



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 101988896 B

(45) 授权公告日 2013. 12. 25

(21) 申请号 201010158813. 5

审查员 张洁

(22) 申请日 2010. 04. 23

(30) 优先权数据

10-2009-0070308 2009. 07. 30 KR

10-2010-0009753 2010. 02. 02 KR

(73) 专利权人 庆熙大学校产协力团

地址 韩国京畿道

(72) 发明人 金荣东 郑珍谟 韩承镐

(74) 专利代理机构 北京德琦知识产权代理有限公司 11018

代理人 康泉 宋志强

(51) Int. Cl.

G01N 21/47(2006. 01)

G01N 21/59(2006. 01)

(56) 对比文件

US 2008/0297770 A1, 2008. 12. 04, 说明书第12-14, 17, 35, 40, 43, 53-54, 121 段及说明书附图1-8.

US 6867866 B1, 2005. 03. 15, 全文.

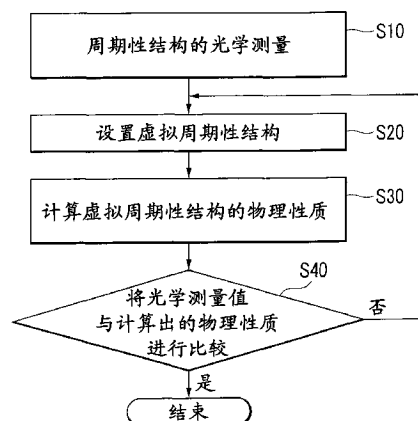
权利要求书1页 说明书18页 附图7页

(54) 发明名称

周期性结构的非破坏性分析方法

(57) 摘要

本发明提供一种周期性结构的非破坏性分析。在该方法中, 设置虚拟周期性结构并将其划分成多层。通过利用李普曼-薛定谔方程以及M次插值, 计算与所述虚拟周期性结构的反射率或透射率有关的物理性质。在对李普曼-薛定谔方程的离散化中采用的M次插值公式使得能够准确快速地计算周期性结构的物理性质。



1. 一种周期性结构的非破坏性分析方法,包括以下步骤:

(a) 照射实际周期性结构,并测量与所述实际周期性结构响应于所述照射的反射率或透射率有关的至少一个物理性质;

(b) 通过以下步骤计算与虚拟周期性结构响应于所述照射的反射率或透射率中至少之一有关的至少一个物理性质,

设置具有一维、二维或三维重复形状以及至少水平重复周期的虚拟周期性结构,

将所述虚拟周期性结构划分成垂直堆叠的 N 层,

根据所述虚拟周期性结构定义零级结构和扰动结构,所述扰动结构通过在扰动域中对所述零级结构进行几何或物理改变而获得,

计算在光入射到所述零级结构上时的零级反射波或透射波,

针对所述虚拟周期性结构的至少一个划分层,使用 M 次插值对李普曼-薛定谔方程进行离散化,其中 $2 \leq M \leq N$,

根据离散化的李普曼-薛定谔方程计算扰动反射波或透射波,以及

根据所述零级反射波或透射波以及扰动反射波或透射波计算扰动反射率或透射率;以及

(c) 将步骤 (a) 中测得的与反射率或透射率有关的至少一个物理性质与步骤 (b) 中计算出的与反射率或透射率中至少之一有关的至少一个相应物理性质进行比较,

其中步骤 (b) 进一步包括以下步骤:

将所述虚拟周期性结构的 N 层分为 X 段,其中 $1 \leq X \leq (N-1)$,以及

针对所分的段使用 M_i 次插值对所述李普曼-薛定谔方程进行离散化,其中 $1 \leq M_i \leq N$.

2. 根据权利要求 1 所述的方法,其中所分的段中至少之一与其它段具有不同的层数。

3. 根据权利要求 1 所述的方法,其中所述反射率或透射率是零级以及其它可探测衍射级的反射率或透射率。

4. 根据权利要求 1 所述的方法,其中所述虚拟周期性结构的表面具有层外物质,所述物质是气态、液态或固态。

5. 根据权利要求 1 所述的方法,其中所述虚拟周期性结构被允许具有至少一个表面层,并且所述表面层包括从氧化层、涂层或表面粗糙层构成的组中选择的至少一层。

6. 根据权利要求 1 所述的方法,其中所述物理性质与入射波的反射波或透射波的振幅或相位有关。

7. 根据权利要求 1 所述的方法,其中步骤 (b) 进一步包括以下步骤:

将每个划分层中的扰动势展开成傅立叶级数,以及

根据层索引将扰动波的 M 次插值公式独立地应用到各个划分层中的反射波或透射波。

8. 根据权利要求 1 所述的方法,其中所述虚拟周期性结构被划分成具有至少两个不同高度的 N 层。

周期性结构的非破坏性分析方法

[0001] 相关申请的交叉引用

[0002] 本申请要求分别于 2009 年 7 月 30 日和 2010 年 2 月 2 日递交韩国知识产权局的韩国专利申请 No. 10-2009-0070308 和 No. 10-2010-0009753 的优先权和权益,这两个专利申请的全部内容通过引用合并于此。

技术领域

[0003] 这里描述的本发明涉及周期性结构的分析方法,该方法示例性地通过借助于反射率或透射率测量的非破坏性测试来执行。

背景技术

[0004] 通常,为制备诸如半导体器件或显示器件之类的电子器件,会多次重复清洗、薄膜生长、光刻和薄膜刻蚀工艺来制作消费品。例如,在光刻工艺中,形成具有待制备图像的掩模电路,并将其转移到感光材料(光刻胶)以形成图案,之后使用该图案作为刻蚀屏障以在薄膜上形成期望的电路。

[0005] 在使用光刻工艺制备的半导体和显示器件中,需要在每个步骤将期望的电路以准确的形状转移到薄膜。这基于光刻工艺的准确度而成为可能。也就是说,只有在期望图案的形状被准确地转移到光刻胶并且抗蚀层正确地起到刻蚀屏障的功能时,才能在薄膜上形成准确的电路。也就是说,在薄膜上形成电路之前,需要通过光刻胶形成准确的图案,并且该图案可以通过测试过程确认。

[0006] 为了对图案进行测试,通常使用例如使用图案测试器以光学方式观察半导体器件的形状的方法。然而,由于图案测试器的分辨率不足以确定长度仅几个纳米的“纳米级”图案的形状,因此使用图案测试器很难执行准确的分析。为克服这个缺陷,在半导体研发和生产线上,使用了诸如电子显微镜之类的仪器分析特定形状的方法。

[0007] 然而,由于在使用电子显微镜时半导体器件的一部分被切割下来用于其形状分析,所制备的半导体器件就不能再使用了。而且,由于在真空环境下进行测量,因此可能花很长的时间才能得到测量结果。而且也不可能选择待测量样品的多个区域。由于上述缺点,电子显微镜在生产线上中的应用有一定的局限性。

[0008] 为了克服上述缺陷,已经开发出使用光学测量方法的技术,包括例如称为有效介质近似(EMA)的近似技术。使用EMA的计算方法的问题在于,由于近似值仅由给定周期内组成物质的体积比获得,而不考虑结构的具体形状,因此,这种计算方法不可能识别结构的具体形状。也就是说,由于无法具体地识别具有周期性结构的电路的每个图案的形状,而仅仅识别给定周期内组成物质的体积比,因此实际结构与测量得到的结构之间的差别很大。具体来说,在周期性结构中,由于在不同的周期性结构的体积比相同的情况下,使用EMA的计算方法不能够分清这些不同的周期性结构,因此,特别需要一种新的光学测量方法。

发明内容

[0009] 因此,在本发明的一实施例中,提供一种非破坏性测试方法,该方法能够分析周期性结构的具体形状及其内部组分。

[0010] 在本发明的具体实施例中,提供一种周期性结构的非破坏性测试方法,该方法包括以下步骤:(a) 照射实际周期性结构,并测量与所述实际周期性结构响应于所述照射的反射率或透射率有关的至少一个物理性质;(b) 通过以下步骤计算与虚拟周期性结构响应于所述照射的反射率或透射率中至少之一有关的至少一个物理性质:设置具有一维、二维或三维重复形状以及至少水平重复周期的虚拟周期性结构,将所述虚拟周期性结构划分成垂直堆叠的N层,根据所述虚拟周期性结构定义零级结构和扰动结构,所述扰动结构通过在扰动域中对所述零级周期性结构进行几何或物理改变而获得,计算在光入射到所述零级结构上时的零级反射波或透射波,针对所述虚拟周期性结构的至少一个划分层,使用M次插值($2 \leq M \leq N$)对李普曼-薛定谔方程进行离散化,根据离散化的李普曼-薛定谔方程计算扰动反射波或透射波,以及根据所述零级反射波或透射波以及扰动反射波或透射波计算扰动反射率或透射率;以及(c) 将步骤(a)中测得的与反射率或透射率有关的至少一个物理性质与步骤(b)中计算出的与反射率或透射率中至少之一有关的至少一个相应物理性质进行比较。

[0011] 根据本发明的一实施例,步骤(b)进一步包括以下步骤:将所述虚拟周期性结构的N层分为X段($1 \leq X \leq (N-1)$),以及针对所分的段使用 M_i 次插值($1 \leq M_i \leq N$)对所述李普曼-薛定谔方程进行离散化。

[0012] 根据本发明的一实施例,所分的段中至少之一与其它段具有不同的层数。

[0013] 所述反射率或透射率可以是主级(零级)以及其它可探测衍射级的反射率或透射率。

[0014] 所述虚拟周期性结构的表面可以具有层外物质,所述物质是气态、液态或固态。

[0015] 所述虚拟周期性结构能够被允许具有至少一个表面层,并且所述表面层包括从氧化层、涂层或表面粗糙层构成的组中选择的至少一层。

[0016] 所述物理性质可以与入射波的反射波或透射波的振幅或相位有关。

[0017] 根据本发明的一实施例,其中步骤(b)进一步包括以下步骤:将每个划分层中的扰动势展开成傅立叶级数,以及根据层索引将扰动波的M次插值公式独立应用到各个划分层中的反射波或透射波。

[0018] 所述虚拟周期性结构可以被划分成具有至少两个不同高度的N层。

[0019] 因此,根据本发明的具体实施例,通过使用M次插值对李普曼-薛定谔方程进行离散化,可以更快速地执行与虚拟周期性结构的反射率或透射率有关的物理性质的准确计算。此外,可以精确地测试相对于其上具有天然氧化层或特意形成的表面涂层的初始周期性结构的细微变化。半导体工业或其他纳米技术的发展可以从本发明的实施例中获益。

附图说明

[0020] 根据参考附图对本发明优选实施例的详细描述,本发明实施例的特征和优点将变得明显,附图中,

[0021] 图1是示意性示出根据本发明一实施例的测试方法的流程图;

[0022] 图2和图3是示意性示出周期性结构的测试装置的框图;

- [0023] 图 4 是示出虚拟周期性结构的一示例的透视图；
- [0024] 图 5 是图 4 的虚拟周期性结构被划分为多层的截面图；
- [0025] 图 6 是示出虚拟周期性结构的另一示例的透视图；
- [0026] 图 7 是图 6 的虚拟周期性结构被划分为多层的截面图；
- [0027] 图 8 是根据本发明一实施例的示例性虚拟周期性结构的几何构成的截面图；
- [0028] 图 9 至图 14 是示出从通过 RCWA 方法、使用一次插值的格林函数方法、以及根据本发明一实施例的方法，即使用二次插值的格林函数方法计算的虚拟周期性结构的主级反射率 (principal order reflectance) 得到的结果的图。

具体实施方式

[0029] 以下将参照附图更充分地描述本发明的具体实施例。但本发明的实施例可以通过各种更改来实现，并不限于这里描述的示例性实施例。

[0030] 首先，通过图 1 至图 3 示出了根据本发明一实施例的测试周期性结构的总体流程。

[0031] 图 1 是示意性示出根据本发明一实施例的测试方法的流程图，图 2 和图 3 是示意性示出周期性结构的测试装置的框图。

[0032] 根据本发明的一具体实施例，非破坏性测试方法包括通过照射实际周期性结构来测量光学性质的步骤 (S10)，设置虚拟周期性结构的步骤 (S20)，计算虚拟周期性结构的物理性质的步骤 (S30)，以及将所测量的物理性质与所计算的物理性质进行比较的步骤 (S40)。

[0033] 以下对各个步骤进行详细描述。

[0034] 周期性结构的测量

[0035] 首先，通过照射待测试的实际周期性结构，从测量到的反射率或透射率中提取出光学性质 (S10)。反射率 (R) 在周期性结构的反射特征占主导时测量，透射率 (T) 在透射特征占主导时测量。可以使用如图 2 或图 3 所示的测试装置来执行步骤 S10。

[0036] 参见图 2，测试装置包括光源 (100)、探测器 (110)、处理器 (120) 和衬底 (130)。在作为测试对象的周期性结构被放置在衬底 (130) 上时，光源 (100) 向周期性结构 (200) 发出具有特定波长或多种波长的光。

[0037] 入射到周期性结构 200 上的光部分被透射且部分被反射。反射光在探测器 110 中被检测到，并且在处理器 120 中计算探测器 110 中所测量的反射波的反射率。透射光也在探测器 110 中被检测到，并且在处理器 120 中计算探测器 110 中所测量的透射波的透射率。

[0038] 测试装置可以进一步包括起偏器 140，如图 3 所示。在这种情况下，从光源 100 产生的光通过起偏器 140 被偏振为 TE 模或 TM 模的光，并被入射到周期性结构 200 上。

[0039] 当光入射到周期性结构 200 上时，入射光被分成反射光和透射光。在本发明一实施例中，计算光在最基本的两种偏振态，即 TE 模和 TM 模下的反射或透射的反射率或透射率，以执行周期性结构的非破坏性测试。

[0040] 例如，与通过允许光入射到周期性结构上而测得的反射率或透射率有关的物理性质可以被理解为以下物理性质的组合：与反射波和透射波相对于 TE 模电场的入射波的振幅或相位有关的物理性质，以及与反射波和透射波相对于 TM 模磁场的入射波的振幅或相位有关的物理性质。

[0041] 如上所述,可以在制造半导体器件的过程中通过将光照射到测试对象上并测量反射率或透射率来简单地执行步骤S10。因此,可以在不改变制造环境的情况下容易地执行半导体器件的非破坏性测量。

[0042] 应当建立使得所计算的反射率或透射率与所测量的反射率或透射率相等的虚拟对象,因为这种虚拟对象的结构将与步骤S10中执行光学测量所基于的周期性结构(200)相同。虚拟周期性结构的反射率或透射率在步骤S20和S30中计算。

[0043] 为了计算虚拟周期性结构的 Ψ 和 Δ ,首先需要在步骤S20中假设虚拟周期性结构。通常,在制造半导体器件时有期望的结构,因此基于期望的结构来假设虚拟周期性结构。

[0044] 虚拟周期性结构

[0045] 图4至图8示出虚拟周期性结构的示例。

[0046] 图4是示出虚拟周期性结构的一示例的透视图,图5是图4的虚拟周期性结构被划分为多层(N层)的截面图,图6是示出虚拟周期性结构的另一示例的透视图,并且图7是图6的虚拟周期性结构被划分为多层的截面图。

[0047] 图4和图5以及图6和图7示出虚拟周期性结构的示例。可以通过(i)将零级结构(图4和图5以及图6和图7可以被理解为表示该例子中的零级结构)(200a或200b)划分成多个薄层,(ii)使用两种类型的积分常数得到各个层中的投影空间零级反射或透射波的函数形式,并(iii)通过所划分的层的边界面处的匹配条件选定积分常数,来执行步骤S30的计算。

[0048] 与图4和图5不同,图6和图7示出虚拟周期性结构(200b)表面上的假定表面层(210),例如氧化物层等。因为通常即使是在真空中执行半导体的制造工艺,也会快速形成薄的表面层,因此可能更期望在实施步骤S30时,如图6和图7所示的那样考虑表面层(210),而不是如图4和图5所示。

[0049] 在虚拟周期性结构(200a)是具有例如一维、二维或三维周期性构成的形状的半导体器件时,虚拟周期性结构(200a)具有这样的构造:两种物质或各层中由例如硅等的一种物质形成的两个物质部分(折射率从 n_1 至 n_L),以及例如空气层等的入射部分的物质部分(折射率从 $\tilde{n}_1$ 至 $\tilde{n}_1$)。在水平方向上是周期性的。

[0050] 然而,在半导体工艺等的实际环境中,由于不可能在完全真空的状态下制备周期性结构,因此实际周期性结构的表面上会通过空气或水相接触而形成氧化层。另外,在工艺步骤中,由于在周期性结构的表面上特意形成涂层或者在周期性结构的表面上出现粗糙层,因此图4的周期性结构在与实际的几何形状相匹配的接近程度方面存在限制。

[0051] 图6和图7示出虚拟周期性结构(200b)表面上的表面层(210),例如氧化层等。当虚拟周期性结构(200b)的一部分被划分成多层时,虚拟周期性结构(200b)具有这样的构造:其中至少三种物质被周期性重复,如图7所示。虚拟周期性结构200b包括形成在与槽区域相对应的第三物质两侧的脊区域。该脊区域由形成中心部分的第一物质以及包括形成在中心部分外表面上的表面层的第二物质形成。

[0052] 在图7中, $n_1(1=2,\dots,L)$, $\tilde{n}_l(l=2,\dots,L-1)$,以及 $\bar{n}_l(l=1,\dots,L)$ 分别表示脊区域(第一物质)、槽区域(第三物质)以及表面层区域(第二物质)的折射率。

[0053] 表面层区域（第二物质）可以是氧化层或涂层，或者如该例所示，也可以是周期性结构表面的粗糙层。占据槽区域的第三物质可以是气态、液态或固态，或者是气态、液态或固态的混合。

[0054] 例如，当虚拟周期性结构（200b）是半导体器件时，除最高层（层 1）之外的多层（1 至 L）可以由第一物质形成，其中第一物质是诸如硅等的半导体，并且最高层（层 1）是诸如氧化层或涂层之类的第二物质。第三物质是空气层或者其它气体、液体或固态物质，且可以被布置在层 1 至层 L 之间的槽中。层 1 至 L 以及第三物质可以在周期性结构内水平且周期性地重复。

[0055] 当在考虑诸如氧化层、涂层或表面粗糙层之类的表面层（210）的情况下设置虚拟周期性结构（200b）时，虚拟周期性结构的反射率或透射率可被计算得更接近于实际周期性结构的反射率或透射率。因此，可以准确地测量实际周期性结构的形状和组分。具体来说，可以对周期性结构的几何形状和内部组分进行比较和分析，包括周期性结构内存在的薄膜结构的厚度。

[0056] 通过计算从以上确定的虚拟周期性结构得到反射率或透射率（S30）。稍后描述反射率或透射率的计算方法。

[0057] 在下一步骤（S40）中，将步骤 S30 中计算出的反射率或透射率与步骤 S10 中测量的反射率或透射率进行比较。将实际测量的周期性结构的反射率或透射率或相关的物理量与计算出的虚拟周期性结构的反射率或透射率或相关的物理量进行比较。当这些值在预定的误差范围内相等时，可以将根据反射率或透射率的测量确定的实际周期性结构的结构确定为与虚拟周期性结构的结构相同。

[0058] 在将测量的反射率或透射率与计算出的反射率或透射率进行比较时，可以使用诸如计算机之类的附加设备来比较测量值和计算值。通过这种方法，可以精确地、高效地确定实际结构（200）的几何构造，如形状和维度方面。

[0059] 另外，由周期性结构产生的反射波或透射波具有若干衍射级，包括主级（零级）。通常考虑主级波，但在周期性结构的图形（profile）不对称时，也应考虑其它级（1、2、...、以及 -1、-2、...）。本发明的具体实施例可以同样应用于除主级之外的级的反射光或透射光。

[0060] 在上述比较中，如果计算出的量和测量的量在预定的误差范围内相等，则结束测试过程，因为步骤 S10 中测量的实际周期性结构（200）与步骤 S20 中的虚拟周期性结构相同。相反，如果计算出的量和测量的量不相等，则使用改变后的虚拟周期性结构的光学参数和几何参数，通过重复步骤 S20 和 S30，得到新的反射率或透射率。

[0061] 零级波的计算

[0062] 紧接着上述过程执行使用格林函数方法对周期性结构进行分析的过程。

[0063] 以下描述应当在步骤 S30 中执行以得到计算的反射率或透射率的计算。

[0064] 在本发明的一实施例中，为了计算虚拟周期性结构的物理性质，设置具有相同周期的另一虚拟周期性结构的形状，该结构被称为零级结构。然后，通过在扰动域中给零级结构增加定义扰动势的几何或物理变化，来建立初始虚拟结构。

[0065] 首先通过严格耦合波分析（RCWA）方法计算零级反射波或透射波，然后，使用 M 次插值公式（ $2 \leq M \leq N$ ，N 是所划分的层数），针对划分的每个层中被近似为具有未知系数的

二次函数的电场或磁场,将李普曼-薛定谔方程离散化。通过将从离散化产生的一系列满足微分方程的函数(integral)进行积分,产生线性方程系统。从该线性方程系统的解,即扰动反射波或透射波以及零级反射率或透射率中,提取出扰动反射率或透射率。一旦得到扰动反射率或透射率,最终就可以计算出扰动结构的计算的反射率或透射率。在该过程中,尽管小数目的划分层减少了计算时间,但同时也降低了结果的准确性。因此,为了防止针对小数目划分层的准确性降低,可以采用M次插值。可以针对从虚拟周期性结构划分的每层或每个区域(层束)有差别地应用M次插值。例如,对区域(或层)A应用二次插值,对区域(或层)B应用四次插值,并对区域(或层)C应用一次插值。根据虚拟周期性结构的形状,M次插值可以对于每层或每个区域而改变。随着插值次数变高,计算的准确性可以最多以2的幂增大。结果,本发明的分析在针对小数目划分层的计算时间减少的同时保证了计算的准确性。

[0066] 从虚拟周期性结构划分出的N层可以被进一步分成X段($1 \leq X \leq (N-1)$)。在这种情况下,对于分成的段,使用 M_i 次插值($1 \leq M_i \leq N$, N是所划分的层数)对李普曼-薛定谔方程进行离散化。例如,N层可以被分成N/2段(结果,虚拟周期性结构基本被划分成N/2个层对),然后对每段(或每对)应用二次插值。同样,N层可以被分成N/4段,然后对每段应用四次插值。

[0067] N层可以以每段具有不同大小的方式被分成X段。也就是说,分成的段中的至少一段可以具有与其它段不同的层数。在这种情况下,可以针对具有不同层数的各个段有差别地应用 M_i 次插值。

[0068] 如上所述,可以通过RCWA方法计算零级反射率或透射率。为此,如图4至图7所示,将零级结构(在这种情况下,将图4至图7理解成表示零级结构)(200a或200b)划分成多个薄矩形截面形状的层(1至L)。

[0069] 接下来,将每层中的零级介电函数展开为傅立叶级数。在光入射到零级结构(200a或200b)上时,将每层中的反射波或透射波也展开为傅立叶-弗洛奎级数(Fourier-Floquet series),该级数的系数定义通过匹配电磁波在边界面处的条件而确定的投影空间零级波函数(Z的)。

[0070] 根据前述投影空间零级波函数,计算出零级结构的TE模电场的反射率或透射率($R_{TE}^{[0]}$ 和 $T_{TE}^{[0]}$)以及TM模磁场的反射率或透射率($R_{TM}^{[0]}$ 和 $T_{TM}^{[0]}$),并将计算出的值用于相应扰动值的计算中。

[0071] 可以通过增加从虚拟周期性结构(200a或200b)划分的层数,并相应地增加傅立叶级数展开的项数,得到更精确的解。以下将参照图6和图7中的虚拟周期性结构描述扰动反射率或透射率的计算方法。

[0072] 通过应用零级反射率或透射率的计算方法,可以得到扰动域中的零级结构的格林函数。

[0073] 一旦通过李普曼-薛定谔方程计算出虚拟结构各层中的TE模电场或TM模磁场的投影空间波,就能提取出TE模电场的扰动反射率或透射率(R_{TE} 和 T_{TE})以及TM模磁场的扰动反射率或透射率(R_{TM} 和 T_{TM})。

[0074] 根据本发明的一实施例,入射媒介(区域I)和物质(区域II)之间的零级结构被划分成L层,其中的某些层或所有层由相同的物质形成。存在用于设置零级结构的多种可

能性,其中涉及的是以下情况:整个扰动区中所有层中的每一层由相同的物质形成,扰动区中的所有层由单个相同的物质形成,扰动区被布置为衬底上的空气层,以及各层并非由相同的物质形成,但所有层由一个重复的给定层形成。

[0075] 实施例

[0076] 以下将描述计算图 6 和图 7 中所示的虚拟周期性结构 (200b) 的反射率或透射率的中间步骤中的两个步骤,一个是使用二次插值对李普曼-薛定谔方程进行离散化的步骤,另一个是建立离散的投影空间扰动波的线性方程系统的步骤。

[0077] 下面,将分别针对 TE 模和 TM 模进行计算。首先考虑 TE 模的情况。

[0078] 由于任意周期性结构在 x 方向的周期性,TE 模分量的 x 函数关系完全确定为傅立叶-弗洛奎级数:

$$[0079] \quad E_y(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Psi_n(z) e^{ik_{xn}x} \quad \text{方程 (1)}$$

$$[0080] \quad H_x(x, z) = i \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{1}{k_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \partial_z \Psi_n(z) e^{ik_{xn}x} \quad \text{方程 (2)}$$

[0081] 其中, $i = \sqrt{-1}$; $k_{xn} = k_0 [n_1 \sin \theta - n(\lambda_0/\Lambda)]$; $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ (其中 λ_0 是入射波在真空中的波长, n_1 是入射区域的折射率,并且 θ 是入射角); ϵ_0 是真空电容率 (permittivity); 并且 μ_0 是真空磁导率。

[0082] 具有在 x 方向上等于 Λ 的一维周期的任意周期性结构的介电函数可以被展开为傅立叶级数:

$$[0083] \quad \epsilon(x, z) = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \epsilon_h(z) e^{i2\pi hx/\Lambda} \quad \text{方程 (3)}$$

[0084] 根据麦克斯韦方程,其分量为方程 (1) 中的展开系数 $\Psi_n(z)$ 的列向量 $\Psi(z)$ (投影空间波向量) 满足以下方程:

$$[0085] \quad \left[\frac{d^2}{dz^2} + k_0^2 \mathbf{E}(z) - \mathbf{K}^2 \right] \Psi(z) = 0 \quad \text{方程 (4)}$$

[0086] 其中, k 是 (n, n) 元素等于 k_{xn}/k_0 的对角矩阵,并且 $\mathbf{E}(z)$ 是由电容率谐波分量形成的、其 (n, p) 元素等于 $E_{np}(z) = \epsilon_{(n-p)}(z)$ 的托普利兹 (toeplitz) 矩阵。

[0087] 以下,削减傅立叶-弗洛奎空间指数 (space index) 使其从 $-N$ 到 N 。

[0088] 当周期性结构被设置为在零级结构上增加几何或物理改变即扰动势的扰动结构时,扰动介电函数 $\Delta \epsilon(x, z)$ 可以被定义为 $\Delta \epsilon(x, z) = \epsilon(x, z) - \epsilon^{[0]}(x, z)$; $\epsilon^{[0]}(x, z)$ 为零级结构的介电函数。

[0089] 其分量分别为零级展开系数函数 (z 的函数) $E_y^{[0]}(x, z)$ 和扰动展开系数函数 (z 的函数) $E_y(x, z)$ 的列向量 $\Psi^{[0]}(z)$ 和 $\Psi_1(z)$ 满足以下李普曼-薛定谔方程:

$$[0090] \quad \Psi(z) - \Psi^{[0]}(z) = \int dz' G(z, z') V(z') \Psi(z') \quad \text{方程 (5)}$$

[0091] 其中 $V(z)$ 是扰动势,由 $\mathbf{V}(z) = k_0^2 [\mathbf{E}(z) - \mathbf{E}^{[0]}(z)]$ 给出,其中 $\mathbf{E}(z)$ 和 $\mathbf{E}^{[0]}(z)$ 分别是虚拟周期性结构和零级结构的托普利兹矩阵。在方程 (5) 中,由于在扰动域之外, $V(z) = 0$,

所以积分区域被限制在扰动域内。

[0092] 为了在数值上求解李普曼-薛定谔方程,首先通过 RCWA 方法计算 $\Psi^{[0]}(z)$ 和 $G(z, z')$ 。

[0093] 下面描述计算 $\Psi^{[0]}(z)$ 和 $G(z, z')$ 的一般方法。对于使用 RCWA 方法的具体计算,参见韩国专利 No. 10-0892485 以及 No. 10-0892486。

[0094] 我们将包括氧化层、涂层或表面层的周期性结构近似为具有公共周期 Λ 的平行矩形层的堆叠。在前述周期性结构到层的划分中,某些层或所有层可以由相同的物质形成。通过前述周期性结构到层的划分,介电函数 $\varepsilon(x, z)$ 的 z 函数关系转变为用于表示层的索引 l 。则给定层 l 的介电函数仅为 z 的函数,并且由于其仍然是在 x 上具有周期 Λ 的周期函数,因此可以展开为傅立叶级数。根据展开系数构建的托普利兹矩阵 $E^{[0]}_l$ 大小为 $(2N+1) \times (2N+1)$ 。根据各层中电场的傅立叶-弗洛奎展开系数函数构建的大小为 $(2N+1)$ 的各个列向量 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 满足谐振型矩阵微分方程。因此,求解(在数值上)该方程相当于求解(在数值上)特征值方阵 Q^2_l 和特征向量方阵 S_l 。对 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 及其导数应用边界条件会产生两类积分常数矩阵的递推关系。在没有来自区域 II ($l = L+1$) 的入射光并且来自区域 I ($l = 0$) 的入射光已和的特定条件下,可以在数值上完全得到投影空间零级波 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 。

[0095] $G(z, z')$ 的计算基本上可以使用 RCWA 方法来实施,并且可以用已经针对 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 的情况得到的相同的特征值方阵 Q^2_l 和特征向量方阵 S_l 以及两类常数方阵 $f_{ll'}^\pm(z')$ 和 $g_{ll'}^\pm(z')$ 表述如下:

[0096]

$$G(z, z') = \begin{cases} S_l [e^{-Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^-(z') + e^{Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^-(z')] & (l < l') \\ S_l [e^{-Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^-(z') + e^{Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^-(z')] & (l = l', z < z') \\ S_l [e^{-Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^+(z') + e^{Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^+(z')] & (l = l', z > z') \\ S_l [e^{-Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^+(z') + e^{Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^+(z')] & (l < l') \end{cases}$$

[0097] 方程 (6)

[0098] 与 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 的计算不同,格林函数的来源是零级结构本身。此外,在该实例中,没有来自区域 I 的入射光。因此,需要针对 $G(z, z')$ 的附加边界条件,该附加边界条件是根据由德耳塔函数项导致的 $G(z, z')$ 的导数的不连续性而提供的。通过应用所有的边界条件,两个常数 (z 中的) 方阵 $f_{ll'}^\pm(z')$ 和 $g_{ll'}^\pm(z')$ 被固定为:

$$f_{ll'}^\pm(z') = \bar{T}_{l-1} \cdots \bar{T}_l f_{ll'}^\pm(z') \quad \text{方程 (7)}$$

$$g_{ll'}^\pm(z') = \bar{t}_{l-1} \cdots \bar{t}_l g_{ll'}^\pm(z') \quad \text{方程 (8)}$$

[0101] 其中

$$f_{ll'}^\pm(z') = \frac{1}{2} [e^{Q_l(z'-z_{l-1})} + \bar{r}_l u_l [R_l e^{Q_l(z'-z_{l-1})} + e^{-Q_l(z'-z_{l-1})}]] Q_l^{-1} S_l^T$$

$$[0103] \quad \mathbf{f}_{l'}^{\pm}(z') = \frac{1}{2} \left[e^{\mathbf{Q}_{l'}(z'-z_{l'-1})} + \bar{\mathbf{r}}_{l'} \mathbf{u}_{l'} [\mathbf{R}_{l'} e^{\mathbf{Q}_{l'}(z'-z_{l'-1})} + e^{-\mathbf{Q}_{l'}(z'-z_{l'-1})}] \right] \mathbf{Q}_{l'}^{-1} \mathbf{S}_{l'}^T$$

[0104] 方程 (9)

$$[0105] \quad \mathbf{g}_{l'}^{\pm}(z') = \frac{1}{2} \mathbf{u}_{l'} [\mathbf{R}_{l'} e^{\mathbf{Q}_{l'}(z'-z_{l'-1})} + e^{-\mathbf{Q}_{l'}(z'-z_{l'-1})}] \mathbf{Q}_{l'}^{-1} \mathbf{S}_{l'}^T \quad \text{方程 (10)}$$

[0106] $\mathbf{R}_l$ 和 $\bar{\mathbf{r}}_l$ 被定义为连接 $\mathbf{f}_{l'}^+(z')$ 和 $\mathbf{g}_{l'}^+(z')$ 以及 $\mathbf{f}_{l'}^-(z')$ 和 $\mathbf{g}_{l'}^-(z')$ 的方阵, 并且 $\mathbf{u}_r$ 被定义为 $\mathbf{u}_r = (\mathbf{I} - \mathbf{R}_l \bar{\mathbf{r}}_l)^{-1}$:

$$[0107] \quad \mathbf{g}_{l'}^+(z') = \mathbf{R}_l \mathbf{f}_{l'}^+(z') \quad \text{方程 (11)}$$

$$[0108] \quad \mathbf{f}_{l'}^-(z') = \bar{\mathbf{r}}_l \mathbf{g}_{l'}^-(z') \quad \text{方程 (12)}$$

[0109] 下面描述使用由此得到的 $\Psi^{[0]}(z)$ 和 $G(z, z')$ 对李普曼-薛定谔方程进行离散化的方法。

[0110] 使用二次插值对李普曼-薛定谔方程的离散化

[0111] 由零级结构的物理性质和几何构成及入射波的信息定义的两个量 $\Psi^{[0]}(z)$ 和 $G(z, z')$ 以及扰动势 $V(z)$ 作为输入函数。通过求解离散化的李普曼-薛定谔方程, 得到取决于扰动结构的物理性质和几何构成以及相同入射波的信息的未知量 $\Psi(z)$ 。

[0112] 假定扰动势 $V(z')$ 在层 j 内具有常数值 V_j 。通过针对位于层 1 ($1 = 1, \dots, L$) 内部的 z 设置 $z \rightarrow z_{1-1}$, 并针对位于层 L 内的 z 设置 $z \rightarrow z_L$, 并通过使用方程 (7) 和 (8), 可以将方程 (5) 变换为:

$$[0113] \quad \Psi(z_{l-1}) - \Psi^{[0]}(z_{l-1}) = \mathbf{S}_l \left[(1 + \mathbf{R}_l) \sum_{j=1}^{l-1} \bar{\mathbf{T}}_{l-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_{j'}^+(z') \mathbf{V}_{j'} \Psi(z') \right.$$

$$[0114] \quad \left. + (\bar{\mathbf{r}}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' \mathbf{g}_l^-(z') \mathbf{V}_l \Psi(z') \right.$$

$$[0115] \quad \left. + (\bar{\mathbf{r}}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \bar{\mathbf{T}}_l \cdots \bar{\mathbf{T}}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{g}_{j'}^-(z') \mathbf{V}_{j'} \Psi(z') \right] \quad \text{方程 (13)}$$

$$[0116] \quad \Psi(z_L) - \Psi^{[0]}(z_L) = \mathbf{S}_L \left(e^{-\mathbf{Q}_L d_L} + e^{\mathbf{Q}_L d_L} \mathbf{R}_L \right) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \bar{\mathbf{T}}_{L-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_{j'}^+(z') \mathbf{V}_{j'} \Psi(z') \right.$$

$$[0117] \quad \left. + \int_{z_{L-1}}^{z_L} dz' \mathbf{f}_{L'}^+(z') \mathbf{V}_{L'} \Psi(z') \right] \quad \text{方程 (14)}$$

[0118] 可以注意到, 在方程 (13) 中, 如果 $l = 1$, 则 $\sum_{j=1}^{l-1} (\dots)$ 不会产生项, 并且如果 $l = L$, 则 $\sum_{j=l+1}^L (\dots)$ 不会产生项。

[0119] 为了提高准确性, 我们使用方程 (15) 至 (18) 中给出的二次插值, 同样也可以使用 M 次插值, 在各个层中进行解析积分:

[0120]

$$\Psi(z') = \Psi(z_j) + \Psi_A(z_j)(z' - z_j) + \frac{1}{2!} \Psi_B(z_j)(z' - z_j)^2 + \frac{1}{3!} \Psi_B(z_j)(z' - z_j)^3 + \dots$$

[0121] 方程 (15)

[0122] 在使用二次插值的本实施例中, 可以将 Ψ_A 和 Ψ_B 展开如下。

[0123]

$$\Psi_A = -\frac{d_{j+1}}{d_j(d_j + d_{j+1})} \Psi(z_{j-1}) + \left(\frac{1}{d_j} - \frac{1}{d_{j+1}} \right) \Psi(z_j) + \frac{d_j}{d_{j+1}(d_j + d_{j+1})} \Psi(z_{j+1})$$

[0124] 方程 (16)

[0125]

$$\Psi_B(z_j) = 2! \left(\frac{1}{d_j(d_j + d_{j+1})} \Psi(z_{j-1}) - \frac{1}{d_j d_{j+1}} \Psi(z_j) + \frac{1}{d_{j+1}(d_j + d_{j+1})} \Psi(z_{j+1}) \right)$$

[0126] 方程 (17)

[0127] 可以分别针对偶数层和奇数层实现方程 (13) 中的 z' 积分, 如方程 (16) 和方程 (17) 所示, 其中两层被成对计算。在 N 次插值中, 可以考虑将 N 层放到一段中。相应地, 在二次插值中, 成对的层可以被视为一个单元, 在三次插值中, 三层可以被视为一个单元, 依此类推。上述公式 (或方程) 可以应用于 N 次插值。方程 (18) 和方程 (19) 描述了每层的通用积分公式: II 表示偶数层, I 表示奇数层。

[0128]

$$\int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' f_{jj}^+(z') V_j \Psi_{II}(z') = G_j^{(+)} V_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[A][II](+)} V_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[B][II](+)} V_j \Psi(z_{j-1})$$

$$[0129] \quad \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' f_{jj}^+(z') V_j \Psi_I(z') = G_j^{(+)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[A][II](+)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[B][II](+)} V_j \Psi(z_j)$$

[0130] 方程 (18)

[0131]

$$\int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' g_{jj}^-(z') V_j \Psi_{II}(z') = G_j^{(-)} V_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[A][II](-)} V_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[B][II](-)} V_j \Psi(z_{j-1})$$

[0132]

$$\int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' g_{jj}^-(z') V_j \Psi_I(z') = G_j^{(-)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[A][II](-)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[B][II](-)} V_j \Psi(z_j)$$

[0133] 方程 (19)

[0134] 其中

$$[0135] \quad \begin{pmatrix} G^{(+)} \\ G^{(-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Q_d} + \bar{r}u \\ uRe^{Q_d} + u \end{pmatrix}_j W_j \quad \text{方程 (20)}$$

$$[0136] \quad \begin{pmatrix} G^{[A][I](+)} \\ G^{[A][I](-)} \end{pmatrix}_j = - \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Q_d} W^{[A](-)} + \bar{r}u W^{[A](+)} \\ uRe^{Q_d} W^{[A](-)} + u W^{[A](+)} \end{pmatrix}_j$$

$$[0137] \quad \begin{pmatrix} G^{[A][II](+)} \\ G^{[A][II](-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Q_d} W^{[A](+)} + \bar{r}u W^{[A](-)} \\ uRe^{Q_d} W^{[A](+)} + u W^{[A](-)} \end{pmatrix}_j \quad \text{方程 (21)}$$

$$[0138] \quad \begin{pmatrix} G^{[B][I](+)} \\ G^{[B][I](-)} \end{pmatrix}_j = - \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Q_d} W^{[B](-)} + \bar{r}u W^{[B](+)} \\ uRe^{Q_d} W^{[B](-)} + u W^{[B](+)} \end{pmatrix}_j$$

$$[0139] \quad \begin{pmatrix} G^{[B][II](+)} \\ G^{[B][II](-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Q_d} W^{[B](+)} + \bar{r}u W^{[B](-)} \\ uRe^{Q_d} W^{[B](+)} + u W^{[B](-)} \end{pmatrix}_j \quad \text{方程 (22)}$$

[0140] 方程 (20) 至 (22) 中的量 W_j 、 $W^{(\pm)}$ 、 $\tilde{W}^{(\pm)}$ 由下面的式子给出：

$$[0141] \quad W_j = \frac{1}{2}(1 - e^{Q_j d_j}) Q_j^{-2} S_j^T \quad \text{方程 (23)}$$

$$[0142] \quad W_j^{[A](+)} = \frac{1}{2} d_j Q_j^{-2} S_j^T - Q_j^{-1} W_j \quad \text{方程 (24)}$$

$$[0143] \quad W_j^{[A](-)} = Q_j^{-1} W_j - \frac{1}{2} d_j e^{-Q_j d_j} Q_j^{-2} S_j^T \quad \text{方程 (25)}$$

$$[0144] \quad W_i^{(+)} = \frac{1}{2} d_i Q_i^{-2} S_i^T - Q_i^{-1} W_i \quad \text{方程 (26)}$$

$$[0145] \quad W_j^{[B](+)} = \frac{1}{2 \cdot 2!} d_j^2 Q_j^{-2} S_j^T - Q_j^{-1} W_j^{[A](+)} \quad \text{方程 (27)}$$

$$[0146] \quad W_j^{[B](-)} = Q_j^{-1} W_j^{[A](-)} - \frac{1}{2 \cdot 2!} d_j^2 e^{-Q_j d_j} Q_j^{-2} S_j^T \quad \text{方程 (28)}$$

[0147] 使用方程 (18)、(19) 中的积分公式, 方程 (16) 中定义的 Ψ_A 以及方程 (19)、方程 (13) 中的 Ψ_B 针对 $l = 0, \dots, L-1$ 可以表述为：

$$[0148] \quad \Psi(z_l) - \Psi^{[0]}(z_l) = \sum_{j=1}^l \Theta_b^{(+)} v_j \Psi(z_j) + \sum_{j=0}^{l-1} \bar{\Theta}_b^{(+)} v_{j+1} \Psi(z_j)$$

$$\begin{aligned}
[0149] \quad & + \sum_{j=0}^{l-2} \tilde{\Theta}_l^{(+)} \mathbf{V}_{j+2} \Psi(z_j) + \sum_{j=2}^{l+1} \hat{\Theta}_l^{(+)} \mathbf{V}_{j-1} \Psi(z_j) \\
[0150] \quad & + \sum_{j=l+1}^L \Theta_l^{(-)} \mathbf{V}_j \Psi(z_j) + \sum_{j=l}^{L-1} \bar{\Theta}_l^{(-)} \mathbf{V}_{j+1} \Psi(z_j) \\
[0151] \quad & + \sum_{j=l-1}^{L-2} \tilde{\Theta}_l^{(-)} \mathbf{V}_{j+2} \Psi(z_j) + \sum_{j=l+2}^L \hat{\Theta}_l^{(-)} \mathbf{V}_{j-1} \Psi(z_j) \quad \text{方程 (29)}
\end{aligned}$$

[0152] 虽然方程 (29) 中的下标 l 可以是偶数或奇数, 但对于偶数 l 和奇数 l , $\Theta_l^{(\pm)}$ 、 $\bar{\Theta}_l^{(\pm)}$ 、 $\tilde{\Theta}_l^{(\pm)}$ 、 $\hat{\Theta}_l^{(\pm)}$ 的具体表述是不同的。另外, 矩阵 $\tilde{\Theta}_l^{(\pm)}$ 和 $\hat{\Theta}_l^{(\pm)}$ 的所有偶数列变为零。这是由二次插值的性质导致的。

[0153] 对于 $l = L$ 的离散李普曼 - 薛定谔方程, 即方程 (14), 计算如下:

$$\begin{aligned}
[0154] \quad & \Psi(z_L) - \Psi^{[0]}(z_L) = \sum_{j=1}^L \Theta_L^{(+)} \mathbf{V}_j \Psi(z_j) + \sum_{j=0}^{L-1} \bar{\Theta}_L^{(+)} \mathbf{V}_{j+1} \Psi(z_j) \\
[0155] \quad & + \sum_{j=0}^{L-2} \tilde{\Theta}_L^{(+)} \mathbf{V}_{j+2} \Psi(z_j) + \sum_{j=2}^L \hat{\Theta}_L^{(+)} \mathbf{V}_{j-1} \Psi(z_j) \quad \text{方程 (30)}
\end{aligned}$$

[0156] 当层的数目 L 为奇整数时, 首先考虑在包括 $(L-1)/2$ 对的剩余 $(L-1)$ 偶数层上加上一层。这样, 就可以依据所加的层被认为是在给定对之上还是在给定对之下, 来针对所加的层给出积分公式。一般而言, 可以针对从虚拟周期性结构划分出的每层或分出的每段应用 M 次插值。

[0157] 方程 (29) 和 (30) 可以合并为线性方程系统的一个展开矩阵形式:

$$[0158] \quad \mathbf{X} = \mathbf{X}^{[0]} + [\mathbf{G}\mathbf{V} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{V}} + \tilde{\mathbf{G}}\tilde{\mathbf{V}} + \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{V}}] \mathbf{X} \quad \text{方程 (31)}$$

[0159] 其中, $\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{X}^{[0]}$ 分别是具有层分量 $\Psi(z_1)$ 和 $\Psi^{[0]}(z_1)$ 的 $L+1$ 维列向量。 $\Psi(z_1)$ 和 $\Psi^{[0]}(z_1)$ 中的每一个仍然是具有耦合波分量的 $(2N+1)$ 维列向量。 $\mathbf{G}$ 、 $\bar{\mathbf{G}}$ 、 $\tilde{\mathbf{G}}$ 、 $\hat{\mathbf{G}}$ 是具有 $(L+1)^2$ 个层分量的方阵, 每个层分量为耦合波空间中的 $(2N+1)^2$ 方阵。具有 $L+1)^2$ 个层分量的方阵 $\mathbf{V}$ 、 $\bar{\mathbf{V}}$ 、 $\tilde{\mathbf{V}}$ 、 $\hat{\mathbf{V}}$ 基本上是根据耦合波空间中具有 $(2N+1)^2$ 个分量的扰动势 $V(z_1)$ 构建而成的。

[0160] 针对 N 次插值, 方程 (31) 可以推广如下: 在这种情况下, 待计算的矩阵数目增加 $2N$ 。

$$[0161] \quad \mathbf{X} - \mathbf{X}_0 = \left[\sum_{i=1}^{2N} \mathbf{G}_i \mathbf{V}_i \right] \mathbf{X} \quad \text{方程 (32)}$$

[0162] 至此, 考虑了 TE 模的量的计算, 以下将描述 TM 模的量的计算。

[0163] 由于周期性结构在 x 方向的周期性, 麦克斯韦方程的 TM 模的解可以写成:

$$[0164] \quad H_y(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Phi_n(z) e^{ik_n x} \quad \text{方程 (33)}$$

$$[0165] \quad E_x(x, z) = -i \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{1}{k_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \epsilon_{(n-n')}^{\#}(z) \partial_z \Phi_{n'}(z) e^{ik_n x} \quad \text{方程 (34)}$$

[0166] 这里, $\epsilon_{(n-n')}^{\#}(z)$ 是介电函数 $\epsilon(x, z)$ 的倒数展开为傅立叶级数时的展开系数:

$$[0167] \quad \frac{1}{\epsilon(x, z)} = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \epsilon_h^{\#}(z) e^{i2\pi h x / \Lambda} \quad \text{方程 (35)}$$

[0168] 根据麦克斯韦方程, 其分量为方程 (33) 中的展开系数 $\Phi_n(z)$ 的列向量 $\Phi(z)$ (投影空间波向量) 满足以下方程

$$[0169] \quad \left[\frac{d}{dz} \left(\mathbf{P}(z) \frac{d\Phi(z)}{dz} \right) + k_0^2 \mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{E}(z)^{-1} \mathbf{K} \right] \Phi(z) = 0 \quad \text{方程 (36)}$$

[0170] 其中, $\mathbf{P}(z)$ 是方阵, 其 (n, n) 元素等于 $\epsilon_{(n-n')}^{\#}(z)$ 。其分量分别为方程 (38) 中针对零级结构和扰动结构的展开系数函数 (z 的函数) 的列向量 $\Phi^{[0]}(z)$ 和 $\Phi(z)$ 满足以下李普曼-薛定谔方程:

$$[0171] \quad \Phi(z) - \Phi^{[0]}(z) = - \int dz' \left[\mathbf{G}(z, z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}(z') \mathbf{K} \Phi(z') + \frac{\partial \mathbf{G}(z, z')}{\partial z'} \mathbf{V}(z') \frac{\partial \Phi(z')}{\partial z'} \right]$$

[0172] 方程 (37)

[0173] 其中, k 如 TE 模中的定义, $\tilde{\mathbf{V}}(z) = \mathbf{E}(z)^{-1} - (\mathbf{E}^{[0]})^{-1}(z)$, 并且 $\mathbf{V}(z) = \mathbf{P}(z) - \mathbf{P}^{[0]}(z)$ 。在方程 (37) 中, 使用李的因数分解规则以得到快速收敛。

[0174] 列向量 $\Phi^{[0]}(z)$ 和格林函数 $\mathbf{G}(z, z')$ 可以基本上以与 TE 模中类似的方式来计算。

[0175] 也就是说, 通过针对位于层 l ($l = 1, \dots, L$) 内部的 z 设置 $z \rightarrow z_{l-1}$, 并针对位于层 L 内的 z 设置 $z \rightarrow z_L$, 使用方程 (7) 和 (8), 并且假定扰动势 $\tilde{\mathbf{V}}(z')$ 和 $\mathbf{V}(z')$ 分别具有常数值 $\tilde{\mathbf{V}}_j$ 和 $\mathbf{V}_j$, 则对于 $l = 1, \dots, L-1$, 方程 (37) 可被离散化为:

$$[0176] \quad \Phi(z_{l-1}) - \Phi^{[0]}(z_{l-1}) = - \left\{ \mathbf{S}_l \left[(1 + \mathbf{R}_l) \sum_{j=1}^{l-1} \tilde{\mathbf{T}}_{l-1} \dots \tilde{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_j^+(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_j \mathbf{K} \Phi(z') \right. \right.$$

$$[0177] \quad \left. + (\tilde{\mathbf{r}}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' \mathbf{g}_l^-(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_l \mathbf{K} \Phi(z') \right\}$$

$$\begin{aligned}
[0178] \quad & + (\bar{\mathbf{r}}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \bar{\mathbf{t}}_j \cdots \bar{\mathbf{t}}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{g}_{jj}^-(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_j \mathbf{K} \Phi(z') \Big] \\
[0179] \quad & + \mathbf{S}_l \left[(1 + \mathbf{R}_l) \sum_{j=1}^{l-1} \bar{\mathbf{T}}_{l-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' (\mathbf{f}_{jj}^+)(z') \mathbf{V}_j \Phi(z_j) \right. \\
[0180] \quad & + (\bar{\mathbf{r}}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' (\mathbf{g}_{ll}^-)(z') \mathbf{V}_l \Phi(z_l) \\
[0181] \quad & \left. + (\bar{\mathbf{r}}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \bar{\mathbf{t}}_j \cdots \bar{\mathbf{t}}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' (\mathbf{g}_{jj}^-)(z') \mathbf{V}_j \Phi(z_j) \right] \Big\} \quad \text{方程 (38)}
\end{aligned}$$

[0182] 同时, 对于 $l = L$, 方程 (37) 变为:

$$\begin{aligned}
[0183] \quad & \Phi(z_L) - \Phi^{[0]}(z_L) = - \left\{ \mathbf{S}_L \left(e^{-\mathbf{Q}_L d_L} + e^{\mathbf{Q}_L d_L} \mathbf{R}_L \right) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \bar{\mathbf{T}}_{L-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_{jj}^+(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_j \mathbf{K} \Phi(z') \right. \right. \\
[0184] \quad & \left. \left. + \int_{z_{L-1}}^{z_L} dz' \mathbf{f}_{LL}^+(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_L \mathbf{K} \Phi(z') \right] \right. \\
[0185] \quad & \left. + \mathbf{S}_L \left(e^{-\mathbf{Q}_L d_L} + e^{\mathbf{Q}_L d_L} \mathbf{R}_L \right) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \bar{\mathbf{T}}_{L-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' (\mathbf{f}_{jj}^+)'(z') \mathbf{V}_j \Phi(z_j) \right. \right. \\
[0186] \quad & \left. \left. + \int_{z_{L-1}}^{z_L} dz' (\mathbf{f}_{LL}^+)'(z') \mathbf{V}_L \Phi(z_L) \right] \right\}
\end{aligned}$$

[0187] 方程 (39)

[0188] 为了提高准确性, 与方程 (15) 类似, 通过针对投影空间扰动波 $\Phi(z)$ 使用二次插值, 可以得到用 $\mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_l \mathbf{K}$ 代替方程 (18) 和 (19) 中的 $\mathbf{V}_l$ 的积分, 并且针对方程 37 中被积函数的第二部分实施解析积分, 最后可以得到以下方程 (40) 和 (41)。以与 TE 模类似的方式, II 和 $\Psi(z_{j-1})$ 可以用于偶数层, I 和 $\Psi(z_j)$ 可以用于奇数层。

[0189]

$$\begin{aligned}
[0190] \quad & \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_{z'} f_{jj}^+(z') \mathcal{V}_j \partial_{z'} \Psi_{\text{II}}(z') = G_j^{[2]^{(+)}} \mathcal{V}_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[2]^{[\text{B}][\text{II}]^{(+)}}} \mathcal{V}_j \Psi(z_{j-1}) \\
[0190] \quad & \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_{z'} f_{jj}^+(z') \mathcal{V}_j \partial_{z'} \Psi_{\text{I}}(z') = G_j^{[2]^{(+)}} \mathcal{V}_j \Psi(z_j) + G_j^{[2]^{[\text{B}][\text{I}]^{(+)}}} \mathcal{V}_j \Psi(z_j)
\end{aligned}$$

方程 (40)

$$[0191] \quad \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_{z'} g_{jj}^-(z') \mathcal{V}_j \partial_{z'} \Psi_{\text{II}}(z') = G_j^{[2]^{(-)}} \mathcal{V}_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[2]^{[\text{B}][\text{II}]^{(-)}}} \mathcal{V}_j \Psi(z_{j-1})$$

$$[0192] \quad \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \partial_z g_{jj}^-(z') V_j \partial_{z'} \Psi_I(z') = G_j^{[2](-)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[2][B][I](-)} V_j \Psi(z_j)$$

方程 (41)

[0193] 其中

$$[0194] \quad \begin{pmatrix} G^{[2](+)} \\ G^{[2](-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Qd} - \bar{r}u \\ uRe^{Qd} - u \end{pmatrix}_j Q_j W_j \quad \text{方程 (42)}$$

$$[0195] \quad \begin{pmatrix} G^{[A][I](+)} \\ G^{[A][I](-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} -(1 + \bar{r}uR)e^{Qd} QW^{[A](+)} + \bar{r}uQW^{[A](-)} \\ -uRe^{Qd} QW^{[A](+)} + uQW^{[A](-)} \end{pmatrix}_j \quad \text{方程 (43)}$$

$$[0196] \quad \begin{pmatrix} G^{[A][II](+)} \\ G^{[A][II](-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Qd} QW^{[A](+)} - \bar{r}uQW^{[A](-)} \\ uRe^{Qd} QW^{[A](+)} - uQW^{[A](-)} \end{pmatrix}_j \quad \text{方程 (44)}$$

[0197] 使用这些积分公式, 方程 (38) 最终可以计算如下:

$$[0198] \quad \Phi(z_l) - \Phi^{[0]}(z_l) = \sum_{j=1}^l [\Theta_j^{(+)} K V_j K + \Delta_j^{(+)} V_j] \Phi(z_j)$$

$$[0199] \quad + \sum_{j=0}^{l-1} [\bar{\Theta}_j^{(+)} K V_{j+1} K + \bar{\Delta}_j^{(+)} V_{j+1}] \Phi(z_j)$$

$$[0200] \quad + \sum_{j=0}^{l-2} [\tilde{\Theta}_j^{(+)} K V_{j+2} K + \tilde{\Delta}_j^{(+)} V_{j+2}] \Phi(z_j)$$

$$[0201] \quad + \sum_{j=2}^{l+1} [\hat{\Theta}_j^{(+)} K V_{j-1} K + \hat{\Delta}_j^{(+)} V_{j-1}] \Phi(z_j)$$

$$[0202] \quad + \sum_{j=l+1}^L [\Theta_j^{(-)} K V_j K + \Delta_j^{(-)} V_j] \Phi(z_j)$$

$$[0203] \quad + \sum_{j=l}^{L-1} [\bar{\Theta}_j^{(-)} K V_{j+1} K + \bar{\Delta}_j^{(-)} V_{j+1}] \Phi(z_j)$$

$$[0204] \quad + \sum_{j=l-1}^{L-2} [\tilde{\Theta}_j^{(-)} K V_{j+2} K + \tilde{\Delta}_j^{(-)} V_{j+2}] \Phi(z_j)$$

$$[0205] \quad + \sum_{j=l+2}^L [\hat{\Theta}_j^{(-)} K V_{j-1} K + \hat{\Delta}_j^{(-)} V_{j-1}] \Phi(z_j), \quad \text{方程 (45)}$$

[0206] 其中, 对于奇数 l 和偶数 l , $\Delta_j^\pm$ 、 $\bar{\Delta}_j^\pm$ 、 $\tilde{\Delta}_j^\pm$ 、 $\hat{\Delta}_j^\pm$ 的具体形式不同。

[0207] 同时, 对于 $l = L$, 方程 (39) 变为:

$$[0208] \quad \Phi(z_L) - \Phi^{[0]}(z_L) = \sum_{j=1}^L [\Theta_{Lj}^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_j \mathbf{K} + \Delta_{Lj}^{(+)} \mathbf{V}_j] \Phi(z_j)$$

$$[0209] \quad + \sum_{j=0}^{L-1} [\bar{\Theta}_{Lj}^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+1} \mathbf{K} + \bar{\Delta}_{Lj}^{(+)} \mathbf{V}_{j+1}] \Phi(z_j)$$

$$[0210] \quad + \sum_{j=0}^{L-2} [\tilde{\Theta}_{Lj}^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+2} \mathbf{K} + \tilde{\Delta}_{Lj}^{(+)} \mathbf{V}_{j+2}] \Phi(z_j)$$

$$[0211] \quad + \sum_{j=2}^L \hat{\Theta}_{Lj}^{(+)} \mathbf{V}_{j-1} \Psi(z_j) \quad \text{方程 (46)}$$

[0212] 在奇数 L 的情况下, 如 TE 模中一样, 可以通过考虑在 (L-1) 层上加上一层来应用二次插值方法。

[0213] 与 TE 模的计算类似, 可以得到针对 TM 模中离散化的投影空间扰动磁场 $\Phi(z_1)$ 的线性方程系统, 如下:

$$[0214] \quad \mathbf{X} = \mathbf{X}^{[0]} + [\mathbf{G} \mathbf{V}' + \bar{\mathbf{G}} \bar{\mathbf{V}}' + \tilde{\mathbf{G}} \tilde{\mathbf{V}}' + \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{V}}' + \mathbf{H} \mathbf{V} + \bar{\mathbf{H}} \bar{\mathbf{V}} + \tilde{\mathbf{H}} \tilde{\mathbf{V}} + \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{V}}] \mathbf{X} \quad \text{方程 (47)}$$

[0215] 其中, $\Phi(z_1)$ 和 $\Phi^{[0]}(z_1)$ 是分别具有层分量 $\Phi(z_1)$ 和 $\Phi^{[0]}(z_1)$ 的 L+1 维列向量, 也是具有耦合波基分量的 (2N+1) 维列向量。G、 $\bar{\mathbf{G}}$ 、 $\tilde{\mathbf{G}}$ 、 $\hat{\mathbf{G}}$ 与 TE 模中的定义相同。H、 $\bar{\mathbf{H}}$ 、 $\tilde{\mathbf{H}}$ 、 $\hat{\mathbf{H}}$ 为具有 (L+1)² 个层分量的方阵, 每个层分量是具有 (2N+1)² 个以耦合波为基础的分量的方阵, 并且具有 (L+1)² 个层分量的方阵 V、 $\bar{\mathbf{V}}$ 、 $\tilde{\mathbf{V}}$ 、 $\hat{\mathbf{V}}$ 基本上是根据耦合波空间中具有 (2N+1)² 个分量的扰动势 $V(z_1)$ 构建而成的。

[0216] 一旦确定了 TE 模电场 $\Psi(z_1)$ 和 TM 模磁场 $\Phi(z_1)$ 的层分量, 就可以通过韩国专利 No. 10-0892486 中所描述的方法计算出图 6 和图 7 中所示虚拟周期性结构 (200b) 的反射率或透射率。

[0217] 将以上描述的计算出的 TE 模和 TM 模各自的反射率或透射率与所测量的反射率或透射率进行比较。比较结果可以应用于对各种周期性结构的非破坏性分析, 这些周期性结构例如为: 全息光栅结构、表面起伏 (surface relief) 和多层光栅结构、平坦的绝缘或吸收性全息光栅结构、随机部分绝缘且吸收性表面起伏光栅结构、二维表面起伏光栅结构以及各向异性光栅结构。应当理解, 本发明的范围不限于所公开的实施例。

[0218] 与使用一次插值的格林函数方法的计算时间的比较

[0219] 可以使用如图 8 中所示的周期性结构来研究准确性。

[0220] 图 8 是根据本发明一实施例的示例性虚拟周期性结构的几何构成的截面图。图 9 至图 12 是示出从通过 RCWA 方法、使用一次插值的格林函数方法以及根据本发明的方法, 即使用二次插值的格林函数方法计算出的虚拟周期性结构的主级反射率得到的图。

[0221] 图 8 中所示周期性结构的脊区域 (堆叠在石英衬底上) 由单一物质铬构成。周期性结构的周期 Λ 为 600nm, 并且铬脊的宽和深均为 300nm。

[0222] 图 9 至图 14 是示出从通过 RCWA、使用一次插值的格林函数方法以及根据本发明一实施例的方法计算出的虚拟周期性结构的主级反射率得到的图。

[0223] 图 9 至图 14 用于检查根据本发明一实施例的准确性,并且图 9 至图 14 中用于比较的基准数据是通过 RCWA 方法使用对于图 8 的测试采样来说足够大的傅立叶分量数目 $N = 81$ 进行仿真得到的。在本示例中比较的,是通过基于线性插值的现有格林函数方法的计算与通过本发明实施例的方法的计算之间计算速度的差别。一方面,这种比较应当在相同的准确度条件下进行。另一方面,这种比较也可以通过在相同的层数条件下比较准确度来进行,原因在于通过减少层数提高计算速度的同时会伴随较大的误差。因此,为了核实本发明实施例的方法提供了更好的办法,以下对误差进行比较。选用椭圆偏光法作为多种光学测量方法中的典型示例。因此,用于比较的误差公式如下:

$$[0224] \quad \text{误差} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{2N} \left(\frac{\psi_s - \psi_e}{\psi_e} \right)^2 \quad \text{方程 (48)}$$

[0225] 其中 ψ_e 表示椭圆偏光法中从通过格林函数方法的仿真得到的 Ψ 和 Δ 的值,并且 ψ_s 表示通过具有高精度的 RCWA 方法得到的 Ψ 和 Δ 的值。

[0226] 首先,通过图 9 和图 10 检查通过现有的格林函数方法得到的结果与通过本发明实施例的方法得到的结果之间的比较。

[0227] 图 9 和图 10 示出针对图 8 所示的结构使用 10 个划分层进行计算的结果。实线表示通过具有高精度的 RCWA 方法计算出的相应量的值,图 9 中的虚线表示通过现有的格林函数方法得到的 Ψ 和 Δ 相对于波长的图,并且图 10 中的虚线表示通过本发明实施例得到的 Ψ 和 Δ 相对于波长的图。

[0228] 从图 9 中可以看出,可以发现在现有的格林函数方法的计算结果与具有高精度的 RCWA 方法的计算结果之间存在显著差异。使用方程 (48) 计算出的误差为 $4.7834\text{E}-3$ 。

[0229] 作为比较,从图 10 中可以看出,本发明实施例的计算结果与具有高精度的 RCWA 方法的计算结果之间的差异变小。误差为 $6.4878\text{E}-4$,减小了一个数量级。

[0230] 结果,根据本发明的实施例,通过使用小数目的划分层和具有较小误差的二次插值格林函数方法计算出的值接近实际值。

[0231] 使用图 11 和图 12,再次比较现有格林函数方法的结果与本发明实施例的结果。

[0232] 与图 9 和图 10 不同,图 10 和图 11 示出针对图 8 中示出的结构使用 20 个划分层的计算结果。

[0233] 如图 9 和图 10 中所示,实线表示通过具有高精度的 RCWA 方法计算出的值,图 11 中的虚线表示通过现有的格林函数方法得到的 Ψ 和 Δ 相对于波长的图,并且图 12 中的虚线表示通过本发明实施例方法,即二次插值格林函数方法,得到的 Ψ 和 Δ 相对于波长的图。

[0234] 当然,从图 11 中可以看出,当划分层的数目从 10 变为 20 时,现有的格林函数方法降低了误差。在这种情况下,误差计算为 $8.618\text{E}-4$ 。

[0235] 作为比较,当划分层 L 的数目为 20 时,本发明实施例给出几乎与 RCWA 计算相同的结果,这从图 12 中可以看出。使用方程 (55) 得到的误差为 $5.3909\text{E}-6$ 。也就是说,使用相同的层数,本发明的实施例使得误差值得到显著改善,改善了 100 因子。

[0236] 为了使用现有的格林函数方法得到与图 12 中所示相同的误差值,应当将图 8 中的周期性结构划分为 85 层。在相同误差条件下的计算时间的比较为 32.8 (现有的格林函数

方法):1.5(本发明实施例)。因此,根据本发明的实施例,在要求预定误差的计算中,使用二次插值的格林函数方法比现有的格林函数方法更加高效。

[0237] 这一点在图 13 中图 14 中更详细地示出。

[0238] 图 13 中的 x 轴和 y 轴分别表示误差和经过的时间。在图 14 中, x 轴和 y 轴分别表示划分的层数和误差率。在图 13 和图 14 中,实线用于现有的格林函数方法,而虚线用于本发明的实施例。

[0239] 在层数小的情况下,本发明实施例经过的时间长于现有的格林函数方法。然而,由于仅仅减少时间而不研究准确度没有意义,因此期望比较相同误差条件下的计算时间。从图 13 中可以看出,如果容许误差为通常可接受的 $1.00E-5$,则根据本发明实施例的格林函数方法在具有相同误差的计算中具有显著减小计算时间的优点。

[0240] 同时,在图 14 中,由于本发明实施例的计算在需要相同误差率的情况下允许较小的划分层数,因此实现了增加项比现有的格林函数少的优点。

[0241] 将这些放在一起与现有的格林函数方法进行比较,本发明的实施例即使使用小的层目也具有足够的计算准确度,并且显著减小了具有相同误差的计算所经过的时间。因此,本发明的实施例可以在实际制造过程中用于原位监控。

[0242] 已经使用优选示例性实施例对本发明进行了描述。然而,应当理解,本发明的范围不限于所公开的实施例。相反,本发明的范围意在包括本领域普通技术人员能够使用当前已知的或未来的技术进行的各种改变和替代布置以及等同物。因此,权利要求的范围应当作最宽泛的解释,以涵盖所有的这种替代和等同布置。

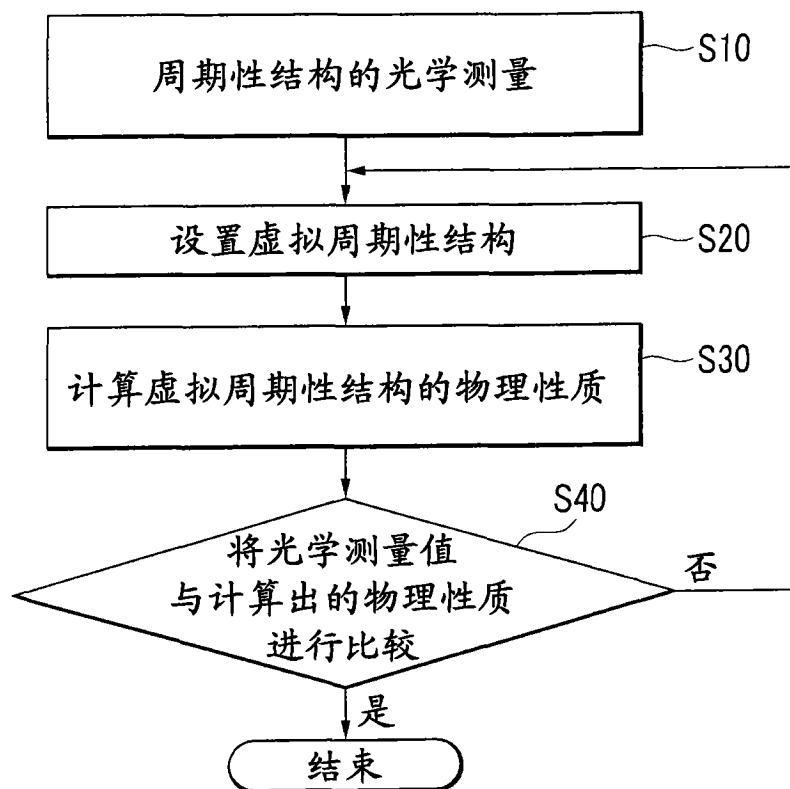


图 1

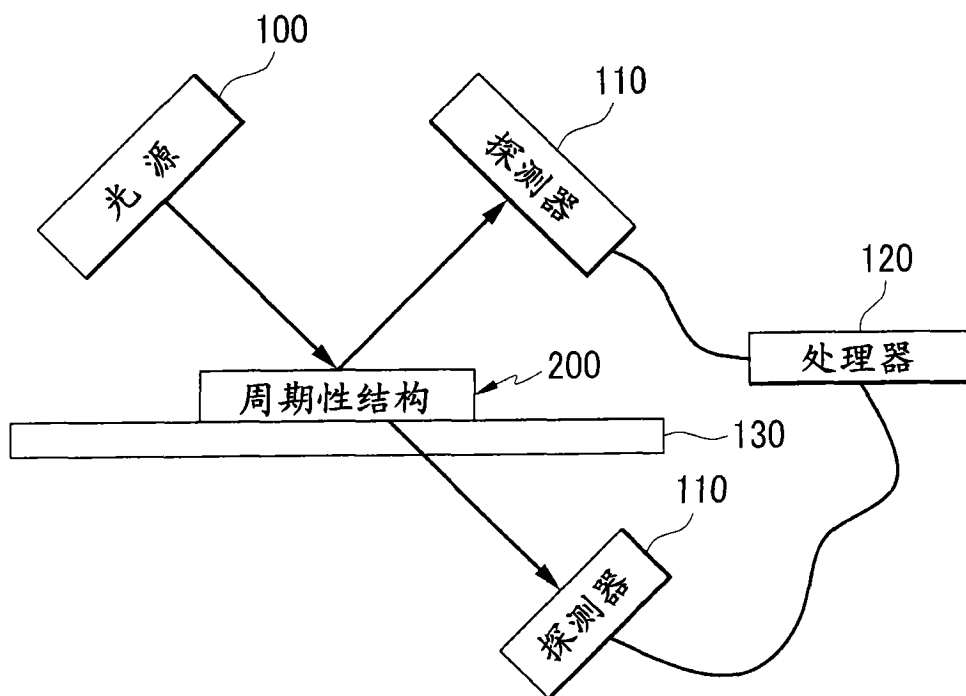


图 2

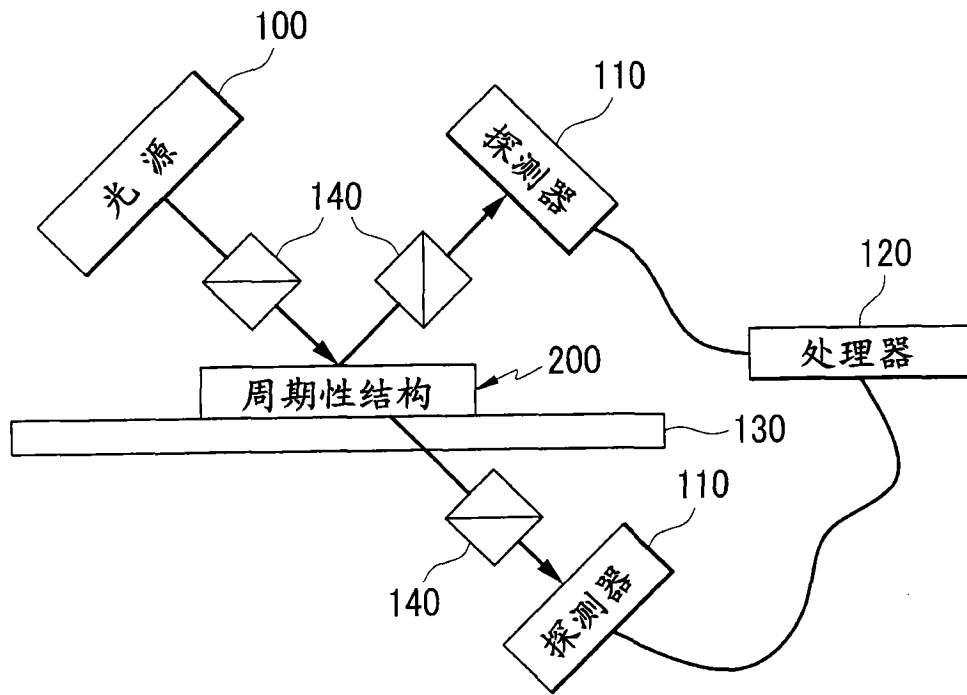


图 3

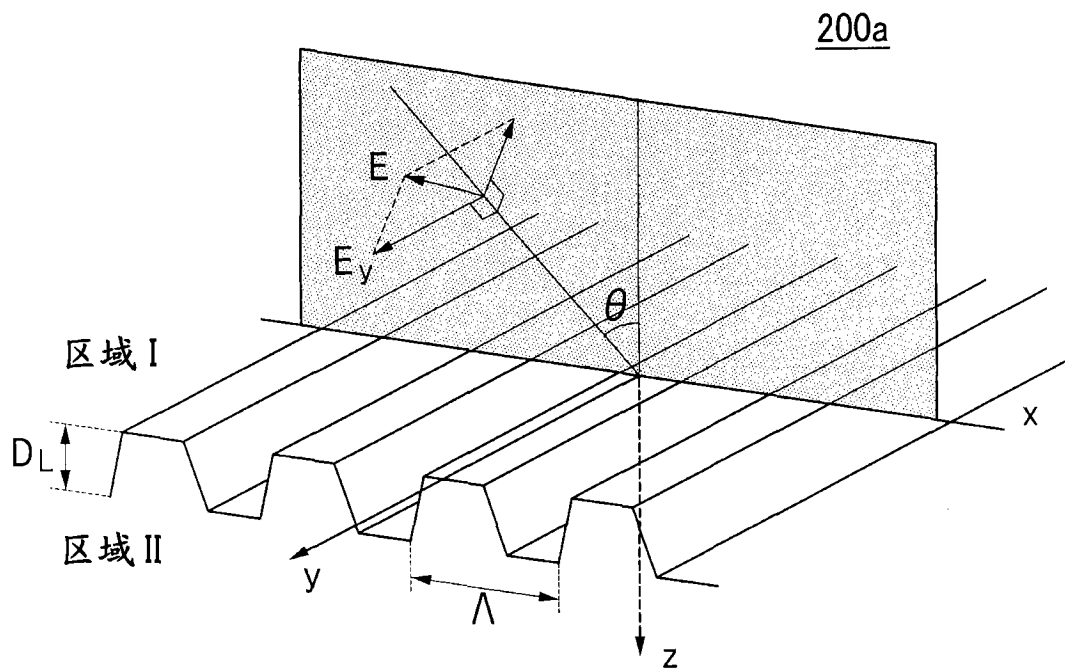


图 4

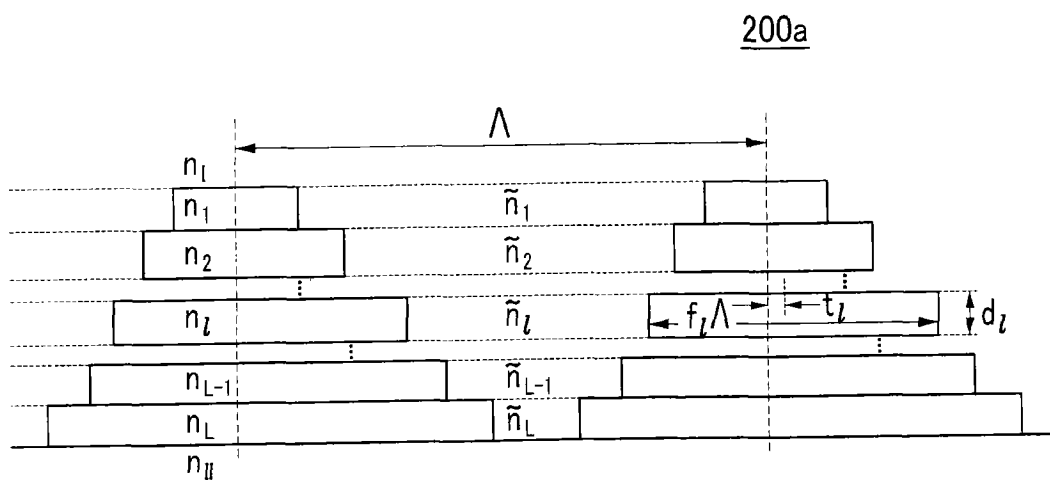


图 5

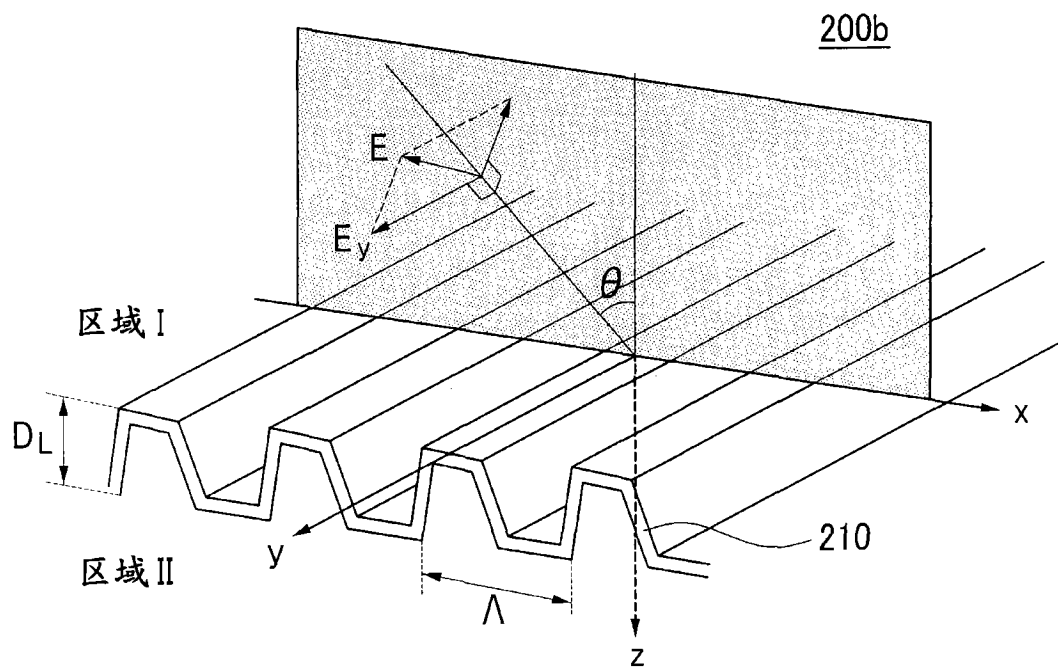


图 6

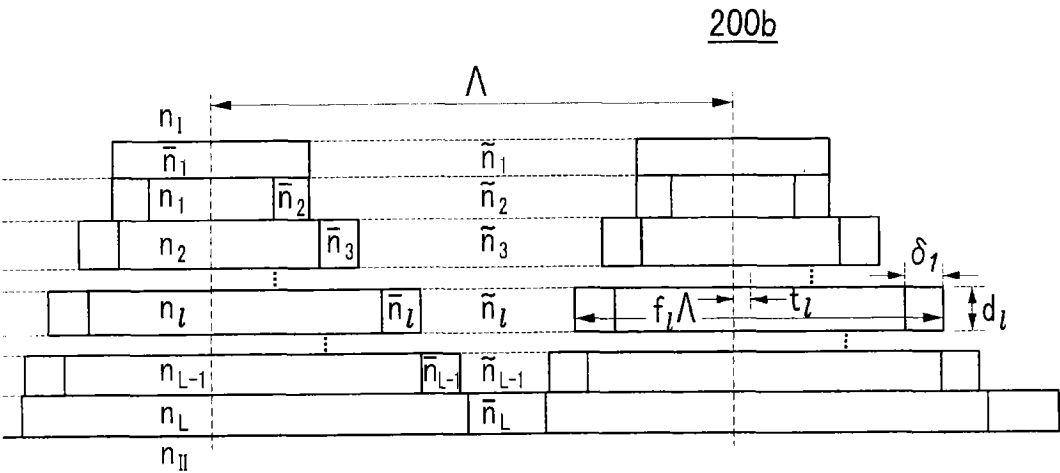


图 7

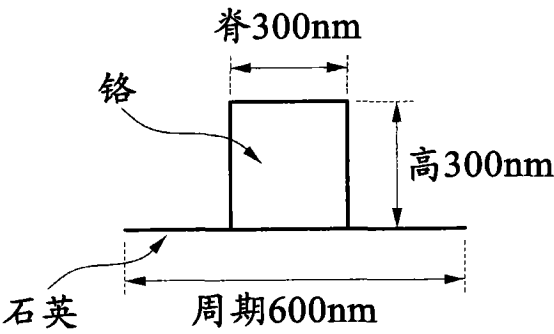


图 8

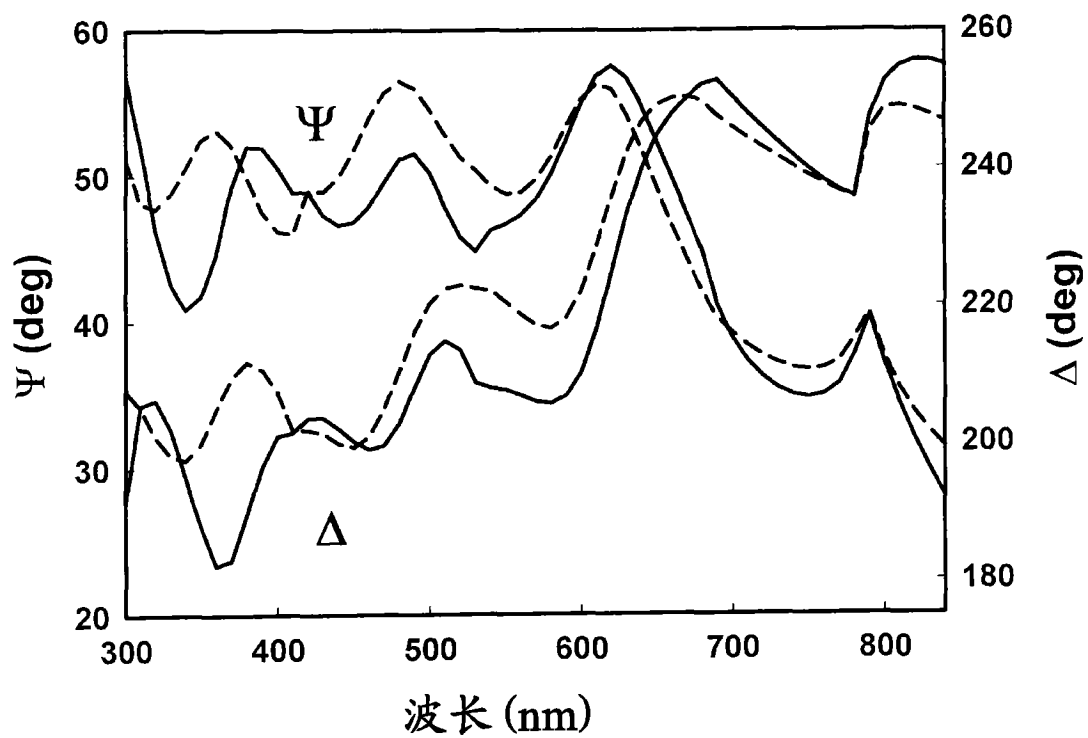


图 9

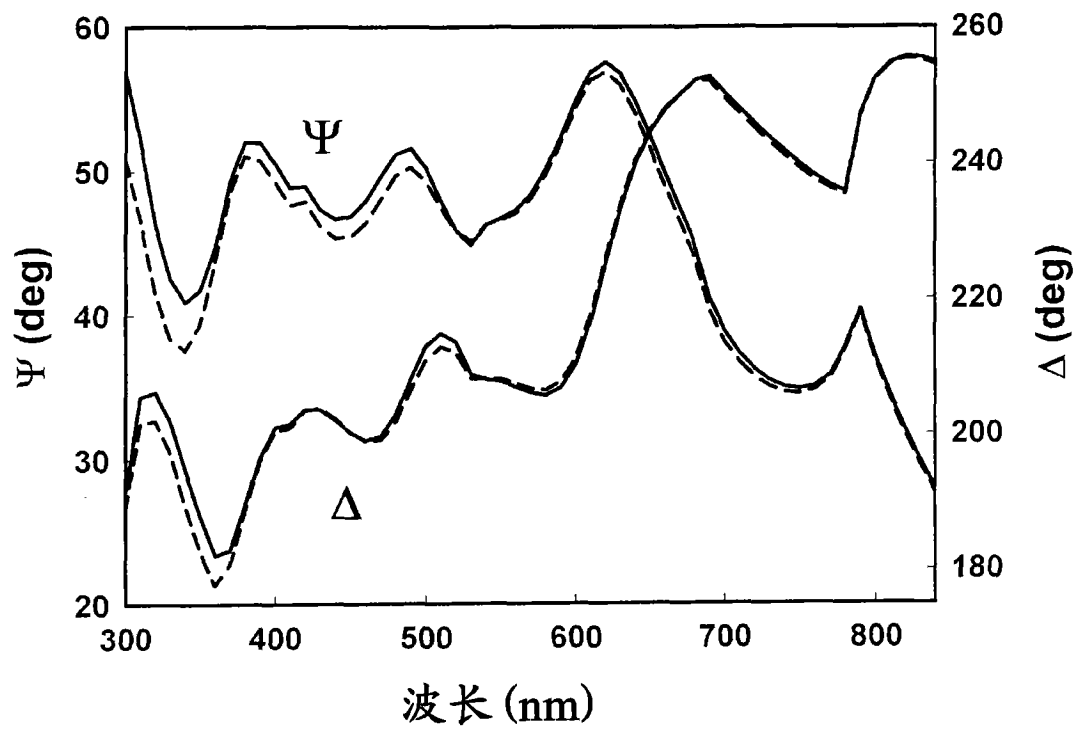


图 10

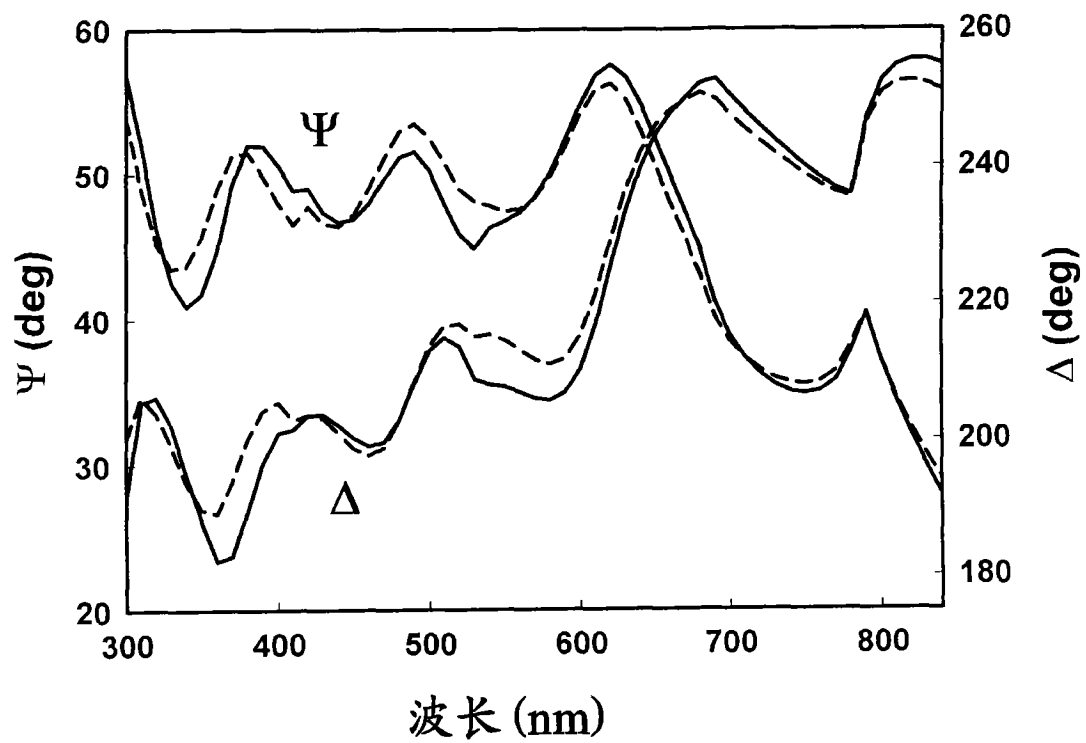


图 11

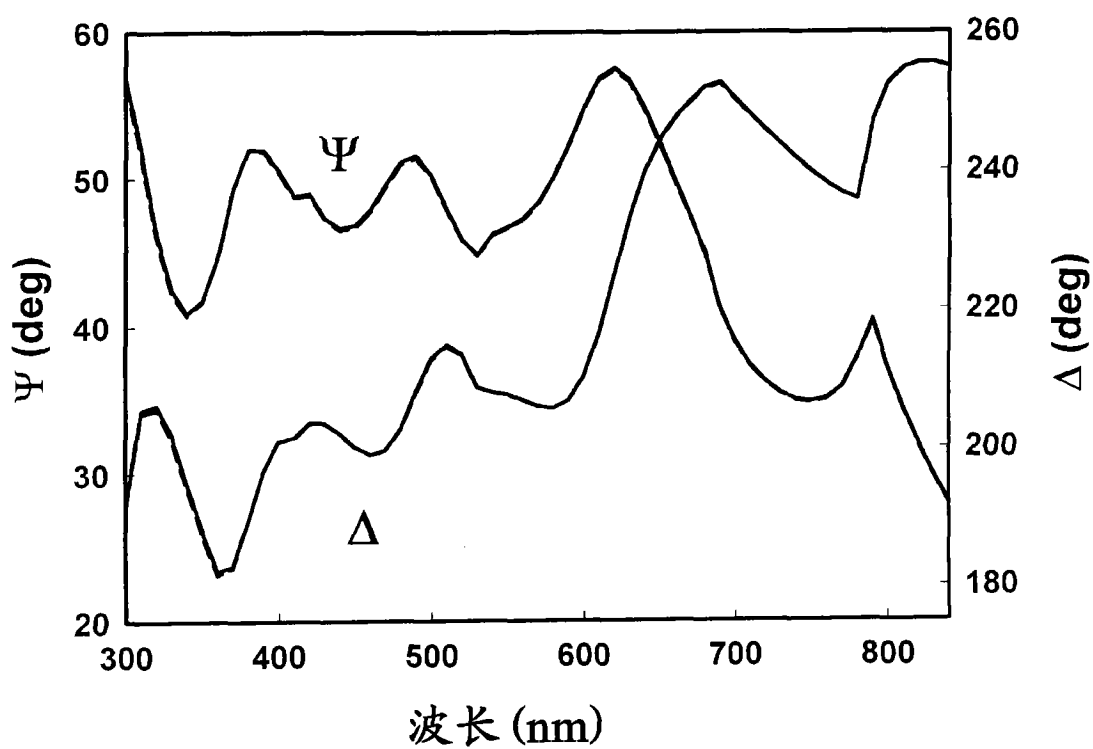


图 12

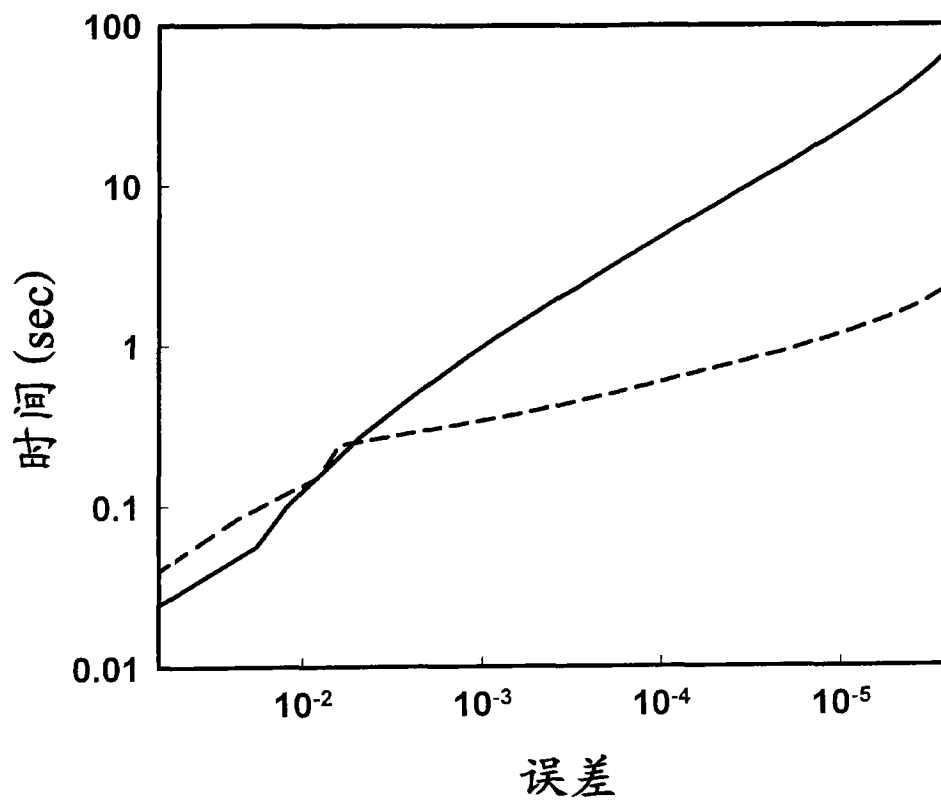


图 13

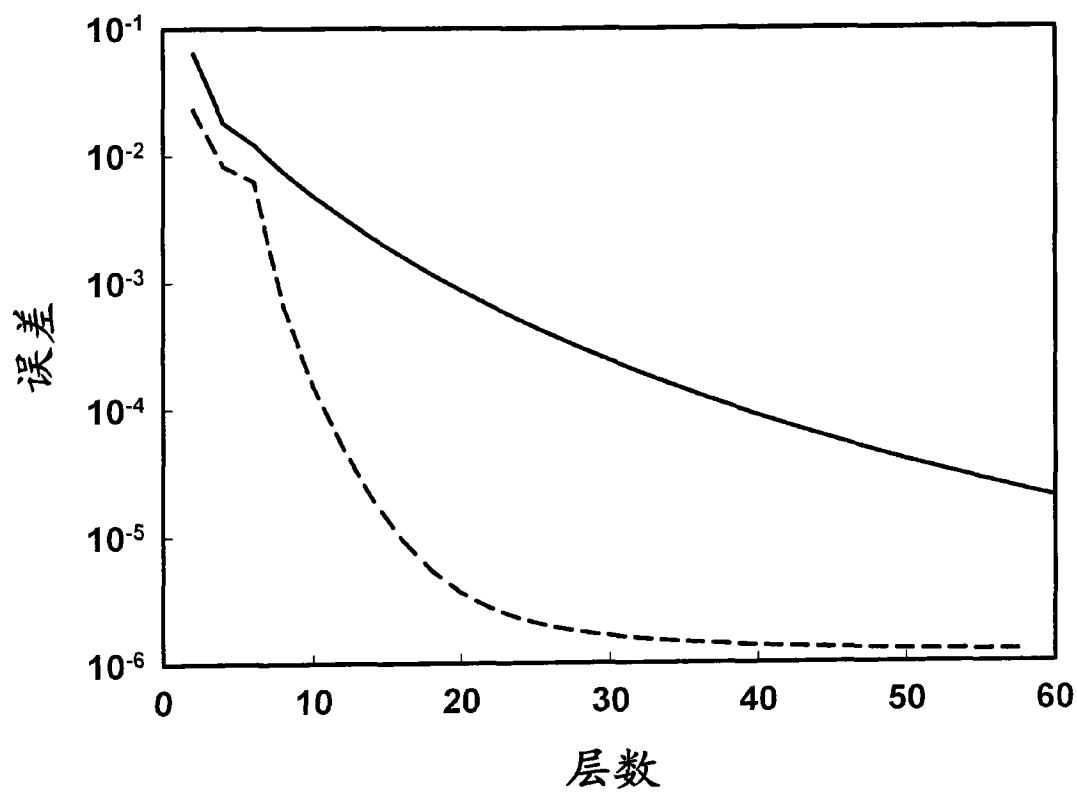


图 14