8). Dies ist die so genannte Treppenstufen Approximation (staircase approximation), wobei jede einzelne Schicht wieder ein binäres Gitter, wie oben betrachtet, ist.

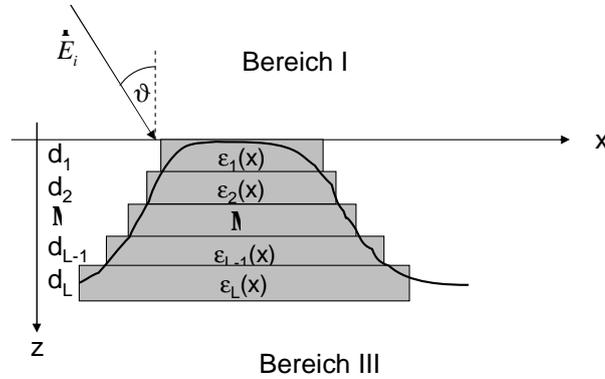


Abbildung 2.8: Treppenstufenapproximation in der RCWA

Der so genannte Enhanced Transmittance Matrix Approach (ETMA) [45] erlaubt es nun, dass wir jede Schicht separat betrachten und anschließend die einzelnen Schichten durch Lösen der Randbedingungen aneinander koppeln.

Betrachten wir die Grenzfläche zum Bereich I ($z=0$), dann erhalten wir:

$$\begin{pmatrix} \delta_{m,0} \\ -i\delta_{m,0}\gamma_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ \mathbf{Y}_I \end{pmatrix} \mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{W}_1 \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{V}_1 & -\mathbf{V}_1 \mathbf{X}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

und zwischen der $l - 1$ -ten und der l -ten Schicht

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{l-1}\mathbf{X}_{l-1} & \mathbf{W}_{l-1} \\ \mathbf{V}_{l-1}\mathbf{X}_{l-1} & -\mathbf{V}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{l-1}^+ \\ \mathbf{c}_{l-1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_l & \mathbf{W}_l\mathbf{X}_l \\ \mathbf{V}_l & -\mathbf{V}_l\mathbf{X}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_l^+ \\ \mathbf{c}_l^- \end{pmatrix} \quad (2.88)$$

sowie an der letzten Grenzfläche zum Bereich *III*

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_L\mathbf{X}_L & \mathbf{W}_L \\ \mathbf{V}_L\mathbf{X}_L & -\mathbf{V}_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_L^+ \\ \mathbf{c}_L^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -\mathbf{Y}_{\text{III}} \end{pmatrix} \mathbf{T} \quad (2.89)$$

Wir definieren nun $\mathbf{f}_{L+1} := \mathbf{I}$ und $\mathbf{g}_{L+1} = -\mathbf{Y}_{\text{III}}$ und können dann schreiben:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix} \mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L\mathbf{X}_L & \mathbf{W}_L \\ \mathbf{V}_L\mathbf{X}_L & -\mathbf{V}_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_L^+ \\ \mathbf{c}_L^- \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

Durch Umstellen der Gleichung erhält man

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{W}_L & \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{V}_L & \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_L^- \\ \mathbf{T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L\mathbf{X}_L \\ \mathbf{V}_L\mathbf{X}_L \end{pmatrix} \mathbf{c}_L^+$$

Nun kann nach $\begin{pmatrix} \mathbf{c}_L^- \\ \mathbf{T} \end{pmatrix}$ aufgelöst werden und damit ist

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_L^- \\ \mathbf{T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{W}_L & \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{V}_L & \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L\mathbf{X}_L \\ \mathbf{V}_L\mathbf{X}_L \end{pmatrix} \mathbf{c}_L^+$$

Wir definieren:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{b}_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{W}_L & \mathbf{f}_{L+1} \\ \mathbf{V}_L & \mathbf{g}_{L+1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L\mathbf{X}_L \\ \mathbf{V}_L\mathbf{X}_L \end{pmatrix} \quad (2.91)$$

Dann folgt

$$\mathbf{c}_L^- = \mathbf{a}_L \mathbf{c}_L^+ \quad (2.92)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{b}_L \mathbf{c}_L^+ \quad (2.93)$$

Jetzt benutzen wir Gleichung 2.92 und erhalten für die linke Seite von Gleichung 2.89:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_L & \mathbf{W}_L\mathbf{X}_L \\ \mathbf{V}_L & -\mathbf{V}_L\mathbf{X}_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_L^+ \\ \mathbf{a}_L \mathbf{c}_L^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L(\mathbf{I} + \mathbf{X}_L \mathbf{a}_L) \\ \mathbf{V}_L(\mathbf{I} - \mathbf{X}_L \mathbf{a}_L) \end{pmatrix} \mathbf{c}_L^+ \quad (2.94)$$

Wir definieren nun eine weitere Hilfsgröße:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_L \\ \mathbf{g}_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_L(\mathbf{I} + \mathbf{X}_L \mathbf{a}_L) \\ \mathbf{V}_L(\mathbf{I} - \mathbf{X}_L \mathbf{a}_L) \end{pmatrix} \quad (2.95)$$

Betrachten wir jetzt die Grenzfläche in L-1 zur L-ten Schicht, dann muss gelten:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{L-1}\mathbf{X}_{L-1} & \mathbf{W}_{L-1} \\ \mathbf{V}_{L-1}\mathbf{X}_{L-1} & -\mathbf{V}_{L-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{L-1}^+ \\ \mathbf{c}_{L-1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_L \\ \mathbf{g}_L \end{pmatrix} \mathbf{c}_L^+$$

Wenn man diese Gleichung umstellt, erhält man

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{W}_{L-1} & \mathbf{f}_L \\ \mathbf{V}_{L-1} & \mathbf{g}_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{L-1}^- \\ \mathbf{c}_L^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{L-1}\mathbf{X}_{L-1} \\ \mathbf{V}_{L-1}\mathbf{X}_{L-1} \end{pmatrix} \mathbf{c}_{L-1}^+$$

Damit erhalten wir

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_{L-1}^- \\ \mathbf{c}_L^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{L-1} \\ \mathbf{b}_{L-1} \end{pmatrix} \mathbf{c}_{L-1}^+$$

wobei

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{L-1} \\ \mathbf{b}_{L-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{W}_{L-1} & \mathbf{f}_L \\ \mathbf{V}_{L-1} & \mathbf{g}_L \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{L-1}\mathbf{X}_{L-1} \\ -\mathbf{V}_{L-1}\mathbf{X}_{L-1} \end{pmatrix}$$

Und damit dann

$$\mathbf{c}_{L-1}^- = \mathbf{a}_{L-1}\mathbf{c}_{L-1}^+ \quad (2.96)$$

$$\mathbf{c}_L^+ = \mathbf{b}_{L-1}\mathbf{c}_{L-1}^+ \quad (2.97)$$

Entsprechend gilt dies auch für die anderen Übergänge der Schichten. An der letzten Grenzfläche zum Bereich I erhalten wir dann

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{g}_1 \end{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ = \begin{pmatrix} \delta_{m,0} \\ -i\delta_{m,0}\gamma_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ \mathbf{Y}_I \end{pmatrix} \mathbf{R}$$

Wir stellen die Gleichung um und erhalten:

$$\begin{pmatrix} \delta_{m,0} \\ -i\delta_{m,0}\gamma_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 & -\mathbf{I} \\ \mathbf{g}_1 & -\mathbf{Y}_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{R} \end{pmatrix}$$

Jetzt lösen wir noch nach $\begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{R} \end{pmatrix}$ auf und erhalten dann damit

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 & -\mathbf{I} \\ \mathbf{g}_1 & -\mathbf{Y}_I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \delta_{m,0} \\ -i\delta_{m,0}\gamma_i \end{pmatrix} \quad (2.98)$$

Wir können also \mathbf{R} berechnen, in dem wir sukzessive a_l und b_l , daraus f_{l-1} und g_{l-1} und dann wieder a_{l-1} und b_{l-1} und so weiter berechnen. Für \mathbf{T} hatten wir

$$\mathbf{T} = \mathbf{b}_L \mathbf{c}_L^+$$

und für \mathbf{c}_l^+ gilt allgemein

$$\mathbf{c}_l^+ = \mathbf{b}_{l-1} \mathbf{c}_{l-1}^+$$

Das Gleichungssystem für \mathbf{R} liefert \mathbf{c}_1^+ und damit

$$\mathbf{T} = \mathbf{b}_L \mathbf{b}_{L-1} \cdots \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_1^+$$

Mit dem *Enhanced Transmittance Matrix Approach* lassen sich also beliebige Stapel binärer Gitter berechnen. So können in der RCWA beliebige Oberflächenprofile approximiert werden. Da das Eigenwertproblem in jeder Schicht separat gelöst wird, wächst die Rechenzeit linear mit der Anzahl der Schichten.

Zweidimensionale Gitter

Nun sollen kurz die RCWA-Gleichungen für zweidimensionale Gitter eingeführt werden. Auf eine ausführliche Herleitung wird allerdings bewusst verzichtet und der Leser sei auf die einschlägige Literatur verwiesen. Die Beschreibung ist angelehnt an die Ausführungen von Kerwien [48], die betrachtete Gittergeometrie ist in Abbildung 2.9 dargestellt. Nun betrachten wir nicht mehr den Fall der klassischen Beugung, sondern eine beliebige

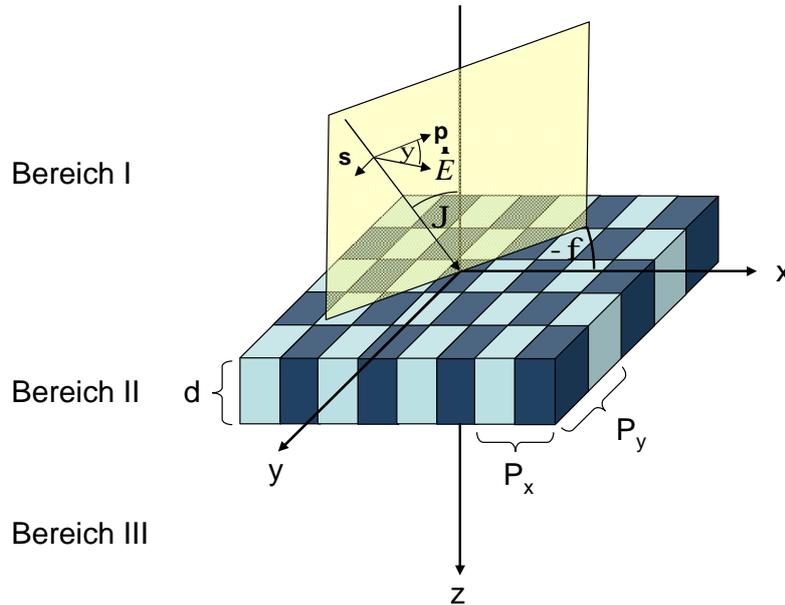


Abbildung 2.9: Geometrie des zweidimensionalen Gitterbeugungsproblems

ge einfallende ebene Welle. Der Einfallswinkel der Welle sei ϑ , die Einfallsebene habe den Azimuthwinkel ϕ und der normierte elektrische Feldstärkevektor habe den Winkel ψ zur Einfallsebene. Außerdem betrachten nun ein lokales Koordinatensystem für die einfallende Wellen, dessen s- und p-Komponente ebenfalls dargestellt sind.

Da das Gitter nun in x- und in y-Richtung periodisch ist, setzen wir für die Rayleigh-Zerlegung in den Bereichen *I* und *III* an:

$$\vec{E}_I = \vec{E}_{inc} + \sum_{m,n=-M_{x,y}}^{M_{x,y}} R_{mn} e^{i(k_{xmn}x + k_{ymn}y - \gamma_I z)} \quad (2.99)$$

$$\vec{E}_{III} = \sum_{m,n=-M_{x,y}}^{M_{x,y}} T_{mn} e^{i(k_{xmn}x + k_{ymn}y + \gamma_{III}(z-d))} \quad (2.100)$$

R_{mn} und T_{mn} sind dabei wie oben die Reflexions- bzw. Transmissionsamplituden der Beugungsordnungen. Die Richtungen der Beugungsordnungen erhalten wir wieder aus dem Floquet-Theorem:

$$k_{xmn} = k_0 n_I \sin \vartheta \cos \phi - m \frac{2\pi}{P_x} \quad (2.101)$$

$$k_{ymn} = k_0 n_I \sin \vartheta \sin \phi - n \frac{2\pi}{P_y} \quad (2.102)$$

P_x und P_y ist dabei die Periode des Gitters in x- bzw. y-Richtung. Die z-Komponente ist wieder entsprechend der Ewald-Bedingung:

$$\gamma_l = \sqrt{(k_0 n_l)^2 - k_{xmn}^2 - k_{ymn}^2} \quad l = I, III$$

Wie im eindimensionalen Fall setzen wir auch im Gitterbereich eine Rayleighzerlegung an und erhalten dann für das elektrische und das magnetische Feld:

$$\vec{E}_{II} = \sum_{m,n=-M_{x,y}}^{M_{x,y}} (S_{xmn} \vec{e}_x + S_{ymn} \vec{e}_y + S_{zmn} \vec{e}_z) e^{i(k_{xmn}x + k_{ymn}y)}$$

$$\vec{H}_{II} = -\frac{i}{Z_0} \sum_{m,n=-M_{x,y}}^{M_{x,y}} (U_{xmn} \vec{e}_x + U_{ymn} \vec{e}_y + U_{zmn} \vec{e}_z) e^{i(k_{xmn}x + k_{ymn}y)}$$

Für die periodische Permittivität im Gitterbereich können wir nun analog zum eindimensionalen Fall eine Fourier-Reihenentwicklung ansetzen:

$$\epsilon(x, y) = \sum_{m,n=-M_{x,y}}^{M_{x,y}} \tilde{\epsilon}_{mn} e^{2\pi i (\frac{mx}{P_x} + \frac{ny}{P_y})}$$

Setzt man die Reihenentwicklungen wieder in Maxwell'schen Gleichungen ein und eliminiert die Normalenkomponenten E_z und H_z erhält man einen $(4(2M_x + 1) \cdot (2M_y + 1))$ -dimensionalen Satz gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} S_x \\ \frac{\partial}{\partial z} S_y \\ \frac{\partial}{\partial z} U_x \\ \frac{\partial}{\partial z} U_y \end{pmatrix} = k_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & -K_x E^{-1} K_y & K_x E^{-1} K_x - I \\ 0 & 0 & I - K_y E^{-1} K_y & K_y E^{-1} K_x \\ -K_x K_y & K_x^2 - [[\epsilon]] & 0 & 0 \\ [[\epsilon]] - K_y^2 & K_x K_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ U_x \\ U_y \end{pmatrix} \quad (2.103)$$

Die zweidimensionalen Arrays der Fourier-Koeffizienten lassen sich in Spaltenvektoren umordnen. Hierbei wird eine geeignete Bijektion verwendet:

$$m, n \in [(2M_x + 1) \times (2M_y + 1)] \rightarrow m' \in [M \times 1] \quad \text{mit } M = (2M_x + 1) \cdot (2M_y + 1)$$

Im Folgenden wird der lineare Index mit m bezeichnet. K_x und K_y sind dann Diagonalmatrizen mit den Elementen von k_{xm}/k_0 und k_{ym}/k_0 . Außerdem ist I eine M -dimensionale Einheitsmatrix und 0 die M -dimensionale Null-Matrix. Die Matrizen E , $[[\epsilon]]$ und $[[\epsilon]]$ bezeichnen Toeplitz-Matrizen, die sich unter Verwendung der Faktorisierungsregeln von Li [47] aus den Fourier-Koeffizienten der Permittivität im Gitterbereich ergeben:

$$[[\epsilon]]_{mn,jl} = \left[\left[\begin{array}{c} 1 \\ \epsilon \end{array} \right]_{mj}^{-1} \right]_{nl}, \quad [[\epsilon]]_{mn,jl} = \left[\left[\begin{array}{c} 1 \\ \epsilon \end{array} \right]_{nl}^{-1} \right]_{mj}$$

wobei

$$[[\epsilon]]_{mn} = \frac{1}{P_x} \int_0^{P_x} \epsilon(x, y) e^{-i(m-n)\frac{2\pi}{P_x}x} dx$$

$$[[\epsilon]]_{mn} = \frac{1}{P_y} \int_0^{P_y} \epsilon(x, y) e^{-i(m-n)\frac{2\pi}{P_y}y} dy$$

Das Problem lässt sich durch blockweises Einsetzen auf einen $2M$ -dimensionalen Satz gekoppelter Differentialgleichungen für U_x und U_y reduzieren:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_x \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_y \end{pmatrix} = k_0^2 \underbrace{\begin{pmatrix} K_x^2 + [[\epsilon]] D & (K_y - [[\epsilon]] K_y E^{-1}) K_x \\ (K_x - [[\epsilon]] K_x E^{-1}) K_y & K_y^2 + [[\epsilon]] B \end{pmatrix}}_{\Omega_1} \begin{pmatrix} U_x \\ U_y \end{pmatrix} \quad (2.104)$$

Mit den Abkürzungen

$$D = (K_y E^{-1} K_y - I), \quad B = (K_x E^{-1} K_x - I) \quad (2.105)$$

Dieses Differentialgleichungssystem lässt sich wieder mit Hilfe eines Eigenwert-Ansatzes lösen. Die Lösung ist damit

$$\begin{pmatrix} U_x \\ U_y \end{pmatrix} = \sum_{m=1}^{2M} w_m (-c_m^+ e^{-k_0 q_m z} + c_m^- e^{k_0 q_m (z-d)}) \quad (2.106)$$

Hierbei sind w_m die Eigenvektoren und q_m die Wurzeln der Eigenwerte der Matrix Ω_1 .

Aus Gleichung 2.103 erhalten wir

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} U_x \\ \frac{\partial}{\partial z} U_y \end{pmatrix} = k_0 \underbrace{\begin{pmatrix} -K_x K_y & K_x^2 - [[\epsilon]] \\ [[\epsilon]] - K_y^2 & K_x K_y \end{pmatrix}}_{\Omega_2} \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \end{pmatrix} \quad (2.107)$$

Setzen wir Gleichung 2.106 in Gleichung 2.107 ein, dann erhalten wir

$$\begin{pmatrix} S_y \\ S_x \\ U_y \\ U_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -V\Phi^-(z) & V\Phi^+(z) \\ W\Phi^-(z) & W\Phi^+(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix}$$

Wobei $V = \Omega_2^{-1}WQ$, Q eine Diagonalmatrix aus den Wurzeln der Eigenwerte ist und Φ^+ und Φ^- Diagonalmatrizen mit den Elementen $e^{-k_0\sqrt{\lambda_m}z}$ und $e^{k_0\sqrt{\lambda_m}(z-d)}$ sind.

Zur Bestimmung der Beugungseffizienzen des Gitters müssen wir nun wie oben die Randbedingungen einsetzen. Hier betrachten wir nicht das globale kartesische Koordinatensystem, sondern das lokale Koordinatensystem der jeweiligen Beugungsordnung. R_s und R_p bzw. T_s und T_p sind dann die TE- und TM-Komponenten des reflektierten bzw. des transmittierten Feldes. Die Randbedingungen für die Tangentialkomponenten an der oberen Grenzfläche bei $z = 0$ liefern dann:

$$\begin{pmatrix} -D_\phi V & D_\phi V\Phi \\ -\tilde{D}_\phi W & \tilde{D}_\phi W\Phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{Z}_I \\ \hat{Y}_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_s \\ R_p \end{pmatrix} + L_{inc}$$

Zur kompakteren Darstellung wurden folgende Matrizen definiert:

$$D_\phi = \begin{pmatrix} F_c & -F_s \\ F_s & F_c \end{pmatrix}, \quad \tilde{D}_\phi = \begin{pmatrix} F_s & F_c \\ F_c & -F_s \end{pmatrix}, \quad \hat{Y}_I = \begin{pmatrix} iY_I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \hat{Z}_I = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & iZ_I \end{pmatrix}$$

F_c und F_s sind dabei Diagonalmatrizen mit den Elementen $\cos\phi_m$ und $\sin\phi_m$, wobei ϕ_m der Beugungswinkel der m -ten Ordnung ist. Y_I und Z_I sind ebenfalls Diagonalmatrizen mit den Elementen $\frac{\gamma_I}{k_0}$ und $\frac{\gamma_I}{k_0 n_I^2}$. Φ hat die Diagonalelemente $e^{-k_0\sqrt{\lambda_m}d}$, L_{inc} repräsentiert die einfallende Welle und ist gegeben durch:

$$L_{inc} = \begin{pmatrix} \sin\psi \delta_{m,0} \\ \cos\psi \cos\vartheta \delta_{m,0} \\ -i n_I \sin\psi \cos\vartheta \delta_{m,0} \\ i n_I \cos\psi \delta_{m,0} \end{pmatrix}$$

An der unteren Grenzfläche bei $z = d$ erhalten wir ebenfalls aus den Randbedingungen für die Tangentialkomponenten der Felder:

$$\begin{pmatrix} -D_\phi V\Phi & D_\phi V \\ -\tilde{D}_\phi W\Phi & -\tilde{D}_\phi W \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{Z}_{III} \\ \hat{Y}_{III} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_s \\ T_p \end{pmatrix}$$

Mit den Hilfsmatrizen:

$$\hat{Y}_{III} = \begin{pmatrix} -iY_{III} & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \hat{Z}_{III} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -iZ_{III} \end{pmatrix}$$

Y_{III} und Z_{III} sind Diagonalmatrizen mit den Elementen $\frac{\gamma_{III}}{k_0}$ und $\frac{\gamma_{III}}{k_0 n_{III}^2}$

Das Gleichungssystem in $8M$ Gleichungen und $8M$ Unbekannten könnte nun direkt gelöst werden. Wie im eindimensionalen Fall sollen nun aber zunächst wieder Gitterstapel betrachtet werden. Dasselbe Vorgehen wie im eindimensionalen Fall führt dann wieder zum Enhanced Transmittance Matrix Approach. Die Rekursionsformeln im zweidimensionalen Fall sind dann:

$$\begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} -D_{\phi,l}V_l & F_{l+1} \\ \tilde{D}_{\phi,l}W_l & G_{l+1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} D_{\phi,l}V_l\Phi_l \\ \tilde{D}_{\phi,l}W_l\Phi_l \end{pmatrix} \quad (2.108)$$

$$\begin{pmatrix} F_l \\ G_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -V_{1,l} - W_{1,l}a_l \\ V_{2,l} + W_{2,l}a_l \end{pmatrix} \quad (2.109)$$

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} W_{1,l} &= -D_{\phi,l}V_lX_l, & V_{1,l} &= -D_{\phi,l}V_l \\ W_{2,l} &= -\tilde{D}_{\phi,l}W_lX_l, & V_{2,l} &= -\tilde{D}_{\phi,l}W_l \end{aligned} \quad (2.110)$$

Mit den Startwerten $F_{L+1} = \hat{Z}_{III}$ und $G_{L+1} = \hat{Y}_{III}$ können die a_l und b_l , sowie die f_l und g_l wieder abwechselnd bestimmt werden. An der obersten Grenzschicht erhalten wir dann:

$$\begin{pmatrix} c_1^+ \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 & -\hat{Z}_1 \\ G_1 & \hat{Y}_1 \end{pmatrix}^{-1} L_{inc} \quad (2.111)$$

Hier bei ist $R = (R_s R_p)^T$. Wie bereits im eindimensionalen Fall gilt wieder:

$$c_l^- = a_l c_l^+$$

und

$$c_{l+1}^+ = b_l c_l^+$$

Damit können wir die Transmissionsamplituden $T = (T_s T_p)^T$ wieder aus den b_l bestimmen:

$$\mathbf{T} = \mathbf{b}_L \mathbf{b}_{L-1} \cdots \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_1^+ \quad (2.112)$$

Mit der zweidimensionalen RCWA und dem Enhanced Transmittance Matrix Approach lassen sich also beliebige zweidimensionale Gitterstapel simulieren. Im zweidimensionalen Fall ist aber in der Regel keine analytische Berechnung der Fourier-Koeffizienten und der Matrizen $[[\epsilon]]$ und $[[\epsilon]]$ mehr möglich. Zur Betrachtung einer beliebigen Gitterzelle betrachtet man diese dann auf einem kartesischen Raster, dies führt allerdings dazu, dass die Kontur der Gitterzelle durch eine Zickzack-förmige Linie approximiert wird, was zu Fehlern führen kann. Schuster benutzt hierfür ein Normalenvektorfeld, um dieser

Problematik entgegen zu treten und die Konvergenz zu erhöhen [49]. Allerdings ist es oft schwierig für beliebige Geometrien ein geeignetes Normalenvektorfeld zu generieren.

Granet verwendet eine adaptive Ortsauflösung in der RCWA, um eine Konvergenzverbesserung zu erreichen [50]. So können z.B. Kanten an den Gittern anschaulich durch mehr Moden approximiert werden.

Mit der RCWA lassen sich auf Grund der periodischen Randbedingungen nur periodische Probleme betrachten. Durch die Einführung eines *Perfectly Matched Layers* (PML) an den Grenzen der Einheitszelle, lässt sich allerdings die Kopplung der einzelnen Gitterperioden unterdrücken. So lassen sich dann mit der RCWA auch nichtperiodische Probleme betrachten [51, 52, 53].

Insbesondere bei zweidimensionalen Gittern bietet sich die Ausnutzung von Symmetrien an - eine symmetrische Gitterzelle führt auch zu Symmetrien in den gebeugten Feldern, so dass diese Symmetrien bei der Lösung des Gitterbeugungsproblems berücksichtigt werden können. Bai beschreibt eine Methode, mit der verschiedene Symmetrieklassen in der RCWA betrachtet werden können, so lässt sich die Rechenzeit für symmetrische zweidimensionale Probleme erheblich reduzieren [54, 55].

2.1.5 Gültigkeitsbereiche

Die oben vorgestellten Verfahren besitzen jeweils in einem bestimmten Bereich ihre Gültigkeit. Der Gültigkeitsbereich der Methoden soll hier analysiert und dargestellt werden.

Zunächst soll nochmals das sub- λ -Regime betrachtet werden. Ein Sub- λ -Gitter wirkt näherungsweise wie ein homogenes Medium und kann durch eine effektive Brechzahl beschrieben werden. Diese ist im einfachsten Fall nur abhängig von den Gittermaterialien und dem Füllfaktor des Gitters (siehe Gleichungen 2.45 und 2.46). Die Theorie von Rytov (Gl. 2.47) erweitert die Methode und führt eine Abhängigkeit von der Gitterperiode ein.

Beide Verfahren wurden mit einer elektromagnetischen Berechnung (RCWA) verglichen. Dazu wurde zunächst die effektive Brechzahl für das Sub- λ Gitter berechnet und dann die Transmission über die Mehrschichttheorie bestimmt. Abbildung 2.10 zeigt das Ergebnis des Vergleichs, aufgetragen ist die Beugungseffizienz bzw. die Transmission über der Gitterperiode in Einheiten der Wellenlänge (logarithmische Darstellung). Für das Beispiel wurde ein binäres Gitter mit Füllfaktor 0.5, Brechungsindex 1.5 und Gitterhöhe = λ betrachtet. Der Brechungsindex über dem Gitter betrug 1.5, im transmittierten Bereich wurde Vakuum angenommen.

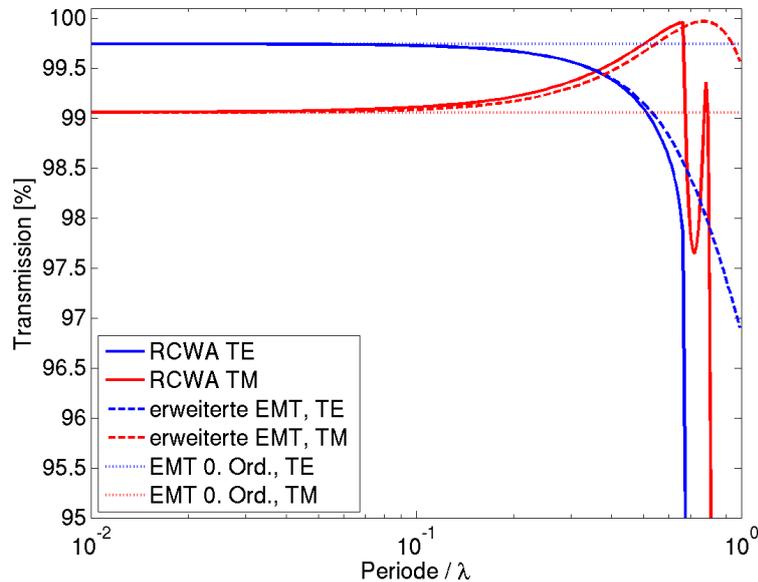


Abbildung 2.10: Vergleich der Effektiv Medium Theorie mit elektromagnetischer Simulation

Man sieht, dass die elektromagnetische Simulation und die Effektiv Medium Theorie (siehe Abschnitt 2.1.4.2) für Perioden $< 0.1\lambda$ gut übereinstimmen. Hier hängt die Beugungseffizienz (bzw. die Transmission der Schicht) kaum mehr von der Periode ab. Für größere Gitterperioden erkennt man eine Abhängigkeit von der Periode. Die EMT zweiter Ordnung beschreibt dies recht gut bis etwa 0.5λ . Danach gibt es große Abweichungen zwischen der Effektiv Medium Theorie und der RCWA Berechnung. Ein umfangreicher Vergleich der Effektiv Medium Theorien mit der rigorosen Berechnung wird auch von Richter betrachtet [56].

Nun betrachten wir Gitterperioden $> \lambda$, die Simulationsbedingungen sind identisch wie oben. In Abbildung 2.11 ist der Vergleich der elektromagnetischen Simulation und zweier Näherungsverfahren dargestellt. Zum einen die klassische skalare Theorie (grün) und zum anderen die „vektorielle“ Erweiterung (vgl. 2.1.3.4) der Kirchhoff’schen Näherung VTEA (cyan).

Man sieht, dass bis zu einer Periode kleiner 10λ deutliche Polarisierungseffekte auftreten. Hier weicht die elektromagnetische Lösung deutlich von den Näherungen ab. Sowohl die skalare Theorie als auch die VTEA sind unabhängig von der Gitterperiode, so dass der Abfall der Effizienz der 1. Beugungsordnung bzw. der Anstieg der 0. Beugungsordnung für kleine Gitterperioden hier nicht auftreten. Es gibt aber auch Erweiterungen der skalaren Theorie, die diesen Effekt in Form einer geometrischen Abschattung versuchen zu berücksichtigen [57]. Für große Perioden nähert sich die elektromagnetische Lösung,

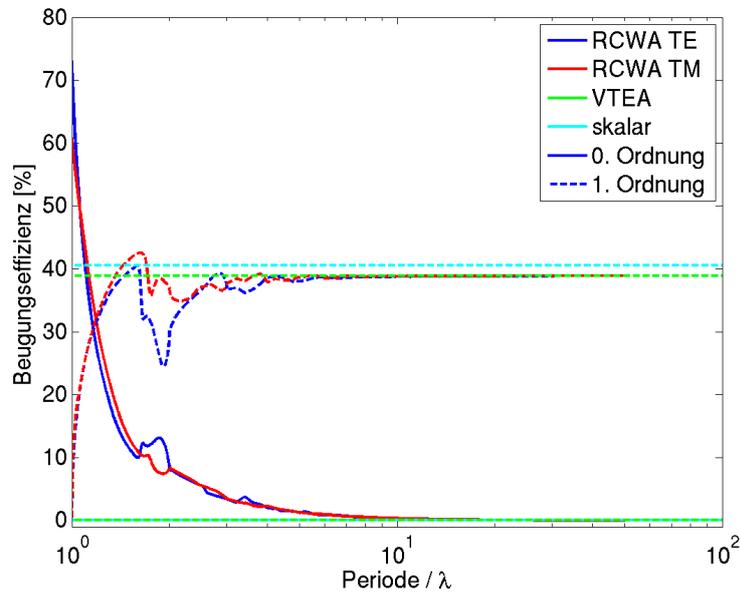


Abbildung 2.11: Vergleich elektromagnetische Simulation mit Näherungsverfahren

dann dem VTEA-Wert an. Der Wert der skalaren Näherung für die erste Ordnung ist etwas zu hoch, da hier die Fresnelreflexion am Gitter nicht berücksichtigt wird.

Die hier geführte Untersuchung soll lediglich ein qualitatives Verständnis für die Notwendigkeit der elektromagnetischen Betrachtung wecken. Eine genauere Betrachtung der Grenzen der skalaren Beugungstheorie wird z.B. von Pommet durchgeführt [58]. Im Fall von zweidimensionalen Beugungsgittern gibt es vergleichbare Ausführungen von Glytsis [59].

2.2 Anwendungsgebiete von Beugungsgittern

In diesem Abschnitt sollen zunächst einige Anwendungsgebiete von Beugungsgittern und diffraktiven Elementen vorgestellt werden. Die verschiedenen Anwendungen sind sicherlich nahezu unbegrenzt, so dass hier nur ein exemplarischer Einblick gegeben werden kann. Eine umfangreiche Darstellung von vielen Anwendungen findet sich z.B. bei Turunen [60]. Einen Überblick bietet auch der Artikel von Kleemann und Ruoff [61]. Dieser Abschnitt soll einen Überblick über die verschiedenen Anwendungen und die damit verbundenen Anforderungen an die Elemente bieten. Außerdem werden einige elektromagnetische Effekte betrachtet, die bei hochfrequenten Gittern auftreten können. Die in den späteren Abschnitten untersuchten Gitterstrukturen werden ebenfalls in diesem Abschnitt beschrieben.

2.2.1 Spektroskopie

Ein klassisches Anwendungsgebiet von Beugungsgittern ist die Spektroskopie. Dort werden Gitter benutzt, um Licht in seine spektralen Bestandteile zu zerlegen. Im Vergleich zu Prismen sind Beugungsgitter hierfür bis zu hundert mal effektiver [60]. Vermutlich war die Spektroskopie auch die erste Anwendung von Beugungsgittern. Fraunhofer benutzte Beugungsgitter, um die Absorptionslinien des Sonnenlichts zu bestimmen [62].

Im Spektrometer wird das Licht von einer Apertur (z.B. ein Schlitz) am Eingang des Instruments durch eine Linse oder einen Spiegel kollimiert und auf das Beugungsgitter abgebildet. Durch eine zweite Linse oder einen Spiegel wird das Licht dann fokussiert. Durch die Dispersion des Gitters ist die laterale Position des Fokus abhängig von der Wellenlänge. Rowland hat diesen Aufbau vereinfacht, in dem er das plane Beugungsgitter durch ein konkaves Gitter ersetzt hat. Liegt die Quelle auf einem Kreis, der den halben Radius der Krümmung des Gitters hat, so wird das Spektrum ebenfalls auf den Kreis abgebildet [60]. Man bezeichnet den in Abbildung 2.12 skizzierten Aufbau daher auch als Rowland Kreis.

Ein Hauptkriterium für die Anwendung von Gittern in spektroskopischen Anwendungen ist die Beugungseffizienz. Man nutzt meistens nur eine Beugungsordnung des Gitters, daher sind geblazete ideal, die das einfallende Licht möglichst vollständig in eine Ordnung beugen. Die Winkeldispersion des Beugungsgitters ergibt sich aus der Ableitung der Gittergleichung (hier für senkrechten Einfall):

$$\nu = \frac{d\vartheta}{d\lambda} = \frac{m}{P \cdot \cos \vartheta} = \frac{m}{\sqrt{P^2 - (m\lambda)^2}}$$

Somit wäre für eine maximale Dispersion in der ersten Ordnung eine Periode nahe der Wellenlänge notwendig. Hier treten dann aber elektromagnetische Effekte auf (siehe

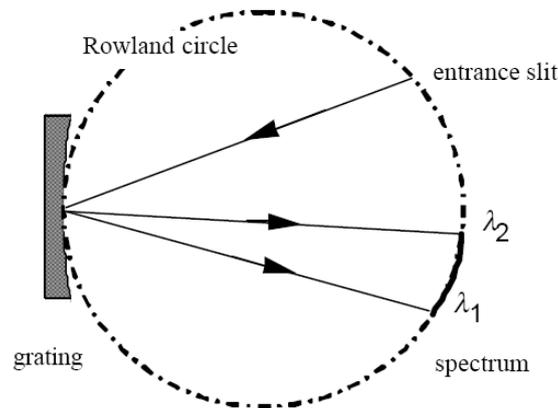


Abbildung 2.12: Rowland Kreis (Quelle: Palmer [62])

Abschnitt 2.3). Daher werden für Spektrometer oft Gitter eingesetzt, die für eine sehr hohe Beugungsordnung geblazet sind und somit moderate Gitterperioden aufweisen.

2.2.2 Interferometrie

Die Interferometrie ist ein weiteres Anwendungsgebiet von diffraktiv optischen Elementen. Dort werden diffraktive Elemente - so genannte Computer generierte Hologramme (CGH) - als Null-Linse eingesetzt [63, 64]. Sie werden am Rechner entsprechend der zu prüfenden Fläche ausgelegt. Insbesondere zur Prüfung von asphärischen Linsen, wie sie beispielsweise in Lithographie-Objektiven eingesetzt werden, werden Computer generierte Hologramme eingesetzt [65, 66]. Im Interferometer (Abb. 2.13) sorgt das Hologramm (Fall b) bzw. mit einer zusätzlichen refraktiven Optik (Fall c) dafür, dass die Prüfwelle senkrecht auf den meist asphärischen Prüfling fällt und wieder in sich zurück reflektiert wird. Als Ergebnis erhält man dann die Abweichung des Prüflings von der Sollform, die in das Hologramm kodiert wurde.

Herstellungsfehler im Hologramm wirken sich direkt auf die Wellenfront aus und sind im Interferometer zunächst nicht von den Fehlern des Prüflings zu trennen. Daher ist eine präzise Herstellung der Hologramme notwendig, die Beugungseffizienz ist für die Performance weniger entscheidend. Der Einfluss von Herstellungsfehler auf die Phase und damit die Wellenfront von Computer generierten Hologrammen wurde beispielsweise von Chang [67] und Zhou [68] untersucht.

Die lokale Gitterperiode des diffraktiven Elements hängt von der lokalen Krümmung der zu prüfenden Fläche ab. Für hohe Krümmungen sind große Ablenkwinkel und damit kleine Gitterperioden notwendig. In diesem Fall müssen dann unter Umständen elektromagnetische Phasen- und Amplitudeneffekte berücksichtigt werden.

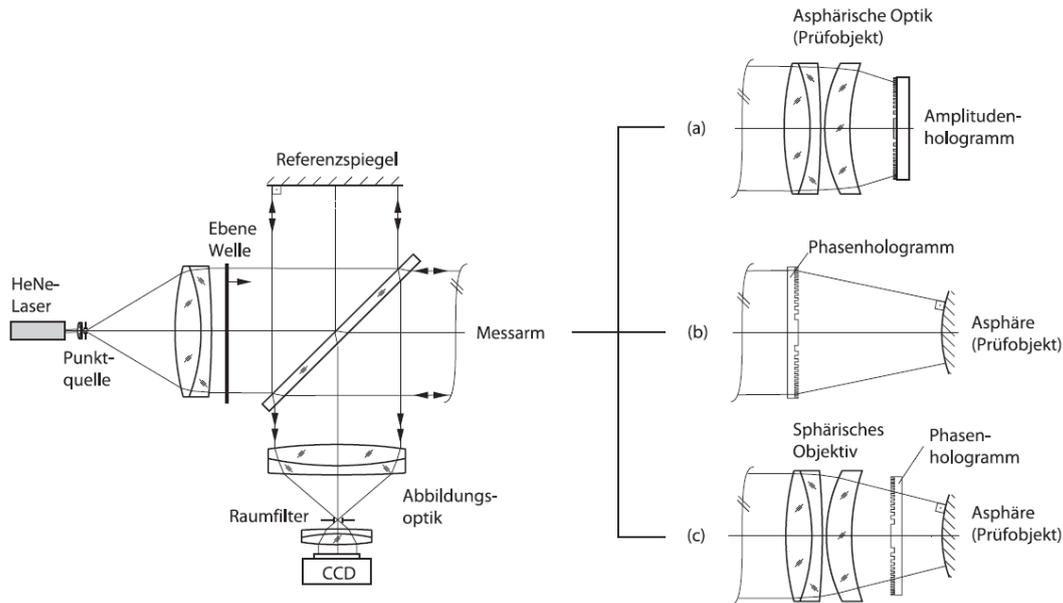


Abbildung 2.13: Interferometer zur Asphärenprüfung (Quelle: Reichelt [64])

2.2.3 Chromatische Korrektur

Die wohl bekannteste Anwendung von diffraktiven Elementen in optischen Systemen ist die Korrektur von chromatischen Fehlern [60, 69]. Die Gittergleichung (Gl. 2.34) führt dazu, dass diffraktive Linsen ein sehr große Dispersion aufweisen. Im Vergleich zu refraktiven Linsen ist das Korrekturpotential daher enorm.

Betrachtet man eine diffraktive sphärische Linse (Abb. 2.14), so ergibt sich geometrisch folgende Beziehung für die lokale Gitterperiode (für die erste Beugungsordnung):

$$P(r) = \frac{f}{r} \lambda - \lambda$$

Für Linsen mit geringer numerischer Apertur kann der zweite Term vernachlässigt werden und damit ist:

$$P(r) \approx \frac{f}{r} \lambda$$

Die Abbezahl einer Linse, die die Dispersionseigenschaften beschreibt, ergibt sich aus der Brechkraft $\varphi = \frac{1}{f}$ der Linse bei den Wellenlängen $\lambda_d = 587.6 \text{ nm}$, $\lambda_F = 486.1 \text{ nm}$ und $\lambda_C = 656.3 \text{ nm}$:

$$V = \frac{\varphi_d}{\varphi_F - \varphi_C} = \frac{n_d - 1}{n_F - n_C} \quad (2.113)$$

Für herkömmliche Materialien lassen sich damit Werte im Bereich von ca. 25-70 erreichen [57]. Da die Abbezahl für alle Materialien positiv ist, lässt sich eine chromatischen

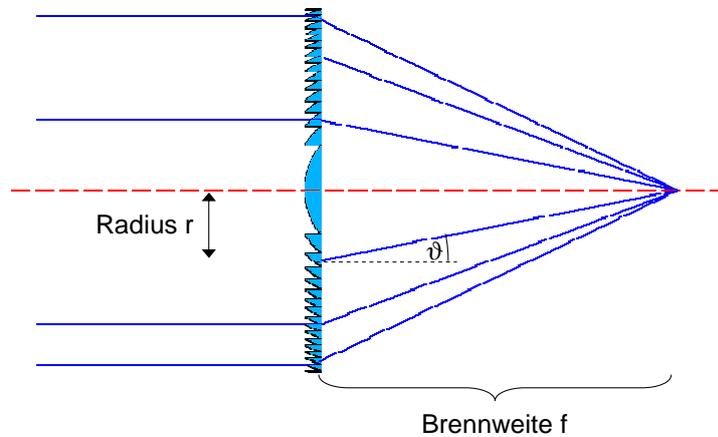


Abbildung 2.14: Diffraktive Linse

Korrektur nur durch Kombination einer Linse mit einer positiven und einer negativen Krümmung erreichen. Betrachten wir nun die Abbe-Zahl einer diffraktiven Linse. Die Brechkraft der Linse ist:

$$\varphi = \frac{\lambda}{Pr}$$

Setzen wir dies in die Gleichung für die Abbezahl ein, bleibt nur das Verhältnis der Wellenlängen übrig:

$$V = \frac{\lambda_d}{\lambda_F - \lambda_C} = -3.45 \quad (2.114)$$

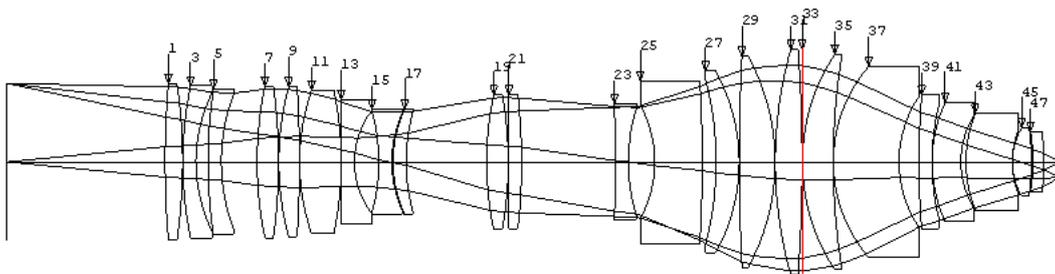


Abbildung 2.15: Lithographieobjektiv mit diffraktivem Element nach Tezuka [70]

Abbildung 2.15 zeigt ein Lithographieobjektiv, das ein diffraktives Element (rot dargestellt) enthält. Es dient zur Achromatisierung des Objektivs und reduziert die chromatischen Bildfehler. Das diffraktive Element muss auch kein eigenständiges Element sein, sondern kann beispielsweise auch auf eine Linsenoberfläche aufgebracht werden. Man spricht dann von hybriden Systemen [71]. Solch ein Element ist z.B. auch in einem Fotoobjektiv der Firma Canon enthalten. Dadurch können Linsen eingespart werden und das Objektiv wird damit ca. 30 % kleiner und leichter[72].

2.2.4 Lithographie-Masken

Bei der lithographischen Herstellung von Halbleiterstrukturen wird die Struktur einer Maske meist vierfach verkleinert auf den Wafer abgebildet. Bei den Strukturen handelt es sich oft um periodische Elemente, da auf einem Chip oft viele gleiche Elemente, wie z.B. Speicherzellen, nebeneinander vorkommen. Auf der Maske befindet sich dann im Wesentlichen ein Liniengitter, das bestimmt an welchen Stellen der Fotolack auf dem Wafer belichtet werden soll. Die Masken können also lokal als Beugungsgitter betrachtet werden.

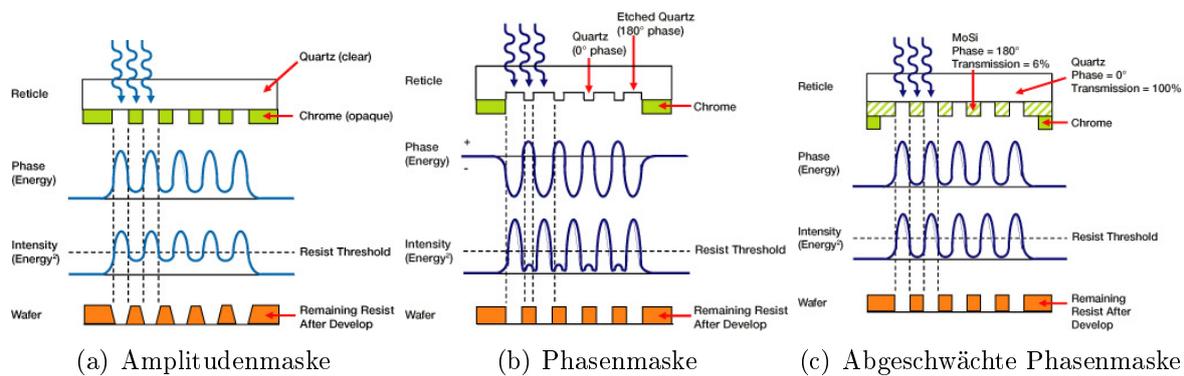
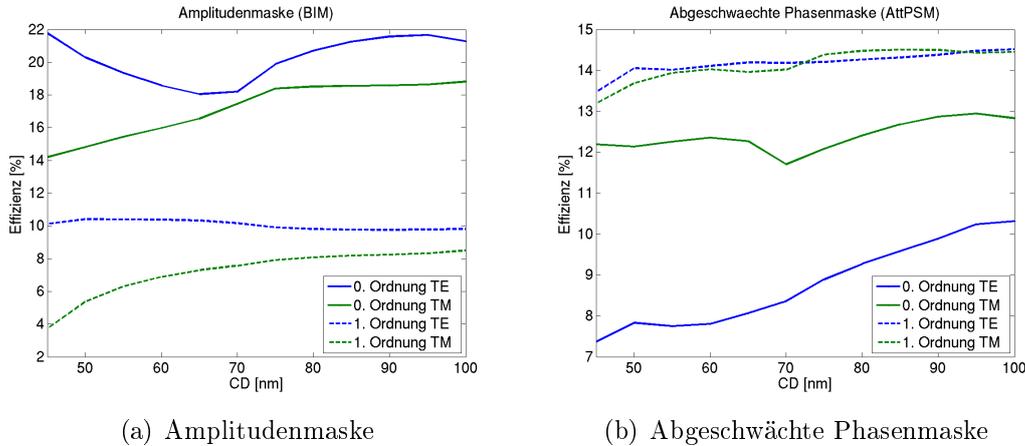


Abbildung 2.16: Lithographiemasken (Quelle: ASML [73])

In Abbildung 2.16 sind verschiedene Typen von Lithographiemasken dargestellt. Links eine klassische Amplitudenmaske (Binary Intensity Mask, BIM). Sie besteht aus Chromstrukturen auf einem Quarz-Substrat. Die undurchsichtigen Metallstege bilden ein Amplitudengitter. In der Mitte ist eine Phasenmaske (Alternating Phase Shift Mask, Alt-PSM) gezeigt, hier wurde das Amplitudengitter durch ein binäres Phasengitter ersetzt. Die Gitterhöhe ist so gewählt, dass sie genau eine Phasenverzögerung von 180° bewirkt und damit bei einem Steg-zu-Lücke Verhältnis von 1:1 die 0. Beugungsordnung unterdrückt werden soll. Die Verwendung von Phasenmasken hat insbesondere den Vorteil, dass nahezu alles Licht transmittiert und nicht von der Maske absorbiert wird. Der dritte Maskentyp, der rechts dargestellt ist, ist eine abgeschwächte Phasenmaske (Attenuated Phase Shift Mask, AttPSM). Das Phasengitter besitzt jetzt zusätzlich eine Amplitudenabschwächung, die dazu führt, dass der Kontrast gesteigert wird, indem die Intensität der verschiedenen Beugungsordnungen angeglichen wird.

Mit der zunehmenden Schrumpfung der Halbleiterstrukturen werden auch die Strukturen auf den Masken immer kleiner, so dass hier unter anderem Polarisierungseffekte berücksichtigt werden müssen [74]. Auch die reale Topographie muss z.B. mit Hilfe von elektromagnetischen Simulationen modelliert werden [75].



(a) Amplitudenmaske

(b) Abgeschwächte Phasenmaske

Abbildung 2.17: Beugungseffizienz von Lithographiemasken

Im Rahmen dieser Arbeit wurde als Beispiel die Beugungseffizienz der -1. und 0. Ordnung von zwei verschiedenen Lithographiemaskentypen wurde elektromagnetisch berechnet, das Ergebnis ist in Abbildung 2.17 dargestellt (Simulationsparameter: $\lambda = 193 \text{ nm}$, Periode = $8 \cdot \text{CD}$). Für verschiedene Werte der Critical Dimension (CD) - das ist die kleinste Strukturgröße, die noch abgebildet werden kann - wurde jeweils für TE- (blau) und TM-polarisiertes (grün) Licht die Beugungseffizienz bestimmt. Es ist zu erkennen, dass sich die Beugungseffizienz für die beiden Polarisationsrichtungen - insbesondere für sehr kleine Strukturen - deutlich unterscheidet. Bei der Amplitudenmaske ist die Effizienz der 0. und der -1. Ordnung sehr unterschiedlich, was zu einem schlechten Kontrast in der Abbildung führt. Dies versucht die abgeschwächte Phasenmaske durch eine Angleichung der Ordnungen zu erreichen. Die maximale Differenz der Beugungseffizienz zwischen 0. und 1. Ordnung wird damit von ca. 10 % auf ungefähr 4-6 % reduziert.

2.2.5 Sub- λ Gitter als Entspiegelungsschicht

Betrachtet man ein Sub- λ Gitter, also ein Gitter dessen Gitterperiode kleiner als die Wellenlänge ist, so ist dies kein Beugungsgitter im eigentlichen Sinne mehr, da nur noch die 0. Beugungsordnung ausbreitungsfähig ist. Trotzdem bieten solche „Gitter“ interessante Eigenschaften. Wie im Abschnitt 2.1.4.2 gezeigt, verhalten sich Sub- λ Gitter wie ein anisotropes, homogenes Medium. Der effektive Brechungsindex der Struktur ist abhängig von Füllfaktor des Gitters. Somit lassen sich beliebige Brechzahlen zwischen der Brechzahl der Gitterstege und der Brechzahl der Lücken (meist Luft, also Brechzahl gleich 1) realisieren. Dies kann z.B. für Entspiegelungsschichten genutzt werden, da herkömmliche Materialien nur mit bestimmten Brechzahlen verfügbar sind [76].

Betrachtet man kein lineares Sub- λ Gitter, sondern ein zweidimensionales Gitter, kann

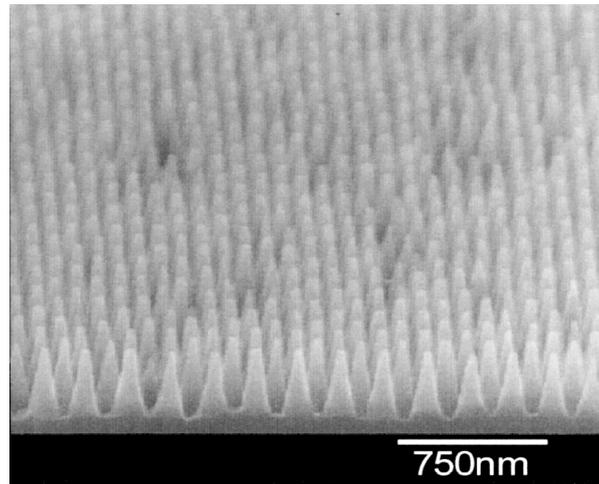


Abbildung 2.18: Sub- λ Antireflex Beschichtung (Quelle: Kanamori [77])

der Füllfaktor in x- und in y-Richtung unterschiedlich gewählt werden, so dass das effektive Medium isotrope Polarisations-eigenschaften bekommt. Bei Grann [78] beispielsweise werden verschiedene zweidimensionale Sub- λ Gitter als Anti-Reflex-Schicht verglichen.

Da Sub- λ Gitter nur als effektives Medium wirken ist die exakte Kenntnis der Gitterparameter oft nicht so entscheidend. Lediglich der lokale Füllfaktor verändert die effektive Brechzahl und damit die Wirkung des Gitters. Außerdem wird über die Höhe des Gitters die Phase beeinflusst.

2.2.6 Diffraktiv geblazete Gitter

2.2.6.1 Eindimensionale, diffraktiv geblazete Gitter

Die Eigenschaft, dass sich über ein Sub- λ -Gitter eine effektive Brechzahl realisieren lässt, kann auch genutzt werden, um Brechzahlverläufe zu realisieren. So kann man mit Hilfe eines Sub- λ -Gitters mit ansteigendem Füllfaktor eine Brechzahl- und somit eine Phasenrampe erzeugen, wodurch sich z.B. mit einem binären Gitter ein Blaze realisieren lässt [79, 80, 81].

Die Gitterperiode Λ wird, wie in Abbildung 2.19 dargestellt, in Sub-Perioden Λ_s eingeteilt. Innerhalb dieser Perioden wird der Füllfaktor zwischen 0 und 1 variiert, so dass die effektive Brechzahl der Sub-Perioden zwischen 1 und n_{max} variiert. Die Gitterhöhe wird so gewählt, dass sich der für den Blaze notwendige Phasenhub ergibt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden verschiedene Arten von geblazeten Gittern miteinander verglichen. Abbildung 2.20 zeigt beispielhaft die elektromagnetisch berechnete

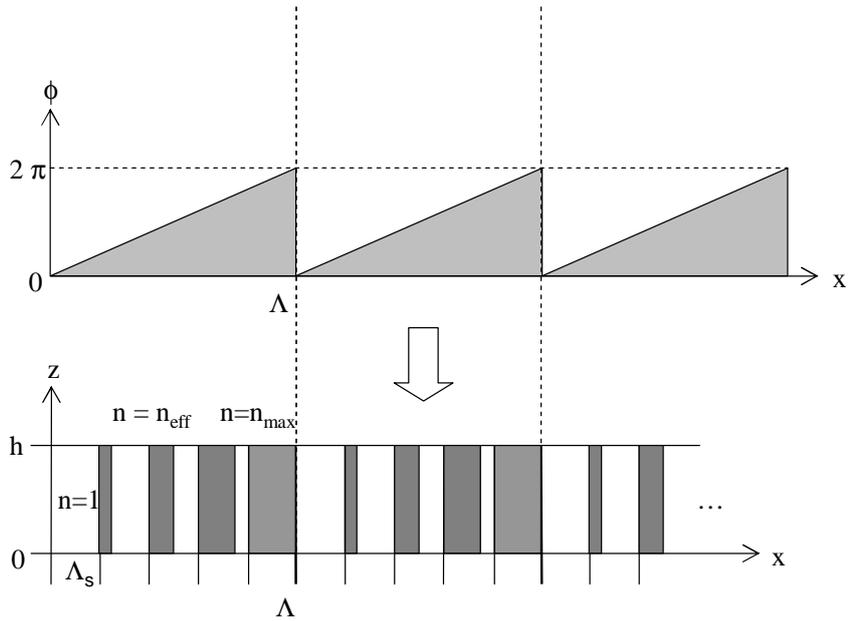


Abbildung 2.19: Diffraktiv geblazetes Gitter

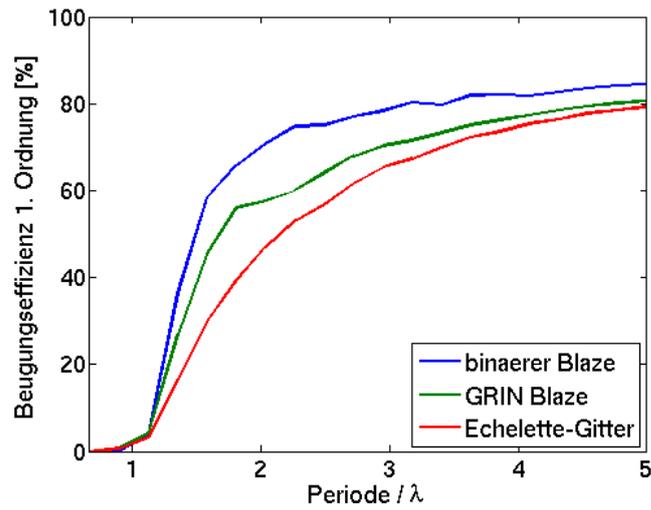


Abbildung 2.20: Beugungseffizienz verschiedener Blazegitter

Beugungseffizienz eines solchen binär geblazeten Gitters (blau). Zum Vergleich ist die Effizienz eines Oberflächenblazegitters (rot) und eines Gradientenindex-Gitters (grün) dargestellt. Die Effizienz des diffraktiv geblazeten Gitters ist insbesondere für kleine Gitterperioden am höchsten, für große Perioden nähern sich die Werte aneinander an. Lalanne hat gezeigt, dass sich mit einem zweidimensionalen Gitter z.B. für eine Periode von 3λ eine 12 % höhere Effizienz als mit herkömmlichen Echelettegittern realisieren lässt [82]. Das gleiche Prinzip kann auch benutzt werden, um eine binäre diffraktive Linse zu realisieren [83, 84, 85].

2.2.6.2 BLACES

Ein weiteres Beispiel für einen sub- λ Blaze sind die so genannten Blazed area-coded effective medium structures (BLACES) [86, 87], Abbildung 2.21 zeigt die Struktur der BLACES. Das zweidimensionale Gitter besitzt eine Periode, die größer als die Wellenlänge (hier in x-Richtung) ist, und eine Periode, die kleiner als die Wellenlänge (hier in y-Richtung) ist. Das Sub- λ -Gitter bewirkt wie oben eine effektive Brechzahl, so dass das binäre Gitter in der Wirkung einem geblazten Oberflächengitter entspricht. Solche Gitter wurden auch experimentell hergestellt und deren Funktionsprinzip erfolgreich demonstriert [88]. Im Vergleich zu den oben beschriebenen diffraktiv geblazten Gittern bietet die BLACE-Struktur Vorteile bei der Herstellung, da die feinen Strukturen der diffraktiv geblazten Gitter recht schwierig herzustellen sind.

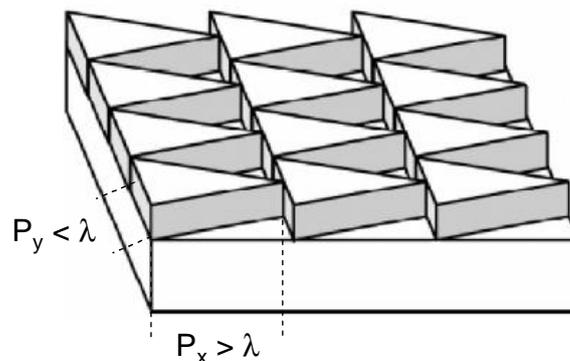


Abbildung 2.21: Struktur der BLACES

Abbildung 2.22 zeigt die im Rahmen dieser Arbeit elektromagnetisch berechnete Beugungseffizienz eines zweidimensionalen BLACE-Gitters, verglichen mit einem konventionell geblazten 1D-Gitter. Es wurde das Beispiel von Kleemann [86] gewählt: $\lambda = 633\text{nm}$, $n = 2.3$, $n_{\text{Superstrat}} = 1$, $n_{\text{Substrat}} = 1.457$, $h = \frac{\lambda}{n-1}$. Die Effizienz der BLACES ist dabei für kleine Perioden höher als beim konventionell geblazten Gitter. Dies ist anschaulich verständlich, da beim konventionell geblazten Gitter Abschattungseffekte auftreten [89],

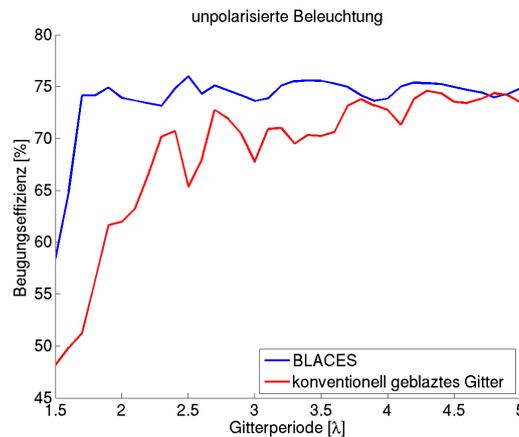


Abbildung 2.22: Beugungseffizienz der BLACES

die durch die binäre Struktur reduziert werden. Die Strukturen können zur Realisierung von polarisationssensitiven Elementen verwendet werden [90].

2.2.7 Zweidimensionale Gitter

Die oben beschriebenen BLACES stellen bereits ein zweidimensionales Beugungsgitter dar. Allerdings ist hier eine Periode kleiner als die betrachtete Wellenlänge, so dass hier nur die Periode, die größer als die Wellenlänge ist, Beugungsordnungen bewirkt. Wir betrachten nun Gitter, die zwei Perioden aufweisen, die größer als die jeweilige Wellenlänge sind, und damit auch Beugungsordnungen in zwei Dimensionen besitzen.

Eine klassische Anwendung für solche Gitter sind Strahlteiler: dadurch, dass das Licht in x- und in y-Richtung gebeugt wird, kann das Licht leicht in mehrere Teile aufgeteilt werden. Kawatsuki verwendet so ein Gitter als Strahlteiler bzw. Polarisationsstrahlteiler, um die Größe eines Schreib-/Lesekopfes des magneto-optischen Speichersystems zu verkleinern [91]. Die ersten Veröffentlichungen zu solchen Gittern stammen von Dammann [92]. Das Design von solchen binären zweidimensionalen Gittern, die auch als Array Generators bezeichnet werden [93], wird z.B. von Mait [94] und Vasara [95] betrachtet. Um eine höhere Effizienz zu erzielen, werden auch mehrstufige Elemente [96] oder so genannte Kinoform-Elemente eingesetzt [97, 98, 99]. Abbildung 2.23 zeigt die Anwendung eines solchen Gitters zur Erzeugung eines Spot-Arrays.

Anstatt einen Strahl in mehrere Teilstrahlen aufzuspalten, können zweidimensionale Gitter auch für die umgekehrte Anwendung benutzt werden. Leger beschreibt z.B. einen Aufbau mit einem zweidimensionalen Beugungsgitter, der das Licht aus einem Laserarray zu einem Strahl bündeln soll [100].

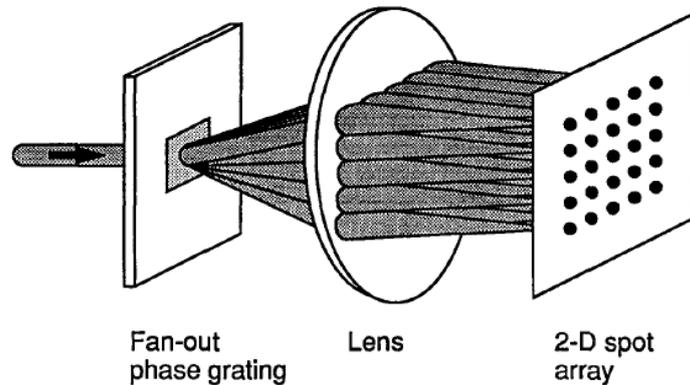


Abbildung 2.23: Anwendung eines zweidimensionalen Gitters zur Erzeugung eines Spot-Arrays (Quelle: Gale [98])

Die oben beschriebenen Lithographiemasken wurden bis jetzt als eindimensionale Gitter betrachtet. Dies ist in vielen Fällen auch zulässig, allerdings gibt es auch Strukturen, bei denen man die Masken als zweidimensionale Gitter modellieren muss. Dies sind z.B. die Masken für die so genannten Kontaktlöcher. Abbildung 2.24 zeigt eine schematische Darstellung einer solchen Maske.

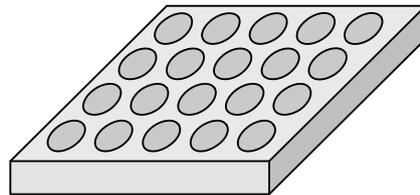


Abbildung 2.24: Maske für Kontaktlöcher

Auch bei der Betrachtung von eindimensionalen Gittern gibt es Fälle, bei denen man das Gitter als zweidimensionales Gitter betrachtet. Möchte man z.B. den Einfluss der Kantenrauheit untersuchen, so kann man diese Rauheit modellieren, indem man die Breite der Gitterlinien variiert [101]. Außer den hier beschriebenen Anwendungen gibt es noch viele weitere Gebiete auf denen zweidimensionale Beugungsgitter zum Einsatz kommen. Bei der Betrachtung des Schreib- und Lesevorgangs auf optischen Datenträgern beispielsweise werden elektromagnetische Methoden zur Analyse eingesetzt. Der strukturierte Datenträger kann dabei als zweidimensionales Gitter betrachtet werden [102].

2.3 Einfluss der Gitterstruktur

Im vorherigen Abschnitt wurden verschiedene Anwendungsgebiete von diffraktiven Elementen und Beugungsgittern vorgestellt. Dabei gibt es viele unterschiedliche Anforderungen an das verwendete Element. In diesem Abschnitt soll nun der Einfluss verschiedener Gitterparameter auf die Performance des diffraktiven Elements untersucht werden. Daraus können dann Genauigkeitsanforderungen für die oben beschriebenen Anwendungen abgeleitet werden. Darüber hinaus soll ermittelt werden, welche Messgrößen sensitiv bezüglich der Gitterparameter sind, um später ein geeignetes Verfahren für die Lösung des inversen Problems (siehe Kapitel 3) abzuleiten.

Außerdem soll hier nochmals der Vergleich zur skalaren Berechnung durchgeführt werden. Die skalare Theorie liefert zwar für kleine Gitterperioden nicht die exakte Lösung, kann aber in vielen Fällen für das Verständnis der grundlegenden Zusammenhänge hilfreich sein. In diesem Abschnitt soll primär der Einfluss der Herstellungsfehler auf die Beugungseffizienz betrachtet werden, weniger auf die Phasenwirkung. Es gibt allerdings auch Anwendungen bei denen die Phase des Elements eine entscheidende Rolle spielt, wie z.B. bei der Anwendung in der Interferometrie.

Im Folgenden wird in den meisten Beispielen ein binäres Phasengitter betrachtet, da dieses auf Grund der einfachen Herstellung in vielen Anwendungen eingesetzt wird. Im Vergleich zu Amplitudengittern bieten Phasengitter zudem den Vorteil, dass kein Licht absorbiert wird, sondern die ganze eingestrahlte Lichtleistung auf reflektierte und transmittierte Beugungsordnungen verteilt wird.

2.3.1 Gitterhöhe

Wir untersuchen zunächst den Einfluss der Gitterhöhe. Skalar betrachtet wirkt sich die Gitterhöhe direkt auf die Phase der einzelnen Ordnungen aus, da ja das Gitter als infinitesimal dünnes Element betrachtet wird und dessen Phase sich aus dem Produkt der Gitterhöhe und der Brechzahl des Gitters ergibt. Betrachten wir ein binäres Gitter mit Periode P und Füllfaktor f , dann ist der Brechzahlverlauf wie folgt:

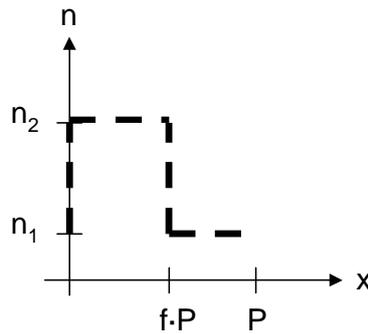


Abbildung 2.25: Brechzahlverlauf eines binären Phasengitters

Zur Vereinfachung betrachten wir ein Gitter, das nur aus einem Material besteht, die Zwischenräume zwischen den Gitterstegen seien mit Luft gefüllt, also $n_1 = 1$. Die Phase, die die Gitterstege bewirken, ist dann für eine Gitterhöhe von d :

$$\phi_0 = \frac{n_2 \cdot d - d}{\lambda} 2\pi \quad (2.115)$$

Der Phasenverlauf ist dann damit:

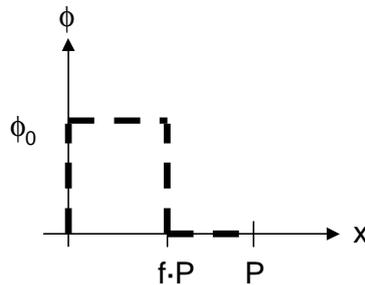


Abbildung 2.26: Phase eines skalaren Phasengitters

Die Transmissionsfunktion des dünnen Phasenelements ist also:

$$t(x) = \begin{cases} e^{i\phi_0} & 0 \leq x \leq f \cdot P \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.116)$$

Betrachten wir nun zunächst die komplexe Amplitude der 0. Ordnung. Wir erhalten

dann:

$$\begin{aligned}
 c_0 &= \frac{1}{P} \int_P t(x) dx \\
 &= \frac{1}{P} \int_0^{fP} e^{i\phi_0} dx + \frac{1}{P} \int_{fP}^P 1 dx \\
 &= \frac{1}{P} [e^{i\phi_0} fP + (P - fP)] \\
 &= f \cdot e^{i\phi_0} + (1 - f)
 \end{aligned} \tag{2.117}$$

Betrachten wir die Intensität der 0. Ordnung erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 I_0 &= |c_0|^2 \\
 &= |f \cdot e^{i\phi_0} + (1 - f)|^2 \\
 &= \dots \\
 &= (1 - f)^2 + f^2 + 2(1 - f)f \cos(\phi_0)
 \end{aligned} \tag{2.118}$$

Für einen festen Füllfaktor f besteht also eine kosinusförmige Abhängigkeit von der Phase und damit der Gitterhöhe.

Für die komplexe Amplitude der ersten Ordnung erhalten wir dann

$$c_1 = \frac{1}{P} \int_P t(x) e^{-2\pi i \frac{x}{P}} dx \tag{2.119}$$

$$= \frac{1}{P} \int_0^{fP} e^{i\phi_0} e^{-2\pi i \frac{x}{P}} dx + \frac{1}{P} \int_{fP}^P e^{-2\pi i \frac{x}{P}} dx \tag{2.120}$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} (e^{i\phi_0} (e^{-2\pi i f} - 1) + (1 - e^{-2\pi i f})) \tag{2.121}$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} (1 - e^{-2\pi i f}) (e^{i\phi_0} - 1) \tag{2.122}$$

2.3.1.1 Elektromagnetische Betrachtung

Nun soll der Einfluss der Gitterhöhe elektromagnetisch betrachtet werden. Abbildung 2.27 zeigt das Ergebnis der elektromagnetischen Berechnung der Beugungseffizienzen (RCWA) über der Gitterhöhe, exemplarisch wurde ein binäres Phasengitter mit Füllfaktor 0.3 betrachtet. Für große Gitterperioden (links) passen die skalare und die elektromagnetische Berechnung noch recht gut. Für kleinere Perioden gibt es größere Abweichungen. Trotzdem ist qualitativ noch der kosinusförmige Verlauf der Kurve zu erkennen. Für das Gitter mit Periode $P = 2 \mu m$ (rechts) sind deutliche Unterschiede für die beiden Polarisationsrichtungen zu erkennen.

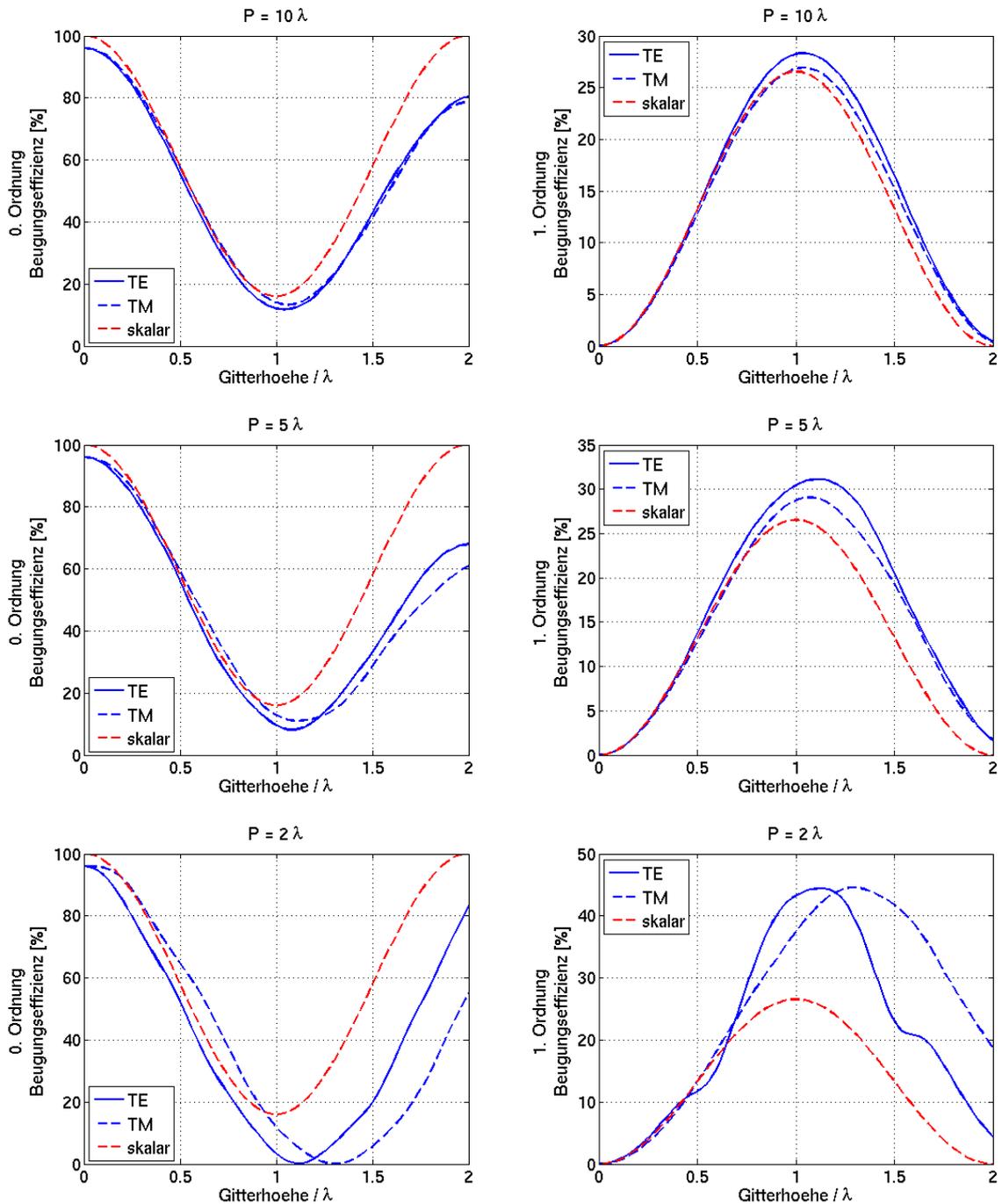


Abbildung 2.27: Abhängigkeit der Beugungseffizienz der 0. und 1. Beugungsordnung von der Gitterhöhe

2.3.2 Brechungsindex

Bei der skalaren Betrachtung eines binären Phasenelements sind Brechungsindex und Gitterhöhe gekoppelt. Sie wirken sich über die Beziehung $\phi_0 = \frac{(n_2-1) \cdot d}{\lambda} 2\pi$ nur auf die Phase des Elements aus. Bei genauerer Betrachtung führt allerdings ein anderer Brechungsindex zu anderen Reflexionseigenschaften, die allerdings bei der klassischen skalaren Betrachtung nicht berücksichtigt werden. Betrachtet man die reine Fresnel-Reflexion an einer planaren Luft-Material Grenzfläche, so steigt die Reflexion mit wachsender Brechzahl bei senkrechtem Einfall:

$$\mathfrak{R} = \left(\frac{1 - n}{1 + n} \right)^2 \quad (2.123)$$

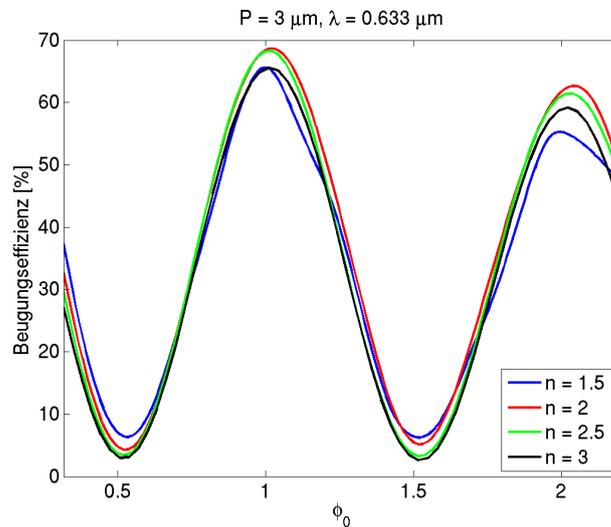


Abbildung 2.28: Elektromagnetische Betrachtung von Brechzahl und Gitterhöhe

In Abbildung 2.28 ist die Beugungseffizienz der 0. Beugungsordnung eines binären Phasengitters ($P = 3 \mu m$, $\lambda = 0.633 \mu m$, Füllfaktor 0.6) für verschiedene Brechzahlen der Gitterstege dargestellt. Die Beugungseffizienz wurde über der skalaren Phase des Elements aufgetragen. Die Beugungseffizienz ist dabei fast unabhängig von der Brechzahl des Gittermaterials, es überwiegt hier also die skalare Phasenwirkung des Elements. Der Brechungsindex beeinflusst die Beugungseffizienz hingegen nur wenig. Für das Beispiel wurden sehr große Brechzahlunterschiede betrachtet, die meisten optischen Materialien haben allerdings eine Brechzahl in der Nähe von 1.5, so dass hier der Einfluss auf die Beugungseffizienz noch geringer ist. Bei der Betrachtung des inversen Problems führt dies dazu, dass die beiden Parameter Gitterhöhe und Brechzahl kaum unabhängig voneinander bestimmt werden können. Dies wird im Abschnitt 4.2.6.4 am Beispiel der Gittercharakterisierung genauer betrachtet.

In der elektromagnetischen Betrachtung gibt es außerdem Effekte, die nicht nur auf der skalaren Phase oder den Fresnel Reflexen beruhen. Ein anschauliches Beispiel sind Metallgitter: Der komplexe Brechungsindex führt in der elektromagnetischen Berechnung zur Induktion von Strömen und Nahfeldeffekten, wie beispielsweise Plasmonen.

2.3.3 Füllfaktor

In diesem Abschnitt soll nun der Einfluss des Füllfaktors untersucht werden. Der Füllfaktor sei hier als Quotient aus Stegbreite zu Gitterperiode definiert. Somit kann er Werte zwischen 0 (kein Gittersteg) und 1 (Gittersteg über die gesamte Periode ausgedehnt) annehmen.

In der skalaren Betrachtung der Gitterhöhe wurde schon die Abhängigkeit der Beugungseffizienz bezüglich des Füllfaktors f ermittelt (Gleichungen 2.118 und 2.122). Für eine feste Phase haben wir also einen quadratischen Zusammenhang. Betrachten wir ein Phasenronchi-Gitter mit Füllfaktor 0.5 und Phasenhub π , dann verschwindet die 0. Beugungsordnung ($I_0 = 0\%$) und die erste Ordnung wird maximal: $I_1 \approx 40.53\%$.

Elektromagnetische Betrachtung

Nun soll die Abhängigkeit der Beugungseffizienz vom Füllfaktor elektromagnetisch betrachtet werden. Exemplarisch wird hier wieder ein binäres Phasengitter betrachtet. Die Höhe ist so gewählt, dass die Phase in der skalaren Betrachtung genau einen Phasenhub von π ergibt: $h = \frac{\lambda}{2(n-1)}$.

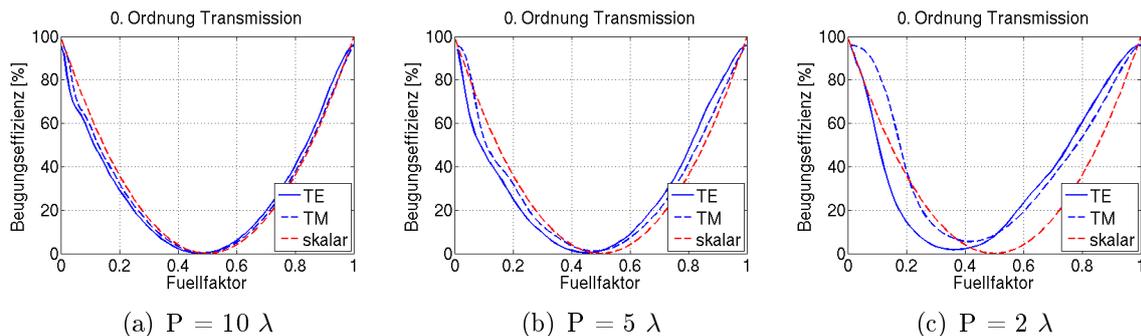


Abbildung 2.29: Abhängigkeit der Beugungseffizienz der 0. Ordnung vom Füllfaktor

In Abbildung 2.29 und 2.30 ist das Ergebnis der elektromagnetischen Simulation (RCWA) für die 0. und die 1. Beugungsordnung dargestellt. Es wurden verschiedene Gitterperioden betrachtet, die untere Reihe zeigt jeweils einen Ausschnitt aus den oberen Diagrammen. Für kleine Gitterperioden ergeben sich deutliche Abweichungen zur skalaren

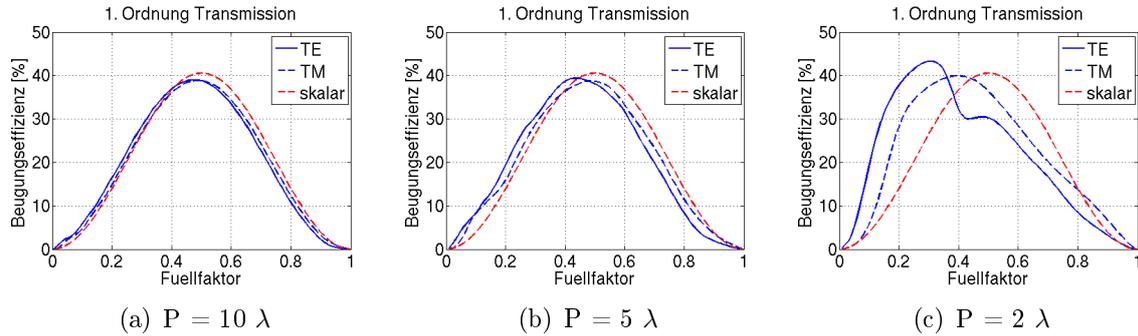


Abbildung 2.30: Abhängigkeit der Beugungseffizienz der 1. Ordnung vom Füllfaktor

Berechnung (rote Kurve). Aber auch für eine relativ große Periode von 10λ sind noch deutliche Abweichungen zu erkennen. Im Wesentlichen bleibt aber der quadratische Zusammenhang zwischen Füllfaktor und Beugungseffizienz für die 0. Ordnung, allerdings sind die Kurven verschoben.

2.3.4 Gitterperiode

Bei der skalaren Betrachtung hängt die Beugungseffizienz eines Gitters nicht von dessen Periode ab. Betrachtet man allerdings eine Periode, die nur etwas größer als die Wellenlänge ist, so würde die Beugungseffizienz der 1. Ordnung abrupt auf 0 abfallen, wenn sich die Periode nur leicht ändert und das Gitter zum Sub- λ Gitter wird. Dies scheint augenscheinlich etwas ungewöhnlich zu sein. Bei der elektromagnetischen Betrachtung von Beugungsgittern ist dies daher auch ein entscheidender Unterschied zur skalaren Betrachtung: die Beugungseffizienz des Gitters hängt von der Gitterperiode ab, wie bereits im Abschnitt 2.1.5 gesehen. Es soll nun genauer untersucht werden, wie sich die Beugungseffizienz über der Gitterperiode verhält.

Amplitudengitter

Zunächst betrachten wir ein Amplitudengitter, das in der skalaren Betrachtung aus durchlässigen und undurchlässigen Bereichen besteht. Für die elektromagnetische Simulation betrachten wir eine 100 nm dicke Chrom-Schicht auf einem Glassubstrat ($n = 1.5$), da reine Amplitudengitter in der Realität nicht existieren. Bei der betrachteten Wellenlänge von 633 nm absorbiert Chrom aber hinreichend gut, so dass dies ziemlich gut dem Modell eines Amplitudengitters entspricht.

In Abbildung 2.31 ist die Beugungseffizienz der 0. Ordnung in Transmission (a) und Reflexion (b), sowie der ersten transmittierten (c) und reflektierten (d) Ordnung darge-

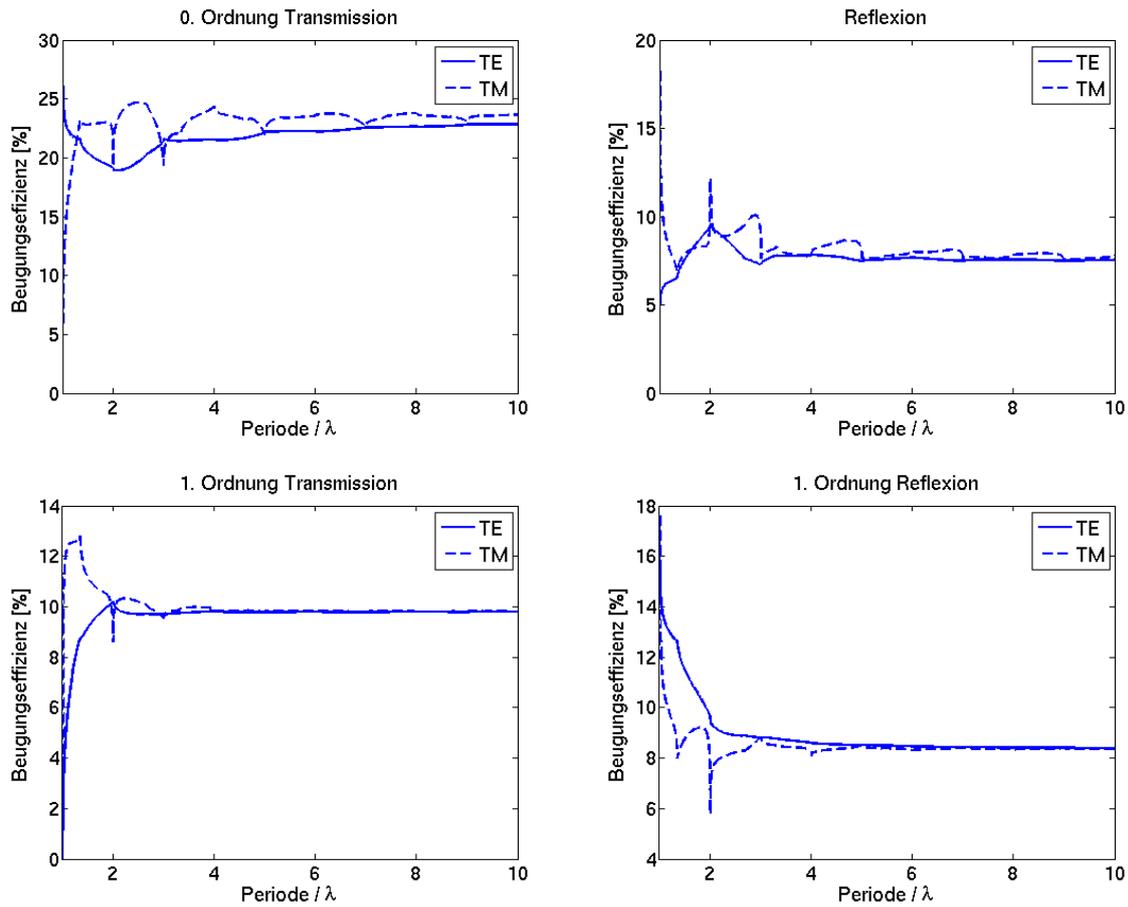


Abbildung 2.31: Amplitudengitter: Abhängigkeit der Beugungseffizienz von der Gitterperiode

stellt. Wird die Periode klein im Vergleich zur Wellenlänge, treten Polarisierungseffekte auf und die beiden Polarisationsrichtungen unterscheiden sich signifikant. Bei $P = \lambda$ verschwindet die erste Beugungsordnung und das Gitter wird zum sub- λ Gitter. Allerdings fällt die Beugungseffizienz nicht kontinuierlich auf 0 ab, sondern zeigt einige Schwankungen. Dies sind so genannte Gitterresonanzen, die hier allerdings nicht weiter diskutiert werden sollen.

Phasengitter

Bei der Betrachtung eines binären Phasengitters ($n = 1.5$, Füllfaktor $\frac{1}{2}$, $h = \lambda$) stellt man ein ähnliches Verhalten wie beim Amplitudengitter fest (s. Abb. 2.32). Insbesondere die Beugungseffizienzen der 1. Ordnung und der reflektierten Ordnungen werden

stark polarisationsabhängig. Für große Perioden wird die Beugungseffizienz unabhängig von der Gitterperiode und nähert sich dem skalaren Wert an. Betrachtet man die erste transmittierte Ordnung, die in vielen Anwendung genutzt wird (z.B. bei einer diffraktiven Linse), so schwankt die Beugungseffizienz sehr stark. Für viele Anwendungen wird aber eine homogene Beugungseffizienz gewünscht. Im Abschnitt 4.1.1 wird ein Verfahren vorgestellt, um den Beugungseffizienzverlauf zu homogenisieren oder gezielt zu beeinflussen. Bei der Betrachtung der 0. reflektierten Beugungsordnung fällt auf, dass sich die Beugungseffizienz für große Gitterperioden einem Wert von etwa 4 % annähert, dies entspricht der erwarteten Fresnelreflexion einer Luft-Glas Grenzfläche. Für kleine Perioden schwankt die Beugungseffizienz allerdings sehr stark und steigt auf bis zu 20 % an.

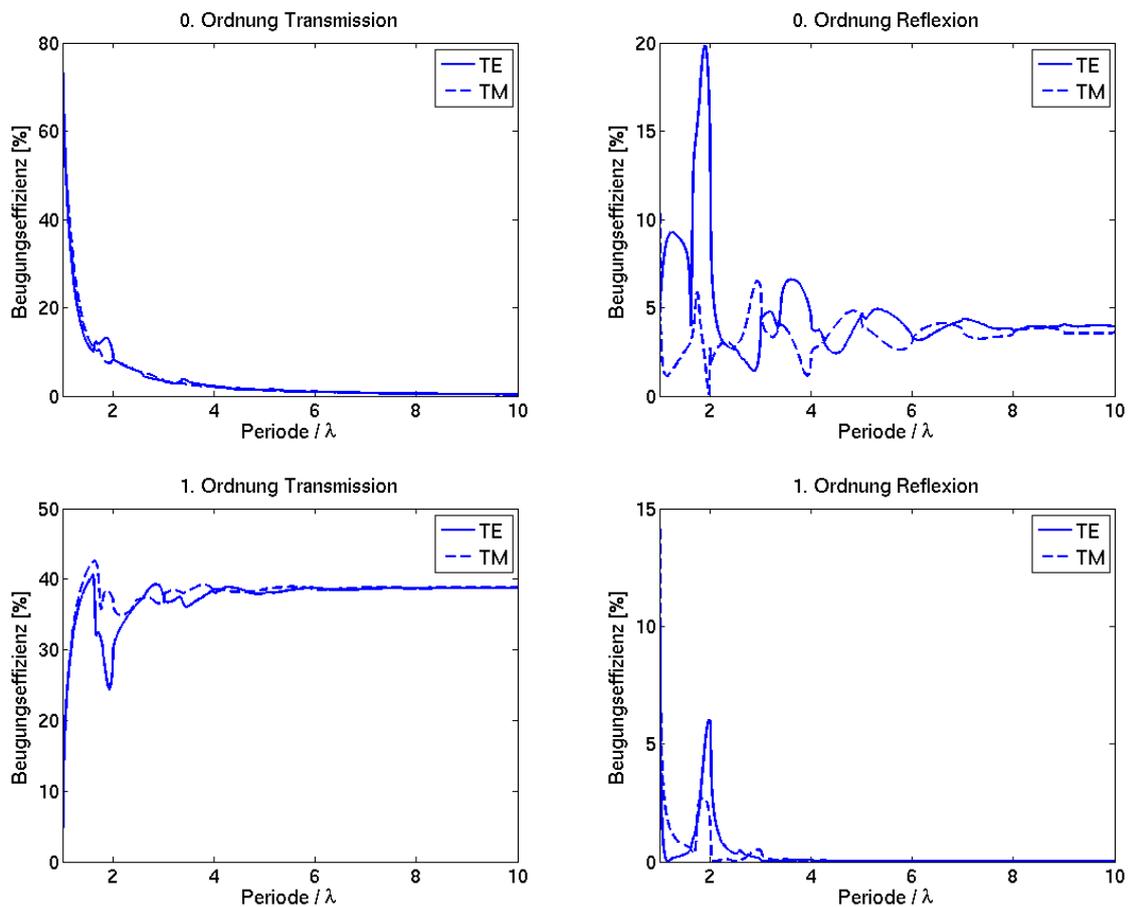


Abbildung 2.32: Phasengitter: Abhängigkeit der Beugungseffizienz von der Gitterperiode

2.3.5 Flankenwinkel

Nun sollen Beugungsgitter mit einem Flankenwinkel betrachtet werden. Zunächst sollen hier verschiedene Simulationmethoden miteinander verglichen werden, da die bisher verwendete RCWA prinzipiell nur senkrechte Flanken berechnen kann und hier eine Approximation eingesetzt werden muss. Im zweiten Teil des Abschnitts wird dann der Einfluss des Flankenwinkels auf die Effizienz und Phase eines Gitters betrachtet.

2.3.5.1 Vergleich von verschiedenen Simulationmethoden

Die hier betrachtete RCWA kann schräge Flankenwinkel zunächst nicht simulieren (vgl. Abschnitt 2.1.4.3) und ist auf Binärgitter oder Stapel von Binärgittern beschränkt. Daher müssen beispielsweise Trapezprofile durch mehrere dünne, binäre Gitterschichten approximiert werden (siehe Abbildung 2.33). Man spricht hier von der so genannten Treppenstufenapproximation (staircase approximation) bzw. dem Slicing. Durch die stufenweise Approximation verändert man also die reale Gittergeometrie und führt zusätzliche Kanten ein. Die RCWA-Simulation für ein solches approximiertes Gitter soll nun zunächst mit anderen rigorosen Verfahren verglichen werden, um den Einfluss der Approximation auf das Fernfeld, d.h. auf die Beugungseffizienz und die Phase der Beugungsordnungen zu untersuchen.

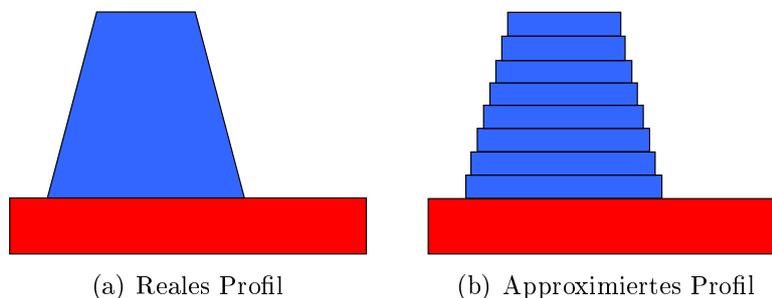


Abbildung 2.33: Treppenstufenapproximation

Wir betrachten zunächst das Nahfeld eines metallischen Trapezgitters, um den Einfluss der Treppenstufen-Approximation auf das Nahfeld zu untersuchen. Abbildung 2.34 zeigt das Betragsquadrat des elektrischen Feldes im Nahfeld eines metallischen (Cr) Trapezgitters. Im Fall der TE-Polarisation zeigt der E-Feld Vektor in Richtung der Gitterstege (hier in die Papierebene hinein), im Fall der TM-Polarisation steht das E-Feld senkrecht zu den Gitterstegen (im Bild horizontal). Im Fall der TM-Polarisation sind deutliche Feldüberhöhungen an den einzelnen Stufen zu erkennen.

Um den Einfluss dieses Effekts auf die Beugungseffizienz zu untersuchen, betrachten wir nun die Konvergenz von verschiedenen elektromagnetischen Simulationsverfahren und

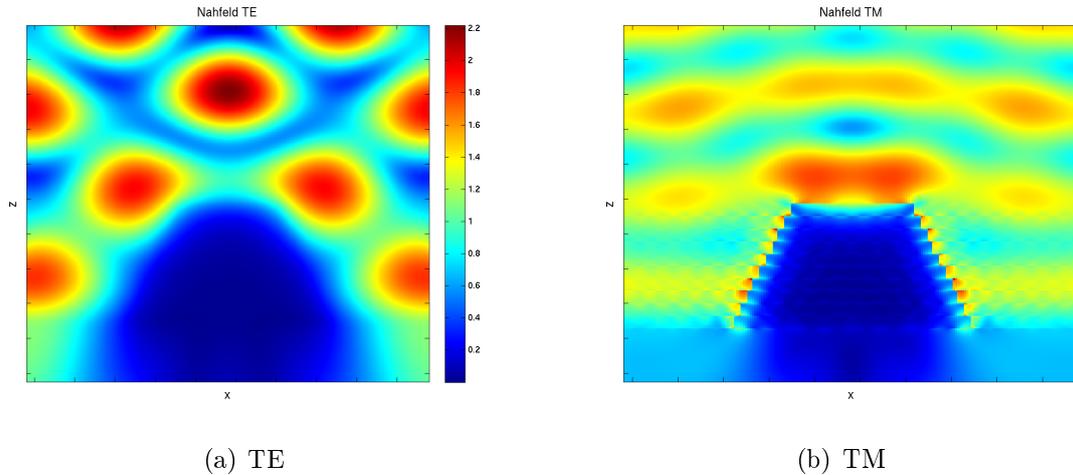


Abbildung 2.34: Nahfeld eines metallischen Trapezgitters

vergleichen das Konvergenzverhalten, sowie die berechnete Effizienz. Betrachtet wurden die RCWA, die Differentialgleichungsmethode (DM), die Finite Elemente Methode (FEM) und die generalisierte Finite Elemente Methode (GFEM). Bis auf die RCWA kommen alle anderen Verfahren ohne die Treppenstufenapproximation aus.

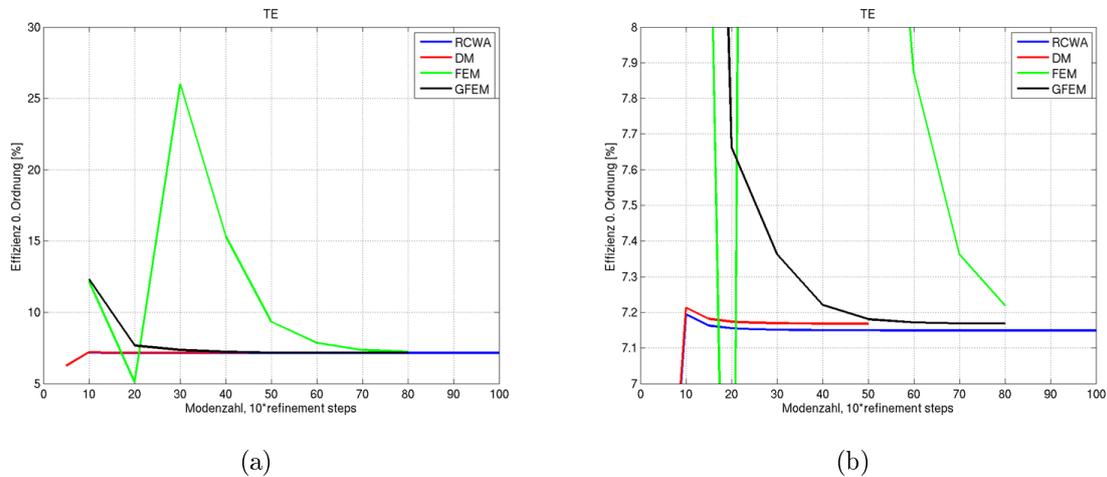


Abbildung 2.35: Konvergenzverhalten der verschiedenen Methoden: TE-Polarisation

Die Abbildungen 2.35 und 2.36 zeigen die Konvergenz der Beugungseffizienz der 0. Ordnung über der Modenzahl der RCWA und DM bzw. über der Anzahl der Verfeinerungsschritte bei der FEM und GFEM. Rechts ist jeweils ein vergrößerter Ausschnitt aus dem linken Diagramm dargestellt. Zunächst ist festzuhalten, dass eine Konvergenz gegen einen festen Wert bei allen Verfahren zu erkennen ist. Allerdings konvergiert vor

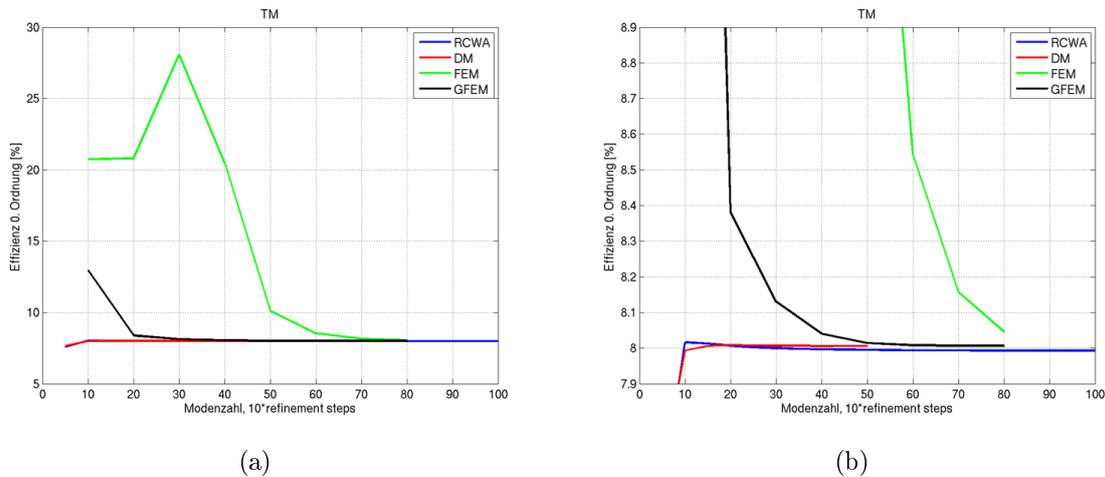


Abbildung 2.36: Konvergenzverhalten der verschiedene Methoden: TM-Polarisation

allem die FEM recht langsam im Vergleich zu den anderen Verfahren. Vergleicht man die Effizienz, gegen die die Verfahren konvergieren, so stellt man kleine Abweichungen fest. Diese liegen im Bereich von ca. 0.01 % Punkten. Die Auswirkungen des Nahfeldeffekts auf die Beugungseffizienz der 0. Ordnung im Fernfeld scheint also gering zu sein.

2.3.5.2 Einfluss der Stufenzahl

Um Herauszufinden wie viele Stufen für die korrekte Approximation eines Trapezgitters notwendig sind, wurde die Effizienz über der Stufenzahl der Treppenstufenapproximation in der RCWA betrachtet. Es wurden exemplarisch ein dielektrisches und ein metallisches Trapezgitter mit folgenden Parametern betrachtet: Flankenwinkel 70° , Gitterperiode 5λ , $\lambda = 193 \text{ nm}$, Gitterhöhe 140 nm . Solche Gitter kommen z.B. als Amplitudenmasken in der Lithographie vor.

Abbildung 2.37 zeigt die Effizienz der 0. Beugungsordnung für das dielektrische Trapezgitter (mit $n = 1.5$) über der Stufenzahl N . Zu erkennen ist, dass die Abweichung bei der TM-Polarisation auch für große Stufenzahlen größer ist als im Fall der TE-Polarisation. Allerdings sind die Abweichungen im Bereich von maximal 0.02 %.

Abbildung 2.38 zeigt die Effizienz der 0. Beugungsordnung für ein metallisches Trapezgitter aus Chrom ($n = 0.84 + 1.65i$) über der Stufenzahl. Hier ist zu erkennen, dass insbesondere für die TM-Polarisation sich die Effizienz nur langsam dem mit den anderen Methoden ermittelten Wert nähert. Auch für große Stufenzahlen ist die Abweichung noch relativ groß (andere Skalierung im Diagramm der TM-Polarisation!). Auffällig ist

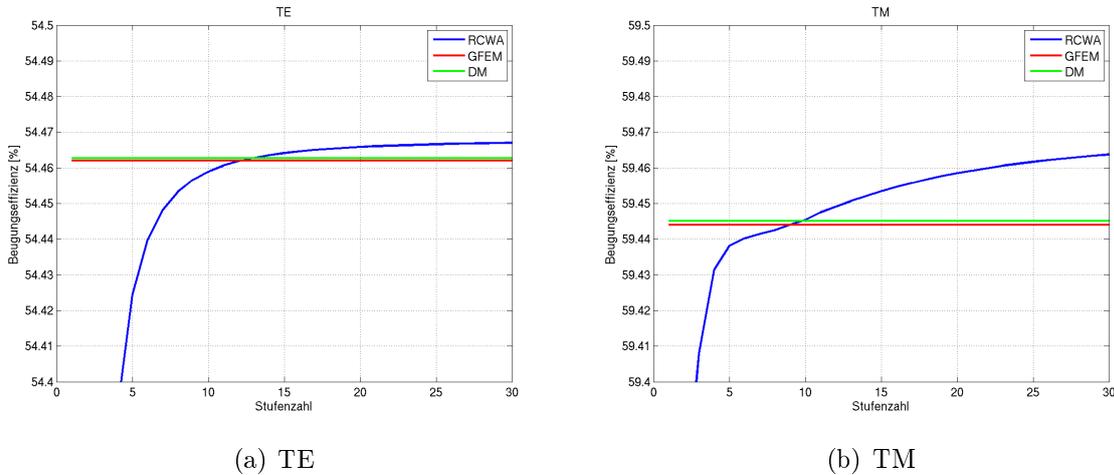


Abbildung 2.37: Einfluss der Stufenzahl: Dielektrisches Trapezgitter

auch, dass auch die Differentielle Methode und die Generalisierte Finite Elemente Methode noch relativ große Abweichungen aufweisen. Dies deutet darauf hin, dass bei einer der beiden Methoden Konvergenzprobleme auftreten.

Die Gültigkeit der Treppenstufenapproximation wurde auch von Popov untersucht [103]. Er stellt fest, dass die Feldüberhöhungen an den Treppenstufen, die bei der TM-Polarisation an metallischen Gittern auftreten, auch im Grenzfall unendlich vieler Schichten nicht verschwinden. Dies führt dazu, dass für die Darstellung des Feldes mehr Fourier-Komponenten benötigt werden und somit die Konvergenz schlechter wird. Hier ist die Konvergenz der RCWA allerdings noch akzeptabel und die Abweichungen in der Beugungseffizienz sind tolerierbar. Außerdem sollen in dieser Arbeit hauptsächlich dielektrische Gitter betrachtet werden.

Eine Lösung für das Problem der Treppenstufenapproximation bietet auch die differentielle Methode, die im Abschnitt 2.1.4.1 bereits vorgestellt wurde. Außerdem wurde kürzlich von Kim ein Verfahren vorgeschlagen, das durch eine so genannte „pseudo-Fourier modal analysis“ das Problem umgeht [104].

2.3.5.3 Einfluss des Flankenwinkels

Da die Stufenapproximation (bei ausreichend großer Stufenzahl) keine signifikanten Auswirkungen auf die Beugungseffizienz gezeigt hat, wird für die Untersuchung des Flankenwinkels die RCWA verwendet. Diese zeichnet sich im Vergleich zu den anderen Verfahren durch eine deutlich kürzere Rechenzeit aus. Wir betrachten nun ein dielektrisches Trapezgitter und untersuchen den Einfluss des Flankenwinkels auf die Beugungseffizienz. Dies könnte z.B. eine Phasenmaske sein, deren Flanken nicht exakt senkrecht sind. Die

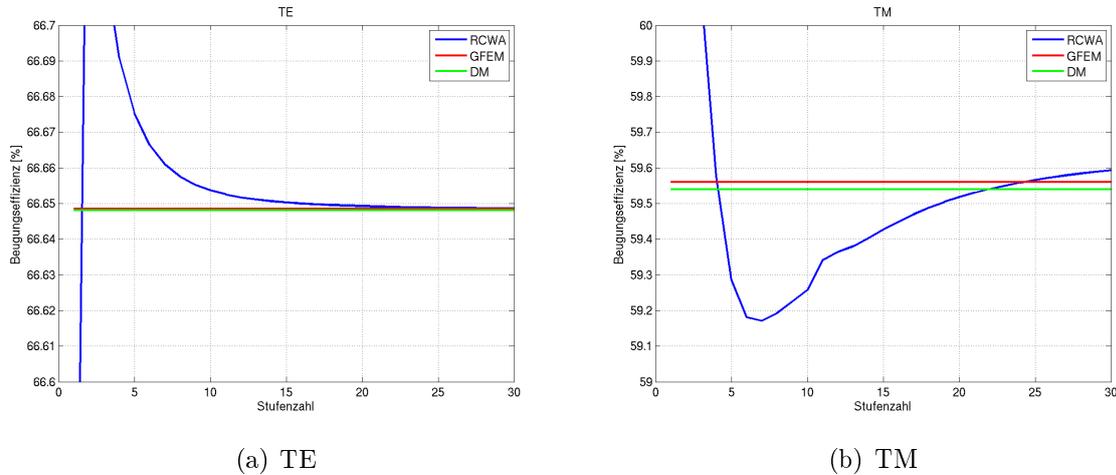


Abbildung 2.38: Einfluss der Stufenzahl: Metallisches Trapezgitter

Periode sei die doppelte Wellenlänge, die Gitterhöhe $h = \frac{\lambda}{2(n-1)}$. Als Flankenwinkel betrachten wir den Trapezwinkel des Gitters, ein Winkel von 90° entspricht also einem Binärgitter. In Abbildung 2.39a ist die Effizienz der 0. und der 1. Beugungsordnung des Gitters über dem Flankenwinkel dargestellt. Man erkennt, dass sich die beiden Ordnungen im Wesentlichen gegenläufig verhalten. Allerdings sind die Steigungen der Kurven etwas unterschiedlich. Abbildung 2.39b zeigt die Phase der 0. und 1. Beugungsordnung in Radiant für TE- (blau) und TM-polarisiertes Licht (grün). Die Phasen sind bezogen auf den Wert für Gitter mit Flankenwinkel 90° , also ein Binärgitter. Insbesondere die 0. Ordnung des Gitters scheint sehr sensitiv auf den Flankenwinkel zu reagieren.

2.3.6 Füllfaktorvariation

Mit der hier verwendeten Methode der RCWA lassen sich prinzipiell nur periodische Gitterstrukturen simulieren. Daher ist es zunächst nicht möglich stochastische Fehler, wie beispielsweise einen variierenden Füllfaktor zu modellieren. Ein Versuch solche Störungen trotzdem zu untersuchen ist ein Übergitter. Man betrachtet nicht ein Gitter der eigentlichen Periode P , sondern ein Gitter mit einer vielfach größeren Periode $N \cdot P$. Nun können die einzelnen „Sub-Perioden“ innerhalb der Periode des Übergitters unterschiedliche Parameter aufweisen. Dennoch lässt sich somit kein komplett stochastisches Verhalten nachbilden, da das Übergitter ja periodisch bleibt und sich die Überperioden immer wiederholen. Dies führt dann dazu, dass es immer noch diskrete Beugungsordnungen des Übergitters gibt und kein kontinuierliches Richtungsspektrum entsteht. Es werden daher mehrere solcher Übergitter betrachtet und das Ergebnis gemittelt.

Es wurde beispielhaft ein Binärgitter mit einer Füllfaktorvariation von $\pm 100 \text{ nm}$ unter-

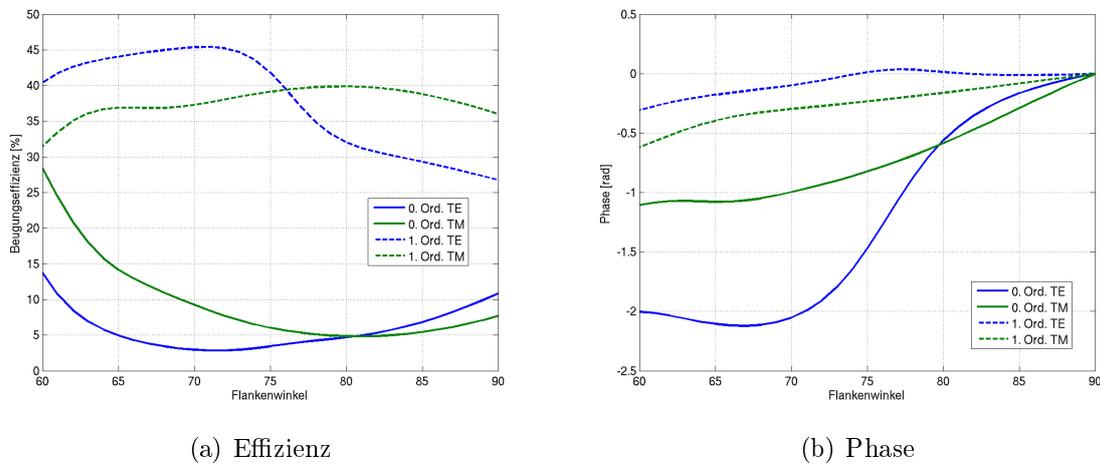


Abbildung 2.39: Einfluss des Flankenwinkels

sucht. Dazu wurde ein Übergitter betrachtet, das die zehnfache Periode des eigentlichen Gitters besitzt, in jeder Sub-Periode wurde ein zufälliger Stegbreitenfehler zwischen -100 nm und $+100 \text{ nm}$ gewählt (gleichverteilt). Nun wurden jeweils zehn solche Übergitter betrachtet und die elektromagnetisch berechnete Beugungseffizienz mit der eines ungestörten Gitters verglichen. Die absolute Abweichung der mittleren Beugungseffizienz der gestörten Gitter und dem idealen Gitter ist in Abbildung 2.40 über dem Kehrwert der Gitterperiode aufgetragen. Solche stochastischen Fehler wurden auch von Germer untersucht [105]. Er gibt ein Modell an, mit dem sich der Einfluss der statistischen Variation berechnen lässt. Das Ergebnis dieses so genannten mean-field models ist in der Abbildung gestrichelt dargestellt. Das Modell spiegelt zwar in etwa den qualitativen Verlauf der Kurven wider, für eine quantitative Analyse des Fehlers scheint das Modell aber ungeeignet zu sein.

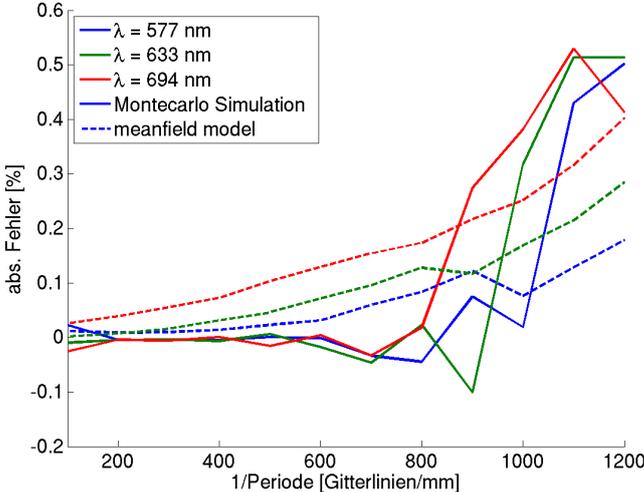


Abbildung 2.40: Absolutfehler der Beugungseffizienz bei Füllfaktorvariationen

3 Inverses Problem

Nachdem die notwendigen Grundlagen geschaffen wurden und das Vorwärtsproblem analysiert wurde, sollen nun in diesem Kapitel das inverse Gitterbeugungsproblem und zwei Lösungsmethoden untersucht werden. Wie bereits im Abschnitt 1.3 beschrieben, gibt es keine direkte Methode zur Lösung des inversen Problems. Es gibt also zunächst nur Verfahren, die zu einer gegebenen Gittergeometrie die Beugungseffizienz und Phase berechnen können, nicht aber umgekehrt. Inverse Probleme sind weit verbreitet und haben ihren festen Platz auf dem Gebiet der Mathematik [106]. Hier soll das inverse Problem aber weniger im mathematischen Sinne als inverses Problem behandelt werden, sondern ganz konkret in Hinblick auf die Anwendungen bei Design- und Optimierung und der Gittercharakterisierung, die dann im Kapitel 4 beschrieben werden. Zunächst soll das inverse Problem konkret formuliert werden, anschließend wird dann zunächst ein iteratives Lösungsverfahren vorgestellt, mit dem das inverse Gitterbeugungsproblem über ein Optimierungsverfahren gelöst werden kann. Das zweite Verfahren, das in diesem Kapitel betrachtet wird, basiert auf einer Approximation von berechneten Beugungseffizienzen über einem bestimmten Parameterraum und kann ebenfalls zur Lösung des inversen Problems verwendet werden.

Für das iterative Verfahren wird ein Verfahren angewendet, um in der RCWA direkt die Ableitungen der Beugungseffizienz nach den Gitterparametern zu bestimmen. Das Verfahren wurde erstmals auf zweidimensionale Beugungsgitter angewendet und bietet einen deutlichen Geschwindigkeitsvorteil bei der Berechnung der Gradienten im Optimierungsalgorithmus. Zum anderen wurde ein Approximationsverfahren eingesetzt, um Beugungseffizienzen über dem betrachteten Parameterraum zu approximieren. So kann mit wenigen elektromagnetischen Rechnungen der Parameterraum approximiert werden. Die Approximation wird dann anschließend durchsucht und so können dann zu vorgegebenen Beugungseffizienzen (z.B. aus einer Messung) die passenden Gitterparameter bestimmt werden. Das Approximationsverfahren auf Basis von verschobenen Basisfunktionen wurde am Lehrstuhl Optoelektronik entwickelt und wurde in dieser Arbeit zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems eingesetzt. Das Verfahren bietet außerdem die Möglichkeit Gradientendaten zu approximieren, so dass auch hier die Gradienten, die der modifizierte RCWA-Algorithmus liefert als Grundlage für eine Approximation dienen können.

3.1 Formulierung des inversen Problems

Da das inverse Gitterbeugungsproblem im Allgemeinen nicht eindeutig ist, müssen wir das Gitter zunächst durch eine endliche Anzahl von Gitterparametern beschreiben (Abb. 3.1). Hierdurch schränken wir den Lösungsraum ein und legen implizit bestimmte Randbedingungen fest. Die einzelnen Gitterparameter (wie beispielsweise Gitterhöhe, Füllfaktor, Flankenwinkel, ...) fassen wir als Vektor zusammen:

$$\vec{p} = (p_1, \dots, p_N)$$

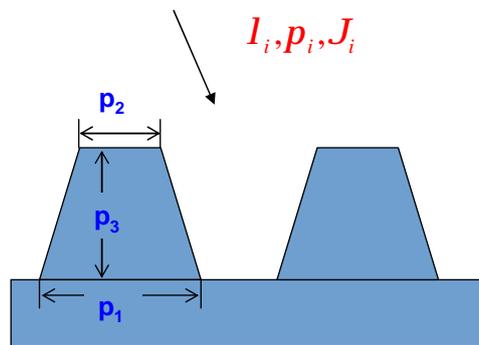


Abbildung 3.1: Parametrisierung des Gitters

Außer den Gitterparametern beschreiben wir die Umgebungsbedingungen durch einen Konfigurationsvektor \vec{C} , der die Wellenlänge λ , den Einfallswinkel ϑ , die Polarisationsrichtung π sowie die betrachtete Beugungsordnung m zusammenfasst:

$$\vec{C} = (\lambda, \pi, \vartheta, m)$$

Wenn wir nochmals das Vorwärtsproblem betrachten, so suchen wir zu einem gegebenen Parametervektor und einer gegebenen Konfiguration die Beugungseffizienz η . Dies liefert uns z.B. die RCWA:

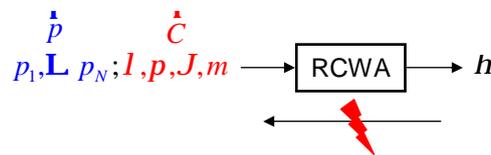


Abbildung 3.2: RCWA liefert Beugungseffizienz zu gegebenem Parametervektor \vec{p} und Konfiguration \vec{C}

Die RCWA steht hier exemplarisch für ein (elektromagnetisches) Berechnungsverfahren und könnte auch durch andere Verfahren ersetzt werden. Auch wenn kein analytischer

funktionaler Zusammenhang zur Berechnung der Beugungseffizienz besteht, beschreiben wir das Vorwärtsproblem über eine Modellfunktion m :

$$\eta = m(\vec{p}, \vec{C})$$

Betrachten wir mehrere Konfigurationen (z.B. wenn wir die Beugungseffizienz bei verschiedenen Wellenlängen betrachten), fassen wir Beugungseffizienzen der Konfigurationen zu einem Effizienzvektor $\vec{\eta}$ zusammen:

$$\vec{\eta} = \begin{pmatrix} m(\vec{p}; \vec{C}_1) \\ \vdots \\ m(\vec{p}; \vec{C}_L) \end{pmatrix}$$

Betrachtet man nun das inverse Problem sucht man zu einer gegebenen Beugungseffizienz die entsprechenden Gitterparameter:

$$\vec{p} = m^{-1}(\eta, \vec{C})$$

Damit das Problem eindeutig oder überbestimmt wird, benötigt man mindestens so viele Effizienzen, wie zu bestimmende Parameter. Wir betrachten daher die Beugungseffizienzen des Gitters z.B. bei verschiedenen Wellenlängen oder die Effizienzen mehrerer Ordnungen. Dann erhalten wir entsprechend:

$$\vec{p} = m^{-1}(\vec{\eta}, \vec{C}_1, \dots, \vec{C}_L)$$

Leider gibt es kein direktes Verfahren zur Lösung des inversen Problems, die inverse Funktion m^{-1} gibt es also nicht. Zur Lösung des inversen Problems müssen daher andere Verfahren eingesetzt werden. Zwei verschiedene Lösungsverfahren sollen in den folgenden Abschnitten betrachtet werden.

3.2 Iteratives Lösungsverfahren

Zunächst soll die iterative Lösung des inversen Problems betrachtet werden. Im Vergleich zur Vorausberechnung der Daten (vgl. Tabelle 1.1) ist die iterative Lösung zwar langsamer, aber flexibler als beispielsweise die Approximation des Parameterraums, die im zweiten Teil des Kapitels vorgestellt wird (siehe auch bei Raymond [7]). Bei der Betrachtung von inversen Problemen liegt die iterative Lösung mit Hilfe von Optimierungsalgorithmen nahe: Da die Vorwärtsrechnung zu gegebenen Parametern die Beugungseffizienzen liefert, versucht man nun iterativ die Parameter so lange zu verändern, bis man die gewünschten Beugungseffizienzen erhält.

3.2.1 Das Optimierungsverfahren

Die elektromagnetischen Methoden erlauben uns die Lösung des Vorwärtsproblems - wir erhalten also zu gegebenen Gitterparametern die entsprechenden Beugungseffizienzen. Zur Lösung des inversen Problems suchen wir den Parametervektor \vec{p} eines Beugungsgitters zu einem gegebenen Effizienzvektor $\vec{\eta}_{\text{vorgegeben}}$. Wir betrachten die Beugungseffizienz als vektorielle Größe, da wir z.B. im Design Forderungen an mehrere Beugungsordnungen stellen oder in der Charakterisierung die Beugungseffizienz bei verschiedenen Wellenlängen messen. Dies wird dann durch die verschiedenen Konfigurationen \vec{C} beschrieben, da diese aber bekannt sind, betrachten wir im Folgenden die Beugungseffizienz nur als Funktion der Gitterparameter.

Zur iterativen Lösung des inversen Problems versuchen wir die Parameter im Vorwärtsproblem so zu variieren, bis die Differenz zwischen den vorgegeben Beugungseffizienzen und den berechneten minimal wird:

$$\vec{\eta}_{\text{vorgegeben}} - \vec{\eta}_{\text{calc}}(\vec{p}) \rightarrow \min$$

Diese vektorielle Größe lässt sich nur schwierig minimieren, daher betrachten wir als skalare Größe das Quadrat der Norm¹ dieser Differenz. Dies ist unsere skalare Zielfunktion $f(\vec{p})$:

$$f(\vec{p}) = \frac{1}{2} \|\vec{\eta}_{\text{vorgegeben}} - \vec{\eta}_{\text{calc}}(\vec{p})\|^2 \rightarrow \min$$

Dies ist ein klassisches kleinste-Quadrate Problem, wie es in vielen Lehrbücher behandelt wird. Die Herleitung für ein Lösungsverfahren dieses Problems ist hier angelehnt an die Erklärungen von Nocedal und Wright [107]. Betrachten wir zunächst ein allgemeines Minimierungsproblem $f(\vec{x}) \rightarrow \min$. Die skalare Funktion f können wir durch eine Taylorreihe im Punkt \vec{x}_0 approximieren:

$$T(\vec{x}) = f(\vec{x}_0) + \nabla f(\vec{x}_0)^T (\vec{x} - \vec{x}_0) + \frac{1}{2} (\vec{x} - \vec{x}_0)^T \nabla^2 f(\vec{x}_0) (\vec{x} - \vec{x}_0) + \dots$$

Das Minimum kann nun bestimmt werden, indem wir die Ableitung der Taylorreihe Null setzen. Wir betrachten die Taylorreihe bis zur zweiten Potenz und erhalten dann für die Ableitung:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} T(\vec{x}) \approx \nabla f(\vec{x}_0)^T + \nabla^2 f(\vec{x}_0) (\vec{x} - \vec{x}_0)$$

Und damit:

$$\vec{x}_m \approx \vec{x}_0 - (\nabla^2 f(\vec{x}_0))^{-1} \nabla f(\vec{x}_0)^T$$

Dies ist das klassische Newton-Verfahren. Ausgehend von einem Startpunkt \vec{x}_0 berechnen wir das Minimum \vec{x}_m und setzen diesen Punkt als neuen Startpunkt. Das Newton-Verfahren konvergiert quadratisch, hat aber den Nachteil, dass sowohl der Gradient der

¹Wir betrachten hier die Euklidische Norm (2-Norm) $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$

Funktion ∇f und die Hessematrix (also die zweite Ableitung) $\nabla^2 f$ berechnet werden müssen.

Wir betrachten daher das Gauß-Newton Verfahren, das eine Erweiterung des Newton-Verfahrens darstellt, aber ohne die zweite Ableitung auskommt. Zunächst betrachten wir ein etwas spezielleres Optimierungsproblem - ein kleinste-Quadrate Problem, wie oben bereits dargestellt:

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{2} \|\vec{r}(\vec{x})\|^2 \rightarrow \min$$

$\vec{r}(\vec{x})$ ist dabei der sogenannte Residuenvektor. Im konkreten Fall der Beugungseffizienzen ist dies die Differenz aus den vorgegebenen und den berechneten Effizienzen $r(\vec{p}) = \vec{\eta}_{\text{vorgegeben}} - \vec{\eta}_{\text{calc}}(\vec{p})$. Im Fall des kleinste-Quadrate Problems ist dann der Gradient und die Hessematrix:

$$\begin{aligned} \nabla f(\vec{x}) &= \mathbf{J}^T \vec{r}(\vec{x}) \\ \nabla^2 f(\vec{x}) &= \mathbf{J}^T \mathbf{J} + \sum_j r_j(\vec{x}) \nabla^2 r_j(\vec{x}) \end{aligned}$$

Dabei ist \mathbf{J} die Jacobi-Matrix von $\vec{r}(\vec{x})$:

$$\mathbf{J} = \nabla \vec{r}(x_1, \dots, x_N) = \begin{pmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial r_1}{\partial x_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial r_L}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial r_L}{\partial x_N} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Im Gauß-Newton Verfahren verwendet man eine Näherung für die Berechnung der zweiten Ableitung, um auf die explizite Berechnung zu verzichten:

$$\nabla^2 f(\vec{x}) \approx \mathbf{J}^T \mathbf{J}$$

Und bekommt dann folgendes Iterationsschema für die Optimierung:

$$\vec{x}_m = \vec{x}_0 - (\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1} \mathbf{J}^T \vec{r}(\vec{x}_0) \quad (3.2)$$

Um die Matrixinversion zu vermeiden löst man stattdessen das folgende Gleichungssystem und bestimmt dann \vec{x}_m :

$$\mathbf{J}^T \mathbf{J} \cdot (\vec{x}_m - \vec{x}_0) = -\mathbf{J}^T \vec{r}(\vec{x}_0)$$

Dabei ist anschaulich $\vec{d} := -(\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1} \mathbf{J}^T \vec{r}(\vec{x}_0)$ die Richtung, die das Verfahren beim nächsten Schritt einschlägt. Damit das Verfahren gut konvergiert, empfiehlt es sich nicht immer die volle Schrittweite \vec{d} zu gehen, sondern nur $\alpha \vec{d}$, wobei $0 < \alpha \leq 1$. Zur Bestimmung der richtigen Schrittweite, die als Liniensuche bezeichnet wird, gibt es verschiedene Verfahren, auf die hier aber nicht genauer eingegangen werden soll. Ein guten Überblick über Optimierungsverfahren und verschiedene Techniken zur Liniensuche findet sich ebenfalls im Buch von Nocedal und Wright [107].

Das Gauß-Newton Verfahren ist also ein iteratives Verfahren zur Lösung des kleinsten-Quadrate Problems und damit des hier betrachteten inversen Gitterbeugungsproblems. Es ist allerdings nur ein lokales Verfahren, da es beim ersten gefundenen Minimum stagniert. Für die Anwendung zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems sind die Parameter oft nicht frei wählbar, sondern unterliegen bestimmten Anforderungen (z.B. auf Grund des verwendeten Herstellungsverfahrens). Um solche Randbedingungen mit zu berücksichtigen muss das Verfahren weiter angepasst werden, worauf hier aber nicht weiter eingegangen werden soll. Eine Implementierung des Gauß-Newton Verfahrens wurde in dieser Arbeit exemplarisch für die iterative Lösung des inversen Problems eingesetzt, prinzipiell sind hierfür aber auch andere Optimierungsverfahren anwendbar. Da die Vorwärtsrechnung sehr rechenintensiv ist, bieten sich Verfahren an, die mit möglichst wenig Funktionsauswertungen auskommen.

3.2.2 Analytische Berechnung der Gradienten

Wie oben gesehen benötigen wir für das Optimierungsverfahren in jedem Optimierungsschritt die Jacobi-Matrix des Residuenvektors $\vec{r}(\vec{p})$. Die Residuenvektoren sind dabei die Differenzen der vorgegeben Beugungseffizienzen und der berechneten:

$$\vec{r}(\vec{p}) = \vec{\eta}_{\text{vorgegeben}} - \vec{\eta}_{\text{calc}}(\vec{p})$$

Da $\vec{\eta}_{\text{vorgegeben}}$ konstant ist, brauchen wir also die partiellen Ableitungen der Beugungseffizienz. Aus Gleichung 3.1 folgt:

$$\mathbf{J} = -\nabla \vec{\eta}_{\text{calc}}(p_1, \dots, p_N) = - \begin{pmatrix} \frac{\partial \eta_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial \eta_1}{\partial p_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \eta_L}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial \eta_L}{\partial p_N} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Diese Ableitungen werden in der Regel über Differenzenquotienten berechnet. Bei der Verwendung der symmetrischen Formulierung des Differenzenquotienten sind so zwei zusätzliche elektromagnetische Rechnungen für jede Effizienz und jeden Parameter notwendig:

$$\frac{\partial \eta}{\partial p_i} = \frac{\eta(p_i + \Delta p_i) - \eta(p_i - \Delta p_i)}{2\Delta p_i} \quad (3.4)$$

Bei der Verwendung der (ungenaueren) einseitigen Formulierung des Differenzenquotienten ist ebenfalls eine zusätzliche rigorose Rechnung für jeden Gitterparameter notwendig:

$$\frac{\partial \eta}{\partial p_i} = \frac{\eta(p_i + \Delta p_i) - \eta(p_i)}{\Delta p_i} \quad (3.5)$$

Anstatt die Ableitungen der Beugungseffizienz numerisch zu berechnen hat van der Aa gezeigt, dass sich die Ableitungen der Beugungseffizienz eindimensionaler Gitter nach

den Gitterparametern ohne das Lösen eines zusätzlichen Eigenwertproblems berechnen lassen [12, 13]. Da das Lösen des Eigenwertproblems der rechenintensivste Schritt im RCWA-Algorithmus ist, lässt sich so Rechenzeit im Vergleich zur numerischen Berechnung durch Differenzenquotienten einsparen. Zur Berechnung der Ableitung setzt man direkt $\frac{\partial T}{\partial p_i}$ für die transmittierten bzw. $\frac{\partial R}{\partial p_i}$ für die reflektierten Beugungsordnungen in die RCWA-Gleichungen ein und versucht das Problem dann auf die Ableitungen der Eigenwerte und Eigenvektoren zurück zu führen. Diese können dann analytisch - ohne die weitere Lösung eines Eigenwertproblems - bestimmt werden. Hier soll zunächst noch mal das Verfahren von van der Aa für den eindimensionalen Fall betrachtet werden, anschließend wird die Methode dann für die Ableitungsberechnung zweidimensionaler Gitter erweitert.

3.2.2.1 1D-Gitter

Wir betrachten nun das Verfahren von van der Aa zur Bestimmung der Ableitung der Beugungseffizienz nach den Gitterparametern. Hier sei nur der TE-Fall betrachtet - für den TM-Fall, sowie den konischen Fall lassen sich die Gleichungen entsprechend herleiten. Betrachten wir als Ausgangspunkt die Berechnung der reflektierten und transmittierten Beugungseffizienzen (aus Gleichung 2.85):

$$\eta_{R,m} = R_m R_m^* \cdot \Re \left(\frac{\gamma_I}{\gamma_i} \right)$$

$$\eta_{T,m} = T_m T_m^* \cdot \Re \left(\frac{\gamma_{III}}{\gamma_i} \right)$$

mit $\gamma_i = k_0 n_I \cos \vartheta$.

Betrachten wir nun die Ableitung der Beugungseffizienz nach einem Gitterparameter p_i , dann erhalten wir

$$\frac{\partial \eta_{R,m}}{\partial p_i} = \left(\frac{\partial R_m}{\partial p_i} R_m^* + R_m \frac{\partial R_m^*}{\partial p_i} \right) \cdot \Re \left(\frac{\gamma_I}{\gamma_e} \right)$$

$$\frac{\partial \eta_{T,m}}{\partial p_i} = \left(\frac{\partial T_m}{\partial p_i} T_m^* + T_m \frac{\partial T_m^*}{\partial p_i} \right) \cdot \Re \left(\frac{\gamma_{III}}{\gamma_e} \right)$$

Es werden also die Ableitungen der Amplituden R und T benötigt. Für die Berechnung der Feldamplituden betrachten wir den Enhanced Transmittance Matrix Approach (ETMA, siehe Abschnitt 2.1.4.3). Wir betrachten hier aus Gründen der Übersichtlichkeit nur ein binäres Gitter. Das Verfahren lässt sich aber ebenso auf mehrere Schichten übertragen. Für ein binäres Gitter erhalten wir dann aus dem ETMA (Gl. 2.98):

$$\begin{pmatrix} B^{-1}T \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F & -I \\ G & -Y_I \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \delta_{i,0} \\ -i\gamma_i\delta_{i,0} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Wenn wir diese Gleichung umstellen, erhalten wir

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} B^{-1}T + \begin{pmatrix} -I \\ -Y_I \end{pmatrix} R = \begin{pmatrix} \delta_{i,0} \\ -i\gamma_i\delta_{i,0} \end{pmatrix}$$

Diese Gleichung können wir jetzt nach p_i ableiten. Gestrichene Buchstaben bedeuten dabei die Ableitung nach dem i -ten Parameter: $\frac{\partial}{\partial p_i}$.

$$\begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} B^{-1}T + \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} (B^{-1'}T + B^{-1}T') + \begin{pmatrix} -I \\ -Y_I \end{pmatrix} R' = 0$$

Wir können dann nach R' und T' auflösen und erhalten

$$\begin{pmatrix} B^{-1'}T + B^{-1}T' \\ R' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F & -I \\ G & -iY_I \end{pmatrix}^{-1} \cdot (-1) \cdot \begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} B^{-1}T \quad (3.7)$$

Wir bekommen dann also R' und einen Ausdruck für T' . Benötigt wird das Ergebnis der RCWA, sowie F' und G' . Aus dem Ergebnis können wir dann T' berechnen:

$$T' = B \left((B^{-1'}T + B^{-1}T') - B^{-1'}T \right) \quad (3.8)$$

Der Term in der Klammer ist dabei das Ergebnis des Gleichungssystems von oben. Leiten wir $B^{-1}B = I$ ab, dann erhalten wir einen Ausdruck für $B^{-1'}$:

$$B^{-1'} = -B^{-1}B'B^{-1} \quad (3.9)$$

Wir brauchen damit also nur noch die Ableitung von B . Wir betrachten zunächst die Ableitung von F' und G' . Im Transmittance Matrix Approach erhalten wir F und G aus Gleichung 2.95. Wir können diese Gleichung ableiten und bekommen damit

$$\begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W' + W'XA + WX'A + WXA' \\ V' - V'XA - VX'A - VXA' \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Dabei sind W' die abgeleiteten Eigenvektoren. Außerdem benötigen wir noch A' und X' . A und B erhalten wir aus Gleichung 2.91. Wenn wir diese Gleichung umstellen und ableiten, erhalten wir dann für A' und B' :

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -W & F_+ \\ V & G_+ \end{pmatrix}^{-1} \left[\begin{pmatrix} W'X + WX' \\ V'X + VX' \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} F'_+ \\ G'_+ \end{pmatrix} B - \begin{pmatrix} -W' \\ V' \end{pmatrix} A \right]$$

Im Fall einer Schicht (bzw. bei der letzten Schicht im ETMA) ist $F_+ = I$ und $G_+ = -Y_{III}$. Damit erhalten wir dann

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -W & I \\ V & -Y_{III} \end{pmatrix}^{-1} \left[\begin{pmatrix} W'X + WX' \\ V'X + VX' \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -W' \\ V' \end{pmatrix} A \right] \quad (3.11)$$

Mit $V = WQ$ erhalten wir dann für die Ableitung von V :

$$V' = W'Q + WQ' \quad (3.12)$$

Außerdem ist $Q = \sqrt{\Lambda}$, wobei Λ die Diagonalmatrix der Eigenwerte ist. Damit ist dann

$$Q' = \frac{1}{2}Q^{-1}\Lambda' \quad (3.13)$$

Die Matrix X ist $X = e^{-d \cdot Q}$, wobei die Exponentialfunktion komponentenweise auf die Elemente der Diagonalmatrix angewendet zu verstehen ist. Damit erhalten wir

$$X' = -d \cdot Q' \cdot X \quad (3.14)$$

Wir haben nun also alle Gleichungen auf W' und Λ' zurückgeführt!

Ableitung der Eigenwerte und Eigenvektoren

Jetzt benötigen wir zur Berechnung der Ableitung der Beugungseffizienz nur noch die Ableitungen der Eigenwert- und Eigenvektormatrizen. Wir betrachten zunächst ein allgemeines Eigenwertproblem:

$$AW - W\Lambda = 0$$

Und damit $A = W\Lambda W^{-1}$. Dabei ist W die Matrix der Eigenvektoren von A und Λ die Diagonalmatrix mit den Eigenwerten von A . Wir leiten diese Gleichung ab und erhalten:

$$A'W + AW' - W'\Lambda - W\Lambda' = 0$$

Dann multiplizieren wir die Gleichung mit der Matrix der linksseitigen Eigenvektoren W^{-1} :

$$W^{-1}A'W + W^{-1}AW' - W^{-1}W'\Lambda - \Lambda' = 0$$

Wir definieren dann

$$C := W^{-1}W'$$

Damit ist $W' = WC$. Wir versuchen jetzt nicht direkt W' zu bestimmen, sondern C . Setzen wir ein, dann erhalten wir:

$$\Lambda' = W^{-1}A'W + \Lambda C - C\Lambda$$

Wir betrachten die Gleichung nun komponentenweise und erhalten dann:

$$\delta_{k,l}\lambda'_k = \vec{v}_k^* A' \vec{w}_l + (\lambda_l - \lambda_k) \cdot c_{k,l}$$

Dabei ist \vec{v}_k^* der k-te Vektor von W^{-1} , \vec{w}_l der l-te Eigenvektor von W und λ_l und λ_k der l-te bzw. k-te Eigenwert. Die Ableitung des k-ten Eigenwerts ist dann

$$\lambda'_k = \vec{v}_k^* A' \vec{w}_l \quad (3.15)$$

Wenn wir die Gleichung nach den Komponenten von C auflösen, erhalten wir

$$c_{k,l} = \begin{cases} \frac{-\vec{v}_k^* A' \vec{w}_l}{(\lambda_l - \lambda_k)} & \text{für } k \neq l \\ 0 & \text{für } k = l \end{cases} \quad (3.16)$$

Wir können also die Ableitungen der Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix A aus deren Eigenwerten und Eigenvektoren, sowie der Ableitung der Matrix bestimmen, ohne ein weiteres Eigenwertproblem zu lösen! Dies reduziert den Rechenaufwand erheblich.

3.2.2.2 2D-Gitter

Nun soll die Ableitungsberechnung für zweidimensionale Gitter betrachtet werden. Besonders bei zweidimensionalen Gitterstrukturen ist die rigorose Rechnung sehr aufwändig, so dass die Betrachtung des inversen Problems (z.B. für die Rekonstruktion von Gitterparametern aus Beugungsmessungen) sehr lange dauert. Eine schnelle Berechnung der Gradienten würde einen erheblichen Geschwindigkeitsvorteil bedeuten. Das oben beschriebene Verfahren soll nun also auf zweidimensionale Gitter angewendet werden.

Da sich die RCWA für zweidimensionale Gitter nicht grundsätzlich vom eindimensionalen Fall unterscheidet (vgl. Abschnitt 2.1.4.3), ist auch die Herleitung für die Ableitungsberechnung zweidimensionaler Gitter in weiten Teilen analog zum eindimensionalen Fall, hier werden daher nur die wichtigsten Schritte dargestellt. Wir beginnen mit der Gleichung für die Feldamplituden aus dem ETMA und leiten diese ab. Wir erhalten dann aus Gleichung 2.111:

$$\begin{pmatrix} B^{-1}T + B^{-1}T' \\ R' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F & -\hat{Z}_I \\ G & -\hat{Y}_I \end{pmatrix}^{-1} \cdot (-1) \cdot \begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} B^{-1}T \quad (3.17)$$

Für die Ableitungen von F und G erhalten wir aus Gleichung 2.109:

$$\begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -V'_1 - (W'_1 A + W_1 A') \\ V'_2 + W'_2 A + W_2 A' \end{pmatrix}$$

A' und B' erhalten wir aus Gleichung 2.108

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -V_1 & \hat{Z}_{III} \\ -V_2 & \hat{Y}_{III} \end{pmatrix}^{-1} \left[\begin{pmatrix} W'_1 \\ W'_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -V'_1 \\ -V'_2 \end{pmatrix} A \right]$$

W'_1, W'_2, V'_1, V'_2 erhalten wird, in dem wir Gleichung 2.110 ableiten:

$$W'_1 = -D_\phi (V'X + VX') \quad (3.18)$$

$$W'_2 = -\tilde{D}_\phi (W'X + WX') \quad (3.19)$$

$$V'_1 = -D_\phi V' \quad (3.20)$$

$$V'_2 = -\tilde{D}_\phi W' \quad (3.21)$$

Wir benötigen dann noch die Ableitung von V :

$$V' = (\Omega_2^{-1})' WQ + \Omega_2^{-1} (W'Q + WQ') \quad (3.22)$$

Die Berechnung von X' ist dabei analog zum eindimensionalen Fall. Nun fehlt noch die Berechnung von $(\Omega_2^{-1})'$:

$$(\Omega_2^{-1})' = -\Omega_2^{-1} \Omega_2' \Omega_2^{-1} \quad (3.23)$$

und

$$\Omega_2' = \begin{pmatrix} 0 & -\llbracket [\epsilon] \rrbracket' \\ \llbracket [\epsilon] \rrbracket' & 0 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Nun haben wir die Ableitung der Beugungseffizienz auf die Berechnung von W' und Q' zurück geführt. Nun können wir wieder das oben beschriebene Verfahren für die Ableitung der Eigenwerte und Eigenvektoren verwenden. Hierfür wird dann noch die Ableitung der Matrix Ω_1 benötigt:

$$\Omega_1 = \begin{pmatrix} K_x^2 + \llbracket [\epsilon] \rrbracket D & (K_y - \llbracket [\epsilon] \rrbracket K_y E^{-1}) K_x \\ (K_x - \llbracket [\epsilon] \rrbracket K_x E^{-1}) K_y & K_y^2 + \llbracket [\epsilon] \rrbracket B \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

mit

$$D = K_y E^{-1} K_y - I$$

$$B = K_x E^{-1} K_x - I$$

Die Teile der abgeleiteten Matrix sind dann

$$(\Omega_1')_{1,1} = \llbracket [\epsilon] \rrbracket' D + \llbracket [\epsilon] \rrbracket D' \quad (3.26)$$

$$(\Omega_1')_{1,2} = -(\llbracket [\epsilon] \rrbracket' K_y E^{-1} + \llbracket [\epsilon] \rrbracket K_y (E^{-1})') K_x \quad (3.27)$$

$$(\Omega_1')_{2,1} = -(\llbracket [\epsilon] \rrbracket' K_x E^{-1} + \llbracket [\epsilon] \rrbracket K_x (E^{-1})') K_y \quad (3.28)$$

$$(\Omega_1')_{2,2} = \llbracket [\epsilon] \rrbracket' B + \llbracket [\epsilon] \rrbracket B' \quad (3.29)$$

und für die Ableitungen von B , D und E erhalten wir:

$$D' = K_y (E^{-1})' K_y \quad (3.30)$$

$$B' = K_x (E^{-1})' K_x \quad (3.31)$$

$$(E^{-1})' = -E^{-1} E' E^{-1} \quad (3.32)$$

Die Berechnung der Beugungseffizienz lässt sich also auch im zweidimensionalen Fall auf die Berechnung der Ableitungen der Eigenwerte und Eigenvektoren zurück führen. Diese lassen sich wie im eindimensionalen Fall ohne das Lösen eines Eigenwertproblems berechnen. Im eindimensionalen Fall wird dafür nur die Ableitung der Matrix E , also der Matrix der Fourier-Koeffizienten benötigt. Diese können analytisch berechnet werden. Im zweidimensionalen Fall benötigt man mit der Formulierung von Li für eine gute Konvergenz noch die Ableitungen der Matrizen $[[\epsilon]]$ und $[[\epsilon]]$ [47]. Diese Matrizen können für allgemeine Gitterzellen allerdings nicht analytisch bestimmt werden, sondern müssen mit Hilfe der FFT berechnet werden. Die Ableitung der Matrizen kann also auch nicht analytisch berechnet werden, sondern muss numerisch berechnet werden.

Vergleich der Genauigkeit und Konvergenz

Das Verfahren erlaubt uns also die Berechnung der Ableitungen ohne zusätzliches Lösen eines Eigenwertproblems. Nun sollen die analytisch bestimmten Ableitungen mit numerisch berechneten verglichen werden. Dazu berechnen wir exemplarisch die Ableitung der Beugungseffizienz eines quadratischen Säulengitters (s. Abb. 3.3) nach dem Füllfaktor f . Abb. 3.4 zeigt die Beugungseffizienz einiger Ordnungen (grüne Kurve), sowie die analytisch (blaue Kurve) und die numerisch bestimmte Ableitung (rote Kurve). Die Ableitungen stimmen für alle Ordnungen sehr gut überein.

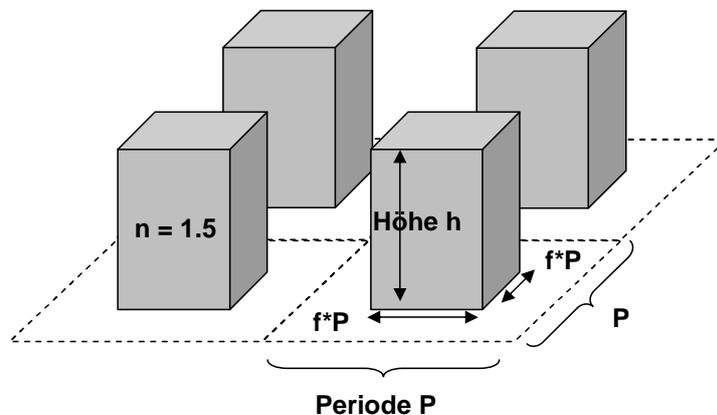


Abbildung 3.3: Zweidimensionales Säulengitter

Außerdem wurde untersucht, inwieweit sich die Konvergenzeigenschaften ändern. Abbildung 3.5 zeigt die analytische und die numerisch bestimmte Ableitung der $(0/0)$ -Beugungsordnung über der Modenzahl M_0 . Beide Ableitungen zeigen dasselbe Konvergenzverhalten. Die analytische Ableitungsbestimmung hat also keine negativen Auswirkungen auf die Konvergenzeigenschaften.

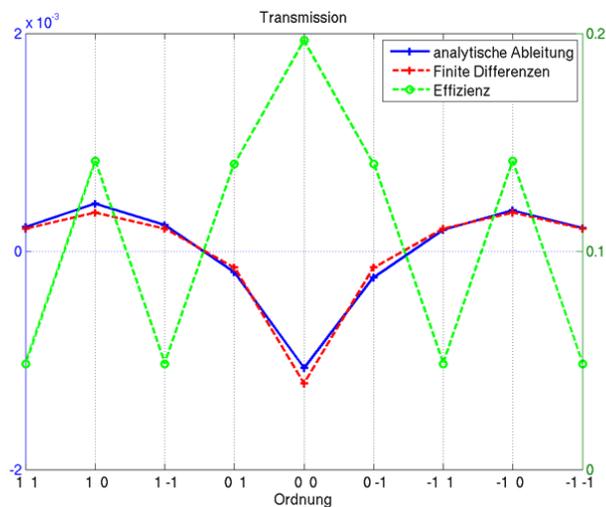


Abbildung 3.4: Vergleich analytische und numerische Ableitung

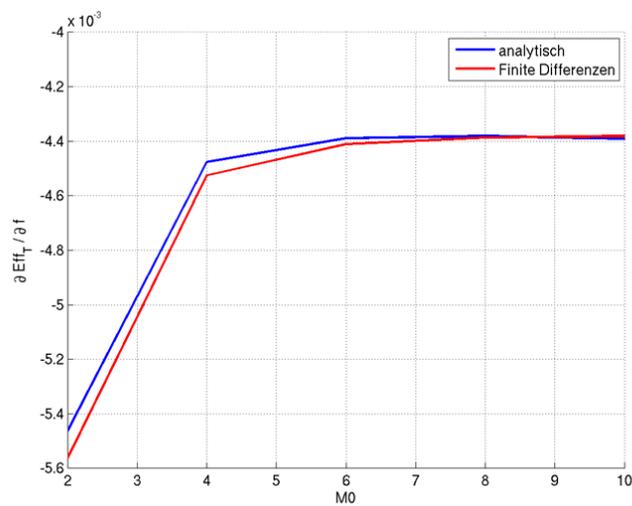


Abbildung 3.5: Konvergenzvergleich analytische und numerische Ableitung

3.2.2.3 Vergleich der Rechenzeit und Komplexität

Betrachten wir nun die Rechenzeit des Verfahrens im Vergleich zur numerischen Berechnung der Ableitung mit Differenzenquotienten. Für die Berechnung muss zwar kein zusätzliches Eigenwertproblem gelöst werden, aber die Berechnung der Ableitung erfordert das Lösen von einigen Gleichungssystemen.

Numerische Ableitungsberechnung

Betrachten wir zunächst die numerische Ableitung über Finite Differenzen. Wenn wir die einseitige Ableitung bilden, müssen wir für jeden Parameter die Effizienz für $p_i + \Delta p_i$ bestimmen. Wir benötigen also für N Gitterparameter $(N + 1)$ rigorose Rechnungen (siehe Abbildung 3.6).

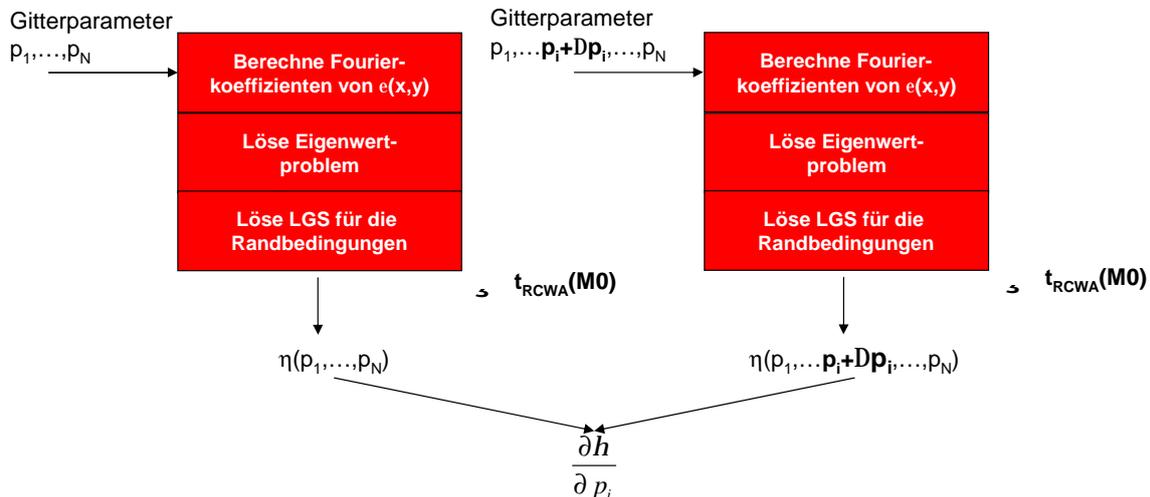


Abbildung 3.6: Numerische Ableitungsberechnung

Die Zeit für eine rigorose Rechnung bezeichnen wir als t_{RCWA} , dann beträgt die gesamte Rechenzeit:

$$t_{FD} = (N + 1) \cdot t_{RCWA}(M_0) \quad (3.33)$$

Verwenden wir anstelle der einseitigen Ableitung einen symmetrischen Differenzenquotienten, um eine genauere Ableitung zu erhalten, brauchen wir pro Parameter sogar zwei rigorose Rechnungen. Die Rechenzeit ist dann:

$$t_{FD,symm} = 2N \cdot t_{RCWA}(M_0) \quad (3.34)$$

Analytische Ableitungsberechnung

Im Vergleich zur numerischen Ableitungsberechnung benötigen wir bei der analytischen Bestimmung nur eine rigorose Rechnung. Außerdem müssen wir für jeden Parameter die Ableitung der Fourierkoeffizienten und die Ableitung der Beugungseffizienz berechnen. Wir benötigen also N mal die Zeit für die Ableitung und die Zeit für eine rigorose Rechnung (siehe Abb. 3.7).

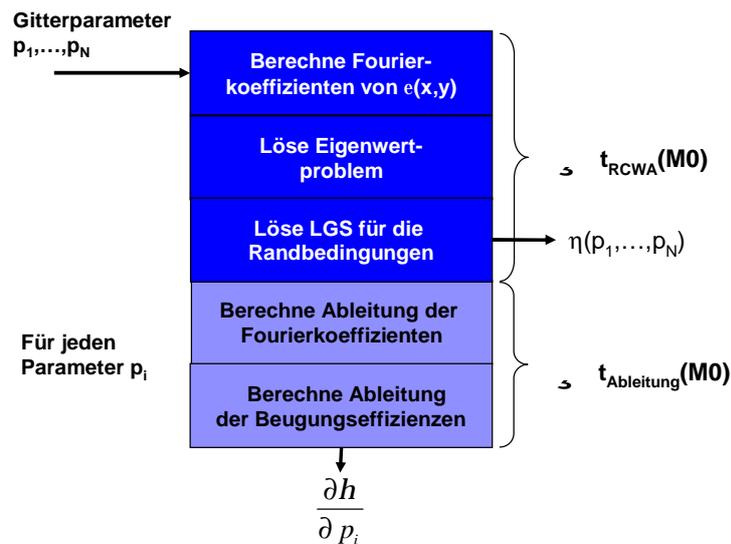


Abbildung 3.7: Analytische Ableitungsberechnung

$$t_{ana} = t_{RCWA}(M_0) + N \cdot t_{Ableitung}(M_0) \quad (3.35)$$

Wenn die Ableitungsberechnung also nicht länger dauert als die RCWA-Berechnung, bringt die analytische Berechnung der Ableitung einen Geschwindigkeitsvorteil.

Komplexität des Algorithmus Nun soll zunächst die Komplexität der Ableitungsberechnung analysiert werden. Bei der RCWA-Berechnung benötigt das Lösen des Eigenwertproblems die meiste Rechenzeit. Die Rechenzeit wächst mit $O(M^3)$, wobei M die Größe der Matrix ist, deren Eigenwerte und -vektoren berechnet werden. Betrachten wir nun die Rechenzeit für die Berechnung der Ableitung genauer. Zunächst muss für die Berechnung der abgeleiteten Feldamplituden ein Gleichungssystem gelöst werden (Gl. 3.6 bzw. 3.17). Die Matrizen, die zum Lösen des Gleichungssystems invertiert bzw. zerlegt (z.B. über eine LU-Zerlegung) werden müssen, kommen allerdings auch schon im RCWA-Algorithmus vor. Es ändert sich also nur die rechte Seite des Gleichungssystems, so dass die Matrizen nicht noch einmal zerlegt werden müssen. Lediglich die Rücksubstitution

ist notwendig zum Lösen des Gleichungssystems. Vergleicht man die Komplexität der Algorithmen, so ist die LU-Zerlegung $O(N^3)$, die Rücksubstitution aber nur $O(N^2)$.

Betrachten wir nun die Berechnung von F' und G' , so sind zunächst einige Matrixmultiplikationen notwendig. Die Matrixmultiplikation hat dabei die Komplexität² $O(M^3)$. F' und G' werden allerdings nie direkt benötigt, sondern nur das Produkt

$$\begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} B^{-1}T$$

Dies ist dann keine $M \times M$ -Matrix mehr, sondern nur noch ein Vektor der Länge M . Somit können die Matrix-Matrix Multiplikationen zur Berechnung von F' und G' durch Matrix-Vektor Multiplikationen ersetzt werden. Die Komplexität ist damit dann nur noch $O(M^2)$.

Ableitung der Eigenwerte und Eigenvektoren

Die Berechnung der Ableitungen der Eigenwerte und Eigenvektoren nach van der Aa (Gl. 3.15 und 3.16) hat die Komplexität $O(M^3)$, da im Prinzip eine Matrixmultiplikation berechnet werden muss. Es gibt zwar noch andere Möglichkeiten diese Ableitungen zu berechnen, allerdings haben auch diese Verfahren mindestens diese Komplexität, sofern die Ableitungen aller Eigenwerte und Eigenvektoren benötigt werden [108].

Ableitung der Fourier-Koeffizienten

Im eindimensionalen Fall kann die Ableitung der Fourier-Koeffizienten analytisch berechnet werden. Da die Größe der E -Matrix $M \times M$ ist, bekommen wir insgesamt eine Komplexität von $O(M^2)$. Im zweidimensionalen Fall müssen Ableitungen der zweidimensionalen Fourier-Koeffizienten berechnet werden, außerdem benötigt man die Matrizen $\lfloor \lceil \epsilon \rceil \rfloor$ und $\lceil \lfloor \epsilon \rfloor \rceil$. Diese können für allgemeine Gitterzellen nicht analytisch bestimmt werden, sondern müssen mit Hilfe der FFT berechnet werden. Die Berechnung benötigt N eindimensionale Fourier-Transformationen, also haben wir insgesamt eine Komplexität von $O(M^2 \cdot \log(M))$.

Vergleich der Rechenzeit

Sowohl der RCWA-Algorithmus, als auch die Ableitungsberechnung haben die Komplexität $O(M^3)$, das heißt zunächst, dass die Rechenzeit mit zunehmender Modenzahl gleich schnell wächst. Trotzdem kann die analytische Ableitungsberechnung von Vorteil sein, wenn ihre Rechenzeit durch andere Vorfaktoren kleiner ist als die Rechenzeit für die RCWA-Berechnung.

²Es gibt Algorithmen für die Matrixmultiplikation, die etwas besser sind als $O(M^3)$. Durch geschickte Verfahren lässt sich eine Komplexität von $O(M^{\log_2 7}) \approx O(M^{2.807})$ erreichen. Für sehr große Matrizen wurde auch schon $O(M^{2.376})$ gezeigt.

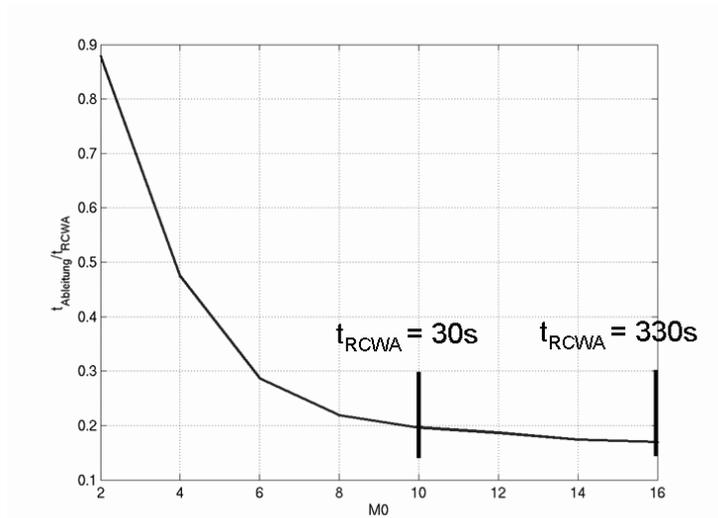
Abbildung 3.8: Verhältnis zwischen $t_{\text{Ableitung}}$ und t_{RCWA}

Abbildung 3.8 zeigt das Verhältnis der Zeit für die Ableitungsberechnung $t_{\text{Ableitung}}$ und der RCWA-Rechenzeit t_{RCWA} über der Modenzahl M_0 . Für eine große Modenzahl ergibt sich ein konstanter Wert, das heißt beiden Größen wachsen gleich schnell und haben daher dieselbe Komplexität.

Betrachtet man nun den Speedup, das heißt den Rechenzeitgewinn, den die analytische Berechnung der Ableitung bringt, so hängt dieser für eine bestimmte Modenzahl nur noch von der Anzahl der betrachteten Gitterparameter ab.

$$s(N) = \frac{t_{FD}(M_0)}{t_{ana}(M_0)} = \frac{N + 1}{1 + N \cdot \frac{t_{\text{Ableitung}}(M_0)}{t_{\text{RCWA}}(M_0)}}$$

Im Grenzfall vieler Gitterparameter ist dies genau das Verhältnis aus t_{RCWA} und t_{ana} :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} s = \frac{t_{\text{RCWA}}}{t_{\text{Ableitung}}}$$

3.2.2.4 Zusammenfassung

Es wurde gezeigt, dass sich die analytische Bestimmung der Ableitung der Beugungseffizienzen auf 2D-Gitter übertragen lässt. Die analytische Berechnung der Ableitungen bringt einen erheblichen Geschwindigkeitsvorteil und die analytisch berechneten Gradienten stimmen sehr gut mit den numerisch berechneten überein. Betrachtet man die Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems durch ein Optimierungsverfahren, so müssen in jedem Iterationsschritt die Ableitungen nach allen Gitterparametern berechnet

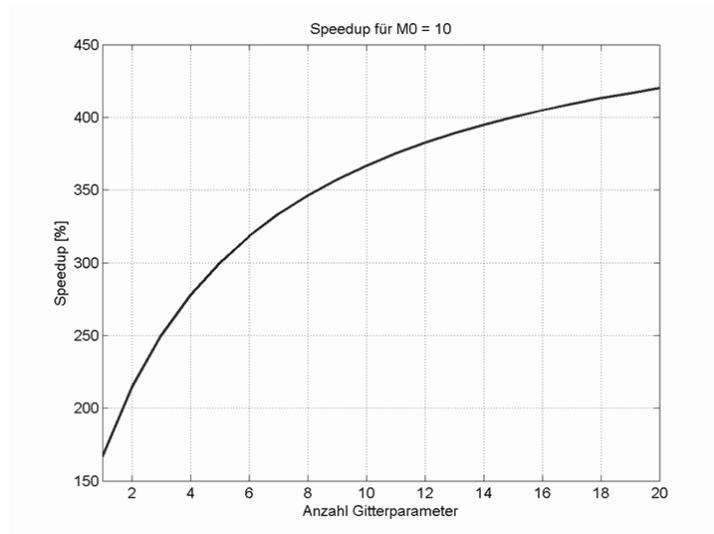


Abbildung 3.9: Speedup über der Parameterzahl

werden. Die Verwendung der analytisch bestimmten Gradienten beschleunigt also jeden Iterationsschritt, unabhängig vom gewählten Verfahren.

3.3 Approximation des Parameterraums

Wie oben bereits beschrieben ist eine Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems die Vorausberechnung von Daten und damit das Erzeugen einer Datenbank. Diese Datenbank wird dann nach dem passenden Parametersatz durchsucht. Ein Problem hierbei ist, dass die Daten in der Datenbank nur an diskreten Stellen, d.h. für bestimmte Parameterkombinationen vorliegen. Um die Parameter eines unbekanntes Gitters nun genau zu bestimmen, bräuchte man die Daten zwischen den Datenpunkten der Datenbank. Hier kommen nun klassischerweise Interpolationsverfahren, wie beispielsweise Spline-Interpolation [109] zum Einsatz, um die Zwischenwerte zu interpolieren. Einen ähnlichen Ansatz verfolgt die Approximation durch verschobene Basisfunktionen [10], die aber einige Vorteile im Vergleich zu vielen Interpolationsalgorithmen bietet. Das Approximationsverfahren, sowie dessen Eigenschaften werden im nächsten Abschnitt beschrieben. Hier soll zunächst auf das Approximationsverfahren und anschließend auf die Anwendung des Verfahrens zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems eingegangen werden.

3.3.1 Das Approximationsverfahren

Das Verfahren der **Least Square Approximation mit verschobenen Basisfunktionen** [10] basiert auf der Interpolation mit radialen Basisfunktionen [110]. Hier wird eine Oberfläche als lineare Superposition von radial symmetrischen Basisfunktionen dargestellt. Hervorzuheben ist zunächst, dass es sich hier aber um ein Approximationsverfahren und nicht um ein Interpolationsverfahren handelt. Bei der Interpolation von Daten ist eine zwingende Voraussetzung, dass die Interpolation genau durch die Abtastpunkte geht. Dies ist insbesondere bei verrauschten Daten (wie z.B. Messdaten) störend. Im Vergleich dazu muss die Approximation nicht notwendigerweise die Daten an den Abtastpunkten wiedergeben, sondern liefert eine Least Square Approximation an die Daten (siehe Abb. 3.10).

3.3.1.1 Höhenapproximation

Zunächst soll die Approximation der Funktionswerte einer vektoriellen Funktion betrachtet werden. Dieses Verfahren wird als Höhenapproximation³ bezeichnet, im Gegensatz zur Gradientenapproximation, die später beschrieben wird. Die Approximation der

³Die Bezeichnung Höhenapproximation stammt aus der ursprünglichen Anwendung des Verfahrens in der Vermessung von Oberflächen. Hier unterscheidet man die Approximation der Höhen und der Approximation der Steigung, also der Gradienten der Höhenverteilung.

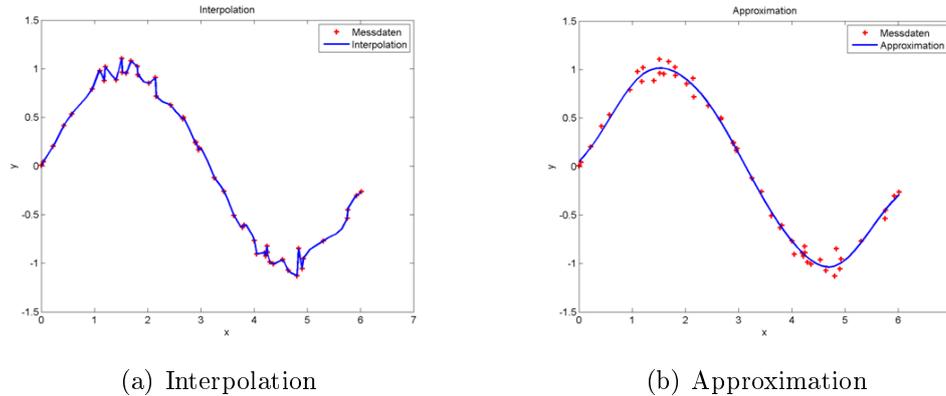


Abbildung 3.10: Vergleich Interpolation und Approximation von verrauschten Daten

Funktion ist eine Superposition von verschobenen Basisfunktionen:

$$\vec{f}(\vec{p}) = \sum_{k=0}^{B-1} \vec{c}_k \Psi(\vec{p} - \vec{p}_k, \vec{\sigma}) \quad (3.36)$$

Die Basisfunktionen Ψ sind an die Punkte \vec{p}_k verschoben und besitzen eine Gewichtung c_k . $\vec{\sigma}$ ist ein Skalierungsparameter und beschreibt die Breite der Basisfunktion. Die Basisfunktionen müssen dabei nicht, wie im Falle der Interpolation mit radialen Basisfunktionen, radialsymmetrisch sein. Ein Beispiel für eine solche Basisfunktion ist die Amplitude der Lorentz-Funktion:

$$\Psi(\vec{p}, \vec{\sigma}) = \sqrt{\frac{1}{1 + \sum_{j=1}^N \left(\frac{p_j}{\sigma_j}\right)^2}}$$

In Abbildung 3.11 ist das Prinzip der Superposition der verschobenen Basisfunktionen dargestellt. Die gewichteten und verschobenen Lorentz-Amplituden ergeben in Summe die approximierende Funktion (schwarze Kurve).

Die Basispunkte \vec{p}_k an die die Basisfunktionen verschoben werden, werden für die Approximation vorgegeben. $\vec{\sigma}$ wird problemangepasst gewählt, so dass zur Approximation lediglich die Koeffizienten c_k bestimmt werden müssen. Suchen wir eine Approximation an die Daten \vec{y}_i , stellen wir folgende Gleichung auf:

$$\Phi(\vec{p}_i) = \sum_i \left\| \vec{y}_i - \vec{f}(\vec{p}_i) \right\|^2 \rightarrow \min$$

Also

$$\Phi(\vec{c}_k) = \sum_i (\vec{y}_i - f(\vec{p}_i))^T (\vec{y}_i - f(\vec{p}_i)) \rightarrow \min$$

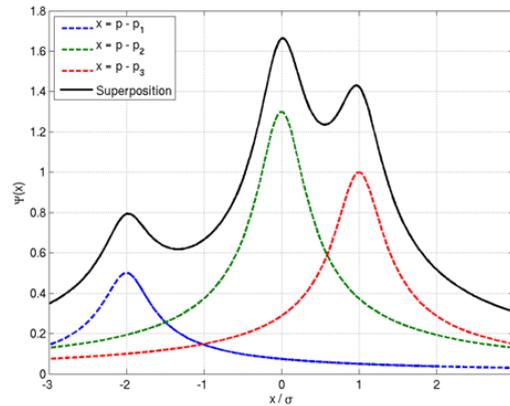


Abbildung 3.11: Superposition von Basisfunktionen

Wir können dieses Problem lösen, indem wir die Ableitung Null setzen:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial c_k} = 0$$

Wir erhalten dann ein lineares Gleichungssystem:

$$\sum_{k'=1}^B c_{j,k'} M_{k,k'} = V_{j,k}$$

mit

$$M_{k,k'} = \sum_{i=1}^M \Psi(p_i - p_{k'}) \Psi(p_i - p_k) \quad (3.37)$$

und

$$V_{j,k} = \sum_{i=1}^M y_{j,i} \Psi(p_i - p_k) \quad (3.38)$$

Die Approximation wird also bestimmt, indem das Gleichungssystem aufgestellt und die Koeffizienten der Basisfunktionen bestimmt werden. Die Superposition der Basisfunktionen liefert dann eine analytische Darstellung des Parameterraums und damit die Berechnung von jedem beliebigen Punkt im Parameterraum. Da die Matrix M nicht von den Daten y_i abhängt, können leicht neue Punkte zur Approximation hinzugefügt werden, da sich nur die rechte Seite des Gleichungssystems ändert und die Koeffizienten daher schnell neu berechnet werden können.

3.3.1.2 Eigenschaften der Approximation durch verschobene Basisfunktionen

Die Approximation durch verschobene Basisfunktionen bietet die Möglichkeit vektorielle Daten in einem beliebig dimensional Parameterraum zu approximieren. Ein Vorteil

der Approximation im Gegensatz zur Interpolation ist dabei die Glättung von verrauschten Daten. Bei der Betrachtung des inversen Gitterbeugungsproblems werden allerdings berechnete Beugungseffizienzen approximiert, so dass hier keine verrauschten Daten zu erwarten sind. Trotzdem bietet sich das Verfahren zur Lösung des inversen Problems an. Die Approximation durch verschobene Basisfunktionen stellt keine Anforderungen an die Wahl der Datenpunkte und die Dimensionalität des Parameter- und des Werteraums. Das Verfahren kann dabei als „Black-Box“ angesehen werden: Die Approximation kann mit Daten gefüllt werden, anschließend können beliebige Werte ausgelesen werden. Zur Verfeinerung der Approximation können zu jedem Zeitpunkt weitere Werte zur Approximation hinzugefügt werden. Dies könnte auch für ein iteratives Verfahren zur Lösung des inversen Problems genutzt werden: In jedem Iterationsschritt fügt man einen neuen Datenpunkt zur Approximation hinzu und verbessert so die Approximation. Das globale Minimum der Approximation (bzw. einer approximierten Potentiallandschaft) kann dann sehr schnell bestimmt werden und als nächster Datenpunkt für die Approximation genutzt werden, um so die Genauigkeit in der Nähe des Minimums zu erhöhen. Außerdem sorgt die Approximation für eine erhebliche Datenreduktion - der komplette Parameterraum wird lediglich durch die Basispunkte und die Koeffizienten beschrieben.

Zusammenfassend bietet die Approximation durch verschobene Basisfunktionen folgende Eigenschaften:

- Approximation eines beliebig dimensionalen Parameterraums
- Approximation vektorieller Daten
- Analytische Darstellung des gesamten Raums der beliebig oft differenzierbar ist
- Kommt ohne äquidistantes Raster aus
- Glättung von verrauschten Daten
- Datenreduktion
- Verfahren ist akkumulativ, d.h. es können leicht neue Messpunkte hinzugefügt werden

3.3.2 Anwendung des Verfahrens auf das inverse Gitterbeugungsproblem

Zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems soll zunächst eine Datenbank mit berechneten Beugungseffizienzen erzeugt werden. Hierzu tasten wir den Parameterraum ab und füllen die Datenbank mit den berechneten Daten für die verschiedenen Parameterkombinationen an den Abtastpunkten. Für jede Parameterkombination berechnen wir also

rigoros die Beugungseffizienz für die L Konfigurationen $\vec{C} = (\lambda, \pi, \vartheta, m)$. Die Anzahl der Abtastpunkte bezeichnen wir mit M .

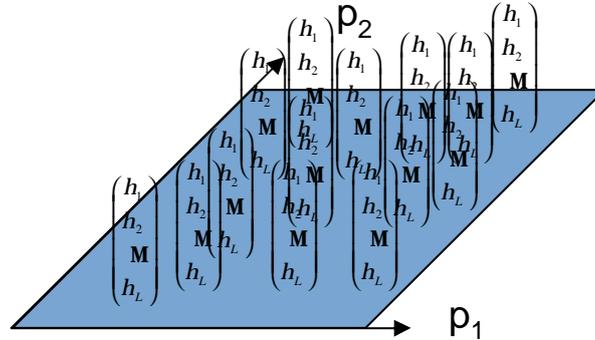


Abbildung 3.12: Effizienzvektoren im Parameterraum

Abbildung 3.12 zeigt schematisch den abgetasteten Parameterraum. An den Abtastpunkten im zweidimensionalen Parameterraum werden für die L Konfigurationen L Beugungseffizienzen rigoros berechnet. Der Parameterraum soll nun mit Hilfe von verschobenen Basisfunktionen approximiert werden. Der Ausgangspunkt ist also ein N -dimensionaler Parameterraum (Gitterparameter) mit einer L -dimensionalen Funktion (Beugungseffizienzen). Die Funktionswerte sind nur an M Punkten gegeben und gesucht sind die Werte zwischen den Abtastpunkten, d.h. die Approximation des gesamten Parameterraums.

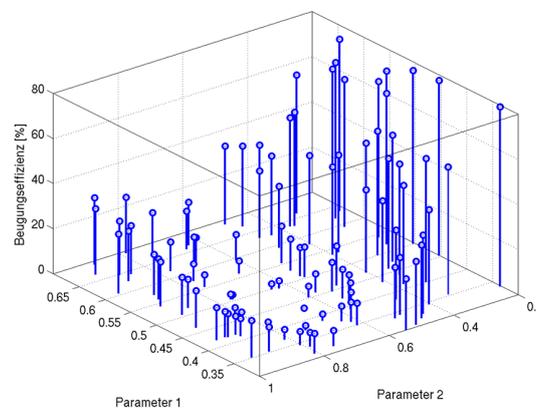


Abbildung 3.13: Ausgangspunkt der Approximation

Die Abbildung 3.13 zeigt den Ausgangspunkt der Approximation für einen zweidimensionalen Parameterraum. Dargestellt ist hier nur eine Vektorkomponente. Die Least-Square-Approximation mit verschobenen Basisfunktionen (Abb. 3.14) liefert uns dann eine glatte, analytische Beschreibung der vektorwertigen Funktion als Superposition von verschobenen vektoriellen Basisfunktionen.

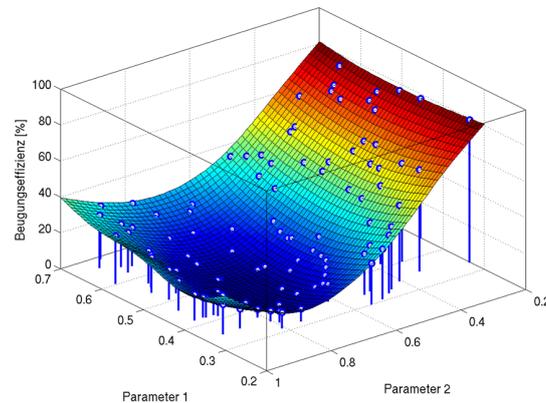


Abbildung 3.14: Ergebnis der Approximation

Die Approximation des Vektorfelds ist dann der Ausgangspunkt für die Lösung des inversen Problems. Zu einem gegebenen Effizienzvektor kann die Approximation nach dem am besten passenden Parametersatz durchsucht werden. Die Approximation beinhaltet dabei alle Punkte des Parameterraums. Die Approximation kann in dieser Anwendung auch als eine Art „Black-Box“ betrachtet werden. Durch das Hinzufügen von rigoros berechneten Effizienzen wird die Approximation mehr und mehr verfeinert. Dann kann die Approximation dazu genutzt werden, um die Beugungseffizienzen an den Stellen zwischen den Abtastpunkten abzufragen. Die Funktion ist dabei ähnlich wie ein neuronales Netz, das ebenfalls eingesetzt werden kann, um das inverse Gitterbeugungsproblem zu lösen [111, 112, 113].

3.3.3 Gradientenapproximation

Die Approximation von Gradienten hat viele Anwendungen auf dem Gebiet der optischen Messtechnik. In vielen Fällen stehen nur die Gradientendaten zur Verfügung, nicht aber die gesuchte Größe. Z.B. wird in der Deflektometrie die Krümmung einer Fläche über die Ablenkung des Lichts bestimmt, gesucht ist aber in vielen Fällen die Höhenverteilung der gemessenen Oberfläche. Die Gradientendaten müssen also noch integriert werden. Die Approximation durch verschobene Basisfunktion kann zur Approximation von Gradientendaten genutzt werden [10] und liefert dann nicht nur die Approximation der Gradienten, sondern auch - ohne jegliche numerische Integration - die Höhendaten.

Bis jetzt wurde die Approximation benutzt, um Beugungseffizienzen zu approximieren. Im Abschnitt 3.2.2 wurde gezeigt, dass wir in der RCWA leicht die Ableitung der Beugungseffizienz nach den Profilparametern des Gitters bestimmen können. Diese Gradienten können ebenfalls als Ausgangspunkt für eine Least-Square Approximation mit verschobenen Basisfunktionen dienen.

Theorie

Wir betrachten nun anstelle der Funktion $f(\vec{p})$ den Gradient der Funktion, also die Ableitung nach den Parametern p_i :

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial p_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial p_M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(\vec{p}) \\ \vdots \\ f_M(\vec{p}) \end{pmatrix}$$

Die partiellen Ableitungen bezeichnen wir als $f_j = \frac{\partial f}{\partial p_j}$. Dann können wir folgenden Ansatz für die Approximation aufstellen:

$$f_j(\vec{p}) = \sum_{k=0}^{B-1} c_k \Psi_j(\vec{p} - \vec{p}_k, \vec{\sigma})$$

Wobei $\Psi_j = \frac{\partial \Psi}{\partial p_j}$ die partielle Ableitung der Basisfunktion ist, diese ist analytisch berechenbar.

Die Funktionswerte erhalten wir dann ohne Integration aus der Approximation (bis auf eine Konstante):

$$f(\vec{p}) = \sum_{k=0}^{B-1} c_k \Psi(\vec{p} - \vec{p}_k, \vec{\sigma}) \quad (3.39)$$

Für die Approximation wählen wir denselben Ansatz wie oben und bilden die partiellen Ableitungen. Die Koeffizienten c_k lassen sich über ein ähnliches Gleichungssystem bestimmen. Die genau Herleitung ist bei Brenner [10] beschrieben.

Über die Approximation durch verschobene Basisfunktionen können also die Ableitungen der Beugungseffizienz für eine Approximation des Parameterraums genutzt werden. Aus den approximierten Gradienten lässt sich dann die Beugungseffizienz bis auf eine Konstante bestimmen. Dieser Offset kann bestimmt werden, wenn man die Beugungseffizienz an einem Punkt des Parameterraums kennt.

Beispiel: Approximation der Gradienten

Nun soll die Approximation von Gradientendaten anhand eines Beispiels betrachtet werden. Die Beugungseffizienz eines Gitters soll über einem gewissen Parameterraum approximiert werden, als Ausgangspunkt für die Approximation dienen nun die über die RCWA berechneten Gradienten. Wir betrachten wieder ein Binärgitter mit Gitterperiode $2 \mu\text{m}$. Durch die Gradienten soll die Beugungseffizienz über dem Füllfaktor und der

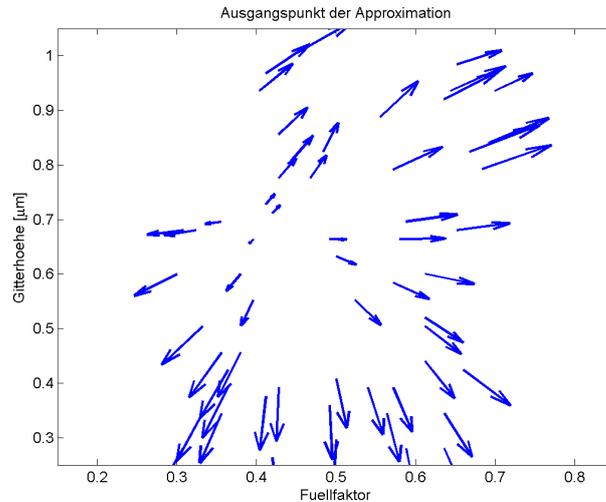


Abbildung 3.15: Ausgangspunkt der Approximation

Gitterhöhe bestimmt werden. Ausgangspunkt sind die Gradienten über dem Parameterraum an 64 zufällig gewählten Punkten.

Abbildung 3.15 zeigt die an 64 zufälligen Punkten berechneten Gradienten. Diese dienen nun als Basis für die Approximation. Durch das Lösen eines Gleichungssystems können nun die Koeffizienten der Basisfunktionen bestimmt werden. Wir erhalten dann die approximierten Gradienten. Abbildung 3.16 zeigt die Approximation der Gradienten über dem betrachteten Parameterraum (zur besseren Darstellung sind die Pfeillängen im Vergleich zu Abb. 3.15 skaliert). Wir erhalten dann eine glatte Verteilung der Gradienten. Die Basisfunktionen sind an 8×8 Basispunkten im Parameterraum definiert. Wie oben gezeigt, können nun aus den Gradientendaten die Höhendaten bestimmt werden (Gl. 3.39). In diesem Fall ist dies die Beugungseffizienz des Gitters.

Der Vergleich zwischen den approximierten Effizienzen und den elektromagnetisch berechneten ist in Abbildung 3.17 dargestellt. Die Farbskala zeigt die Beugungseffizienz in Prozent, die Kreuze markieren die Ausgangsdaten der Approximation. Zumindest qualitativ stimmt die Verteilung der approximierten Beugungseffizienz überein. Zum Vergleich wurden an denselben Stellen nicht die Gradienten, sondern die Beugungseffizienz als Grundlage für die Approximation verwendet. Das Ergebnis ist in Abb. 3.18 dargestellt.

Hier sind vor allem im Randbereich deutliche Abweichungen zu erkennen. Eine quantitative Analyse der Genauigkeit der Approximation zeigt Abb. 3.19. Dargestellt ist die relative Abweichung zwischen den approximierten und den berechneten Beugungseffizienzen in Prozent.

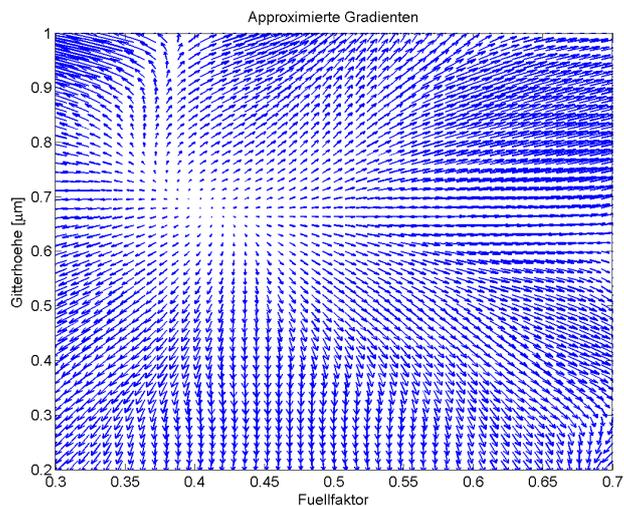
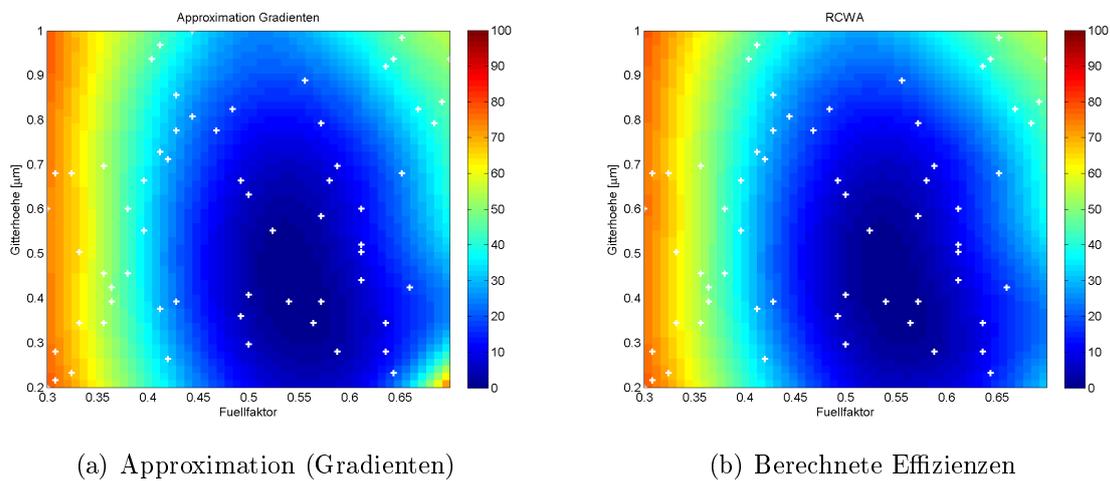


Abbildung 3.16: Approximierte Gradienten



(a) Approximation (Gradienten)

(b) Berechnete Effizienzen

Abbildung 3.17: Vergleich zwischen approximierten und berechneten Effizienzen: Gradientenapproximation

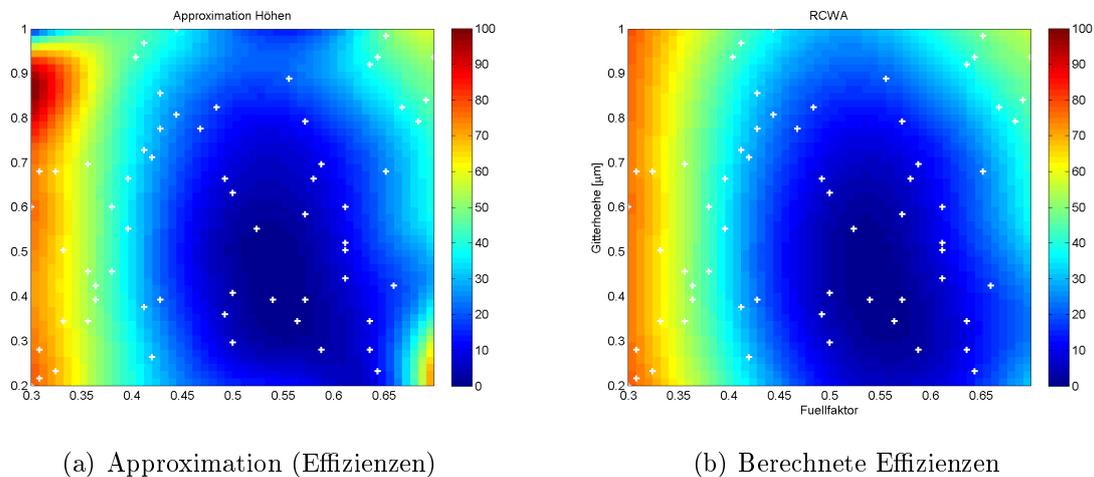


Abbildung 3.18: Vergleich zwischen approximierten und berechneten Effizienzen: Höhenapproximation

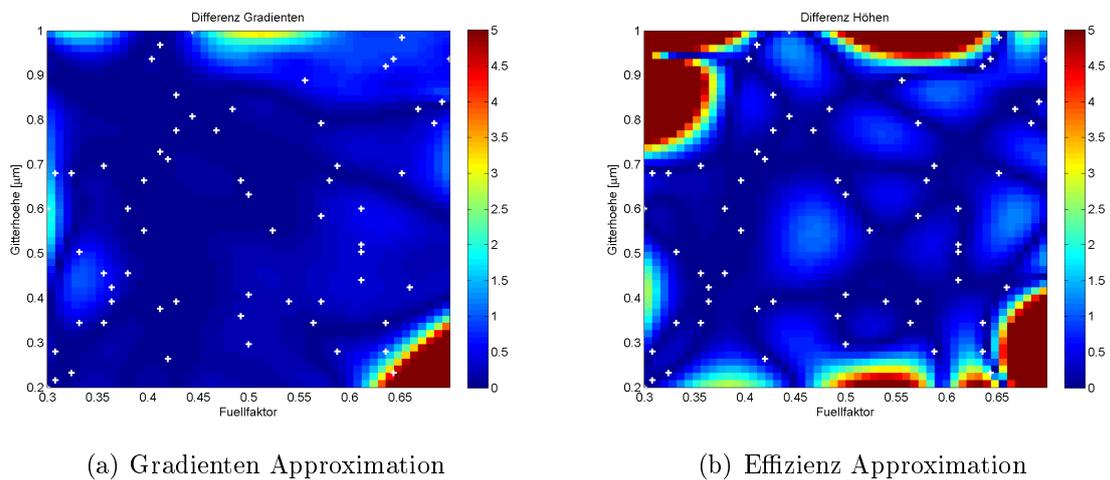


Abbildung 3.19: Differenz zwischen Approximation und berechneten Daten

Insgesamt liefert die Approximation auf Basis der Gradienten eine bessere Übereinstimmung mit den berechneten Daten. Insbesondere am Rand des Parameterraums, an dem nur wenige Daten in die Approximation mit eingeflossen sind, sind die Abweichungen deutlich geringer. Im Inneren des Parameterraums geben beide Verfahren die Effizienzverteilung sehr gut wieder. Die relative Abweichung ist (bei 64 zufällig gewählten Datenpunkten für die Approximation) kleiner als 2 %.

Vergleich der Genauigkeit

Wie oben gezeigt, liefert die Approximation auf Basis von Gradientendaten eine höhere Genauigkeit bei gleicher Anzahl an Datenpunkten. Nun betrachten wir die Genauigkeit der Approximation bei zunehmender Datenpunktzahl. Für die Untersuchung wurde die Zahl der Datenpunkte im obigen Beispiel variiert. Abb. 3.20 zeigt die maximale Abweichung zwischen berechneter und approximierter Beugungseffizienz.

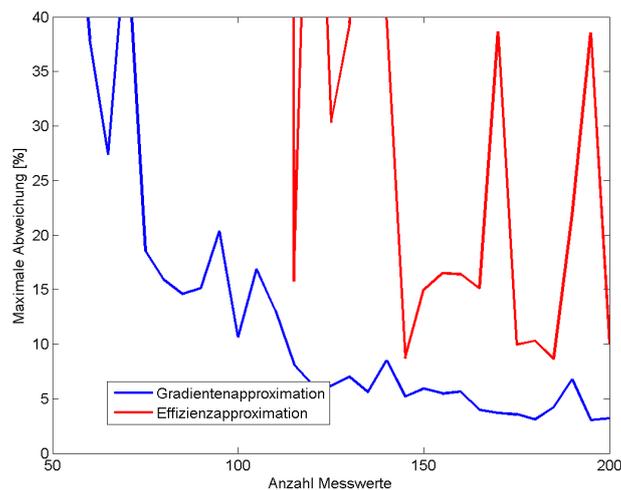


Abbildung 3.20: Genauigkeit der Approximation

Wie auch im oben betrachteten Beispiel liefert die Approximation auf Basis der Gradienten eine höhere Genauigkeit. Die maximale Abweichung zwischen der Approximation und den berechneten Effizienzen ist deutlich geringer als bei der Höhenapproximation.

Ausblick

Bis jetzt wurde die Approximation der Beugungseffizienzen und der Gradienten getrennt von einander betrachtet. Mit der Methode von van der Aa liefert uns die RCWA aller-

dings sowohl die Effizienz als auch die Ableitungen. Um eine möglichst gute Approximation der Beugungseffizienzen über den Parameterraum zu bekommen - z.B. um das inverse Gitterbeugungsproblem zu lösen - könnte man versuchen beide Informationen zu verwenden, um eine Approximation zu bestimmen.

3.4 Besonderheiten zweidimensionaler Gitter

Bisher wurde das inverse Gitterbeugungsproblem unabhängig von der Dimensionalität des Beugungsgitters betrachtet. Prinzipiell ist das Problem auch unabhängig davon, ob ein ein- oder zweidimensionales Beugungsgitter betrachtet wird, im Fall zweidimensionaler Gitter gibt es trotzdem einige Besonderheiten, die hier kurz betrachtet werden sollen.

Im Abschnitt 2.1.4.3 wurde die RCWA für ein- und zweidimensionale Gitter betrachtet. In beiden Fällen werden die Maxwell'schen Gleichungen über einen Eigenwertansatz gelöst - dieser unterscheidet sich jedoch in der Größe der auftretenden Matrizen. Im eindimensionalen Fall benötigen wir nur eine Modenentwicklung in einer Dimension. Betrachten wir die Modenentwicklung, dann haben wir für $-M_0 \cdots + M_0$ also eine Gesamtmodenzahl

$$M_{1D} = 2M_0 + 1$$

Die Matrix deren Eigenwerte berechnet werden müssen hat die Größe $M_{1D} \times M_{1D}$, also $(2M_0 + 1) \times (2M_0 + 1)$. Im zweidimensionalen Fall benötigen wir sowohl eine Modenentwicklung in x- als auch in y-Richtung. Die Gesamtmodenzahl ist damit

$$M_{2D} = (2M_0 + 1)^2$$

Zudem muss ein größeres Eigenwertproblem der Größe $2M_{2D} \times 2M_{2D}$, also $2(2M_0 + 1)^2 \times 2(2M_0 + 1)^2$ gelöst werden (vgl. Gleichung 2.104). Da die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren eine Komplexität von $O(N^3)$ besitzt (wobei N die Dimension der Matrix ist), ist die Rechenzeit für ein zweidimensionales Gitter bei gleicher Modenzahl M_0 um den Faktor $8(M_0 + 1)^3$ höher. Der Speicherbedarf der Matrizen wächst entsprechend quadratisch. Die elektromagnetische Betrachtung zweidimensionaler Beugungsgitter ist also deutlich aufwändiger als der eindimensionale Fall. Der Speicherplatzbedarf und die Rechenzeit der RCWA für ein- und zweidimensionale Gitter ist in Tabelle 3.1 gegenüber gestellt. Da also bereits das Vorwärtsproblem bereits einen hohen Rechenaufwand benötigt, macht dies das inverse Problem umso anspruchsvoller. Gerade bei der Betrachtung des inversen Gitterbeugungsproblems zweidimensionaler Gitter werden Verfahren benötigt, die mit möglichst wenigen Vorwärtsrechnungen auskommen.

Eine weitere Schwierigkeit ist die Parametrisierung des Gitters im zweidimensionalen Fall. Im Vergleich zu eindimensionalen Gittern gibt es deutlich mehr Freiheitsgrade, dies

	1D-Gitter	2D-Gitter
Gesamtmodenzahl	$2M_0 + 1$	$(2M_0 + 1)^2$
Speicherplatz	$(2M_0 + 1)^2 = O(M_0^2)$	$4(2M_0 + 1)^4 = O(M_0^4)$
Rechenzeit	$(2M_0 + 1)^3 = O(M_0^3)$	$8(2M_0 + 1)^6 = O(M_0^6)$

Tabelle 3.1: Komplexität des RCWA-Algorithmus

führt zwar zu vielen Freiheiten im Design allerdings auch zu Schwierigkeiten bei der Lösung des inversen Problems. Insbesondere bei der Charakterisierung von Beugungsgittern (siehe Abschnitt 4.2) müssen alle physikalischen Gitterparameter im Modell berücksichtigt werden. Dadurch wird die Lösung des inversen Problems schwieriger als im eindimensionalen Fall, da mehr Gitterparameter auftreten können. Da zweidimensionale Beugungsgitter mehr Beugungsordnungen besitzen als eindimensionale Gitter muss genauer untersucht werden, ob alle Beugungsordnungen auf alle Gitterparameter sensitiv sind, so dass aus den Beugungseffizienzmessungen einzelner Ordnungen alle Gitterparameter eindeutig bestimmt werden können.

4 Anwendungsbeispiele des inversen Gitterbeugungsproblems

Im Kapitel Anwendungsbeispiele des inversen Gitterbeugungsproblems werden die zwei Anwendungen dargestellt, bei denen das inverse Gitterbeugungsproblem gelöst werden muss. Zunächst wird das Design und die Optimierung von Beugungsgittern betrachtet, hier sucht man ein Gitter für eine bestimmte Anwendung und stellt bestimmte Forderungen an die Beugungseffizienz des Gitters. Die zweite Anwendung ist die Gittercharakterisierung. Durch das Lösen des inversen Gitterbeugungsproblems können aus Beugungseffizienzmessungen die Parameter des Gitters, wie z.B. die Gitterhöhe bestimmt werden.

4.1 Design und Optimierung von Beugungsgittern

In diesem Abschnitt sollen einige Beispiele für das Design und die Optimierung von Beugungsgittern dargestellt werden, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden. Es sollen die Anforderungen für verschiedene Anwendungen dargestellt und Lösungsmöglichkeiten analysiert werden. In diesem Abschnitt soll die Relevanz des inversen Gitterbeugungsproblems anhand von Beispielen deutlich gemacht werden. Es geht dabei weniger um die Lösungsverfahren, sondern primär um die Betrachtung von verschiedenen Anwendungsbeispielen. Im zweiten Abschnitt des Kapitels werden dann die betrachteten Verfahren zur Lösung des inversen Problems zur Gittercharakterisierung angewendet (Abschnitt 4.2).

4.1.1 Homogenisierung der Beugungseffizienz

In vielen Anwendungen benötigt man eine konstante Beugungseffizienz, unabhängig von der Periode des Gitters. Wie aber bereits im Abschnitt 2.3.4 gezeigt, führen elektromagnetische Effekte dazu, dass die Beugungseffizienz für kleine Gitterperioden nicht mehr konstant ist. Hier soll nun ein Verfahren betrachtet werden, mit dem man ein diffraktives Element konstruieren kann, das eine homogene Beugungseffizienz über der Gitterperiode besitzt.

Betrachtet man ein Gitter mit einer kleinen Gitterperiode, so schwankt die Beugungseffizienz sehr stark über der Gitterperiode. Dies ist für ein binäres Phasengitter (Füllfaktor 0.5, Gitterhöhe $\frac{\lambda}{2(n-1)}$) in Abbildung 4.1 dargestellt. Betrachtet man nun ein diffraktives Element, das Gitterperioden in dieser Größenordnung aufweist - wie z.B. eine diffraktive Linse mit hoher numerischer Apertur - so erzeugt das Element keine homogene Intensitätsverteilung.

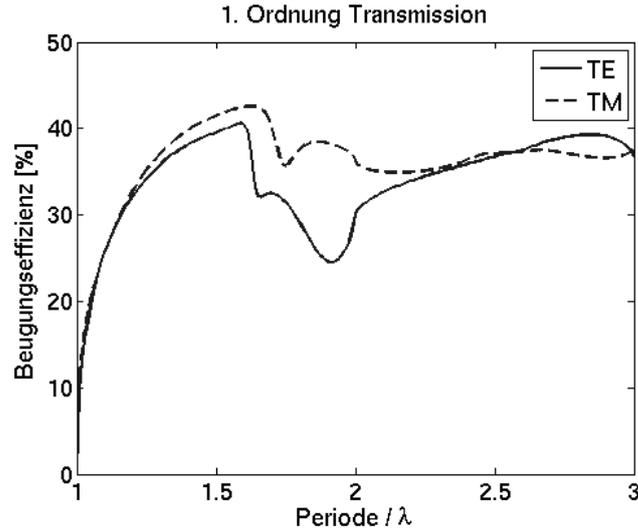


Abbildung 4.1: Beugungseffizienz über der Gitterperiode

In Abschnitt 2.3 wurde bereits gezeigt, dass bestimmte Gitterparameter, wie z.B. die Gitterhöhe oder der Füllfaktor einen Einfluss auf die Beugungseffizienz haben. Dies kann nun genutzt werden, um die Beugungseffizienz eines diffraktiven Elements anzupassen und z.B. eine homogene Intensitätsverteilung zu erzeugen. Dies wird z.B. von Kleemann erreicht, indem die Höhe eines geblazten Gitters angepasst wird [114, 115]. Betrachtet man allerdings ein binäres Element, dann scheint die Anpassung der Gitterhöhe nicht sehr sinnvoll, da dann der Vorteil der einfachen Herstellung des Binärgitters wegfällt. Allerdings kann man auch für ein binäres Gitter eine Homogenisierung der Effizienz erreichen und zwar über den Füllfaktor des Gitters.

Betrachtet man die Beugungseffizienz über dem Füllfaktor, so führen die elektromagnetischen Effekte dazu, dass sich für unterschiedliche Gitterperioden unterschiedliche Verläufe ergeben. In Abbildung 4.2 ist die Beugungseffizienz der 1. Beugungsordnung (bei unpolarisierter Beleuchtung) eines binären Phasengitters ($n = 1.5$, $h = \lambda$) über dem Füllfaktor dargestellt. Um eine homogene Beugungseffizienz zu erzielen, wählt man nun den Füllfaktor für jede Periode so, dass sich die gewünschte Beugungseffizienz ergibt. Im Diagramm ist dies beispielhaft für eine Beugungseffizienz von 38% und drei verschiedene Gitterperioden ($P = 1.5 \lambda$, 2λ und 2.5λ) dargestellt.

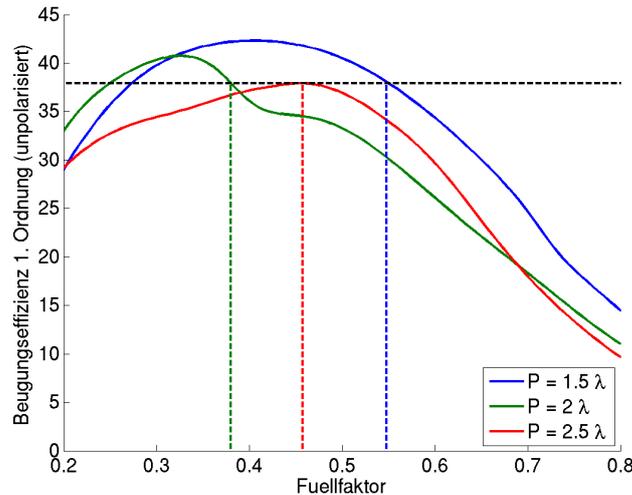


Abbildung 4.2: Effizienz der 1. Beugungsordnung für verschiedene Gitterperioden über dem Füllfaktor

Abbildung 4.3 zeigt nochmals die Beugungseffizienz der 1. Ordnung eines binären Phasengitters über der Gitterperiode, die gestrichelte Kurve zeigt die Effizienz mit einem konstanten Füllfaktor von 0.5. Durch die Anpassung des Füllfaktors in Abhängigkeit der Gitterperiode kann die Beugungseffizienz über der Periode homogen eingestellt werden. Wie in Abbildung 4.2 bereits zu erkennen ist, kann die Beugungseffizienz nur in gewissen Grenzen über den Füllfaktor eingestellt werden. Das Verfahren kann aber nicht nur genutzt werden, um eine homogene Intensitätsverteilung zu erzeugen, sondern kann auch dazu eingesetzt werden ein Diffraktiv Optisches Element auszulegen, das eine beliebige optische Wirkung und eine beliebige Intensitätsverteilung erzeugt, in Abbildung 4.4 ist der schematische Ablauf des Verfahrens dargestellt.

Aus der optischen Wirkung resultiert die Phasenfunktion des Elements, die die lokale Gitterperiode festlegt. Die Intensitätsverteilung wird über den Füllfaktor des Gitters eingestellt. Aus dem Ergebnis der elektromagnetischen Simulation wählt man den Füllfaktor, der über die Beugungseffizienz des lokalen Gitters die gewünschte Intensitätsverteilung generiert.

Betrachtet man beispielsweise ein Computer generiertes Hologramm (CGH), wie es zur interferometrischen Prüfung von Asphären eingesetzt wird (s. Abschnitt 2.2.2), so wird über die lokale Gitterperiode des Hologramms eine Wellenfront erzeugt, die mit der Welle der zu prüfenden Asphäre überlagert wird. In der Regel verwendet man ein binäres Phasenprofil mit Füllfaktor 0.5 und nutzt die erste Beugungsordnung, die Gitterhöhe wird so gewählt, dass die 0. Ordnung bei skalarer Betrachtung verschwindet und damit die erste Ordnung maximal wird. Betrachtet man die 1. Ordnung, so hat diese für kleine Ablenkwinkel eine Beugungseffizienz von ca. 40%. Für große Ablenkwinkel hinge-

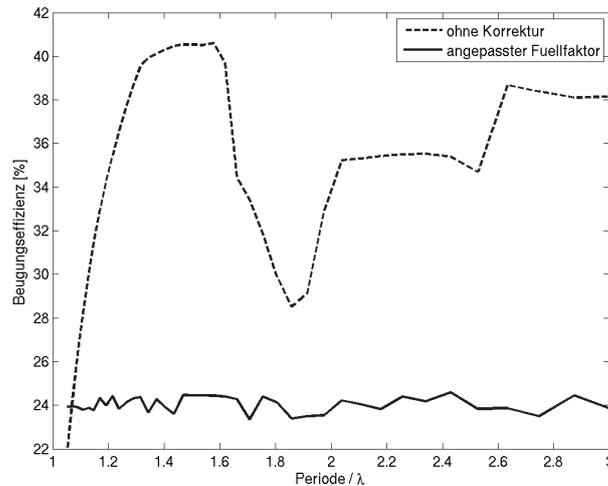


Abbildung 4.3: Anpassung der Effizienz über den Füllfaktor

gen sinkt die Effizienz ab (vgl. Abb. 4.1). Dies führt dazu, dass die zu prüfende Fläche nicht homogen ausgeleuchtet wird. Mit der oben genannten Methode kann man nun das Hologramm so konstruieren, dass es eine homogene Intensitätsverteilung generiert: Man wählt für die gewünschte Beugungseffizienz aus der rigorosen Simulation für jede Gitterperiode den passenden Füllfaktor. Dabei kann allerdings nicht jede beliebige Effizienz gewählt werden, da die Beugungseffizienz für alle Füllfaktoren bei hohen Ablenkwinkeln absinkt.

Die Homogenisierung der Beugungseffizienz durch die Anpassung des Füllfaktors ist ein sehr anschauliches Beispiel für das Design von Beugungsgittern. Die Vorgabe ist eine homogene Beugungseffizienz über der Gitterperiode und der einzig freie Parameter ist der Füllfaktor des Gitters. Zur Lösung des inversen Problems müssen in diesem Fall keine aufwändigen Verfahren eingesetzt werden, sondern der Füllfaktorwert, der zu einer bestimmen Beugungseffizienz führt, kann direkt aus der Vorwärtsrechnung genommen werden. Möchte man außer einer homogenen Beugungseffizienz noch weitere Anforderungen festlegen, können die entsprechenden Parameter aber auch mit den oben beschriebenen Verfahren zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems bestimmt werden.

4.1.2 Gitter zur Schrägbelichtung von Fotolackstrukturen

In diesem Abschnitt soll die Anwendung von Beugungsgittern zur Belichtung von Ablenkstrukturen betrachtet werden. Hier geht es weniger um die Bestimmung von bestimmten Gitterparametern, sondern um die Untersuchung der prinzipiellen Grenzen und der auftretenden elektromagnetischen Effekte.

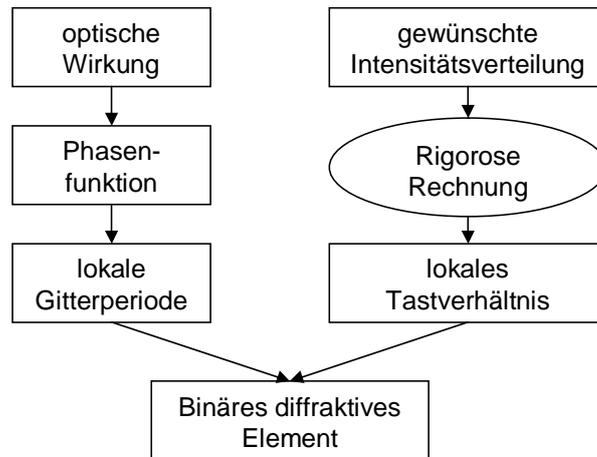


Abbildung 4.4: Designprozess für ein DOE mit vorgegebener Intensitätsverteilung

4.1.2.1 Anwendung

Für viele Anwendungen wird eine Lichtablenkung unter einem großen Ablenkwinkel benötigt. Hier wird nun ein Gitter gesucht, das einen möglichst großen Ablenkwinkel erzeugt und dabei möglichst viel Licht in diese Ordnung gebeugt wird. Eine Anwendung hierfür ist die Erzeugung von 45 Grad Strukturen in Fotoresist: Am Lehrstuhl Optoelektronik wurden Strukturen zur Ankopplung von Glasfasern an vertikal emittierende Laser (VCSEL) entwickelt [116, 117]. Diese Elemente werden durch Schrägbelichtung in SU8¹ realisiert.

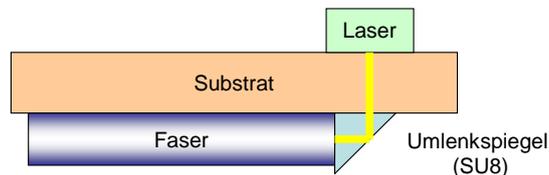


Abbildung 4.5: Schematische Darstellung der VCSEL-Faserkopplung mit Hilfe eines SU8 Umlenkspiegels

Abbildung 4.5 zeigt die schematische Darstellung einer solchen Koppelstruktur. Der lithographisch hergestellte Umlenkspiegel bewirkt eine 90° Umlenkung des Lichts aus dem Laser und ermöglicht eine Einkopplung in die horizontal liegende Faser.

Um eine 90° Umlenkung zu realisieren müssen 45° Strukturen im Fotolack erzeugt werden. Die lithographische Herstellung ist in Abbildung 4.6 dargestellt. Da der verwendete Lack einen Brechungsindex von ≈ 1.7 besitzt ist eine direkte Belichtung der Strukturen

¹SU8 ist ein Fotolack für die Tiefenlithographie mit dem sehr große Aspektverhältnisse und Strukturhöhen von mehreren hundert Mikrometer realisiert werden können

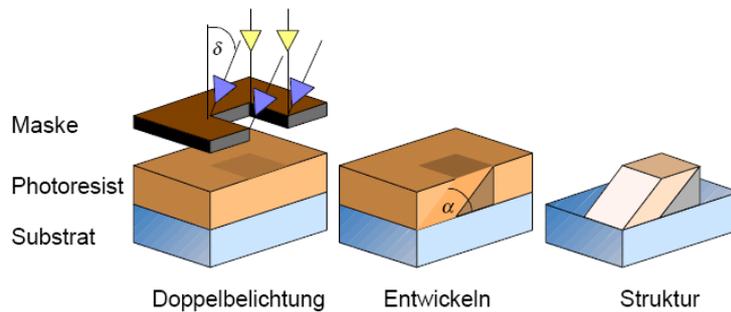


Abbildung 4.6: Herstellung der Koppelstruktur (Quelle: Wohlfeld [117])

nicht möglich (auf Grund der Brechung im Lack). Daher wird momentan ein Prisma zur Belichtung eingesetzt. Das Prisma soll nun durch ein Beugungsgitter ersetzt werden, das, wenn möglich, nur eine Beugungsordnung unter einem Winkel von 45° im Photolack erzeugt. Das Licht soll dabei senkrecht auf das Gitter eingestrahlt werden, um eine einfache Herstellung der Strukturen zu ermöglichen. Das Gitter könnte dann als Teil einer Maske realisiert werden, die festlegt, welche Bereiche unter welchem Winkel belichtet werden sollen (Abb. 4.7).

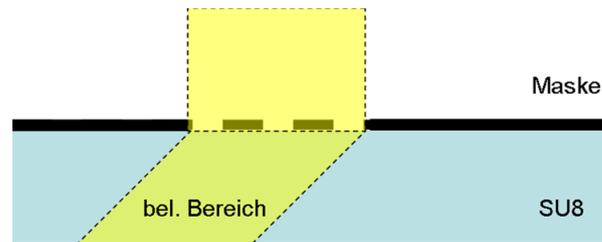


Abbildung 4.7: Schrägbelichtung über eine diffraktive Maske

Soll der Winkel der 1. Ordnung im Lack 45° betragen, erhalten wir für die Gitterperiode:

$$P = \frac{\lambda}{n_2 \sin(45^\circ)} = \frac{\lambda\sqrt{2}}{n_2}$$

Mit der Brechzahl des verwendeten Lacks SU8 haben wir damit eine Periode von $P \approx 0.83\lambda$. Die zweite Ordnung des Gitters ist dann bereits evaneszent. Es soll nun ein möglichst großer Teil des eingestrahnten Lichts auf diese Ordnung konzentriert werden, um also nur eine Beugungsordnung für die Belichtung zu verwenden. Hierfür kommt zunächst ein herkömmliches Blazegitter in Frage.

4.1.2.2 Blazegitter

Bei skalarer Betrachtung erzeugt eine lineare Phasenrampe eine vollständige Blazewirkung und konzentriert das Licht auf die erste Beugungsordnung. Die Transmissionsfunk-

tion ist dabei:

$$t(x) = e^{2\pi i \frac{x}{P}}$$

Und damit erhalten wir für die Fourierkoeffizienten:

$$c_m = \frac{1}{P} \int_P e^{2\pi i \frac{x}{P}(1-m)} dx = \begin{cases} 1 & \text{für } m = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Wir betrachten hier, um den großen Ablenkwinkel zu erzielen, eine sehr kleine Gitterperiode, so dass die Beugungseffizienz eines solchen Gitters nur über elektromagnetische Rechnung bestimmt werden kann. Abbildung 4.8 zeigt die Beugungseffizienz eines geblazten Gitters auf einem SU8-Substrat. Die eigentliche Blazeordnung (rot) fällt für große Ablenkwinkel kontinuierlich ab. Für große Winkel nimmt dagegen die -1. Ordnung (grüne Kurve) zu, für einen Ablenkwinkel von 45° sind allerdings beide Ordnungen sehr gering und die 0. Beugungsordnung dominiert.

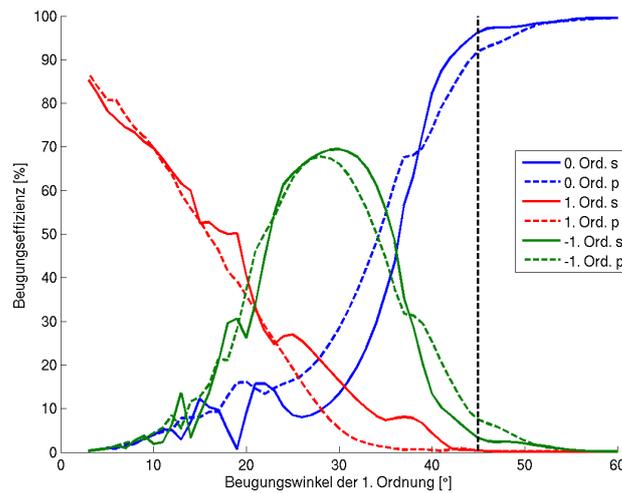


Abbildung 4.8: Beugungseffizienz eines geblazten Gitters zur Schrägbelichtung

4.1.2.3 Volumengitter

Da sich hier mit einem herkömmlichen Blazegitter keine ausreichende Blazewirkung realisieren lässt, soll nun ein anderer Gittertyp betrachtet werden. Abbildung 4.9 zeigt ein sogenanntes Volumengitter das z.B. über eine holographische Belichtung hergestellt werden kann [118]. Im Prinzip handelt es sich um ein gekipptes Binärgitter - aus der Kippung soll sich eine Vorzugsrichtung für eine Beugungsordnung ergeben. Für die elektromagnetische Simulation der Volumengitter wurde hier die klassische RCWA mit der Treppenstufenapproximation verwendet (siehe auch Abb. 4.11). Für diesen Gittertyp

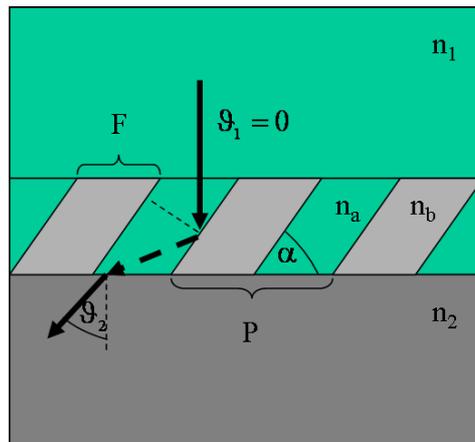


Abbildung 4.9: Volumengitter

gibt es aber auch eine spezielle RCWA-Formulierung von Chernov mit der sich direkt solche gekippten Gitterzellen simulieren lassen [119].

Es soll nun untersucht werden, welcher Kippwinkel für die betrachtete Anwendung ideal ist. Dazu wurden die Beugungseffizienzen für verschiedene Kippwinkel des Gitters über eine elektromagnetische Berechnung bestimmt ($\lambda = 365$ nm, Gitterhöhe 2λ , $P = 303$ nm (entstpr. 45° Ablenkwinkel im Substrat)). Abbildung 4.10 zeigt das Ergebnis der Simulationen. Zunächst fällt auf, dass die Beugungseffizienz stark polarisationsabhängig ist, da das Gitter eine sehr kleine Periode verglichen mit der Wellenlänge des einfallenden Lichts besitzt. Für einen Gitterwinkel von 53° ergibt sich eine maximale Blazewirkung für beide Polarisationsrichtungen.

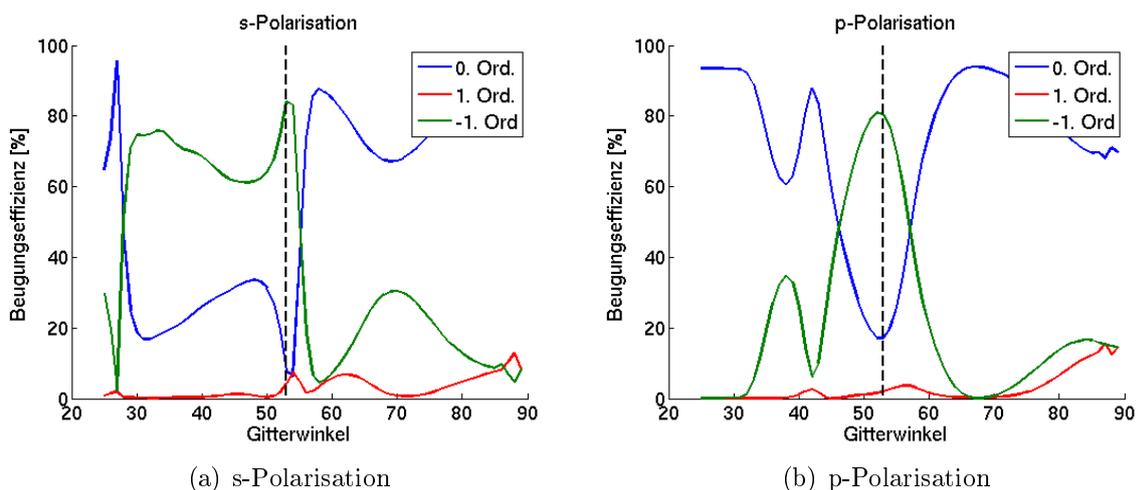


Abbildung 4.10: Beugungseffizienz eines Volumengitters über dem Winkel des Gitters

In Tabelle 4.1 sind die Beugungseffizienzen für ein Gitter mit einem Gitterwinkel von

	-1 Ordnung	0. Ordnung	+1. Ordnung
s-Polarisation	84,05 %	7,69 %	4,2 %
p-Polarisation	80,39 %	17,13 %	2,05 %
Mittelwert	82,22 %	12,41 %	3,125 %

Tabelle 4.1: Beugungseffizienzen des betrachteten Volumengitters

53° dargestellt. Es ergibt sich zwar ein starker Blaze der -1. Ordnung, die anderen Beugungsordnungen sind mit einer Effizienz von insgesamt 15-20 % immer noch recht stark, so dass sie bei der Belichtung störend sein könnten. Die gute Blazewirkung lässt sich zudem nur mit einem sehr hohen Gitter erreichen (siehe Abbildung 4.11), die betrachtete Gitterhöhe von 2λ führt bereits zu einem Gitter mit starkem Überhang. So ein Gitter ist vermutlich nur sehr schwierig praktisch zu realisieren. Für ein niedrigeres Gitter lässt sich keine gute Blazewirkung mehr erzielen. Abbildung 4.12 zeigt die Beugungseffizienz für ein Gitter mit Höhe λ . Für p-polarisiertes Licht bewirkt das Gitter nahezu keine Ablenkung mehr und das meiste Licht wird in die 0. Ordnung transmittiert. Für die s-Polarisation ergibt sich zwar eine Blazewirkung der -1. Beugungsordnung, die 0. Ordnung ist aber mit mindestens 30 % Beugungseffizienz überall sehr stark.

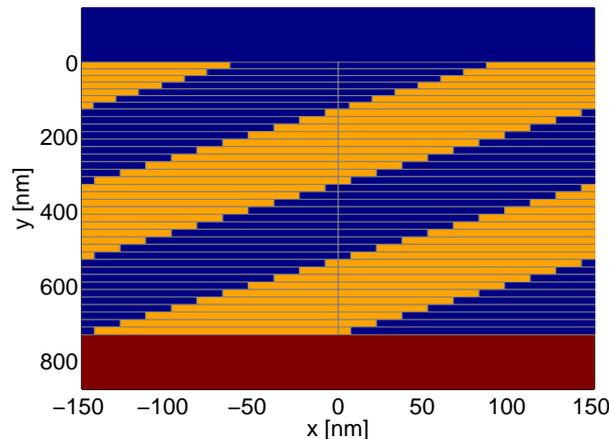


Abbildung 4.11: Simulierte Geometrie des Volumengitters mit maximaler Blazewirkung

4.1.2.4 Ergebnis der Untersuchungen zur Schrägbelichtung

Mit den untersuchten geblazten Gittern lässt sich keine ausreichende Blazewirkung erzielen, da nahezu alles Licht in die 0. Ordnung transmittiert wird. Lediglich mit den betrachteten Volumengittern lässt sich eine Blazewirkung erzielen, allerdings ist auch hier die Beugungseffizienz der restlichen Ordnungen sehr hoch, so dass auch hier eine Belichtung mit einer einzelnen Beugungsordnung nicht möglich ist. Eine Alternative wäre eventuell ein schräger Einfall auf das Gitter, allerdings bietet das Verfahren dann kaum

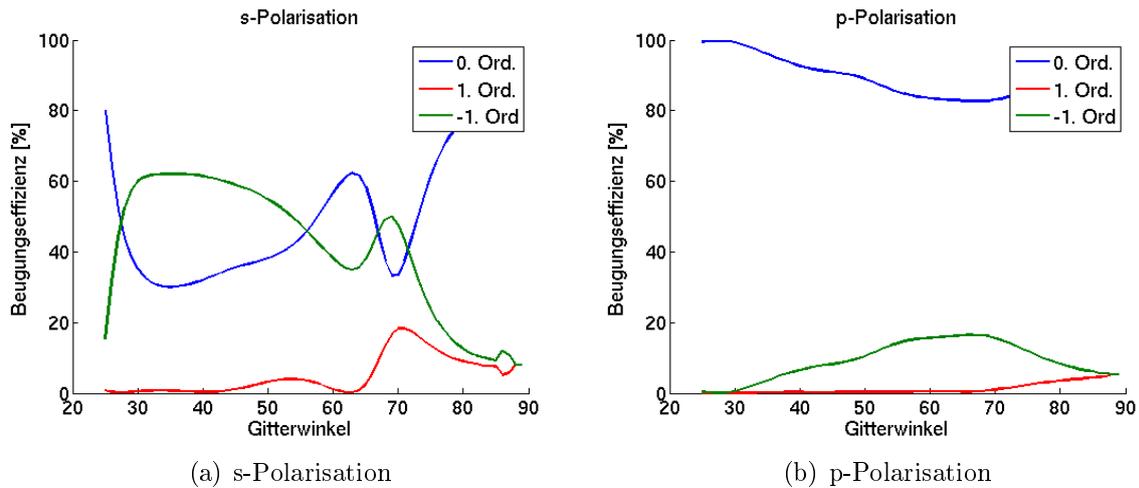


Abbildung 4.12: Beugungseffizienz eines Volumengitters mit $h = \lambda$ über dem Winkel des Gitters

Vorteile gegenüber dem jetzigen Herstellungsverfahren (Belichtung über ein Prisma). Obwohl keine gute Blazewirkung erzielt werden kann, gibt es einige Konfigurationen in denen einige Prozent des eingestrahelten Lichts in die -1. und +1. Beugungsordnung und damit unter den gewünschten 45° abgelenkt werden. Daher könnte evtl. eine Belichtung mit drei Beugungsordnungen durchgeführt werden, die Belichtung und die fertige Koppelstruktur sind in Abb. 4.13 dargestellt. Allerdings könnte auch hier die unterschiedliche Intensität der Beugungsordnungen zu Problemen bei der Belichtung führen. Da die Herstellung von solchen hochfrequenten Gitterstrukturen nur mit hohem Aufwand möglich ist, wurden die Gitter bislang noch nicht realisiert. Die Belichtung der Koppelstrukturen mit Hilfe von Beugungsgittern wurde daher noch nicht umgesetzt.

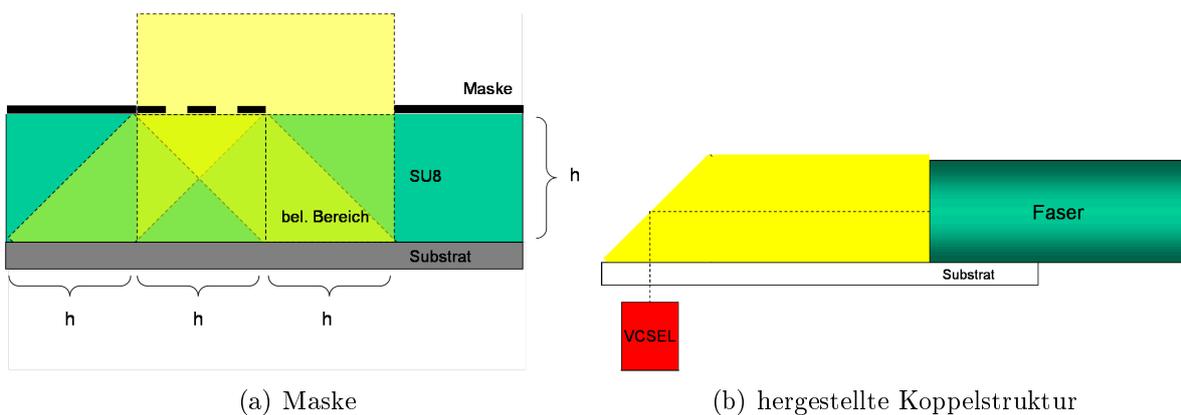


Abbildung 4.13: Herstellung von Koppelstrukturen durch Belichtung mit drei Beugungsordnungen

4.1.3 Diffraktive Polarisationsstrahlteiler

Im vorherigen Abschnitt wurden Beugungsgitter mit hohen Ablenkwinkeln zur Schrägbelichtung untersucht. Durch die kleine Gitterperiode, die zur Erzeugung des großen Beugungswinkels notwendig ist, traten hier teilweise starke Polarisierungseffekte auf. Nun soll eine Anwendung untersucht werden, bei der dieser Effekt ausgenutzt wird. Betrachtet man ein binäres Phasengitter mit einer Periode, die nur etwas größer ist als die eingestrahlte Wellenlänge, wirkt das Gitter sehr sensitiv auf die Polarisationsrichtung des eingestrahnten Lichts. Für bestimmte Kombinationen von Füllfaktor und Gitterhöhe kann so ein diffraktiver Strahlteiler realisiert werden [120]. Das Gitter beugt dabei das Licht einer Polarisationsrichtung möglichst vollständig in die höheren Beugungsordnungen, das Licht der orthogonalen Polarisierung wird dagegen vollständig transmittiert (Abb. 4.14).

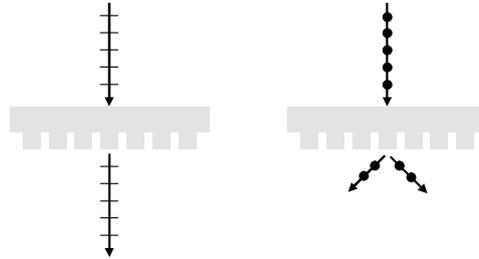


Abbildung 4.14: Prinzip des diffraktiven Polarisationsstrahlteilers

Wir betrachten nun beispielhaft ein binäres Phasengitter mit Periode 1.06λ (entspricht 70° Beugungswinkel in der ersten Ordnung) und Brechzahl $n = 2.5$. Gesucht ist nun der Füllfaktor und die Gitterhöhe, so dass das Gitter als Polarisationsstrahlteiler wirkt. Der Parameterraum soll nun mit Hilfe von verschobenen Basisfunktionen approximiert werden (vergleiche Abschnitt 3.3). Über dem zweidimensionalen Parameterraum wurde die Beugungseffizienz der 0. und 1. Beugungsordnung an 21×21 Abtastpunkten jeweils für s- und p-polarisiertes Licht mit Hilfe der RCWA berechnet. Diese berechneten Effizienzen dienten dann als Ausgangspunkt für die Approximation des Parameterraums. Wir wollen, dass der Strahlteiler s-polarisiertes Licht möglichst transmittiert und p-polarisiertes in die 1. Ordnungen beugt - wir können daher folgende Zielfunktion definieren:

$$m = (100\% - \eta_{0,s}) + \eta_{0,p} + \eta_{1,s} + (50\% - \eta_{1,p});$$

Die Zielfunktion wird Null, wenn $\eta_{0,s} = 100\%$ und $\eta_{+1,p} = \eta_{-1,p} = 50\%$ und die anderen Beugungseffizienzen verschwinden. Nun können die approximierten Beugungseffizienzen verwendet werden, um die Zielfunktion über dem Parameterraum zu berechnen. Die Zielfunktion ist umso kleiner, je besser das Gitter als Polarisationsstrahlteiler funktioniert. Abbildung 4.15 zeigt die aus den approximierten Effizienzen berechnete Zielfunktion.

Zum Vergleich wurde der Parameterraum feiner abgetastet (durch 101×101 Datenpunkte) und die daraus berechnete Zielfunktion der approximierten gegenüber gestellt.

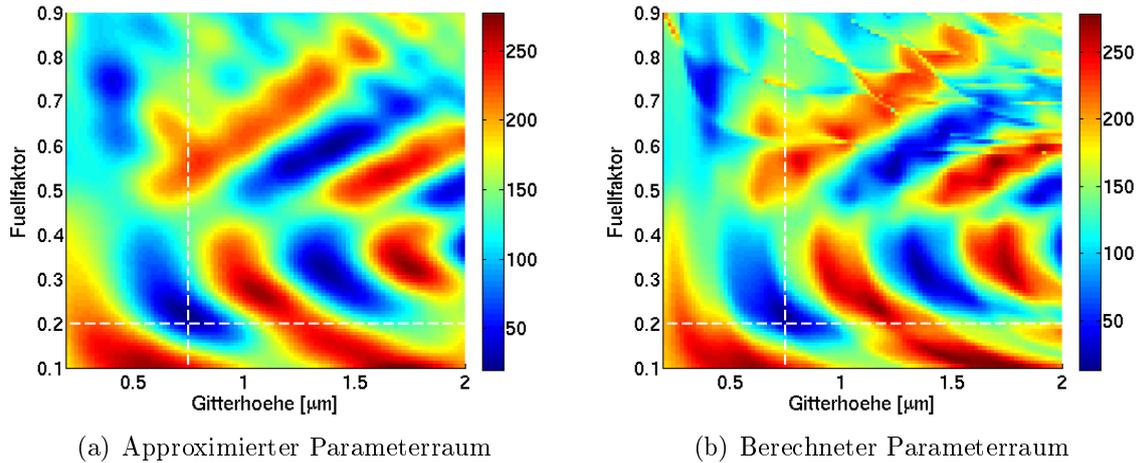


Abbildung 4.15: Zielfunktion des diffraktiven Polarisationsstrahlteilers

Die approximierte und die berechnete Zielfunktion weisen zwar kleine Unterschiede auf, dennoch ist die Lage der Minima und Maxima sehr ähnlich. Insbesondere zeigen sich in der berechneten Zielfunktion Gitterresonanzen (im oberen Teil des Diagramms), die durch die Glättungseigenschaft der Approximation nicht auftreten. Ein Minimum in der Zielfunktion befindet sich bei einer Gitterhöhe von $0,75 \mu\text{m}$ und einem Füllfaktor von 0,2. Wir betrachten daher für ein solches Gitter mit Höhe $0,75 \mu\text{m}$ den Verlauf der Beugungseffizienz des Gitters.

In Abbildung 4.16 ist die Beugungseffizienz des Gitters über dem Füllfaktor aufgetragen. Für einen Füllfaktor von ca. 0,2 wird s-polarisiertes Licht nahezu ungehindert transmittiert (98,6 %). Wird das Gitter hingegen mit p-polarisiertem Licht beleuchtet, gelangen jeweils ca. 41 % in die plus und minus erste Beugungsordnung. Lediglich 2 % des einfallenden Lichts werden transmittiert - das Gitter mit der gefundenen Parameterkombination erfüllt also die gewünschte Eigenschaft eines diffraktiven Polarisationsstrahlteilers. Außer dem betrachteten Parametersatz gibt es in der Zielfunktion noch weitere Minima, so dass auch andere Parameter gewählt werden können.

Die betrachtete Gitterperiode von $\approx 1,06\lambda$ führt zu einem sehr großen Winkel der ersten Beugungsordnung (etwa 70°). Somit können die beiden Polarisationsrichtungen leicht voneinander getrennt werden. Wie schon im Diagramm zu erkennen ist, reagiert die Beugungseffizienz sehr sensitiv auf den Füllfaktor. Ändert sich der Füllfaktor von 0,2 auf 0,16 (dies entspricht einer Änderung der Stegbreite um ca. $0,04 \lambda$), so fällt die Effizienz von 98 % auf ca. 60 % ab, ähnlich sensitiv ist auch die Gitterhöhe. Bei der

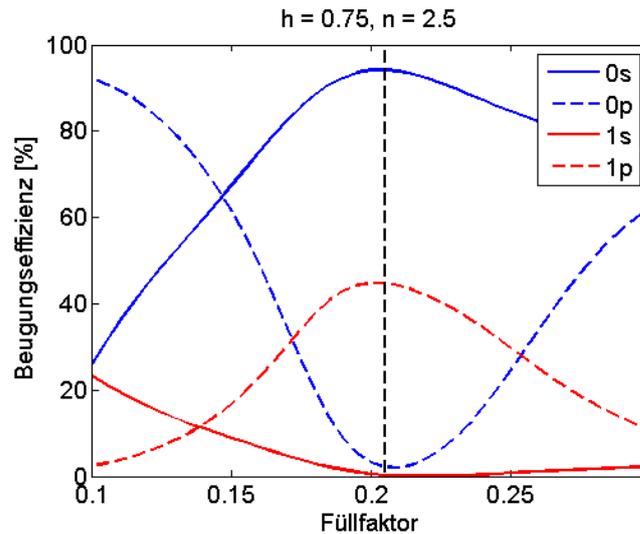


Abbildung 4.16: Phasengitter als Polarisationsstrahlteiler

Herstellung eines solchen Elements müssten also beide Parameter sehr genau getroffen werden.

Das Beispiel hat gezeigt, dass sich das inverse Gitterbeugungsproblem gut mit Hilfe der Approximation durch verschobene Basisfunktionen lösen lässt. Zur Bestimmung der Parameter eines diffraktiven Polarisationsstrahlteilers wurden die Beugungseffizienzen des Gitters auf der Basis von wenigen berechneten Datenpunkten approximiert. Die aus den approximierten Effizienzen berechnete Zielfunktion liefert dann die optimalen Parameter des Gitters.

4.1.4 Effizienzsteigerung von Fotodetektoren

In diesem Abschnitt soll abschließend eine Anwendung aus dem Bereich der Photovoltaik betrachtet werden. Ziel ist es, die Effizienz eines Fotodetektors durch den Einsatz eines Beugungsgitters zu steigern. Als Effizienz wird hier der Anteil des Lichts bezeichnet, der im Detektor absorbiert und in elektrische Ladungsträger umgesetzt wird. Es werden dabei die Gitterparameter gesucht, die eine möglichst hohe Detektoreffizienz bewirken.

4.1.4.1 Aufbau des Detektors

Der Detektor soll in der Standard „Silicon on Insulator“ (SOI) Technologie [121] gefertigt werden (Abb. 4.17). Dies ermöglicht die Herstellung in einem herkömmlichen CMOS-Prozess, so dass die optische Funktionalität leicht mit Elektronik kombiniert werden kann. Die absorbierende Schicht der Diode ist dabei der Silizium-Kanal, die Bereiche

links und rechts von den Polysiliziumstegen werden p- bzw. n-dotiert, so dass sich die Sperrschicht der Diode unterhalb des Polysiliziums befindet. Unterhalb des Silizium-Kanals befindet sich eine dielektrische SiO_2 -Schicht, darunter das Silizium-Substrat. Zum Fotostrom tragen nur die Elektronen bei, die im Bereich der Sperrschicht entstehen. Da die Siliziumschicht prozessbedingt nur ca. 100 nm dünn ist und die Absorption von Silizium im sichtbaren Bereich sehr schwach ist, werden bei senkrechtem Einfall nur wenige Prozent des einfallenden Lichts absorbiert. Die Absorption führt zu einem exponentiellen Abfall der Intensität:

$$I(z) = I(0) \cdot e^{-\alpha z} \quad (4.1)$$

Dabei ist α der Absorptionskoeffizient, der sich aus dem Imaginärteil κ der komplexen Brechzahl des absorbierenden Materials ergibt:

$$\alpha = \frac{4\pi\kappa}{\lambda} \quad (4.2)$$

Für eine Wellenlänge von 670 nm, bei der der Detektor eingesetzt werden soll ist die Brechzahl von Silizium $n = 3.82 + 0.015i$. Die 100 nm dünne Silizium-Schicht bewirkt also nur eine Absorption von knapp 3 %. Der Rest des Lichts wird erst im Substrat absorbiert und trägt nicht zum Fotostrom und damit auch nicht zur Effizienz der Diode bei. Nun soll mit Hilfe eines Beugungsgitters versucht werden, die Effizienz der Diode zu erhöhen. Das Beugungsgitter sind dabei die Polysiliziumstege. Durch Anpassung der Breite der Stege und der Gitterperiode soll versucht werden, das Licht dort zu konzentrieren, wo die Absorption stattfinden soll, also in die Sperrschicht der Diode.

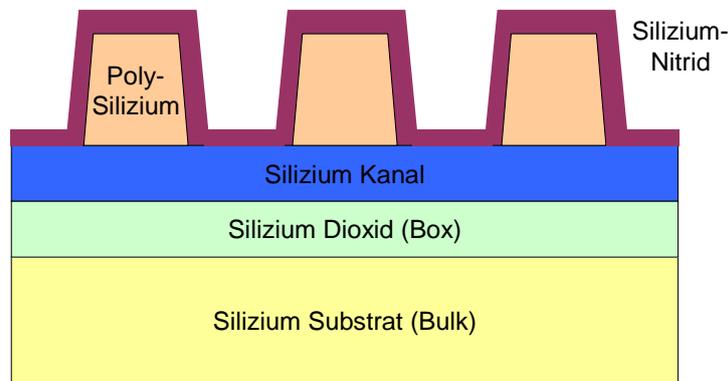


Abbildung 4.17: Schematischer Querschnitt der SOI Technologie

Mit Hilfe von elektromagnetischen Simulationen wurde die im Detektor absorbierte Energie berechnet. Um die optimalen Parameter zu bestimmen, wurde hier der Parameterraum, der durch den Herstellungsprozess vorgegeben war, systematisch abgetastet und die Absorption über dem gesamten Parameterraum berechnet. Da die meisten Parameter durch den Herstellungsprozess vorgegeben sind, wurden hier nur zwei freie Parameter

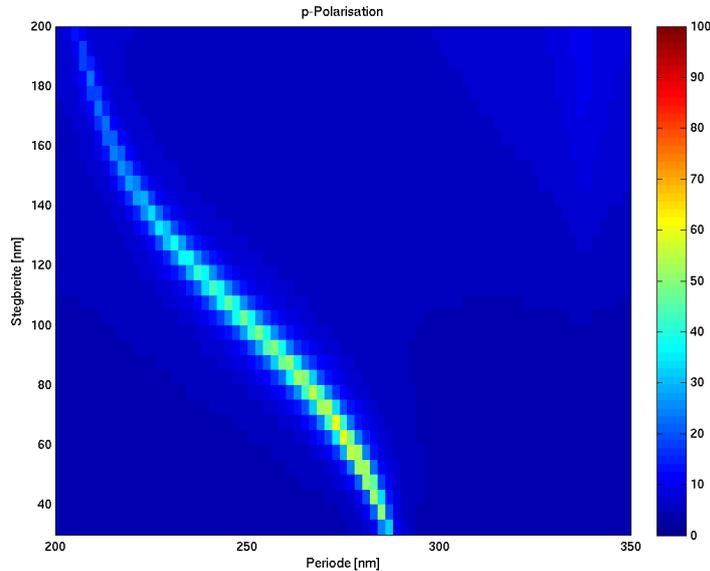


Abbildung 4.18: Absorption der Diode für verschiedene Stegbreiten und Perioden

betrachtet. Abbildung 4.18 zeigt die Absorption in Prozent als Farbwert über der Periode und der Stegbreite des Polysilizium-Gitters. Man erkennt, dass die Absorption in den meisten Bereichen recht gering ist ($< 20\%$), allerdings gibt es bestimmte Kombinationen von Periode und Stegbreite, bei denen die Absorption auf bis zu 70% ansteigt. Die Ursache für den Anstieg der Absorption sind Resonanzeffekte im Gitter. Abbildung 4.19 zeigt die elektromagnetisch berechnete Intensität in der Fotodiode und die Richtung des Energieflusses (Poynting-Vektor). Es ist deutlich zu erkennen, dass sich die Energie unter den Stegen konzentriert - dort ist die Intensität am höchsten. Zudem bildet sich eine Art Wirbel im Energiefluss, so dass nur sehr wenig Energie in Richtung des Substrats gelangt.

Für die Berechnung der Absorption wurde hier nur die globale Absorption im Silizium-Kanal betrachtet. Der Imaginärteil der Brechzahl des eigentlich absorbierenden Substrats wurde dabei vernachlässigt, so dass sich die Absorption aus der reflektierten und der transmittierten Energie berechnen lässt. Um die exakte Effizienz der Diode zu berechnen, müsste die in der Sperrschicht absorbierte Energie bestimmt werden. Diese lässt sich aus der elektrischen Feldstärke in der Diode berechnen, die Rechenzeit ist dabei aber deutlich höher als für die Berechnung der Beugungseffizienzen. Die hier durchgeführten Simulationen und Messungen stellen nur eine Voruntersuchung über die Machbarkeit solcher Elemente dar, daher wurde hier auf eine exakte Absorptionsberechnung verzichtet. Außerdem haben erste Berechnungen gezeigt, dass die vereinfachte Absorptionsberechnung zumindest qualitativ mit der exakten Berechnung übereinstimmt. Für eine weitere Untersuchung der Effekte müsste allerdings die exakte Absorptionsberechnung ange-

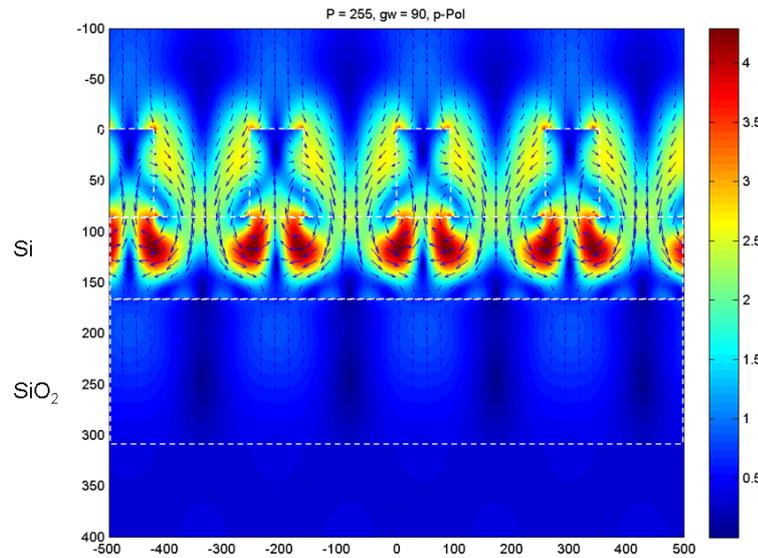


Abbildung 4.19: Intensitätsverteilung in der Diode

wendet werden. Dann ist vermutlich die komplette Abtastung des Parameterraums auf Grund der höheren Rechenzeit nicht mehr möglich, so dass dann die hier betrachteten Verfahren zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems eingesetzt werden sollten.

4.1.4.2 Realisierung und Messung

In Zusammenarbeit mit IBM Deutschland (Böblingen) und dem IBM Research Laboratory (Zürich) wurden solche Fotodioden hergestellt und vermessen. Abbildung 4.20 zeigt einen Teil des Versuchsaufbaus zur Charakterisierung der Dioden. Auf einem Wafer wurden mehrere Dioden in verschiedenen Konfigurationen (Kombinationen von Periode und Stegbreite) hergestellt. Über eine Glasfaser wird jeweils eine Diode beleuchtet und die Absorption der Diode über den Fotostrom gemessen.

Abbildung 4.21a zeigt die simulierte Absorption für eine Diode über der Wellenlänge des eingestrahlt Lichts, in Abbildung 4.21b ist die gemessene Ansprechempfindlichkeit der Diode dargestellt. Die Ansprechempfindlichkeit (oft auch als responsivity bezeichnet) ist dabei das Verhältnis aus dem Detektorstrom und der eingestrahlt Lichtleistung. Anhand der Simulation erwartet man eine hohe Absorption und damit eine hohe Empfindlichkeit der Diode bei einer Wellenlänge von etwa 800 nm. Die gemessene Empfindlichkeit zeigt ebenfalls einen Scheitel, allerdings bei einer etwas kürzeren Wellenlänge. Vermutlich wurden beim Herstellungsprozess nicht genau die gewünschten Gitterparameter getroffen oder andere Parameter, wie z.B. die Schichtdicken unterscheiden sich

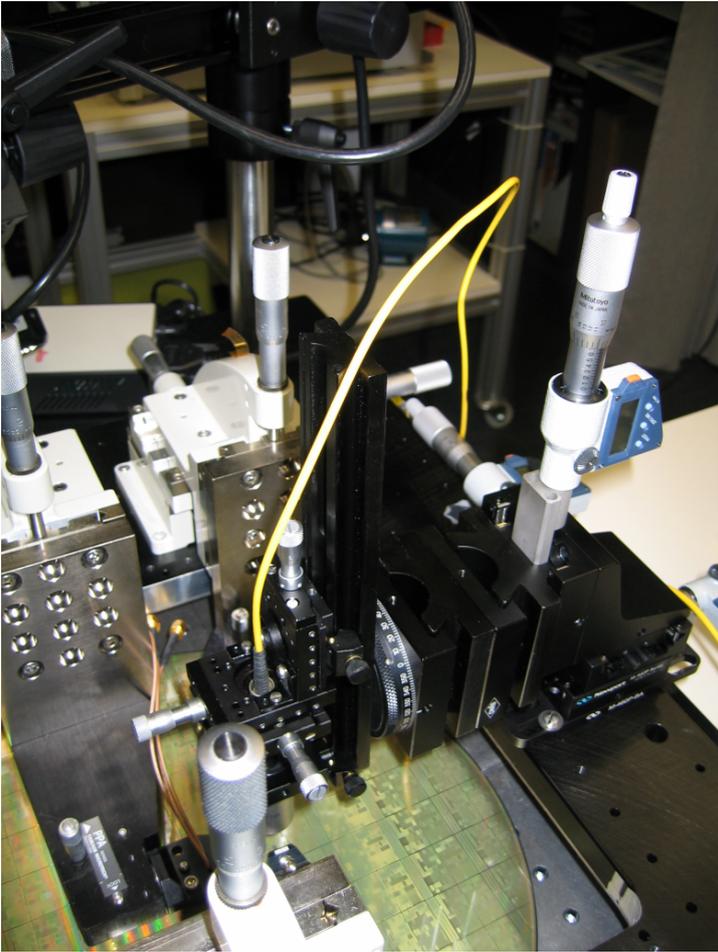
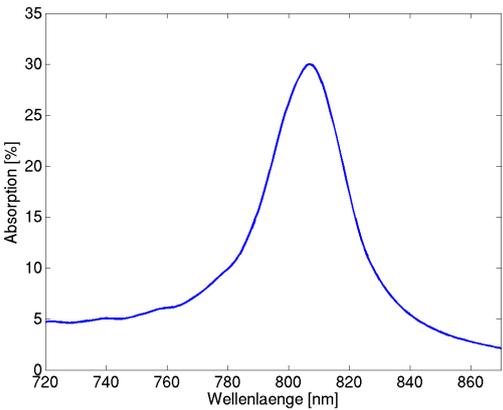
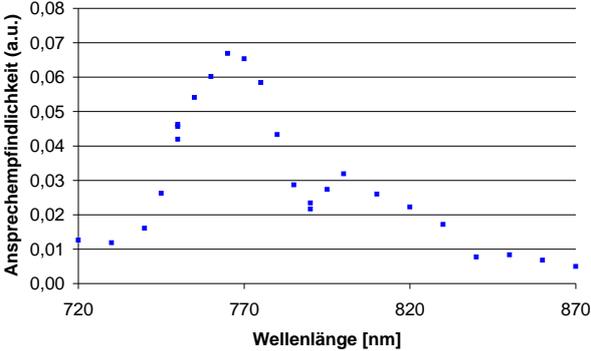


Abbildung 4.20: Versuchsaufbau zur Charakterisierung der Dioden



(a) Simulierte Absorption



(b) Gemessene Empfindlichkeit

Abbildung 4.21: Simulierte Absorption und gemessene Empfindlichkeit der Diode

von der Simulation. Dies führt dann zu einem veränderten Absorptionsverhalten der Diode.

4.1.4.3 Ergebnis der Untersuchungen

Die durchgeführten Voruntersuchungen bestätigen die elektromagnetischen Simulationen der Diodenabsorption und der erwarteten Ansprechempfindlichkeit. Zur genaueren Untersuchung der Detektoreffizienz müsste aber die Absorption in der Sperrschicht der Diode genauer analysiert werden. Die Simulationen und Messungen haben zudem gezeigt, dass die untersuchten Dioden sehr sensitiv auf die Polarisierung und den Einfallswinkel sind. Um die Performance der Dioden zu verbessern, müssten daher weitere Untersuchungen durchgeführt werden und geeignete Parameter für das Gitter gefunden werden. Hierfür können dann die in dieser Arbeit untersuchten Methoden zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems heran gezogen werden.

4.1.5 Ergebnis der Untersuchungen zu Design und Optimierung von Beugungsgittern

Die untersuchten Beispiele haben gezeigt, dass in den verschiedensten Anwendungen Design- und Optimierungsprobleme auftreten, bei denen verschiedene Gitterparameter bestimmt werden müssen. Sollen die auftretenden elektromagnetischen Effekte dabei mit berücksichtigt werden, muss hierfür das inverse elektromagnetische Gitterbeugungsproblem gelöst werden. Dies kann durch die Verwendung der in Kapitel 3 beschrieben Verfahren erreicht werden. Auf der anderen Seite eröffnen die elektromagnetischen Effekte ein neues Anwendungsspektrum. Anhand des diffraktiven Polarisationsstrahlteilers wurde gezeigt, wie sich die elektromagnetischen Polarisierungseffekte sinnvoll nutzen lassen.

Es wurde dargestellt, wie sich das inverse Problem durch den Einsatz der Approximation mit verschobenen Basisfunktionen lösen lässt. Im Vergleich zu Optimierungsverfahren lässt sich hiermit nicht nur ein lokales Minimum bestimmen, sondern die Approximation repräsentiert den gesamten Parameterraum, so dass das globale Minimum sehr leicht bestimmt werden kann. Im nächsten Abschnitt soll nun die Charakterisierung von Beugungsgittern beschrieben werden - hier kommt dann auch das oben beschriebene iterative Verfahren zur Anwendung.

4.2 Charakterisierung von Beugungsgittern

In diesem Abschnitt soll die Charakterisierung von Beugungsgittern als Anwendung des inversen Gitterbeugungsproblems betrachtet werden. Um die Qualität von diffraktiven Elementen sicher zu stellen und um eine hohe Performance zu erzielen, sind genaue Mess- und Charakterisierungsmethoden notwendig. Da die Strukturdetails der Elemente bis auf wenige Nanometer schrumpfen, ist die optische Mikroskopie als Standardwerkzeug auf Grund der zu geringen Auflösung oft nicht mehr einsetzbar. Andere Methoden, wie die Rasterkraft- oder Elektronenmikroskopie besitzen zwar ein Auflösungsvermögen im Nanometerbereich, bieten aber nicht die Vorteile optischer Messverfahren. Hier soll daher ein optisches Verfahren betrachtet werden, mit dem Gitterparameter durch das Lösen des inversen Gitterbeugungsproblems auf wenige Nanometer genau bestimmt werden können.

Zunächst sollen verschiedene Verfahren zur Charakterisierung von Beugungsgittern betrachtet werden. Als erstes werden klassische Verfahren, wie Mikroskopie oder Rasterkraft-Mikroskopie betrachtet und deren Vor- und Nachteile analysiert. Anschließend soll dann genauer auf inverse Verfahren eingegangen werden. Dies sind Messverfahren, die nicht direkt die gesuchte Größe, wie z.B. die Gitterhöhe messen, sondern nur deren Wirkung und versuchen durch das Lösen des inversen Gitterbeugungsproblems die gesuchte Größe zu bestimmen. Es wird zunächst auf die bekannten scatterometrischen Verfahren eingegangen und anschließend das hier untersuchte Verfahren zur Rekonstruktion von Gitterparametern aus Beugungseffizienzmessungen vorgestellt.

Es wurde ein spezielles Verfahren untersucht, um Gitterparameter ein- und zweidimensionaler Beugungsgitter aus den Beugungseffizienzen zu bestimmen. Zunächst wird in diesem Kapitel das Verfahren an sich betrachtet, der experimentelle Versuchsaufbau sowie die experimentellen Untersuchungen werden dann im Kapitel 5 dargestellt. Wie bereits in Kapitel 3 beschrieben, kommen zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems zum einen iterative Verfahren und zum anderen die Vorausberechnung von Daten und anschließende Datenbanksuche in Frage. Die beiden Verfahren werden hier am Beispiel der Gittercharakterisierung nochmals genauer betrachtet, am Ende des Kapitels wird die Eindeutigkeit des Verfahrens genauer untersucht.

4.2.1 Klassische Charakterisierungsmethoden

Nun sollen exemplarisch einige Messverfahren vorgestellt werden, die sich zur Charakterisierung von Beugungsgittern eignen oder die weit verbreitet sind. Dies soll nur ein kurzer Überblick sein, für mehr Informationen sei auf die entsprechenden Zitate hingewiesen. Einen guten Überblick über optische Messverfahren bietet z.B. Osten [122].

4.2.1.1 Mikroskopie

Das wohl verbreitetste optische Messgerät zur Untersuchung von Mikrostrukturen ist vermutlich das klassische Mikroskop. Zwar haben heutige Mikroskope noch viel mehr Funktionen als die ersten Mikroskope von Ernst Abbe², aber dennoch ist der prinzipielle Aufbau gleich geblieben.

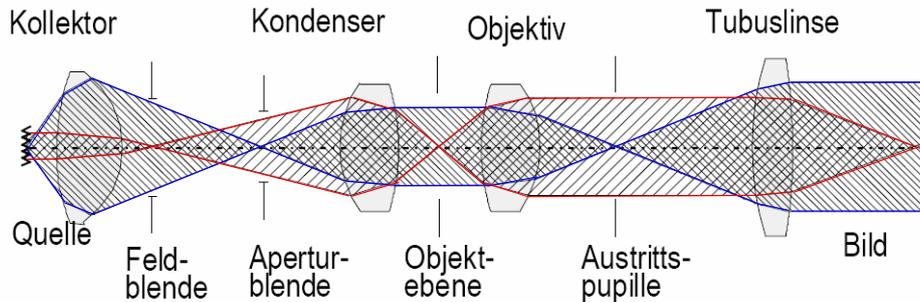


Abbildung 4.22: Mikroskopische Abbildung (nach Beyer [123])

Abbildung 4.22 zeigt schematisch die mikroskopische Abbildung (mit Köhler'scher Beleuchtung). Gezeigt sind der Abbildungsstrahlengang (blau) und der Beleuchtungsstrahlengang (rot).

Die Auflösung die mit einem Mikroskop erreicht werden kann, lässt sich mit der Formel von Ernst Abbe berechnen:

$$d = \frac{\lambda}{2n \sin \alpha}$$

Der Abstand d zweier Punkte, die mit dem Mikroskop gerade noch als zwei getrennte Objekte beobachtet werden können, ist der Quotient aus der Wellenlänge λ und 2 mal der Sinus des halben Öffnungswinkels α mal die Brechzahl des umgebenden Mediums.

Das Produkt $n \sin \alpha$ bezeichnet man als *Numerische Apertur* (NA). Betrachtet man die klassische Mikroskopie, so ist $n = 1$. Dann lässt sich also eine maximale Auflösung von $\lambda/2$ erreichen, sofern das Objektiv eine numerische Apertur von 1 hat. Solch eine Apertur lässt sich allerdings mit einer einzelnen Linse nicht gut genug erreichen³, daher ist das Objektiv ein Linsensystem mit vielen Einzellinsen. So lässt sich eine Apertur von ≈ 0.95 erreichen. Um die Auflösung noch weiter zu steigern, ersetzt man den Raum zwischen Objektiv und Objekt durch eine Flüssigkeit mit einer Brechzahl > 1 , z.B. Öl oder Wasser. Man spricht dann von der so genannten Immersionsmikroskopie.

²Die ersten Lichtmikroskope stammen vermutlich aus dem 16. Jahrhundert. Ernst Abbe (1840-1905) hat durch seine Arbeiten zur Theorie der optischen Abbildung die Mikroskopie entscheidend geprägt, so dass es möglich wurde beugungsbegrenzte Mikroskope zu entwickeln.

³Die Abbildungsfehler wären dann zu schlecht für eine gute Abbildung

Allerdings lässt sich die Auflösung auch so nicht unbegrenzt steigern, da die meisten Flüssigkeiten eine Brechzahl < 2 besitzen. Zur Charakterisierung von diffraktiven Elementen lässt sich die Mikroskopie daher nur bedingt einsetzen. Eine Möglichkeit ist der Aufbau eines Mikroskops mit einer Wellenlänge von 193 nm. Hiermit lässt sich dann eine Auflösung von ca. 100 nm erzielen. Mit Hilfe von elektromagnetischen Verfahren zur Bildsimulation können Linienbreiten auf ca. 10 nm genau bestimmt werden [124]. Diese Auflösung unterhalb der nominellen Auflösungsgrenze erreicht man, in dem man das Mikroskopbild mit elektromagnetischen Simulationen vergleicht. Damit kann zwar nicht direkt die Linienbreite gemessen werden, aber aus der elektromagnetischen Wechselwirkung kann man auf die Struktur des gemessenen Objekts schließen. Das Verfahren ist also ähnlich dem hier betrachteten Verfahren zur Charakterisierung von Beugungsgittern. Der Einfluss von Polarisationsseffekten in der mikroskopischen Bildentstehung wurde z.B. von Kerwien untersucht [48].

4.2.1.2 Rasterkraftmikroskopie

Das Rasterkraftmikroskop oder englisch Atomic Force Microscope (AFM) basiert auf der Wechselwirkung einer dünnen Spitze (Cantilever) und einer Oberfläche [125]. Die atomaren Kräfte führen zu einer Auslenkung der AFM-Spitze, die gemessen werden kann. Hierfür kommen auch optische Verfahren, wie z.B. die Interferometrie zum Einsatz.

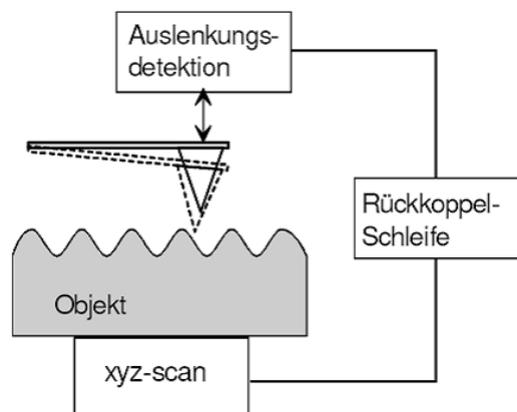


Abbildung 4.23: Schematischer Aufbau eines Rasterkraftmikroskops (Quelle: Totzeck [126])

Für die Messung mit dem Rasterkraftmikroskop gibt es mehrere Betriebsmodi, die z.B. bei Totzeck näher erläutert werden [126]. Mit einem Rasterkraftmikroskop können Höhendifferenzen weit unter 1 nm gemessen werden. Ein Problem der Rasterkraftmikroskopie sind allerdings Artefakte durch die Messspitze. Die Spitze ist nicht ideal punktförmig, sondern räumlich ausgedehnt. Durch die pyramidenförmige Gestalt der meisten Spitzen

werden senkrechte Kanten als schräge Kanten abgebildet. Die Messung liefert also nicht direkt die Topographie des Objekts sondern dessen Faltung mit der Messspitze. Um also die Topographie richtig zu bestimmen ist die genaue Kenntnis der Messspitze notwendig.

Die Rasterkraftmikroskopie eignet sich gut zur Vermessung von Oberflächen, kann aber je nach verwendeter Messspitze nur bestimmte Aspektverhältnisse auflösen. Rasterkraftmikroskope werden als ein Standardverfahren auch zur Charakterisierung von Halbleiterstrukturen eingesetzt [127, 4, 128].

4.2.1.3 Elektronenmikroskopie

Bei der Elektronenmikroskopie wird ausgenutzt, dass Teilchen, wie beispielsweise Elektronen, auch Welleneigenschaften besitzen. Die Materiewelle hat die Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

wobei h das Planck'sche Wirkungsquantum und p der Impuls des Teilchens ist. Betrachtet man z.B. ein Elektron, das durch ein elektrisches Feld beschleunigt wird, so ist die Wellenlänge abhängig von der angelegten Spannung:

$$\lambda[nm] = \frac{1,23}{\sqrt{U[V]}}$$

Betrachtet man nun nochmals das Auflösungskriterium von Abbe, so lassen sich bereits mit kleinen Spannungen enorme Auflösungen erreichen. Ein Problem bei der Elektronenmikroskopie sind die notwendigen Linsen - sie lassen sich nur als recht aufwändige magnetische oder elektrostatische Linsen realisieren. Diese besitzen aber meistens nur eine geringe numerische Apertur und große Bildfehler, so dass zur Erreichung einer Auflösung im Nanometerbereich Spannungen im kV Bereich nötig sind. In der Elektronenmikroskopie gibt es im Wesentlichen zwei Verfahren - die Transmissions-Elektronenmikroskopie (TEM) und die Rasterelektronenmikroskopie (REM oder englisch SEM) [126, 129].

Transmissions-Elektronenmikroskopie

Das Transmissions-Elektronenmikroskop entspricht vom Aufbau im Prinzip einem herkömmlichen Lichtmikroskop (siehe Abb. 4.22). Eine dünne Probe wird von einem Elektronenstrahl durchstrahlt und über eine Objektivlinse und eine Projektionslinse auf einen Leuchtschirm abgebildet. Da die Probe im TEM durchstrahlt wird, kommen nur sehr dünne Proben in Frage. Das Verfahren ist daher für die Untersuchung von diffraktiven Elementen ungeeignet.

Raster-Elektronenmikroskopie

Das zweite Verfahren in der Elektronenmikroskopie ist das Raster-Elektronenmikroskop (REM) oder englisch Scanning Electron Microscope (SEM). Hier werden im Vergleich zum TEM nicht die transmittierten sondern die von der Probe zurück gestreuten Elektronen detektiert. Ein Elektronenstrahl scannt die Probe und die gestreuten Elektronen werden von einer positiven Elektrode aufgefangen. So lässt sich ein Objekt indirekt abbilden. Außerdem lassen sich durch die unterschiedlichen Streueigenschaften verschiedener Materialien weitere Untersuchungen durchführen.

Mit Hilfe der Elektronenmikroskopie lässt sich eine Auflösung von weniger als 1 nm erzielen. Das Hauptproblem sind hier die auftretenden Aberrationen. Betrachtet man allerdings das Verfahren zur quantitativen Charakterisierung - insbesondere von optischen Elementen - treten weitere Schwierigkeiten auf. Zunächst funktioniert die Elektronenmikroskopie nur für metallische Objekte, da die Wechselwirkung der Elektronen mit dielektrischen Materialien zu gering ist. Daher müssen dielektrische Proben oft mit einer sehr dünnen Metallschicht bedampft werden, was damit die Probe meist für die eigentliche Anwendung unbrauchbar macht. Neuere Geräte erlauben auch die Untersuchung von dielektrischen Proben ohne vorherige Beschichtung, allerdings ist die erreichte Auflösung dann etwas niedriger. Außerdem wird durch das Elektronenmikroskop nicht direkt die Oberfläche des Objekts abgebildet, sondern lediglich die gestreuten Elektronen, die auch aus dem Inneren der Probe stammen können. Eine quantitative Messung ist daher nur möglich, wenn die genauen Streuprozesse analysiert und berücksichtigt werden.

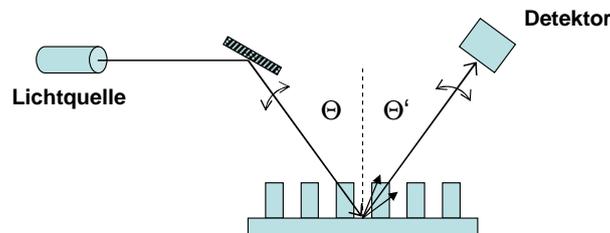
4.2.2 Inverse Charakterisierungsmethoden

In diesem Abschnitt sollen nun einige Messverfahren, die in die Kategorie „inverse Verfahren“ fallen, vorgestellt werden. Als inverse Verfahren sollen Charakterisierungsmethoden bezeichnet werden, die die Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems zur Charakterisierung nutzen. Die Namensgebung der Verfahren ist oft nicht eindeutig, außerdem werden oft mehrere Ansätze kombiniert, daher soll hier lediglich ein kurzer Überblick über die Grundprinzipien der einzelnen Verfahren gegeben werden. Für die Klassifizierung wird die Bezeichnung der Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) verwendet [130], die in Tabelle 4.2 dargestellt ist. Der Begriff **Scatterometrie** kann als Überbegriff der anderen Verfahren verstanden werden. Er beschreibt Verfahren, die das Licht, das von einem Objekt zurück gestreut wird, messen. Im Fall von periodischen Gitterstrukturen würde man dann korrekterweise vom gebeugten Licht sprechen. Scatterometrische Verfahren existieren seit Ende der siebziger Jahre, als eine der ersten Veröffentlichungen auf diesem Gebiet wird oft das Verfahren von Kleinknecht und Meier [131] zur Linienebreitenbestimmung zitiert. Eine recht umfangreiche Betrachtung der Geschichte der scatterometrischen Verfahren findet sich bei Raymond [4].

Untersuchte Eigenschaft	Messverfahren	Goniometrische Messgrößen (Θ -abhängig)	Spektroskopische Messgrößen (λ -abhängig)
Intensität	Klassische Scatterometrie	$\eta_{\Theta}(\Theta')$	
	Reflektometrie	$R(\Theta/2\Theta)$	$R_{\Theta/2\Theta}(\lambda)$
	Pol. abh. Scatterometrie	$R_{P,A}(\Theta/2\Theta),$ $\eta_{P,A}(\Theta')$	$R_{P,A,\Theta/2\Theta}(\lambda),$ $R_{P,A,\Theta=0}(\lambda)$
	Phasenmod. Scatterom.	$I_0(\Theta), I_{sin}(\Theta),$ $I_{cos}(\Theta)$	
Polarisationszustand	Klassische Ellipsometrie	$\Delta(\Theta/2\Theta),$ $\Psi(\Theta/2\Theta)$	$\Delta_{\Theta/2\Theta}(\lambda),$ $\Psi_{\Theta/2\Theta}(\lambda)$
	Ellips. Scatterometrie	$\Delta_{\Theta}(\Theta'), \Psi_{\Theta}(\Theta')$	
Ausbreitungsrichtung	Diffraktometrie	Θ' (Ordnung)	

Tabelle 4.2: Klassifikation der inversen Messverfahren nach der PTB

Die **2 Θ -Scatterometrie** ist das in der Praxis gebräuchlichste Verfahren. Hierbei wird das Gitter schräg beleuchtet und die Intensität des in 0. Ordnung reflektierten Lichts gemessen (spekulare Ordnung). Der Einfallswinkel Θ wird dabei variiert, und der Detektor entsprechend nachgefahren (siehe Abb. 4.24). Der Begriff Scatterometrie wird auch oft als Synonym für die 2 Θ -Scatterometrie verwendet.

Abbildung 4.24: 2 Θ -Scatterometer

Eine Variante, bei dem mehr als eine Beugungsordnung gemessen werden kann, ist das so genannte *Dome-Scatterometer* [15], das in Abbildung 4.25 dargestellt ist. Über einen halbkugelförmigen Schirm werden die Beugungsordnungen eingefangen und dann auf eine Kamera abgebildet.

Die **Reflektometrie** ist ein Spezialfall der Scatterometrie. Wie der Name bereits ausdrückt, wird hier nur das von der Struktur reflektierte Licht gemessen. Da die Scatterometrie hauptsächlich bei Siliziumstrukturen eingesetzt wird, die nicht transparent sind, handelt es sich hierbei also fast ausschließlich um solche Verfahren.

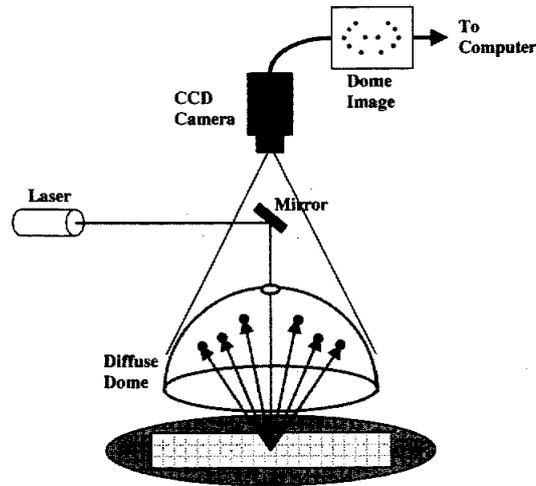


Abbildung 4.25: Dome-Scatterometer (Quelle: Hatab [15])

Statt den Einfallswinkel zu variieren, gibt es auch scatterometrische Verfahren, die Wellenlänge des einfallenden Lichts ändern [132]. Man spricht dann auch von **spektroskopischer Scatterometrie**.

Anstelle der Intensität werden oft auch, wie in der klassischen **Ellipsometrie**, die ellipsometrischen Winkel Ψ und Δ bestimmt. Das Verfahren der Ellipsometrie stammt aus der Schichtanalyse. Über die ellipsometrischen Winkel wird die Polarisationsellipse und somit der genaue Polarisationszustand des Lichts beschrieben [133].

Die Scatterometrie wird teilweise auch **Diffraktometrie** bezeichnet. Die Diffraktometrie ist allerdings klassischerweise ein Verfahren, bei dem nur die Beugungswinkel einer Struktur bestimmt werden. Diffraktometrie wird hauptsächlich zur Analyse von Kristallen eingesetzt: Das Beugungsmuster gibt Aufschluss über die Kristallstruktur des untersuchten Materials.

Die scatterometrischen Verfahren, die in der Halbleiterindustrie eingesetzt werden, basieren fast ausschließlich auf vorausberechneten Daten. So kann eine scatterometrische Messung schnell mit der Datenbank abgeglichen werden und zur Prozesskontrolle genutzt werden.

Das inverse Problem in der Scatterometry und der Einfluss von Messfehlern wurde von Drege, Byrne und Al Assaad über ein Linearisierungsverfahren untersucht [134, 135, 136]. Die Messung der Critical Dimension mit Hilfe der Scatterometry und der Vergleich mit anderen Messverfahren wurde z.B. von Wurm [137] betrachtet.

4.2.3 Rekonstruktion durch Messung von Beugungseffizienzen

Wir betrachten nun ein Verfahren, das ebenfalls zu den oben genannten inversen Verfahren zählt. Ziel ist es diffraktiv optische Elemente (DOEs) zu charakterisieren. Betrachtet man die oben vorgestellten scatterometrischen Verfahren, so stammen diese fast ausschließlich aus der Halbleiterindustrie. Stand der Technik sind Verfahren, die eindimensionale Gitterstrukturen charakterisieren können. Verfahren für zweidimensionale Gitterstrukturen sind auf Grund des Rechenaufwands noch in der Entwicklungsphase [8, 9]. In der Halbleiterindustrie versucht man die Silizium-Strukturen auf dem Wafer oder die Fotoresist-Strukturen vor dem Ätzprozess durch solche Verfahren zu charakterisieren. Im Gegensatz zu Silizium-Strukturen stehen im Fall von diffraktiven Elementen nun nicht nur reflektierte Beugungsordnungen sondern auch die transmittierten zur Verfügung.

In der Scatterometrie wird für die Rekonstruktion oft ein großes Wellenlängen- oder Winkelspektrum betrachtet. Hier soll nun nur die Beugungseffizienz einzelner Ordnung bei diskreten Wellenlängen und Einfallswinkeln betrachtet werden. Ziel ist es die Gitterparameter von ein- und zweidimensionalen Beugungsgittern aus den Beugungseffizienzmessungen zu bestimmen. Wie bereits im Kapitel 3 beschrieben benötigen wir zunächst ein Modell des Gitters, das die Parametrisierung festlegt. Zur Bestimmung der Parameter verwenden wir dann die gemessenen Beugungseffizienzen bei verschiedenen Messkonfigurationen (z.B. verschiedenen Wellenlängen, Einfallswinkeln oder Beugungsordnungen). Wir versuchen also wieder das inverse Problem zu lösen und so die Parameter zu bestimmen:

$$f(\vec{p}) = \frac{1}{2} \|\vec{\eta}_{\text{gemessen}} - \vec{\eta}_{\text{calc}}(\vec{p})\|^2 \rightarrow \min \quad (4.3)$$

Bei der Betrachtung des Design- und Optimierungsproblems ist eine eindeutige Lösung nicht zwingend erforderlich, hier sind mehrere Lösungen eventuell sogar gewünscht, da dann eventuell weitere Kriterien hinzugefügt werden können. Im Fall der Gittercharakterisierung sucht man hingegen eine eindeutige Lösung des inversen Problems. Gesucht ist der Parametersatz, der die Zielfunktion nicht nur minimiert, sondern idealerweise exakt zu den gemessenen Beugungseffizienzen führt:

$$\|\vec{\eta}_{\text{gemessen}} - \vec{\eta}_{\text{calc}}(\vec{p})\|^2 = 0 \quad (4.4)$$

4.2.4 Gittercharakterisierung über Optimierungsverfahren

Im Abschnitt 3.2 wurde die iterative Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems betrachtet. Nun soll dieses Verfahren zur Charakterisierung von Beugungsgittern eingesetzt werden. Abbildung 4.26 zeigt den schematischen Ablauf der Profilformbestimmung. Das Schema zeigt wie oben bereits beschrieben die iterative Invertierung des Gitterbeugungsproblems. Auf der einen Seite messen wir die Beugungseffizienzen eines unbekannt

Gitters, auf der anderen Seite nutzen wir ein Modell unseres Gitters, um durch Vorwärtsrechnungen die Beugungseffizienz rigoros zu berechnen. Die Messungen liefert die

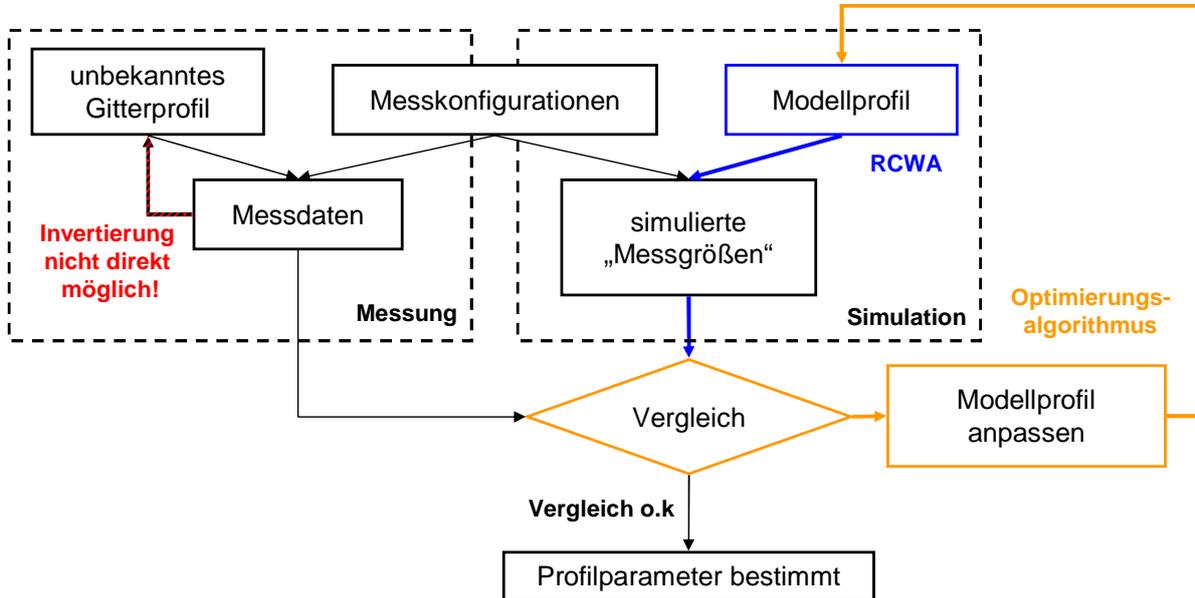


Abbildung 4.26: Schematischer Ablauf der Profilformbestimmung

Beugungseffizienz des unbekannten Gitters in verschiedenen Messkonfigurationen. Ausgehend von Startwerten für die Gitterparameter können nun die Beugungseffizienzen des Modellprofils für die Messkonfigurationen über die elektromagnetische Rechnung bestimmt werden. Durch den Vergleich der gemessenen und der berechneten Effizienzen versucht nun der Optimierungsalgorithmus das Minimum der Zielfunktion und damit den zum unbekannten Gitter gehörigen Parametersatz zu bestimmen. Die Gittercharakterisierung über das Lösen des inversen Problems ist ein geeignetes Verfahren, wenn nur kleine Abweichungen von einer Sollform bestimmt werden sollen (z.B. Herstellungsfehler). Dann ist die Sollform des Gitters ein geeigneter Startpunkt für die Optimierung. Sind nur wenige Informationen über das Gitter bekannt, ist die Charakterisierung mit solch einem Verfahren nur schwierig möglich. Abbildung 4.27 zeigt ein Beispiel für die iterative Parameterbestimmung. Ausgehend von einem Startpunkt im Parameterraum wird der Gradient der Zielfunktion bezüglich der Gitterparameter berechnet und so der Parametersatz für den nächsten Iterationsschritt bestimmt (vgl. Abschnitt 3.2 bzw. Gleichung 3.2). Nach wenigen Iterationsschritten hat der Optimierungsalgorithmus die Nullstelle der Zielfunktion bestimmt und somit die Parameter des gesuchten Gitters. Hier wurde zur Visualisierung die berechnete Beugungseffizienz eines Gitters mit bekannten Parametern verwendet. Dargestellt ist außerdem der Wert der Zielfunktion über dem gesamten Parameterraum - der Optimierungsalgorithmus kennt aber nur den Funktionswert und den Gradienten an der jeweiligen Stelle.

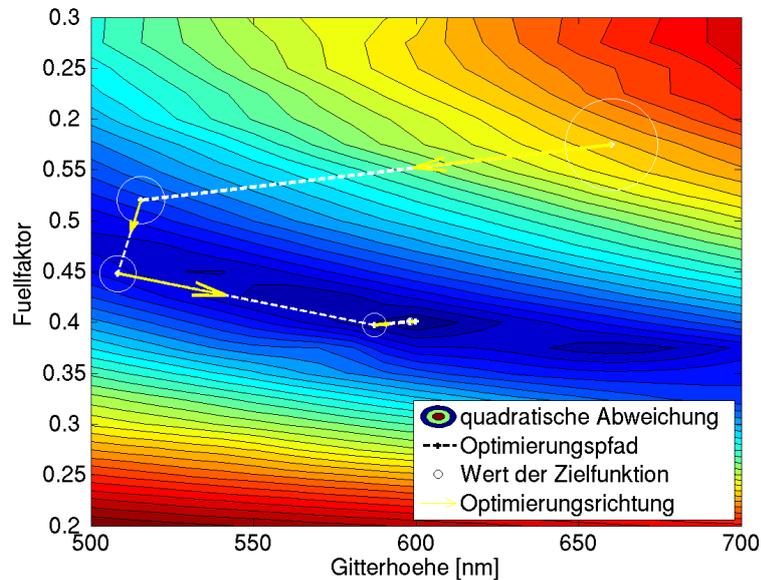


Abbildung 4.27: Potentiallandschaft und Optimierungspfad

4.2.5 Profilformbestimmung mit approximierten Daten

Nun soll ein Beispiel betrachtet werden, wie die Parameterbestimmung mit Hilfe des in Abschnitt 3.3 beschriebenen Approximationsverfahrens abläuft. Wir betrachten als Beispiel ein binäres, eindimensionales Gitter, dessen Höhe und Füllfaktor (also das Verhältnis von Stegbreite und Periode) bestimmt werden sollen. Die Brechzahl und die Periode seien bekannt (die Gitterperiode kann z.B. leicht über die Bestimmung des Ablenkungswinkels bestimmt werden). Wir betrachten die Effizienz der ungebeugten Ordnung bei fünf verschiedenen Wellenlängen und haben also als Ausgangspunkt einen fünf-komponentigen Effizienzvektor. Um das Verfahren zu demonstrieren verwenden wir keine Messdaten, sondern berechnen die Effizienz eines bekannten Gitters und versuchen dessen Höhe und Füllfaktor aus der Approximation zu bestimmen. Wir wählen den Füllfaktor = 0.428 und die Gitterhöhe = $0.664 \mu\text{m}$, die Gitterperiode des betrachteten Gitters sei $2 \mu\text{m}$. Dann erhalten wir für die fünf betrachteten Wellenlängen folgende fünf Beugungseffizienzen:

$$\vec{\eta} = \begin{pmatrix} 5.03\% \\ 0.41\% \\ 1.38\% \\ 7.01\% \\ 11.80\% \end{pmatrix}$$

Jede Effizienz liefert dann in der entsprechenden Komponente der Approximation eine Höhenlinie. In Abbildung 4.28 sind die approximierten Beugungseffizienzen über dem zweidimensionalen Parameterraum (Gitterhöhe und Füllfaktor) dargestellt.

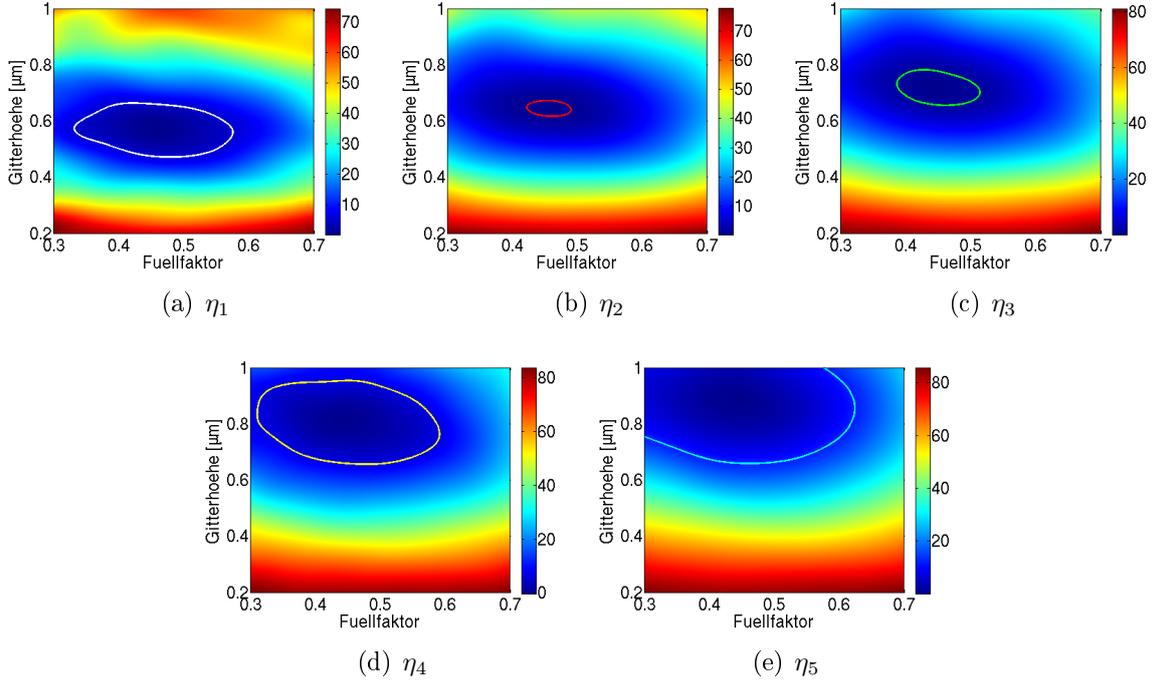


Abbildung 4.28: Messdaten in den Komponenten der Approximation

Die Approximation wurde mit 11×11 Datenpunkten erstellt, an jedem der Abtastpunkte wurden die fünf Effizienzen rigoros berechnet. Die Approximation besteht aus 8×8 verschobenen Basisfunktionen. Betrachtet man jede Komponente für sich ist das Problem nicht eindeutig, alle Punkte auf der jeweiligen Höhenlinie wären eine Lösung des Problems. Betrachtet man jedoch alle Komponenten zusammen, haben die Höhenlinien einen eindeutigen Schnittpunkt (Abb. 4.29).

Der Schnittpunkt aller Höhenlinien liegt beim Füllfaktor = 0.428 und der Gitterhöhe = $0.664 \mu\text{m}$. Die gefundenen Parameter sind also genau die vorgegebenen Daten. Betrachten wir die quadratische Abweichung zwischen den vorgegebenen Effizienzen und der Approximation (Farbdarstellung in Abb. 4.29), dann liegt das Minimum ebenfalls an dieser Stelle. Im Minimum ist

$$\|\vec{\eta}_{meas} - \vec{\eta}_{approx}\| = 0.02\%$$

Das Minimum ist nicht exakt Null, allerdings ist der Fehler, der durch die Approximation zu Stande kommt, mit 0.02% sehr gering.

Durch die Verwendung von mehreren Messkonfigurationen erhalten wir bei der Betrachtung des inversen Gitterbeugungsproblems eine eindeutige Lösung. Wir können mit Hilfe der Approximation durch verschobene Basisfunktionen zu einem gegebenen Effizienzvektor bestimmte Gitterparameter bestimmen. Da wir hier keine Messdaten, sondern

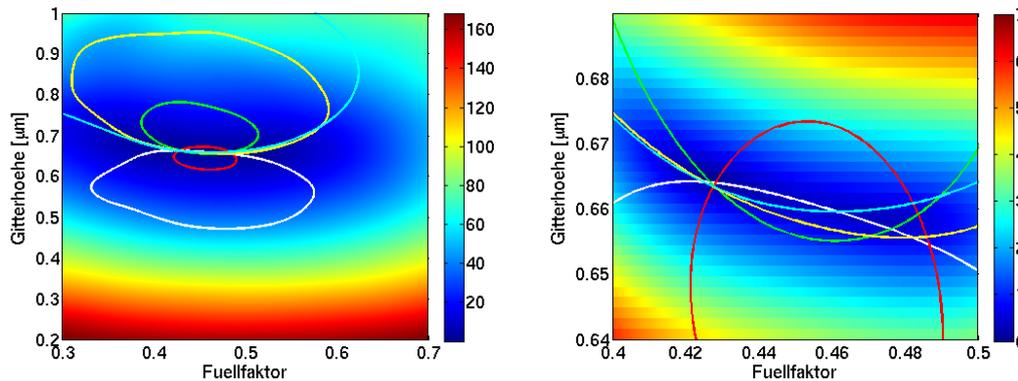


Abbildung 4.29: Schnittpunkt der Höhenlinien (rechts: Ausschnitt)

berechnete Daten approximieren, nutzen wir eine der Haupteigenschaften der Approximation - nämlich die Glättung von verrauschten Daten - kaum aus. Bei der rigorosen Berechnung könnte allenfalls ein numerisches Rauschen eingeführt werden. Trotzdem eignet sich die Approximation sehr gut für diese Anwendung. Verschobene Basisfunktionen sind ein einfaches, genaues und effizientes Mittel zur Approximation vektorieller Daten. Außer der Berechnung einer Datenbank mit Hilfe von rigorosen Simulationen gibt es auch Verfahren, die zu gemessenen Beugungseffizienz die Profilparameter durch andere Messverfahren, wie beispielsweise AFM oder SEM ermitteln (siehe oben). In diesem Fall sind die Daten in der Datenbank sicherlich fehlerbehaftet, so dass hier die Approximation Vorteile im Vergleich zu Interpolationsverfahren bieten würde.

4.2.6 Untersuchung der Eindeutigkeit

Im Folgenden soll nun die Eindeutigkeit der Rekonstruktion der Gitterparameter untersucht werden. Es ist augenscheinlich klar, dass die Lösungen des inversen Gitterbeugungsproblems nicht eindeutig ist, da es mehrere Gitter geben kann, die die gleichen Beugungseffizienzen besitzen. Allerdings betrachten wir bei der Bestimmung der Gitterparameter immer einen eingeschränkten Parameterraum und suchen hierin nach einer eindeutigen Lösung. Trotzdem kann es auch hier zu Mehrdeutigkeiten kommen. Für verschiedene Spezialfälle des Gitterbeugungsproblems gibt es mathematische Untersuchungen zur Eindeutigkeit [138]. Hier soll nun aber das konkrete inverse Problem zur Charakterisierung von Beugungsgittern betrachtet werden, bei dem nur bestimmte Beugungseffizienzen aus der Messung bekannt sind.

4.2.6.1 Beispiel

Wir betrachten zunächst ein einfaches Beispiel und wollen die Gitterhöhe eines binären Phasengitters bestimmen - alle anderen Parameter seien bekannt. Abbildung 4.30 zeigt die Beugungseffizienz der 0. Ordnung (blau) eines solchen Gitters über der zu bestimmenden Gitterhöhe.

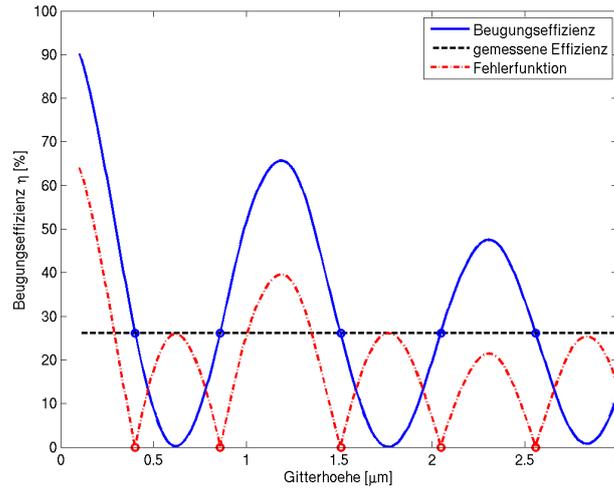
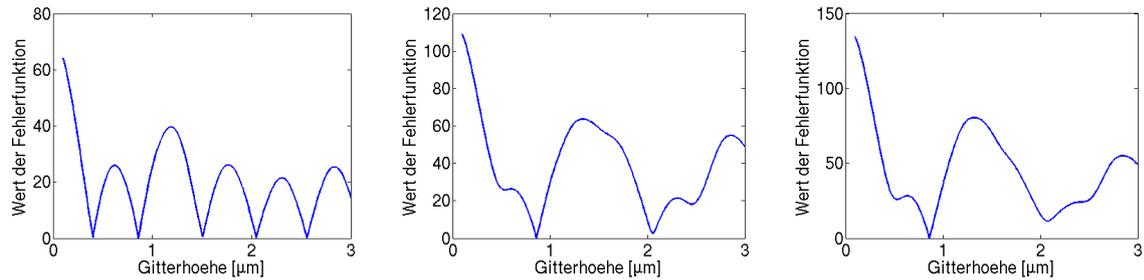


Abbildung 4.30: Beugungseffizienz eines binären Phasengitters über der Gitterhöhe

Betrachten wir nun eine bestimmte Beugungseffizienz (die z.B. gemessen wurde), so gibt es mehrere Schnittpunkte mit der Effizienzkurve. Es gibt also mehrere Lösungen für die Gitterhöhe. Die Fehlerfunktion (rot), die wir zur Bestimmung der Gitterhöhe minimieren möchten, beschreibt die Abweichung der gemessenen Effizienz und der Effizienz bei der jeweils betrachteten Höhe:

$$\|\eta_{unknown} - \eta(h)\| \rightarrow \min$$

Nun betrachten wir die Messung der Beugungseffizienz bei mehreren Wellenlängen. In Abbildung 4.31 ist der Wert der Fehlerfunktion für verschiedene Messkonfigurationen aufgetragen. In Abb. 4.31a wurde nur eine Wellenlänge (577 nm) verwendet. Wie oben bereits gesehen gibt es dann mehrere Lösungen für die Gitterhöhe, da die Beugungseffizienz oszilliert - das Problem ist nicht eindeutig. Mit der Hinzunahme einer zweiten Wellenlänge (694 nm) in Abb. 4.31b weist die Fehlerfunktion nur noch zwei Minima auf. Die Gitterhöhe könnte so nun über einen weitaus größeren Bereich eindeutig bestimmt werden. Durch eine dritte Wellenlänge (633 nm), bei der die Beugungseffizienz gemessen wurde (Abb. 4.31c), gibt es dann nur noch eine Nullstelle über den betrachteten Höhenbereich von 3 μm . Allerdings gibt es noch lokale Minima, die bei der Verwendung eines lokalen Optimierungsalgorithmus zur Bestimmung des Minimums der Fehlerfunktion zu einer falschen Lösung führen könnten.



(a) Messung der Effizienz bei einer Wellenlänge
 (b) Messung der Effizienz bei zwei Wellenlängen
 (c) Messung der Effizienz bei drei Wellenlängen

Abbildung 4.31: Fehlerfunktion für die Bestimmung der Gitterhöhe

4.2.6.2 Eindeutigkeit der Minima

Im obigen Beispiel wurde gezeigt, dass durch die Verwendung von genügend Messgrößen eine eindeutige Lösung des inversen Problems entstehen kann. Nun soll die Eindeutigkeit der Parameterrekonstruktion genauer betrachtet werden. Es soll exemplarisch wieder ein binäres Phasengitter betrachtet werden, zur besseren Veranschaulichung wird ein zweidimensionaler Parameterraum mit den Parametern Gitterhöhe und Füllfaktor angenommen. Die Gitterperiode und das Gittermaterial seien bekannt. Wir betrachten die Fehlerfunktion über dem Parameterraum, indem wir an jedem Punkt des Parameterraums die quadratische Abweichung der Beugungseffizienzen des Gitters mit den entsprechenden Parametern und den Effizienzen eines unbekanntes Gitters (z.B. aus einer Messung) berechnen. Anstelle einer Messung betrachten wir hier die berechneten Effizienzen eines bekannten Gitters, an dieser Stelle im Parameterraum hat die Fehlerfunktion dann eine Nullstelle.

Es soll ein Gitter mit einer großen Gitterperiode ($P > 10\lambda$) und ein Gitter mit einer kleinen Gitterperiode ($P = 3\mu\text{m}$) verglichen werden. Für die große Gitterperiode ist die skalare Näherung noch gültig und wir können das Gitter als dünnes Phasenelement betrachten. Für die Berechnung verwenden wir die „Vectorial Thin Element Approximation“ (VTEA)[23], die eine Erweiterung der klassischen skalaren Theorie darstellt (siehe Abschnitt 2.1.3.4). Die Beugungseffizienzen des feineren Gitters müssen elektromagnetisch berechnet werden, da hier die Kanteneffekte eine signifikante Rolle spielen und nicht vernachlässigt werden können.

Die Fehlerfunktion über dem Parameterraum ist in Abbildung 4.32 dargestellt. Die Berechnung basiert auf 16 verschiedenen Messkonfigurationen (8 Wellenlängen, jeweils s- und p-Polarisation). Es wurde jeweils die Effizienz der 0. transmittierten Ordnung verwendet. Das betrachtete Gitter (Füllfaktor 0.44, Gitterhöhe $0.8\mu\text{m}$) befindet sich im Schnittpunkt der gestrichelten Linien. Hier ist die Fehlerfunktion exakt Null, da be-

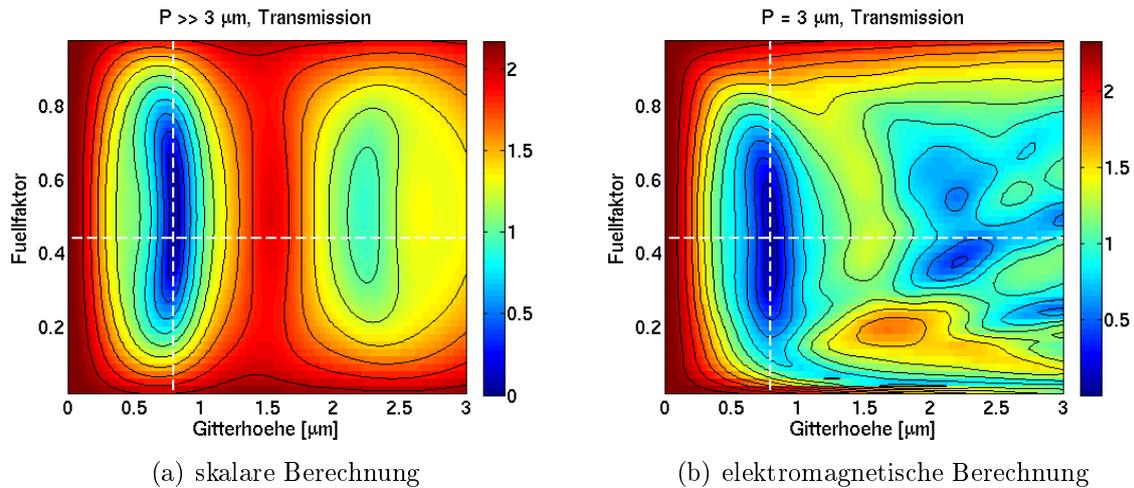


Abbildung 4.32: Fehlerfunktion für den betrachteten Parameterraum

rechnete Daten verwendet wurden. Nun soll die Fehlerfunktion entlang der Linien für verschiedene Messkonfigurationen betrachtet werden.

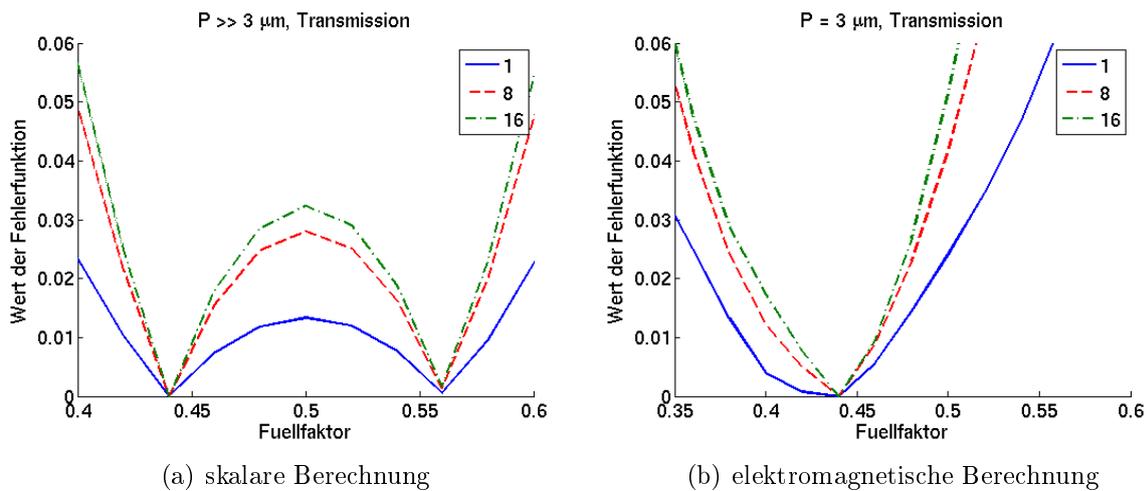


Abbildung 4.33: Fehlerfunktion über dem Füllfaktor

Abbildung 4.33 zeigt die Fehlerfunktion über dem Füllfaktor des Gitters. Es wurde eine unterschiedliche Anzahl an Messkonfigurationen betrachtet: Die Messung der Beugungseffizienz der 0. transmittierten Ordnung bei einer Wellenlänge (1), die Messung bei 4 verschiedenen Wellenlängen, jeweils bei s- und bei p-polarisierter Beleuchtung (8) und die Messung der 0. Ordnung bei 8 verschiedenen Wellenlängen jeweils für s- und p-polarisiertes Licht (also insgesamt 16 Messkonfigurationen). Wie schon in 4.32 erkennbar, ist die skalar berechnete Fehlerfunktion symmetrisch um einen Füllfaktor von 0.5. Dies

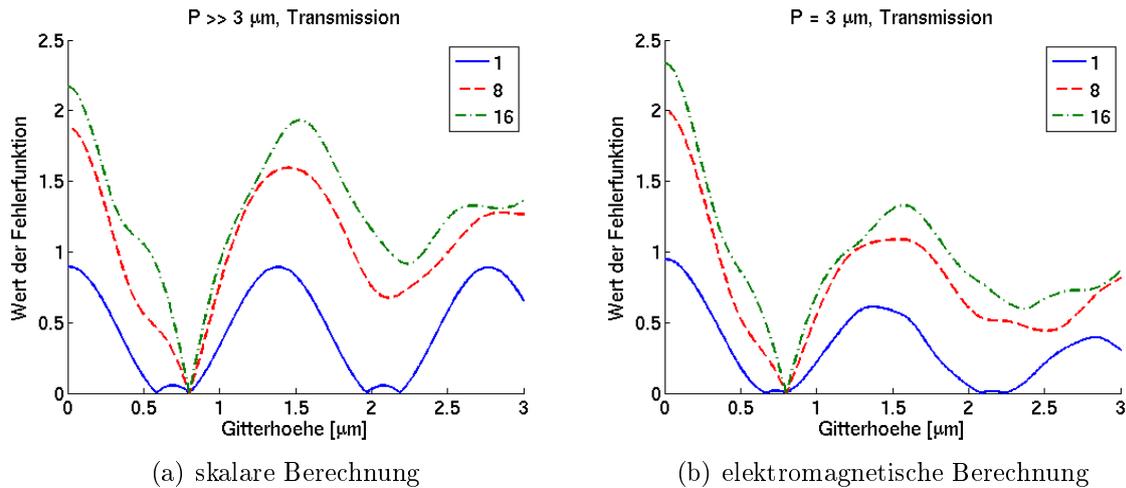


Abbildung 4.34: Fehlerfunktion über der Gitterhöhe

führt zu einer prinzipiellen Zweideutigkeit dieses Parameters bei der skalaren Betrachtung. Das feine Gitter, dessen Beugungseffizienzen elektromagnetisch berechnet wurden, hat eine eindeutige Lösung für den Füllfaktor (Abb. 4.33b). Die elektromagnetischen Kanteneffekte führen für den Füllfaktor also zu einer eindeutigen Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems.

In Abbildung 4.34 wird die Fehlerfunktion über der Gitterhöhe betrachtet. Hier sind keine so signifikanten Unterschiede zwischen dem groben (skalar berechneten) und dem feinen (elektromagnetisch berechneten) Gitter zu erkennen. Mit zunehmender Zahl an Messkonfigurationen wird das globale Minimum steiler und die lokalen Minima schlechter. Unter Verwendung von mehreren Messkonfigurationen gibt es über einen weiten Bereich eine eindeutige Lösung für die Gitterhöhe.

Bislang wurde nur die 0. transmittierte Beugungsordnung betrachtet. Für eine mögliche Charakterisierung könnten allerdings auch - wie bei der klassischen Scatterometrie (siehe Abschnitt 4.2.2) - die reflektierten Beugungsordnungen verwendet werden. Abbildung 4.35 zeigt die Fehlerfunktion über dem Füllfaktor und der Gitterhöhe. Auffällig ist, dass die Fehlerfunktion für die Gitterhöhe eine schnellere Oszillation aufweist, als im Fall der transmittierten Beugungsordnungen (Abb. 4.33b). Die Ursache ist die unterschiedliche Beziehung zwischen der Gitterhöhe und der Phase. Die Phase des Gitters ist proportional zur optischen Wegdifferenz (OPD), die sich aus der Differenz der optischen Weglängen (OPL) ergibt. In Abbildung 4.36 ist dieser Zusammenhang dargestellt. Für das transmittierte Licht ergibt sich dabei eine OPD von $(n - 1) \cdot h$, für das reflektierte Licht ist die optische Wegdifferenz $2h$. Betrachten wir also beispielsweise eine Brechzahl von 1.5 entspricht dies einem Faktor vier für die Phase des Gitters.

Die Oszillationen in der Fehlerfunktion können insbesondere bei der Verwendung von

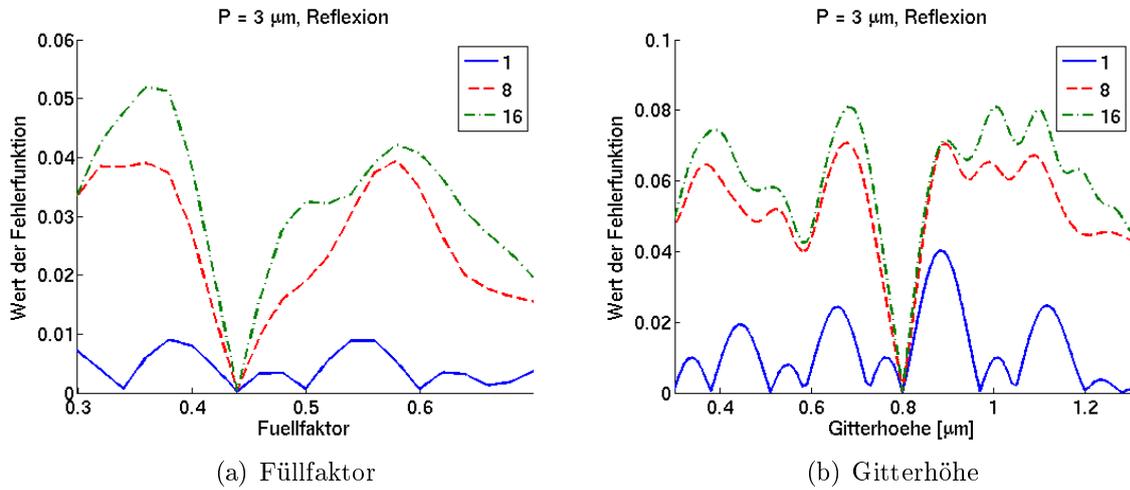


Abbildung 4.35: Fehlerfunktion für die Messung der 0. reflektierten Beugungsordnung

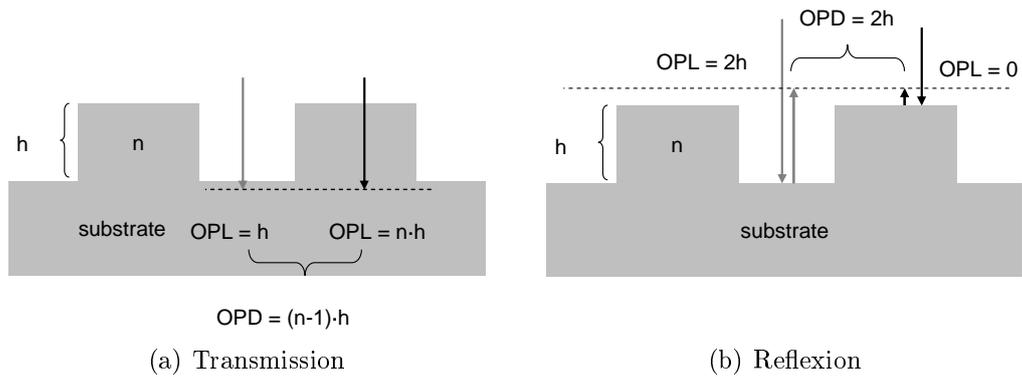


Abbildung 4.36: Optische Wegdifferenz (OPD) für transmittierte und reflektierte Beugungsordnungen

lokalen Optimierungsverfahren Schwierigkeiten bereiten, da je nach Wahl des Startpunktes der Optimierung möglicherweise nicht das globale, sondern nur ein lokales Minimum gefunden wird. Betrachtet man den Absolutwert der Fehlerfunktion, so ist dieser bei den reflektierten Ordnungen niedriger als bei den transmittierten, da die reflektierten Beugungsordnungen in der Regel eine niedrigere Beugungseffizienz besitzen.

Bis jetzt wurden nur die 0. Beugungsordnungen bei verschiedenen Wellenlängen und Polarisationsrichtungen betrachtet, zur Bestimmung der Gitterparameter könnten aber verschiedene Beugungsordnungen eines Gitters gemessen werden. Für die Bestimmung von Füllfaktor und Gitterhöhe betrachten wir nun die 0., 1. und 2. Beugungsordnung des Gitters bei einer einzigen Wellenlänge (633 nm). Die Fehlerfunktion für die beiden Parameter ist in Abbildung 4.37 dargestellt.

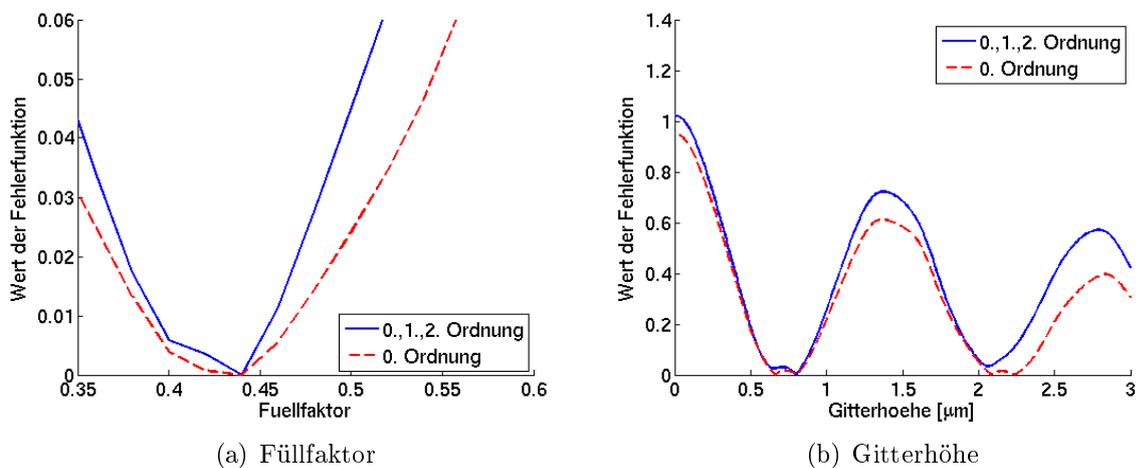


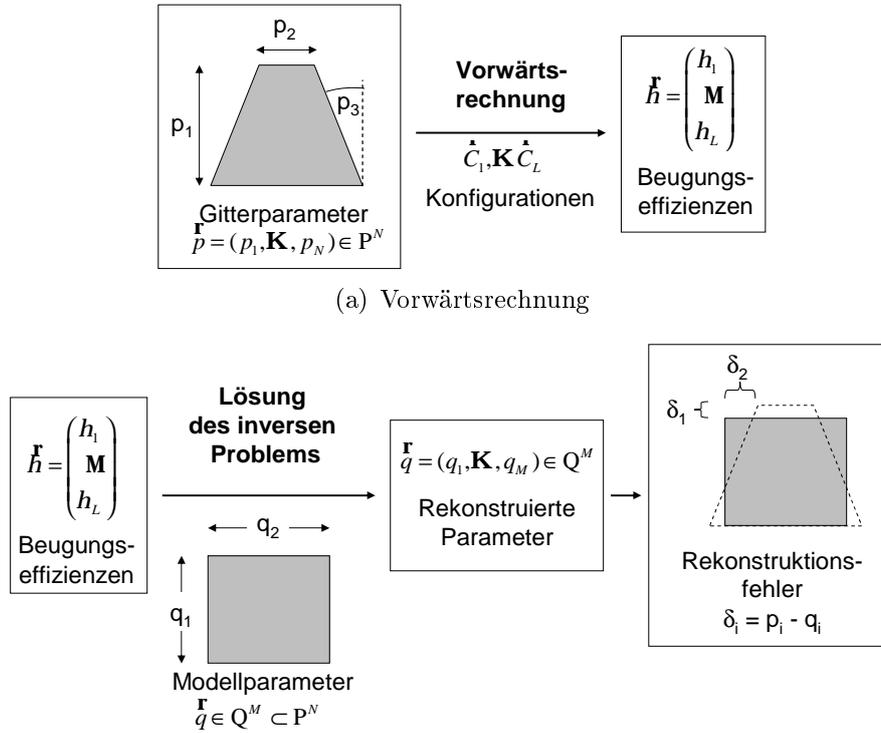
Abbildung 4.37: Fehlerfunktion für die Messung von drei Beugungsordnungen

Die Hinzunahme der 1. und 2. Beugungsordnung verschmälert das Minimum für den Füllfaktor im Vergleich zur Messung der 0. Ordnung (grüne Kurve) geringfügig. Bei der Gitterhöhe verschwinden die weiteren Nullstellen, allerdings bleiben sehr tiefe lokale Minima, so dass die eindeutige Bestimmung der Gitterhöhe in dieser Konfiguration schwierig bleibt. Der Vorteil einer solchen Konfiguration besteht darin, dass alle Beugungseffizienzen des Gitters gleichzeitig gemessen werden könnten und so eine sehr schnelle Charakterisierung möglich wäre. Ein experimenteller Aufbau zur gleichzeitigen Messung von mehreren Beugungsordnungen wird in Kapitel 5 vorgestellt.

4.2.6.3 Unzureichende Parametrisierung

Für das Lösen des inversen Gitterbeugungsproblems benötigt man zunächst eine Parametrisierung des Gitters. Entweder für die Erstellung einer Datenbank mit Beugungsef-

fizienzen oder für das Aufstellen der Zielfunktion im Optimierungsalgorithmus. In der Regel kann man aber nur eine endliche Zahl an Gitterparametern betrachten, da sonst der Suchraum zu groß wird. Nun soll untersucht werden, welche Auswirkungen es hat, wenn das betrachtete Gitter Parameter aufweist, die im Modell nicht berücksichtigt wurden.



(a) Vorwärtsrechnung
(b) Lösung des inversen Problems und Bestimmung der Rekonstruktionsfehler

Abbildung 4.38: Verfahren zur Analyse von Modellfehlern

In Abbildung 4.38 ist das Verfahren zur Analyse der unzureichenden Parametrisierung dargestellt. Zunächst werden die Beugungseffizienzen eines vorgegebenen Gitterprofils mit N Parametern $\vec{p} = (p_1, \dots, p_N)$ aus dem Parameterraum P^N über die elektromagnetische Vorwärtsrechnung bestimmt (für L Messkonfigurationen $\vec{C}_1, \dots, \vec{C}_L$). Die berechneten Beugungseffizienzen $\vec{\eta}$ dienen dann als Ausgangspunkt für die Lösung des inversen Problems.

Für die Bestimmung der Parameter wird nun aber eine andere Parametrisierung verwendet, die nur $M < N$ Parameter besitzt. Der Parameterraum des Modells für die Lösung des inversen Problems ist dabei ein Unterraum des ursprünglichen Parameterraums:

$$\vec{q} \in Q^M \subset P^N$$

Aus den rekonstruierten Parametern \vec{q} können wir nun den Rekonstruktionsfehler der einzelnen Parameter bestimmen, indem wir die ursprünglichen Parameter p_i mit den rekonstruierten q_i vergleichen:

$$\delta_i = p_i - q_i$$

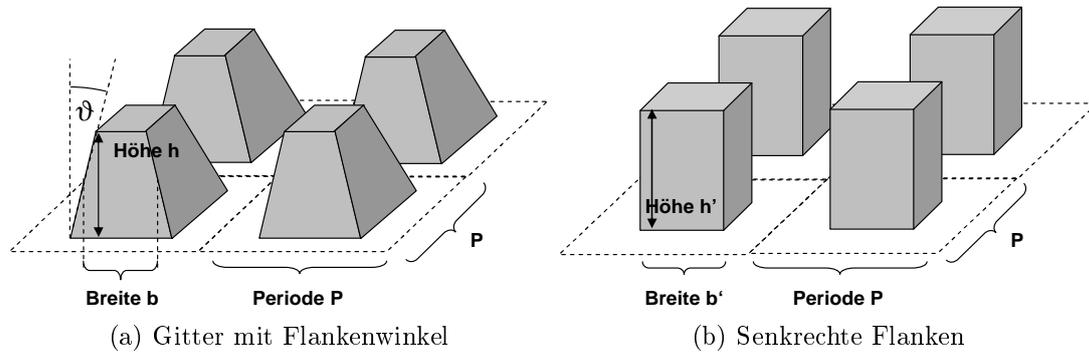


Abbildung 4.39: Zweidimensionales Säulengitter

Es soll nun exemplarisch ein zweidimensionales, binäres Säulengitter betrachtet werden. Gitterperiode und Material seien bekannt und es sollen die Gitterhöhe und die Breite der Säulen bestimmt werden. Das Gitter habe nun keine ideal senkrechten Kanten, sondern weise einen kleinen Flankenwinkel auf (z.B. verursacht durch den Herstellungsprozess). Dies beeinflusst, wie in Abschnitt 2.3.5 gesehen die Beugungseffizienz des Gitters. Wird der Flankenwinkel im Modell nicht berücksichtigt führt dies zu einer falschen Bestimmung der anderen Gitterparameter Gitterhöhe und Säulenbreite. Abbildung 4.39 zeigt das Säulengitter mit Flankenwinkel und das Modell für die Rekonstruktion mit senkrechten Kanten. Das betrachtete Gitter hat eine Gitterhöhe und Säulenbreite von 633 nm, die Gitterperiode beträgt $2 \mu\text{m}$. Für die Bestimmung des Rekonstruktionsfehlers wurden

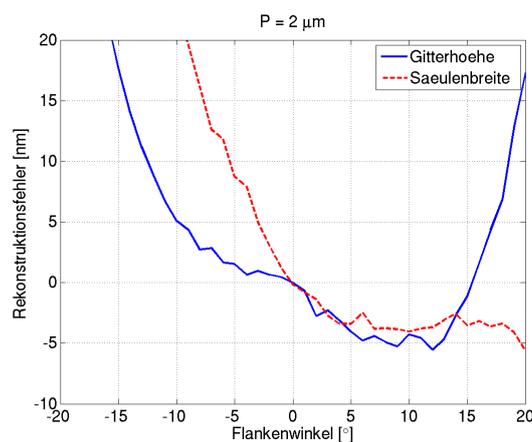


Abbildung 4.40: Rekonstruktionsfehler für ein Säulengitter mit Flankenwinkel

nun die Beugungseffizienzen eines Säulengitters mit Flankenwinkel elektromagnetisch berechnet. Aus diesen Effizienzen werden dann die Parameter des Gitters bestimmt, aber unter der Annahme senkrechter Flanken. Betrachtet werden 16 Messkonfigurationen - jeweils 8 Wellenlängen bei zwei Polarisationsrichtungen. Abbildung 4.40 zeigt den Rekonstruktionsfehler für die Säulenbreite und die Gitterhöhe über dem Flankenwinkel. Für einen Winkel von 0° verschwindet der Rekonstruktionsfehler, da das betrachtete Gitter und das Modell senkrechte Flanken aufweisen und so das Profil perfekt rekonstruiert werden kann. Für einen Flankenwinkel $\neq 0^\circ$ weichen die rekonstruierten Parameter von den ursprünglichen ab.

4.2.6.4 Nichteindeutige Parameter

Nun betrachten wir Eindeutigkeit der Bestimmung verschiedener Parameter und untersuchen ob alle Parameter unabhängig voneinander bestimmt werden können. Als Beispiel betrachten wir dabei die Gitterhöhe und die Brechzahl des Gitters.

In der skalaren Betrachtung wurde bereits gezeigt, dass Gitterhöhe und Brechzahl auf die Phase des Gitters wirken (s. Abschnitt 2.3). Die Phase kann also durch beide Parameter beeinflusst werden. Auch in der elektromagnetischen Betrachtung wirken Gitterhöhe und Brechzahl ähnlich, lediglich die Kanten des Gitters wirken unterschiedlich. Außerdem verändert die Brechzahl des Gitters die Reflexionseigenschaften an den Grenzschichten zu Substrat und Superstrat. Bei der Parameterbestimmung sind diese beiden Parameter also sehr schwer von einander zu trennen.

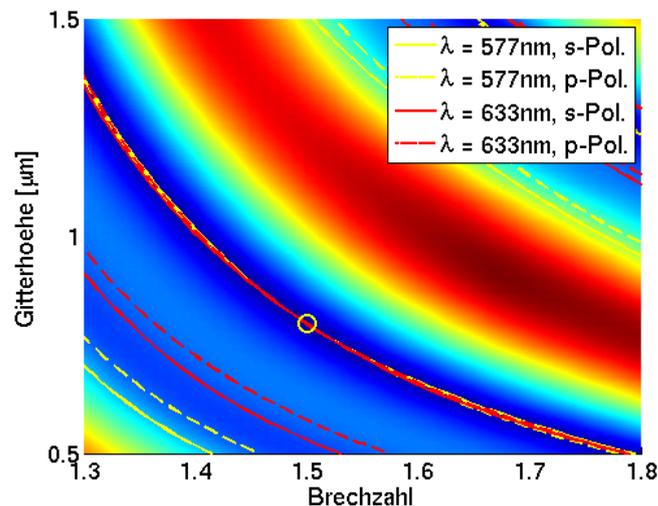


Abbildung 4.41: Potentiallandschaft für Gitterhöhe und Brechzahl

Abbildung 4.41 zeigt die Fehlerfunktion für die zwei Parameter Gitterhöhe und Brechzahl eines binären Phasengitters. Betrachtet wurde ein Gitter mit Periode $3\ \mu\text{m}$ und

Füllfaktor 0.44. Verwendet wurden zwei Wellenlängen (577 und 633 nm) und jeweils s- und p-Polarisation. Zu erkennen ist, dass sich ein sehr langes Minimum bildet. Die dargestellten Potentiallinien der einzelnen „Messwerte“ verlaufen nahezu parallel und es ist kaum möglich den Schnittpunkt (markiert durch den gelben Kreis) zu bestimmen.

Obwohl einige Gitterparameter nicht unabhängig von einander bestimmt werden können, ist dies für viele Anwendungen nicht sonderlich störend. Es wird zur Charakterisierung des Elements die optische Wirkung betrachtet. Daraus werden dann die Gitterparameter berechnet, um eine Aussage über die Performance des optischen Elements machen zu können. In den meisten Fällen wirken sich aber die Parameter, die nicht eindeutig bestimmt werden können, in ähnlicher Weise auf die Performance des Elements aus. In diesem Fall hat das Verfahren sogar Vorteile im Vergleich zu nicht optischen Verfahren, wenn z.B. nicht die eigentliche Gitterhöhe, sondern das Produkt aus Höhe und Brechzahl - also die Phase - für die Performance des Elements entscheidend sind.

4.2.6.5 Ergebnisse der Eindeutigkeitsuntersuchungen

Zur Eindeutigkeit der Rekonstruktion der Gitterparameter lässt sich nur schwer eine allgemeine Aussage treffen, daher wurde die Eindeutigkeit des Problems hier anhand von einigen Beispielen betrachtet. Es wurde gezeigt, dass es möglich ist Gitterparameter zu bestimmen, indem nur wenige Beugungseffizienzen gemessen werden. Wenn genügend Messkonfigurationen betrachtet werden, lassen sich die Parameter über einen weiten Bereich eindeutig bestimmen.

Im Fall der feinen Gitter mit einer Periode von wenigen Wellenlängen helfen die elektromagnetischen Kanteneffekte Gitterparameter, wie den Füllfaktor, eindeutig zu bestimmen. Bei den gröberen Gittern, bei denen die skalare Näherung noch ihre Gültigkeit besitzt gibt es dagegen fundamentale Mehrdeutigkeiten. Allerdings können zur Charakterisierung von solchen Gittern auch andere Methoden, wie die klassische optische Mikroskopie eingesetzt werden. Aber auch im elektromagnetischen Bereich gibt es Parameter, die nur sehr schwer unterschieden werden können. Am Beispiel Gitterhöhe und Brechzahl wurde gezeigt, dass beide Parameter im Wesentlichen die Phase des Gitters beeinflussen und deswegen nicht unabhängig von einander bestimmt werden können. Erst bei großen Änderungen dominiert der Effekt der einzelnen Parameter: die Gitterhöhe beeinflusst die Kanteneffekte und der Brechungsindex ändert die Reflexionseigenschaften an der Material-Luft Grenzschicht. Hieran wird aber auch wieder der Vorteil der funktionellen Charakterisierung deutlich: die Mehrdeutigkeit zwischen Gitterhöhe und Brechzahl ist in vielen Fällen ebenfalls nicht kritisch, da auch in der Anwendungen des Gitters beide Parameter denselben Effekt haben.

Vergleicht man die Messungen von transmittierten und reflektierten Beugungsordnungen sieht man, dass insbesondere für die Bestimmung der Gitterhöhe Oszillationen in der

Fehlerfunktion auftreten. Diese können vor allem bei der Verwendung von lokalen Optimierungsalgorithmen zu Fehlern führen, wenn der Startpunkt für die Optimierung zu weit vom globalen Minimum entfernt liegt. In diesem Fall sind die transmittierten Beugungsordnungen den reflektierten vorzuziehen. Auf der anderen Seite ist das Minimum für den Füllfaktor in Reflexion schmaler, so dass der Füllfaktor genauer bestimmt werden kann. Da die reflektierten Beugungsordnungen geringere Beugungseffizienzen besitzen, ist eine genauere Messung in Reflexion schwieriger als in Transmission.

Ausschlaggebend für die Genauigkeit der Rekonstruktion ist das betrachtete Modell des Gitters (also die Parametrisierung). Hier wurde ein Verfahren vorgestellt, mit dem der Einfluss von solchen Modellfehlern untersucht werden kann. Es wurde gezeigt, dass kleine Abweichungen im realen Gitter, die nicht im Modell berücksichtigt wurden, nur zu kleinen Fehlern führen. Ein Flankenwinkel von wenigen Grad führt zu einem Rekonstruktionsfehler von wenigen Nanometern bei den anderen Parametern und ist in vielen Fällen noch tolerierbar.

5 Experimentelle Untersuchungen zur Gittercharakterisierung

Nun sollen die experimentellen Untersuchungen zur Charakterisierung von Beugungsgittern beschrieben werden. Es werden zunächst verschiedene Aufbauvarianten zur Messung der Beugungseffizienz dargestellt. Durch numerische Simulationen wurde der Einfluss von Messfehlern auf die Rekonstruktion der Gitterparameter untersucht, um damit die Robustheit des Verfahrens bezüglich verrauschten Messdaten zu analysieren. Es wurde ein experimenteller Versuchsaufbau realisiert, der im Folgenden vorgestellt wird. Anschließend werden dann einige repräsentative Messungen an ein- und zweidimensionalen Beugungsgittern vorgestellt. Aus den gemessenen Beugungseffizienzen wurden dann die Gitterparameter ermittelt und die Ergebnisse mit anderen Messverfahren verglichen.

5.1 Messaufbau

In diesem Abschnitt werden verschiedene Varianten des Messaufbaus beschrieben. Ziel ist immer die Messung der Beugungseffizienz einzelner oder mehrerer Beugungsordnungen. Die Beugungseffizienz ist dabei das Verhältnis aus Intensität der zu messenden Beugungsordnung zur eingestrahnten Intensität auf das Gitter.

5.1.1 Messung in Transmission

Zunächst sei hier der Messaufbau in Transmission beschrieben. Dies ist bei der Betrachtung diffraktiv-optischer Elemente wohl der intuitivste Fall. Das Gitter wird von einem Laser beleuchtet (Wellenlänge λ , Einfallswinkel ϑ und Polarisation π), dabei wird die Effizienz einer transmittierten Beugungsordnung m gemessen.

Abbildung 5.1 zeigt schematisch diesen Aufbau. Der Detektor misst die Beugungseffizienz η einer Beugungsordnung und liefert diese an einen Rechner, so dass dann die Parameter des Gitters mit den oben beschriebene Verfahren rekonstruiert werden können.

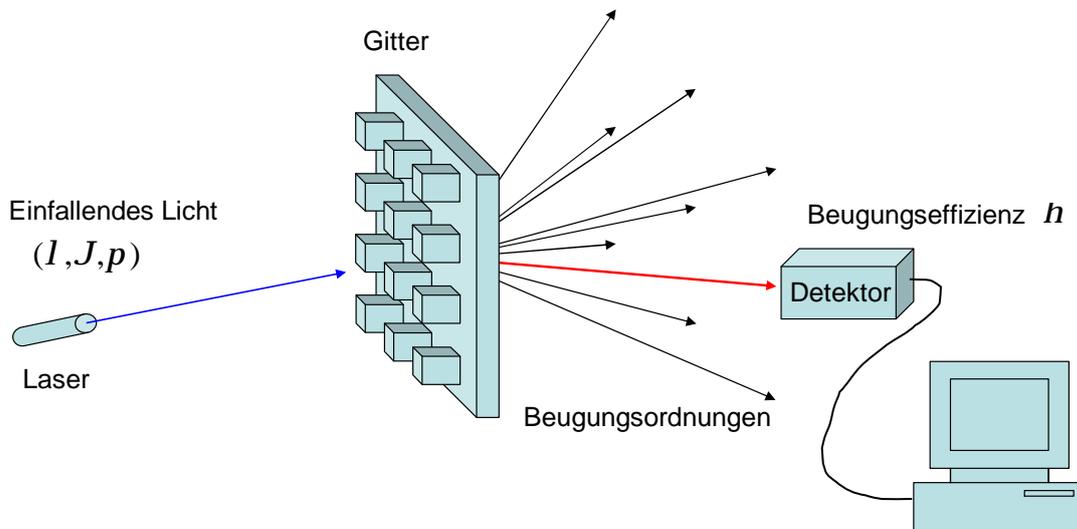


Abbildung 5.1: Messaufbau in Transmission

5.1.2 Messung in Reflexion

Anstelle der transmittierten Beugungsordnungen können - in Anlehnung an die klassische Scatterometrie - auch die reflektierten Beugungsordnungen gemessen werden.

Der Aufbau für die Reflexionsmessungen (Abb. 5.2) unterscheidet sich nicht prinzipiell vom vorher gezeigten Aufbau für die Messung in Transmission. Eine Schwierigkeit ist allerdings, dass sich die Lichtquelle und der Detektor auf der gleichen Seite des Gitters befinden, so dass das Licht, das genau entgegengesetzt zum eingestrahlteten Licht reflektiert wird, nicht direkt gemessen werden kann. In diesem Fall muss dann ein Strahlteiler eingesetzt werden.

5.1.3 Messung mehrerer Beugungsordnungen

Die zuvor beschriebenen Varianten des Messaufbaus erlauben nur die Messung einzelner Beugungsordnungen. Sollen mehrere Beugungsordnungen bestimmt werden, muss der Detektor verfahren werden und die Messungen hintereinander durchgeführt werden. Abbildung 5.3 zeigt einen Aufbau, mit dem mehrere Beugungsordnungen gleichzeitig gemessen werden können.

Mit Hilfe einer Linse wird das Beugungsspektrum des Gitters kollimiert und dann auf einen flächigen Detektor (z.B. eine CCD-Kamera) abgebildet. Die Intensitätsverteilung auf dem Detektor kann dann in die Beugungseffizienz der einzelnen Ordnungen umgerechnet werden. Der Aufbau ist dabei ähnlich dem unter anderem von Agersnap beschriebenen Verfahren der „Optical Diffraction Microscopy“, bei der die ± 1 . und die 0.

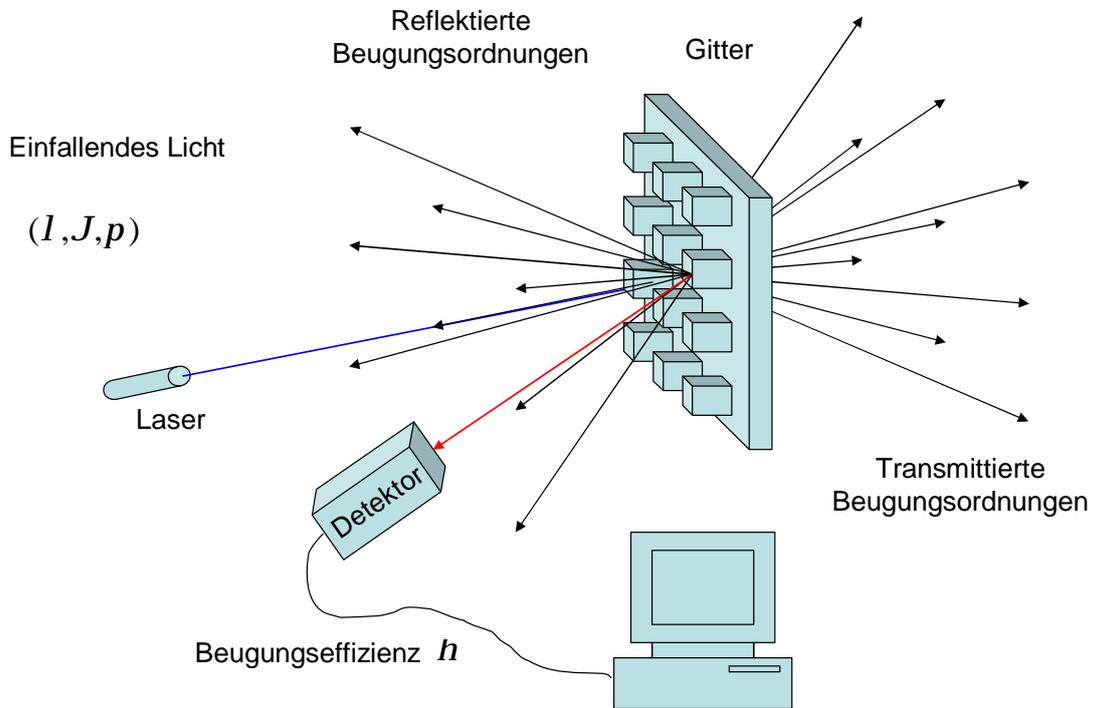


Abbildung 5.2: Messaufbau in Reflexion

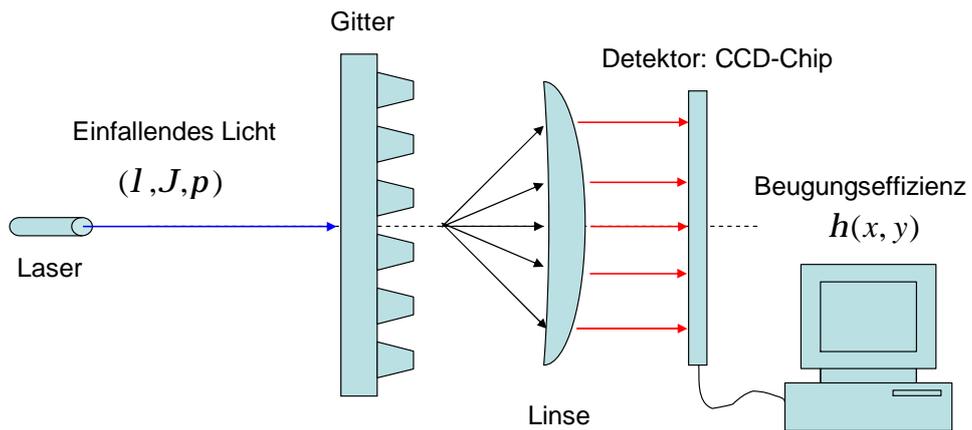


Abbildung 5.3: Messung mehrerer Beugungsordnungen

Beugungsordnung eines 1D-Gitters über eine Linse auf einen Detektor abgebildet werden [139, 140].

Die simultane Messung von mehreren Beugungsordnungen bietet außerdem den Vorteil, dass die elektromagnetischen Methoden, die in der Modellierung die Beugungseffizienz des Gitters berechnen, alle Beugungsordnungen des Gitters berechnen. Es ist also nur eine elektromagnetische Berechnung notwendig, um die Beugungseffizienz aller Beugungsordnungen zu bestimmen. Im Vergleich dazu benötigt man bei der Betrachtung von verschiedenen Wellenlängen eine elektromagnetische Berechnung pro Wellenlänge.

5.1.4 Experimentalaufbau

Zu den oben beschriebenen Varianten wurden zur näheren Untersuchung des Verfahrens auch experimentelle Aufbauten realisiert. Der erste Aufbau dient der Messung der Beugungseffizienz diffraktiver Elemente, sowohl in Transmission, als auch in Reflexion.

5.1.4.1 Messung der 0. Ordnung

Zunächst wurde ein Aufbau realisiert, mit dem die Transmission und die Reflexion der 0. Ordnung eines diffraktiven Elements bei verschiedenen Wellenlängen und Polarisationsrichtungen bestimmt werden kann. Der Aufbau ist an die Ausführungen von Hetzler et al. angelehnt [141], dort werden computergenerierte Hologramme mit Hilfe von Beugungseffizienzmessungen charakterisiert. Abbildung 5.4 zeigt ein Foto des Messaufbaus. Der Aufbau wurde in Zusammenarbeit mit Thomas Leikert - im Rahmen seiner Diplomarbeit „Aufbau und Qualifikation eines Messstandes zur Charakterisierung diffraktiver Elemente“ an der Hochschule Aalen - aufgebaut und untersucht.

Die Komponenten des Messaufbaus wurden hinsichtlich ihrer Genauigkeit charakterisiert. Als Lichtquelle dient eine Halogen-Weißlichtquelle, die zusammen mit schmalbandigen Interferenzfiltern und einem Glan-Thompson Polarisator den Beleuchtungsteil des Aufbaus bildet. Als Detektor wurde eine Standard-CCD Kamera verwendet. Zur genauen Messung der Beugungseffizienz müssen alle Komponenten des Aufbaus hinsichtlich ihrer Messgenauigkeit untersucht werden. Abbildung 5.5 zeigt beispielsweise die zeitliche Stabilität der verwendeten Lichtquelle ab dem Einschaltzeitpunkt. Um eine stabile Leistung sicherzustellen wurde die Lampe bei den Messungen mindestens eine Stunde vor der Messung eingeschaltet.

Die Beugungseffizienz ist das Verhältnis aus eingestrahelter Intensität und der Intensität der zu messenden Beugungsordnung. Daher wird auch die Effizienz im Messaufbau als Verhältnis zweier Intensitäten gemessen - somit ist keine absolute Intensitätsmessung

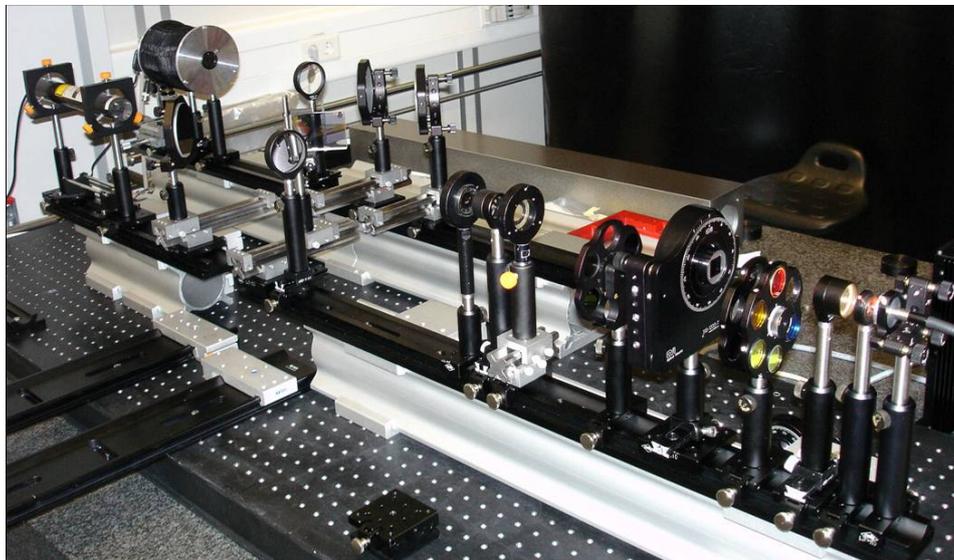


Abbildung 5.4: Experimentalaufbau zur Messung der Beugungseffizienzen

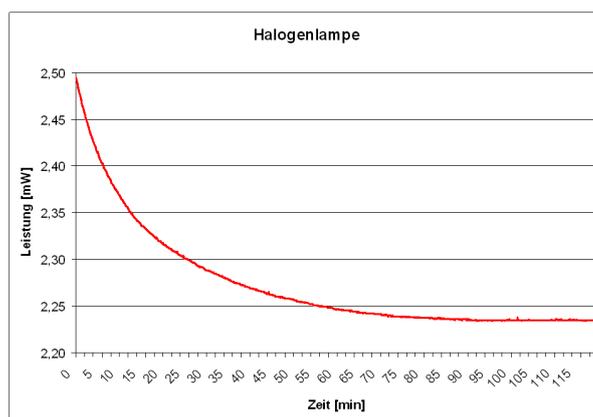


Abbildung 5.5: Zeitliche Stabilität der verwendeten Lichtquelle

notwendig. Als Referenz dient eine Messung der Intensität ohne das zu charakterisierende Beugungsgitter:

$$\eta = \frac{I_{\text{Gitter}}}{I_0}$$

Dabei muss I nicht der absolute Intensitätswert sein, sondern könnte auch der Strom eines Fotodetektors oder der Grauwert einer CCD-Kamera sein. Allerdings setzt dies voraus, dass der verwendete Detektor linear bezüglich der eingestrahlten Intensität ist.

Für die elektromagnetische Berechnung der Beugungseffizienzen nehmen wir ein unendlich ausgedehntes Substrat an (vgl. Abschnitt 2.1.4.3). In Realität ist das Substrat aber nur einige Millimeter dick, so dass die Fresnelreflexe am Substrat bei der Berechnung der Beugungseffizienz berücksichtigt werden müssen. Da das Substrat in der Regel deutlich dicker ist als die Kohärenzlänge der verwendeten Lichtquelle ist keine kohärente Überlagerung von Mehrfachreflexen zu erwarten.

5.1.4.2 Messung von höheren Beugungsordnungen

Als Erweiterung des Messaufbaus wurde der Aufbau für die Messung der höheren Beugungsordnungen (vgl. Abb. 5.3) umgesetzt. Zusammen mit Merit Jansen wurde der Aufbau - im Rahmen ihrer Masterarbeit „Calibration of DOEs using higher diffraction orders“ an der Hochschule München - realisiert. Für die Messung sollen die Beugungsordnungen mit Hilfe einer Linse auf eine CCD-Kamera abgebildet werden. Da möglichst hohe Beugungswinkel aufgefangen werden sollen wurde ein 40x Mikroskopobjektiv mit einer numerischen Apertur von 0.65 verwendet. Damit können dann Beugungswinkel von bis zu 40° gemessen werden.

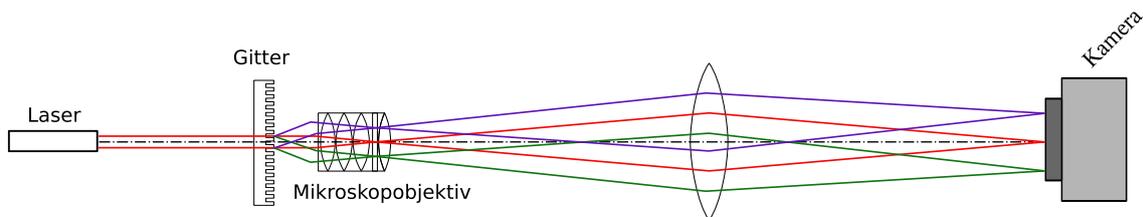


Abbildung 5.6: Schematischer Aufbau zur Messung der höheren Beugungsordnungen mit Hilfe eines Mikroskop-Objektivs

Abbildung 5.6 zeigt den Strahlengang des Versuchsaufbaus. Da die Fourier-Ebene des Mikroskopobjektiv im Inneren des Objektivs liegt und somit nicht zugänglich ist, muss eine zusätzliche Linse verwendet werden, um die Ebene auf die Kamera abzubilden. In der Fourier-Ebene wird jede Richtung (also die einzelnen Beugungsordnungen) idealerweise zu einem Ort, man spricht daher auch vom Winkelraum des Systems, da hier die verschiedenen Ausbreitungsrichtungen räumlich getrennt werden.

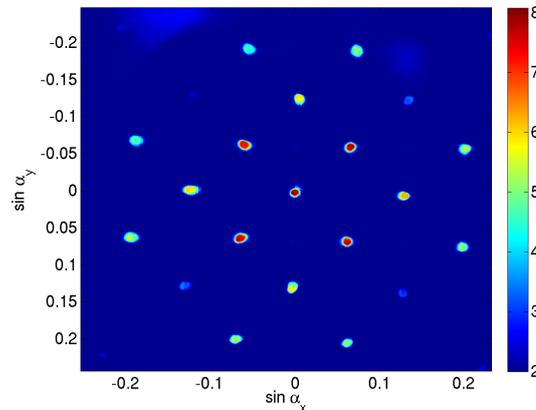


Abbildung 5.7: Beugungsspektrum eines zweidimensionalen Gitters (logarithmische Darstellung)

Insbesondere bei zweidimensionalen Gittern können mit diesem Aufbau viele Beugungsordnungen parallel gemessen werden. Abbildung 5.7 zeigt das Beugungsspektrum eines Säulengitters ($P_x = P_y = 4 \mu m$, $\lambda = 515 nm$). Die Farbskala stellt die gemessenen Kameracounts und damit die Intensität der Beugungsordnungen dar.

Messgenauigkeit des Aufbaus

Bei der Realisierung des Messaufbaus traten einige Schwierigkeiten auf, die zu Fehlern bei der Messung der höheren Beugungsordnungen führten. Abbildung 5.8 zeigt die 0. und ± 1 . Beugungsordnung eines binären Phasengitters. Da das Gitterprofil symmetrisch ist, sollten die beiden ersten Beugungsordnungen gleich sein - allerdings traten hier recht große Abweichungen von ca. 2 Prozentpunkten der Beugungseffizienz auf. Die Messung der 0. Beugungsordnung wurde mit Messungen des anderen Messaufbaus (s.o.) verglichen. Auch hier gab es signifikante Abweichungen in der Beugungseffizienz.

Als schwierig stellte sich die Justage des Messaufbaus und die Positionierung des verwendeten Mikroskopobjektivs heraus. Um möglichst große Beugungswinkel aufzufangen wird ein Objektiv mit möglichst großer numerischer Apertur benötigt. Diese besitzen aber in der Regel nur ein sehr kleines Objektfeld von einigen Hundert Mikrometern. Wird das Feld überstrahlt, werden die Beugungsordnungen möglicherweise im Objektiv beschnitten, was dann zu Messfehlern führt. Ein leicht dezentriertes Objektiv führt dann zu einem asymmetrischen Beschnitt der Ordnungen was die Abweichungen zwischen -1. und +1. Beugungsordnung erklären könnte.

Ein weiteres Problem ist die Transmission des Objektivs und des gesamten optischen Systems. Da die höheren Beugungsordnungen unter einem sehr großen Winkel auf das

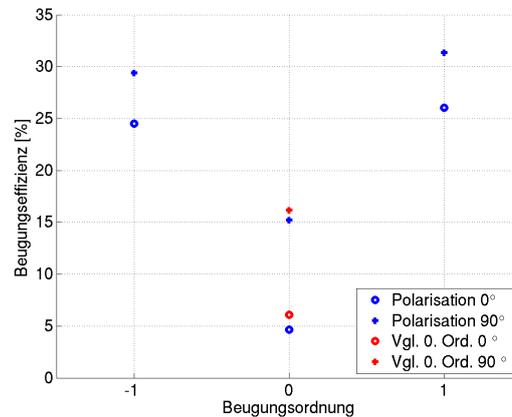


Abbildung 5.8: Ergebnis der Messung von höheren Beugungsordnungen

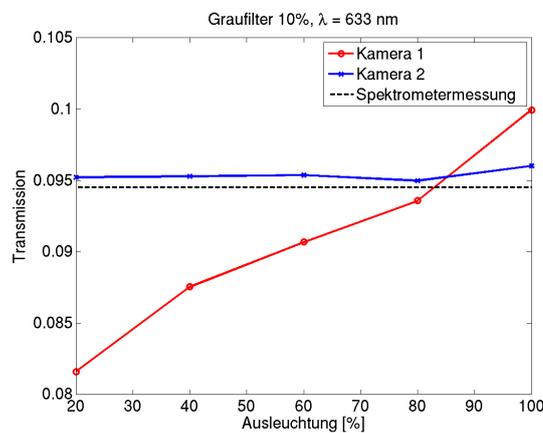


Abbildung 5.9: Linearität für zwei verschiedene CCD-Kameras

Objektiv treffen, ist die Transmission dieser Ordnungen niedriger. Um eine Absolutmessung der Beugungseffizienzen durchzuführen müsste daher das gesamte System hinsichtlich der Transmission unter verschiedenen Einfallswinkeln kalibriert werden.

Wie in Abbildung 5.7 deutlich zu erkennen ist, wird außer den Beugungsordnungen des Gitters auch noch Störlicht aufgefangen, das zu einer Untergrundhelligkeit führt. Da zur Bestimmung der Beugungseffizienz ein bestimmter Bereich des CCD-Chips integral betrachtet wird, führt dies zu einer fehlerhaften Berechnung der Beugungseffizienz. Weitere Probleme sind die Linearität des Kamerachips und Ausleseeffekte, wie z.B. Smear, die zu Messfehlern führen können.

Für den Versuchsaufbau wurden zwei verschiedene CCD-Kameras hinsichtlich ihrer Linearität untersucht. Abbildung 5.9 zeigt die Transmission eines Graufilters über der relativen Ausleuchtung der Kameras. Die ermittelte Filtertransmission wurde mit der an einem geeichten Spektrometer gemessenen Transmission verglichen. Die Kamera 1 zeigt

ein deutlich nichtlineares Verhalten, wohingegen die Kamera 2 eine konstante Transmission unabhängig von der jeweiligen Ausleuchtung liefert. Für die Messungen wurde daher die zweite Kamera verwendet.

Der Messaufbau zur Messung der höheren Beugungsordnungen bietet den Vorteil viele Beugungsordnungen gleichzeitig zu messen. So könnten möglicherweise alle Beugungseffizienzen, die für die Bestimmung der Gitterparameter notwendig sind mit nur einer Messung bestimmt werden. Bei der Realisierung des Aufbaus hat sich aber gezeigt, dass insbesondere durch die Verwendung des Mikroskopobjektivs die Justage des Aufbaus sehr schwierig ist. Eine Lösung könnte ein anderes Objektiv sein, das eine sehr große numerische Apertur und ein großes Feld besitzt. Außerdem müssten die verwendeten Komponenten - insbesondere der Detektor - zur genauen Messung der Beugungseffizienzen eingehend charakterisiert werden.

Für die Rekonstruktion der Gitterparameter aus den Beugungseffizienzen des Gitters müssen die Beugungseffizienzen des Gitters absolut genau bestimmt werden. Die experimentellen Untersuchungen haben gezeigt, dass dies hohe Anforderungen an den Messaufbau und die verwendeten Komponenten stellt. Insbesondere beim Messaufbau zur Bestimmung der höheren Beugungsordnungen, der in diesem Abschnitt beschrieben wurde, hat sich gezeigt, welche Probleme bei der Messung auftreten können und wie schwierig die Justage der einzelnen Komponenten ist. Zur genauen Messung der absoluten Beugungseffizienzen müssten beide hier untersuchten Aufbauten weiter verbessert und auf ihre Messgenauigkeit hin untersucht werden. Allerdings sollen die hier durchgeführten experimentellen Untersuchungen nur zur Demonstration des Prinzips des untersuchten Verfahrens zur Gitterrekonstruktion dienen, daher ist hier die erreichte Genauigkeit ausreichend. Für die Bestimmung der Gitterparameter am Ende dieses Kapitels wurde der Aufbau zur Messung der 0. Beugungsordnung verwendet, da die Justage des anderen Aufbaus zu fehleranfällig war.

5.2 Numerische Simulationen zur Auswirkung von Messfehlern

Im letzten Kapitel wurde gezeigt, wie sich die Gitterparameter aus den Beugungseffizienzen rekonstruieren lassen. Bis jetzt wurden allerdings nur synthetische Daten betrachtet. Nun betrachten wir gemessene Beugungseffizienzen, die mit Sicherheit fehlerbehaftet sind. Die Untersuchungen am experimentellen Aufbau haben gezeigt, dass es verschiedene Ursachen für Messfehler gibt. Es soll daher untersucht werden, wie sich diese Messfehler auf die Rekonstruktion der Gitterparameter auswirken, um die Genauigkeit des Verfahrens zu untersuchen. Eine interessante Untersuchung zur Messgenauigkeit in der Scatterometrie wurde auch von Alassaad und Byrne [136] durchgeführt. Durch die Linearisierung des Problems wurde ein Modell für die Rekonstruktionsfehler entwickelt. Ist bekannt, dass alle Messwerte fehlerbehaftet sind (z.B. durch Messrauschen), kann der Messfehler bei der Rekonstruktion der Gitterparameter berücksichtigt werden.

5.2.1 Statistische Messfehler

Für die Untersuchung der Messgenauigkeit wird zunächst ein bekanntes Gitter betrachtet. Die rigoros berechneten Beugungseffizienzen werden dann mit einem „Messfehler“ behaftet. Anschließend werden aus den gestörten Effizienzen die Gitterparameter ermittelt und mit den ursprünglichen Parametern verglichen (s. Abb. 5.10).

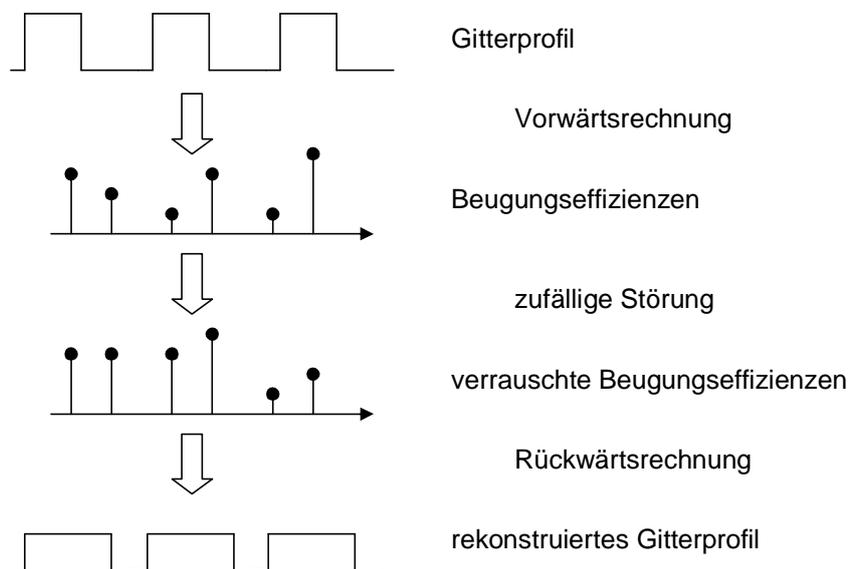


Abbildung 5.10: Untersuchung der Messgenauigkeit

Eindimensionale Gitter

Es werden zwei verschiedene Messkonfigurationen untersucht - die Messung der 0. transmittierten Beugungsordnung (entsprechend Abbildung 5.1) und die Messung der 0. reflektierten Beugungsordnung (entsprechend Abbildung 5.2). Exemplarisch wird ein binäres Phasengitter mit Periode $2.5\ \mu\text{m}$ betrachtet, der Füllfaktor des Gitters beträgt 0.45, die Gitterhöhe 710 nm. Wir betrachten die Beugungseffizienz bei 8 verschiedenen Wellenlängen (zwischen 450 und 750 nm), jeweils für die s- und die p-Polarisation.

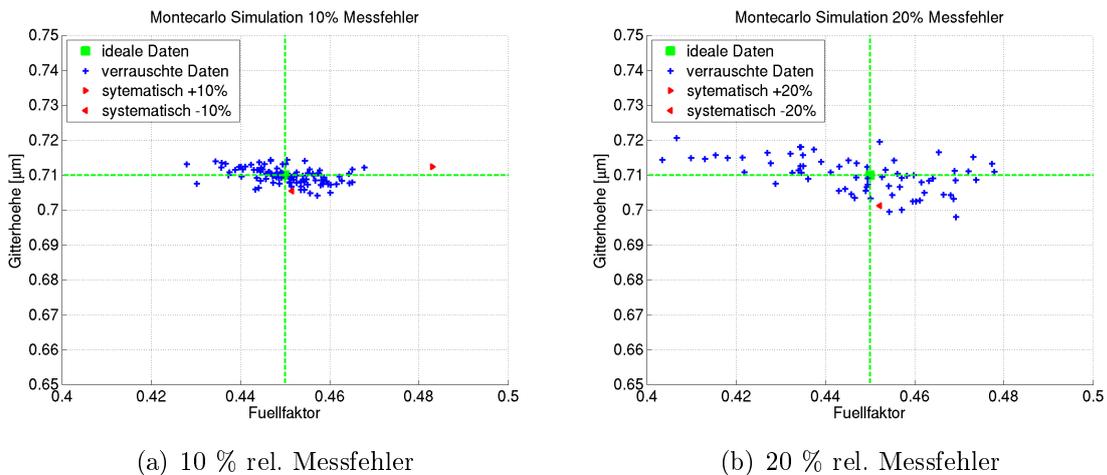


Abbildung 5.11: Simulation von Messfehlern: Messung der 0. transmittierten Ordnung

Abbildung 5.11 zeigt das Ergebnis der Montecarlo-Simulation für die Messkonfiguration in Transmission. Es wurden 100 Sätze von Beugungseffizienzen betrachtet und die einzelnen Messgrößen jeweils mit einem zufälligen Messfehler (gleichverteilt) zwischen -10 % und +10 % (a) bzw. -20 % und +20 % (b) skaliert. Die blauen Kreuze markieren den jeweils dazu rekonstruierten Parametersatz, die Parameter wurden mit dem iterativen Rekonstruktionsverfahren bestimmt. Außerdem wurde jeweils ein systematischer Fehler aller Messdaten von 10 % bzw. 20 % betrachtet.

Abbildung 5.12 zeigt das Ergebnis für die Messung der reflektierten Beugungseffizienzen. Vergleicht man die Ergebnisse, so fällt auf, dass die Streuung bei der Reflexionsmessung deutlich geringer ist als bei der Transmissionsmessung. Insbesondere die Streuung beim Füllfaktor ist nicht so groß. Die rekonstruierten Parameter der mit einem systematischen Fehler behafteten Daten liegen bei den Reflexionsmessungen im Bereich der anderen rekonstruierten Parameter. Bei den Transmissionsmessungen weichen die Parameter der mit einem Fehler von +10% behafteten Daten stark vom idealen Profil ab. Die Reflexionsmessung ist also insensitive gegenüber systematischen und statistischen Messfehlern.

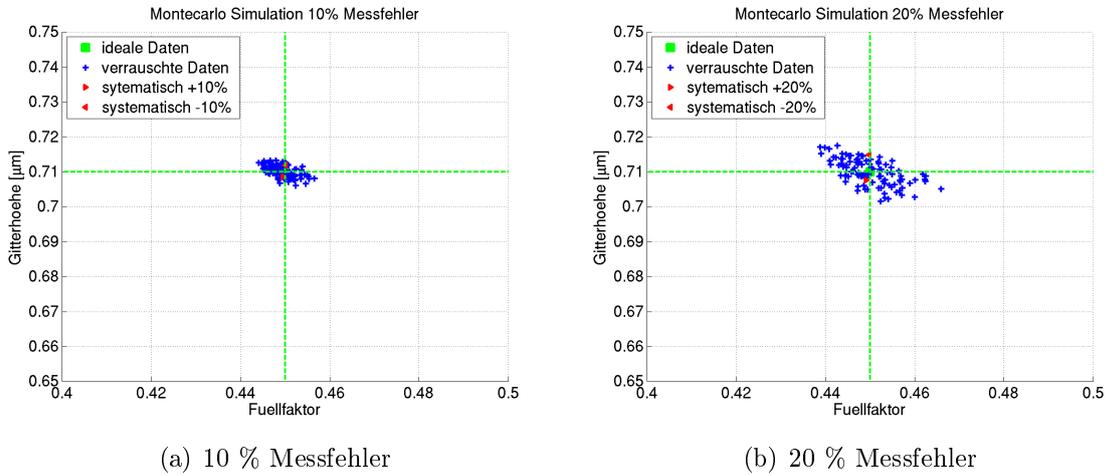


Abbildung 5.12: Simulation von Messfehlern: Messung der 0. reflektierten Ordnung

	Mittelwert Steghöhe (Sollwert 710 nm)	PV Steghöhe	Standardabweichung Steghöhe	Mittelwert Füllfaktor (Sollwert 0.45)	PV Füllfaktor	Standardabweichung Füllfaktor
Transmission 10%	709.9 nm	10.3 nm	2.30 nm	0.450	15.92 ‰P	3.18 ‰P
Transmission 20%	710.1 nm	22.53 nm	5.04 nm	0.447	29.75 ‰P	7.10 ‰P
Reflexion 10%	710.1 nm	7.2 nm	1.68 nm	0.449	4.99 ‰P	1.06 ‰P
Reflexion 20%	709.9 nm	16.02 nm	3.71 nm	0.451	10.81 ‰P	2.31 ‰P

Tabelle 5.1: Ergebnis der Montecarlo-Simulation

In Tabelle 5.1 sind die Ergebnisse gegenüber gestellt. Betrachtet man die Standardabweichung oder die PV-Werte der rekonstruierten Parameter, so hängen diese in etwa linear vom Messfehler ab. Zwischen 10 % und 20 % Messfehler verdoppeln sich die Werte ungefähr. Vergleicht man Transmissions- und Reflexionsmessungen, so sind die Abweichungen bei der Reflexion etwa einen Faktor drei besser beim Tastverhältnis und bei der Gitterhöhe etwa Faktor 1,4. Allerdings muss man beachten, dass die reflektierten Effizienzen in der Regel geringer sind als die transmittierten (siehe z.B. Abb. 2.32). Es ist also schwieriger die reflektierten Effizienzen mit der selben Genauigkeit zu messen, als die transmittierten. Auf der anderen Seite lässt sich beispielsweise die Gitterhöhe trotz des recht großen Messfehlers von 10 % auf 10 nm genau bestimmen.

Zweidimensionale Gitter

Beispielhaft betrachten wir nun die Rekonstruktion eines BLACE-Gitters (siehe Abschnitt 2.2.6.2). Es werden zwei Gitterparameter betrachtet, zum einen die Gitterhöhe und zum anderen ein so genannter Proximity Fehler. Dies ist eine Verbreiterung (oder Verschmälerung) der kompletten Struktur in x- und y-Richtung, die durch den Herstellungsprozess entstehen kann. Sowohl bei der Belichtung, als auch bei der Entwicklung (vgl. 5.3.1.1) kann solch ein Fehler auftreten.

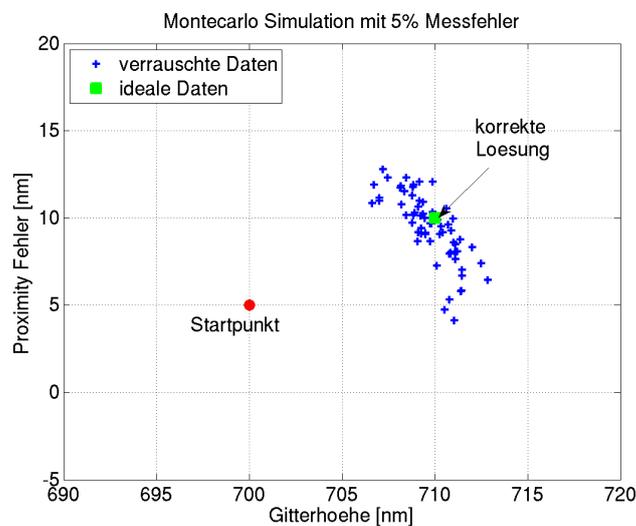


Abbildung 5.13: Rekonstruktionsfehler des zweidimensionalen BLACE-Gitters

In Abbildung 5.13 ist der Rekonstruktionsfehler für die beiden Parameter für einen statistischen Messfehler von 5 % dargestellt. Wie oben wurden die Effizienzen des Gitters (markiert durch ein grünes Quadrat im Diagramm) berechnet und anschließend mit einem zufälligen Messfehler behaftet. Die rekonstruierten Gitterparameter weichen nur wenig von der korrekten Lösung ab und streuen um diesen Wert. Die Gitterparameter

können also auch bei verrauschten Daten mit einer Genauigkeit von wenigen Nanometern bestimmt werden.

5.2.2 Spektrum der Lichtquelle

Im vorigen Abschnitt wurde der Einfluss des gesamten Messrauschens betrachtet. Es gibt allerdings auch andere Ursachen als rein stochastisches Rauschen, z.B. besitzt jede Lichtquelle eine endliche spektrale Breite. Dies führt unter Umständen zu Fehlern, wenn wir in der Simulation von einer monochromatischen Beleuchtung ausgehen oder das Spektrum der Lichtquelle nicht richtig modellieren.

5.2.2.1 Spektrale Breite

Viele schmalbandige Lichtquellen besitzen ein annähernd gaußförmiges Spektrum, das meistens durch die spektrale Halbwertsbreite beschrieben wird. Es wurde untersucht, welchen Einfluss eine bestimmte spektrale Breite der Lichtquelle auf die Beugungseffizienz des Gitters hat. Dazu wurde die Effizienz des Gitters bei der Schwerpunktswellenlänge berechnet und dann mit der Effizienz des Gitters unter Berücksichtigung des Spektrums der Lichtquelle verglichen. Hierzu wurde das Spektrum abgetastet und die Effizienz des Gitters bei der jeweiligen Wellenlänge berechnet, mit dem Spektrum gewichtet und aufsummiert.

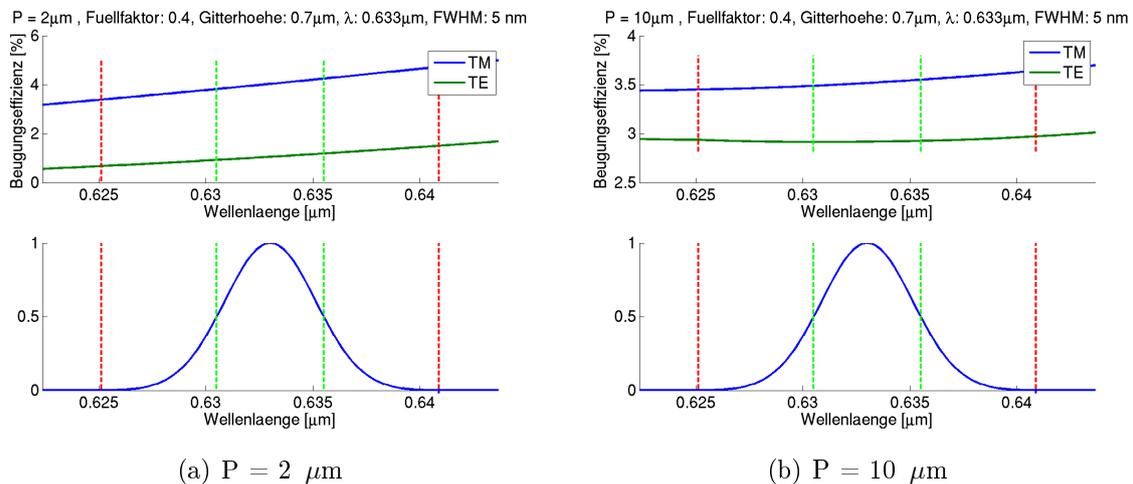


Abbildung 5.14: Simulierte spektrale Verteilung (unten) und Effizienz über der Wellenlänge (oben)

Abbildung 5.14 zeigt eine gaußförmige spektrale Verteilung mit einer Halbwertsbreite von 5 nm. Die grünen Linien markieren die Halbwertsbreite, die betrachtete Schwerpunktswellenlänge liegt bei $0.633 \mu\text{m}$. Darüber ist die Beugungseffizienz eines binären Phasengitters über der Wellenlänge aufgetragen. Exemplarisch betrachten wir zwei Quarzgitter (Brechungsindex 1.457), jeweils mit Gitterhöhe $0.7 \mu\text{m}$ und Füllfaktor 0.4, die Gitterperiode beträgt $2 \mu\text{m}$ (links) bzw. $10 \mu\text{m}$ (rechts). Die Beugungseffizienz des Gitters mit Periode $2 \mu\text{m}$ ist im betrachteten Bereich über der Wellenlänge nahezu linear, so dass zwischen der Effizienz bei der Schwerpunktswellenlänge und der Effizienz unter Berücksichtigung der spektralen Breite nur geringe Abweichungen zu erwarten sind. Das gröbere Gitter zeigt eine deutlich nichtlinearere Beugungseffizienz, so dass hier vermutlich größere Fehler auftreten.

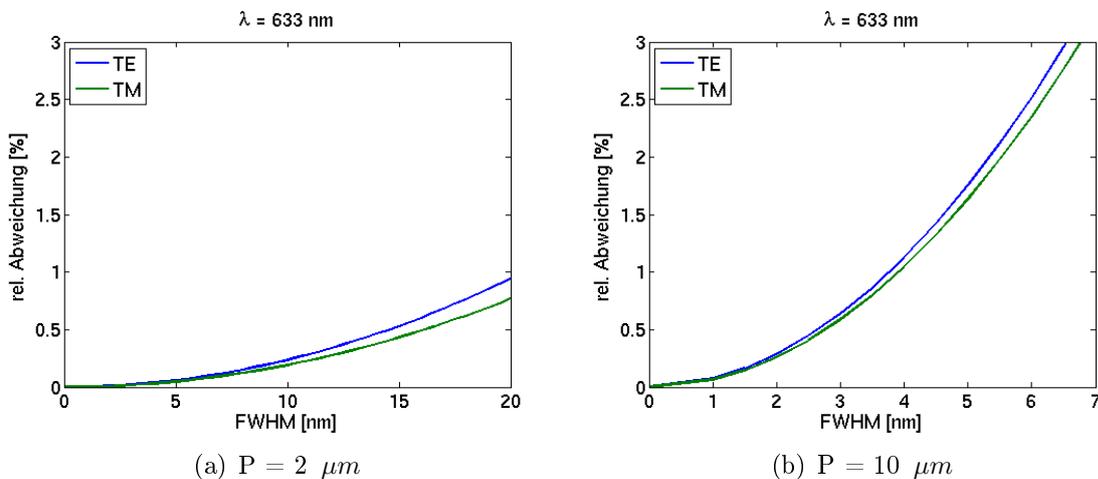


Abbildung 5.15: Einfluss der spektralen Breite auf die Beugungseffizienz

In Abbildung 5.15 sind die Fehler durch eine Nichtberücksichtigung der spektralen Breite für die beiden betrachteten Gitter aufgetragen. Wie erwartet sind die Abweichungen für das Gitter mit Periode $2 \mu\text{m}$ geringer als beim Gitter mit $10 \mu\text{m}$ Periode. So führt eine spektrale Breite von 5 nm für das feine Gitter nur zu einer Abweichung von ca. 0.05 %, wohingegen beim größeren Gittern die Abweichung 0.4 % beträgt.

5.2.2.2 Verschiebung der Wellenlänge

Außer der endlichen spektralen Breite kann auch eine Verschiebung der Schwerpunktswellenlänge zu Fehlern führen. Insbesondere bei Verwendung von Farbfiltern ist die genaue Zentralwellenlänge des Filters oft nicht genau bekannt. Außerdem führt eine Verkipfung eines Interferenzfilters auch zu einer Änderung der Filterwellenlänge, siehe z.B.

in Naumann/Schröder [142]. Für kleine Winkel gilt die Näherung:

$$\lambda(\vartheta) = \lambda_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \vartheta}{n_{eff}^2}}$$

Dabei ist ϑ der Kippwinkel (bzw. der Einfallswinkel bei schrägem Einfall), λ_0 die Zentralwellenlänge des Filters und n_{eff} die effektive Brechzahl. Die effektive Brechzahl liegt für gängige Filtermaterialien im Bereich 1.4 – 2.1. Für den im Experimentalaufbau verwendeten Filter mit Zentralwellenlänge 633nm beträgt die effektive Brechzahl 2.05 - somit führt ein Verkippung des Filters um 2° bereits zu einer Verschiebung um -0.2nm .

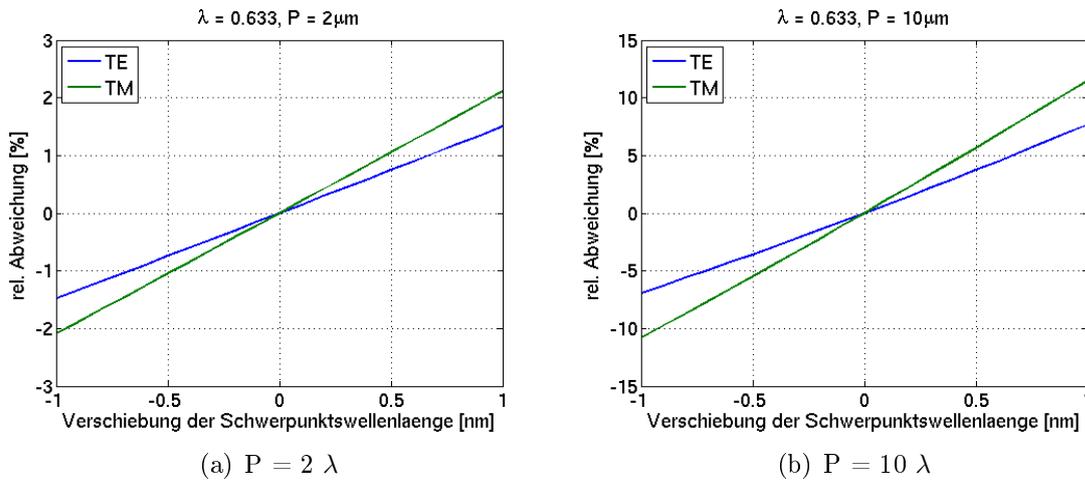


Abbildung 5.16: Verschiebung der Schwerpunktwellenlänge gegen relative Abweichung

Abbildung 5.16 zeigt den relativen Fehler der Beugungseffizienz über der Verschiebung der Wellenlänge für die zwei betrachteten Gitter. Wie erwartet erhält man für ein solch kleines Wellenlängenintervall eine näherungsweise lineare Abhängigkeit. Auffällig ist, dass auch hier die Abweichungen für das Gitter mit Periode $10\mu\text{m}$ größer sind. Dies liegt aber daran, dass hier der relative Fehler dargestellt ist - also bezogen auf die Effizienz des Gitters. Da die Beugungseffizienz des Gitters mit $P = 10\mu\text{m}$ geringer ist, ist auch der relative Fehler größer. Betrachtet man hingegen die absolute Abweichung der Beugungseffizienz ergibt sich ein genau umgekehrtes Verhalten.

Für die Abweichungen, die durch die spektrale Breite und die Verschiebung der Wellenlänge verursacht ist natürlich die Steigung der Effizienzkurve über der Wellenlänge entscheidend. Diese hängt stark vom jeweiligen Gitter (insbesondere von Gitterhöhe und Füllfaktor) ab, so dass die entsprechenden Abweichungen für die jeweilige Anwendung genauer analysiert werden müssen.

5.2.3 Weitere Fehlerursachen

Außer den oben betrachteten Fehlern gibt es bei der Messung der Beugungseffizienz noch weitere Fehlerquellen, die zu Messfehlern führen können. Wie bei der Beschreibung des Messaufbaus bereits angedeutet wurde, ist die Linearität des Detektors entscheidend für die Genauigkeit der Beugungseffizienzmessung. Bestimmt man die Beugungseffizienz als Verhältnis der gebeugten Intensität und einer Referenzintensität ohne Gitter, so ist, insbesondere bei der Messung der 0. Beugungsordnung, die Intensität der Referenz oft deutlich höher als die Intensität der Beugungsordnung. Es wird also ein linearer Detektor mit einem sehr großen Dynamikumfang benötigt. Schwierig ist auch die Bestimmung der Linearität, da hierfür das Detektorsignal über der eingestrahlten Intensität gemessen werden müsste und die eingestrahlte Intensität wiederum genau gemessen werden müsste. In Abschnitt 5.1.4.2 wurde die Linearitätskurve für verschiedene Belichtungszeiten und eine konstante Intensität bestimmt. Es wird dann aber vorausgesetzt, dass der Detektor linear gegenüber der Belichtungszeit ist. Bei der Verwendung einer Kamera als Detektor müssen weitere Effekte berücksichtigt werden - hier muss gewährleistet sein, dass sich alle Pixel des Chips gleich verhalten. Außerdem treten hier unter Umständen weitere Effekte, wie z.B. Smear auf, die zu Fehlern führen können.

Exemplarisch wurde oben der Einfluss des Lichtquellenspektrums auf die Messung der Beugungseffizienz untersucht. Um eine möglichst genaue Messung durchzuführen, müssen entsprechend auch die anderen Komponenten des Versuchsaufbaus betrachtet werden. Da die Beugungseffizienz polarisiert gemessen wird und insbesondere Polarisationseffekte bei der Rekonstruktion interessant sind, müssen alle Komponenten hinsichtlich ihrer Polarisations-eigenschaften untersucht werden. Bei der Rekonstruktion gehen wir davon aus, dass das Licht vollständig linear polarisiert ist - dies ist in der Realität sicher nicht immer der Fall und muss daher untersucht und bei der Rekonstruktion berücksichtigt werden.

Bei der Messung der höheren Beugungsordnungen werden die einzelnen Ordnungen auf einen flächigen Detektor abgebildet. Dort wird im Idealfall die Intensität einer einzelnen Beugungsordnungen auf einen Punkt konzentriert. In der Realität ergibt sich allerdings eine räumlich ausgedehnte Intensitätsverteilung. Dies liegt zum einen an den realen Abbildungseigenschaften des optischen Systems und zum anderen an nichtperiodischen Fehlern des Gitters. Diese führen dann zu einer Untergrundintensität auf dem Detektor. Zur Bestimmung der Beugungseffizienz der einzelnen Ordnungen muss ein bestimmter Bereich auf dem Detektor integriert werden. Die Größe des gewählten Bereichs beeinflusst unter Umständen die ermittelte Intensität, so dass genauer analysiert werden muss, wie groß der zu integrierende Bereich idealerweise gewählt werden muss. Die experimentellen Untersuchungen haben zudem gezeigt, dass es zur Messung der Effizienzen sogar besser ist, wenn die Kamera leicht defokussiert wird. Dann verteilt sich die Intensität auf der Kamera auf mehr Pixel, was dann Kamerafehler verringert.

5.3 Rekonstruktion von 1D-Gittern

Mit Hilfe des oben gezeigten experimentellen Aufbaus wurden die Beugungseffizienzen verschiedener Gitter gemessen und daraus die Gitterparameter bestimmt. Exemplarisch seien hier die Messungen einiger eindimensionaler Beugungsgitter, sowie die Rekonstruktion der Gitterparameter gezeigt. Es wurden verschiedene binäre Phasengitter untersucht und versucht die rekonstruierten Parameter mit anderen Messverfahren zu vergleichen. Die Bestimmung der Gitterparameter wurde mit dem oben beschriebenen iterativen Verfahren durchgeführt (siehe Abschnitt 4.2.4).

5.3.1 Eindimensionale Fotolackgitter

Zunächst sollen Binärgitter aus Fotolack untersucht werden. Sie dienen meist als Vorstufe für das eigentliche Gitter. Da sie recht einfach hergestellt werden können, sollen im Folgenden zunächst solche Strukturen untersucht werden.

5.3.1.1 Herstellung

Die verwendeten Gitter wurden mit Hilfe einer Laserlithographieanlage¹ hergestellt. Als Ausgangspunkt dient ein gereinigtes Glassubstrat. Auf dieses wird anschließend eine dünne Schicht Fotolack aufgetragen². Der Fotolack kann durch UV-Licht strukturiert werden und ändert dabei seine chemische Zusammensetzung. Anschließend kann der belichtete Teil des Lacks in einem Entwicklerbad entfernt werden. Der schematische Ablauf des Herstellungsprozesses ist in Abbildung 5.17 dargestellt. Für die hier verwendeten Gitter wurden nur die Schritte 1-4 durchgeführt, so dass ein Gitter aus Fotoresist auf einem Glassubstrat entstand. Eine ausführlichere Beschreibung des Verfahrens findet sich z.B. bei O'Shea [57].

5.3.1.2 Messergebnisse

Zur Rekonstruktion der Gitterparameter wurde jeweils die Beugungseffizienz der 0. transmittierten Ordnung der Gitter bei 8 verschiedenen Wellenlängen und zwei Polarisationsrichtungen gemessen. Aus den gemessenen Beugungseffizienzen wurden die Gitterhöhe, der Füllfaktor und der Flankenwinkel bestimmt. Tabelle 5.2 zeigt die rekonstruierten Gitterparameter. Zum Vergleich wurde der Füllfaktor des Gitters mit dem Mikroskop bestimmt und mit dem rekonstruierten Wert verglichen.

¹Heidelberg Instruments DWL 2.0

²Verwendeter Fotolack: Rohm+Haas Microposit S1805

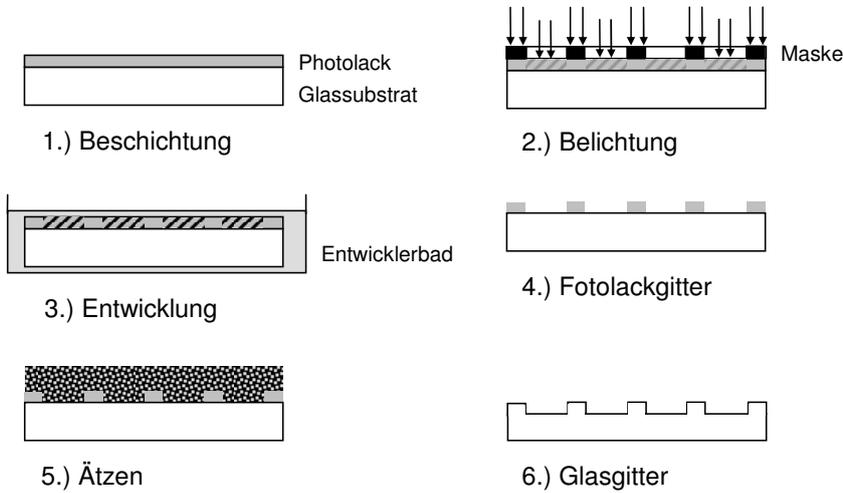


Abbildung 5.17: Lithographische Herstellung der Beugungsgitter

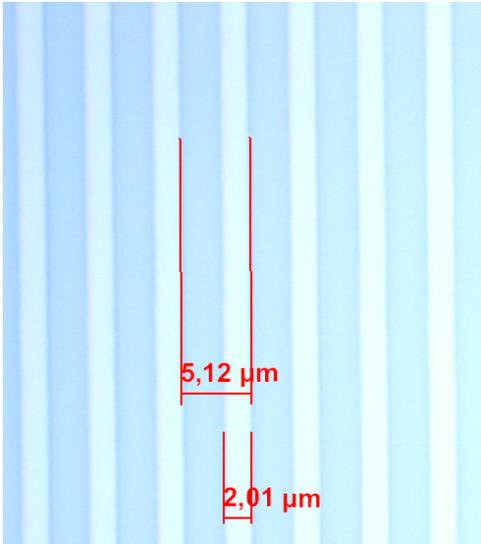


Abbildung 5.18: Mikroskopische Messung des Füllfaktors

Bei dem Gitter mit Periode $5\ \mu\text{m}$ stimmen der rekonstruierte Wert und der mikroskopisch gemessene (siehe Abb. 5.18) gut überein. Bei den anderen beiden Gittern mit $10\ \mu\text{m}$ bzw. $3,33\ \mu\text{m}$ Periode gibt es größere Abweichungen. Die Dicke der Lackschicht wurde an einer Stelle des Substrats mit im Interferenzkontrast-Modus des Mikroskops (TIC) bestimmt, die gemessene Dicke betrug ca. 450 nm. Da das Messverfahren ohne Kalibration nicht sehr genau ist und die Dicke der Lackschicht auf dem Substrat nicht homogen ist, dient dieser Wert nur als Konsistenzvergleich der ermittelten Gitterhöhen. Die Schichtdicke des Fotolacks soll laut Datenblatt [143] für den verwendeten Herstellungsprozess etwa 500 nm betragen, so dass die ermittelten Werte auch hierzu gut passen.

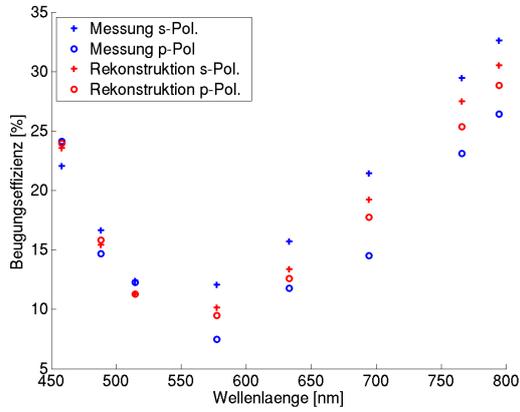
Abbildung 5.19 zeigt die Ergebnisse der Rekonstruktion. Auf der linken Seite sind jeweils die gemessenen Beugungseffizienzen (blau) und die berechneten Beugungseffizienzen der rekonstruierten Gitter (rot) gezeigt. Insbesondere beim ersten Gitter ($P = 10\ \mu\text{m}$) passen die berechneten Werte nicht gut zu den gemessenen, so dass hier die Rekonstruktion nicht ideal funktioniert hat. Auf der rechten Seite wurde die Potentiallandschaft für die gemessenen Effizienzen berechnet und über einem zweidimensionalen Parameterraum aufgetragen (Gitterhöhe und Füllfaktor). Die Potentiallandschaft visualisiert die quadratische Abweichung der gemessenen Effizienzen zu den berechneten Effizienzen an jedem Punkt des Parameterraums. Die einzelnen Messwerte liefern jeweils eine Höhenlinie (weiße Kurve), die idealerweise einen gemeinsamen Schnittpunkt besitzen sollten. Da die Gitter eine relativ große Periode besitzen ist hier deutlich die Mehrdeutigkeit im Tastverhältnis zu erkennen (vgl. Abschnitt 4.2.6), die zu zwei lokalen Minima in der Potentiallandschaft führt. An den Höhenlinien ist ebenfalls zu erkennen, dass es keinen gemeinsamen Schnittpunkt aller Linien und somit keine exakte Lösung des inversen Problems gibt.

Periode [μm]	Füllfaktor	Gitterhöhe [nm]	Flanke- nwinkel	Mikroskop	Abweichung abs.	Abweichung [%]
10	0,34	436,3	18,7	0,43	0,09	20,3%
5	0,38	500,9	47,9	0,39	0,01	1,9%
3,33	0,43	520,0	25,8	0,36	-0,07	-19,8%

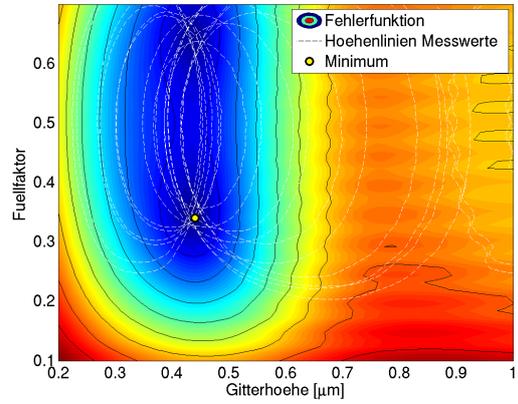
Tabelle 5.2: Rekonstruierte Gitterparameter Fotolackgitter

5.3.1.3 Interpretation der Ergebnisse

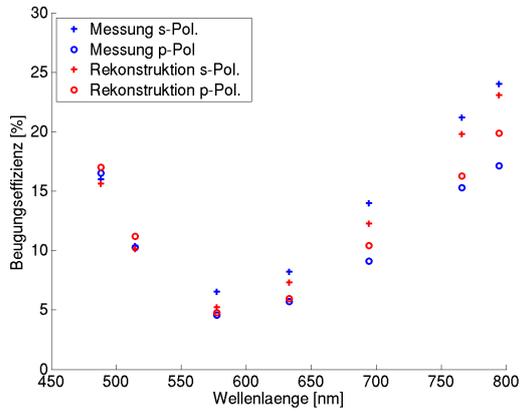
Die rekonstruierten Werte für den Füllfaktor weisen für das 1. und 3. Gitter große Abweichungen zu den am Mikroskop gemessenen Werten auf. Obwohl die Messgenauigkeit des Mikroskops nicht genau bekannt ist, scheint die Ursache für die Abweichungen bei der Rekonstruktion zu liegen. Die großen Abweichungen der gemessenen Effizienzen und der für die rekonstruierten Gitter berechneten deutet entweder auf Messfehler oder auf eine



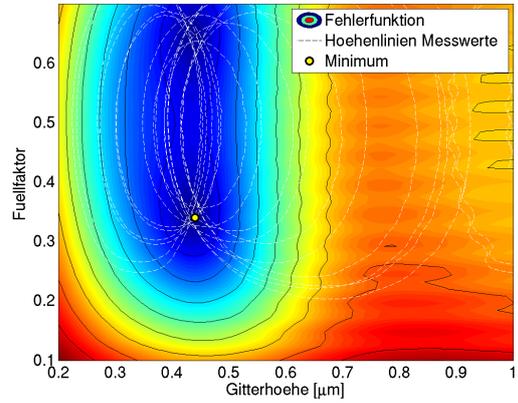
(a) $P = 10 \mu\text{m}$



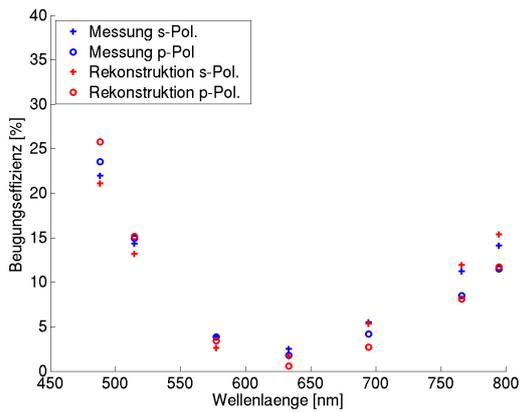
(b) $P = 10 \mu\text{m}$



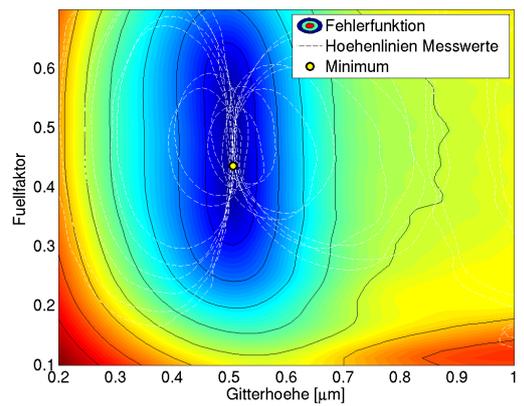
(c) $P = 5 \mu\text{m}$



(d) $P = 5 \mu\text{m}$



(e) $P = 3.33 \mu\text{m}$



(f) $P = 3.33 \mu\text{m}$

Abbildung 5.19: Ergebnis der Rekonstruktion

falsche (oder unzureichende) Modellierung des Gitters bei der Parameterbestimmung hin. Ein unbekannter Parameter bei der Modellierung des Gitters ist die Brechzahl des Fotolacks - sie ändert sich beim Belichten des Lacks und ist auch nicht genau bekannt. Zur Bestimmung der Parameter wurden die Werte aus dem Datenblatt eines ähnlichen Lacks verwendet [143], da keine anderen Werte verfügbar waren. Außerdem ist auffällig, dass der rekonstruierte Flankenwinkel der Gitter sehr groß ist - die Gitter sind also keine Binärgitter. Möglicherweise weisen die Gitter auch noch andere Herstellungsfehler, wie Verrundungen auf, die zu den Abweichungen bei den rekonstruierten Profilen führen könnten, da sie im Modell nicht berücksichtigt wurden. Die berechneten Potentiallandschaften zeigen alle ein sehr flaches Tal in Richtung der Füllfaktor-Achse. Kleine Messfehler führen hier also auch zu großen Abweichungen beim Tastverhältnis.

Auffällig sind auch die großen Polarisationsunterschiede der Beugungseffizienzen, die bei diesen Gitterperioden nicht zu erwarten sind. Bei einer genaueren Analyse der Messergebnisse wurde festgestellt, dass auch bei der Transmission durch das unbeschichtete und unstrukturierte Glassubstrat Polarisationsunterschiede von bis zu 0.5 % auftreten (Abb. 5.20). Der Effekt ist aber zu klein, um damit die Unterschiede in den Beugungseffizienzen zwischen s und p zu erklären. Da bei senkrechtem Einfall keine Polarisationsunterschiede durch die Fresnel-Reflexe zu erwarten sind, ist möglicherweise das verwendete Glassubstrat doppelbrechend. Dies führt dann ebenfalls zu Fehlern bei den rekonstruierten Gitterparametern, da für das Substrat eine homogene und isotrope Brechzahl angenommen wurde. Möglicherweise könnten auch hochfrequente Strukturen innerhalb der Gitterperiode für die Polarisationsaufspaltung verantwortlich sein.

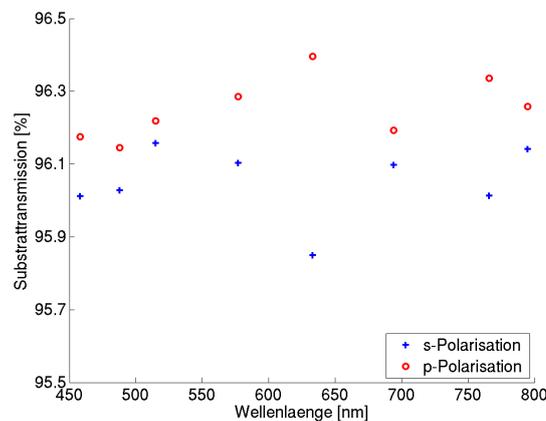


Abbildung 5.20: Polarisationsdifferenz in der Substrattransmission

5.3.2 Eindimensionale Quarzgitter

Nun sollen anstelle der Fotolackgitter Oberflächengitter in Quarz betrachtet werden. Hier sind die Materialeigenschaften besser bekannt als bei den Fotolackgittern, so dass eine bessere Rekonstruktion der Gitterparameter zu erwarten ist.

5.3.2.1 Herstellung

Die oben beschriebenen Gitter aus Fotolack können über einen Ätzprozess in das Glassubstrat übertragen werden. Es entsteht dann ein Oberflächengitter im Glas. Die hier verwendeten Gitter wurden durch reaktives Ionenätzen [144] in Quarzglas hergestellt. Der Herstellungsprozess wurde in Abschnitt 5.3.1.1 bereits beschrieben, hier wurden nun auch die letzten beiden Schritte durchgeführt.

5.3.2.2 Messergebnisse

Nun betrachten wir die Rekonstruktion der Gitterparameter aus den Beugungseffizienzen des Gitters. Abbildung 5.21 zeigt die gemessenen Beugungseffizienzen, es wurde jeweils die 0. transmittierte Ordnung bei 8 verschiedenen Wellenlängen und zwei Polarisationsrichtungen (s- und p-polarisiertes Licht) bestimmt. Anschließend wurden dann die Gitterhöhe, der Füllfaktor und der Flankenwinkel des Gitters bestimmt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.3 dargestellt.

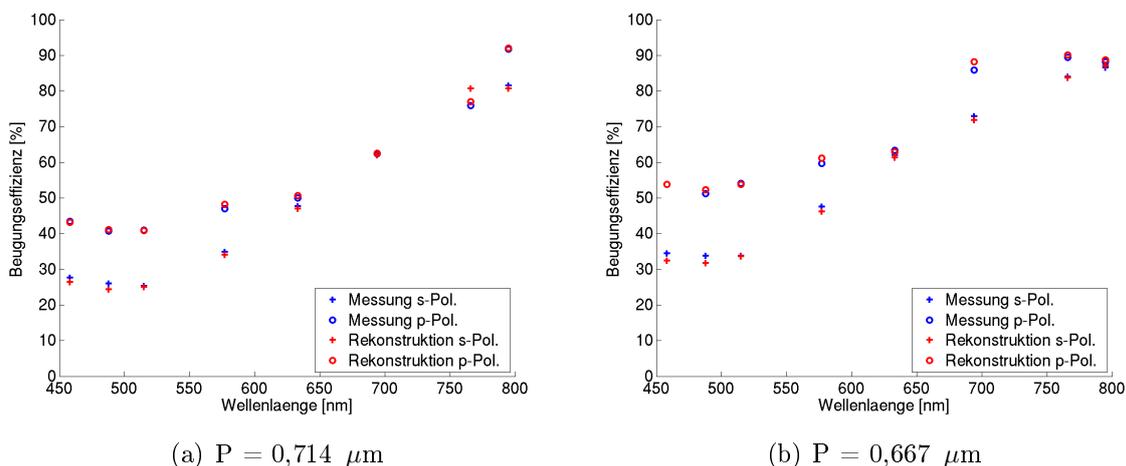


Abbildung 5.21: Gemessene Beugungseffizienzen der 0. Ordnung in Transmission

Gitterperiode	Gitterhöhe [nm]	Füllfaktor	Flankenwinkel [°]
0,714 μm	723,3	0,5233	1,75
0,667 μm	728,9	0,5087	3,9

Tabelle 5.3: Rekonstruierte Gitterparameter Quarzgitter

Der Füllfaktor des Gitters wurde außerdem mit einem Rasterkraftmikroskop bestimmt. In Tabelle 5.4 sind die rekonstruierten und die gemessenen Füllfaktorwerte gegenübergestellt. Die rekonstruierten Werte stimmen gut mit den am AFM gemessenen Werten überein. Die Abweichung liegt im Rahmen der Messgenauigkeit des verwendeten Rasterkraftmikroskops³.

Gitterperiode	Füllfaktor rekonstruiert	Füllfaktor AFM	Differenz [%]	Differenz [nm]
0,714 μm	0,5233	0,526	-0,51%	-3,67
0,667 μm	0,5087	0,525	-3,10%	-20,70

Tabelle 5.4: Vergleich AFM - Rekonstruktion: Füllfaktor

Das Gitter mit Periode 0,714 μm wurde auch in Reflexion vermessen. Die gemessenen Beugungseffizienzen sind in Abb. 5.22 dargestellt. Tabelle 5.5 stellt die aus den Transmissions- und Reflexionsmessungen ermittelten Parameter gegenüber. Auch hier sind die relativen Abweichungen bei der Gitterhöhe und dem Füllfaktor gering. Lediglich der ermittelte Flankenwinkel weicht um einige Grad ab.

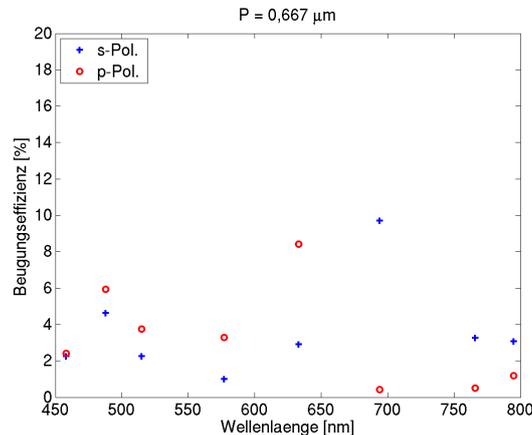


Abbildung 5.22: Gemessene Beugungseffizienzen der 0. reflektierten Ordnung

Eine mögliche Erklärung für die Abweichungen ist eine unterschiedliche Messposition auf dem Gitter. Eine exakte Positionierung des Gitters war bei den Messungen nicht

³Digital Instruments (Veeco) Dimension 5100

	Gitterhöhe [nm]	Füllfaktor	Flankenwinkel [°]
Transmissionsmessung	728,9	0,5087	3,9
Reflexionsmessung	722,7	0,4961	0,49
Differenz [%]	-0,85%	-2,48 %	
Differenz [nm]	-6,20	-16,51	

Tabelle 5.5: Vergleich Transmissions- und Reflexionsmessung

möglich, so dass die drei Messungen (Transmission, Reflexion und AFM) an verschiedenen Stellen des Gitters durchgeführt wurden. Da die Gitterparameter vermutlich lokal variieren, erklärt das die Abweichungen der drei verschiedenen Messungen. Wie bereits in 4.2.6 gezeigt, wirkt sich ein kleiner Flankenwinkel kaum auf die Bestimmung der anderen Gitterparameter aus. Andererseits heißt dies aber auch, dass der Flankenwinkel nicht genau bestimmt werden kann, da die Messgrößen nicht sehr sensitiv sind. Zudem sind die gemessenen Beugungseffizienzen noch mit Messfehlern behaftet. Dies führt (siehe Abschnitt 5.2) dann auch zu Fehlern in den rekonstruierten Parametern, die sich möglicherweise in der Reflexionsmessung anders auswirken als in der Transmissionsmessung.

5.4 Rekonstruktion von 2D-Gittern

In diesem Abschnitt sollen exemplarisch einige Ergebnisse der Gitterrekonstruktion zweidimensionaler Gitter vorgestellt werden. Die Beugungseffizienzen der Gitter wurden am Experimentalaufbau gemessen, anschließend wurden daraus die Gitterparameter mit dem oben beschriebenen Verfahren (siehe Abschnitt 4.2.3) bestimmt. Wie im Falle der 1D-Gitter wurden hier zunächst Fotolack-Gitter und anschließend in Quarzglas geätzte Gitter betrachtet.

5.4.1 Zweidimensionale Fotolackgitter

Zunächst sollen hier wieder Fotolackgitter betrachtet werden, die fotolithographisch hergestellt wurden. Das Herstellungsverfahren ist in Abschnitt 5.3.1.1 beschrieben. Es wurden zweidimensionale Schachbrettgitter mit verschiedenen Perioden und Füllfaktoren hergestellt und deren Gitterparameter bestimmt.

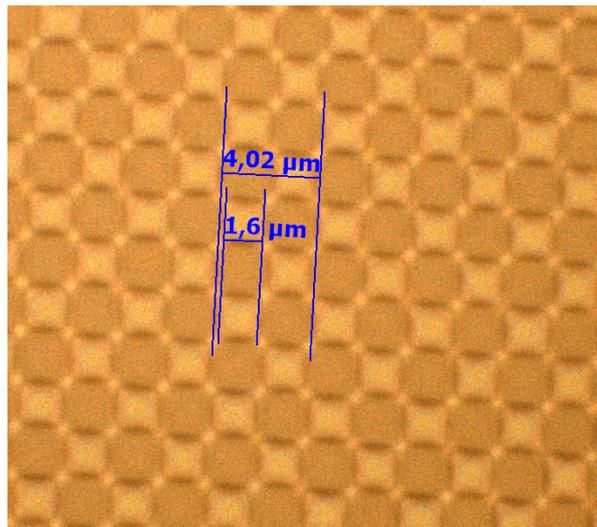


Abbildung 5.23: Mikroskopaufnahme eines zweidimensionalen Fotolackgitters

Abbildung 5.23 zeigt eine Mikroskopaufnahme eines solchen Gitters mit Periode $4\ \mu\text{m}$ (in x- und in y-Richtung) in 150-facher Vergrößerung ($\text{NA} = 0.95$). Die helleren Bereiche sind die erhabenen Säulen des Gitters, die dunkleren das Glassubstrat. Da sich die Strukturbreiten nur schwer mit dem Mikroskop messen lassen, kann hier nur ein qualitativer Vergleich der Messergebnisse erfolgen. Die im nächsten Abschnitt untersuchten Quarzgitter wurden zum Vergleich mit einem Rasterkraftmikroskop untersucht, um genauere Aussagen über die Genauigkeit der rekonstruierten Parameter machen zu können.

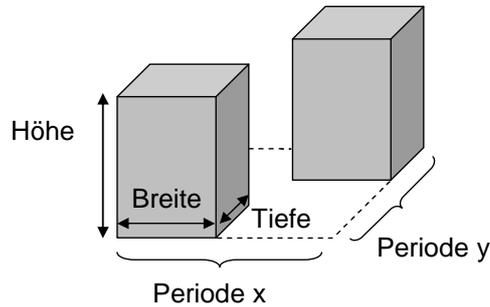


Abbildung 5.24: Parametrisierung des Schachbrett-Gitters

Periode	Füllfaktor	Gitterhöhe [nm]	Füllfaktor Mikroskop	Abweichung abs.
2 μm	0,39	319,9	0,44	0,05
4 μm	0,50	499,2	0,40	-0,10

Tabelle 5.6: Rekonstruierte Gitterparameter der zweidimensionalen Fotolackgitter

Abbildung 5.24 zeigt das verwendete Modell des Schachbrettgitters. Um das Gitter mit nur zwei Parametern beschreiben zu können, nehmen wir an, dass $P_x = P_y$ und die Säulen einen quadratischen Querschnitt haben. Dies bestätigt auch das Mikroskopbild. Der Füllfaktor ist dann genau das Verhältnis aus Säulenbreite und Gitterperiode. Für die Rekonstruktion wurde die Beugungseffizienz der 0. transmittierten Beugungsordnung bei 8 verschiedenen Wellenlängen gemessen. Die Beugungseffizienzen wurden für zwei verschiedene Polarisationsrichtungen bestimmt, auf Grund der Symmetrie sollten sich allerdings keine Polarisationsunterschiede ergeben. Dies bestätigten auch die gemessenen Beugungseffizienzen, die im Rahmen der Messgenauigkeit identisch waren.

Tabelle 5.6 zeigt die rekonstruierten Parameter der Gitter, es wurden jeweils Füllfaktor und Gitterhöhe bestimmt. Wie oben bereits erwähnt können die mit dem Mikroskop gemessenen Werte nur als grober Anhaltspunkt für die rekonstruierten Werte dienen. Wie schon bei den 1D-Gittern (Vgl. Abschnitt 5.3) ist die Brechzahl des Fotolacks nicht genau bekannt, was zu Fehlern bei der Rekonstruktion führen kann. Trotzdem schafft es die Rekonstruktion Gitterparameter zu bestimmen, die recht gut zu den gemessenen Effizienzen passen. Die gemessenen Beugungseffizienzen und die der rekonstruierten Gitter sind in Abbildung 5.25 dargestellt.

5.4.2 Zweidimensionale Quarzgitter

Wir betrachten nun, wie bereits bei den eindimensionalen Gittern, in Quarzglas geätzte Gitter. Es werden zwei verschiedene Gittertypen untersucht - zum einen Schachbrettgitter und zum anderen binär geblazete Gitter, so genannte BLACES (vgl. Abschnitt 2.2.6.2). Die rekonstruierten Gitterparameter wurden mit AFM-Messungen verglichen,

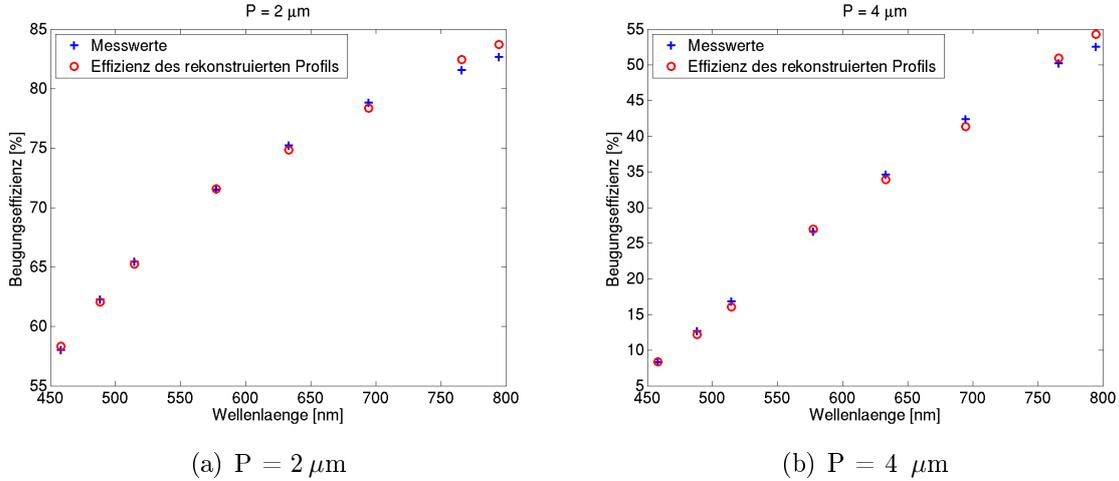


Abbildung 5.25: Messergebnisse der zweidimensionalen Fotolackgitter

so dass hier eine genauere Analyse der Messgenauigkeit möglich wird. Außerdem sind die Materialparameter besser bekannt als bei den Fotolackgittern.

5.4.2.1 Schachbrettgitter

Wir betrachten wie oben ein binäres Schachbrettgitter entsprechend Abb. 5.24 und bestimmen wieder zwei Parameter aus den Beugungseffizienzmessungen: zum einen die Gitterhöhe und zum anderen den Füllfaktor, also das Verhältnis der Breite der (als quadratisch angenommenen) Säulen und der Gitterperiode.

Rekonstruktion der Parameter

Tabelle 5.7 und Abbildung 5.26 zeigen die rekonstruierten Parameter verschiedener gemessener Gitter. Wie im Fall der Fotolackgitter wurde die Beugungseffizienz der 0. transmittierten Ordnung bei 8 verschiedenen Wellenlängen gemessen. Es wurde jeweils die Gitterhöhe und der Füllfaktor rekonstruiert. Die letzte Spalte zeigt den Restfehler nach der Bestimmung der Parameter durch den Optimierungsalgorithmus. Er beschreibt die Abweichung zwischen den gemessenen Beugungseffizienzen und denen des rekonstruierten Gitters: $\|\vec{\eta}_{\text{gemessen}} - \vec{\eta}_{\text{rekonstruiert}}\|$. Er ist ein Maß für die Güte der Rekonstruktion bzw. für die Genauigkeit der Messung.

Bis auf die ersten beiden Gitter mit Gitterperiode $1 \mu\text{m}$ ist der Restfehler der Gitterrekonstruktion relativ gering. Sowohl der Füllfaktor, als auch die rekonstruierte Gitterhöhe befinden sich in einem vernünftigen Bereich. Die untersuchten Gitter wurden teilweise

P [nm]	Füllfaktor	h [nm]	Restfehler [%]
1000	0,42	699,00	6,67
1000	0,64	764,11	4,00
1111	0,36	684,93	2,41
1111	0,58	682,86	1,50
1250	0,36	678,47	0,96
1250	0,56	688,79	1,74
1429	0,46	680,73	2,63
1429	0,54	692,70	1,80
1667	0,48	678,13	1,65
1667	0,53	695,26	0,73
2000	0,52	652,50	2,65
2000	0,52	682,74	1,14

Tabelle 5.7: Rekonstruierte Parameter der zweidimensionalen Schachbrettgitter

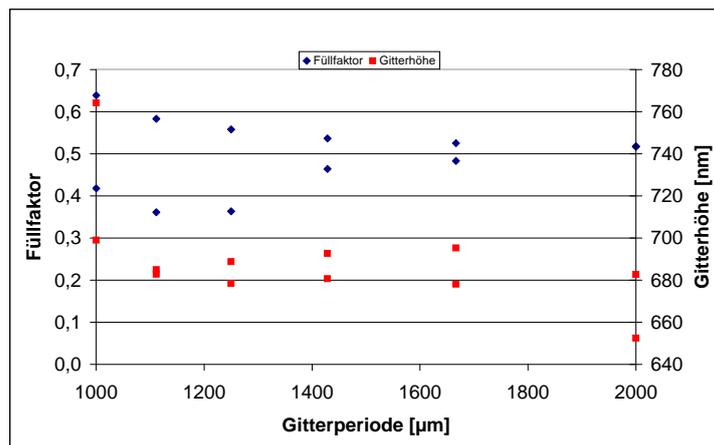


Abbildung 5.26: Rekonstruierte Parameter der zweidimensionalen Schachbrettgitter

mit derselben Periode aber unterschiedlichen Füllfaktoren hergestellt, was sich auch deutlich in den rekonstruierten Werten widerspiegelt. Außer beim zweiten Gitter ist die Gitterhöhe bei allen Gittern einigermaßen konstant. Da alle Gitter auf dem selben Substrat gefertigt wurden ist durch den Herstellungsprozess auch eine konstante Gitterhöhe zu erwarten.

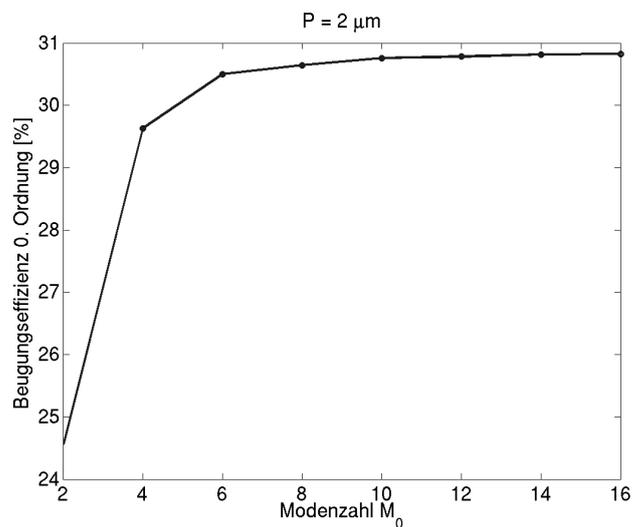


Abbildung 5.27: Konvergenz der elektromagnetischen Berechnung für das Schachbrettgitter

Für die inverse Parameterrekonstruktion wurde die Konvergenz der elektromagnetischen Rechnung untersucht. Abbildung 5.27 zeigt die Effizienz der 0. Beugungsordnung des zweidimensionalen Gitters über der Modenzahl M_0 für das Gitter mit Periode $2\mu m$. Ab einer Modenzahl von $M_0 = 10$ gibt es nur noch kleine Abweichungen, so dass diese Genauigkeit für die Rekonstruktion ausreichend sein sollte und für die Berechnungen verwendet wurde. Für die Gitter mit kleineren Perioden ist sogar noch eine bessere Konvergenz zu erwarten.

Vergleich mit AFM-Messungen

Von einigen Gittern wurden Messungen mit dem Rasterkraft-Mikroskop (AFM) durchgeführt. Abbildung 5.28 zeigt das Oberflächenprofil und einen Schnitt durch die Säulen des Schachbrettgitters mit Periode $2\mu m$. Das gemessene Profil passt qualitativ gut zum Modell des Schachbrettgitters. Das Gitter weist keinen großen Flankenwinkel auf (der scheinbare Flankenwinkel im Bild kommt von der Geometrie der AFM-Spitze) und die Gittersäulen sind wie angenommen quadratisch.

Tabelle 5.8 zeigt einen quantitativen Vergleich der rekonstruierten Parameter mit den AFM-Messungen. Insgesamt passen die rekonstruierten und die gemessenen Parameter gut zusammen. Da das verwendete AFM nur den open-loop Betrieb ermöglichte ist durch die Hysterese des Piezos nur eine Genauigkeit im Bereich von 5-10 % zu erwarten. Bis auf den Füllfaktor des Gitters mit $P = 1 \mu\text{m}$ liegen alle Parameter in diesem Genauigkeitsbereich. Wie oben bereits gesehen, trat bei diesem Gitter ein relativ großer Restfehler bei der Rekonstruktion auf. Dies deutet entweder auf eine nicht ausreichende Modellierung hin oder auf Fehler bei der Messung der Beugungseffizienzen. Abbildung 5.28 zeigt beispielsweise, dass die Strukturen abgerundete Kanten besitzen. Dies könnte eine Ursache für die fehlerhafte Rekonstruktion des Füllfaktors sein und müsste im Modell mit berücksichtigt werden.

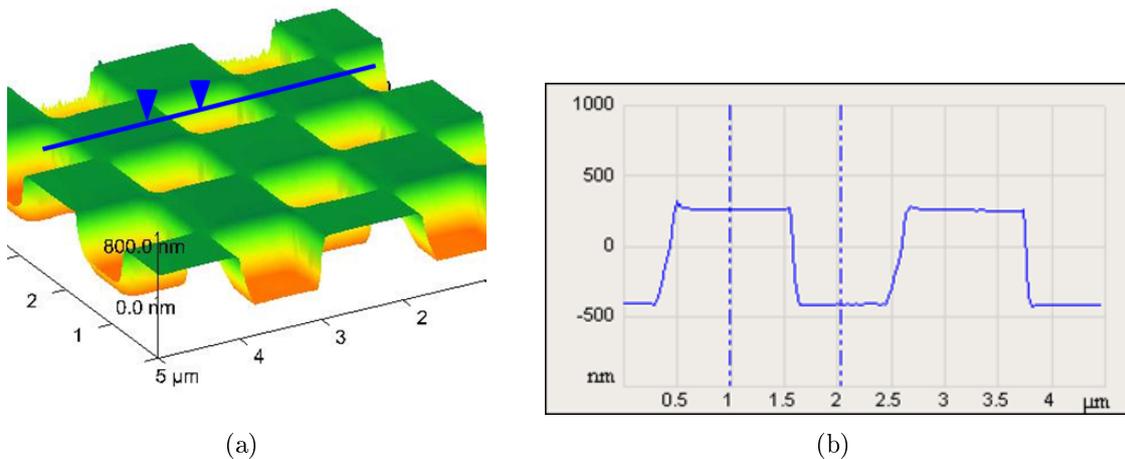


Abbildung 5.28: AFM-Messung des Schachbrettgitters

	P = 1000 nm		P = 2000 nm	
	f	h [nm]	f	h [nm]
Rekonstruktion	0,42	699,00	0,52	652,50
AFM	0,48	673,00	0,51	667,00
Differenz absolut	-0,06	26,00 nm	0,004	-14,50 nm
Differenz %	-12,0%	3,9%	0,8%	-2,2%

Tabelle 5.8: Vergleich der rekonstruierten Parameter mit AFM-Messungen

5.4.2.2 BLACES

Nun betrachten wir diffraktiv geblazete Gitter, so genannte BLACES⁴ (Vgl. Abschnitt 2.2.6.2). Sie besitzen eine Periode, die größer ist als die verwendete Wellenlänge (hier in

⁴Blazed area-coded effective medium structures

x-Richtung) und eine Periode, die kleiner ist als die Wellenlänge (hier in y-Richtung). Über das Sub- λ -Gitter entsteht ein effektiver Brechungsindex in diese Richtung, so dass das binäre Gitter den gleichen Phasenverlauf - und somit die gleiche Wirkung - wie ein gewöhnliches geblazetes Gitter besitzt.

Abbildung 5.29 zeigt die Modellierung der BLACES für die Parameterbestimmung. Da die Strukturen nicht ideal hergestellt wurden, wurde auch das Modell abweichend von der Sollform (siehe Abbildung 2.21) gewählt.

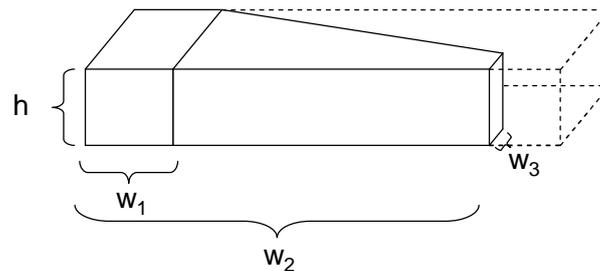


Abbildung 5.29: Parametrisierung der BLACES

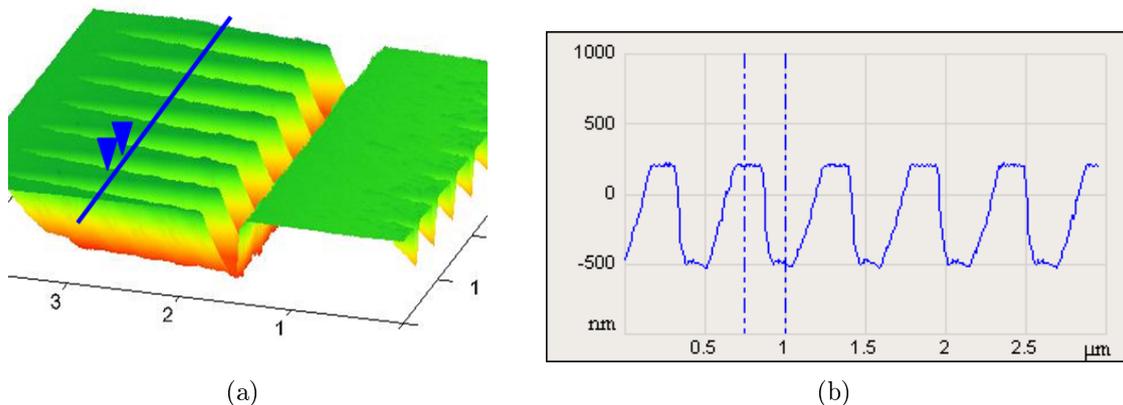


Abbildung 5.30: AFM-Messung der BLACES

Abbildung 5.30 zeigt eine AFM-Messung eines BLACES-Gitters mit einer Periode von $3 \mu\text{m}$ in x-Richtung und 500nm in y-Richtung. In Tabelle 5.9 sind die rekonstruierten Gitterparameter und die mit dem Rasterkraft-Mikroskop ermittelten Parameter gegenüber gestellt. Im Gegensatz zum Schachbrettgitter gibt es hier deutlich größere Abweichungen.

Wie in der AFM-Messung zu erkennen ist, scheint das gewählte Modell für die Rekonstruktion der Gitterparameter nicht ausreichend gewesen zu sein. An der Spitze der Strukturen ist z.B. zu erkennen, dass die Struktur keine senkrechten Kanten hat, sondern

	Rekonstruierte Parameter	AFM-Messung	Differenz
h	760 nm	730 nm	30 nm, rel. 4 %
w1	0.68 μm	1.03 μm	abs. 0.35 μm , rel. 34 %
w2	2.84 μm	2.67 μm	abs. 0.17 μm , rel. 6 %
w3	18 nm	100 nm	abs. 82 nm

Tabelle 5.9: BLACES - Vergleich Rekonstruktion und AFM

einen nicht zu vernachlässigenden Flankenwinkel aufweist. Die rekonstruierte Gitterhöhe weicht um ca. 30 nm vom gemessenen Wert ab und liegt somit noch im Bereich der Messunsicherheit des Rasterkraft-Mikroskops.

5.4.3 Diskussion der Messergebnisse

Mit dem Messaufbau und den untersuchten Gittern konnte gezeigt werden, dass eine Rekonstruktion der Gitterparameter - auch für zweidimensionale Beugungsgitter - prinzipiell möglich ist. Allerdings müssen möglichst alle physikalischen Gitterparameter bei der Rekonstruktion berücksichtigt werden. Insbesondere beim BLACE-Gitter hat dies zu großen Abweichungen der rekonstruierten Parameter geführt. Auch das Fehlen der korrekten Materialparameter, wie im Fall der Fotolackgitter führt zu ungenauen Ergebnissen. Hier könnte aber von Vorteil sein, dass wir ein optisches Element durch ein optisches Verfahren charakterisieren. Ist die Brechzahl des Materials nicht genau bekannt, führt dies zwar zu einem Fehler in der Gitterhöhe, zur Bestimmung der Beugungseffizienz des Elements (die in vielen Anwendungen entscheidend ist) ist aber nur das Produkt aus Gitterhöhe und Brechzahl relevant. Die nicht bekannte Brechzahl führt also unter Umständen trotzdem zur richtigen Effizienz des untersuchten Elements.

Problematisch ist auch der Vergleich zu anderen Messverfahren, da es schwierig ist die Gitterparameter mit der erforderlichen Genauigkeit mit anderen Verfahren zu bestimmen. Das im Experiment verwendete Rasterkraftmikroskop wies nicht die nötige Genauigkeit auf, konnte aber zumindest die rekonstruierten Parameter bestätigen. Zum genaueren Vergleich müsste ein besser kalibriertes Gerät heran gezogen werden, das aber leider zum Zeitpunkt der Untersuchungen nicht zur Verfügung stand. Vergleichsmessungen mit dem Elektronenmikroskop sind schwierig, da in der Regel Schnitte des Gitters angefertigt werden müssen und somit das Objekt zerstört wird. Bei dielektrischen Proben muss die Probe zudem oft mit einer dünnen Metallschicht bedampft werden.

Vergleicht man die erzielten Ergebnisse mit anderen Arbeiten auf dem Gebiet, so wurden in dieser Arbeit ähnlich gute oder sogar bessere Ergebnisse erzielt. Von Reinig et al [8] wurden zweidimensionale Silizium-Gitter mit einem scatterometrischen Verfahren untersucht und mit SEM Messungen verglichen. Dabei wurde beispielsweise eine Abweichung von ca. 4.7% bzw. 76 nm in der Gitterhöhe festgestellt. Von Schuster [9] wurde ein anderes Verfahren angewendet, der so genannte ϕ -Scan, bei dem nicht der Einfallswinkel variiert wird, sondern die Probe azimuthal gedreht wird. Es konnte aber keine gute Übereinstimmung zu elektronenmikroskopischen Messungen erzielt werden, als Ursache wird eine unzureichende Modellierung des Gitters vermutet.

Die Simulationen zur Messgenauigkeit haben gezeigt, dass das Verfahren relativ robust gegenüber einem statistischen Messrauschen reagiert. Systematische Fehler bei der Messung der Beugungseffizienz führen hingegen zu größeren Fehlern der rekonstruierten Parameter. Die Messung der reflektierten Beugungsordnungen scheint insensitiver gegenüber dem Messrauschen zu sein, allerdings sind dort die Beugungseffizienzen meist niedriger als in Transmission. Die Experimente haben gezeigt, dass dies auch zu einer Verringerung der Messgenauigkeit führt, da das Signal zu Rausch Verhältnis schlechter wird.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Elektromagnetische Effekte spielen bei diffraktiven Elementen eine immer wichtigere Rolle, da mit den heutigen Herstellungsverfahren Strukturdetails von wenigen Nanometern realisiert werden können. Diese Effekte können einerseits für die verschiedensten Anwendungen ausgenutzt werden, müssen andererseits aber auch bei der Lösung des inversen Problems berücksichtigt werden. In dieser Arbeit wurden verschiedene Verfahren zur Lösung des inversen, elektromagnetischen Gitterbeugungsproblems untersucht. Es wurden ein- und zweidimensionale Beugungsgitter untersucht und das inverse Problem anhand einiger Beispiele betrachtet.

Zur Lösung des inversen Problems wurden zwei konkrete Verfahren betrachtet: zum einen die iterative Lösung über Optimierungsalgorithmen - hier wurde die RCWA erweitert, um die im Optimierungsalgorithmus benötigten Ableitungen der Beugungseffizienzen nach den Gitterparametern schneller zu berechnen - und zum anderen die Lösung mit Hilfe einer Approximation des Parameterraums. Hier wurde die Approximation durch verschobene Basisfunktionen eingesetzt, um die Beugungseffizienz eines Gitters über dem Parameterraum zu approximieren. Das Approximationsverfahren ist dabei eine sehr flexible Methode, die sich gut zur Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems eignet.

Am Beispiel der Gittercharakterisierung wurde die Lösung des inversen Gitterbeugungsproblems genauer analysiert und die Eindeutigkeit des Verfahrens untersucht. Es wurden Methoden entwickelt, um den Einfluss von Messfehlern und fehlenden Modellparametern zu untersuchen. Abschließend wurden experimentelle Untersuchungen durchgeführt, um ein- und zweidimensionale Beugungsgitter mit Hilfe der hier entwickelten Verfahren zu charakterisieren. Es wurde erfolgreich demonstriert, dass sich die Methoden zur Bestimmung der Gitterparameter eignen und dass sich eine hohe Genauigkeit erzielen lässt.

Insbesondere im Fall zweidimensionaler Gitter ist der Rechenaufwand zur Lösung des inversen Problems sehr hoch, so dass hier nur wenige Gitterparameter im Modell berücksichtigt werden können. Dies führt vor allem bei der Gittercharakterisierung zu Problemen, wenn nicht alle physikalischen Parameter des untersuchten Gitters im Modell abgebildet sind. Dies zeigte sich auch bei der experimentellen Charakterisierung der zweidimensionalen Gitter und führte teilweise zu größeren Abweichungen der rekonstruierten und der mit anderen Messverfahren bestimmten Parameter. Allerdings ist der Vergleich der Messergebnisse mit anderen Messverfahren schwierig, da geeignete Verfahren gefunden werden müssen, die mindestens die gleiche Genauigkeit, wie das untersuchte Verfahren bieten.

Die gleichzeitige Messung von mehreren Beugungsordnungen ist für die Charakterisierung sehr interessant, da dann mehrere Messgrößen in einer Messung erfasst werden können. Zudem liefert die elektromagnetische Vorwärtsrechnung ebenfalls die Beugungseffizienz aller Beugungsordnungen, so dass dies den Rechenaufwand zur Lösung des inversen Problems reduziert. Bei der experimentellen Umsetzung des Verfahrens stellte sich der Aufbau allerdings als sehr schwer justierbar heraus, so dass nicht die erforderliche Messgenauigkeit erreicht werden konnte. Für den Einsatz zur Gittercharakterisierung müsste der Aufbau daher weiter verbessert und die Messgenauigkeit erhöht werden.

Das inverse, elektromagnetische Gitterbeugungsproblem ist ein weitreichendes Forschungsgebiet mit sehr vielen Anwendungen, so dass im Rahmen dieser Arbeit nur einige prinzipielle Fragestellungen untersucht werden konnten und zwei Verfahren zur Lösung des inversen Problems entwickelt und analysiert wurden. Die Lösungsverfahren für das inverse Problem können nun in den verschiedenen Anwendungen eingesetzt werden - die in dieser Arbeit betrachteten Anwendungsbeispiele stellen dabei nur einen kleinen Ausschnitt aus dem Spektrum der möglichen Einsatzgebiete dar. Sollen die Verfahren zur Gittercharakterisierung eingesetzt werden, sollte zunächst analysiert werden, welche Messgrößen sensitiv auf die zu bestimmenden Parameter sind. Ein Verfahren zur Sensitivitätsanalyse des inversen Problems für eindimensionale Gitter wurde von Gross und Rathsfeld vorgestellt [145]. Mit Hilfe der hier gezeigten Methode der Berechnung der Sensitivitäten für zweidimensionale Gitter, könnte die Methode auch auf das inverse Problem der zweidimensionalen Gitterbeugung erweitert werden.

Literatur

- 1 DI VENTRA, M. ; EVOY, S. ; HEFLIN, J.R.: *Introduction to Nanoscale Science and Technology*. Kluwer Academic Publishers, 2004
- 2 MOORE, G. E.: Cramming more components onto integrated circuits. In: *Electronics* 38 (1965), Nr. 8, S. 114–117
- 3 SINZINGER, S. ; JAHNS, J.: *Microoptics*. Wiley-VCH Chichester, 1999
- 4 RAYMOND, C.J.: *Handbook of Silicon Semiconductor Metrology, Scatterometry for Semiconductor Metrology*. CRC Press, 2001
- 5 ELSCHNER, J. ; SCHMIDT, G.: Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. Part I: direct problems and gradient formulas. In: *Mathematical Methods in the Applied Sciences* 21 (1998), Nr. 14, S. 1297–1342
- 6 ELSCHNER, J. ; SCHMIDT, G.: Numerical Solution of Optimal Design Problems for Binary Gratings. In: *J. Comp. Phys.* 146 (1998), November, Nr. 2, S. 603–626
- 7 RAYMOND, C.J. ; LITTAU, M.E. ; CHUPRIN, A. ; WARD, S.: Comparison of solutions to the scatterometry inverse problem. In: *Proceedings of SPIE* 5375 (2004), S. 564–575
- 8 REINIG, P. ; DOST, R. ; MOERT, M. ; HINGST, T. ; MANTZ, U. ; MOFFITT, J. ; SHAKYA, S. ; RAYMOND, C.J. ; LITTAU, M.: Metrology of deep trench etched memory structures using 3D scatterometry. In: *Proceedings of SPIE* 5752 (2005), S. 559
- 9 SCHUSTER, T. ; RAFLER, S. ; OSTEN, W. ; REINIG, P. ; HINGST, T.: Scatterometry from crossed grating structures in different configurations. In: *Proceedings of SPIE* 6617 (2007), S. 661715
- 10 BRENNER, K.-H.: Shifted Base Functions: An Efficient and Versatile New Tool in Optics. In: *J. Phys.: Conf. Ser. (WIO08)* (2008)
- 11 TRAUTER, B. ; BRENNER, K.-H.: Schnelle Profilformbestimmung von diffraktiven Elementen durch Least-Square-Approximation mit verschobenen Basisfunktionen. In: *DGaO Proceedings*, 2008 (109. Jahrestagung der DGaO, Esslingen), S. B15

- 12 AA, NP van der: *Sensitivity analysis for grating reconstruction*, Technische Universiteit Eindhoven, Dissertation, 2007
- 13 AA, NP van der ; MATTHEIJ, RMM: Computing shape parameter sensitivity of the field of one-dimensional surface-relief gratings by using an analytical approach based on RCWA. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 24 (2007), Nr. 9, S. 2692–2700
- 14 TRAUTER, B. ; HETZLER, J.: Rekonstruktion der Gitterparameter zweidimensionaler Gitter mit Hilfe der RCWA und analytischer Gradientenberechnung. In: *DGaO Proceedings*, 2008 (109. Jahrestagung der DGaO, Esslingen), S. B16
- 15 HATAB, Z.R. ; PRINS, S.L. ; SOHAIL, S. ; NAQVI, H. ; MCNEIL, J.R.: 16 MB DRAM trench depth characterization using dome scatterometry. In: *Applied Surface Science* 86 (1995), Nr. 1-4, S. 597–599
- 16 BORN, M. ; WOLF, E.: *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. Cambridge University Press, 2000
- 17 JACKSON, J.D.: *Klassische Elektrodynamik*. Walter de Gruyter, 2002
- 18 BRENNER, K.-H.: *Skript zur Vorlesung Grundlagen der Optik*. Universität Mannheim, 2007
- 19 PETIT, R.: *Electromagnetic theory of gratings*. Springer-Verlag, Berlin New York, 1980
- 20 NOPONEN, E. ; TURUNEN, J. ; VASARA, A.: Electromagnetic theory and design of diffractive-lens arrays. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 10 (1993), Nr. 3, S. 434
- 21 GOODMAN, J.W.: *Introduction To Fourier Optics*. Roberts & Co, 2005
- 22 WEYL, H.: Ausbreitung elektromagnetischer Wellen über einem ebenen Leiter. In: *Annalen der Physik* 365 (1919), Nr. 21, S. 481–500
- 23 KERWIEN, N. ; SCHUSTER, T. ; RAFLER, S. ; OSTEN, W. ; TOTZECK, M.: Vectorial thin-element approximation: a semirigorous determination of Kirchhoff's boundary conditions. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 24 (2007), Nr. 4, S. 1074–1084
- 24 BAO, G. ; COWSAR, L. ; MASTERS, W.: *Mathematical Modeling in Optical Science*. SIAM, 2001
- 25 TAFLOVE, A. u. a.: *Computational electrodynamics*. Artech House Boston, 2000

- 26 BRENNER, K.-H.: Effizienzsteigerung der Finite-Differenzen-Methode im Zeitbereich (FDTD-Methode) durch Beschränkung auf reelle E-Felder. In: *DGaO Proceedings*, 2007 (107. Jahrestagung der DGaO, Weingarten), S. B11
- 27 UNGER, A. ; BRENNER, K.-H.: Vergleich exakter optischer Lösungsmethoden im Zeitbereich in Hinblick auf Genauigkeit und Effizienz. In: *DGaO Proceedings*, 2008 (109. Jahrestagung der DGaO, Esslingen), S. B14
- 28 RATHSFELD, A.: *DIPOG-2.0 User Guide - Direct Problems for Optical Gratings over Triangular Grids*
- 29 ELSCHNER, J. ; HINDER, R. ; SCHMIDT, G.: Finite Element Solution of Conical Diffraction Problems. In: *Advances in Computational Mathematics* 16 (2002), April, Nr. 2, S. 139–156
- 30 BURKHARDT, C. B.: Diffraction of a Plane Wave at a Sinusoidally Stratified Dielectric Grating. In: *J. Opt. Soc. Am.* 56 (1966), Nr. 11, S. 1502
- 31 KASPAR, F.G.: Diffraction by thick, periodically stratified gratings with complex dielectric constant. In: *J. Opt. Soc. Am.* 63 (1973), Nr. 1, S. 37–45
- 32 PENG, ST ; TAMIR, T. ; BERTONI, HL: Theory of periodic dielectric waveguides. In: *IEEE Trans. Microwave Theory Tech* 23 (1975), Nr. 1, S. 123–133
- 33 KNOP, K.: Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves. In: *J. Opt. Soc. Am.* 68 (1978), Nr. 9, S. 1206–1210
- 34 MOHARAM, MG ; GAYLORD, TK: Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. In: *J. Opt. Soc. Am.* 71 (1981), Nr. 7, S. 811–818
- 35 MOHARAM, MG ; GAYLORD, TK: Three-dimensional vector coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. In: *J. Opt. Soc. Am.* 73 (1983), S. 1105–1112
- 36 MOHARAM, MG: Coupled-wave analysis of two-dimensional dielectric gratings. In: *Proc. SPIE* 883 (1988), S. 8–11
- 37 LI, L. ; CHANDEZON, J. ; GRANET, G. ; PLUMEY, J.P.: Rigorous and efficient grating-analysis method made easy for optical engineers. In: *Appl. Opt.* 38 (1999), Nr. 2, S. 304–313
- 38 GRANET, G.: Analysis of diffraction by surface-relief crossed gratings with use of the Chandezon method: application to multilayer crossed gratings. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 15 (1998), Nr. 5, S. 1121–1131
- 39 POPOV, E. ; NEVIERE, M.: Grating theory: new equations in Fourier space leading to fast converging results for TM polarization. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 17 (2000), Nr. 10, S. 1773–1784

- 40 KLEEMANN, B.H.: *Elektromagnetische Analyse von Oberflächengittern von IR bis XUV mittels einer parametrisierten Randintegralmethode: Theorie, Vergleich und Anwendungen*, Universität Ilmenau, Dissertation, 2002
- 41 MAYSTRE, D. (Hrsg.): *Selected Papers on Diffraction Gratings*. Bd. MS 83. SPIE Milestone series, 1993
- 42 RYTOV, SM: Electromagnetic properties of a finely stratified medium. In: *Sov. Phys. JETP* 2 (1956), Nr. 3, S. 466–475
- 43 TOTZECK, M.: Numerical simulation of high-NA quantitative polarization microscopy and corresponding near-fields. In: *Optik - International Journal for Light and Electron Optics* 112 (2001), Nr. 9, S. 399–406
- 44 MOHARAM, M. G. ; GRANN, Eric B. ; POMMET, Drew A. ; GAYLORD, T. K.: Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 12 (1995), Nr. 5, S. 1068
- 45 MOHARAM, M. G. ; POMMET, Drew A. ; GRANN, Eric B. ; GAYLORD, T. K.: Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 12 (1995), Nr. 5, S. 1077
- 46 LI, L.: Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996), Nr. 9, S. 1870–1876
- 47 LI, L.: New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 14 (1997), Nr. 10, S. 2758–2767
- 48 KERWIEN, N.: *Zum Einfluss von Polarisierungseffekten in der mikroskopischen Bildentstehung*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2008
- 49 SCHUSTER, T. ; RUOFF, J. ; KERWIEN, N. ; RAFLER, S. ; OSTEN, W.: Normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 24 (2007), Nr. 9, S. 2880–2890
- 50 GRANET, G.: Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 16 (1999), Nr. 10, S. 2510–2516
- 51 HUGONIN, J.P. ; LALANNE, P.: Perfectly matched layers as nonlinear coordinate transforms: a generalized formalization. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 22 (2005), Nr. 9, S. 1844–1849
- 52 SILBERSTEIN, E. ; LALANNE, P. ; HUGONIN, J.P. ; CAO, Q.: Use of grating theories in integrated optics. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 18 (2001), Nr. 11, S. 2865–2875

- 53 LALANNE, P. ; SILBERSTEIN, E.: Fourier-modal methods applied to waveguide computational problems. In: *Opt. Lett.* 25 (2000), Nr. 15, S. 1092–1094
- 54 BAI, B. ; LI, L.: Reduction of computation time for crossed-grating problems: a group-theoretic approach. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 21 (2004), Nr. 10, S. 1886–1894
- 55 BAI, B. ; LI, L.: Group-theoretic approach to the enhancement of the Fourier modal method for crossed gratings: C2 symmetry case. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 22 (2005), Nr. 4, S. 654–661
- 56 RICHTER, I. ; SUN, P.C. ; XU, F. ; FAINMAN, Y.: Design considerations of form birefringent microstructures. In: *Appl. Opt.* 34 (1995), Nr. 14, S. 2421–2
- 57 O'SHEA, D.C.: *Diffraction Optics: Design, Fabrication, and Test*. SPIE Press, 2004
- 58 POMMET, D.A. ; MOHARAM, MG ; GRANN, E.B.: Limits of scalar diffraction theory for diffractive phase elements. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 11 (1994), Nr. 1827, S. 1834
- 59 GLYTSIS, E.N.: Two-dimensionally-periodic diffractive optical elements: limitations of scalar analysis. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 19 (2002), Nr. 4, S. 702–715
- 60 TURUNEN, J. ; WYROWSKI, F.: *Diffraction Optics for Industrial and Commercial Applications*. Akademie Verlag, 1998
- 61 KLEEMANN, BH ; RUOFF, J.: Beugen, Filtern, Komprimieren. In: *PHYSIK JOURNAL* 5 (2006), Nr. 6, S. 47
- 62 PALMER, C.: *Diffraction Grating Handbook*. Newport Corporation, 2005
- 63 DÖRBAND, B. ; TIZIANI, H.: Testing aspheric surfaces with computer-generated holograms: analysis of adjustment and shape errors. In: *Appl. Opt.* 24 (1985), Nr. 16, S. 2604–2611
- 64 REICHELT, S. ; TIZIANI, H.: Asphärenprüfung mit computergenerierten Hologrammen. In: *Technisches Messen* 73 (2006), S. 554–565
- 65 FREIMANN, R. ; DOERBAND, B. ; SCHILLKE, F. ; BEIERSDOERFER, S. ; SCHULTE, S.: *Method for calibrationg an interferometer, method for qualifyying an object, and method for producing an object*. April 26 2006. – EP Patent 1,649,241
- 66 HETZLER, J. ; BEDER, S. ; FELDMANN, H.: *Hologram and method of manufacturing an optical element using a hologram*. 2006. – WO 2006/077145 A3

- 67 CHANG, Y.C. ; ZHOU, P. ; BURGE, J.H.: Analysis of phase sensitivity for binary computer-generated holograms. In: *Applied Optics* 45 (2006), Nr. 18, S. 4223–4234
- 68 ZHOU, P. ; BURGE, J.H.: Fabrication error analysis and experimental demonstration for computer-generated holograms. In: *Applied Optics* 46 (2007), Nr. 5, S. 657–663
- 69 GREISUKH, GI ; BOBROV, ST ; STEPANOV, SA: *Optics of diffractive and gradient-index elements and systems*. SPIE Optical Engineering Press, 1997
- 70 TEZUKA, Y. ; KUBA, K.: *Projection Lens System*. 1991. – US Patent 5,170,207
- 71 BRUNNER, R. ; STEINER, R. ; DOBSCHAL, H. ; RUDOLF, K.: Hybride diffraktive-refraktive Optik: Vom Design zum System. In: *PHOTONIK-STUTTGART-* (2004), S. 50–55
- 72 CANON: *Canon Technology - DO lens*. http://www.canon.com/technology/canon_tech/explanation/do_lens.html
- 73 ASML: *MaskTools - Technology*. <http://www.asml.com/asml/show.do?ctx=10176&rid=10134>
- 74 RUOFF, J. ; NEUMANN, J.T. ; SCHMITT-WEAVER, E. ; SETTEN, E. van ; MASSON, N. le ; PROGLER, C. ; GEH, B.: Polarization-induced astigmatism caused by topographic masks. In: *Proceedings of SPIE* 6730 (2007), S. 67301T
- 75 ERDMANN, A.: Topography effects and wave aberrations in advanced PSM technology. In: *Proceedings of SPIE* 4346 (2001), S. 345
- 76 BLÄSI, B.: *Holographisch hergestellte Antireflexoberflächen für solare und visuelle Anwendungen*, Dissertation, Fraunhofer ISE, Dissertation, 2000
- 77 KANAMORI, Y. ; SASAKI, M. ; HANE, K.: Broadband antireflection gratings fabricated upon silicon substrates. In: *Opt. Lett.* 24 (1999), Nr. 20, S. 1422–1424
- 78 GRANN, E.B. ; MOHARAM, MG: Comparison between continuous and discrete subwavelength grating structures for antireflection surfaces. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996), S. 988–992
- 79 HAIDNER, H. ; SHERIDAN, JT ; STREIBL, N.: Dielectric binary blazed gratings. In: *Appl. Opt* 32 (1993), Nr. 12, S. 4276–4278
- 80 LALANNE, P.: Waveguiding in blazed-binary diffractive elements. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 16 (1999), Nr. 10, S. 2517–2520

- 81** LALANNE, P. ; ASTILEAN, S. ; CHAVEL, P. ; CAMBRIL, E. ; LAUNOIS, H.: Design and fabrication of blazed binary diffractive elements with sampling periods smaller than the structural cutoff. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 16 (1999), Nr. 5, S. 1143–1156
- 82** LALANNE, S. ; CHAVEL, P. ; CAMBRIL, E. ; LAUNOIS, H.: Blazed binary subwavelength gratings with efficiencies larger than those of conventional échelette gratings. In: *Opt. Lett.* 23 (1998), Nr. 14, S. 1081–1083
- 83** MAIT, J.N. ; PRATHER, D.W. ; MIROTZNIK, M.S.: Binary subwavelength diffractive-lens design. In: *Opt. Lett.* 23 (1998), Nr. 17, S. 1343–1345
- 84** MAIT, J.N. ; PRATHER, D.W. ; MIROTZNIK, M.S.: Design of binary subwavelength diffractive lenses by use of zeroth-order effective-medium theory. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 16 (1999), Nr. 5, S. 1157–1167
- 85** MAIT, J.N. ; SCHERER, A. ; DIAL, O. ; PRATHER, D.W. ; GAO, X.: Diffractive lens fabricated with binary features less than 60 nm. In: *Opt. Lett.* 25 (2000), Nr. 6, S. 381–383
- 86** KLEEMANN, Bernd H. ; RUOFF, Johannes ; ARNOLD, Ralf: Area-coded effective medium structures, a new type of grating design. In: *Opt. Lett.* 30 (2005), Nr. 13, S. 1617–1619
- 87** ARNOLD, R. ; KLEEMANN, B.: *Diffractive optical element*. Februar 17 2005. – US Patent App. 11/059,803
- 88** ELFSTRÖM, H. ; KUITTINEN, M. ; VALLIUS, T. ; KLEEMANN, B.H. ; RUOFF, J. ; ARNOLD, R.: Fabrication of blazed gratings by area-coded effective medium structures. In: *Optics Communications* 266 (2006), Nr. 2, S. 697–703
- 89** SANDFUCHS, Oliver ; BRUNNER, Robert ; PÄTZ, Daniel ; SINZINGER, Stefan ; RUOFF, Johannes: Rigorous analysis of shadowing effects in blazed transmission gratings. In: *Opt. Lett.* 31 (2006), Nr. 24, S. 3638–3640
- 90** RUOFF, J. ; KLEEMANN, B.: *Polarization-selectively blazed, diffractive optical element*. August 18 2005. – US Patent App. 11/206,886
- 91** KAWATSUKI, N. ; UETSUKI, M.: Crossed grating beam splitter for magneto-optical pickup head. In: *Jpn. J. Appl. Phys* 29 (1990), S. 2420–2423
- 92** DAMMANN, H. ; KLOTZ, E.: Coherent optical generation and inspection of two-dimensional periodic structures. In: *Opt. Acta* 24 (1977), Nr. 4, S. 505–515
- 93** JAHNS, J. ; PRISE, ME ; DOWNS, MM ; WALKER, SJ ; STREIBL, N.: Dammann gratings as array generators (A). In: *J. Opt. Soc. Am. A* 4 (1987), S. 69

- 94** MAIT, J.N.: Design of binary-phase and multiphase Fourier gratings for array generation. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 7 (1990), Nr. 8, S. 1514
- 95** VASARA, A. ; TAGHIZADEH, M. R. ; TURUNEN, J. ; WESTERHOLM, J. ; NOPONEN, E. ; ICHIKAWA, H. ; MILLER, J. M. ; JAAKKOLA, T. ; KUISMA, S.: Binary surface-relief gratings for array illumination in digital optics. In: *Appl. Opt.* 31 (1992), Nr. 17, S. 3320–3336
- 96** WALKER, S.J. ; JAHNS, J.: Array generation with multilevel phase gratings. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 7 (1990), Nr. 8, S. 1509
- 97** PRONGUÉ, D. ; HERZIG, HP ; DÄNDLIKER, R. ; GALE, M.T.: Optimized kinoform structures for highly efficient fan-out elements. In: *Appl. Opt.* 31 (1992), Nr. 26, S. 5706–5711
- 98** GALE, M.T. ; ROSSI, M. ; SCHÜTZ, H. ; EHBETS, P. ; HERZIG, H.P. ; PRONGUÉ, D.: Continuous-relief diffractive optical elements for two-dimensional array generation. In: *Appl. Opt.* 32 (1993), Nr. 14, S. 2526–2533
- 99** BENGTTSSON, J.: Design of fan-out kinoforms in the entire scalar diffraction regime with an optimal-rotation-angle method. In: *Appl. Opt.* 36 (1997), Nr. 32, S. 8435–8444
- 100** LEGER, J.R. ; SWANSON, G.J. ; VELDKAMP, W.B.: Coherent laser addition using binary phase gratings. In: *Appl. Opt.* 26 (1987), S. 4391–4399
- 101** SCHUSTER, T. ; RAFLER, S. ; FRENNER, K. ; OSTEN, W.: Influence Of Line Edge Roughness (LER) On Angular Resolved And On Spectroscopic Scatterometry. In: *9th International Symposium on Laser Metrology*, 2008
- 102** CHENG, Xianfu ; JIA, Huibo ; XU, Duanyi: Vector Diffraction Analysis of Optical Disk Readout. In: *Appl. Opt.* 39 (2000), Nr. 34, S. 6436–6440
- 103** POPOV, E. ; NEVIÈRE, M. ; GRALAK, B. ; TAYEB, G.: Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 19 (2002), Nr. 1, S. 33–42
- 104** KIM, H. ; LEE, B.: Pseudo-Fourier modal analysis of two-dimensional arbitrarily shaped grating structures. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 25 (2008), Nr. 1, S. 40–54
- 105** GERMER, T.A.: Effect of line and trench profile variation on specular and diffuse reflectance from a periodic structure. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 24 (2007), Nr. 3, S. 696–701
- 106** TARANTOLA, A.: *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. Society for Industrial Mathematics, 2005

- 107** NOCEDAL, J. ; WRIGHT, S.J.: *Numerical Optimization*. Springer, 1999
- 108** MURTHY, DV ; HAFTKA, RT: Derivatives of eigenvalues and eigenvectors of a general complex matrix. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 26 (1988), Nr. 2, S. 293–311
- 109** NÜRNBERGER, G.: *Approximation by spline functions*. Springer, 1989
- 110** ETTL, S. ; KAMINSKI, J. ; HÄUSLER, G.: Generalized hermite interpolation with radial basis functions considering only gradient data. In: *Curve and Surface Fitting: Avignon 2006* (2006), S. 141–149
- 111** KALLIONIEMI, I. ; SAARINEN, J. ; OJA, E.: Optical Scatterometry of Subwavelength Diffraction Gratings: Neural-Network Approach. In: *Appl. Opt.* 37 (1998), S. 5830–5835
- 112** KALLIONIEMI, Ilkka ; SAARINEN, Jyrki ; OJA, Erkki: Characterization of Diffraction Gratings in a Rigorous Domain with Optical Scatterometry: Hierarchical Neural-Network Model. In: *Appl. Opt.* 38 (1999), Nr. 28, S. 5920–5930
- 113** WEI, S. ; LI, L.: Measurement of photoresist grating profiles based on multiwavelength scatterometry and artificial neural network. In: *Appl. Opt.* 47 (2008), Nr. 13, S. 2524–2532
- 114** KLEEMANN, BH ; GÜTHER, R.: Zonal diffraction efficiencies and imaging of micro-Fresnel lenses. In: *Journal of Modern Optics* 45 (1998), Nr. 7, S. 1405–1420
- 115** KLEEMANN, B.H. ; ROSTALSKI, H.-J. ; ULRICH, W.: *Diffraction optical element and also optical arrangement comprising a diffraction optical element*. 2002. – US 6,728,036 B2
- 116** WOHLFELD, D. ; BRENNER, K.-H.: Fabrication of integrated structures for coupling VCSEL to fibre. In: *DGaO Proceedings, 2005* (106. Jahrestagung der DGaO, Wrocław (Poland)), S. B38
- 117** WOHLFELD, D. ; SCHEFFELMEIER, S. ; BRENNER, K.-H.: Doppelbelichtung und Replikation von Mikrostrukturen für die optische Informationsübertragung. In: *DGaO Proceedings, 2007* (107. Jahrestagung der DGaO, Weingarten), S. P57
- 118** YEH, J.H. ; KOSTUK, R.K.: Substrate-mode holograms used in optical interconnects: design issues. In: *Appl. Opt.* 34 (1995), Nr. 17, S. 3152–3164
- 119** CHERNOV, B. ; NEVIÈRE, M. ; POPOV, E.: Fast Fourier factorization method applied to modal analysis of slanted lamellar diffraction gratings in conical mountings. In: *Optics Communications* 194 (2001), Nr. 4-6, S. 289–297

- 120 SCHMITZ, M. ; BRAUER, R. ; BRYNGDAHL, O.: Gratings in the resonance domain as polarizing beam splitters. In: *Opt. Lett* 20 (1995), Nr. 17, S. 1830–1831
- 121 MARSHALL, A. ; NATARAJAN, S.: *Soi Design: Analog, Memory and Digital Techniques*. Kluwer Academic Publishers, 2002
- 122 OSTEN, W. ; KERWIEN, N.: Optische Messtechnik an den Grenzen zwischen Makro und Nano / Universität Stuttgart. 2005. – Forschungsbericht
- 123 BEYER, H.: *Handbuch der Mikroskopie*. VEB Verlag Technik, 1973
- 124 EHRET, G. ; BODERMANN, B. ; WOehler, M.: Comparison of rigorous modelling of different structure profiles on photomasks for quantitative linewidth measurements by means of UV-or DUV-optical microscopy. In: *Proceedings of SPIE* 6617 (2007), S. 661710
- 125 SARID, D.: *Scanning force microscopy*. Oxford University Press New York, 1991
- 126 TOTZECK, M.: *Skript zur Vorlesung Messtechniken für Mikrostrukturen*. Universität Stuttgart, 2006
- 127 VEECO: Using a CD AFM to Calibrate Other Metrology Systems / Veeco Instruments Inc. 2003. – Forschungsbericht
- 128 OSTEN, W. (Hrsg.): *Optical Inspection of Microsystems*. CRC Press, 2006
- 129 WATT, I.M.: *The principles and practice of electron microscopy*. Cambridge. Cambridge University, 1997
- 130 WURM, M. ; BODERMANN, B. ; PILARSKI, F.: Das neue DUV-Scatterometer der PTB. In: *DGaO Proceedings*, 2006, S. H7
- 131 KLEINKNECHT, H. P. ; MEIER, H.: Linewidth measurement on IC masks and wafers by grating test patterns. In: *Appl. Opt.* 19 (1980), Nr. 4, S. 525
- 132 NIU, X. ; JAKATDAR, N. H. ; BAO, J. ; SPANOS, C. J. ; YEDUR, S. K.: Specular spectroscopic scatterometry in DUV lithography. In: *Proceedings of SPIE* 3677 (1999), S. 159–168
- 133 AZZAM, RMA ; BASHARA, NM: *Ellipsometry and polarized light*. Amsterdam: North-Holland, 1992
- 134 DREGE, E.M. ; AL-ASSAAD, R.M. ; BYRNE, D.M.: Mathematical analyses of inverse scatterometry. In: *Proceedings of SPIE* 4689 (2002), S. 151

- 135 DRÈGE, E.M. ; REED, J.A. ; BYRNE, D.M.: Linearized inversion of scatterometric data to obtain surface profile information. In: *Opt. Eng.* 41 (2002), S. 225
- 136 AL-ASSAAD, R. M. ; BYRNE, D. M.: Error analysis in inverse scatterometry. I. Modeling. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 24 (2007), Nr. 2, S. 326–338
- 137 WURM, M. ; BODERMANN, B. ; MIRANDE, W.: Investigation and evaluation of scatterometric CD metrology methods. In: *Proceedings of SPIE* 5858 (2005), S. 293–303
- 138 BAO, G.: A uniqueness theorem for an inverse problem in periodic diffractive optics. In: *Inverse Problems* 10 (1994), Nr. 2, S. 335–340
- 139 AGERSNAP, N. ; HANSEN, P.E. ; PETERSEN, J.C. ; GARNAES, J. ; DESTOUCHES, N. ; PARRIAUX, O.: Critical dimension metrology using optical diffraction microscopy. In: *Proc. SPIE* 5965 (2005), S. 68–78
- 140 GARNAES, J. ; HANSEN, P.E. ; AGERSNAP, N. ; HOLM, J. ; BORSETTO, F. ; KÜHLE, A.: Profiles of a high-aspect-ratio grating determined by spectroscopic scatterometry and atomic-force microscopy. In: *Appl. Opt.* 45 (2006), Nr. 14, S. 3201–3212
- 141 HETZLER, J. ; ANDIEL, U. ; BRANDENBURG, H.: *Method of qualifying a diffraction grating and method of manufacturing an optical element.* 2006. – US 0,274,325 A1
- 142 NAUMANN, H. ; SCHRÖDER, G.: *Bauelemente der Optik.* Carl Hanser Verlag, 1983
- 143 ROHM AND HAAS: *Microposit S1800 G2 series photoresists.* http://www.microresist.de/products/room_haas/pdf/Microposit_S1800_G2_Serie.pdf. 2006
- 144 LEECH, P.W.: Reactive ion etching of quartz and silica-based glasses in CF₄/CHF₃ plasmas. In: *Vacuum* 55 (1999), Nr. 3-4, S. 191–196
- 145 GROSS, H. ; RATHSFELD, A.: Sensitivity analysis for indirect measurement in scatterometry and the reconstruction of periodic grating structures. In: *Waves in Random and Complex Media* 18 (2008), Nr. 1, S. 129–149

Abbildungsverzeichnis

1.1	Klassisches Gitterbeugungsproblem	5
1.2	Inverses Gitterbeugungsproblem	6
1.3	Invertierung des Gitterbeugungsproblems mit Hilfe von Optimierungsalgorithmen	8
1.4	Invertierung des Gitterbeugungsproblems durch Vorausberechnung	8
2.1	Betrachtete Gittergeometrie	16
2.2	Skalare Klassifizierung von Beugungsgittern	19
2.3	Schematische Darstellung einer diffraktiven Linse (Fresnel-Linse)	20
2.4	Vergleich der Aspektverhältnisse bei kleiner und großer Gitterperiode	24
2.5	Modellierung des Beugungsgitters in der VTEA als Schichtstapel (Quelle: Kerwien [23])	24
2.6	Modell für die Effektiv Medium Theorie 0. Ordnung	28
2.7	Gittergeometrie für die Betrachtung der klassischen Beugung	30
2.8	Treppenstufenapproximation in der RCWA	36
2.9	Geometrie des zweidimensionalen Gitterbeugungsproblems	39
2.10	Vergleich der Effektiv Medium Theorie mit elektromagnetischer Simulation	45
2.11	Vergleich elektromagnetische Simulation mit Näherungsverfahren	46
2.12	Rowland Kreis (Quelle: Palmer [62])	48
2.13	Interferometer zur Asphärenprüfung (Quelle: Reichelt [64])	49
2.14	Diffraktive Linse	50
2.15	Lithographieobjektiv mit diffraktivem Element nach Tezuka [70]	50
2.16	Lithographiemasken (Quelle: ASML [73])	51
2.17	Beugungseffizienz von Lithographiemasken	52
2.18	Sub- λ Antireflex Beschichtung (Quelle: Kanamori [77])	53
2.19	Diffraktiv geblazetes Gitter	54
2.20	Beugungseffizienz verschiedener Blazegitter	54
2.21	Struktur der BLACES	55
2.22	Beugungseffizienz der BLACES	56
2.23	Anwendung eines zweidimensionalen Gitters zur Erzeugung eines Spot-Arrays (Quelle: Gale [98])	57
2.24	Maske für Kontaktlöcher	57
2.25	Brechzahlverlauf eines binären Phasengitters	59
2.26	Phase eines skalaren Phasengitters	59

2.27	Abhängigkeit der Beugungseffizienz der 0. und 1. Beugungsordnung von der Gitterhöhe	61
2.28	Elektromagnetische Betrachtung von Brechzahl und Gitterhöhe	62
2.29	Abhängigkeit der Beugungseffizienz der 0. Ordnung vom Füllfaktor	63
2.30	Abhängigkeit der Beugungseffizienz der 1. Ordnung vom Füllfaktor	64
2.31	Amplitudengitter: Abhängigkeit der Beugungseffizienz von der Gitterperiode	65
2.32	Phasengitter: Abhängigkeit der Beugungseffizienz von der Gitterperiode	66
2.33	Treppenstufenapproximation	67
2.34	Nahfeld eines metallischen Trapezgitters	68
2.35	Konvergenzverhalten der verschiedene Methoden: TE-Polarisation	68
2.36	Konvergenzverhalten der verschiedene Methoden: TM-Polarisation	69
2.37	Einfluss der Stufenzahl: Dielektrisches Trapezgitter	70
2.38	Einfluss der Stufenzahl: Metallisches Trapezgitter	71
2.39	Einfluss des Flankenwinkels	72
2.40	Absolutfehler der Beugungseffizienz bei Füllfaktorvariationen	73
3.1	Parametrisierung des Gitters	75
3.2	RCWA liefert Beugungseffizienz zu gegebenem Parametervektor \vec{p} und Konfiguration \vec{C}	75
3.3	Zweidimensionales Säulengitter	85
3.4	Vergleich analytische und numerische Ableitung	86
3.5	Konvergenzvergleich analytische und numerische Ableitung	86
3.6	Numerische Ableitungsberechnung	87
3.7	Analytische Ableitungsberechnung	88
3.8	Verhältnis zwischen $t_{Ableitung}$ und t_{RCWA}	90
3.9	Speedup über der Parameterzahl	91
3.10	Vergleich Interpolation und Approximation von verrauschten Daten	93
3.11	Superposition von Basisfunktionen	94
3.12	Effizienzvektoren im Parameterraum	96
3.13	Ausgangspunkt der Approximation	96
3.14	Ergebnis der Approximation	97
3.15	Ausgangspunkt der Approximation	99
3.16	Approximierte Gradienten	100
3.17	Vergleich zwischen approximierten und berechneten Effizienzen: Gradientenapproximation	100
3.18	Vergleich zwischen approximierten und berechneten Effizienzen: Höhenapproximation	101
3.19	Differenz zwischen Approximation und berechneten Daten	101
3.20	Genauigkeit der Approximation	102
4.1	Beugungseffizienz über der Gitterperiode	106

4.2	Effizienz der 1. Beugungsordnung für verschiedene Gitterperioden über dem Füllfaktor	107
4.3	Anpassung der Effizienz über den Füllfaktor	108
4.4	Designprozess für ein DOE mit vorgegebener Intensitätsverteilung	109
4.5	Schematische Darstellung der VCSL-Faserkopplung mit Hilfe eines SU8 Umlenkspiegels	109
4.6	Herstellung der Koppelstruktur (Quelle: Wohlfeld [117])	110
4.7	Schrägbelichtung über eine diffraktive Maske	110
4.8	Beugungseffizienz eines geblazten Gitters zur Schrägbelichtung	111
4.9	Volumengitter	112
4.10	Beugungseffizienz eines Volumengitters über dem Winkel des Gitters	112
4.11	Simulierte Geometrie des Volumengitters mit maximaler Blazewirkung	113
4.12	Beugungseffizienz eines Volumengitters mit $h = \lambda$ über dem Winkel des Gitters	114
4.13	Herstellung von Koppelstrukturen durch Belichtung mit drei Beugungsordnungen	114
4.14	Prinzip des diffraktiven Polarisationsstrahlteilers	115
4.15	Zielfunktion des diffraktiven Polarisationsstrahlteilers	116
4.16	Phasengitter als Polarisationsstrahlteiler	117
4.17	Schematischer Querschnitt der SOI Technologie	118
4.18	Absorption der Diode für verschiedene Stegbreiten und Perioden	119
4.19	Intensitätsverteilung in der Diode	120
4.20	Versuchsaufbau zur Charakterisierung der Dioden	121
4.21	Simulierte Absorption und gemessene Empfindlichkeit der Diode	121
4.22	Mikroskopische Abbildung (nach Beyer [123])	124
4.23	Schematischer Aufbau eines Rasterkraftmikroskops (Quelle: Totzeck [126])	125
4.24	2Θ -Scatterometer	128
4.25	Dome-Scatterometer (Quelle: Hatab [15])	129
4.26	Schematischer Ablauf der Profilformbestimmung	131
4.27	Potentiallandschaft und Optimierungspfad	132
4.28	Messdaten in den Komponenten der Approximation	133
4.29	Schnittpunkt der Höhenlinien (rechts: Ausschnitt)	134
4.30	Beugungseffizienz eines binären Phasengitters über der Gitterhöhe	135
4.31	Fehlerfunktion für die Bestimmung der Gitterhöhe	136
4.32	Fehlerfunktion für den betrachteten Parameterraum	137
4.33	Fehlerfunktion über dem Füllfaktor	137
4.34	Fehlerfunktion über der Gitterhöhe	138
4.35	Fehlerfunktion für die Messung der 0. reflektierten Beugungsordnung	139
4.36	Optische Wegdifferenz (OPD) für transmittierte und reflektierte Beugungsordnungen	139
4.37	Fehlerfunktion für die Messung von drei Beugungsordnungen	140
4.38	Verfahren zur Analyse von Modellfehlern	141

4.39	Zweidimensionales Säulengitter	142
4.40	Rekonstruktionsfehler für ein Säulengitter mit Flankenwinkel	142
4.41	Potentiallandschaft für Gitterhöhe und Brechzahl	143
5.1	Messaufbau in Transmission	147
5.2	Messaufbau in Reflexion	148
5.3	Messung mehrerer Beugungsordnungen	148
5.4	Experimentalaufbau zur Messung der Beugungseffizienzen	150
5.5	Zeitliche Stabilität der verwendeten Lichtquelle	150
5.6	Schematischer Aufbau zur Messung der höheren Beugungsordnungen mit Hilfe eines Mikroskop-Objektivs	151
5.7	Beugungsspektrum eines zweidimensionalen Gitters (logarithmische Darstellung)	152
5.8	Ergebnis der Messung von höheren Beugungsordnungen	153
5.9	Linearität für zwei verschiedene CCD-Kameras	153
5.10	Untersuchung der Messgenauigkeit	155
5.11	Simulation von Messfehlern: Messung der 0. transmittierten Ordnung	156
5.12	Simulation von Messfehlern: Messung der 0. reflektierten Ordnung	157
5.13	Rekonstruktionsfehler des zweidimensionalen BLACE-Gitters	158
5.14	Simulierte spektrale Verteilung (unten) und Effizienz über der Wellenlänge (oben)	159
5.15	Einfluss der spektralen Breite auf die Beugungseffizienz	160
5.16	Verschiebung der Schwerpunktswellenlänge gegen relative Abweichung	161
5.17	Lithographische Herstellung der Beugungsgitter	164
5.18	Mikroskopische Messung des Füllfaktors	164
5.19	Ergebnis der Rekonstruktion	166
5.20	Polarisationsdifferenz in der Substrattransmission	167
5.21	Gemessene Beugungseffizienzen der 0. Ordnung in Transmission	168
5.22	Gemessene Beugungseffizienzen der 0. reflektierten Ordnung	169
5.23	Mikroskopaufnahme eines zweidimensionalen Fotolackgitters	171
5.24	Parametrisierung des Schachbrett-Gitters	172
5.25	Messergebnisse der zweidimensionalen Fotolackgitter	173
5.26	Rekonstruierte Parameter der zweidimensionalen Schachbrettgitter	174
5.27	Konvergenz der elektromagnetischen Berechnung für das Schachbrettgitter	175
5.28	AFM-Messung des Schachbrettgitters	176
5.29	Parametrisierung der BLACES	177
5.30	AFM-Messung der BLACES	177

Tabellenverzeichnis

1.1	Vergleich zwischen Vorausberechnung und iterativem Lösungsverfahren	9
3.1	Komplexität des RCWA-Algorithmus	104
4.1	Beugungseffizienzen des betrachteten Volumengitters	113
4.2	Klassifikation der inversen Messverfahren nach der PTB	128
5.1	Ergebnis der Montecarlo-Simulation	157
5.2	Rekonstruierte Gitterparameter Fotolackgitter	165
5.3	Rekonstruierte Gitterparameter Quarzgitter	169
5.4	Vergleich AFM - Rekonstruktion: Füllfaktor	169
5.5	Vergleich Transmissions- und Reflexionsmessung	170
5.6	Rekonstruierte Gitterparameter der zweidimensionalen Fotolackgitter	172
5.7	Rekonstruierte Parameter der zweidimensionalen Schachbrettgitter	174
5.8	Vergleich der rekonstruierten Parameter mit AFM-Messungen	176
5.9	BLACES - Vergleich Rekonstruktion und AFM	178

Danksagung

Die Zeit als Doktorand am Lehrstuhl für Optoelektronik an der Universität Mannheim und in der Abteilung Optik Design und Simulation der Carl Zeiss SMT AG in Oberkochen war für mich eine sehr schöne und lehrreiche Zeit. Die vielfältigen Fragestellungen aus Wissenschaft und Industrie boten mir die Möglichkeit mich sowohl fachlich, als auch persönlich weiter zu entwickeln. Mein Dank gilt daher allen, die mich auf diesem Weg unterstützt haben.

Zunächst möchte ich mich bei Prof. Dr. Karl-Heinz Brenner für die hervorragende Betreuung und Unterstützung der Arbeit bedanken. Seine fast unerschöpflichen Ideen trugen mit zu den Ergebnissen dieser Arbeit bei, außerdem bedanke ich mich für die interessanten Diskussionen zu den verschiedensten Themengebieten. Ihm habe ich es zudem zu verdanken, dass ich mich für diese Promotion entschieden habe und dass der Kontakt zur Carl Zeiss SMT AG erfolgreich zu Stande kam.

Professor Dr. Wolfgang Osten danke ich für das Interesse an meiner Arbeit und die nicht selbstverständliche Bereitschaft das Zweitgutachten der Arbeit anzufertigen.

Ganz herzlich bedanken möchte ich mich auch bei meinen Betreuern bei der Carl Zeiss SMT AG, an erster Stelle bei Dr. Jochen Hetzler, der mich während meiner ganzen Promotionszeit unterstützt und begleitet hat. Nicht weniger gilt mein Dank auch Dr. Michael Totzeck, der mir ebenfalls fördernd zur Seite stand. Außerdem möchte ich bei Dr. Bernd Dörband für seine Betreuung und Unterstützung bei den experimentellen Untersuchungen bedanken.

Für den Aufbau und die Untersuchungen des experimentellen Messaufbaus im Rahmen seiner Diplomarbeit bedanke ich mich sehr bei Thomas Leikert, sowie bei Merit Jansen für die im Rahmen ihrer Masterarbeit durchgeführten Arbeiten zur Messung der höheren Beugungsordnungen. Beide haben mit ihren Arbeiten zu den Ergebnissen dieser Dissertation beigetragen.

Mein weiterer Dank gilt allen Kollegen des Lehrstuhls für Optoelektronik und der Abteilung Optik Design und Simulation, die mich bei meiner Arbeit unterstützt haben. Besonders bedanken möchte ich mich bei Hanna Jödicke für die lehrreichen Diskussionen zur RCWA, bei Xiyuan Liu für die Mithilfe bei der Herstellung der Beugungsgitter, bei Wolfgang Stumpfs für verschiedenste mechanische Anfertigungen und für so manche Ablenkung vom Arbeitsalltag, bei Konstanze Bogumil und Estelle Bauer für die Unterstützung bei der Planung und Realisierung des experimentellen Aufbaus, bei Harald

Bihlmeier für die Anfertigung diverser Teile für den Aufbau, bei Dr. Johannes Ruoff und Dr. Bernd Kleemann für die Anregungen zur rigorosen Simulation und nicht zuletzt bei Markus Mützel für das Korrekturlesen der Arbeit.

Außerdem bedanke ich mich bei der Carl Zeiss SMT AG für die Finanzierung der Arbeit, sowie bei meinem Chef Wilhelm Ulrich für seine Unterstützung und für die Möglichkeit eine Promotion bei der Carl Zeiss SMT AG durchzuführen.

Nicht zuletzt geht ein ganz lieber Dank an meine Familie, die mich bei meiner Arbeit unterstützt und begleitet hat, insbesondere auch an meine Frau Katharina. Sie hat mich immer wieder motiviert und mir mit so manch germanistischem Wissen bei der Korrektur der Arbeit weitergeholfen.

Aalen, im September 2008

Bastian Trauter