

# 基于时域有限差分方法的点衍射波前误差分析

陈 琛 杨甬英 王道档 卓永模

(浙江大学现代光学仪器国家重点实验室, 浙江 杭州 310027)

**摘要** 小孔的直径影响小孔衍射波前的误差,进而会影响点衍射干涉(PDI)检测的精度。基于矢量衍射理论中的时域有限差分(FDTD)方法,精确分析了可见光情况下衍射小孔直径接近以及小于入射光波长时所对应的衍射波前相对于标准球面波的偏离误差。数值仿真结果表明,当小孔的直径为 400 nm 时,所对应的数值孔径为 0.65 的衍射波前的误差峰谷值小于 1 nm,而误差均方根值小于 0.35 nm。随着小孔尺寸的减小,其衍射波前的误差进一步减小。仿真结果原理上验证了小孔点衍射干涉方法用于实现大数值孔径球面的高精度检测的可行性,并为实际检测中点衍射小孔尺寸的选择提供了精确的数值依据。

**关键词** 光学测量;点衍射干涉检测;时域有限差分法;波前误差;矢量衍射

**中图分类号** O436.1 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201138.0908003

## Analysis of Point-Diffraction Wavefront Error Based on Finite Difference Time Domain Method

Chen Chen Yang Yongying Wang Daodang Zhuo Yongmo

(State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou, Zhejiang 310027, China)

**Abstract** The dimension of pinhole affects the error of diffraction wavefront, which is the critical element that determines the precision of point diffraction interferometer (PDI). The deviation of diffracted wavefront from an ideal sphere at visible wavelength, which is aroused by the dimension of the pinhole, is numerically analyzed based on the finite difference time domain (FDTD) method. The simulation results show that the peak-to-valley (PV) value of diffraction wavefront error is less than 1 nm and the root mean square (RMS) value is less than 0.35 nm when the diameter of pinhole is 400 nm and numerical aperture (NA) is 0.65. The high precision of testing spherical surfaces with high NA is demonstrated. The analysis of point-diffraction wavefront error with FDTD method provides theoretical basis for choosing the dimension of pinhole in experiments and tests with PDI.

**Key words** optical measurement; point diffraction interferometry; finite difference time domain; diffraction wavefront error; vector diffraction

**OCIS codes** 120.3180; 120.4640; 120.5050; 260.1960

## 1 引 言

随着光学技术的不断发展以及光学元器件加工精度的提高,对于光学面形检测精度提出了越来越高的要求,其中光学球面检测是一个非常重要的领域。现有商用干涉仪基本都是利用标准面产生参考球面波进行干涉检测,检测精度主要受限于标准面的精度,其球面检测精度一般只能达到均方根(RMS)值为  $\lambda/50 \sim \lambda/100$  量级。而用于光刻机中的镜片,对其球面的面形精度有着很高的要求。为

了进一步提高检测精度,需要更高精度的参考球面波。点衍射干涉(PDI)技术<sup>[1~6]</sup>使用点衍射的方法得到误差非常小的球面波作为参考波前,从而实现更高精度的测量。

点衍射干涉技术的精度限制主要来自两个方面,即参考球面波的误差和系统的结构误差,其中系统的结构误差可以被精确地测量并加以校正<sup>[7]</sup>。因而小孔衍射波前的误差,即作为参考波前的小孔衍射波前相对于标准球面波的偏差,就直接制约着点

收稿日期: 2011-02-24; 收到修改稿日期: 2011-05-03

作者简介: 陈 琛(1987—),男,硕士研究生,主要从事光学精密检测方面的研究。E-mail: chenchentz@gmail.com

导师简介: 杨甬英(1954—),女,教授,博士生导师,主要从事光学精密检测方面的研究。E-mail: chuyyy@zju.edu.cn (通信联系人)。

衍射干涉技术的检测精度<sup>[8]</sup>,这也凸显了研究小孔衍射波前误差的重要性。对于可见光波长,可基于标量衍射理论<sup>[9]</sup>对小孔衍射波前误差进行分析,但该方法只适用于小孔直径大于几个入射光波长的场合<sup>[10]</sup>,以满足标量衍射理论的近似条件;同时,该方法只适用于检测数值孔径(NA)小于0.6的球面<sup>[9]</sup>。研究小尺寸小孔衍射产生的大数值孔径的衍射波前误差时,则需要使用非近似的矢量衍射理论进行精确的仿真分析。Otaki等<sup>[11]</sup>提出运用严格耦合波理论(RCW)对可见光波长的小孔衍射波前误差进行分析,但该方法在计算小孔衍射近场分布时,将一定周期的光栅近似为小孔,这一近似过程会影响仿真结果的精确性;同时在三维情况下,由于这一近似所导致的仿真结果偏差很难控制,所以该方法不适用于三维分析。

为了精确分析可见光情况下的小孔衍射波前误差,本文基于矢量衍射理论中的时域有限差分(FDTD)方法,利用自行编写的 Matlab 程序对小孔衍射波前误差进行仿真分析,并研究了小孔直径接近以及小于入射光波长 $\lambda$ 情况下的大数值孔径(NA大于0.6)衍射波前误差。通过与文献[9]中基于标量衍射理论和文献[11]中 RCW 方法的仿真结果的对比,验证了仿真结果的有效性。通过本文的分析研究,可为设计用于大数值孔径球面高精度检测的点衍射干涉系统提供重要的指导以及精确可靠的定量参考依据。

## 2 理论分析及仿真模型

点衍射干涉检测装置有多种实现形式,图1为较常见的形式之一。激光器输出光经过显微镜聚焦到小孔上,经过小孔的衍射产生衍射球面波。该

装置中把衍射波面分成两个部分,一部分用作检测光 $W_1$ ,一部分用作参考光 $W_4$ 。检测光路返回的光 $W_2$ 在小孔附近反射后形成 $W_3$ , $W_3$ 和 $W_4$ 汇合,经过成像透镜由 CCD 接收干涉条纹。由于经过显微镜物镜汇聚的激光高斯光束的束腰尺寸远远大于所研究小孔的直径,所以入射到小孔上的光波可以看成是平面波<sup>[10,12]</sup>。

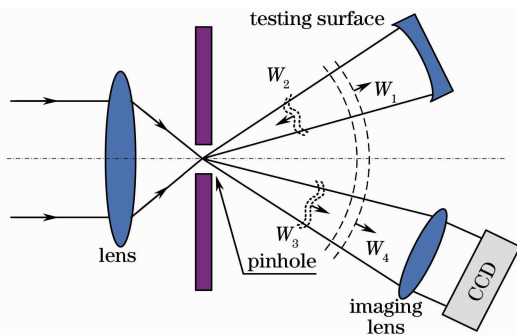


图1 点衍射干涉测量示意图

Fig. 1 Principle of point diffraction interferometer

基于矢量衍射理论中的 FDTD 方法分析小孔点衍射波前误差的流程图如图2所示<sup>[13~15]</sup>。考虑到计算机内存容量以及仿真时间等因素的限制,FDTD数值仿真并不适合直接仿真远场的电磁波分布。首先利用 FDTD 方法分析小孔衍射,得到小孔衍射的近场分布。计算小孔衍射波前的近场分布时所用的 FDTD 方法是利用时间和空间上的离散差分,数值求解麦克斯韦方程组,得到空间的电场和磁场分布。在满足 FDTD 数值计算的稳定性条件的情况下,利用 FDTD 方法可以得到非常精确的仿真结果。第二步,根据所得到的近场分布,利用基于惠更斯原理的近场远场变换方法<sup>[16]</sup>,得到实际所需位置处的衍射波前分布(远场)。第三步,对远场波前进行泽尼克多项式拟合,去除平移、倾斜、离焦,得到

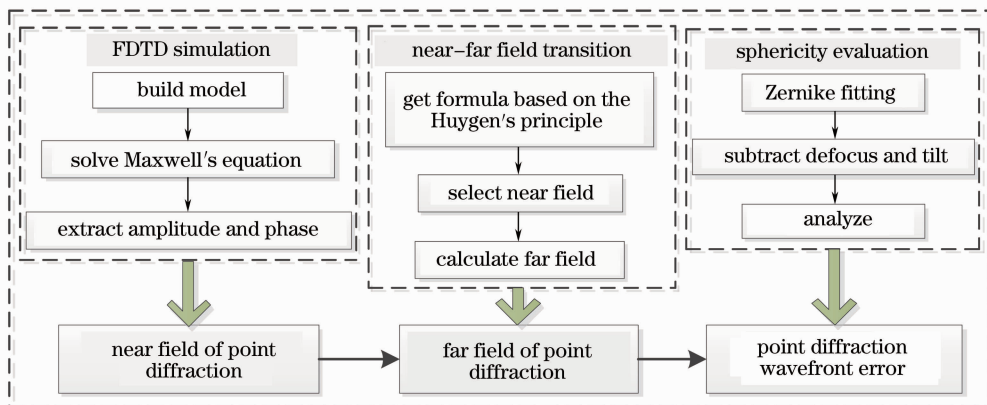


图2 小孔衍射波面 FDTD 仿真流程图

Fig. 2 Flow diagram of FDTD solution of pinhole diffraction

远场波前与标准球面波的偏差,即小孔衍射远场波前的误差。

实验中使用的的小孔通过聚焦离子束(FIB)技术在 Cr 膜上加工而成。图 3 为实际加工直径为  $1\ \mu\text{m}$  的小孔扫描电镜(SEM)照片,经分析,其对应的圆度误差仅为  $9\ \text{nm}$ ,因而可以忽略小孔圆度误差对于衍射波前的影响。根据实际检测情况和仿真流程,建立如图 4 所示的仿真模型。利用 FDTD 仿真计算平面波入射到小孔的衍射波前的近场分布,并且 FDTD 仿真小孔衍射波前的近场区域的四周采用完全匹配层(PML)作为吸收边界吸收外向散射的光波,再根据惠更斯原理和近场的衍射波前可以计算得到远场的波前分布。

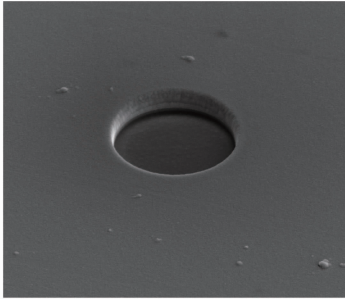


图 3 直径为  $1\ \mu\text{m}$  小孔的扫描电镜照片

Fig. 3 SEM photo of pinhole with  $1\ \mu\text{m}$  diameter

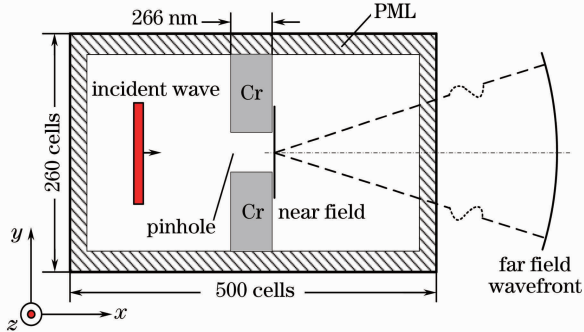


图 4 小孔衍射波前的仿真模型

Fig. 4 Simulation model of pinhole diffraction

### 3 仿真结果及分析

#### 3.1 数值仿真

基于如图 4 所示的仿真模型,用光波  $\lambda=532\ \text{nm}$  的平面波作入射光波进行仿真。基于 FDTD 仿真的 Courant 稳定条件及数值色散的要求,并根据本文所仿真的小孔的直径等条件,确定 FDTD 仿真的空间步长为  $\lambda/40$ ,所选取的时间步长  $\Delta t = \Delta x/(2c)$ ,其中  $\Delta x$  为空间步长, $c$  为真空中的光速。仿真区域的总大小为  $x$  方向上 500 个空间步长, $y$

方向上 260 个空间步长。所用的小孔 Cr 基底厚度为 20 个空间步长,即  $266\ \text{nm}$ 。PML 吸收边界的总厚度为 8 个空间步长,正入射时反射率为  $10^{-7}$ ,最大电导率为  $6.03 \times 10^5\ \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ 。通过以上参数设置,分析了小孔的直径接近及小于入射光波长  $\lambda$  的小孔衍射波前误差。

根据图 2 所示的仿真流程图,首先计算得到稳定的近场分布。以直径为  $500\ \text{nm}$  的小孔衍射为例,得到对应的近场振幅和相位分布如图 5 所示。从图 5(a)可以看出,小孔衍射波前的主要能量都集中于艾里斑的范围内;从图 5(b)可以看出,在近场的情况下,其相位的分布非常理想,接近于理想的球面波。从小孔衍射波前的近场振幅和相位分布情况可知,如采用图 1 所示的点衍射检测装置进行检测,必须使得小孔的直径足够小以使待检球面镜和干涉成像部分都置于艾里斑的范围内。对于被检球面镜具有较大数值孔径的情况,要求艾里斑的孔径要足够大,也就要求小孔的直径进一步减小。

被检球面的曲率半径为  $500\ \text{mm}$ ,根据图 1 所示的点衍射检测装置可知,需要得到距离小孔  $500\ \text{mm}$  处的远场衍射波前的误差。所以再根据基于惠更斯原理的近场远推方法,研究小孔远场波前误差;然后对远场波前进行泽尼克多项式拟合及对比分析,得到远场波前的误差。得到对于小孔的直径为  $300, 500, 700\ \text{nm}$  的小孔衍射波前误差的 RMS 值与衍射波前的数值孔径之间的对应关系曲线,如图 6 所示。从图 6 可知,对于  $500\ \text{nm}$  直径的衍射小孔,其在 NA 为  $0.4$  范围内的衍射波前误差 RMS 值小于  $0.07\ \text{nm}$ ,并且所对应的衍射波前误差 RMS 随着 NA 的增大而增大;而当 NA 一定时,衍射波前误差则随着小孔直径的增大而增大。从图 6 中也可以

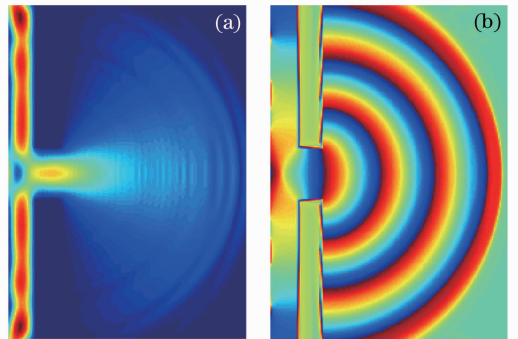


图 5 直径为  $500\ \text{nm}$  的小孔衍射波前近场分布  
(a)振幅分布;(b)相位分布

Fig. 5 Diffraction wavefront from a pinhole with  $500\ \text{nm}$  diameter. (a) Amplitude; (b) phase

看出,对较大数值孔径的球面进行高精度检测时,需要选取直径较小的小孔。

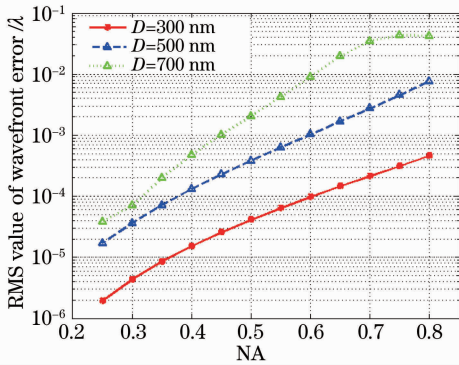


图 6 衍射波前误差(RMS)与衍射波前 NA 的关系

Fig. 6 Wavefront error (RMS) versus NA

另外分析了衍射波前的数值孔径同为0.65时不同直径的小孔所对应的衍射波前误差的关系曲线,如图7所示。从图7可以看出,在小孔的直径为200~800 nm 范围内时,所对应的衍射波前误差随着小孔尺寸的减小而减小。其中,直径为400 nm 的小孔对应的衍射波前误差的峰谷(PV)值小于1 nm,而其RMS值小于0.35 nm。若要求点衍射干涉检测精度的RMS值达到 $\lambda/200$ ,则可以使用该小孔的衍射波前作为参考波前,并且该衍射波前可以视为理想球面波,满足作为高精度点衍射干涉检测中参考波面的精度要求。

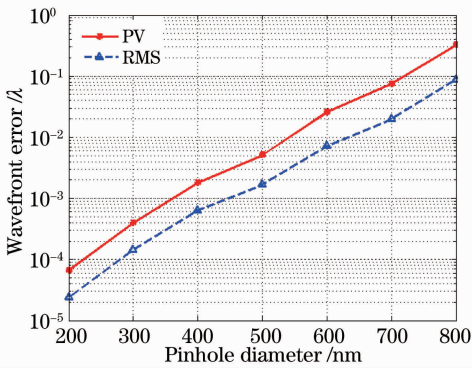


图 7 衍射波前误差与小孔直径的关系

Fig. 7 Wavefront error versus diameter of pinhole

但从FDTD仿真的近场强度可以发现,小孔直径的减少使得衍射光的能量明显减弱。选择直径过小的孔,对激光的功率、膜层的质量提出了更高的要求,也会导致实验调整装置更加复杂。所以应根据图7中不同直径的小孔与衍射波前误差的关系以及实际检测要求的精度选择合适的小孔尺寸。

从小孔的直径与所对应的衍射波前误差的对应关系,可以发现小孔起到很好的整形滤波的作用,使

其衍射波前接近于理想的球面波。而研究表明,除了整形滤波的功能外,小孔也起到波导的作用<sup>[17,18]</sup>。仿真分析了小孔厚度(即镀Cr膜厚度)对小孔衍射波前质量的影响。实际所用小孔的膜层厚度在150~350 nm 范围内,在该范围中均匀选取8个不同的厚度进行了仿真分析,仿真得到的远场波前误差如表1所示。分析结果表明,对于小孔直径为400 nm 的小孔,所对应的NA为0.65的衍射波前误差的RMS值变化很小,在均值 $6.223 \times 10^{-4} \lambda$ 上下浮动,波动幅度小于5%。由此可知,小孔的膜层厚度在150~350 nm 范围内小幅度变化,对其衍射波前误差的影响很小。

表 1 衍射波前误差与膜层厚度的关系

Table 1 Wavefront error versus film thickness

Film thickness / ( $\lambda/40$ )	RMS / ( $10^{-4} \lambda$ )
12	6.190
14	5.963
16	5.992
18	6.336
20	6.424
22	6.219
24	6.215
26	6.447

### 3.2 仿真有效性分析

经过显微物镜会聚的激光高斯光束的束腰尺寸远远大于所研究小孔的直径,入射到小孔上的光波可以看成是平面波<sup>[10,12]</sup>。为了验证该等效的有效性,仿真分析了在束腰尺寸为 $4\lambda(2.128 \mu\text{m})$ 的高斯光束入射情况下的小孔衍射波前误差,以直径为400 nm 的小孔为例,其对应数值孔径0.65的远场衍射波前的误差为 $6.477 \times 10^{-4} \lambda$ 。对比分析了相同情况下平面波入射的小孔衍射波前误差,对应误差为 $6.424 \times 10^{-4} \lambda$ ,两者相差很小。验证了当高斯光束的束腰尺寸为 $4\lambda$ 时,可以把高斯光束等效成平面波处理。

为了验证仿真分析结果的有效性,将本文提出的分析方法与文献[9]中基于标量衍射理论的方法以及文献[11]中基于RCW的方法进行了仿真结果对比。具体的仿真参数为:衍射波前NA为0.6,远场位置为100 mm,小孔的直径范围为 $0.5\lambda \sim 1.2\lambda$ ,得到其对比结果如图8所示。

从图8可以看出,在小孔的直径接近以及小于入射光波长的情况下,标量衍射理论的仿真结果明显偏离矢量衍射理论的仿真结果,验证了标量衍射理论在该情况下的无效性。而基于FDTD方法和

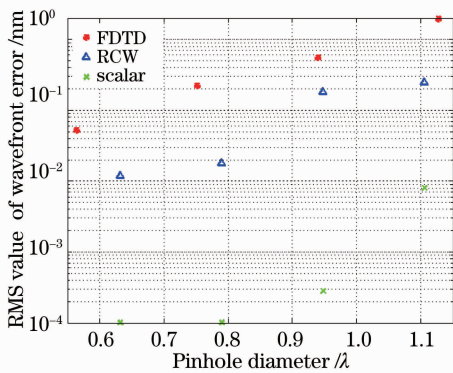


图 8 不同分析方法的衍射波前误差比较

Fig. 8 Comparison of wavefront errors of different simulation methods

基于 RCW 方法的仿真结果比较接近,相变量基本在同一个数量级之内,并且变化的趋势也都是相同的。从两者的比较可以发现,FDTD 方法所得到的的小孔衍射波前的误差偏大,证明该方法得到的结果相对保守,因而将 FDTD 方法得到的仿真结果作为实际点衍射干涉系统设计的指导数据更为可靠。

## 4 结 论

基于矢量衍射理论中的 FDTD 方法,针对可见光情况下的小孔衍射波前误差的分析,提出了相应的仿真模型,并对大数值孔径(NA 大于 0.6)的小孔衍射波前误差进行了仿真分析。结果表明,在数值孔径为 0.65 的情况下,小孔衍射波面误差的 RMS 值可以达到  $10^{-4}\lambda$ ,证明了在大数值孔径时,小孔衍射波前非常接近标准的球面波,可以作为点衍射干涉检测中的参考球面,并实现高精度检测;虽然随着小孔直径的进一步减小,其所对应的衍射波前误差也会变小,但是由于小孔尺寸变小会导致衍射光能量减小,从而提高对激光器输出光功率以及膜层质量的要求,并加大实际操作中的调整难度等,所以进行高精度点衍射干涉测量时,应先确定所要测量器件的数值孔径及所要求的检测精度,再根据衍射波前误差与小孔直径的关系,寻找尺寸合适的小孔。通过仿真分析,验证了使用点衍射干涉方法实现大数值孔径球面高精度检测的有效性,并为点衍射干涉检测系统的设计提供了精确的数据支持。

## 参 考 文 献

1 R. N. Smartt, W. H. Steel. Theory and application of point-diffraction interferometers[J]. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1975, **14**(suppl. 14-1): 351~356

2 G. Y. Wang, Y. L. Zheng, A. M. Sun *et al.*. Polarization pinhole interferometer[J]. *Opt. Lett.*, 1991, **16**(17): 1352~1354

3 Q. Gong, J. M. Geary. Modeling point diffraction interferometers[J]. *Opt. Engng.*, 1996, **35**(2): 351~356

4 Q. Gong, W. Eichhorn. Alignment and testing of piston and aberrations of a segmented mirror[C]. *SPIE*, 2005, **5869**: 273~282

5 J. E. Millerd, S. J. Martinek, N. J. Brock *et al.*. Instantaneous phase-shift point-diffraction interferometer [C]. *SPIE*, 2004, **5380**: 422~429

6 R. M. Neal, J. C. Wyant. Polarization phase-shifting point-diffraction interferometer [J]. *Appl. Opt.*, 2006, **45** (15): 3463~3476

7 P. Naulleau, K. A. Goldberg, S. H. Lee *et al.*. The EUV phase-shifting point diffraction interferometer [C]. *AIP Conf. Proc.*, 2000, 66~72

8 P. Naulleau, K. A. Goldberg, S. H. Lee *et al.*. Characterization of the accuracy of EUV phase-shifting point diffraction interferometry[C]. *SPIE*, 1998, **3331**: 114~123

9 Ma Qiang, Liu Weiqi, Li Xiangbo *et al.*. Analysis of diffraction wavefront error in point diffraction [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(12): 2321~2324

马 强,刘伟奇,李香波 等. 点衍射干涉仪中小孔衍射波面误差分析[J]. *光学学报*, 2008, **28**(12): 2321~2324

10 Deng Xiaojun, Li Huanlong, Liu Caixia *et al.*. A comparative study of vectorial diffraction theories and the validity of scalar approximation[J]. *Chin. J. Quantum Electron.*, 2007, **24**(5): 543~547

邓小玖,李环龙,刘彩霞 等. 矢量衍射理论的比较及标量衍射近似的有效性[J]. *量子电子学报*, 2007, **24**(5): 543~547

11 K. Otaki, Y. Zhu, M. Ishii *et al.*. Rigorous wavefront analysis of visible-light point diffraction interferometer for EUVL [C]. *SPIE*, 2004, **5193**: 182~190

12 Zhou Wanzhi, Lu Zhenwu. A point-diffraction holographic interferometer[J]. *Acta Optica Sinica*, 1986, **6**(12): 1130~1135

周万治,卢振武. 点衍射全息干涉[J]. *光学学报*, 1986, **6**(12): 1130~1135

13 Lu Zengxiong, Jin Chunshui, Zhang Lichao *et al.*. Wave-front quality analysis of three-dimension pinhole vector diffractonal in extreme ultraviolet region [J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(10): 2849~2854

卢增雄,金春水,张立超 等. 极紫外三位小孔矢量衍射波面质量分析[J]. *光学学报*, 2010, **30**(10): 2849~2854

14 K. A. Goldberg, E. Tejnli, J. Bokor. A 3-D numerical study of pinhole diffraction to predict the accuracy of EUV point diffraction interferometry [J]. *Vol. 4 to OSA Trends in Optics and Photonics*, 1996. 133~137

15 Yoshiyuki Sekine, Akiyoshi Suzuki, Masanobu Hasegawa *et al.*. Wavefront errors of reference spherical waves in high-numerical aperture point diffraction interferometers [J]. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 2004, **22**(1): 104~108

16 J. A. Kong. *Electromagnetic Wave Theory* [M]. New York: John Wiley & Sons, 1986. 380~382

17 Yang Jingjing, Huang Ming, Wu Zhongyuan *et al.*. Optical resonance for subwavelength Ag particle/hole [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(5): 1379~1383

杨晶晶,黄 铭,吴中元 等. 亚波长银粒子/孔的光谱振特性[J]. *光学学报*, 2009, **29**(5): 1379~1383

18 Zeng Xiahui, Fan Dianyan, Zhou Ping. Field distributions and transmission property inside a conical waveguide with a sub-wavelength-sized exit hole [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(6): 1487~1492

曾夏辉,范滇元,周 萍. 亚波长锥形波导的电磁场分布及传输特性[J]. *光学学报*, 2009, **29**(6): 1487~1492