

doi:10.3788/gzxb20154408.0805001

一种二维光栅结构衍射场计算中的快速收敛方案

邓浩¹, 陈树强¹, 全军²

(1 电子科技大学 物理电子学院, 成都 610054)

(2 岭南师范学院 物理科学与技术学院, 广东 湛江 524048)

摘 要: 基于 Lalanne 经验法与 Götz 法向矢量法的傅里叶因式分解过程, 给出了傅里叶模态层吸收法的一个快速收敛方案. 通过求解解析边界轮廓函数的梯度矢量, 简化了 Götz 法向矢量法的傅里叶因式分解过程, 使其单波长点计算时间降低两个量级. 通过距离反比权重法构造 4 个典型方向的法向矢量场, 降低了法向矢量法在傅里叶因式分解过程中的不确定性. 根据这 4 个典型法向矢量场与 Lalanne 经验法, 提供了 5 个傅里叶模态层吸收法的收敛性改进矩阵. 预先对 5 个收敛性改进矩阵优选分析, 选择一个最优矩阵进行傅里叶模态层吸收法的衍射模拟计算, 可以实现快速收敛. 计算结果表明, 对于硅材料简单结构, 优选的改进矩阵相比于非优选矩阵收敛性提高 2 阶左右, 能有效提高衍射场计算速度. 该方案可提高光栅设计和集成电路结构分析/测试的效率.

关键词: 衍射; 模拟算法; 层吸收法; 光栅; 严格耦合波分析; 法向矢量法; 收敛性; 测试

中图分类号: 0436

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2015)08-0805001-8

A Fast Convergence Solution for Calculation Diffraction of Crossed Gratings

DENG Hao¹, CHEN Shu-qiang¹, QUAN Jun²

(1 University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

(2 Zhanjiang Normal University, Zhanjiang, Guangdong 524048, China)

Abstract: Based on the Fourier factorization process in Lalanne's empirical method and Götz normal vector method, a fast convergence solution was proposed for Fourier modal slice absorption method. The gradient vectors of analytic boundary function were used to simplify the Fourier factorization process in Götz normal vector method, which made the calculation time for a single wavelength point reduced by 2 orders of magnitude. 4 typical types of normal vector fields were built by inverse distance weighting algorithm, and the degrees of freedom in normal vector method was reduced. According to these 4 normal vector fields and the Lalanne's method, 5 types of convergence improved matrices were finally presented. By pre-selection among the 5 matrices, an optimal matrix could be implemented in the calculation of Fourier modal slice absorption method to guarantee fast convergence. Calculation results demonstrate that for a simple silicon structure the optimal matrix has 2 diffraction orders improved compared with the unpreferred selected matrix, and effectively improves the simulation rate of diffraction. The proposed fast convergence solution is expected to improve the efficiency for grating design and analysis/testing of integrated circuit.

Key words: Diffraction; Simulation method; Slice absorption method; Grating; Rigorous couple wave analysis; Normal vector method; Convergence; Measurement

OCIS Codes: 050.1755; 050.1960; 050.2770; 120.3940; 120.5820

基金项目: 国家自然科学基金(No. 11304276), 广东省自然科学基金(No. 408224939030)资助

第一作者: 邓浩(1984-), 男, 博士研究生, 主要研究方向为微电子结构光学测试技术. Email: 383926996@qq.com

导师(通讯作者): 陈树强(1961-), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为微电子结构光学测试技术及光纤通信技术. Email: chensq@uestc.edu.cn

收稿日期: 2015-03-02; 录用日期: 2015-06-03

<http://www.photon.ac.cn>

0 引言

光栅衍射场的模拟计算对分析与设计光栅、光子晶体等周期结构具有重要意义^[1-3],在微电子半导体集成电路结构的分析/测试技术(如散射度量术, Scatterometry)中也有着广泛的应用^[4].传统光栅衍射场计算方法主要采用标量衍射模型^[5].但是随着半导体技术节点(Technology node)的不断更新以及半导体工艺的持续发展(以亚波长尺寸 3D 结构为代表的二维光栅结构大量出现),矢量衍射模型逐渐成为主流.其中,基于傅里叶空间展开实现的严格耦合波分析(Rigorous Coupled-wave Analysis, RCWA)应用最为成熟. RCWA 的命名最早来源于 Moharam 和 Gaylord 在 20 世纪 80 年代初的工作^[6],是过去工程实际中的主流提法^[7-8].为了更准确地描述其特点,该方法又被称为傅里叶模态法(Fourier modal Method, FMM)^[9-10]. RCWA 对于垂直侧壁周期结构的衍射模拟具有极高效率,但是对于复杂非垂直侧壁结构则需通过沿光栅侧壁方向阶梯近似分多薄层计算^[11].另一个值得注意的矢量衍射模型为傅里叶模态层吸收法(Fourier Modal Slice Absorption Method, FMSAM)^[12],该方法来源于 Rumpf 在 2007 年基于复杂周期结构模拟计算提出的一种差分方法——层吸收法^[13]. FMSAM 通过高斯消元实现求解,避免了 RCWA 特征值计算过程中的耗时性问题,适合于需要阶梯近似薄层数较多的非垂直侧壁复杂结构的计算.

FMSAM 傅里叶空间矩阵波动方程的建立包括沿光栅侧壁方向的差分网格化与沿光栅周期方向傅里叶级数展开两个过程^[14].因此其计算除了需要考虑选择合适的差分网格以保证数值稳定外,还需要考虑傅里叶级数展开过程所带来的收敛性问题^[14].当前,对于二维光栅衍射场的模拟计算,有效的收敛方法主要有 Lalanne 的经验收敛法^[15]与 Schuster 的法向矢量收敛法(Normal vector method)^[16].

Lalanne 经验法通过一个经验参数 α 的引入,实现对不符合傅里叶因式分解三规则^[14]的边界长度的最小化,从而提高 FMSAM 收敛性,实施高效简便,在实际工程中应用较多,但是它并不严格满足傅里叶因式分解三规则,难以实现对多数复杂二维光栅的有效收敛.法向矢量法则是通过引入光栅边界对应的辅助法向矢量场,以保证 FMSAM 在傅里叶空间的因式分解能较为严格地满足傅里叶因式分解三规则,但是现有的法向矢量场构造方法往往过程复杂且计算量较大,在实际工程中应用较少,如 Götz 等人的改进型法向矢量法^[17].当前任意结构的法向矢量场的构造与优选缺乏统一的方法和严格的理论解释,其中 Schuster 建议对典型周期结构采用两类法向矢量场构造模型(分段

常数型和静电型, Electrostatic model)^[16], Götz 采用距离反比权重法(Inverse distance weighting)并建议向右型法向矢量场作为优选^[17], Rafler 采用 Spline 方法并建议构造法向矢量场时避免不连续点或线^[18].因此,工程实际中针对不同结构需要尝试多种法向矢量场的收敛效果,这种不确定性大大降低法向矢量法的应用效率.

本文选择效率相对较高的距离反比权重法(简化其计算步骤)构造了四类典型法向矢量场.然后基于此四类典型法向矢量场与 Lalanne 经验法,为 FMSAM 模拟计算的收敛性改进提供了 5 个矩阵形式.对于二维光栅通常可以从该 5 个矩阵形式中优选出收敛性较好的方案,实现快速计算.

1 FMSAM 理论分析

考虑一个任意非磁性的多层二维光栅模型(如图 1),其问题区域包括覆盖层、光栅区域、和衬底层.对于 FMSAM 算法,问题区域将按照全场/散射场(Total Filed/ Scatter Filed, TF/SF) Yee 式网格模型实现沿光栅侧壁方向的差分网格化(如图 1,其中 S 与 U 为归一化的电场与磁场幅度向量)^[12].最终,可以通过如图 2 的一个傅里叶空间块矩阵波动方程求解其各阶衍射效率.

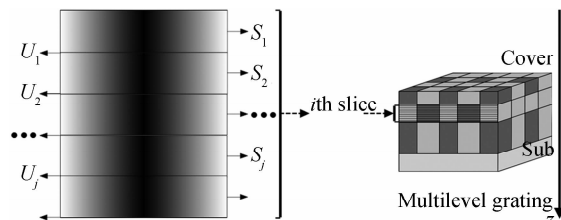


图 1 任意多层二维光栅及其网格模型示意图
Fig. 1 Arbitrary multilayer crossed grating sketch

图 2 所示块矩阵波动方程与文献[12]中式(20)等价,其各行方程是图 1 中各光栅网格的二阶差分波动方程.下标 i, j 表示第 i 层光栅第 j 网格($1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J_i$), \mathbf{R} 为归一化衍射场幅度向量,向量 $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$ 与源有关,由文献[12]中式(19)给出.各层光栅的重复网格方程可以通过对 RCWA 的二阶微分波动方程(文献[19]中式(6.54))作二阶差分近似直接得到;载源网格方程与各层光栅的边界网格方程则需由各边界位置处相邻两网格的一阶差分旋度方程推出.块矩阵方程中各网格所对应的系数矩阵 $\mathbf{a}_{i,j}, \mathbf{b}_{i,j}$ 由文献[12]所述方法给出,其中影响其收敛性的关键矩阵定义为

$$\mathbf{B}_{1,i,j} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_y \mathbf{E}_{\text{inv},i,j} \mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y \mathbf{E}_{\text{inv},i,j} \mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x \mathbf{E}_{\text{inv},i,j} \mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x \mathbf{E}_{\text{inv},i,j} \mathbf{K}_y \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B}_{2,i,j} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_x \mathbf{K}_y & \mathbf{E}_{i,j} - \mathbf{K}_y^2 \\ \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}_{i,j} & -\mathbf{K}_x \mathbf{K}_y \end{pmatrix} \quad (1)$$

式中, $\mathbf{E}, \mathbf{E}_{\text{inv}}$ 为介电系数及其倒数所对应的托普利兹

(Toeplitz)矩阵^[16], \mathbf{K}_x , \mathbf{K}_y 为对角元为 $\mathbf{K}_x(mn, mn) = N$, M, N 分别为 x, y 方向的截断衍射阶次, k_{xm}, k_{yn} 由 k_{xm} , $\mathbf{K}_y(mn, mn) = k_{yn}$ 的对角矩阵 ($0 < m < M, 0 < n < N$, Floquet 条件给出)^[12], \mathbf{I} 为单位矩阵.

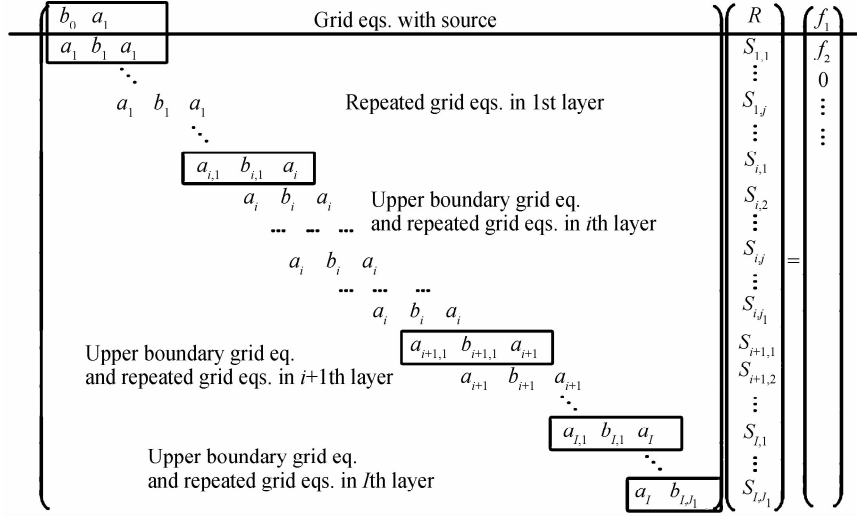


图2 二维光栅 FMSAM 衍射模拟的块矩阵波动方程

Fig. 2 The block matrix wave equation for diffraction of crossed grating using the FMSAM

2 收敛性改进理论

FMSAM 的波动方程基于傅里叶空间实现,因此需要考虑在傅里叶级数展开过程中带来的收敛性问题.如果采用式中原有的 \mathbf{B}_1 , \mathbf{B}_2 矩阵形式,对于复杂的二维光栅结构, FMSAM 算法将很难收敛,从而最终影响到微电子半导体集成电路结构的分析/测试速度.因此本文根据三个傅里叶因式分解规则^[14],并结合 RCWA-Lalanne 经验法^[15]与 RCWA 法向矢量法^[17],将式中的 \mathbf{B}_1 的矩阵修改为

$$\mathbf{B}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y \end{pmatrix} \quad (2)$$

将式(1)中的 \mathbf{B}_2 的矩阵修改为:

1) Lalanne's 经验法

$$\mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_x \mathbf{K}_y & \alpha \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1} + (1 - \alpha) \mathbf{E} - \mathbf{K}_y^2 \\ \mathbf{K}_x^2 - \alpha \mathbf{E} - (1 - \alpha) \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1} & -\mathbf{K}_x \mathbf{K}_y \end{pmatrix} \quad (3)$$

其中 α 为经验参数,由文献^[15]式(3)给出.

2) 法向矢量法

$$\mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_x \mathbf{K}_y - \Delta \mathbf{N}_{xy} & \mathbf{E} - \mathbf{K}_y^2 - \Delta \mathbf{N}_{xx} \\ \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E} + \Delta \mathbf{N}_{yy} & -\mathbf{K}_x \mathbf{K}_y + \Delta \mathbf{N}_{xy} \end{pmatrix} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{N}_{xy} = [[\mathbf{N}_x, \mathbf{N}_y]]$ 是法向矢量场的 x, y 方向分量 N_x, N_y 的实空间积的托普利兹矩阵, $\mathbf{N}_{xx}, \mathbf{N}_{yy}$ 定义类似; $\Delta = \mathbf{E} - \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1}$.

由于当前微电子结构一般可用规则形貌的二维光栅表示(如矩形、圆形、十字型等),为了简化 Götze 等的方法,本文以规则形貌边界轮廓的解析表达式为出发

点构造整个光栅区域的法向矢量场.具体过程包括:1) 将边界轮廓解析函数的梯度矢量函数离散化,并直接作为边界位置的法向矢量;2) 通过距离反比权重加速算法^[17],对非边界位置做法向矢量插值.图3为椭圆形光栅结构法向矢量场的构造过程示意图(位图分辨率为 32×32).

假定一个任意边界的周期结构,其边界的解析函数为

$$F(x, y) = 0 \quad (5)$$

那么可以用其归一化梯度表示边界位置的法向矢量

$$(N_{bx}, N_{by}) = \left(\frac{F_x(x, y)}{\sqrt{F_x^2 + F_y^2}}, \frac{F_y(x, y)}{\sqrt{F_x^2 + F_y^2}} \right) \quad (6)$$

式中, $F_x(x, y)$ 与 $F_y(x, y)$ 为 $F(x, y)$ 的偏微分函数, N_{bx} 与 N_{by} 表示边界位置法向矢量的 x, y 方向分量.离散化式(6),并将之表示在位图上可以得到如图3(a)的示意图.图3(a)中除了边界位置存在法向矢量外,其余位置均为零,因此需要通过插值得到其余位置处的法向矢量(图3(b)).该插值方法为距离反比权重法^[20],其数学过程为

$$\begin{cases} N_x^*(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{N_{bx}(x_i, y_i)}{|x-x_i|^2 + |y-y_i|^2}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{|x-x_i|^2 + |y-y_i|^2}}, \\ N_y^*(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{N_{by}(x_i, y_i)}{|x-x_i|^2 + |y-y_i|^2}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{|x-x_i|^2 + |y-y_i|^2}} \end{cases} \quad (7)$$

归一化 $N_x^*(x, y)$, $N_y^*(x, y)$ 可得

$$\begin{cases} N_x(x, y) = \frac{N_x^*(x, y)}{\sqrt{N_x^*(x, y)^2 + N_y^*(x, y)^2}}, \\ N_y(x, y) = \frac{N_y^*(x, y)}{\sqrt{N_x^*(x, y)^2 + N_y^*(x, y)^2}} \end{cases} \quad (8)$$

式中, n_b 是边界处法向矢量在位图中的离散个数, x_i , y_i 是边界上第 i 个法向矢量在位图中的位置.

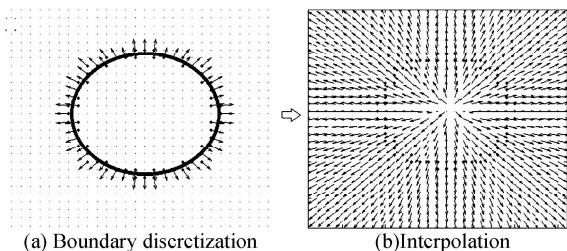


图 3 椭圆形光栅结构法向矢量场的构造过程示意图

Fig. 3 Normal vector field construction for elliptical grating

事实上, 直接应用式(7)与式(8)逐点计算法向矢量过于低效, 因此采用 Götzt 的加速算法, 最终得到所有位置处的法向矢量离散场. 该加速算法的主要思想为忽略远点位置处的权重影响, 只计算各个位置附近各点的加权和, 具体步骤为: 1) 根据邻近四个周期区域的所有边界位置处的法向矢量, 按照距离反比权重法确定图 4(a) 中点 P 的法向矢量; 2) 将一个周期区域四分, 计算图 4(b) 中左、中、上三个空心点的法向矢量 (空心点的值, 加权了周期区域内所有边界位置和 P 点的法向矢量); 3) 将各小区域再四分, 计算图 4(c) 中每个小区域左、中、上三个空心点的法向矢量 (1 与 2 步骤中已计算点标为实心, 所有空心点的值加权了每个小区域内边界位置和四个实心顶点的法向矢量); 4) 不断重复步骤 1)~3), 直到位图中所有位置的法向矢量都得到计算. 对于一个分辨率 R 为 $2^n \times 2^n$ 的位图, 最终仅需要 $n+1$ 次迭代即可构造整个法向矢量场.

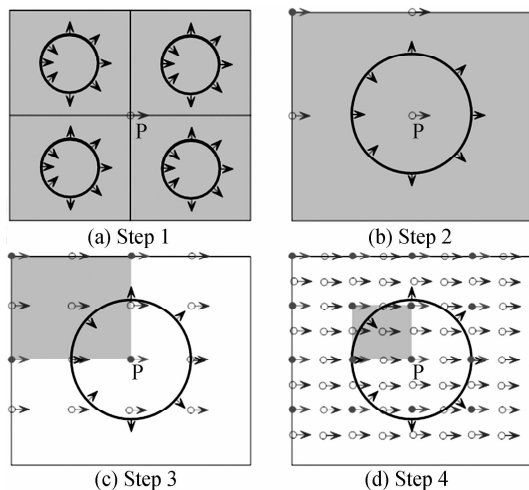


图 4 距离反比权重加速算法示意图

Fig. 4 Progressive refinement algorithm

针对具有规则形貌边界轮廓的光栅结构, 在构造法向矢量场时最终将 Götzt 方法的五个过程化简为如图 3 的两个过程. 由于减少了对基于阶梯近似调制位图的处理, 所需的位图分辨率 R 也可以降低到 256×256 (甚至更低), 相对于 Götzt 所建议的 2048×2048 分辨率位图^[17], 极大提高了法向矢量场的构造效率.

实际上对于二维衍射问题, 采用 Lalanne 经验法时, 单波长点 FMSAM 算法的时间复杂度为 $O(M^2 N^2)$; 而采用 Götzt 法向矢量法时, 单波长点的时间复杂度则为 $O(R^2) + O(M^2 N^2)$ ^[17]. 因此在截断衍射阶次 M, N 不太大的情况下, 单波长点的法向矢量法所需计算时间完全由法向矢量场的构造时间决定, 并远大于 Lalanne 经验法的计算时间. 本文通过采用解析边界轮廓函数, 最终将 Götzt 法向矢量场的构造时间降低两个量级甚至更低. 以截断衍射阶次 ($M=N=10$) 为例, 法向矢量场的构造时间与总计算时间的比值也由 2048×2048 位图对应的 99% 降为 256×256 位图所对应的 80%, 但是其总计算时间仍为 Lalanne 经验法的 4 倍左右. 另一方面, 实际工程中通常为宽谱光源 (波长范围往往在 10^3 量级) 下的衍射模拟^[21], 并不需要每一波长点都单独计算法向矢量场. 因此尽管法向矢量法在单波长点计算时比 Lalanne 经验法低效, 它仍然可以通过改进收敛性降低截断衍射阶次 M, N 来提高宽谱光源下的整体计算效率. 实际工程中宽谱光源的二维结构衍射模拟问题往往极为耗时, 单一的 Lalanne 经验法或者法向矢量法均难以满足当前的在线 (In-situ) 应用需求, 更多的需要采用建库 (或称为“数据库-查表”^[22]) 技术, 因此在建库过程中对具体结构预先综合考量 Lalanne 经验法与法向矢量法的计算效率并择优选用便具有现实意义. 当两者收敛性相同时, Lalanne 经验法为 FMSAM 计算过程中的首选. 文献[12]已给出 FMSAM 算法结合 Lalanne 经验法与法向矢量法的收敛性改进尝试, 但简单应用这两方法并不一定能对多种结构或者介质实现收敛性的有效提高. 原因在于 Lalanne 经验法本身具有理论缺陷, 而法向矢量法则在于法向矢量场的构造具有不确定性 (并非任一法向矢量场都能实现对多种结构的良好收敛).

由于当前法向矢量法的构造与优选存在较多不确定性. 因此, 结合入射偏振态与周期结构形貌, 经验性地将二维周期结构的法向矢量场分为右向/左向型 nv_0 、上向/下向型 nv_1 、内向/外向型 nv_2 、斜向型 nv_3 四类, 如图 5 (分辨率 R 为 32×32). nv_0 与 nv_1 侧重于体现法向矢量场在 $x-y$ 平面两个维度方向对收敛效果的影响, nv_2 侧重于体现法向矢量场的中心对称性对收敛效果的影响, nv_3 侧重于体现法向矢量场旋转角度的影响. 同时, 方向相反的法向矢量场仅仅带来一个负号的变化, 它们之间的收敛效果没有任何区别, 因此

将右向/左向、上向/下向、内向/外向分别归并. 这 4 个类型除了较为完备地描述了法向矢量场的方向属性外,还包括了不同的连续性,其中: nv0 为上下边界不连续; nv1 为左右边界不连续; nv2 为中心点与四周边界不连续; nv3 无不连续点. 因此此 4 个类型较为全面的描述了法向矢量场的各种情况. 本文收敛性优选方案基于该 4 类法向矢量场与 Lalanne 经验法,为 FMSAM 模拟计算的收敛性改进提供了 5 个 B_2 矩阵形式,通过对该 5 个矩阵形式的优选,最终提高 FMSAM 计算效率. 分别定义 5 个 B_2 矩阵为 B_{2_1} , B_{2_2} , B_{2_3} , B_{2_4} , B_{2_5} .

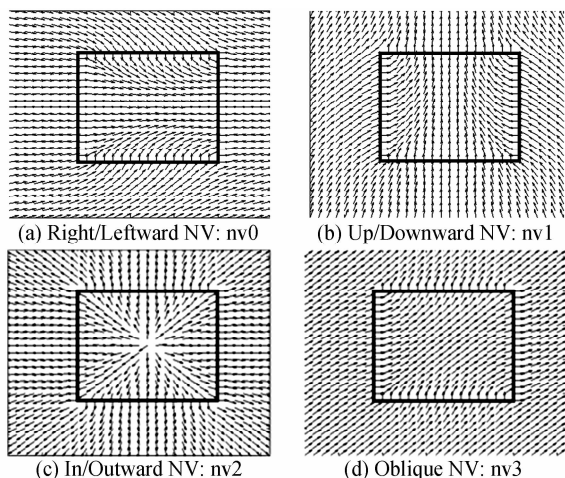


图 5 二维光栅结构的四类法向矢量示意图
Fig. 5 The 4 typical types of normal vector for crossed grating

3 收敛性讨论

数值示例 1 为四个典型的空穴型硅材料结构,如图 6,图中相应的四类法向矢量场如图 5 与图 7. 四个结构在 FMSAM 模拟中共有的输入参数如表 1. 图 8

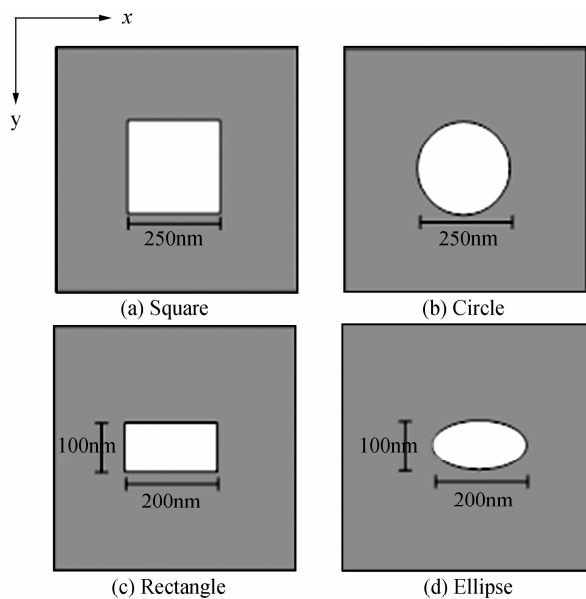


图 6 四类典型二维周期结构
Fig. 6 Four typical gratings

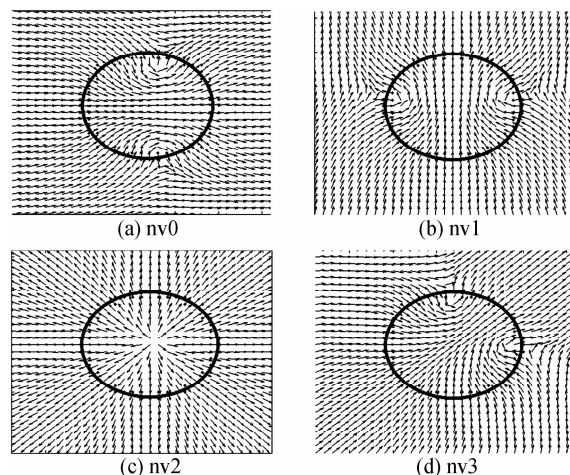


图 7 圆形/椭圆形二维周期结构的四类法向矢量示意图
Fig. 7 The four types of NV field for circle or ellipse structure

表 1 四个结构数值示例的共有输入参数

Table 1 Public simulation parameters for these 4 structures

Parameter	Value
Wavelength	500 nm
X Period, Y Period	500 nm, 500 nm
Thickness of grating	200 nm
Refractive index of substrate, cover	Si (4.30 + 0.071i), 1
Refractive index of gray, white region	Si (4.30 + 0.070i), 1
Incidence angle θ	0°
Bitmap resolution	256×256

是方形与圆形硅结构在各类法向矢量场下的收敛性结果, α 为 Lalanne 经验法结果.

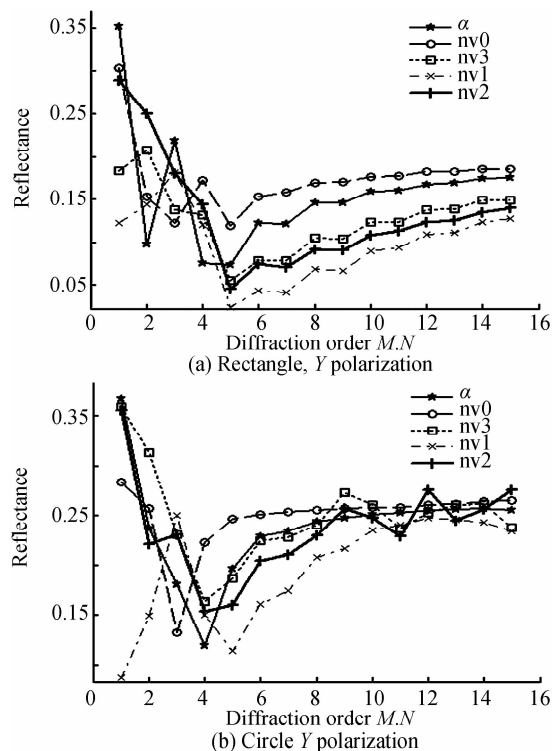


图 8 方形与圆形的收敛性分析比较图
Fig. 8 Convergence analysis for square and circle structure

可以看出,对于Y偏振垂直入射的方形或圆形简单硅结构均是右向/左向型法向矢量的收敛效果最好,即选择 $B_{2_{min}}$ 作为关键矩阵可以相对其它4个矩阵采用更小的截断衍射阶次 M,N 进行计算.并且由于方形与圆形结构在 x,y 方向的几何完全对称性, X 偏振下其FMSAM结果与图8具有对偶关系,即此时上向/下向型法向矢量的结果对应着Y偏振下右向/左向型的结果(X 偏振的结果不再给出).因此,对于方形或者圆形硅结构,Y偏振入射下它们的优选法向矢量场为右向/左向型,优选的关键矩阵为 $B_{2_{min}}$.简单情况下,一个可以推广到倾斜入射的经验性优选原则(优选原则1)是:对于方形或者圆形硅结构,Y偏振入射下右向/左向型法向矢量场($B_{2_{min}}$ 矩阵)为优选的; X 偏振入射下上向/下向型法向矢量场($B_{2_{min}}$ 矩阵)为优选的.

图9是矩形与椭圆形硅结构在各类法向矢量场下的收敛性结果,对于矩形与椭圆形硅结构, X 偏振垂直入射时(图9(c),(d)),上向/下向型法向矢量场对应的 $B_{2_{min}}$ 矩阵相对于其它4个关键矩阵有2阶左右截断

衍射阶次 M,N 的提高,可以作为优选,这一特性与优选原则1相同.但是Y偏振入射时(图9(a),(b)),却并非左向/右向型 $B_{2_{min}}$ 最优;此时,内向/外向型法向矢量场对应的 $B_{2_{min}}$ 矩阵可以采用更低的截断衍射阶次(2阶左右).这是由于Y偏振情况下左向/右向型法向矢量场的整体趋势并不能同时垂直于Y偏振方向与光栅长轴(或称为适应Y偏振方向与光栅长轴),最终导致其收敛效果不如内向/外向型,而 X 偏振情况则满足这一条件.图9中5个关键矩阵对截断衍射阶次的影响并不如图8中那么明显,但是工程实际中提高2阶左右的截断衍射阶次仍然具有一定价值(FMSAM算法在宽谱光源下的时间复杂度更多取决于 $O(M^2N^2)$).因此对于这类简单硅材料结构,即使5个 B_2 关键矩阵均能较快实现收敛,也可以通过经验性原则(优选原则2)在应用前预先作适当优选,即对于矩形或者椭圆形硅结构,法向矢量场的整体趋势以同时垂直于光栅长轴与入射偏振方向为宜;如不满足该条件,则再对5个关键矩阵进行综合比较与优选.

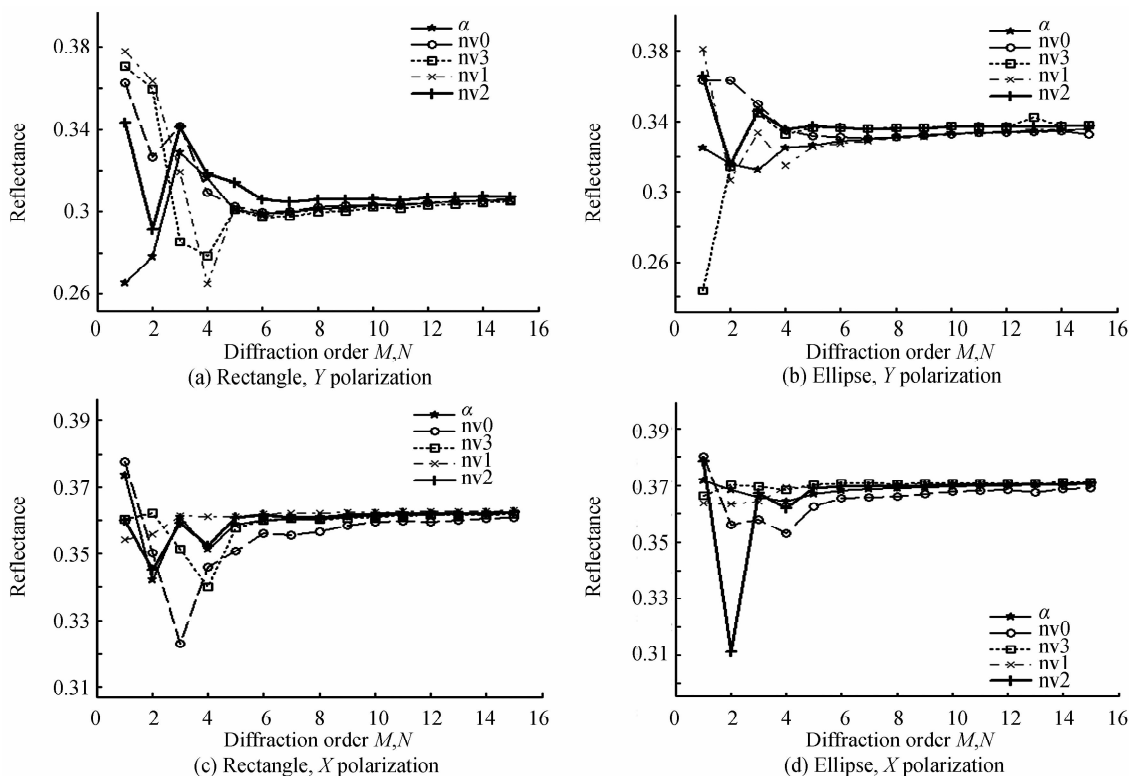


图9 矩形与椭圆形的收敛性分析比较图

Fig. 9 Convergence analysis for rectangle and ellipse structure

工程实际中,两个经验性原则能较快判断硅材料简单结构的优选 B_2 关键矩阵.对于Lalanne经验法能很好收敛的部分结构^[12],建议优先选择 B_2 矩阵.对于更复杂的情况,如高反射率金属材料或者复杂光栅形貌,则建议预先对5个关键矩阵进行优选分析.虽然这一预处理过程耗时较多,但是选择合适的关键矩阵并尽可能提高FMSAM的收敛性在工程实际的建库过程

中具有重要意义.

数值示例2为一种实现高透射调制的二维亚波长矩形金属阵列光栅^[23],如图10,其 x 与 y 方向周期为120 nm, x 方向矩形长为108 nm(占空比 $f_x=0.9$), y 方向矩形宽为66 nm(占空比 $f_y=0.55$),衬底为 SiO_2 其550 nm波长对应的实验测得折射率为1.46,金属材料为Al其550 nm波长对应的折射率为 $0.97+6.69i$,

厚度为 140 nm,入射源为波长为 550 nm 的垂直入射 Y 偏振平面波.其收敛性曲线比较如图 11,可以看出对于示例 2 情况,法向矢量法对应的 4 个关键矩阵收敛效果接近,均可以作为优选矩阵,其最低截断衍射阶次 M, N 可以选为 10,而此时 Lalanne 经验法则难以稳定收敛.事实上,对于多数高反射率金属材料结构而言, B_2 矩阵通常都不是一个恰当的选择.此外,在工程实际中,由于是宽谱光源入射(一般为 190~1 000 nm 波段),不同波段下所需的 B_2 关键矩阵可能并不相同,因此还需要分波段考虑对 FMSAM 模拟计算收敛性的影响.其中,对于波长较短的紫外波段(190~400 nm),其 FMSAM 结果往往更难收敛,选择一个恰当的 B_2 关键矩阵尤为重要.同时,由于法向矢量法在构造矢量场过程中耗时较多,应避免过多地构造法向矢量场.一般性的处理办法为在紫外、可见光、近红外三个波段分别设定一代表性波长点,然后在此三个波长点分别实施 5 个关键矩阵的优选,最后在各波段内分别以该优选关键矩阵进行 FMSAM 的模拟计算.对于示例 2 而言则可以分别在 300 nm, 900 nm 波长点重复 550 nm 的分析过程,并找到其各自对应的优选矩阵与最低截断衍射阶次.

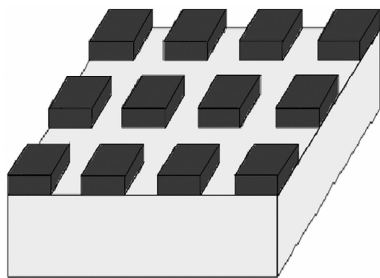


图 10 矩形金属阵列光栅
Fig. 10 Rectangle metallic array

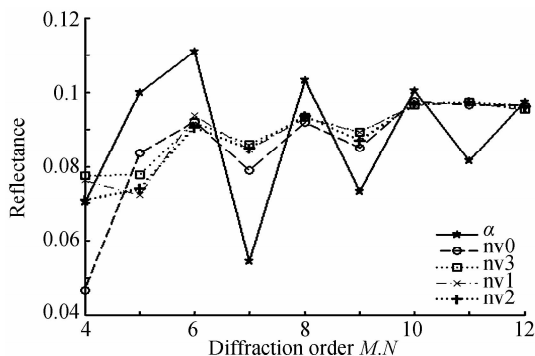


图 11 示例 2 的各矩阵形式对应收敛曲线
Fig. 11 Convergence curves for example 2

实际上,建库过程甚至需要进行数千次 FMSAM 在宽谱光源入射情况下的模拟计算,因此通过优选本文所述 5 个关键矩阵以改进 FMSAM 的收敛性对提高应用效率此时显得极为重要.5 个关键矩阵一方面兼顾 Lalanne 经验法的便捷高效,另一方面确保在 4 个较

为完备描述法向矢量场属性的关键矩阵中优选出至少一个矩阵以有效提高 FMSAM 收敛性.

4 结论

本文基于 Lalanne 经验法与法向矢量场法,为 FMSAM 模拟计算的收敛性改进提供了 5 个关键矩阵,通过对 5 个关键矩阵的优选,提高了 FMSAM 在工程实际中的计算效率.其中,通过降低法向矢量场构造过程中的不确定性,给出了完备表征各类法向矢量场的 4 类情况,并简化了其构造过程.但是由于单波长点法向矢量型 FMSAM 的计算时间仍然远高于 Lalanne-FMSAM,因此在实际工程的宽谱光源模拟问题中,应在考虑入射波波波长影响的同时尽量避免过多构造法向矢量场.最后,给出了硅材料简单结构的两个经验性关键矩阵优选原则.对于更普遍性的情况,则建议预先对 5 个关键矩阵进行优选分析;在所需截断衍射阶次相同的情况下,优先选择 Lalanne 经验法关键矩阵.

参考文献

- [1] FAN Shu-wei, ZHOU Qing-hua, LI Hong. Research of optimization design of groove diffraction grating profile parameters[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(11): 3133-3139.
樊叔伟,周庆华,李红.槽型衍射光栅结构参数优化设计研究[J]. *光学学报*, 2010, **30**(11): 3133-3139.
- [2] YU Wei-xing, LU Zhen-wu, WANG Peng, et al. Vector diffraction characteristic of profile two-dimensional subwavelength surface-relief structure [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2001, **30**(3): 331-335.
鱼卫星,卢振武,王鹏,等.锥形轮廓亚波长二维表面浮雕结构的矢量衍射特性[J]. *光子学报*, 2001, **30**(3): 331-335.
- [3] TONG Kai, ZEN Wen-zhi, GU Chao-cong, et al. Effects of coating on sensitivity of photonic crystal biosensor[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2013, **40**(2): 0214002.
童凯,曾文智,谷朝聪,等.覆层介质对光子晶体生物传感器灵敏度的影响[J]. *中国激光*, 2013, **40**(2): 0214002.
- [4] CHALYKH R, PUNDALEVA I, KIM S, et al. Simulation of critical dimension and profile metrology based on scatterometry method[C]. SPIE, 2006, **6349**: 63491K.
- [5] DENG Xiao-jun, GAO Feng, LIU Cai-xia, et al. Non paraxial approximation of scalar diffraction theory and its validity[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(6): 898-901.
邓小玖,高峰,刘彩霞,等.标量衍射理论的非旁轴近似及其有效性[J]. *光子学报*, 2006, **35**(6): 898-901.
- [6] MOHARAM M G, GAYLORD T K. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction [J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1981, **71**(7): 811-818.
- [7] DIEBOLD A C. Handbook of silicon semiconductor metrology [M]. New York: Marcel Dekker, 2001.
- [8] THONY P, HERISSON H, HENRY D, et al. Review of CD measurements and scatterometry [C]. API Conference Proceedings, 2003, **683**: 381-388.
- [9] LI L. Mathematical Modeling in Optical Science [M]. Philadelphia: SIAM, 1987.
- [10] LI L. Gratings: Theory and Numeric Applications [M]. 2nd, Marseille: AMU, 2014.
- [11] MOHARM M G, POMMET D A, GRANN E B, et al. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis

- for surface-relief gratings; enhanced transmittance matrix approach[J]. *Journal of the Optical Society of America, A*, 1995, **12**(5): 1077-1086.
- [12] DENG H, CHEN S Q. Efficient implementation of Fourier modal slice absorption method for lamellar crossed gratings [J]. *Optical Engineering*, 2013, **52**(6): 068201.
- [13] RUMPF R C, TAL A, Kuebler S M. Rigorous electromagnetic analysis of volumetrically complex media using the slice absorption method[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2007, **24**(10): 3123-3134.
- [14] LI L. 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.
- [15] LALANNE P. Improved formulation of the couple-wave method for two-dimensional gratings [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1997, **14**(7): 1592-1598.
- [16] SHUSTER T, RUOFF J, KERWIEN N, *et al.* Normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings[J]. *Journal of the Optical Society of America, A*, 2007, **24**(9): 2880-2890.
- [17] GÖTZ P, SCHUSTER T, FRENNER K, *et al.* Normal vector method for the RCWA with automated vector field generation[J]. *Optics Express*, 2008, **16** (22): 17295-17301.
- [18] RAFLER S, Götz P, PETSCHOW M *et al.* Investigation of methods to set up the normal vector field for the Differential Method[C]. SPIE, 2008, 6995: 69950Y.
- [19] RUMPF R C. Design and optimization of nano-optical elements by copling fabrication to optical behavior [D]. Orlando; University of Central Florida, 2006.
- [20] FRANKE R. Scattered data interpolation; tests of some methods[J]. *Mathematics of Computation*, 1982, **38**(157): 181-200.
- [21] VAGOS P, HU J, LIU Z *et al.* Uncertainty and sensitivity analysis and its applications in OCD measurements [C]. SPIE, 2009, 7272: 72721N.
- [22] WEI Shi-ming. Application of scatterometry in grating profile measurement and fabrication of echelette gratings [D]. Beijing; Tsinghua University, 2010.
魏石铭. 衍射度量术在光栅形貌测量与小阶梯光栅制作中的应用[D]. 北京: 清华大学, 2010.
- [23] CHEN Juan, YAN Lian-shan, PAN Wei *et al.* Arbitrary polarization transformation based on two-dimensional metallic rectangular gratings[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(12): 1224001.
陈娟, 闫连山, 潘炜, 等. 二维金属矩形光栅的偏振控制及其透射特性[J]. 光学学报, 2011, **31**(12): 1224001.