



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2011-0013168
(43) 공개일자 2011년02월09일

(51) Int. Cl.

G01N 21/41 (2006.01) G01N 21/59 (2006.01)

G06F 19/00 (2011.01) G06F 17/11 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2010-0009753

(22) 출원일자 2010년02월02일

심사청구일자 2010년02월02일

(30) 우선권주장

1020090070308 2009년07월30일 대한민국(KR)

(71) 출원인

경희대학교 산학협력단

경기도 용인시 기흥구 서천동 1 경희대학교 국제 캠퍼스내

(72) 발명자

김영동

서울 서초구 잠원동 대림아파트 1동 809호

정진모

서울 노원구 상계3동 1293 불암 현대아파트 105-1201호

한승호

충청남도 아산시 풍기동 동일하이빌아파트 101-118

(74) 대리인

이익배

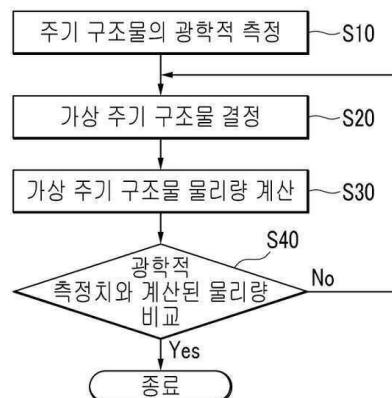
전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 주기 구조물의 비파괴 검사 방법

(57) 요약

본 발명은 가상 주기 구조물을 설정하고, 상기 설정된 가상 주기 구조물을 다수의 층으로 나누고, 리프만-슈빙거 적분 방정식을 M차 내삽법으로 이산화시켜 상기 가상 주기 구조물에 대한 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산하는 단계를 포함하는 그런 함수 방법을 이용한 주기 구조물 분석 방법에 대한 것으로 M차 내삽법을 이용하여 보다 빠른 시간내에 보다 정확한 비파괴 검사를 할 수 있다.

대표도 - 도1



특허청구의 범위

청구항 1

(a) 광원에서 빔을 실제 주기 구조물에 입사시켜 상기 빔의 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 측정하는 단계;

(b) 상기 빔이 가상 주기 구조물에 입사하였을 경우의 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산하는 단계로서, 일차원, 이차원적, 또는 삼차원적으로 반복적인 형태를 갖는 가상 주기 구조물을 설정하고,

상기 가상 주기 구조물을 N 개의 층으로 수평적으로 분할하고,

상기 가상 주기 구조물로서 영차 주기 구조물과, 이 영차 주기 구조물을 기하학적 또는 물리적으로 접동시킨 주기 구조물로 설정하고,

상기 가상 주기 구조물에 입사되는 빔이 영차 주기 구조물에 입사하였을 경우의 반사율 또는 투과율을 산출하고,

리프만-슈빙거 적분 방정식에 의해 상기 접동된 가상 주기 구조물의 반사율 및 투과율을 구하는 단계로서, 상기 가상 주기 구조물의 분할된 층들 중 적어도 한 층에 대하여 리프만-슈빙거 적분 방정식을 M 차 내삽법으로 이산화시켜(여기서, $2 \leq M \leq N$) 상기 가상 주기 구조물에 대한 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산하는 단계를 포함하고;

(c) 상기 (a) 단계에서 측정된 반사율 및 투과율과 관계된 물리량과 상기 (b) 단계에서 계산된 반사율 및 투과율을 사용하여 추출된 해당 물리량을 비교하여 상기 실제 주기 구조물의 구조가 상기 가상 주기 구조물과 일치하는지를 판단하는 단계를 포함하는

주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 가상 주기 구조물을 분할한 N개의 층을 X 개의 영역(여기서, $1 \leq X \leq (N-1)$)으로 구획하고, 구획된 개별 영역에 대하여 리프만-슈빙거 적분 방정식을 M_i 차 내삽법으로 이산화시켜 상기 가상 주기 구조물에 대한 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산하는 단계를 포함하며, 여기서 상기 M_i 는 $1 \leq M_i \leq N$ 인 것을 특징으로 하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 3

제2항에 있어서, 상기 가상 주기 구조물을 분할한 N 개 층을 X 개의 영역으로 구획할 때, 구획된 개별 영역중 적어도 어느 하나는 다른 영역과 다른 수의 층을 포함하는 것을 특징으로 하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 반사율 또는 상기 투과율은 주차수(0차) 회절뿐만 아니라 다른 차수의 회절에 대한 반사율 또는 투과율인 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 주기 구조물의 외측에 위치하는 물질은 기체, 액체 또는 고체 중 어느 하나인 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 6

제1항에 있어서, 상기 가상 주기 구조물의 외측면에는 적어도 하나의 표면층이 형성되어 있고, 이 표면층은 산화막, 표면 거칠기층 또는 코팅층인 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 7

제1항에 있어서, 상기 물리량은 반사파 또는 투과파의 진폭 또는 위상과 관련된 물리량인 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 8

제1항에 있어서, 상기 리프만-슈빙거 적분 방정식을 통하여 상기 물리량을 계산하는 단계는

상기 가상 주기 구조물의 분할된 층에서 섭동 유전율 함수를 푸리에 급수로 전개하는 단계, 및

상기 가상 주기 구조물의 분할된 각 층에서 섭동 반사파 또는 투과파의 층을 나타내는 지수에 따라 M 차 내삽법을 분리해서 적용하는 단계를 포함하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 9

제1항에 있어서, 상기 가상 주기 구조물의 다수의 층 중 적어도 하나는 다른 높이를 가지도록 나누는 것을 특징으로 하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

명세서

기술 분야

[0001] 본 발명은 주기 구조물의 비파괴 검사 방법에 관한 것으로, 보다 상세하게는 실제로 측정된 빛의 반사율 및 투과율에 관계된 물리량과 계산에 의해 추정된 반사율 및 투과율에 관련된 물리량을 비교하여 주기 구조물의 형태를 측정하는 분석 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 일반적으로, 반도체 소자나 디스플레이 소자와 같은 전자 디바이스(device)를 제조하기 위해서는 세척, 박막성장, 포토 리소그래피 및 박막 에칭 등의 공정을 여러번 반복 수행하여야 한다. 예를 들어, 포토 리소그래피 공정에서는 마스크에 빛을 조사하여 마스크 상의 패턴을 감광성 물질에 전사하여 마스크 패턴과 동일한 패턴을 형성하고, 전사된 패턴을 에치 장벽(etch barrier)으로 이용하여 박막 상에 원하는 패턴을 형성하게 된다.

[0003] 이와 같이 포토 리소그래피 공정을 이용하여 제작되는 반도체 또는 디스플레이 소자는 단계마다 원하는 패턴이 정확하게 형성되어야 한다. 즉 원하는 패턴이 감광성 물질로 정확하게 전사되고, 이 감광성 패턴도 에치 장벽으로써 역할을 제대로 하여 정확한 패턴이 박막에 형성되어야 한다. 포토 리소그래피 공정의 정확성을 확인하기 위해서는 포토 리소그래피 공정 후 형성된 박막 패턴 또는 박막 위에 형성된 감광성 패턴 따위를 검사하여 확인할 필요가 있다.

[0004] 패턴의 검사를 위하여 일반적으로 패턴검사기를 이용하여 광학적으로 반도체 소자의 형상을 관찰하는 방법이 사용되고 있으나 이는 나노 수준의 패턴을 검사 하기에는 그 해상도가 부족하여 정확한 분석이 어렵다. 그 결과, 패턴 검사기를 이용하여 검사를 수행한 후에 별도로 전자현미경 등을 이용하여 구체적인 형상을 분석하는 방법이 반도체 연구 및 생산라인에서 이용되고 있다.

[0005] 그러나, 전자 현미경을 이용하는 경우 반도체 소자의 단면을 절단하여 그 형상을 분석하여야 하므로 제조된 소자를 다시 이용할 수 없는 단점이 있고, 진공상태에서 측정을 하여야 하므로 측정 결과를 얻는데 과도한 시간이 걸리며, 측정 부위를 다양하게 선택할 수 없다는 단점을 안고 있어 실제로 생산라인에서 이용하기에는 한계가 있다.

[0006] 이를 보완하기 위한 방법으로 광학적 측정법을 이용하는 기술이 개발되었으며, 일례로, 유효물질이론(Effective Medium Approximation: EMA)이라는 근사식을 사용하는 방법이 있다. 유효물질이론을 이용한 계산 방법은 구조의 세부적인 형태와는 상관없이 부피의 비율로만 근사함으로써 구조물의 세밀한 형태를 전혀 구별해내지 못한다는 문제점이 있다. 즉, 주기적인 구조를 갖는 회로의 각 패턴의 형성을 구체적으로 구별하지 못하고 그 비율만을 구별해 냄으로써 실제의 구조와 측정된 구조 사이의 차이가 크게 발생한다. 특히, 주기구조물의 경우 유효물질이론을 이용한 계산방법으로는 주기구조를 밝힐 수 없어 새로운 광학적 측정 방법이 절실히 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 주기 구조물의 구조를 빠르고 정확하게 파악하는 방법을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명은 (a) 광원에서 빔을 실제 주기 구조물에 입사시켜 상기 빔의 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 측정하는 단계; (b) 상기 빔이 가상 주기 구조물에 입사하였을 경우의 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산하는 단계로서, 일차원, 이차원적, 또는 삼차원적으로 반복적인 형태를 갖는 가상 주기 구조물을 설정하고, 상기 가상 주기 구조물을 N 개의 층으로 수평적으로 분할하고, 상기 가상 주기 구조물로서 영차(zeroth order) 주기 구조물과 이 영차 주기 구조물을 기하학적 또는 물리적으로 접동시킨 주기 구조물로 설정하고, 상기 가상 주기 구조물에 입사되는 빔이 영차(zeroth order) 주기 구조물에 입사하였을 경우의 반사율 또는 투과율을 산출하고, 리프만-슈빙거 적분 방정식에 의해 상기 접동된 가상 주기 구조물의 반사율 및 투과율을 구하는 단계로서, 상기 가상 주기 구조물의 분할된 층들 중 적어도 한 층에 대하여 리프만-슈빙거 적분 방정식을 M 차 내삽법으로 이산화시켜(여기서, $2 \leq M \leq N$) 상기 가상 주기 구조물에 대한 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산하는 단계를 포함하고; (c) 상기 (a) 단계에서 측정된 반사율 및 투과율과 관계된 물리량과 상기 (b) 단계에서 계산된 반사율 및 투과율을 사용하여 추출된 해당 물리량을 비교하여 상기 실제 주기 구조물의 구조가 상기 가상 주기 구조물과 일치하는지를 판단하는 단계를 포함하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법을 제공한다.

[0009] 본 발명에 있어서, 상기 가상 주기 구조물을 분할한 N개의 층을 X 개의 영역(여기서, $1 \leq X \leq (N-1)$)으로 구획하고, 구획된 개별 영역에 대하여 리프만-슈빙거 적분 방정식을 M_i 차 내삽법 ($M_{i\text{th}}$ order interpolation)으로 이산화시켜 상기 가상 주기 구조물에 대한 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산하는 단계를 더 포함할 수 있다(여기서 M_i 는 $1 \leq M_i \leq N$).

[0010] 상기 가상 주기 구조물을 분할한 N 개 층을 X 개의 영역으로 구획할 때, 구획된 개별 영역중 적어도 어느 하나는 다른 영역과 다른 수의 층을 포함할 수 있다.

[0011] 상기 반사율 또는 상기 투과율은 주차수(0차) 회절뿐만 아니라 다른 차수의 회절에 대한 반사율 또는 투과율을 포함할 수 있다.

[0012] 상기 주기 구조물의 외측에 위치하는 물질은 기체, 액체 또는 고체 중 어느 하나일 수 있으며, 상기 가상 주기 구조물의 외측면에는 적어도 하나의 표면층이 형성되어 있고 이 표면층은 산화막, 표면 거칠기층 또는 코팅층일 수 있다.

[0013] 상기 물리량은 반사파 또는 투과파의 진폭 또는 위상과 관련된 물리량일 수 있다. 상기 리프만-슈빙거 적분 방정식을 통하여 상기 물리량을 계산하는 단계는 상기 가상 주기 구조물의 분할된 층에서 섭동 유전율 함수를 푸리에 급수로 전개하는 단계, 및 상기 가상 주기 구조물의 분할된 각 층에서 섭동 반사파 또는 투과파의 층을 나타내는 지수에 따라 M 차 내삽법을 분리해서 적용하는 단계를 포함할 수 있다.

[0014] 상기 가상 주기 구조물의 다수의 층 중 적어도 하나는 다른 높이를 가지도록 나눌 수 있다.

발명의 효과

[0015] 본 발명에 따르면, 주기 구조물의 구조를 보다 빠르고 정확하게 파악할 수 있다.

[0016] 또한, 비파괴적으로 주기 구조물의 구조를 파악할 수 있고, 자연적으로 주기 구조물 상에 형성되는 산화막이나 코팅층 등의 미세 구조도 정밀하게 검사할 수 있다.

[0017] 그 결과 반도체 산업 등 기타 나노 산업 분야에서의 빠르고 정밀한 비파괴 검사가 가능하다.

도면의 간단한 설명

[0018] 도 1은 본 발명의 한 실시예에 따른 그린 함수 방법을 이용한 주기 구조물 분석 방법을 도시한 순서도이다.

도 2 및 도 3은 본 발명의 실시예에 따른 주기 구조물의 비파괴 검사 장치를 개략적으로 도시한 도면이다.

도 4는 본 발명의 한 실시예에 따른 가상 주기 구조물을 도시한 사시 도면이다.

도 5는 도 4의 가상 주기 구조물의 단면을 복수의 층으로 나눈 단면도이다.

도 6은 본 발명의 또 다른 실시예에 따른 가상 주기 구조물을 도시한 사시 도면이다.

도 7은 도 6의 가상 주기 구조물의 단면을 복수의 층으로 나눈 단면도이다.

도 8은 본 발명의 한 실시예에 따라서 설정된 주기 구조물의 단면도이다.

도 9 내지 도 14는 RCWA 방법, 기존의 비파괴 검사 방법 및 본 발명의 실시예에 따른 검사 방법에 의한 결과를 비교하여 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0019] 이하에서는 첨부한 도면을 참고하여 본 발명의 실시예에 대하여 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 상세히 설명한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 실시예에 한정되지 않는다.
- [0020] 우선은 도 1 내지 도 3을 통하여 본 발명의 한 실시예에 따른 그린 함수(Green Function) 방법을 이용한 주기 구조물 분석 방법의 진행 순서를 살펴본다.
- [0021] 도 1은 본 발명의 한 실시예에 따른 그린 함수 방법을 이용한 주기 구조물 분석 방법을 도시한 순서도이고, 도 2 및 도 3은 본 발명의 실시예에 따른 주기 구조물의 비파괴 검사 장치를 개략적으로 도시한 도면이다.
- [0022] 본 발명의 실시예에 따른 그린 함수 방법을 이용한 주기 구조물 분석 방법은 주기 구조물을 대상으로 빛을 조사하여 광학적 특성을 측정하는 단계(S10), 가상 주기 구조물의 구조를 결정하는 단계(S20), 결정된 가상 주기 구조물을 대상으로 물리량을 계산하는 단계(S30) 및 광학적 측정치와 계산된 물리량을 비교하는 단계(S40)를 포함한다.
- [0023] 우선, 각 단계를 살펴보면 아래와 같다.
- [0024] 먼저, 구조를 알고자하는 주기 구조물에 빛을 조사하여 반사율 또는 투과율을 측정하고 광학적 특성을 추출한다(S10). 주기 구조물이 반사 특성이 양호한 경우에는 반사율을 측정하며, 투과 특성이 양호한 경우에는 투과율을 측정한다. S10 단계는 도 2 또는 도 3과 같은 검사 장치를 통하여 검사할 수 있다.
- [0025] 먼저, 도 2의 검사 장치는 광원(100), 검출기(110), 프로세서(120) 및 기관(130)을 포함한다. 광원(100)은 주기 구조물(200)을 향하여 빛을 조사한다. 광원은 특정 파장을 가지는 빛을 조사하며, 다양한 파장의 빛을 사용할 수 있다.
- [0026] 주기 구조물(200)에 입사한 빛 중 일부는 투과하고, 일부는 반사한다. 반사된 빛은 검출기(110)에서 검출되고, 프로세서(120)에서는 검출기(110)에서 측정된 반사파의 반사율이 산출된다. 투과된 빛 또한 검출기(110)에서 검출되고, 프로세서(120)에서는 검출기(110)에서 측정된 투과파의 투과율이 산출된다.
- [0027] 상기 검사 장치는 도 3에 도시된 바와 같이, 편광기(140)를 더 구비할 수 있다. 이 경우, 광원(100)에서 발생한 빛은 편광기(140)를 거쳐 TE 모드의 빛 또는 TM 모드의 빛으로 편광되어 주기 구조물(200)에 입사된다.
- [0028] 주기 구조물(200)에 빛을 입사시키면, 입사한 빛은 반사되는 빛과 투과되는 빛으로 나뉘어진다. 본 발명에서는 빛의 반사 및 투과에 있어서 가장 근본적인 2개의 편광 상태, 즉 TE 모드 및 TM 모드의 반사율 및 투과율을 산출하여 주기 구조물의 비파괴 검사를 수행한다.
- [0029] 예를 들어, 주기 구조물에 빛을 입사하여 측정된 반사율 및 투과율과 관계된 물리량은 TE 모드 전기장의 입사파에 대한 반사파 및 투과파의 진폭 또는 위상과 관계된 물리량 및 TM 모드 자기장의 입사파에 대한 반사파 및 투과파의 진폭 또는 위상과 관련된 물리량의 조합으로 이해될 수 있다.
- [0030] 이상과 같은 S10 단계는 반도체 소자의 제조 공정 중에 단순히 빛을 조사하여 반사율 또는 투과율을 측정하면서 진행할 수 있다. 그 결과 반도체 소자의 제조 환경을 변화시키지 않고서도 간단히 측정할 수 있다.
- [0031] 이와 같이 측정된 반사율 또는 투과율과 일치하는 값을 주는 비교할 대상을 구하여야 한다. 일치하는 값을 주는 해당 대상의 주기 구조가 S10 단계에서 측정된 주기 구조물(200)의 구조이기 때문이다. 이는 S20 내지 S30 단계를 통하여 계산된다.
- [0032] 살펴보면, 먼저, 가상 주기 구조물을 결정(S20)하는 단계를 거친다. 일반적으로 반도체 소자를 제조할 때, 목표하는 구조가 있는데, 해당 구조를 기초로 가상 주기 구조물을 결정하게 된다.
- [0033] 도 4 내지 도 8은 가상 주기 구조물의 예를 도시하고 있다.

- [0034] 도 4는 본 발명의 한 실시예에 따른 가상 주기 구조물을 도시한 사시 도면이고, 도 5는 도 4의 가상 주기 구조물의 단면을 복수의 층으로 나눈 단면도이며, 도 6은 본 발명의 또 다른 실시예에 따른 가상 주기 구조물을 도시한 사시 도면이고, 도 7은 도 6의 가상 주기 구조물의 단면을 복수의 층으로 나눈 단면도이다.
- [0035] 도 4 및 도 5 또는 도 6 및 도 7은 각각 가상 주기 구조물의 예로 S30에서의 계산을 위해서는 가상 주기 구조물(200a, 200b)을 다수의 얇은 층으로 나누고 각 층에 대하여 미정계수를 갖는 각 회절 차수에 대한 반사율과 투과율 함수를 구하고, 각 층에서의 경계조건을 적용하여 미정계수들을 모두 구하는 과정을 진행하게 된다.
- [0036] 도 4 및 도 5와 달리 도 6 및 도 7은 해당 구조의 표면에 산화막 따위의 표면층(210)이 적층된 것을 가정한 구조이다. 일반적으로 진공에서 반도체 공정이 진행된다 하더라도 짧은 시간내에 박막이 표면위에 적층되는 것이 일반적이므로 도 4 및 도 5보다는 도 6 및 도 7과 같이 표면층(210)을 고려하여 S30 단계를 수행하는 것이 바람직할 수 있다.
- [0037] 도 4 및 도 5의 주기구조물(200a)을 예를 들어 1차원, 2차원, 또는 3차원의 주기구조의 형태를 갖는 반도체 소자라고 가정하면, 상기 가상 주기구조물(200a)은 각 층마다 실리콘 등의 해당 물질로 이루어진 물질부분(n_1 부터 n_L 까지)과 공기층 등 입사부의 물질부분($\tilde{n}_1$ 부터 $\tilde{n}_L$ 까지)의 두가지 물질이 수평적으로 주기적인 구조를 가진다.
- [0038] 그러나 반도체 공정 등의 실제 환경에서는, 주기구조물을 완벽한 진공 상태에서 제조하지 못하기 때문에 실제 주기구조물의 표면에는 공기 또는 수분과의 접촉에 의해 산화막이 형성된다. 또한, 공정단계에서 주기구조물의 표면에 의도적인 코팅층을 형성하거나, 주기구조물 표면에 거칠기층(roughness layer)이 존재하여 실제의 기하학적 형태를 추정하는데 도 4 및 도 5의 주기구조물(200a)은 한계가 있다.
- [0039] 도 6 및 도 7은 가상 주기구조물(200b)은 표면에 산화막 등의 표면층(210)이 형성되어 있으며, 그 단면을 복수의 층으로 분할하면 도 7에 도시한 바와 같이 적어도 3 개의 물질이 주기적으로 반복되는 구조를 갖게 된다. 상기 가상 주기구조물(200b)은 골(groove) 영역에 해당하는 제3물질을 사이에 두고 반복적인 주기로 형성된 마루(ridge) 영역을 포함하며, 이 마루 영역은 제1물질로 구성된 중심부와 제2물질로 구성되며 상기 제2물질은 중심부의 외면에 형성되는 표면층을 포함한다.
- [0040] 도 7에서 $n_l(l=2, \dots, L)$, $\tilde{n}_l(l=2, \dots, L-1)$, 및 $\tilde{n}_l(l=1, \dots, L)$ 는 층 l에서 마루(ridge) 영역(제1물질), 골(groove) 영역(제3물질), 표면층 영역(제2물질)을 각각 나타낸다.
- [0041] 상기 표면층(제2물질)은 산화막 또는 코팅층일 수 있으며, 경우에 따라서는 주기구조물 표면의 거칠기층일 수도 있다. 상기 골 영역에 해당하는 제3물질은 기상, 액상, 또는 고상일 수 있다.
- [0042] 예를 들어, 상기 가상 주기구조물(200b)을 반도체 소자로 가정하면, 직사각형 단면의 구조의 복수 층(1 내지 L)에서, 최상부층(제1층)을 제외하고, 중간각 각 층마다 실리콘 등의 물질로 이루어진 제1물질, 산화막 또는 코팅층으로서 존재하는 표면의 제2물질 및 공기층이나 액상 또는 고상형태의 제3물질이 수평적으로 주기적인 반복 구조를 가지게 된다.
- [0043] 이와 같이 산화막이나 코팅층, 또는 표면의 거칠기층 등의 표면층(210)을 고려하여 가상 주기구조물(200b)을 설정하게 되면 가상 구조물의 반사율 및 투과율을 실제 주기구조물과 더욱 근사하게 산출할 수 있다. 따라서, 나노 수준의 미세 주기구조물의 구조 및 성분을 매우 정확하게 측정할 수 있다. 구체적으로는 주기구조의 기하학적인 외관 형태 및 내부 구성 성분, 그 아래에 존재하는 박막 구조들의 두께까지 비교 분석할 수 있다.
- [0044] 이렇게 결정된 가상 주기 구조물은 계산을 통하여 반사율(R) 또는 투과율(T)을 산출한다(S30). 반사율과 투과율의 계산 방법에 대해서는 후술한다.
- [0045] 그 후, S30 단계를 통하여 계산된 반사율 또는 투과율과 S10 단계를 통하여 측정된 반사율 또는 투과율을 비교한다(S40). 주기구조물의 실제 측정된 반사율 또는 투과율 또는 그와 관계된 물리량과 가상 주기구조물의 산출된 반사율 및 투과율 또는 그와 관계된 물리량을 비교하여, 일정 오차 범위 이내에서 동일할 경우, 실제 주기구조물의 구조가 가상 주기구조물의 구조와 일치한다고 판단할 수 있다.
- [0046] 측정된 반사율 또는 투과율과 그와 관계된 물리량과 산출된 반사율 또는 투과율과 그와 관계된 물리량을 비교함에 있어서, 컴퓨터 등의 별도 장치를 이용할 수 있으며 측정값과 산출값의 비교를 위한 소프트웨어를 이용할 수도 있을 것이다. 이와 같은 방법으로 주기구조물의 실제 구조를 정밀하게 검사할 수 있다.

- [0047] 또한 주기적인 구조가 있는 물질의 경우에 반사 또는 투과하는 빛은 0차를 포함한 여러 회절 차수를 갖는다. 일반적으로는 주차수(0차)의 경우만을 고려하지만, 비대칭인 경우 또는 주기를 알고 싶은 경우에는 주차수(0차) 이외의 차수(1, 2, ..., n 및 -1, -2, ..., -n차수)를 고려하게 된다. 본 발명은 이와 같은 주차수 이외의 차수의 반사 또는 투과광에도 동일하게 적용될 수 있다.
- [0048] 비교 결과 양 물리량이 오차 범위 내로 서로 일치한다면 S10 단계에서 측정된 주기 구조물(200)은 S20 단계에서 설정된 가상 주기 구조물의 구조와 같으므로 검사 절차는 종료된다. 이에 반하여 양 물리량이 서로 다른 경우에는 S20 단계로 되돌아가서 이미 설정된 가상 주기 구조물의 광학적 및 기하학적 변수를 변경하여 다시 S20 단계 및 S30 단계를 거쳐 계산된 물리량을 얻는다.
- [0049] 이상과 같은 방식을 통하여 그린 함수 방법을 이용한 주기 구조물 분석 방법이 진행된다.
- [0050] 이하에서는 S30 단계에서 어떠한 계산을 통하여 계산된 반사율 또는 투과율을 산출하는지 살펴본다.
- [0051] 본 발명에서는 가상 주기구조물의 물리량을 산출하기 위해서 가상 주기구조물의 한 형태를 가정하여 영차 구조물(zero-th order periodic structure)로 정의하고, 이 영차 구조물을 섭동영역에서 기하학적 또는 물리적 변화를 가한 섭동된 주기구조물(perturbed periodic structure)을 얻는다.
- [0052] 영차 구조물에 대한 빛의 반사율 및 투과율, 섭동영역에서의 영차 구조물의 그린함수를 계산하고, 리프만-슈빙거 적분방정식(Lippmann-Schwinger Integral Equation)을 이산화하고, 이때 각 분할된 구간에서 피적분 함수인 전기장 또는 자기장 미지함수에 대한 M 차 내삽법 사용하여 이 피적분 함수를 미지계수를 갖는 M 차 다항식으로 근사하여 해석적 적분을 먼저 한 후, 이산화된 미지계수들에 대한 일차 연립 방정식계를 얻고 이를 풀어서, 이들 결과로부터 섭동된 주기구조물의 반사율, 투과율, 또는 반사율 및 투과율에 관계된 물리량을 구한다. 리프만-슈빙거 적분방정식의 수치 해석적 풀이에서는 주기 구조물을 수평 분할하여 층을 나누고, 각 층에서 미지계수의 수가 층의 수만큼 곱해져서 얻어지는 전체 미지계수에 대한 1차 연립방정식을 푸는 방식으로 계산된다. 이때, 수평 분할하는 층의 수를 줄이면 계산 시간이 단축될 수 있는 반면, 계산의 정밀도가 떨어지는 단점이 있다. 본 발명에서는 주기구조물의 수평분할된 층 수를 작게 하면서도 정밀도가 떨어지는 것을 막기 위하여 M 차 내삽법을 사용한다. 이때, 가상의 주기 구조물을 분할한 각 층 또는 영역에 있어서, M차 내삽을 각각 다르게 적용할 수도 있다. 예를 들어, 영역(또는 층) a 에서는 2차 내삽을 적용하고, 영역(또는 층) b 에서는 4차 내삽을 적용하고, 영역(또는 층) c 에서는 1차 내삽을 적용할 수 있을 것이다. 가상 주기 구조물의 구조에 따라 각 영역(또는 층)에 대하여 적용되는 M 차 내삽 방식을 다양하게 변화시킬 수 있다. 내삽의 차수가 늘어남에 따라, 가상 주기 구조물의 형태에 따라 다소 차이가 있을 수 있지만, 계산의 정확도는 최대 2 차수(order)씩 증가할 수 있다. 그 결과, 본 발명에 따른 분석 방법에 따르면, 가상 주기 구조물의 분할 층을 감소시키면서도 계산 정밀도를 유지할 수 있어 매우 빠르고 정확하게 주기 구조물을 분석할 수 있다.
- [0053] 본 발명에 있어서, 가상 주기 구조물을 N 개 층으로 분할할 때 분할된 층들을 X 개의 영역($1 \leq X \leq (N-1)$)으로 구획하고, 구획된 개별 영역에 대하여 리프만-슈빙거 적분 방정식을 M_i 차 내삽법으로 이산화시켜 상기 가상 주기 구조물에 대한 반사율 또는 투과율에 대한 물리량을 계산할 수 있다. 이 경우 상기 M_i 는 $1 \leq M_i \leq N$ 인 것이 바람직하다. 예를 들어, N 개의 층을 2 개씩 묶고 각각의 쌍에 대하여 2차 내삽법을 적용하거나, N 개의 층을 4 개씩 묶고 각각의 쌍에 대하여 4차 내삽법을 적용할 수 있을 것이다. 한편, 가상 주기 구조물을 분할한 N 개 층을 X 개의 영역으로 구획할 때, 구획된 개별 영역은 서로 크기가 다를 수 있다. 즉, 한 영역은 다른 영역과 다른 수의 층을 포함하도록 설정할 수 있다. 따라서, N 개의 층을 서로 다른 수의 영역으로 묶고 각각의 묶음 쌍들에 대하여 서로 다른 M_i 차 내삽법을 적용할 수 있다.
- [0054] 영차 구조물에 대한 빛의 반사율 및 투과율은 맥스웰 방정식에 주기조건을 가미한 계산을 통하여 추정할 수 있다. 이를 위하여, 도 4 내지 도 7에 도시하고 있는 바와 같이 가상 주기구조물(200a 또는 200b)을 직사각형 단면 형태의 복수의 층(1에서 L까지)으로 나눈다.
- [0055] 이어서, 가상 주기구조물(200a 또는 200b)의 분할된 층에서의 유전율 함수를 푸리에(Fourier) 급수로 전개한다. 가상 주기구조물(200a 또는 200b)에 빛이 입사한다고 가정할 때, 입사파, 반사파, 투과파의 전자기파를 평면파의 합으로 두고, 각 층에서의 맥스웰 방정식의 해를 고유함수 모드의 합으로 전개하여 그 전개계수들을 전기장과 자기장의 수평성분이 연속이라는 경계치 조건을 사용하여 결정한다.
- [0056] 상기 전개계수를 이용하여 TE 모드 전기장의 입사파에 대한 반사파 및 투과파의 진폭 또는 위상, 및 TM 모드 자기장의 입사파에 대한 반사파 및 입사파의 진폭 또는 위상을 산출하고, 영차 구조물의 반사율($R_{TE}^{[0]}$ 및 $R_{TM}^{[0]}$) 및

투과율($T_{TE}^{[0]}$ 및 $T_{TM}^{[0]}$)을 계산한다.

- [0057] 이때, 가상 주기구조물(200a 또는 200b)에서 분할된 층의 수와 푸리에 급수 전개에 항의 수를 크게 하면 보다 정밀한 해를 얻을 수 있다. 이하에서는 도 6 및 도 7에서 도시된 가상 구조물(200b)를 통하여 살펴본다.
- [0058] 섭동 영역에서의 영차 구조물의 그린함수도 상기 영차 구조물의 반사율 또는 투과율을 계산하는 방법을 적용하여 구할 수 있다.
- [0059] 리프만-슈빙거 적분방정식을 통하여 섭동 영역의 각 층에서 TE 모드 전기장과 TM 모드 자기장의 결합과 전개계수를 계산한 다음, 이들을 사용하여 섭동된 구조물에 의한 반사율(R_{TE} 및 R_{TM}) 및 투과율(T_{TE} 및 T_{TM})을 각각 계산한다.
- [0060] 본 발명에서는 입사 매질(영역 I)과 기판(영역 II) 사이의 주기구조물을 L층으로 나누는데 일부 또는 전체의 층이 균일한 물질로 이루어진 것을 포함한다. 그 중 몇 가지로 섭동 영역 전체의 층 모두가 각 층 대로 균일한 물질로 이루어진 경우, 모든 층이 하나의 균일한 물질로 이루어진 경우, 섭동 영역을 기판 위의 공기층으로 두는 경우, 각 층이 균일한 물질은 아니면서 모든 층이 주어진 층 하나의 반복으로 이루어진 경우를 고려할 수 있다.
- [0061] 이하에서는 도 6 및 도 7에 도시된 가상 주기구조물(200b)의 반사율 및 투과율을 계산하는 방법의 중간 과정 중 그린함수에 대한 2차 내삽법을 사용하여 리프만-슈빙거 적분방정식의 이산화 과정과 전기장의 이산화 값[$\Psi(z_i)$]들에 대한 1차 연립 방정식계를 구성하는 방법에 대하여 살펴본다.
- [0062] 이하에서는 빛의 편광에 따라 TE모드와 TM모드를 구분하여 계산하며, 먼저 TE모드의 계산에 대하여 살펴본다.
- [0063] 주기 구조물의 x축 방향 주기성에 의하여 맥스웰(Maxwell) 방정식의 TE 모드 해는 푸리에-플로케 급수 전개(Fourier-Floquet series)로 나타내면 아래의 수학식 1 및 수학식 2와 같다.

수학식 1

$$E_y(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Psi_n(z) e^{ik_{xn}x}$$

[0064]

수학식 2

$$H_x(x, z) = i \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{1}{k_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \partial_x \Psi_n(z) e^{ik_{xn}x}$$

[0065]

- [0066] 여기서 $i = \sqrt{-1}$ 이고, k_{xn} 은 플로케(Floquet) 조건에 의해 $k_{xn} = k_0 [n_1 \sin \theta - n \lambda_0 / \Lambda]$, $k_0 = 2\pi / \lambda_0$ 이고, λ_0 는 진공에서의 입사파의 파장이며, n_1 은 입사 영역의 굴절율이며, θ 는 입사각이다. 또한, ϵ_0 는 진공의 유전율이며, μ_0 는 진공의 투자율이다. 또한, x축 방향으로 주기 Λ 를 갖는 주기가 1차원인 주기 구조의 유전율 함수 $\epsilon(x, z)$ 는 푸리에 급수 전개에 의하면 아래의 수학식 3과 같이 나타낼 수 있다.

수학식 3

$$\epsilon(x, z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \epsilon_k(z) e^{i2\pi kx/\Lambda}$$

[0067]

- [0068] 수학식 1의 $\Psi_n(z)$ 를 성분으로 하는 열벡터 $\Psi(z)$ 는 맥스웰 방정식에 의해 아래의 수학식 4를 만족한다.

수학식 4

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

[0069]

[0070] 여기서 $\mathbf{K}$ 는 (n, n) 원소가 k_{xn}/k_0 인 대각 행렬이며, $\mathbf{E}(z)$ 는 (n, p) 원소가 $E_{np}(z) = \varepsilon_{(n-p)}(z)$ 로 주어지는 유전율 급수 전개에 전개 계수로 만들어지는 퇴플리츠(Toeplitz) 행렬이다.

[0071] 이하, 푸리에-플로케 급수전개의 결합파 기저(coupled-wave basis) $\exp[k_m x]$ 를 나타내는 첨자 n 의 범위를 $-N$ 에서 N 까지로 제한할 것이다. 앞에서의 주기구조물은 주기가 같은 영차 주기구조물에 섭동이 가해진 구조물로 여길 때 섭동 유전율 함수 $\Delta \varepsilon(x, z)$ 는 $\Delta \varepsilon(x, z) = \varepsilon(x, z) - \varepsilon^{[0]}(x, z)$ 로 나타낼 수 있다. 여기서 $\varepsilon^{[0]}(x, z)$ 는 영차 주기구조물의 유전율 함수이다.

[0072] 영차 주기구조물과 섭동이 가해진 주기구조물에 대한 전기장의 푸리에-플로케 급수전개의 전개계수 열벡터 $\Psi_1(z)$ 와 $\Psi^{[0]}_1(z)$ 는 다음의 리프만-슈빙거(Lippmann-Schwinger) 방정식(수학식 5)을 만족한다.

수학식 5

$$\Psi(z) - \Psi^{[0]}(z) = \int dz' \mathbf{G}(z, z') \mathbf{V}(z') \Psi(z')$$

[0073]

[0074] 여기서, $\mathbf{V}(z) = k_0^2 [\mathbf{E}(z) - \mathbf{E}^{[0]}(z)]$ 이다. 수학식 5에서 섭동 영역 밖에서 $\mathbf{V}(z)=0$ 이므로 적분 영역은 섭동 영역으로 제한된다.

[0075] 이하에서는 수학식 5에서의 $\Psi^{[0]}(z)$ 와 $\mathbf{G}(z, z')$ 의 계산에 대하여 상세하게 살펴본다.

[0076] 수학식 5의 리프만-슈빙거 적분방정식을 풀기 위해, 영차 주기구조물에 대한 $\Psi^{[0]}(z)$ 와 $\mathbf{G}(z, z')$ 를 정밀 결합파 분석법(Rigorous Coupled-Wave Analysis : RCWA)에 의해 먼저 구한다. 정밀 결합파 분석법은 다층 주기 구조물의 비파괴 검사 방법(특허등록 제 10-0892485) 및 다층 주기 구조물의 물리량 산출 방법(특허등록 제 10-0892486)에 자세히 기술되어 있다.

[0077] 산화막, 코팅막 또는 표면층이 있는 영차 주기구조를 공통의 주기 Λ 를 갖는 평행한 직사각형 모양의 층이 쌓인 것으로 근사한다. 상기 층 나누기에서 일부 또는 전체의 층이 균일한 물질로 이루어진 것을 포함한다. 상기 층 나누기 근사에 의해 유전율 함수 $\varepsilon^{[0]}(x, z)$ 의 z 의존성은 층을 나타내는 지수 l 에게 전가된다. 그러면 주어진 층 l 에서의 유전율 함수는 x 만의 함수로 되고, 역시 주기 Λ 를 갖는 주기 함수이므로 푸리에 급수로 전개할 수 있다. 이때, 급수 전개 계수로 만들어지는 퇴플리츠 행렬은 $\mathbf{E}^{[0]}_1$ 이며, 그 크기는 $(2N+1) \times (2N+1)$ 이다. 영차 주기 구조물의 층 l 에서의 전기장과 자기장의 푸리에-플로케 급수 전개 계수로 만들어지는 크기 $(2N+1)$ 인 열벡터 $\Psi^{[0]}_1(z)$ 가 만족해야 하는 미분방정식은 맥스웰 방정식으로부터 얻어지는 행렬 형태의 조화진동 운동방정식의 형태로의 2차 미분방정식이며, 풀이 방법은 행렬의 고유벡터와 고유치의 문제로 전환된다. 그 고유벡터는 주기 구조물의 광학적 및 기하학적 입력 변수에 의해 수치적으로 계산된다. 이 때 적분상수로 들어오는 두 종류의 상수 열벡터들은 전기장과 자기장이 수평성분이 각 층의 경계면에서 연속이어야 한다는 경계조건을 사용하여 구한다. 각 층에서의 경계조건은 앞서 언급한 두 상수 열벡터에 대한 순환관계식을 주며 영역 II인 기관층($l=l+1$)으로부터 입사하는 빛이 없으며, 영역 I인 공기층($l=0$)에서 입사파가 알려져 있기 때문에 상수 열벡터의 값은 역시 수치적으로 완전히 구해진다.

[0078] 영차 주기 구조물에 대한 행렬 그린함수 $\mathbf{G}(z, z')$ 의 계산도 기본적으로 정밀 결합파 분석법으로 계산된다. 정방 행렬 $\mathbf{G}(z, z')$ 는 고유벡터 $\mathbf{S}_l$ 과 고유치 $\mathbf{Q}^2_l$ 를 사용하여 표현되며, 적분 상수로 들어오는 z 변수와 무관한 두 종류의

정방 행렬 $\mathbf{f}_{ll'}^{\pm}(z')$ 과 $\mathbf{g}_{ll'}^{\pm}(z')$ 은 역시 경계 조건의 적용에 의해 아래의 수학식 6과 같이 계산된다.

수학식 6

$$\mathbf{G}(z, z') = \begin{cases} \mathbf{S}_l [e^{-\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_{ll'}^{-}(z') + e^{\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_{ll'}^{-}(z')] & (l < l') \\ \mathbf{S}_l [e^{-\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_{ll'}^{-}(z') + e^{\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_{ll'}^{-}(z')] & (l = l', z < z') \\ \mathbf{S}_l [e^{-\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_{ll'}^{+}(z') + e^{\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_{ll'}^{+}(z')] & (l = l', z > z') \\ \mathbf{S}_l [e^{-\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_{ll'}^{+}(z') + e^{\mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_{ll'}^{+}(z')] & (l < l') \end{cases}$$

[0079]

[0080] 이번에는 $\Psi^{(0)}_1(z)$ 의 계산에서와 달리 최초 그린 함수의 원천은 주기 구조물 영역의 각 층이 된다. 영역 II인에서 주기 구조물 쪽으로 들어오는 그린함수 파가 없음은 물론이고, 영역 I에서 주기 구조물 쪽으로 입사하는 그린함수 파도 없다. 그 대신 각 원천층에서 델타함수에 의한 그린함수의 도함수가 만족해야 하는 경계조건이 더 있으므로 행렬 그린함수의 표현에 들어가는 z 변수와 무관한 두 종류의 정방행렬은 다음의 수학식 7 내지 수학식 12로 구해진다.

수학식 7

$$\mathbf{f}_{ll'}^{\pm}(z') = \bar{\mathbf{T}}_{l-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_l \mathbf{f}_{ll'}^{\pm}(z')$$

[0081]

수학식 8

$$\mathbf{g}_{ll'}^{\pm}(z') = \bar{\mathbf{T}}_{l-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_l \mathbf{g}_{ll'}^{\pm}(z')$$

[0082]

[0083] 여기서,

수학식 9

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

[0084]

수학식 10

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

[0085]

[0086] 로 주어지며, $\mathbf{R}_l$ 은 $\mathbf{f}_{ll'}^{+}(z')$ 과 $\mathbf{g}_{ll'}^{+}(z')$ 를, $\bar{\mathbf{r}}_l$ 는 $\mathbf{f}_{ll'}^{-}(z')$ 과 $\mathbf{g}_{ll'}^{-}(z')$ 을 다음의 수학식 11 및 수학식 12와 같이 연결짓는 정방행렬이며, $\mathbf{u}_l$ 은 $\mathbf{u}_l = (\mathbf{I} - \mathbf{R}_l \bar{\mathbf{r}}_l)^{-1}$ 로 정의된다.

수학식 11

$$\mathbf{g}_{ll'}^{+}(z') = \mathbf{R}_l \mathbf{f}_{ll'}^{+}(z')$$

[0087]

수학식 12

[0088] $\mathbf{f}_w^-(z') = \bar{\mathbf{f}}_j \mathbf{g}_w^-(z')$

[0089] 이하에서는 이상과 같이 구해진 두 양 $\Psi^{[0]}(z)$ 와 $G(z, z')$ 을 이용하여 리프만-슈빙거 적분 방정식을 이산화하는 것에 대하여 살펴본다.

[0090] 이상과 같이 영차(zeroth order) 주기구조물의 물리적 성질 및 기하학적 구조와 입사파의 정보에 의해 정해진 두 양 $\Psi^{[0]}(z)$ 와 $G(z, z')$ 과 섭동 퍼텐셜 $V(z)$ 를 입력변수로 하여, 섭동된 주기구조물의 물리적 성질, 기하학적 구조, 그리고 동일한 입사파 정보에 의해 결정되어야 할 전기장 미지함수 $\Psi(z)$ 를 리프만-슈빙거 방정식을 풀어 서 구할 것이다.

[0091] 층 1(1=1부터 L까지) 내부에 위치하는 z 를 z_{l-1} 로 보내고, 층 L 내부에 위치하는 z 를 z_L 로 보내고, 수학식 7 및 수학식 8을 사용하여 층j에서 섭동 함수 $V(z')$ 이 상수값 V_j 를 갖는다고 가정하면 수학식 5가 다음과 같이 이산화된다.

수학식 13

[0092]
$$\begin{aligned} \Psi(z_{l-1}) - \Psi^{[0]}(z_{l-1}) = & \mathbf{S}_l \left[(1 + \mathbf{R}_l) \sum_{j=1}^{l-1} \bar{\mathbf{T}}_{l-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_w^+(z') \mathbf{V}_j \Psi(z') \right. \\ & + (\bar{\mathbf{T}}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' \mathbf{g}_w^-(z') \mathbf{V}_l \Psi(z') \\ & \left. + (\bar{\mathbf{T}}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \bar{\mathbf{T}}_l \cdots \bar{\mathbf{T}}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{g}_w^-(z') \mathbf{V}_j \Psi(z') \right] \end{aligned}$$

수학식 14

[0093]
$$\begin{aligned} \Psi(z_L) - \Psi^{[0]}(z_L) = & \mathbf{S}_L \left(e^{-\mathbf{Q}_L d_L} + e^{\mathbf{Q}_L d_L} \mathbf{R}_L \right) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \bar{\mathbf{T}}_{L-1} \cdots \bar{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_w^+(z') \mathbf{V}_j \Psi(z') \right. \\ & \left. + \int_{z_{L-1}}^{z_L} dz' \mathbf{f}_{LL}^+(z') \mathbf{V}_L \Psi(z') \right] \end{aligned}$$

[0094] 수학식 13에서 $l=1$ 일 경우 우변의 $\sum_{j=1}^{l-1} (\cdots)$ 은 어떠한 항도 발생시키지 않으며 $l=L$ 일 경우 우변의 $\sum_{j=l+1}^L (\cdots)$ 은 어떠한 항도 발생시키지 않는다.

[0095] 본 실시예에 따른 물리량의 계산에서는 정밀도를 높이기 위하여 아래의 수학식 15 내지 수학식 17과 같은 2차 내삽법을 사용한다. 그러나, 일반적으로 임의의 차수까지 전개가 가능하다.

수학식 15

[0096]
$$\Psi(z') = \Psi(z_j) + \Psi_A(z_j)(z' - z_j) + \frac{1}{2!} \Psi_B(z_j)(z' - z_j)^2 + \frac{1}{3!} \Psi_C(z_j)(z' - z_j)^3 + \cdots$$

[0097] 본 실시예에서는 2차 전개를 기준으로 설명한다. 2차의 경우 Ψ_A 와 Ψ_B 까지 전개할 수 있고, 그 식은 다음과

같이 표시된다.

수학식 16

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

수학식 17

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

수학식 13에 나오는 z' 적분을 짝수 번째 구간과 홀수 번째 구간에 대해 나누어서 각각 해석적으로 수행하면 수학식 16 및 수학식 17과 같이 표현된다. 즉, 두 개의 층을 하나로 묶어서 고려한다. 이것을 확장해서 N차로 하는 경우에는 N 개의 층을 하나로 묶어서 고려해야 한다. 따라서 2차의 경우는 두 개의 층을, 3차의 경우는 세 개의 층을 하나로 묶어서 고려한다. 즉, 현재의 형식을 그대로 M차까지 확장, 적용이 가능하다.

식 18과 19는 각 층에서의 일반 형태를 표시한 것이다. 여기서 짝수 층은 II로 표시하였고, 홀수 층의 경우는 I로 표시하였다.

수학식 18

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

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

수학식 19

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

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

여기서,

수학식 20

$$\begin{pmatrix} G^{(+)} \\ G^{(-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{Qd} + \bar{r}u \\ uRe^{Qd} + u \end{pmatrix}_j W_j$$

수학식 21

$$[0108] \quad \begin{pmatrix} G^{[A][I](+)} \\ G^{[A][I](-)} \end{pmatrix}_j = - \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{\mathcal{Q}d}W^{[A](-)} + \bar{r}uW^{[A](+)} \\ uRe^{\mathcal{Q}d}W^{[A](-)} + uW^{[A](+)} \end{pmatrix}_j$$

$$[0109] \quad \begin{pmatrix} G^{[A][II](+)} \\ G^{[A][II](-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{\mathcal{Q}d}W^{[A](+)} + \bar{r}uW^{[A](-)} \\ uRe^{\mathcal{Q}d}W^{[A](+)} + uW^{[A](-)} \end{pmatrix}_j$$

수학식 22

$$[0110] \quad \begin{pmatrix} G^{[B][I](+)} \\ G^{[B][I](-)} \end{pmatrix}_j = - \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{\mathcal{Q}d}W^{[B](-)} + \bar{r}uW^{[B](+)} \\ uRe^{\mathcal{Q}d}W^{[B](-)} + uW^{[B](+)} \end{pmatrix}_j$$

$$[0111] \quad \begin{pmatrix} G^{[B][II](+)} \\ G^{[B][II](-)} \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} (1 + \bar{r}uR)e^{\mathcal{Q}d}W^{[B](+)} + \bar{r}uW^{[B](-)} \\ uRe^{\mathcal{Q}d}W^{[B](+)} + uW^{[B](-)} \end{pmatrix}_j$$

[0112] 이다. 이상의 수학식 20 내지 수학식 22의 $\mathbf{W}_i, \mathbf{W}_i^{(\pm)}, \tilde{\mathbf{W}}_i^{(\pm)}, \mathbf{W}_j, \mathbf{W}_j^{[A](\pm)}, \mathbf{W}_j^{[B](\pm)}$ 은 아래의 수학식 23 내지 수학식 28과 같다.

수학식 23

$$[0113] \quad \mathbf{W}_j = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - e^{\mathcal{Q}_j d_j})\mathcal{Q}_j^{-2}\mathbf{S}_j^T$$

수학식 24

$$[0114] \quad \mathbf{W}_j^{[A](+)} = \frac{1}{2}d_j\mathcal{Q}_j^{-2}\mathbf{S}_j^T - \mathcal{Q}_j^{-1}\mathbf{W}_j$$

수학식 25

$$[0115] \quad \mathbf{W}_j^{[A](-)} = \mathcal{Q}_j^{-1}\mathbf{W}_j - \frac{1}{2}d_j e^{-\mathcal{Q}_j d_j} \mathcal{Q}_j^{-2}\mathbf{S}_j^T$$

수학식 26

$$[0116] \quad \mathbf{W}_i^{(+)} = \frac{1}{2}d_i\mathbf{Q}_i^{-2}\mathbf{S}_i^T - \mathbf{Q}_i^{-1}\mathbf{W}_i$$

수학식 27

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

[0117]

수학식 28

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

[0118]

[0119] 수학식 18, 수학식 19의 적분 공식과 수학식 16에서 정의된 Ψ_A 과 수학식 17에서 정의된 Ψ_B 를 사용하면 1은 0 부터 L-1까지의 값을 가질 경우 수학식 13은 아래의 수학식 29와 같다.

수학식 29

$$\begin{aligned} \Psi(z_l) - \Psi^{[0]}(z_l) &= \sum_{j=1}^l \Theta_{\theta}^{(+)} V_j \Psi(z_j) + \sum_{j=0}^{l-1} \bar{\Theta}_{\theta}^{(+)} V_{j+1} \Psi(z_j) \\ &\quad + \sum_{j=0}^{l-2} \tilde{\Theta}_{\theta}^{(+)} V_{j+2} \Psi(z_j) + \sum_{j=2}^{l+1} \hat{\Theta}_{\theta}^{(+)} V_{j-1} \Psi(z_j) \\ &\quad + \sum_{j=l+1}^L \Theta_{\theta}^{(-)} V_j \Psi(z_j) + \sum_{j=l}^{L-1} \bar{\Theta}_{\theta}^{(-)} V_{j+1} \Psi(z_j) \\ &\quad + \sum_{j=l-1}^{L-2} \tilde{\Theta}_{\theta}^{(-)} V_{j+2} \Psi(z_j) + \sum_{j=l+2}^L \hat{\Theta}_{\theta}^{(-)} V_{j-1} \Psi(z_j) \end{aligned}$$

[0120]

[0121] 수학식 29는 1이 짝수인 경우 및 홀수인 경우를 포함하는데, 짝수인 경우와 홀수인 경우에 $\Theta_{\theta}^{(\pm)}$, $\bar{\Theta}_{\theta}^{(\pm)}$, $\tilde{\Theta}_{\theta}^{(\pm)}$, $\hat{\Theta}_{\theta}^{(\pm)}$ 의 구체적인 형태를 다르다. 또한, $\Theta_{\theta}^{(\pm)}$ 와 $\hat{\Theta}_{\theta}^{(\pm)}$ 의 짝수열은 0으로 주어진다는 것이다. 이는 각 층별로 다르게 짝수의 경우와 홀수의 경우가 한가지의 경우만 선택되기 때문이다.

[0122] 1=L일 때에는 수학식 14가 아래의 수학식 30과 같다.

수학식 30

$$\begin{aligned} \Psi(z_L) - \Psi^{[0]}(z_L) &= \sum_{j=1}^L \Theta_{Lj}^{(+)} V_j \Psi(z_j) + \sum_{j=0}^{L-1} \bar{\Theta}_{Lj}^{(+)} V_{j+1} \Psi(z_j) \\ &\quad + \sum_{j=0}^{L-2} \tilde{\Theta}_{Lj}^{(+)} V_{j+2} \Psi(z_j) + \sum_{j=2}^L \hat{\Theta}_{Lj}^{(+)} V_{j-1} \Psi(z_j) \end{aligned}$$

[0123]

[0124] 만약 L이 홀수인 경우는 (L-1)개의 짝수개 층과 나머지 한 개의 층으로 생각하면 된다. 이때 남은 한 개의 층은 위에서 언급한 짝수 번째 구간의 방법을 적용할지, 홀수 번째 구간의 방법을 적용할지에 대해서는 (L-1)개의 층을 두 연속하는 층끼리 짝을 지을 때, 남은 한 개의 층이 어느 한 짝의 위에 놓인 것으로 볼지 아래에 놓인 것으로 볼지에 따라 정해진다. 그러나, 보편적으로는 가상 주기 구조물의 분할된 층의 수만큼 전개하거나 분할된 전체 층을 여러 영역으로 구획하고 각 구획된 영역을 M차 전개하는 것도 가능하다.

[0125] 수학식 29 및 수학식 30을 모아서 다음과 같이 하나의 확장된 행렬 형태의 1차 연립 방정식계로 나타낼 수 있다.

수학식 31

$$X = X^{[0]} + [GV + \bar{G}\bar{V} + \tilde{G}\tilde{V} + \hat{G}\hat{V}]X$$

[0126]

[0127] 여기서 X 와 $X^{[0]}$ 는 $L+1$ 개의 층성분 $\Psi(z_1)$ 과 $\Psi^{[0]}(z_1)$ 을 갖는 열벡터이며, 각 층성분 $\Psi(z_1)$ 과 $\Psi^{[0]}(z_1)$ 은 모두 $(2N+1)$ 개의 결합과 기저 성분을 가지는 열벡터이다. $G, \bar{G}, \tilde{G}, \hat{G}$ 은 $(L+1)^2$ 개의 층성분을 가지는 정방행렬이며, 각각의 층성분은 모두 $(2N+1)^2$ 개의 결합과 기저 성분을 갖는 정방행렬이다. $V, \bar{V}, \tilde{V}, \hat{V}$ 은 섭동 퍼텐셜 $V(z_1)$ 로 만들어지며, 역시 $(L+1)^2$ 개의 층성분을 갖는 정방행렬이며, 각각의 층성분은 모두 $(2N+1)^2$ 개의 결합과 기저 성분을 갖는다.

[0128] 수학식 31은 N 차 내삽일 경우에 다음과 같은 식으로 일반화시킬 수 있다. 이 경우 계산해야할 행렬의 수는 $2N$ 개로 증가한다.

수학식 32

$$X - X_0 = \left[\sum_{i=1}^{2N} G_i V_i \right] X$$

[0129]

[0130] 이상에서는 TE모드에 대한 물리량의 계산에 대하여 살펴보았다. 이하에서는 TM모드에 대한 물리량의 계산에 대하여 살펴본다.

[0131] 각 주기 구조물의 x 축 방향 주기성에 의하여 맥스웰 방정식의 TM 모드의 해는 아래의 수학식 33 및 수학식 34로 나타낼 수 있다.

수학식 33

$$H_y(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Phi_n(z) e^{ik_{x,n}x}$$

[0132]

수학식 34

$$E_x(x, z) = -i \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{1}{k_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \epsilon_{(n-m)}^{\#}(z) \partial_z \Phi_m(z) e^{ik_{x,n}x}$$

[0133]

[0134] 여기서 $\epsilon_{(n-m)}^{\#}(z)$ 는 유전율 함수 $\epsilon(x, z)$ 의 역수를 푸리에 급수로 전개할 때의 전개 계수이다. (아래의 수학식 35 참고)

수학식 35

$$\frac{1}{\epsilon(x, z)} = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \epsilon_h^{\#}(z) e^{i2\pi h x / \Lambda}$$

[0135]

[0136] 수학식 33의 $\Phi_n(z)$ 를 성분으로 하는 열벡터 $\Phi(z)$ 는 맥스웰 방정식에 의하여 아래의 수학식 36을 만족한다.

수학식 36

$$[0137] \quad \left[\frac{d}{dz} \left(\mathbf{P}(z) \frac{d\Phi(z)}{dz} \right) + k_0^2 \mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{E}(z)^{-1} \mathbf{K} \right] \Phi(z) = 0$$

[0138] 여기서 $\mathbf{P}(z)$ 는 $\varepsilon_{(n-n')}(z)$ 를 (n, n') 성분으로 갖는 정방행렬이다.

[0139] 영차 주기 구조물에 대한 자기장의 y성분의 푸리에-플로케 급수전개의 전개계수 $\Phi^{[0]}(z)$ 와 $\Phi(z)$ 는 아래의 TM 모드에 대한 리프만-슈빙거 방정식(수학식 37)을 만족한다.

수학식 37

$$[0140] \quad \Phi(z) - \Phi^{[0]}(z) = - \int dz' \left[\mathbf{G}(z, z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}(z') \mathbf{K} \Phi(z') + \frac{\partial \mathbf{G}(z, z')}{\partial z'} \mathbf{V}(z') \frac{\partial \Phi(z')}{\partial z'} \right]$$

[0141] 여기서 $\mathbf{K}$ 는 TE모드에서 정의된 바와 같고, $\tilde{\mathbf{V}}(z) = \mathbf{E}(z)^{-1} - (\mathbf{E}^{[0]})^{-1}(z)$ 이고, $\mathbf{V}(z) = \mathbf{P}(z) - \mathbf{P}^{[0]}(z)$ 이다. 수학식 37의 유도에서 빠른 수렴화를 위하여 Li의 인자화 규칙을 사용하였다.

[0142] TM 모드에서의 자기장의 y 성분의 푸리에-플로케 전개 계수 열벡터 $\Phi^{[0]}(z)$ 와 그린 함수 정방행렬 $\mathbf{G}(z, z')$ 는 기본적으로 TE모드에서와 같은 방법으로 구할 수 있다.

[0143] 즉, TE 모드에서와 같이 층 l (l=1부터 L까지) 내부에 위치하는 z를 z_{l-1} 로 보내고 층 L내부에 위치하는 z를 z_L 로 보내고 수학식 7과 수학식 8을 사용하여 층 j에서 섭동 함수 $\tilde{\mathbf{V}}(z')$ 와 $\mathbf{V}(z')$ 이 각각 상수값 $\tilde{\mathbf{V}}_j$ 와 $\mathbf{V}_j$ 를 갖는다고 가정하면 수학식 37는 $l=1, \dots, L-1$ 에 대하여는 아래의 수학식 38로 이산화된다.

수학식 38

$$[0144] \quad \begin{aligned} \Phi(z_{l-1}) - \Phi^{[0]}(z_{l-1}) = & - \left\{ \mathbf{S}_l \left[(1 + \mathbf{R}_l) \sum_{j=1}^{l-1} \tilde{\mathbf{T}}_{l-1} \cdots \tilde{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{F}_j^+(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_j \mathbf{K} \Phi(z') \right. \right. \\ & + (\tilde{\mathbf{T}}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' \mathbf{g}_l^-(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_l \mathbf{K} \Phi(z') \\ & \left. + (\tilde{\mathbf{T}}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \tilde{\mathbf{T}}_l \cdots \tilde{\mathbf{T}}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{g}_j^-(z') \mathbf{K} \tilde{\mathbf{V}}_j \mathbf{K} \Phi(z') \right] \\ & + \mathbf{S}_l \left[(1 + \mathbf{R}_l) \sum_{j=1}^{l-1} \tilde{\mathbf{T}}_{l-1} \cdots \tilde{\mathbf{T}}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' (\mathbf{F}_j^+)(z') \mathbf{V}_j \Phi(z_j) \right. \\ & + (\tilde{\mathbf{T}}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' (\mathbf{g}_l^-)(z') \mathbf{V}_l \Phi(z_l) \\ & \left. \left. + (\tilde{\mathbf{T}}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \tilde{\mathbf{T}}_l \cdots \tilde{\mathbf{T}}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' (\mathbf{g}_j^-)(z') \mathbf{V}_j \Phi(z_j) \right] \right\} \end{aligned}$$

[0145] 한편, $l=L$ 에 대해서는 수학식 37은 아래의 수학식 39로 이산화된다.

수학식 39

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

[0146]

[0147]

수치계산의 정밀도를 높이기 위하여 수학식 15와 같은 방법으로 수학식 37의 피적분 함수의 앞부분에서 자기장 미지함수 $\Phi(z)$ 에 대한 2차 내삽법을 사용하여 수학식 18 및 19에서 $\mathbf{V}_i$ 가 $\mathbf{K} \bar{\mathbf{V}}_i \mathbf{K}$ 로 치환된 형태의 적분을 얻고, 수학식 37의 피적분 함수의 둘째항 때문에 생기는 적분을 해석적으로 먼저 수행하면 아래의 수학식 40 및 수학식 41과 같은 결과를 얻는다. TE mode와 마찬가지로, 짝수 층은 II로 나타내었고, 홀수층의 경우는 짝수 층의 표현에서 II를 I로 바꾸어 주고 $\Psi(z_{j-1})$ 을 $\Psi(z_j)$ 로 바꾸어주면 된다.

수학식 40

$$\int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_{z'} f_{jj}^{+}(z') V_j \partial_{z'} \Psi_{\text{II}}(z') = G_j^{[2](+)} V_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[2][\text{B}][\text{II}](+)} V_j \Psi(z_{j-1})$$

[0148]

$$\int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_{z'} f_{jj}^{+}(z') V_j \partial_{z'} \Psi_{\text{I}}(z') = G_j^{[2](+)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[2][\text{B}][\text{I}](+)} V_j \Psi(z_j)$$

[0149]

수학식 41

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

[0150]

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

[0151]

[0152]

여기서,

수학식 42

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

[0153]

수학식 43

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

[0154]

수학식 44

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

[0155]

[0156] 이다. 따라서, 수학식 38은 수학식 29에서, 수학식 39는 수학식 30에서 V_i 가 $\mathbf{K}\hat{\mathbf{V}}_i\mathbf{K}$ 로 대체된 식들과 수학식 37의 피적분 함수의 둘째항 때문에 생기는 다음의 식들의 합으로 표현된다. 즉, 수학식 38은 $i=0, \dots, L-1$ 인 경우에는 아래의 수학식 45와 같이 표현된다.

수학식 45

$$\begin{aligned} \Phi(z_i) - \Phi^{[0]}(z_i) &= \sum_{j=1}^i [\hat{\Theta}_\theta^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_j \mathbf{K} + \hat{\Delta}_\theta^{(+)} \mathbf{V}_j] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=0}^{i-1} [\bar{\Theta}_\theta^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+1} \mathbf{K} + \bar{\Delta}_\theta^{(+)} \mathbf{V}_{j+1}] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=0}^{i-2} [\tilde{\Theta}_\theta^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+2} \mathbf{K} + \tilde{\Delta}_\theta^{(+)} \mathbf{V}_{j+2}] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=2}^{i+1} [\hat{\Theta}_\theta^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j-1} \mathbf{K} + \hat{\Delta}_\theta^{(+)} \mathbf{V}_{j-1}] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=i+1}^i [\Theta_\theta^{(-)} \mathbf{K} \mathbf{V}_j \mathbf{K} + \Delta_\theta^{(-)} \mathbf{V}_j] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=i}^{i-1} [\bar{\Theta}_\theta^{(-)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+1} \mathbf{K} + \bar{\Delta}_\theta^{(-)} \mathbf{V}_{j+1}] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=i-1}^{i-2} [\tilde{\Theta}_\theta^{(-)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+2} \mathbf{K} + \tilde{\Delta}_\theta^{(-)} \mathbf{V}_{j+2}] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=i+2}^i [\hat{\Theta}_\theta^{(-)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j-1} \mathbf{K} + \hat{\Delta}_\theta^{(-)} \mathbf{V}_{j-1}] \Phi(z_j), \end{aligned}$$

[0157]

[0158] 이때, $\Delta_\theta^{(\pm)}$, $\bar{\Delta}_\theta^{(\pm)}$, $\tilde{\Delta}_\theta^{(\pm)}$, $\hat{\Delta}_\theta^{(\pm)}$ 의 구체적인 형태는 i 가 짝수일 때와 홀수일 때 다르게 주어진다.

[0159] 한편, $i=L$ 일 때에는 수학식 39는 아래의 수학식 46과 같이 표현된다.

수학식 46

$$\begin{aligned} \Phi(z_L) - \Phi^{[0]}(z_L) &= \sum_{j=1}^L [\hat{\Theta}_{L_j}^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_j \mathbf{K} + \hat{\Delta}_{L_j}^{(+)} \mathbf{V}_j] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=0}^{L-1} [\bar{\Theta}_{L_j}^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+1} \mathbf{K} + \bar{\Delta}_{L_j}^{(+)} \mathbf{V}_{j+1}] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=0}^{L-2} [\tilde{\Theta}_{L_j}^{(+)} \mathbf{K} \mathbf{V}_{j+2} \mathbf{K} + \tilde{\Delta}_{L_j}^{(+)} \mathbf{V}_{j+2}] \Phi(z_j) \\ &+ \sum_{j=2}^L \hat{\Theta}_{L_j}^{(+)} \mathbf{V}_{j-1} \Psi(z_j) \end{aligned}$$

[0160]

[0161] L이 홀수인 경우는 TE 모드의 홀수인 경우와 마찬가지로이다.

[0162] TE 모드에서의 계산과 같은 방법을 사용하여 TM 모드에서의 자기장 미지함수 $\Phi(z)$ 를 이산화한 미지계수들 $\Phi(z_l)$ 에 대한 1차 연립방정식계인 수학식 47를 구할 수 있다.

수학식 47

$$[0163] \quad X = X^{[0]} + [GV + \bar{G}\bar{V} + \hat{G}\hat{V} + \tilde{G}\tilde{V} + HV + \bar{H}\bar{V} + \hat{H}\hat{V} + \tilde{H}\tilde{V}]X$$

[0164] 여기서 X와 $X^{[0]}$ 는 L+1개의 층성분 $\Phi(z_l)$ 과 $\Phi^{[0]}(z_l)$ 을 각각 갖는 열벡터이며, 각 층성분 $\Phi(z_l)$ 과 $\Phi^{[0]}(z_l)$ 은 모두 $(2N+1)$ 개의 결합과 기저 성분을 가지는 열벡터이다. $G, \bar{G}, \hat{G}, \tilde{G}$ 은 TE모드에서 정의된 바와 같이 $(L+1)^2$ 개의 층성분을 가지는 정방행렬이며, 각각의 층성분은 TM모드에서의 값으로서 모두 $(2N+1)^2$ 개의 결합과 기저 성분을 갖는 정방행렬이다. $H, \bar{H}, \hat{H}, \tilde{H}$ 은 $(L+1)^2$ 개의 층성분을 가지는 정방행렬이며, 각 층성분은 모두 $(2N+1)^2$ 개의 결합과 기저 성분을 갖는 정방행렬이다. $V, \bar{V}, \hat{V}, \tilde{V}$ 은 역시 $(L+1)^2$ 개의 층성분을 갖는 정방행렬로서, TE모드에서 정의된 $V, \bar{V}, \hat{V}, \tilde{V}$ 의 형태에서 영 아닌 성분인 V_i 가 KV_iK 로 바뀐 형태이며, 각각의 층성분은 모두 $(2N+1)^2$ 개의 결합과 기저 성분을 갖는다. 마지막으로 $V, \bar{V}, \hat{V}, \tilde{V}$ 은 TE모드에서 정의된 그대로이다.

[0165] TE 모드에서의 전기장의 층성분 $\Psi(z_l)$ 과 자기장의 층성분 $\Phi(z_l)$ 이 구해지면, 이들 값으로부터 도 6 및 도 7에 도시된 바와 같은 가상 구조물(200b)의 반사율 및 투과율은 선행특허(제 10-0892486)에 기술된 방법에 따라 계산한다.

[0166] 이렇게 하여 계산한 TE 모드와 TM 모드에 대한 각각의 반사율 및 투과율을 실제 측정된 반사율 및 투과율과 비교함으로써, 여러 주기구조물, 예를 들어 홀로그래픽 격자, 표면부조 및 다층 격자구조, 평면 유전 또는 흡수 홀로그래픽 격자, 임의 단면 유전체 및 흡수 표면부조 격자, 2차원 표면부조 격자 또는 비등방성 격자구조의 비파괴적 분석에 적용될 수 있다. 한편, 상기 주기구조물은 상술한 예에 한정되지 않음은 물론이다.

[0167] 이상과 같은 본 발명의 계산 방법에 대하여 도 8의 구조물을 대상으로 어느 정도의 정확성을 가지는지 살펴본다.

[0168] 도 8은 본 발명의 한 실시예에 따라서 설정된 주기 구조물의 단면도이고, 도 9 내지 도 14는 RCWA 방법, 기존의 비파괴 검사 방법 및 본 발명의 실시예에 따른 검사 방법에 의한 결과를 비교하여 나타낸 그래프이다.

[0169] 우선, 도 8에서 설정된 가상의 주기 구조물은 쿼츠(quartz) 기판에 크롬(chrome)으로 형성된 구조이다. 주기 구조물의 주기(period)는 600nm이고, 해당 주기 구조물 중 크롬의 마루(ridge) 영역의 폭은 300nm이고, 그 높이(height)는 300nm로 설정되어 있다.

[0170] 도 9 내지 도 14는 RCWA (Rigorous Coupled-Wave Analysis) 방법, 기존의 비파괴 검사 방법 및 본 발명의 실시예에 따른 검사 방법에 의한 결과를 비교하여 나타낸 그래프이다.

[0171] 도 9 내지 도 14는 본 발명에 따른 물리량의 계산 방법의 정확도를 살펴보기 위한 것으로, 도 9 내지 도 12에서 비교를 위한 기준값은 푸리에 확장성분을 대폭 늘려서 RCWA 방법을 사용하여 가상주기구조물을 전산모사한 것이다. 본 실시예에서 비교하고자 하는 것은 기존의 그린함수방법과 본 발명의 실시예에 따른 2차 내삽법을 이용한 그린함수방법이다. 속도를 높이기 위해서 층의 수를 줄여야 하므로, 동일한 층 수에서 기존의 그린함수방법과 본 발명의 실시예에 따른 2차 내삽법을 이용한 그린함수방법의 결과를 비교하여 그 정확도를 비교함으로써 본 발명에 따른 그린함수방법이 더 좋은 결과를 주는지 보고자 한다. 여기서 비교의 대상으로 삼은 오차값은 다음의 수학식 48과 같이 정하였다.

수학식 48

$$\text{오차} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{2N} \left(\frac{\Psi_i - \Psi_e}{\Psi_e} \right)^2$$

[0172]

[0173] 여기서, Ψ_s 는 그린 함수 방법의 전산모사에 의해서 구해진 타원편광법에서의 Ψ 와 Δ 의 값이고, Ψ_e 는 높은 정밀도의 RCWA에 의해 구해진 Ψ 와 Δ 값이다. 그리고, N은 파장의 개수이다.

[0174] 먼저, 도 9 및 도 10을 이용하여 기존의 그린 함수방법과 본 발명의 실시예에 따른 2차 내삽법을 이용한 그린 함수 방법의 결과를 비교 살펴본다.

[0175] 도 9 및 도 10은 도 8의 구조를 총 10개의 층으로 나누어 계산한 결과로, 도 9 및 도 10에서 실선은 RCWA 방식으로 정확도를 높여 계산된 각 물리량에 대한 값이다. 한편, 도 9의 점선은 기존의 그린 함수방법에 따른 파장에 대한 Ψ 및 Δ 의 그래프이고, 도 10의 점선은 본 발명의 실시예에 따른 2차 내삽법을 이용한 그린 함수방법에 따른 파장에 대한 Ψ 및 Δ 의 그래프이다.

[0176] 도 9의 기존의 그린 함수 방법은 실제 정확도가 높은 RCWA 방식으로 계산된 값과 차이가 크다는 것을 확인할 수 있으며, 수학식 55에 따른 오차는 4.7834E-3값을 가졌다.

[0177] 이에 반하여 도 10의 본 발명에 따른 그린 함수 방법은 기존의 방법보다 오차가 줄었음을 눈으로 확인할 수 있으며, 수학식 55에 따른 오차는 6.4878E-4값을 가졌다.

[0178] 그 결과 본 발명에 따른 그린 함수 계산 방법은 적은 층으로 나누어 계산하여도 적은 오차로 실제에 근사한다는 것을 확인할 수 있다.

[0179] 한편, 도 11 및 12를 이용하여 다시 기존의 그린 함수방법과 본 발명의 실시예에 따른 2차 내삽법을 이용한 그린 함수 방법의 결과를 비교 살펴본다.

[0180] 도 11 및 12는 도 9 및 도 10과 달리 는 도 8의 구조를 총 20개의 층으로 나누어 계산한 결과이다.

[0181] 도 11 및 도 12에서의 실선은 도 9 및 도 10과 같이, RCWA에 의한 계산값을 나타낸다. 한편, 도 11의 점선은 기존의 그린 함수방법에 따른 파장에 대한 Ψ 및 Δ 의 그래프이고, 도 12의 점선은 본 발명의 실시예에 따른 2차 내삽법을 이용한 그린 함수방법에 따른 파장에 대한 Ψ 및 Δ 의 그래프이다.

[0182] 기존의 그린 함수 방법은 층을 20개로 나누니 층을 10개로 나눈 경우에 비하여 오차가 줄어들었음을 확인할 수 있으며, 수학식 56에 따른 오차는 8.6168E-4값을 가졌다.

[0183] 이에 반하여 도 12의 본 발명에 따른 그린 함수 방법은 거의 RCWA에 의한 값과 동일한 계산 결과를 가지며, 수학식 55에 따른 오차는 5.3909E-6값을 가졌다. 즉, 동일한 층을 나누고 계산하였지만, 본 발명에 따른 그린 함수 방법이 100배 이상 향상된 오차값을 가짐을 알 수 있다.

[0184] 기존의 그린 함수 방법에 의하여 계산하는 경우 도 12와 동일한 오차를 가지고자 하는 경우에는 층을 85개로 나누어야 가능하다. 이와 같이 동일 오차를 가지도록 하고자 하는 경우에는 기존의 그린 함수 방법을 통하여 계산하는 시간대 본 발명에 따른 그린 함수 방법을 통하여 계산하는 시간의 비는 32.8:1.5였다. 그러므로 동일한 오차를 가지도록 계산하는 경우 본 발명에 따른 그린 함수 계산 방법이 보다 효율이 높다.

[0185] 즉, 이에 대하여는 도 13 및 도 14에서 보다 상세하게 도시하고 있다.

[0186] 도 13에서 x 축은 오차를 나타내며, y축은 소요시간을 나타내는 그래프이다. 또한, 도 14에서 x축은 나눈 층의 개수이고, y축은 에러율을 나타낸다. 또한, 도 13 및 도 14에서 실선은 기존의 그린 함수 계산 방법을 나타내며, 점선은 본 발명에 따른 그린 함수 계산 방법을 나타낸다.

[0187] 층으로 나눈 경우 제시한 방법은 기존의 그린 함수 계산 방법에 비하여 시간이 약간 더 소요된다. 이는 본 특허에서 제시한 방법이 2차 내삽을 통한 계산을 포함하기 때문이다. 하지만, 정확도에 대한 검토없이 계산 시간을 줄인다는 것은 문제가 있기 때문에, 동일한 오차에 대해서 계산 시간을 검토하는 것이 타당하다. 도 13에서 알 수 있는 바와 같이 본 발명에 따른 그린 함수 계산 방법은 동일한 오차를 가지는 경우 계산 시간이 획기적으로 줄어드는 장점을 가진다. 즉, 일반적으로 허용 오차가 1.00E-5이면 거의 일치한다고 할 수 있는데, 이 경우에

기존의 그린 함수 계산 방법에 비하여 획기적으로 감소된 계산 시간을 확인할 수 있다.

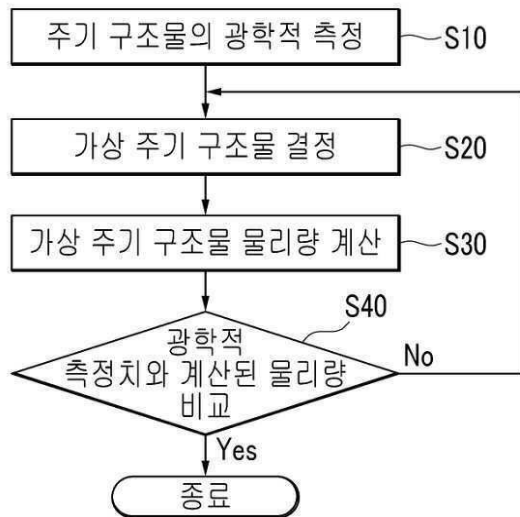
[0188] 한편, 도 14에서는 동일한 에러율을 가지도록 하는 경우 본 발명에 따른 계산 방법은 보다 적은 층으로 나누어도 되므로 기존의 그린 함수 계산 방법에 비하여 상대적으로 더하는 항의 개수가 줄어드는 장점이 있다.

[0189] 종합하면, 기존의 그린 함수 계산 방법에 비하여 본 발명에 따른 계산 방법은 적은 층으로 나누어서 계산하여도 충분한 정확성을 가지며, 또한, 동일한 오차를 가지는 경우, 보다 획기적으로 향상된 속도로 계산이 가능하여 실제 공정에서 인시츄 모니터링에도 사용할 수 있다.

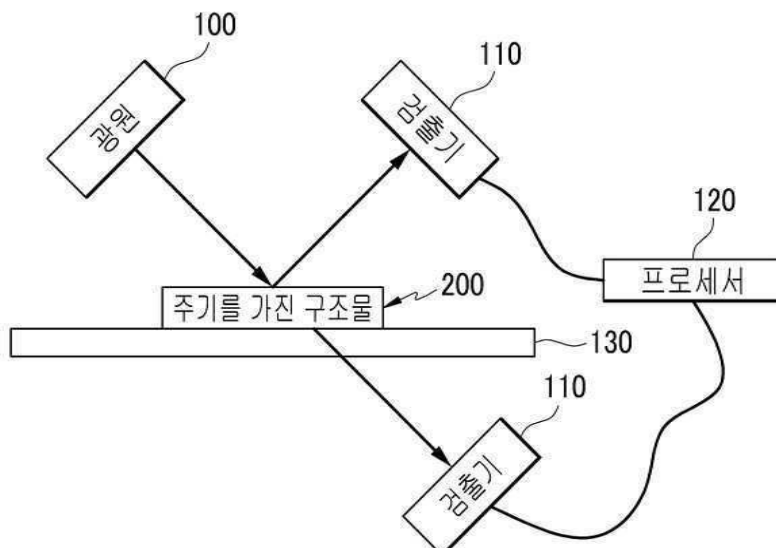
[0190] 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리범위에 속하는 것이다.

도면

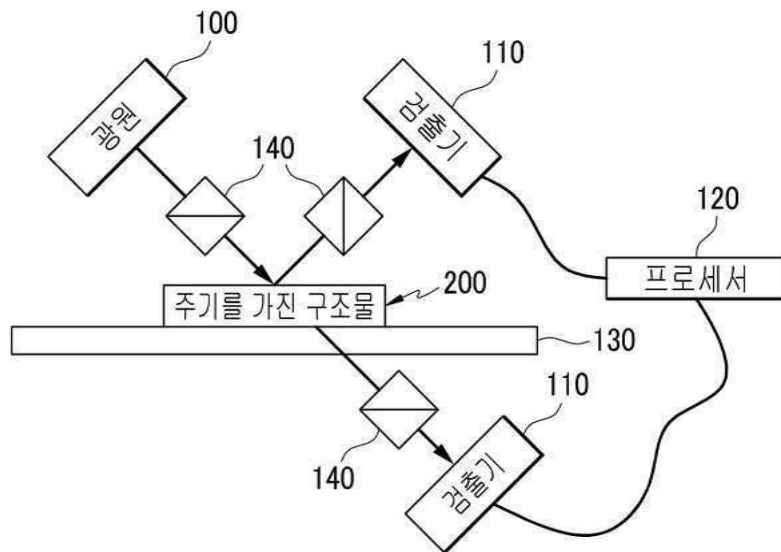
도면1



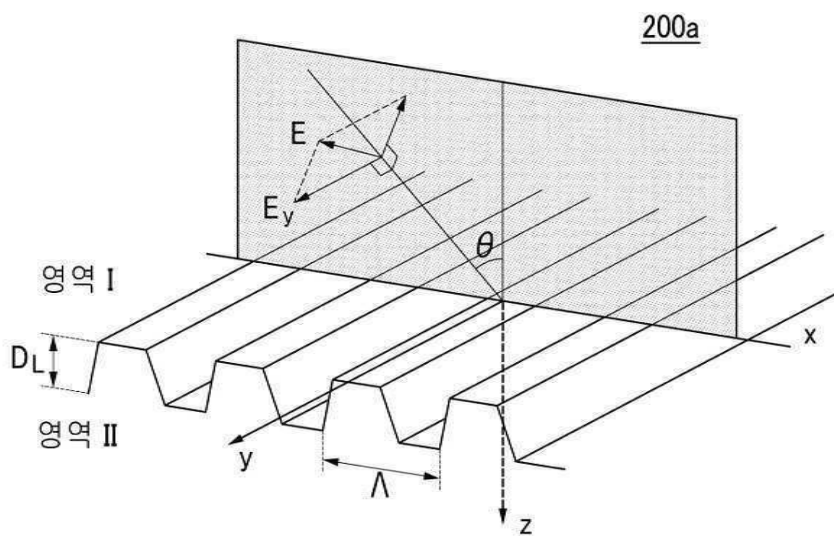
도면2



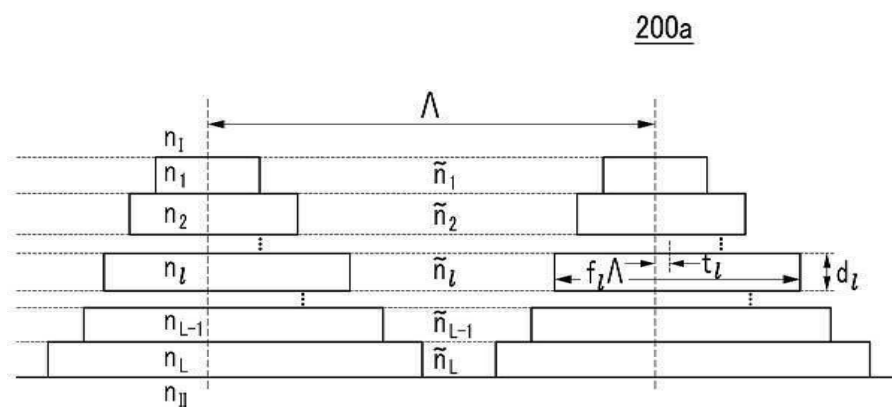
도면3



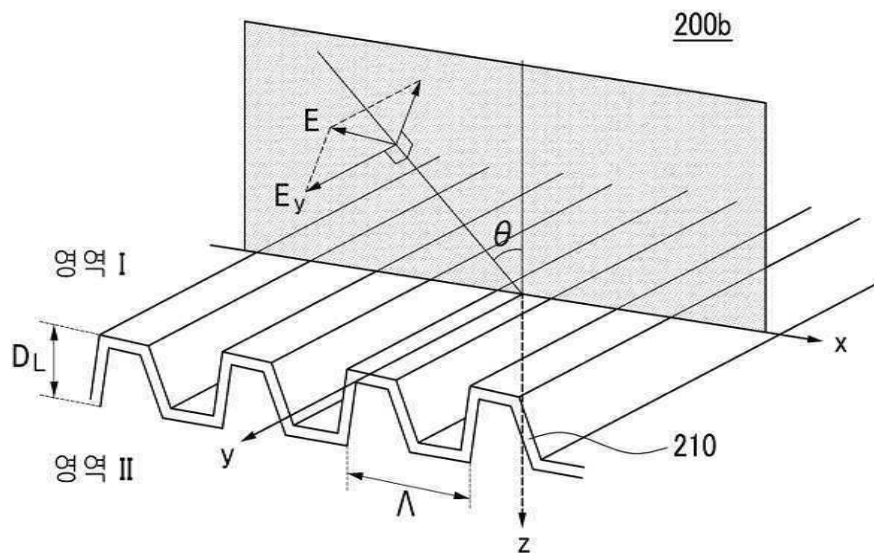
도면4



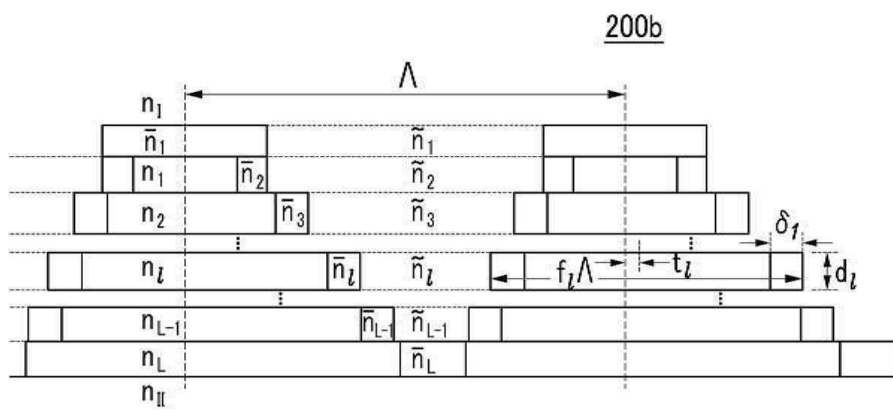
도면5



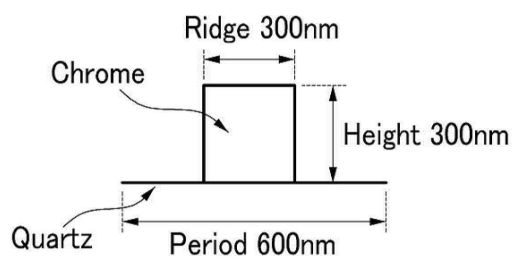
도면6



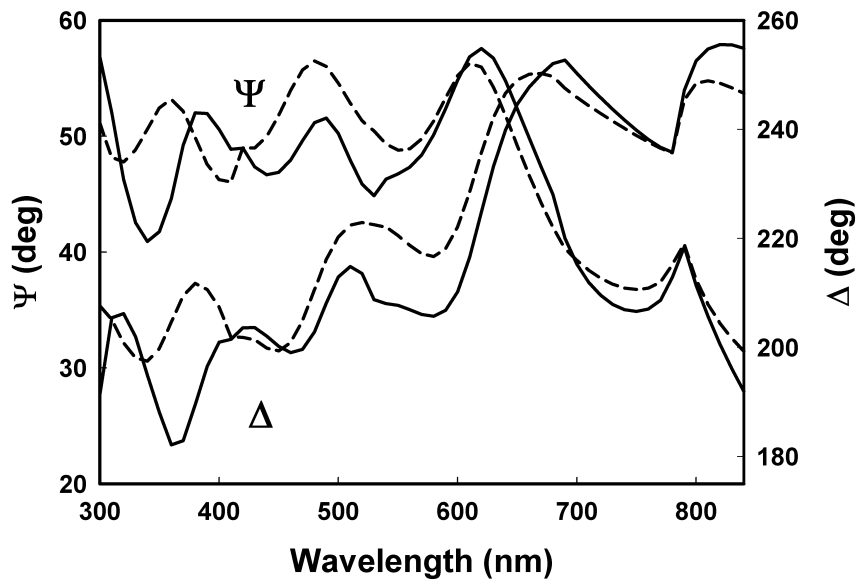
도면7



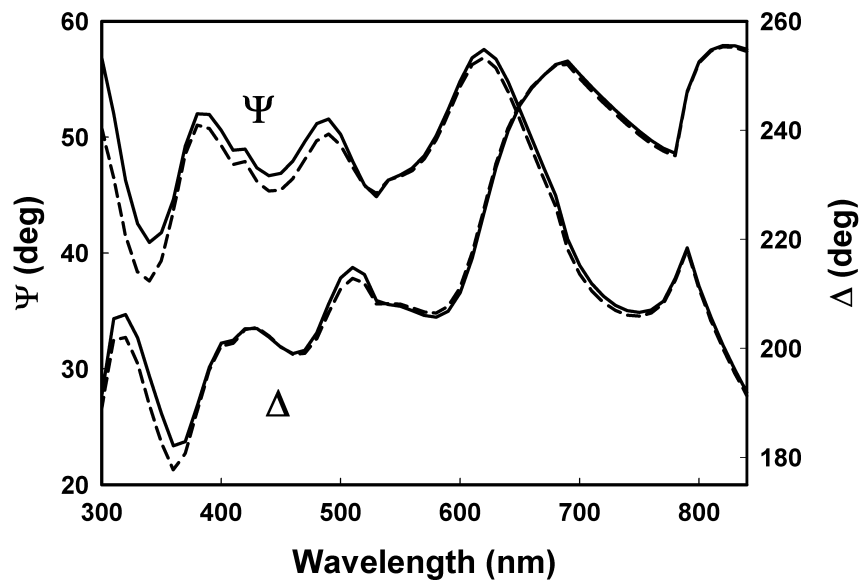
도면8



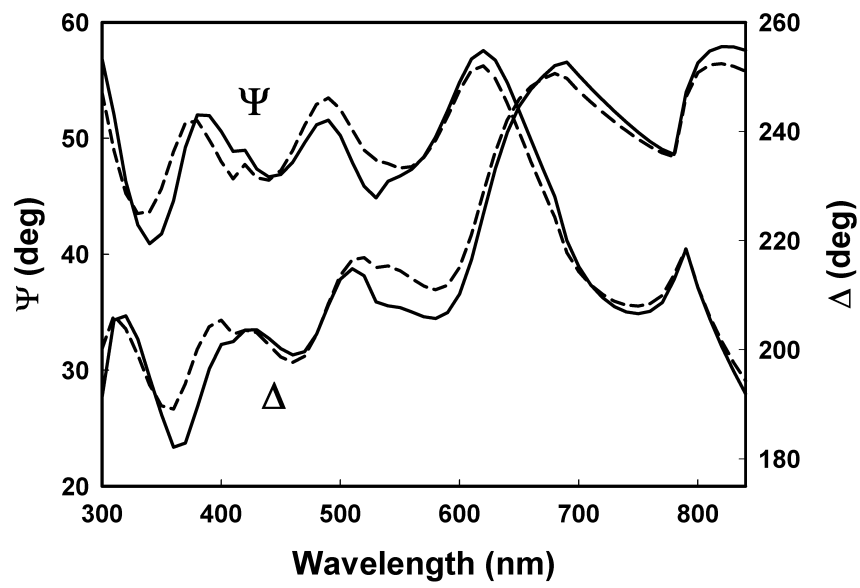
도면9



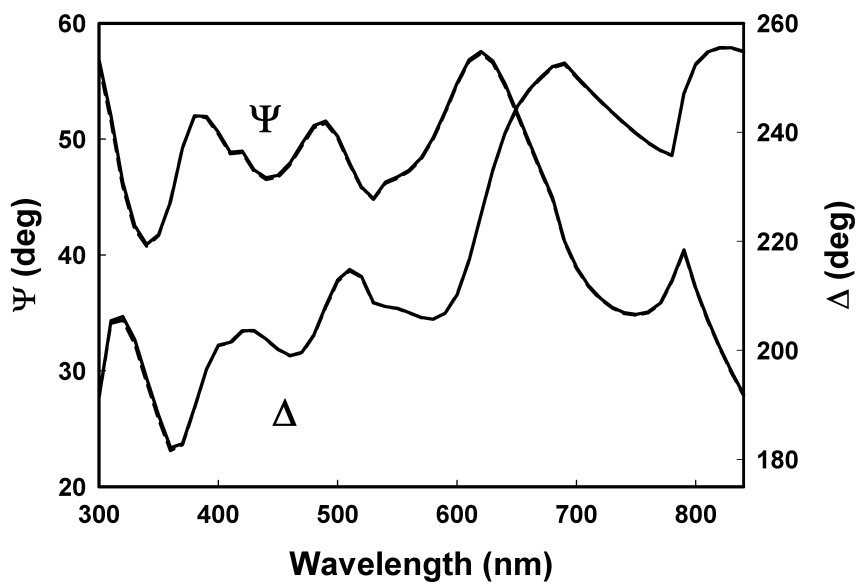
도면10



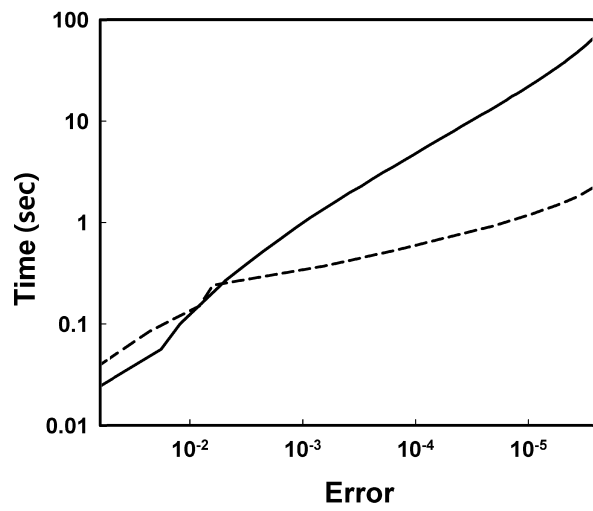
도면11



도면12



도면13



도면14

