

二维计量型平面光栅的设计

袁伟, 朱煜, 张鸣, 王磊杰*

清华大学机械工程系, 北京 100084

摘要 针对二维计量型平面光栅的设计和加工中工艺参数复杂的难点, 本文基于电磁波时域有限差分方法, 对硅基二维平面光栅的设计仿真进行了探索和研究, 并进行了工艺实验验证。围绕平面光栅对衍射效率、衍射效率均衡性等指标的高要求, 对不同结构、槽深和占空比下二维光栅偏振衍射效率受到的影响和变化规律进行了探索。仿真和实验结果表明, 在占空比 45.0%~46.7% 附近, 随着槽深增大, S 偏振衍射效率逐渐减小, P 偏振衍射效率逐渐增大; 光栅槽深在 260 nm 附近时, 不同偏振衍射效率可以达到平衡, 带圆角的梯台结构光栅模型与实际工艺结果相近, 衍射效率和偏振衍射均衡性等符合设计要求。仿真结果与实际工艺结果基本一致, 表明其精度满足要求, 大幅度提高了平面光栅设计和加工的效率。

关键词 光栅设计; 光栅仿真; 光栅制造; 衍射光栅; 衍射效率

中图分类号 O436 **文献标志码** A

DOI: 10.3788/AOS230577

1 引言

精密测量技术是科学进步和高端制造业发展的基础和先决条件之一, 在先进的运动控制中, 高精度定位检测成为运动控制系统中实现实时反馈的重要一环。平面光栅位置测量系统也称为光栅编码器, 是高精度定位检测的重要解决方案之一, 它由光栅尺、光栅尺读数头、光源和其他元件组成, 光栅尺和光栅尺读数头分别安装在相对运动的部件上, 当部件之间发生相对运动时, 光栅尺衍射信号产生相位变化和拍频频移, 借助于参考光束干涉等方式, 可以在光栅尺读数头的光电探测器处产生可供探测的信号强度变化, 最终转换为位移信息, 从而实现运动控制的反馈^[1-4]。例如, 超精密平面光栅位置测量系统是面向 28 nm 及以下工艺节点应用的 193 nm 氟化铝 (ArF) 浸没式光刻机的核心分系统之一, 其确保了工件台的精确定位与控制, 从而支撑光刻机实现高质量的成像和套刻性能^[5-8]。

光栅尺的设计指标和加工精度是决定平面光栅测量系统性能的重要因素。近年来, 工业界和学术界对二维光栅尺进行了大量的研究。吴亚风^[9]进行了高精度平面光栅干涉仪的设计与研究, 设计了新型外差光栅干涉仪测量系统, 并进行了误差研究; 王雪英^[10]进行了基于衍射干涉原理的高精度光栅位移测量系统的研究, 搭建了光栅位移测量系统, 组装并小型化了读头, 并分析了误差来源; 康森等^[11]进行了基于利特罗角的八细分光栅干涉仪读头设计, 分析了系统测量原理, 并

推导了光学细分读头模型; 以上研究多集中在二维光栅读数头的设计、光路系统仿真和光路搭建等方面, 缺少对于光栅尺本身的设计仿真研究与实验验证工作。郑志忠等^[12]进行了高衍射效率短波红外凸面闪耀光栅的研究, 对一维闪耀光栅和矩形浮雕结构光栅的衍射效率进行了仿真分析对比, 但缺乏系统性工艺实验支撑, 且仅研究了一维光栅的衍射效率; 黄爽爽^[13]进行了高衍射效率浸没光栅研究, 对矩形槽型浸没光栅进行了仿真和实验验证, 但仿真结果和实测结果偏差较大。Tang 等^[14]进行了计量型正交平面相位光栅的设计研究, 对正交平面光栅的占空比、槽深和衍射效率之间的关系进行了仿真, 但未做实验验证。

由于光栅尺的栅距、槽型、槽深、占空比、面型以及表面镀膜材料特性对光栅衍射效率和衍射效率均衡性等关键指标都会产生重要影响, 且参数组合和制造工艺多样, 因此光栅尺的开发和工艺优化周期长、迭代速度慢。

本文的目的是建立二维平面光栅的精确设计仿真方法, 并进行实验验证, 为光栅实验开发提供足够精确和快速的支撑, 缩短平面光栅尺设计和加工所需的周期, 提升开发效率。

2 光栅仿真实理论和算法

针对不同的应用场景, 光栅光学仿真计算方法有多种^[15-16]。本文选择了时域有限差分 (FDTD) 算法作为二维光栅光学特性仿真方法。

收稿日期: 2023-02-20; 修回日期: 2023-03-23; 录用日期: 2023-04-23; 网络首发日期: 2023-05-08

通信作者: *wang-lj66@mail.tsinghua.edu.cn

FDTD 算法通过对时间和空间进行差分近似,使电场和磁场在时间顺序上交替采样,采样时间间隔相差半个时间步,电场和磁场在空间排布上相差半个空间步(称为 Yee 氏元胞),从而模拟电场和磁场随时间的交替转化,在时域递推模拟波的传播过程中得出场分布,并可以通过傅里叶变换间接得到频域响应结果^[17-19]。

对于二维光栅结构,FDTD 算法只需要对添加了周期性边界条件的最小可重复单元进行仿真,计算速度和精度都符合要求,并且在一些光栅仿真应用中已经得到了应用和验证。对三维空间下的麦克斯韦方程组进行近似和迭代,就可以得到电磁场在空间和时间中的变化。其中的一种近似方法称为中心差分法,通过对物理量进行线性插值近似,选取适当级次的截断误差,可以获得高精度的近似结果。

在三维空间中利用中心差分法,记为

$$f(x, y, z, t) = f(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = f_{i,j,k}^n, \quad (1)$$

则以麦克斯韦方程组中的 $-\frac{\partial B_x}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}$ 为例,

可以有

$$\frac{1}{\Delta t} \left[B_x^{n+\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} - B_x^{n-\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right] = \frac{1}{\Delta z} \left[E_y^n_{i,j+\frac{1}{2},k+1} - E_y^n_{i,j+\frac{1}{2},k} \right] - \frac{1}{\Delta y} \left[E_z^n_{i,j+1,k+\frac{1}{2}} - E_z^n_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right], \quad (2)$$

式中: E 为电场强度; B 为磁场强度; t 为时间。

基于 Yee 氏元胞(图 1)的设计,式(2)也可写为

$$B_x^{n+\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} = B_x^{n-\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[E_y^n_{i,j+\frac{1}{2},k+1} - E_y^n_{i,j+\frac{1}{2},k} \right] - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[E_z^n_{i,j+1,k+\frac{1}{2}} - E_z^n_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right], \quad (3)$$

式(3)表明,通过 $(n - \frac{1}{2})$ 时刻的 B_x 分布、 n 时刻的 E_y

和 E_z 分布,就可以近似得到 $(n + \frac{1}{2})$ 时刻的 B_x 分布。

以此类推,可以得到其他电磁量之间的关系如下:

表 1 二维光栅设计指标

Table 1 Design specifications of 2D grating

Parameter of 2D grating	Design specification
Grating type	Reflection-type
Material of reflection film	Aluminum
Wavelength of incident light /nm	780
Grating density / (line·mm ⁻¹)	1200
Incidence angle / (°)	27.9
Diffraction efficiency of S/P-polarization light /%	≥30
Diffraction uniformity of S/P-polarization light /%	≤10
Diffraction equilibrium of S/P-polarization light /%	≤10

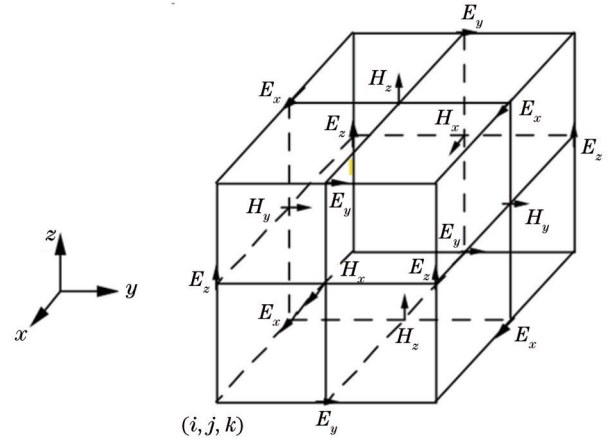


图 1 Yee 氏元胞

Fig. 1 Yee cell

$$D_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} = D_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^n + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[H_z^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} - H_z^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k} \right] - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[H_y^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} - H_y^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}} \right] - J_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

式中: D 为电位移或电通量密度; H 为磁通量。因此,式(3)也即表明,通过 $(n - \frac{1}{2})$ 时刻的磁场各矢量分布

和 n 时刻的电场各矢量分布,就可以近似得到 $(n + \frac{1}{2})$

时刻的磁场各矢量分布;以此为基础,式(4)表明,通过

n 时刻的电场各矢量分布和 $(n + \frac{1}{2})$ 时刻的磁场各

量分布,也可以得到 $(n + 1)$ 时刻的电场各矢量分布,

如此循环,电场各分量与磁场各分量以 $\frac{1}{2} \Delta t$ 为间隔,

交替进行运算,就可以得到电磁场随时间变化的过程。

3 仿真建模及实验

3.1 设计指标需求

仿真基于某二维光栅初始设计方案,其设计指标

要求如表 1 所示。

3.2 仿真工具

本文中光栅衍射仿真采用的是 FDTD Solutions 软件,软件版本:2018a, FDTD Solutions 应用 FDTD 算法,可进行不同维度、不同尺度下的电磁波模拟,广泛用于微纳光子学材料和器件的仿真。

仿真基本条件设定为:入射光波长为 780 nm;入射光角度为 27.9° ;网格划分和边界条件信息将会在下文说明。

3.3 正四棱柱光栅模型仿真

仿真模型中的光栅单元由两部分组成:上部为与半导体工艺兼容的柱状图形,本文会依次涉及三种结构,分别为正四棱柱、梯台结构和带圆角的梯台结构;下部为衬底,材料都为单一的铝。仿真所采用的铝的光学常数为软件材料库中的 Al-CRC,在 780 nm 入射波长处的折射率 $n=2.66$,吸收率 $k=8.32$,铝在单镀膜下的反射率为 86.7%。考虑到铝是一种高吸收的金属材料,计算得到铝在 780 nm 处的穿透深度为 $\lambda/4\pi k$ 即 7.5 nm,远小于实际工艺中 50 nm 的目标沉积厚度,因此在仿真中可以忽略铝以下的多层结构,简化仿真模型,而不失仿真的准确性。

图 2(a)是正四棱柱结构光栅单元仿真模型示意

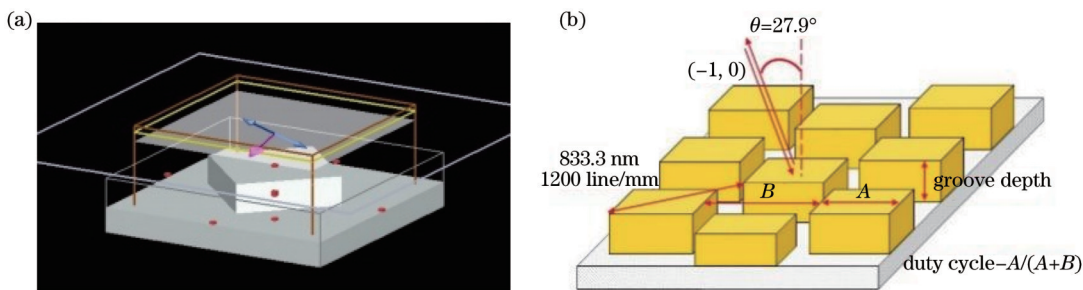


图 2 正四棱柱结构光栅单元图。(a)仿真模型 3D 示意图;(b)光栅阵列侧视图

Fig. 2 Unit diagram of grating of quadrangular prism bump. (a) 3D diagram of simulation model; (b) side view image of grating array

图 3 是全级次远场衍射分布示意图,其显示在 780 nm 对应远场,光栅仅有 2 个级次的衍射,分别为 (0,0) 和 (-1,0) 级,后面简称为 0 级次和 -1 级次,其中 0 级次为一般光栅的主级次,-1 级次即为光栅设计所需要的级次,满足利特罗 (Littrow) 条件,即衍射角等于入射角。在之后的结果中,也主要对 -1 级次衍射光的衍射效率进行分析讨论。

图 4 为 S 偏振不同波长下的衍射强度图。通过仿真可得到,在 780 nm 入射光源下,S 偏振 -1 级次衍射效率超过 70%,P 偏振 -1 级次衍射效率为 4.13%,P 偏振衍射强度低于光栅需求 ($\geq 30\%$),两者差异远大于对衍射效率均衡性的设计指标要求 ($\leq 10\%$),需要进一步优化光栅设计。图 4 中带正方形标记的线是 S 偏振光总的衍射效率,带圆形标记的线是 S 偏振光 0 级次衍射强度,带三角形标记的线是 S 偏振光 -1 级次衍射强度,该数值均为衍射级次相对入射光强的归一化比值。

图,图 2(b)是光栅结构的侧视图,其对光栅的周期、占空比以及槽深进行了说明。四棱柱是正方形排布,在仿真模型的 X/Y 方向,即棱柱对角线方向上,光栅密度为 1200 line/mm,即周期为 833.3 nm。对于正四棱柱光栅单元,简化后的仿真模型由两部分组成,上部为旋转 45° 后的铝正四棱柱,初始参数设定为底边长度为 440 nm,对应占空比为 37.3%,高度为 200 nm,即对应槽深为 200 nm,忽略铝镀膜内部或下部的其他材料,如硅衬底。入射光为中心波长为 780 nm 的平面光脉冲,与法线方向成 27.9° 角入射到模型上,P 和 S 偏振方向分别计算。模型的纵向边界为一定层数的完全匹配层 (PML),入射光都将无反射地穿过边界;水平方向边界为 Bloch 边界,模拟单个计算单元在水平方向上周期性排布后得到光栅结构。仿真模型网格划分由软件预设方案自动实现,铝凸块附近网格较密,空气部分网格较宽松。网格精度根据收敛需求一般在 2~4 之间调整。

为了得到光栅在对应级次上的衍射效率,采用了 FDTD Solutions 所提供的 Grating Projection 监视器,自动计算模型在远场的衍射级次分布,并从宽光谱结果中提取 780 nm 处的结果。

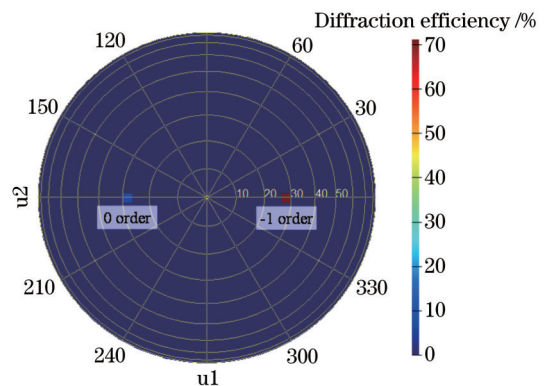


图 3 全级次远场衍射分布示意图

Fig. 3 Diagram of full-order far field diffraction distribution

对于光栅衍射效率均衡性(用 $E_{balance}$ 表示)和衍射效率均匀性(用 $E_{uniformity}$ 表示)这两项关键性能指标的定义如下: $E_{balance} = |(S_{mean} - P_{mean}) / (S_{mean} + P_{mean})|$,其中 S_{mean} 指的是 S 偏振光的衍射效率平均值, P_{mean} 指的是 P 偏

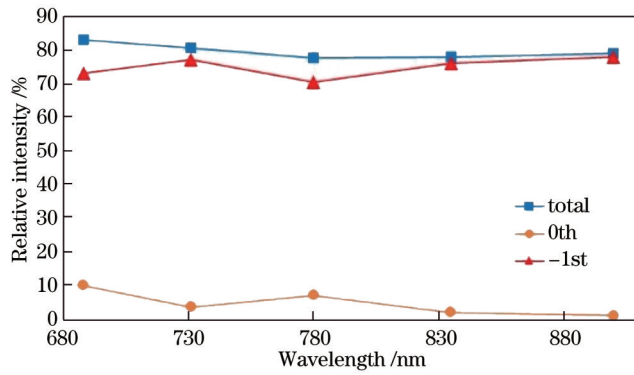


图 4 不同波长下 S 偏振光衍射强度图

Fig. 4 Diffraction intensity map of S-polarization light at different wavelengths

振光的衍射效率平均值;以 P 偏振光为例, $E_{\text{uniformity}} = (P_{\text{max}} - P_{\text{min}}) / P_{\text{min}}$, 其中 P_{max} 和 P_{min} 分别是 P 偏振光的衍射效率的最大值和最小值。

基于正四棱柱结构光栅模型的基本输入条件,进行了实际的工艺开发和实验验证,光栅首轮样品的衍射效率测量结果为 P 偏振光为 12%, S 偏振光为 64%, 仿真结果与实验结果存在一定差异,需要进行进一步分析改善。

光栅工艺验证结果的截面图和俯视图如图 5 所示,在参考了此截面图的结构数据后,发现模型结构与实际工艺结构差异主要在于:侧面倾角、顶部圆角、底部圆角及占空比的差异。图 5(a)中为方便切片,截面图方向与仿真模型的 X/Y 方向相差 45°。

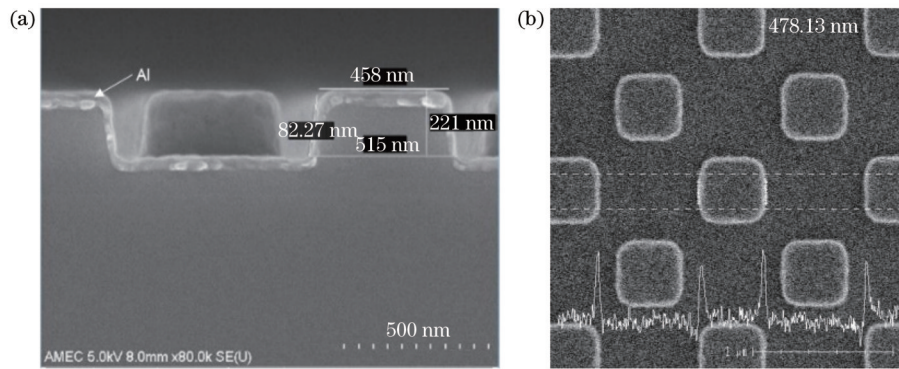


图 5 光栅工艺结果。(a)截面图;(b)俯视图

Fig. 5 Grating processing result. (a) Cross-section view; (b) top view

3.4 梯台结构光栅模型仿真

结合实际工艺结果和光栅测试结果,在后续仿真中尝试优化模型结构,建立了不同结构的光栅仿真模型,包括梯台结构光栅和带圆角梯台结构光栅。

首先将模型的正四棱柱结构修改为梯台结构(图 6),以光栅在硅片上的工艺实测结果作为仿真输入参数,进行仿真验证,并放宽占空比的仿真范围。结果如表 2 所示,仿真结果中条件 1 与样品实测结果(P 偏振光为 12%, S 偏振光为 64%)相近,证明所建立的 FDTD 仿真模型可靠,但还需要在更大范围内探索仿真模型结构参数以达到光栅设计要求。

在前期工艺尝试中,槽深被一直限制在比较低的水平,都在 200 nm 附近, S 偏振衍射强度一直远高于 P 偏振,但在光学干涉中,槽深带来的相位差则是一个非

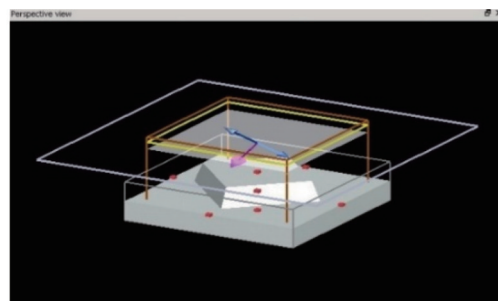


图 6 梯台结构光栅单元仿真模型 3D 示意图

Fig. 6 3D diagram of grating unit simulation model with ladder-shaped bump

常关键的变量,因此在后续仿真中,尝试改变槽深,探索槽深的变化对光栅衍射结果的影响。固定梯台顶边宽度为 440 nm,底边宽度为 500 nm,改变槽深,仿真结

表 2 梯台结构光栅模型仿真结果

Table 2 Simulation results of grating model with ladder-shaped bump

Parameter	Condition 1	Condition 2	Condition 3	Condition 4	Condition 5	Condition 6	Condition 7
Top dimension / nm	432	458	440	440	440	440	440
Bottom dimension / nm	502	515	550	525	500	475	440
Groove depth / nm	240	221	200	200	200	200	200
Diffraction efficiency (P, -1) / %	16.8	11.9	6.4	5.9	5.3	4.7	4.1
Diffraction efficiency (S, -1) / %	69.4	73.1	75.4	75.6	76.0	76.3	76.6

果如图 7 所示。随着槽深增大,不同偏振的衍射效率确实有较大幅度的变化,但在此轮仿真中,槽深的变化所能带来的对衍射效率的影响已接近极限,需要进一步调整占空比等参数。

3.5 带圆角梯台结构光栅模型仿真

考虑到工艺截面图中的结构顶部有明显的圆角,也对光栅衍射有一定影响,因此在后续的仿真模型中,将光栅模型主体部分进一步细化。在保留侧面倾角的同时,在顶边、顶角和侧边都加上了圆角,以进一步接近实际工艺情况。修改后的模型由多个圆柱、圆球和其他几何形状无缝拼接而成,圆球和圆柱的半径为圆角半径,并且在圆角处添加了额外的高精度网格以提高仿真的准确性。由于仿真需要扫描尺寸参数以探索不同结构尺寸的影响,而同时改变各子形状参数过于繁琐,因此编写了用于实现子形状自动生成和参数修

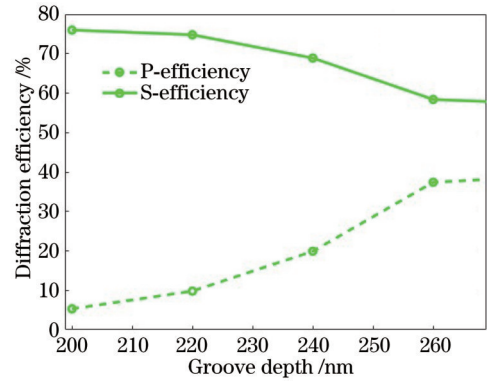


图 7 光栅衍射强度随槽深的变化

改的脚本,保证拼接密合并简化仿真流程,最后生成的带圆角梯台结构如图 8 所示,在之后的仿真中,全部采用该结构和脚本实现。

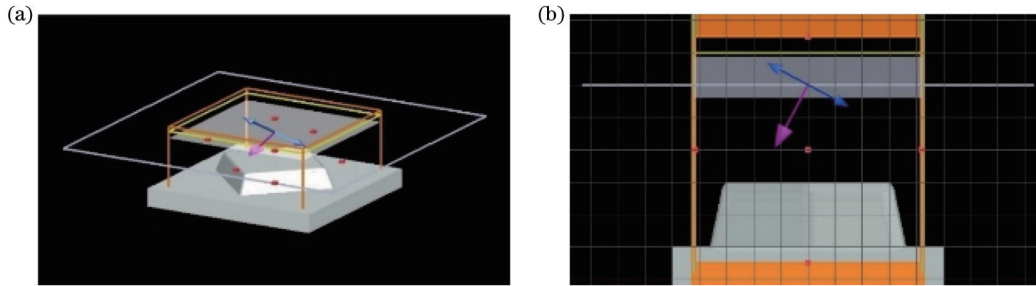


图 8 带圆角梯台结构光栅单元图。(a)仿真模型 3D 示意图;(b)侧视图

Fig. 8 Grating unit with corner-rounded ladder-shaped bump. (a) 3D diagram of simulation model; (b) side view image

继续进行工艺对比验证,此轮样品测试结果如图 9 所示。偏振衍射均衡性还达不到光栅的设计要求,但是在较大槽深和大占空比区域,如槽深为 2350 Å、占空比大于 43% 的样品中,也观察到了类似前一轮仿真中的现象,随着槽深增大,衍射效率均衡性有一定改善的趋势。

在上述工作的基础上,尝试在仿真中将占空比和槽深同时加大,在顶部宽度为 490 nm、底部宽度为 530 nm、对应占空比为 45.0%、圆角半径为 30 nm 时,

通过改变槽深得出了可以实现不同偏振一 1 级次衍射均衡性达标的设计方案,结果如图 10 所示。

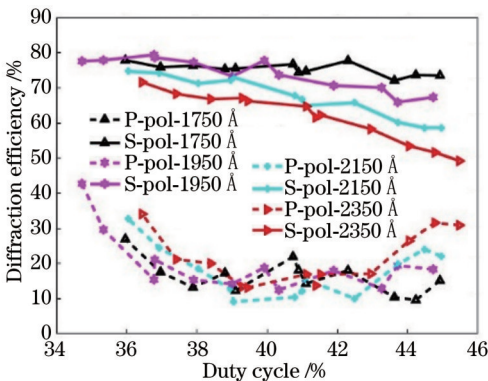


图 9 不同槽深样品衍射效率测量结果

Fig. 9 Diffraction efficiency results of samples with different groove depths

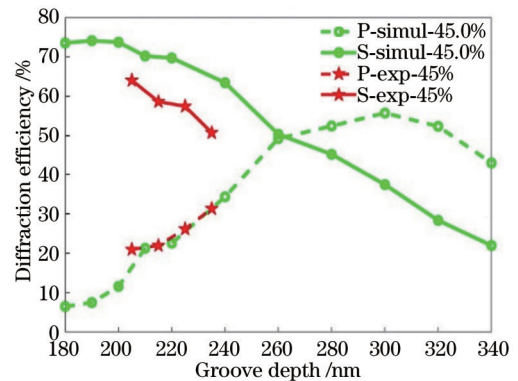


图 10 占空比为 45.0% 时的仿真结果与实验结果对比

Fig. 10 Companion of simulation results and experimental results with duty cycle of 45.0%

同时,添加了不同占空比下的更多预期结果以进行对比,该组估计值通过对图 9 中不同槽深的相近占空比结果运用插值法得出。结果如图 11 中所示,可以看到当槽深为 260 nm 左右时,仿真模型的不同偏振衍射强度几乎相等,符合光栅设计要求。随着占空比增大,不同偏振光的相同衍射效率的交会点有一定平移,

即所需槽深略微减小,该规律与之后的实验所得规律相同。

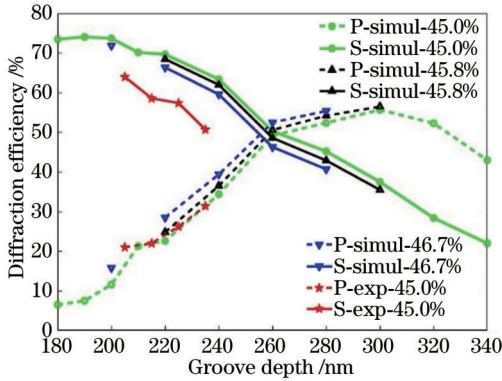


图 11 不同占空比下的仿真结果与实验结果对比

Fig. 11 Comparison of simulation results and experimental results with different duty cycles

另一方面,对比图 11 中仿真结果与实验结果可以看到,仿真和实验的 P 偏振光衍射强度几乎完全一致,但是 S 偏振光衍射强度趋势相近,幅值则有一定区别。推测此差异可能来源于仿真模型与实际实验结构的细节区别,包括圆角半径、侧面倾角和表面粗糙度等,以及实验设置上的误差和损耗,光栅表面可能存在与光栅周期相匹配的光学模式,不同偏振的入射光与这些模式耦合后产生不同的衍射光,因此在幅值上产生差别。按仿真结果趋势将实验结果向更大槽深方向延伸,估算实验结果会在槽深为 260 nm 附近达到交会,衍射效率均衡性可以达到要求。

在后续的工艺实验中,以槽深为 260 nm 作为目标槽深,结合占空比的进一步优化,最终在硅片光栅上实现了 S 偏振光和 P 偏振光衍射效率均衡性小于 10% 的结果,达到设计指标需求。

3.6 不同网格尺寸对仿真结果的影响

FDTD 仿真的准确性极大依赖于仿真步长,步长越小,仿真对结构细节的表征越精确,但所需计算量越大,计算时间越长。因此在本文中也通过缩小仿真步长验证了仿真的准确性,仿真模型设定顶边尺寸为 440 nm,底边尺寸为 520 nm,槽深为 344.7 nm,圆角半

径为 50 nm,不同衍射级次强度如表 3 所示,不同网格尺寸仿真结果均收敛,其中 8 nm 为上述仿真中实际网格大小,与 3 nm 结果的误差在可接受范围内,也证明了本文所建立的仿真方法的可靠性。

表 3 不同网格尺寸下衍射强度仿真结果

Table 3 Diffraction efficiency simulation results with different mesh settings

Mesh setting /nm	Diffraction efficiency (P, -1) /%
3	40.0
8	39.1

4 实验验证

光栅的生产工艺有多种技术路线和方法,本文选择了基于硅基底和铝金属镀膜的生产工艺,开发了与集成电路生产工艺兼容的二维计量型平面光栅制造工艺,对本文的仿真结果进行了实验验证。

实验验证基本工艺条件:光刻工艺所用光刻机为阿斯麦(ASML)公司的 1900i 型号;涂胶显影机为东电电子(TEL)公司的 Lithius ProZ 型号,涂胶均匀性的偏差小于 1%;刻蚀设备为中微半导体公司的 ADRIE 型号;镀膜设备为北方华创公司的 Victor A1030 型号,铝镀膜厚度为 50 nm。

经过仿真优化和工艺优化后的最终光栅,其各项基本工艺参数如表 4 所示。

表 4 光栅的基本制造参数

Table 4 Parameters of grating manufacturing

Parameter of manufacturing	Value
Grating density / (line·mm ⁻¹)	1200
Grating period / nm	833.3
Grating dimension / nm	550
Groove depth / nm	260
Duty cycle / %	46.7

图 12 展示了所加工的平面光栅的微结构的扫描式电子显微镜(X-SEM)截面图和顶部俯视图,可以看到微结构的尺寸和仿真参数接近。

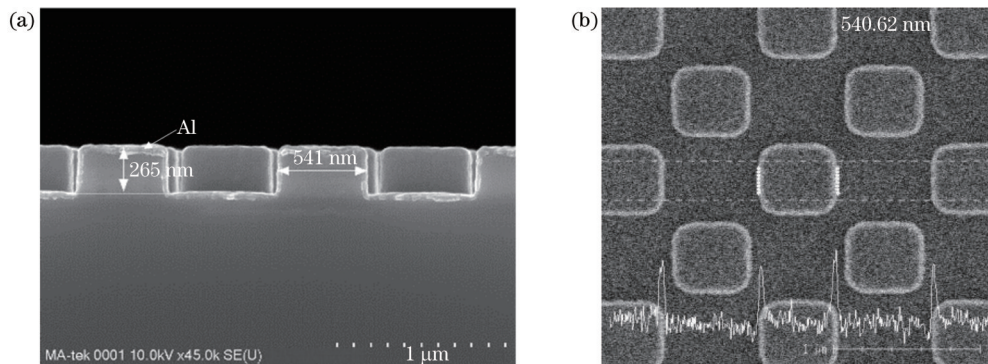


图 12 光栅最终工艺结果。(a)截面图;(b)俯视图

Fig. 12 Final grating processing result. (a) Cross-section view; (b) top view

所加工的硅基平面光栅的实物如图 13 所示。在硅基平面光栅上用 8 个衍射光斑进行测试,测试结果展示了优良的衍射性能。

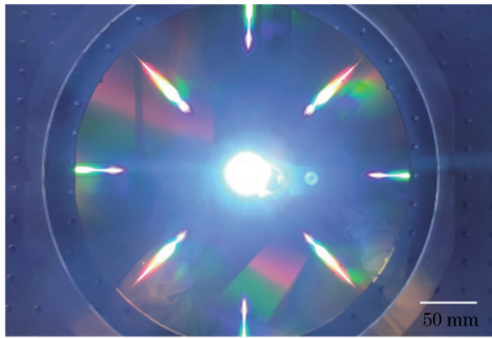


图 13 光栅硅片俯视图
Fig. 13 Top view of grating wafer

将圆形硅片切割为边长为 170 mm 的正方形,在 170 mm × 170 mm 的光栅测量行程范围内,P 偏振光和 S 偏振光的衍射效率、衍射效率均匀性、衍射均衡性等指标均达到了光栅设计要求,测试结果如图 14 所

示。衍射效率测试的光斑直径为 1 mm,步进距离为 1 mm,扫描速度为 1 mm/s,采样频率为 1 Hz。

仿真结果和实测结果的对比如表 5 所示,可以看到实测结果与仿真结果接近。

5 结 论

本文对二维平面光栅的设计仿真进行了研究,建立了一套仿真方法并进行了工艺实验验证。通过所建立的 FDTD 仿真方法,探索了不同结构和尺寸下二维光栅的偏振衍射效率变化规律。镀膜的反射率、槽深和占空比是影响光栅衍射效率的三个最主要的因素;在占空比为 45.0%~46.7% 附近,S 偏振光衍射效率随槽深增大而减小,P 偏振光衍射效率随槽深增大而增大,在槽深为 260 nm 附近时不同偏振衍射效率接近一致,衍射效率和偏振均衡性等指标符合设计要求,且仿真结果与实际工艺结果接近,仿真精度满足要求;基于所建立的 FDTD 仿真方法与制造工艺可以大幅度提高平面光栅设计效率和工艺开发效率。

表 5 最终光栅的仿真结果与实测结果

Table 5 Simulation results and measurement results of final grating

Parameter	Specification	Simulation result	Experimental result
Diffraction efficiency of P-polarization light / %	≥ 30	46.0	38.0
Diffraction uniformity of P-polarization / %	≤ 10	—	6.3
Diffraction efficiency of S-polarization light / %	≥ 30	52.9	37.8
Diffraction uniformity of S-polarization light / %	≤ 10	—	9.3
Diffraction equilibrium of S/P-polarization light / %	≤ 10	7.0	0.3

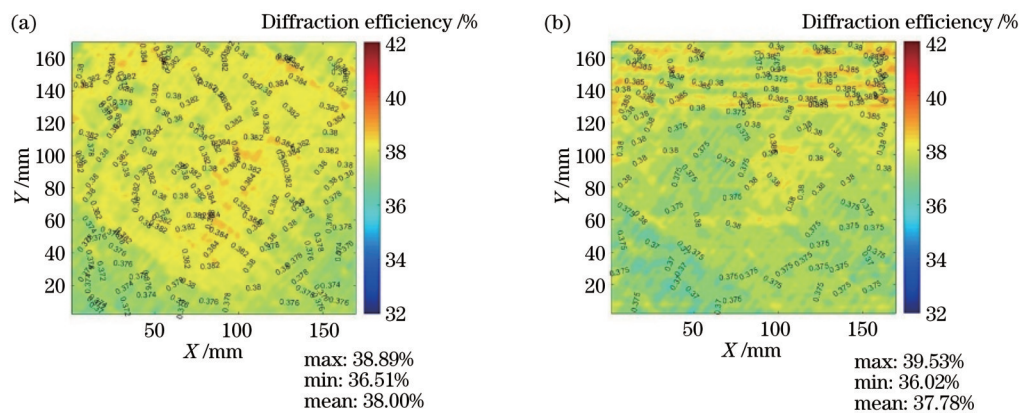


图 14 最终光栅衍射效率测试图。(a) P 偏振光;(b) S 偏振光
Fig. 14 Final grating diffraction efficiency test chart. (a) P-polarization light; (b) S-polarization light

参 考 文 献

[1] 王磊杰,张鸣,朱煜.单体大尺寸高精度全息光栅制造技术综述[J].光学精密工程,2021,29(8):1759-1768.
Wang L J, Zhang M, Zhu Y. Review of monomeric large-size and high precision holographic planar grating manufacturing technology[J]. Optics and Precision Engineering, 2021, 29(8): 1759-1768.

[2] Chen C G. Beam alignment and image metrology for scanning

beam interference lithography: fabricating gratings with nanometer phase accuracy[D]. Cambridge: Massachusetts Institute of Technology, 2003.

[3] 王磊杰,郭子文,叶伟楠,等.超精密空间分离式外差利特罗平面光栅编码器位移测量系统[J].光学精密工程,2022,30(5):499-509.
Wang L J, Guo Z W, Ye W N, et al. Ultra-precision spatial-separated heterodyne Littrow grid encoder displacement measurement system[J]. Optics and Precision Engineering, 2022, 30(5): 499-509.

- [4] 魏莉佳, 张文涛, 熊显名, 等. 高精度平面光栅位移测量系统[J]. 激光杂志, 2020, 41(6): 17-21.
Wei L J, Zhang W T, Xiong X M, et al. A high-precision plane grating displacement measurement[J]. Laser Journal, 2020, 41(6): 17-21.
- [5] de Jong F, van der Pasch B, Castenmiller T, et al. Enabling the lithography roadmap: an immersion tool based on a novel stage positioning system[J]. Proceedings of SPIE, 2009, 7274: 608-617.
- [6] Castenmiller T, van de Mast F, de Kort T, et al. Towards ultimate optical lithography with NXT: 1950i dual stage immersion platform[J]. Proceedings of SPIE, 2010, 7640: 76401N.
- [7] 王磊杰, 张鸣, 朱煜, 等. 面向浸没式光刻机的超精密光学干涉式光栅编码器位移测量技术综述[J]. 光学精密工程, 2019, 27(9): 1909-1918.
Wang L J, Zhang M, Zhu Y, et al. Review of ultra-precision optical interferential grating encoder displacement measurement technology for immersion lithography scanner[J]. Optics and Precision Engineering, 2019, 27(9): 1909-1918.
- [8] 朱煜, 王磊杰, 张鸣, 等. 扫描干涉光刻机光束姿态自动准直系统设计[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2015, 55(7): 716-721, 733.
Zhu Y, Wang L J, Zhang M, et al. Design of beam pose automatic alignment system for an interference lithography scanner[J]. Journal of Tsinghua University (Science and Technology), 2015, 55(7): 716-721, 733.
- [9] 吴亚风. 高精度平面光栅干涉仪的设计与研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2015.
Wu Y F. Design and research on heterodyne planer grating encoder with nanometer resolution[D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2015.
- [10] 王雪英. 基于衍射干涉原理的高精度光栅位移测量系统研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2014: 30-53.
Wang X Y. Research of high-precision displacement measurement system based on the principle of diffraction and interference[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2014: 30-53.
- [11] 康森, 熊显名, 王鹏, 等. 基于利特罗角的 8 细分光栅干涉仪读头设计[J]. 激光杂志, 2022, 43(5): 38-42.
Kang S, Xiong X M, Wang P, et al. Design of reading head of 8 subdivision grating interferometer based on Littrow angle[J]. Laser Journal, 2022, 43(5): 38-42.
- [12] 郑志忠, 杨忠, 修连存. 高衍射效率短波红外凸面闪耀光栅的研制与应用[J]. 光学学报, 2020, 40(12): 1205002.
Zheng Z Z, Yang Z, Xiu L C. Development and application of shortwave infrared convex blazed grating with high diffraction efficiency[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(12): 1205002.
- [13] 黄爽爽. 高衍射效率浸没光栅研究[D]. 苏州: 苏州大学, 2020.
Huang S S. Study on high diffraction efficiency immersion grating[D]. Suzhou: Soochow University, 2020.
- [14] Chen X R, Tang Y, Li C M, et al. Design of crossed planar phase grating for metrology[J]. Proceedings of SPIE, 2018, 10621: 106211D.
- [15] Zhu J Y, Ning Y, Liu L A, et al. Design and fabrication of highly selective polarizers using metallic - dielectric gratings[J]. Photonics, 2023, 10(1): 52.
- [16] 谢豪, 霍富荣, 薛常喜. 用于头戴显示的新型耦合光栅结构优化设计与分析[J]. 光学学报, 2022, 42(14): 1405001.
Xie H, Huo F R, Xue C X. Structural optimization design and analysis of a new type of coupled grating for head-mounted display[J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(14): 1405001.
- [17] 葛德彪, 闫玉波. 电磁波 FDTD 方法[M]. 3 版. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2011.
Ge D B, Yan Y B. Finite-difference time-domain method for electromagnetic waves[M]. 3rd ed. Xi'an: Xidian University Press, 2011.
- [18] 骆钧尧, 郭智, 黄浩, 等. 多层膜光栅衍射效率的同步辐射研究[J]. 光学学报, 2021, 41(14): 1405001.
Luo J Y, Guo Z, Huang H, et al. Synchrotron radiation research on diffraction efficiency of multilayer coated grating[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(14): 1405001.
- [19] 周桐宇, 李丽娟, 任姣姣, 等. 基于 FDTD 的玻璃纤维增强复合材料脉冲太赫兹无损检测[J]. 光学学报, 2020, 40(12): 1226002.
Zhou T Y, Li L J, Ren J J, et al. Pulsed terahertz nondestructive testing of glass fiber reinforced plastics based on FDTD[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(12): 1226002.

Design of Two-Dimensional Metrological Planar Grating

Yuan Wei, Zhu Yu, Zhang Ming, Wang Leijie*

Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Abstract

Objective The design and manufacturing technology of two-dimensional metrological planar gratings is complex and difficult. Design indicators and processing accuracy of two-dimensional (2D) gratings are important factors determining the performance of planar grating measurement systems. The grating type, grating pitch, groove depth, duty cycle, and characteristics of surface coating materials exert influence on diffraction efficiency and diffraction efficiency equilibrium. There are many parameter combinations and manufacturing methods for gratings. The development and process optimization of gratings feature long cycle time and low efficiency. Our purpose is to propose an accurate design and simulation method for two-dimensional planar gratings to provide sufficient accurate and fast support for grating development, shorten the cycle time of the design and processing of planar gratings, and improve development efficiency.

Methods The design simulation of a silicon based two-dimensional planar grating is studied through the electromagnetic finite-difference time-domain (FDTD) method, and the simulation results are verified by experiments in this study. For two-dimensional grating structures, the FDTD algorithm only needs to simulate the smallest repeatable element with

periodic boundary conditions. The calculation speed and accuracy meet the requirements and have been applied and verified in some grating simulations. By approximating and iterating the Maxwell equations in three-dimensional space, we can obtain the spatio-temporal changes in electromagnetic fields. One approximation method is called the central difference method. By linear interpolation approximation of physical quantities and selecting the appropriate truncation error level, high-precision approximation results can be obtained. The grating diffraction simulation in this study employs FDTD Solutions software and the grating unit in the simulation model consists of two parts, and the upper part is a columnar shape compatible with semiconductor technology. In this study, three structures are involved in sequence, including a regular prism, a ladder structure, and a ladder structure with rounded corners. The lower part is the substrate with the coating material of aluminum. Based on the input conditions of the different structure grating model, the actual process development and experimental verification are carried out. The incident light is a plane light pulse with a central wavelength of 780 nm, the incident angle is 27.9° with the normal direction onto the model, and the polarization directions P and S are calculated separately. The longitudinal boundary of the model is a perfect matching layer (PML) with a certain number of layers, and the incident light will pass through the boundary without reflection. The horizontal boundary is the Bloch boundary, which simulates the periodic arrangement of a single computing unit in the horizontal direction to obtain the grating structure. The mesh division of the simulation model is automatically achieved by software preset schemes, with dense grids near the aluminum bumps and loose grids in the air part. The mesh accuracy is generally adjusted between 2 to 4 nm based on convergence requirements.

Results and Discussions Firstly, for the regular prism model, the measurement results of the diffraction efficiency of the first round grating sample are 12% for P-polarized light and 64% for S-polarized light. There are some differences between the simulated and experimental results. Combining the actual process results and grating test results, we try to optimize the model structure in the subsequent simulation and build grating simulation models of different structures and parameters, including the ladder structure grating and the ladder structure grating with rounded corner (Figs. 6 and 8). Secondly, the grating model with corner-rounded bump structure is close to the actual process results, and the final diffraction efficiency and polarization equilibrium meet the design requirements. The simulation results are consistent with the actual process results (Table 5). Thirdly, the FDTD simulation accuracy greatly depends on the simulation step size. The smaller step size leads to more accurate characterization of structural details in the simulation, whereas the larger requires computational amount results in longer calculation time. The simulation accuracy is also verified by reducing the simulation mesh size. The accuracy of mesh size 8 nm is acceptable (Table 3). Finally, at $170\text{ mm} \times 170\text{ mm}$ measurement range of grating, the diffraction efficiency, diffraction uniformity, and balance of P-polarized and S-polarized lights satisfy the grating design requirements (Fig. 14).

Conclusions We study the design and simulation of two-dimensional planar gratings, put forward a simulation method, and conduct process experimental verification. Through the established FDTD simulation method, the variation of polarization diffraction efficiency of two-dimensional gratings under different structures and sizes is explored. The coating layer reflectivity, groove depth, and duty cycle are three main factors affecting the diffraction efficiency of the gratings. At a duty cycle from 45% to 46.7%, the diffraction efficiency of S-polarized light decreases with the increase of groove depth, while the diffraction efficiency of P-polarized light increases with the increase of groove depth. At a groove depth of 260 nm, the diffraction efficiency of different polarizations is nearly constant, and the diffraction efficiency and diffraction efficiency equilibrium meet the design requirements. The simulation results are close to the actual process results, and the simulation accuracy satisfies the requirements. Based on the established FDTD simulation method and manufacturing process, the design efficiency and process development efficiency of planar gratings can be greatly improved.

Key words grating design; grating simulation; grating manufacturing; diffraction grating; diffraction efficiency