

极紫外光栅波导中 TE₀ 模式有效折射率分析毛亚星¹, 曹清^{1*}, 程长杰¹, 朱吉瑞², 陈文轩³, 肖晓琳¹¹上海大学理学院物理系, 上海 200444;²浙江省杭州第七中学, 浙江 杭州 310024;³中国科学院上海光学精密机械研究所精密光学制造与检测中心, 上海 201800

摘要 将极紫外光刻掩模板的吸收层视为光栅波导, 对光栅波导的最低阶横电模式 (TE₀ 模式) 进行理论分析。根据光栅波导电场分布的对称性, 首先指出其电场分布应为双曲余弦函数 $\cosh(\cdot)$, 并提供了有效折射率的零阶近似值 $n_{\text{eff},0}$ 。利用有限元软件对 TE₀ 模式进行仿真, 然后将模拟结果与解析表达式计算结果进行对比, 验证理论猜测的准确性。在吸收材料为金和银的情况下, 零阶近似值 ($n_{\text{eff},0}$) 的相对误差已分别小至 0.75% 和 0.96%。在此基础上, 进一步推导出了一个简单的适用于非亚波长光栅波导有效折射率 (n_{eff}) 的高阶迭代公式, 并用其来减小零阶近似的相对误差。数值模拟结果表明, 经过 7 次迭代后, 相对误差已减小到 0.11%; 经过 23 次迭代后, 相对误差小于 10^{-5} 。

关键词 物理光学; 极紫外; 光栅波导; 有效折射率; 零阶近似值; 高阶数值迭代

中图分类号 O436 文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL231520

1 引言

光刻是半导体工业中用于制造集成电路的核心技术之一, 其关键尺寸依赖于工作波长和数值孔径^[1-2]。目前最前沿的光刻技术是极紫外 (EUV) 光刻^[3-4], 其中 13.5 nm 波长^[5-6] 的 EUV 光源已在高数值孔径光刻技术^[7-10] 中得到了理论和实验验证。传统 EUV 光刻掩模的衍射特性需要根据吸收层图案产生的相位或强度进行分析^[11-12], 但是由于吸收层的高度约为 EUV 曝光波长的 10 倍^[13], 因此有必要在吸收层严格求解麦克斯韦方程组。时域有限差分法 (FDTD)^[14-15]、伪时域法 (PSTD)^[16-17]、严格耦合波分析法 (RCWA) 和模式法^[18-22] 在衍射光栅和其他周期性结构分析中均得到了广泛应用。随着集成电路尺寸的减小, 基于严格建模的波导法^[23-27] 被提出。对于周期性掩模结构, 波导法在收敛性和速度优化方面具有显著优势。在 EUV 光刻成像系统中, 入射光倾斜入射时会出现与阴影效应相关的图像尺寸偏差、图形位置偏移等现象; 同时, 吸收层材料也会影响阴影效应, 当复折射率较大时, 产生的阴影效应更加显著^[28-30]。为保证成像质量, 可以通过校正掩模图形尺寸以及调整掩模物面离焦量或者优化吸收层材料来改善阴影效应^[31-32]。Yeung 等^[9,33] 首次在数值模拟中观察到了波导效应, 并解释了高数值孔径 EUV 光刻中的波导效应, 成功地将 EUV 光刻扩展到 4 nm 技术节点。但是, 他们将吸收层的电场分布视为与平行平板波导相似的电场分布, 忽略了吸收层的

周期性结构排布。

笔者将吸收层视为在 x 轴方向具有周期性的光栅波导, 并根据对称性计算得到了 TE₀ 模式的电场分布函数以及有效折射率的零阶近似值。为了验证所给出的零阶近似值的精确度, 选择包层材料为金 (Au) 和银 (Ag), 利用 COMSOL Multiphysics 有限元软件分别进行仿真, 对有效折射率零阶近似值的精确度进行数值分析。然后, 根据边界条件推导出光栅波导的本征方程, 得到了高精度的 TE₀ 模式有效折射率 n_{eff} 简单迭代公式。最后, 在具体实例中利用迭代法进行计算, 结果表明迭代公式在较少的迭代次数内可更进一步减小零阶近似值的相对误差, 从而验证了该迭代公式的准确性。

2 光栅波导 TE₀ 模式有效折射率的零阶近似值

考虑到吸收层的周期性, 将其看作是光栅波导。为充分认识光栅波导的模式特征, 需要探讨波导模式有效折射率与结构参数之间的联系。因此, 笔者利用 COMSOL 软件进行模拟, 并分析最低阶横电模 (即 TE₀ 模式) 的有效折射率。

EUV 掩模结构如图 1(a) 所示, 其由反射多层膜和吸收层组成, 吸收层沉积在反射多层膜的顶部。图中 H 为光栅波导的厚度, d 为狭缝宽度, n_{core} 和 n_{clad} 分别是芯层和包层 (吸收层) 材料的折射率。在 EUV 波段, 由于固体材料的强吸收, 材料的折射率是小于 1.0 的复

收稿日期: 2023-12-12; 修回日期: 2024-01-16; 录用日期: 2024-01-22; 网络首发日期: 2024-02-04

通信作者: *qcao@shu.edu.cn

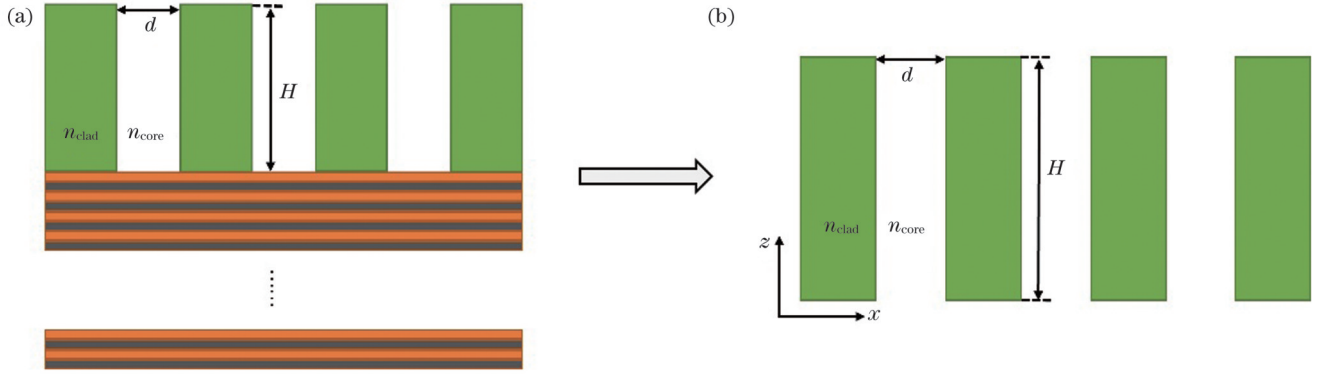


图1 EUV掩模及光栅波导示意图。(a)吸收层(绿色)在 x 方向呈周期性排布并堆积在由钼和硅组成的反射多层膜(橙色和黑色)上;(b)将反射多层膜去除后,可将吸收层看作光栅波导结构

Fig. 1 Schematics of EUV mask and grating waveguide. (a) Absorber (green) is periodically arranged along x direction and piled on multilayer (ML) film composed by Mo and Si (orange and black composite layers); (b) the absorber can be considered as a grating waveguide structure after removing the ML film

数,因此在 EUV 波段折射率最高的介质是真空^[34],则 $n_{\text{core}} = 1$ 。图 1(b)所示的光栅波导被视为在 x 方向呈周期排布的波导阵列^[35]。

对于亚波长周期性结构,可用有效介质理论^[36-37]来分析其有效折射率,但在处理非亚波长结构时有效介质理论不再适用。光栅波导是由两种材料(芯层和包层材料的折射率分别为 n_{core} 和 n_{clad})周期性排列组成的,而且非铁磁性材料的介电常数 $\epsilon(x)$ 与材料折射率满足公式 $\epsilon(x) = n(x)^2$,即材料折射率是关于 x 的函数。根据量子力学中平均值的概念^[38],笔者将有效折射率表示为折射率在不同区域的统计平均值。因此,将 n_{eff} 表示为

$$n_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{\int_{-A/2}^{A/2} \epsilon(x) |E(x)|^2 dx}{\int_{-A/2}^{A/2} |E(x)|^2 dx}}, \quad (1)$$

式中: $E(x)$ 为 TE_0 模的模式场; A 为光栅周期。

为了更好地分析和理解掩模的衍射效应,可以分别模拟反射多层膜和吸收层中的电场^[39]。在本研究中,笔者主要分析吸收层的波导效应,如图 2 所示,其中 α 是电场分布拟合函数中的参数,对于 a 、 b 、 c 三条曲线,其值分别为 0、1/2 和 1。将 TE_0 模的模式场表示为 $E(x)$,其忽略了共同因子 $\exp(-j\omega t)$ 以及纵向传播因子 $\exp(-j\beta z)$ 。其中 ω 为角频率, $j = \sqrt{-1}$, $\beta = k_0 n_{\text{eff}}$ 为 TE_0 模式的传播常数, $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ 为波数, λ_0 为入射波长。

将包层的中心设置为坐标原点, A 表示光栅周期,曲线 a 、 b 、 c 分别表示不同的电场分布。根据曲线的线型,光栅波导电场分布的拟合函数可以表示为

$$E(x) = x^\alpha. \quad (2)$$

曲线 d 是通过 COMSOL 仿真得到的光栅波导的电场分布,其对应的 α 的范围为 (0, 1)。

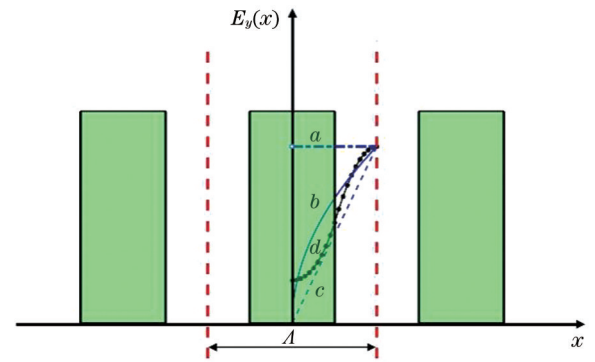


图2 光栅波导简化示意图。曲线 a (蓝色点划线)、 b (蓝色实线)、 c (蓝色虚线) 分别表示 α 不同时的电场分布,曲线 d (黑色点线) 表示光栅波导的电场分布,黑色实线为芯层和包层的边界,红色虚线为每个周期的分界线

Fig. 2 Simplified schematic of grating waveguide. The curves a (blue dot-dash line), b (blue solid line) and c (blue dash line) represent different electric field distributions respectively, the curve d (black solid-dot line) represents the electric field distribution of grating waveguide, the black solid line represents the boundary of core and cladding layers, and the red dashed lines represent the boundary of each period

光栅波导中存在 TE 模式的传播,其只有三个场分量,其中电场分量 E_y 为主要分量, H_x 、 H_z 可以根据标量亥姆霍兹方程求解得到^[40]。对于图 2 所示的光栅波导,不同区域关于 E_y 的方程为

$$\frac{d^2}{dx^2} E_y - k_x^2 E_y = 0, \quad (3)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} E_y - \kappa_x^2 E_y = 0, \quad (4)$$

式中: k_x 和 κ_x 分别表示芯层和包层中 x 方向的波矢量分量。

分别求解式(3)和式(4)即可得到完整形式的空间场分布。求解式(3)时,考虑到芯层导波模的物理合理

性,其电磁场应表现为振荡性,即在 x 方向上呈驻波分布。对于包层,其电场分布与孤立平行平板波导包层的电场分布函数不同,应为相邻两周期包层电场分布的线性叠加,其中相邻两周期包层的模式场分别为指数衰减函数 $\exp(-\kappa_x x)$ 和指数增长函数 $\exp(\kappa_x x)$ 。因此,光栅波导各区域的电场分布函数应表示为

$$E_y(x) = \begin{cases} \cosh(\kappa_x x), & 0 < x < \frac{\Lambda}{4} \\ A \cos\left[k_x\left(x - \frac{\Lambda}{2}\right)\right], & \frac{\Lambda}{4} < x < \frac{\Lambda}{2} \end{cases}, \quad (5)$$

式中: A 为归一化系数。由于光栅波导结构和 TE_0 模式的对称性,式(5)以及后面的模拟均只有半个周期。 k_x 和 κ_x 可以基于标量亥姆霍兹方程获得,

$$k_x = k_0 \sqrt{n_{\text{core}}^2 - n_{\text{eff}}^2}, \quad (6)$$

$$\kappa_x = k_0 \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - n_{\text{clad}}^2}. \quad (7)$$

如图 2 所示,曲线 d 处于曲线 a 和 c 之间,且其线形与曲线 b 更为相似。为进一步分析光栅波导中 TE_0 模式的性质,首先假定曲线 d 的 $\alpha=1/2$,则依据式(1)以及式(5)可以计算得到 $n_{\text{eff},0}$ 的表达式为

$$n_{\text{eff},0} = \sqrt{\frac{3}{4}n_{\text{core}}^2 + \frac{1}{4}n_{\text{clad}}^2}, \quad (8)$$

式中: $n_{\text{eff},0}$ 下标中的 0 表示有效折射率的零阶近似值。为了验证理论假设的准确性,笔者利用 COMSOL 软件进行仿真,将计算得到的 TE_0 模式的有效折射率表示为 n_{sim} ,此即有效折射率的模拟值。

由于掩模板的吸收层可以看作是周期性光栅波导,因此在利用 COMSOL 软件进行模拟仿真时,将光栅波导用具有周期性边界条件的单个周期表示^[41]。对于含有 Mo/Si 多层膜的掩模板结构,入射光角度一般小于 6° 。当入射角过大时,反射率会急剧下降^[8],同时还会引起阴影效应^[42],进行 COMSOL 模拟时可认为是法向入射。其他模拟条件为^[9]: $H=100$ nm, $\lambda_0=13.5$ nm, $\Lambda=32$ nm, $d=16$ nm, $n_{\text{core}}=1$ 。分别选择金

和银两种不同的材料作为包层材料进行仿真,其折射率参数取自参考文献[43]。当包层材料为银时,材料折射率为 $n_{\text{Ag}}=0.853+0.07j$,有效折射率的模拟值 $n_{\text{sim,Ag}}=0.96133+0.00697j$ 。当包层材料为金时,材料折射率为 $n_{\text{Au}}=0.881135+0.044277j$,有效折射率的模拟值 $n_{\text{sim,Au}}=0.96556+0.00587j$ 。将理论值与模拟值之间的相对误差定义为 $\Delta_0=|n_{\text{eff},0}-n_{\text{sim}}|/|n_{\text{sim}}|$ 。两种材料的 $n_{\text{eff},0}$ 与 n_{sim} 之间的相对误差如表 1 所示,包层材料为金和银时有效折射率零阶近似值 $n_{\text{eff},0}$ 和模拟值 n_{sim} 之间的相对误差均小于 1%。

表 1 两种不同材料有效折射率零阶近似值的相对误差

Material	n_{sim}	$n_{\text{eff},0}$	$\Delta_0/\%$
Au	$0.96556+0.00587j$	$0.97145+0.01004j$	0.75
Ag	$0.96133+0.00697j$	$0.96484+0.01547j$	0.96

当 $\Lambda/\lambda_0 \approx 0$ 时,即为亚波长光栅时,若入射光垂直入射到光栅波导,则此时仅有零级衍射,可以利用零级有效折射率近似公式对入射 TE 光的光栅进行分析。有效折射率的零阶近似值与光栅的占空比有关,即

$$n_{\text{eff},0} = \sqrt{\frac{1}{2}n_{\text{core}}^2 + \frac{1}{2}n_{\text{clad}}^2}. \quad \text{当 } \Lambda/\lambda_0 \approx \infty \text{ 时,即芯层几乎覆盖全周期时,模式场几乎全部聚焦在芯层,零阶近似值应为 } n_{\text{eff},0} = \sqrt{n_{\text{core}}^2}.$$

本研究所选参数满足 $\Lambda/\lambda_0 \approx 2.37$, Λ/λ_0 处于 0 到 ∞ 之间,此时不满足以上两种极限情况,因此已有理论不再适用。 Λ/λ_0 处于两种极限情况之间,因此 n_{core}^2 前面的比例系数取 1/2 和 1 的中间值 3/4,此时零阶近似值为 $n_{\text{eff},0} = \sqrt{\frac{3}{4}n_{\text{core}}^2 + \frac{1}{4}n_{\text{clad}}^2}$ 。以上三种方法分析得到的两种材料的 $n_{\text{eff},0}$ 与模拟值之间的相对误差如表 2 所示。

表 2 三种方法有效折射率零阶近似值的相对误差

Table 2 Relative error of zero-order approximation value of three different methods

Material	Relative error / %		
	$n_{\text{eff},0} = \sqrt{n_{\text{core}}^2}$	$n_{\text{eff},0} = \sqrt{\frac{1}{2}n_{\text{core}}^2 + \frac{1}{2}n_{\text{clad}}^2}$	$n_{\text{eff},0} = \sqrt{\frac{3}{4}n_{\text{core}}^2 + \frac{1}{4}n_{\text{clad}}^2}$
Au	3.62	0.99	0.75
Ag	4.09	2.45	0.96

由表 2 可知,本文所用方法计算得到的 $n_{\text{eff},0}$ 与模拟值的相对误差均小于 1%,且精度最高。由于金和银材料的折射率差别不大,而且经过模拟发现金和银的场分布类似,因此选择材料金作为包层材料来进一步验证理论结果。

图 3 中,实线是将 $n_{\text{eff},0}$ 代入式(5)计算得到的理论结果,虚线是利用 COMSOL 软件模拟的电场结果。可见,两组结果的整体性相符,说明考虑吸收层的周期性得到的包层电场分布函数为 $\cosh(\cdot)$ 函数的准确性以及理论推导 $n_{\text{eff},0}$ 的可行性。

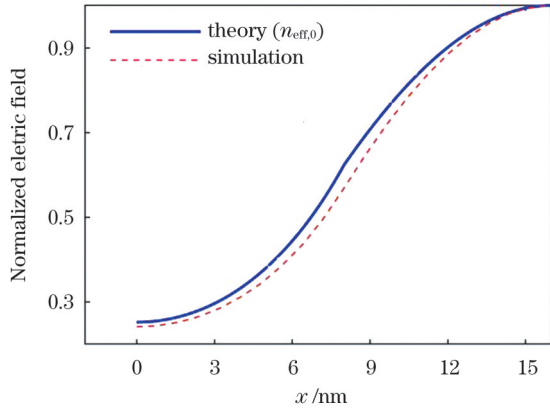


图3 光栅波导的理论和模拟电场分布,其中实线表示理论电场分布,虚线表示COMSOL软件模拟的电场分布

Fig. 3 Theoretical and simulated field distributions of grating waveguide, where the solid line represents the theoretical electric field distribution and the dashed line represents COMSOL simulated electric field distribution

3 更高精度的有效折射率迭代公式

接下来将推导一个更高精度的有效折射率简单迭代公式,并采用迭代法验证该公式的准确性。

根据边界条件, E_y 及其一阶偏导数连续,可以得到光栅波导的本征方程为

$$k_x \sin\left(k_x \frac{\Lambda}{4}\right) \cosh\left(\kappa_x \frac{\Lambda}{4}\right) = \kappa_x \sinh\left(\kappa_x \frac{\Lambda}{4}\right) \cos\left(k_x \frac{\Lambda}{4}\right). \quad (9)$$

将式(9)改写为

$$\tan\left(k_x \frac{\Lambda}{4}\right) = \frac{\kappa_x}{k_x} \tanh(\kappa_x x), \quad (10)$$

将式(6)和式(7)代入式(10),可以推导出经过 m 次迭代之后的有效折射率 $n_{\text{eff},m}$ 的表达式为

$$n_{\text{eff},m} \approx \sqrt{n_{\text{core}}^2 - \frac{16}{\Lambda^2 k_0^2} \left\{ \arctan\left[\frac{\kappa_{x,m-1}}{k_{x,m-1}} \tanh\left(\kappa_{x,m-1} \frac{\Lambda}{4}\right) \right] \right\}^2}, \quad (11)$$

式中: m 表示迭代次数, m 的取值范围为 $m \geq 1$ 。

作为一个特例,仍选择包层材料为金进行仿真。将式(11)作为迭代关系式,利用迭代法对 $n_{\text{eff},0}$ 进行迭代计算来进一步减小相对误差。定义 $n_{\text{eff},m}$ 的相对误差为 $\Delta_m = |n_{\text{eff},m} - n_{\text{sim}}|/|n_{\text{sim}}|$,其随迭代次数 m 增加的变化趋势如图4所示。

利用推导的迭代方程进行迭代计算。当迭代次数 $m=7$ 时,相对误差 Δ_7 减小到 0.11%,因此验证了推导得到的迭代公式可以显著减小相对误差。继续进行迭代计算,当 $m=23$ 时, $n_{\text{eff},23} = 0.96556 + 0.0058772j$,此时的相对误差 $\Delta_{23} < 10^{-5}$ 。这意味着,在误差范围内,随着迭代次数增加,迭代方法计算得到的 $n_{\text{eff},m}$ 可以收敛到COMSOL模拟值。

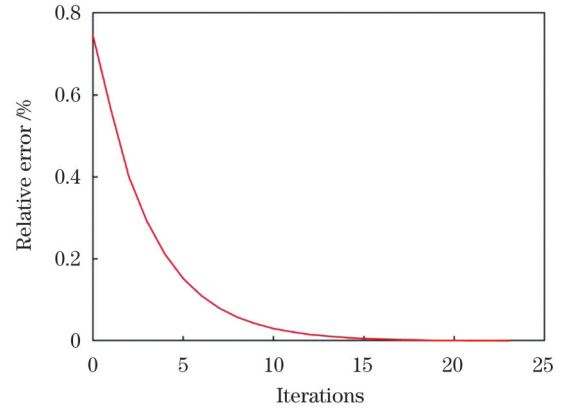


图4 相对误差随迭代次数的变化

Fig. 4 Relative error versus the number of iterations

为了进一步验证采用迭代公式计算得到的 $n_{\text{eff},23}$ 的精度,再次将理论与模拟场分布进行比较,结果如图5所示。可见,将经过迭代计算之后的 $n_{\text{eff},23}$ 代入式(5)得到的理论值与COMSOL模拟结果符合得非常好。因此,式(11)可以有效地描述光栅波导 TE_0 模式的有效折射率。

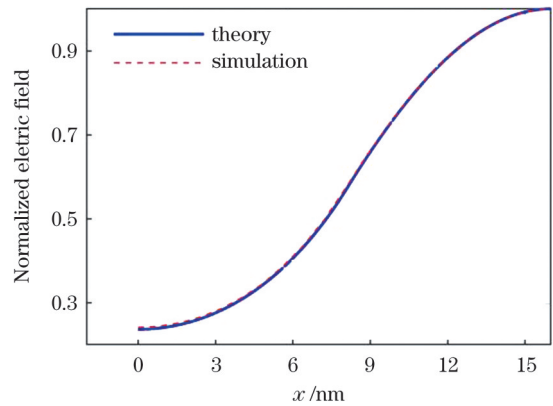


图5 光栅波导的理论和模拟电场分布,其中实线表示 $m=23$ 时的理论电场分布,虚线表示COMSOL模拟的电场分布

Fig. 5 Theoretical and simulated field distributions for grating waveguide, where the solid line represents the theoretical electric field distribution when $m=23$ and the dashed line represents COMSOL simulated electric field distribution

4 讨 论

式(1)是根据量子力学与统计物理方法给出的,并且在推导过程中进行了近似处理。接下来将详细推导式(1)及式(5)。

对于光栅波导,其中的传输模式均满足麦克斯韦方程组以及边界条件。所以,首先从麦克斯韦方程出发,利用式(12)所示的单色电磁波的基本方程进行推导。

$$\begin{cases} \nabla \times E = -j\omega\mu H \\ \nabla \times H = j\omega\epsilon E \end{cases}, \quad (12)$$

式中: μ 为磁导率; E 、 H 分别为电场强度和磁场强度。

光栅波导中 TE₀ 基模的模式场表示为 $E_y(x, z)$, 其标量形式的解为

$$E_y(x, z) = E_y(x) \exp(-jk_0 n_{\text{eff}} z). \quad (13)$$

对于 TE 模式, 只需要求解 E_y , 其他两个分量 H_x 和 H_z 的求解公式为

$$\begin{cases} \beta E_y = -\omega \mu H_x \\ \frac{\partial}{\partial x} E_y = -j\omega \mu H_z \\ j\beta H_x + \frac{\partial}{\partial x} H_z = -j\omega \epsilon E_y \end{cases}. \quad (14)$$

对于非铁磁性材料, 其磁导率 $\mu = 1$, 因此光栅波导不同区域关于 E_y 的方程满足

$$\nabla^2 E_y(x, z) + n^2 k_0^2 E_y(x, z) = 0. \quad (15)$$

将式(13)代入式(15), 整理可得

$$k_0^2 n_{\text{eff}}^2 E_y(x) = n^2 k_0^2 E_y(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} E_y(x). \quad (16)$$

对式(16)两边均左乘 $E_y^*(x)$ 并在一个周期内积分, 考虑到光栅波导材料的介电常数 $\epsilon(x)$ 是关于 x 的函数, 可得

$$k_0^2 n_{\text{eff}}^2 \int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} |E_y(x)|^2 dx = k_0^2 \int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} n(x)^2 |E_y(x)|^2 dx + \int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} E_y^*(x) \frac{\partial^2 E(x)}{\partial x^2} dx, \quad (17)$$

式(17)可改写为

$$n_{\text{eff}}^2 = \frac{\int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} \epsilon(x) |E_y(x)|^2 dx}{\int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} |E_y(x)|^2 dx} + \frac{\int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} E_y^*(x) \frac{\partial^2 E_y(x)}{\partial x^2} dx}{k_0^2 \int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} |E_y(x)|^2 dx}. \quad (18)$$

由于受到两个左右界面的反射, 芯层和包层内必然会形成两种方向的平面波, 则 $E(x)$ 的形式解为

$$\begin{cases} E_{y, \text{core}}(x) = \exp(-jk_x x) + \exp(jk_x x) \\ E_{y, \text{clad}}(x) = \exp(-\kappa_x x) + \exp(\kappa_x x) \end{cases}. \quad (19)$$

因此, 光栅波导各区域的电场分布函数应表示为

$$\begin{cases} E_{y, \text{core}} = \cos(k_x x) \\ E_{y, \text{clad}} = \cosh(\kappa_x x) \end{cases}. \quad (20)$$

由以上推导可知, 光栅波导芯层中的电场分布函数为余弦函数, 包层中的电场分布函数为双曲余弦函数。从而, 本研究给出了式(5)所示光栅波导在各层的电场分布函数。

$E_y(x)$ 及其一阶偏导数连续, 这与量子力学中具有概率统计意义的波函数的性质相似。因此, 将光栅波导中模式的有效折射率用式(18)来描述。但在实际应用时, 通常会式(18)右侧第二项舍掉。首先定性地

讨论其原因。由于 $k_x \ll n_{\text{core}}$, $\kappa_x \ll n_{\text{clad}}$, 而且该项的分子可以改写为

$$\int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} E^*(x) \frac{\partial^2 E(x)}{\partial x^2} dx = \kappa_x^2 \int_{\text{clad}} |E_{\text{clad}}(x)|^2 dx - k_x^2 \int_{\text{core}} |E_{\text{core}}(x)|^2 dx. \quad (21)$$

将芯层和包层电场分别代入式(21)进行计算, 由于式(21)等号右侧两项的系数符号相反, 两项可相互抵消, 因此式(21)近似为 0, 由此可得式(1)。

为进一步说明式(1)的准确性, 笔者继续进行定量分析。将 COMSOL 计算得到的光栅波导各区域电场数值代入式(1), 得到有效折射率, 将其记作 $n_{\text{eff, the}}$, 然后将其与 COMSOL 得到的有效折射率理论值 n_{sim} 进行对比(定义 $n_{\text{eff, the}}$ 的相对误差为 $\Delta_{\text{the}} = |n_{\text{eff, the}} - n_{\text{sim}}| / |n_{\text{sim}}|$), 对比结果如表 3 所示。

表 3 理论有效折射率与模拟有效折射率的相对误差
Table 3 Relative error between theoretical and simulated effective indexes

Material	n_{sim}	$n_{\text{eff, the}}$	$\Delta_{\text{the}} / \%$
Au	0.96556+0.00587j	0.98502+0.00523j	2.02
Ag	0.96133+0.00697j	0.98157+0.00803j	1.60

利用统计平均值的概念表示波导的有效折射率, 然后利用合理的近似推导得到的式(1)与实际模拟值之间的相对误差在误差允许范围内, 并且很小, 由此验证了式(1)的可行性。

5 结 论

笔者将 EUV 光刻掩模的吸波层看作是 x 方向上呈周期排布的光栅波导, 并给出了严格的仿真结果, 用其描述光栅波导中的 TE₀ 模式。由于光栅波导的周期性, 吸收层电场与传统孤立平行平板波导电场不同。光栅波导包层电场应为相邻两个周期场分布的线性叠加, 即 $\cosh(\cdot)$ 函数。在此基础上, 给出了适用于非亚波长结构的光栅波导 TE₀ 模式有效折射率的零阶近似值。当吸收层材料分别为金和银时, 利用 COMSOL 软件模拟光栅波导的电场分布以及 TE₀ 模式的有效折射率。计算模拟值与零阶近似值之间的相对误差, 结果表明两种材料 $n_{\text{eff, 0}}$ 的相对误差很小, 分别为 0.75% 和 0.96%, 说明本研究给出的 $n_{\text{eff, 0}}$ 已有较高精度。为进一步减小相对误差, 根据边界条件, 笔者推导出了光栅波导的本征方程, 并进一步推导出了更高精度的有效折射率简单迭代公式。笔者选择金吸收层材料, 验证了迭代公式的精度。数值模拟结果表明, 随着迭代次数增加, 相对误差逐渐减小, 而且经过 7 次迭代计算之后, 相对误差为 0.11%。继续进行迭代计算, 经过 23 次迭代后, $n_{\text{eff, 23}}$ 的相对误差已小于 10^{-5} 。这表明利用迭代公式进行有限次迭代计算之后相对误差减小, 有效折射率可逐渐收敛到仿真值, 验证了理论计算与

分析的准确性。

笔者基于一维非亚波长矩形光栅结构模型,根据光栅波导的周期性,给出了 TE_0 模式的有效折射率初始零阶近似值,并利用光栅波导的特征方程得到了有效折射率的简单迭代公式。对于非矩形结构以及具有不同周期波长比的非亚波长光栅结构,同样可以采取上述方法分析其 TE_0 模式以及模式的有效折射率。

参 考 文 献

- [1] Erdmann A, Mesilhy H, Evanschitzky P. Attenuated phase shift masks: a wild card resolution enhancement for extreme ultraviolet lithography? [J]. *Journal of Micro/Nanopatterning, Materials, and Metrology*, 2022, 21(2): 020901.
- [2] Bolk J, Ambrosius H, Stabile R, et al. Deep UV lithography process in generic InP integration for arrayed waveguide gratings [J]. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2018, 30(13): 1222-1225.
- [3] Levinson H J. The potential of EUV lithography [J]. *Proceedings of SPIE*, 2019, 11177: 1117702.
- [4] 梁紫鑫, 赵圆圆, 段宣明. 激光超衍射光刻原理与技术 [J]. *激光与光电子学进展*, 2022, 59(9): 0922029.
Liang Z X, Zhao Y Y, Duan X M. Principle and technology of laser super-diffraction lithography [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2022, 59(9): 0922029.
- [5] 窦银萍, 孙长凯, 林景全. 激光等离子体极紫外光刻光源 [J]. *中国光学*, 2013, 6(1): 20-33.
Dou Y P, Sun C K, Lin J Q. Laser-produced plasma light source for extreme ultraviolet lithography [J]. *Chinese Optics*, 2013, 6(1): 20-33.
- [6] 宗楠, 胡蔚敏, 王志敏, 等. 激光等离子体 13.5 nm 极紫外光刻光源进展 [J]. *中国光学*, 2020, 13(1): 28.
Zong N, Hu W M, Wang Z M, et al. Research progress on laser-produced plasma light source for 13.5 nm extreme ultraviolet lithography [J]. *Chinese Optics*, 2020, 13(1): 28.
- [7] Erdmann A, Fuehner T, Evanschitzky P, et al. Modeling studies on alternative EUV mask concepts for higher NA [J]. *Proceedings of SPIE*, 2013, 8679: 86791Q.
- [8] Ruoff J. Impact of mask topography and multilayer stack on high NA imaging of EUV masks [J]. *Proceedings of SPIE*, 2010, 7823: 78231N.
- [9] Yeung M, Barouch E, Oh H K. Waveguide effect in high-NA EUV lithography: the key to extending EUV lithography to the 4-nm node [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2015, 54(6S1): 06FN01.
- [10] Levinson H J. High-NA EUV lithography: current status and outlook for the future [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2022, 61(SD): SD0803.
- [11] Mesilhy H, Evanschitzky P, Bottiglieri G, et al. Investigation of waveguide modes in EUV mask absorbers [J]. *Journal of Micro/Nanopatterning, Materials, and Metrology*, 2021, 20(2): 021004.
- [12] Erdmann A, Shao F, Evanschitzky P, et al. Mask-topography-induced phase effects and wave aberrations in optical and extreme ultraviolet lithography [J]. *Journal of Vacuum Science Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, 2010, 28(6): C6J1-C6J7.
- [13] Zhu Z R, Lucas K, Cobb J L, et al. Rigorous EUV mask simulator using 2D and 3D waveguide methods [J]. *Proceedings of SPIE*, 2003, 5037: 494-503.
- [14] Vial A, Erdmann A, Schmoeller T, et al. Modification of boundaries conditions in the FDTD algorithm for EUV mask modeling [J]. *Proceedings of SPIE*, 2002, 4754: 890-899.
- [15] Paudel H P, Bayat K, Baroughi M F, et al. FDTD simulation of metallic gratings for enhancement of electromagnetic field by surface plasmon resonance [J]. *Proceedings of SPIE*, 2010, 7597: 759706.
- [16] Yeung M, Barouch E. Optical proximity effects in 4-nm EUV lithography: a rigorous study using a new PSTD method [J]. *Proceedings of SPIE*, 2015, 9422: 94220V.
- [17] Yeung M S. A next-generation EMF simulator for EUV lithography based on the pseudo-spectral time-domain method [J]. *Proceedings of SPIE*, 2012, 8322: 83220D.
- [18] Moharam M G, Grann E B, Pommet D A, et al. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1995, 12(5): 1068-1076.
- [19] Lalanne P, Morris G M. Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1996, 13(4): 779-784.
- [20] Li L F. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1996, 13(9): 1870-1876.
- [21] Li L F. New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1997, 14(10): 2758-2767.
- [22] Knop K. Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1978, 68(9): 1206-1210.
- [23] Nyysönen D. Theory of optical edge detection and imaging of thick layers [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1982, 72(10): 1425-1436.
- [24] Erdmann A, Evanschitzky P, Citarella G, et al. Rigorous mask modeling using waveguide and FDTD methods: an assessment for typical hyper-NA imaging problems [J]. *Proceedings of SPIE*, 2006, 6283: 628319.
- [25] Evanschitzky P, Erdmann A. Three dimensional EUV simulations: a new mask near field and imaging simulation system [J]. *Proceedings of SPIE*, 2005, 5992: 59925B.
- [26] Shao F, Evanschitzky P, Reibold D, et al. Fast rigorous simulation of mask diffraction using the waveguide method with parallelized decomposition technique [J]. *Proceedings of SPIE*, 2008, 6792: 679206.
- [27] Evanschitzky P, Erdmann A. Fast near field simulation of optical and EUV masks using the waveguide method [J]. *Proceedings of SPIE*, 2007, 6533: 65330Y.
- [28] Sugawara M, Nishiyama I, Takai M. Mask pattern correction by energy loss compensation in extreme ultraviolet lithography [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2005, 44(7S): 5467-5473.
- [29] 张子南, 李思坤, 王向朝. EUV 光刻三维掩模成像研究进展 [J]. *激光与光电子学进展*, 2022, 59(9): 0922021.
Zhang Z N, Li S K, Wang X C. Research progress on the imaging of three-dimensional mask for extreme ultraviolet lithography [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2022, 59(9): 0922021.
- [30] Yan P Y. Impact of EUVL mask buffer and absorber material properties on mask quality and performance [J]. *Proceedings of SPIE*, 2002, 4688: 150-160.
- [31] Liu P, Xie X B, Liu W, et al. Fast 3D thick mask model for full-chip EUVL simulations [J]. *Proceedings of SPIE*, 2013, 8679: 86790W.
- [32] Lam M C, Neureuther A R. Simplified model for absorber feature transmissions on EUV masks [J]. *Proceedings of SPIE*, 2006, 6349: 63492H.
- [33] Yeung M S, Barouch E. Printing circuits with 4 nm feature size: similarities and differences between EUV and optical lithographies [J]. *Proceedings of SPIE*, 2015, 9426: 94260R.
- [34] 李艳丽, 刘显和, 伍强. 先进光刻技术的发展历程与最新进展 [J]. *激光与光电子学进展*, 2022, 59(9): 0922006.
Li Y L, Liu X H, Wu Q. Evolution and updates of advanced photolithography technology [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2022, 59(9): 0922006.
- [35] Shi W Y, Deng W M, Liu W N, et al. Rectangular dielectric

- metagrating for high-efficiency diffraction with large-angle deflection[J]. Chinese Optics Letters, 2020, 18(7): 073601.
- [36] 田锐, 邹永刚, 海一娜, 等. 亚波长抗反射光栅的设计[J]. 中国激光, 2016, 43(9): 0901004.
Tian K, Zou Y G, Hai Y N, et al. Design of subwavelength anti-reflective grating[J]. Chinese Journal of Lasers, 2016, 43(9): 0901004.
- [37] Lalanne P, Lemerancier-Lalanne D. On the effective medium theory of subwavelength periodic structures[J]. Journal of Modern Optics, 1996, 43(10): 2063-2086.
- [38] 曾谨言. 量子力学-卷 I [M]. 5 版. 北京: 科学出版社, 2013: 42.
Zeng J Y. Quantum mechanics-volume I [M]. 5th ed. Beijing: Science Press, 2013: 42.
- [39] Cao Y T, Wang X Z, Erdmann A, et al. Analytical model for EUV mask diffraction field calculation[J]. Proceedings of SPIE, 2011, 8171: 81710N.
- [40] 李淑凤, 李成仁, 宋昌烈. 光波导理论基础教程[M]. 北京: 电子工业出版社, 2013: 33-35.
Li S F, Li C R, Song C L. Basic course of optical waveguide theory[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2013: 33-35.
- [41] Nguyen K B, Wong A K, Neureuther A R, et al. Effects of absorber topography and multilayer coating defects on reflective masks for soft X-ray/EUV projection lithography[J]. Proceedings of SPIE, 1993, 1924: 418-434.
- [42] Otaki K. Asymmetric properties of the aerial image in extreme ultraviolet lithography[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2000, 39(12S): 6819-6826.
- [43] Edwards D. Handbook of optical constants of solids[M]. Palik E. New York: Academic Press, 1985: 275-357.

Investigation of EUV Grating Waveguide Effective Refraction Index for TE₀ Mode

Mao Yaxing¹, Cao Qing^{1*}, Cheng Changjie¹, Zhu Jirui², Chen Wenxuan³, Xiao Xiaolin¹

¹Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 200444, China;

²Zhejiang Hangzhou No.7 High School, Hangzhou 310024, Zhejiang, China;

³Precision Optical Manufacturing and Testing Center, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China

Abstract

Objective The imaging phenomena in extreme ultraviolet (EUV) lithography must be elaborated from more than one perspective. Traditionally, previous studies on waveguide methods have considered the cladding electric field distribution of the absorber as an evanescent field, which is similar to a single parallel-plate waveguide. However, these studies ignore the periodicity of the absorbers. In this study, the absorber of the EUV lithography mask is regarded as a grating waveguide. Owing to the periodicity of the absorber, two adjacent periods must affect the field distribution. Therefore, the electric field of the absorber is a linear superposition of the adjacent periodic field distributions. We propose that the electric field distribution in the absorber in the lowest-order transverse electric (TE₀) mode is a hyperbolic cosine function $\cosh(\cdot)$. We provide the zero-order approximation value $n_{\text{eff},0}$ of the effective refractive index n_{eff} for the TE₀ mode. To further decrease the relative error of $n_{\text{eff},0}$ according to the boundary conditions, we derive the eigenvalue equation for the grating waveguide. To obtain a good approximation, we derive an iterative formula of $n_{\text{eff},m}$ and use the iteration method to decrease relative error.

Methods According to the line types in the grating waveguide, we assumed a fitting curve function for the electric field distribution of the TE₀ mode and provided the α value range of the grating waveguide. According to waveguide theory, the field distribution in the core should be $\cos(\cdot)$. Owing to the periodicity of the absorber, the electric field distribution in the cladding must not be in an exponential decay form, which will be $\cosh(\cdot)$. Furthermore, we assumed a zero-order approximation value for the effective refractive index. To verify the accuracy of $n_{\text{eff},0}$ and the feasibility of $\cosh(\cdot)$, we used the COMSOL Multiphysics software to simulate the TE₀ mode in the grating waveguide. We selected Au and Ag as absorber materials for the simulation, and the findings indicated that there were small errors between the simulated and theoretical results. To increase the accuracy further, the eigenvalue equation of the grating waveguide was obtained according to the boundary conditions. We also derived an iterative formula for the m th-order effective refractive index ($n_{\text{eff},m}$). As a special example, we selected Au as the cladding material to further verify the iterative formula. An iterative relation equation and iteration method were used to decrease the relative error.

Results and Discussions The relative errors of $n_{\text{eff},0}$ for Au and Ag are 0.75% and 0.96%, respectively (Table 1). The accuracy of $n_{\text{eff},0}$ is extremely high, but there is still a slight error between the theoretical and simulated field distributions (Fig. 3). To further increase the accuracy, we selected Au to verify the iterative formula. The relative error changes with the number of iterations (Fig. 4); with an increase in m , the relative error decreases. When $m=23$, the relative error decreases to less than 10^{-5} . In this case, the field distribution also shows very good agreement with the simulated result shown in Fig. 5. It can be observed that with the iterative formula, $n_{\text{eff},23}$ can describe the TE₀ mode of the grating waveguide accurately.

Conclusions We consider the absorber of the EUV lithography mask as a grating waveguide and perform a rigorous simulation to describe the TE₀ mode of the absorber. Owing to the periodicity of the grating waveguide, the electric field in the cladding of the

absorber is a linear superposition of two adjacent periodic field distributions, which is the $\cosh(\cdot)$ function. We propose a zero-order approximation value for the effective refractive index. The accuracy of the zero-order approximation value is verified by selecting Au and Ag absorbers for the simulation using COMSOL. The relative errors in $n_{\text{eff},0}$ for the two materials are 0.75% and 0.96%, respectively. The relative errors were already small initially, and we use an iterative method to further increase the accuracy of $n_{\text{eff},0}$. The eigenvalue equation for the grating waveguide is derived based on the boundary conditions. Subsequently, a simple iterative formula with a high accuracy is obtained. As a specific example, the Au absorber material is selected to verify the feasibility of the iterative formula. After seven iterations, the relative error of $n_{\text{eff},7}$ decreases to 0.11%. After 23 iterations, $n_{\text{eff},23}$ converges to the simulation value, and the relative error decreases to less than 10^{-5} . The feasibility and accuracy of the zero-order approximation value and iterative formula are verified.

Key words physical optics; extreme ultraviolet; grating waveguide; effective refractive index; zero-order approximation value; high-order numerical iteration