



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I437221 B

(45)公告日：中華民國 103 (2014) 年 05 月 11 日

(21)申請案號：099108585

(22)申請日：中華民國 99 (2010) 年 03 月 23 日

(51)Int. Cl. : G01N21/59 (2006.01)

G01N21/55 (2006.01)

G06F17/10 (2006.01)

(30)優先權：2009/07/30 南韓

10-2009-0070308

2010/02/02 南韓

10-2010-0009753

(71)申請人：熙大學校產學協力團 (南韓) UNIVERSITY-INDUSTRY COOPERATION GROUP OF
KYUNG HEE UNIVERSITY (KR)

韓國

(72)發明人：金榮東 KIM, YOUNG DONG (KR) ; 鄭珍謨 CHUNG, JIN MO (KR) ; 韓承鎬 HAN,
SEUNG HO (KR)

(74)代理人：蔡坤財；李世章

(56)參考文獻：

TW 20042327A

US 6330057B1

US 2008/0297770A1

審查人員：曾世杰

申請專利範圍項數：8 項 圖式數：14 共 0 頁

(54)名稱

用於週期性結構之非破壞性分析

NONDESTRUCTIVE ANALYSIS FOR PERIODIC STRUCTURE

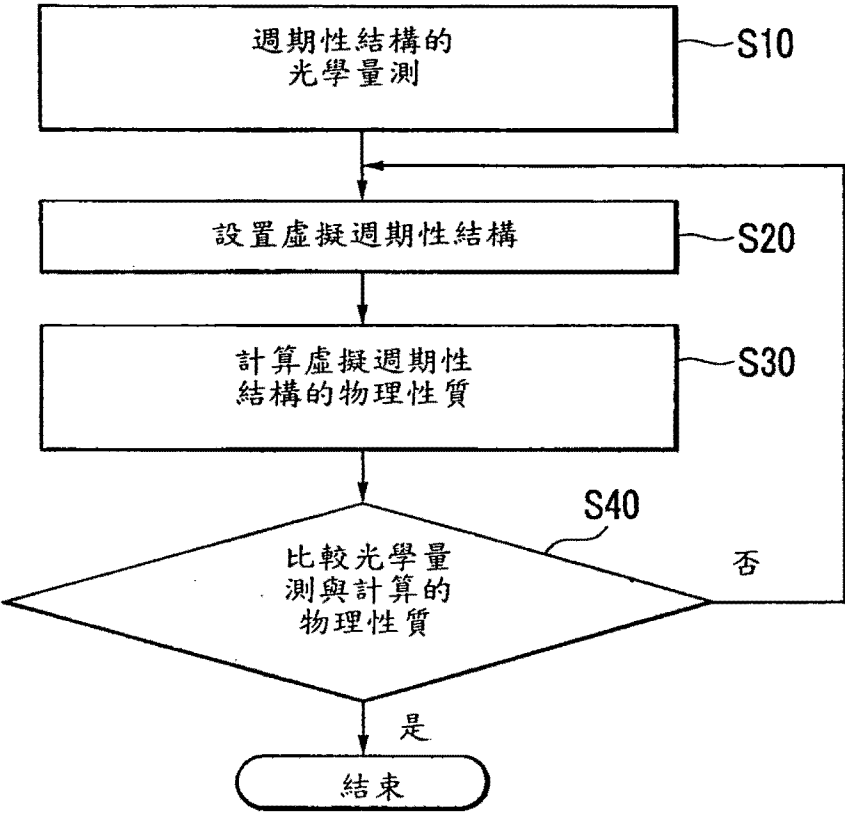
(57)摘要

茲提供用於週期性結構之非破壞性分析。在該方法中，設定一虛擬週期性結構，並將之劃分為複數個層。藉由使用具有 M 階內插的 Lippmann-Schwinger 方程式來計算關於該虛擬週期性結構之反射率或透射率的物理性質。用於離散化 Lippmann-Schwinger 方程式的 M 階內插公式導向準確且迅速地計算週期性結構的物理性質。

There is provided a nondestructive analysis for a periodic structure. In the method, a virtual periodic structure is set and divided into a plurality of layers. By utilizing the Lippmann-Schwinger equation with an M-th order interpolation, physical properties related to reflectivity or transmittance of the virtual periodic structure are calculated. An M-th order interpolation formula employed in discretization of the Lippmann-Schwinger equation leads to an accurate and rapid calculation of the physical properties of the periodic structure.

第 1 圖

S10 . . . 步驟
S20 . . . 步驟
S30 . . . 步驟
S40 . . . 步驟



發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫；惟已有申請案號者請填寫)

※ 申請案號：099108585

※ 申請日期：2010 年 3 月 23 日

※IPC 分類：G01N 21/59 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

G01N 21/55 (2006.01)

用於週期性結構之非破壞性分析/

G06F 17/10 (2006.01)

NONDESTRUCTIVE ANALYSIS FOR PERIODIC STRUCTURE

二、中文發明摘要：

茲提供用於週期性結構之非破壞性分析。在該方法中，設定一虛擬週期性結構，並將之劃分為複數個層。藉由使用具有 M 階內插的 Lippmann-Schwinger 方程式來計算關於該虛擬週期性結構之反射率或透射率的物理性質。用於離散化 Lippmann-Schwinger 方程式的 M 階內插公式導向準確且迅速地計算週期性結構的物理性質。

三、英文發明摘要：

There is provided a nondestructive analysis for a periodic structure. In the method, a virtual periodic structure is set and divided into a plurality of layers. By utilizing the Lippmann-Schwinger equation with an M-th order interpolation, physical properties related to reflectivity or transmittance of the virtual periodic structure are calculated. An M-th order interpolation formula employed in discretization of the Lippmann-Schwinger equation leads to an accurate and rapid calculation of the physical properties of the periodic structure.

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第（ 1 ）圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

S10 步驟

S20 步驟

S30 步驟

S40 步驟

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

無

六、發明說明：

【相關案件之參照】

本申請案主張於 2009 年 7 月 30 日向韓國智慧財產局提出申請之韓國專利申請案第 10-2009-0070308 號與 2010 年 2 月 2 日提出申請之韓國專利申請案第 10-2010-0009753 號之優先權及利益，茲將其完整內容以引用方式併入本文中。

【發明所屬之技術領域】

本文所述之本發明是關於一種用於週期性結構的分析方法，該方法示範性地透過非破壞性測試經由量測反射率或透射率來執行。

【先前技術】

一般而言，為了製造電子元件，如半導體元件或顯示元件，清潔、薄膜生長、微影以及薄膜蝕刻製程會重複許多次，以生產消費性產品。舉例來說，在微影製程中，欲在其上製造影像之光罩的電路被形成並轉移至光敏材料(光阻)，以形成圖案，且該圖案是用作蝕刻阻障，以在薄膜上形成所需電路。

在使用微影製程製造半導體與顯示元件期間，所需的電路必須在每一步驟中以準確的形狀轉移至薄膜。基於微影製程的準確性，這是可行的。那就是說，只有在一所需圖案的形狀準確地轉移至光阻，且抗蝕層適當地作

用如蝕刻阻障時，才可在薄膜上形成準確的電路。那就是說，準確的圖案是在薄膜上形成電路前藉由光阻形成，且可藉由測試製程進行確認。

舉例來說，為了測試圖案，使用圖案測試器(pattern tester)來光學觀測半導體元件之形狀的方法已普遍被使用。不過，由於圖案測試器的解析度可能不足以決定量度僅幾個奈米長度之「奈米級」圖案的形狀，因而難以使用圖案測試器來執行準確分析。為了解決這一類缺點，在半導體研究和生產線中，已使用諸如電子顯微鏡之裝備來分析特定形狀的方法已被使用。

不過，當使用電子顯微鏡時，由於將一部分的半導體元件切割用於其形狀分析，因而無法再次使用所製造的半導體元件。此外，由於量測是在真空環境下實施，為了獲得量測結果可能會耗費過長的時間。亦不可能選擇一欲量測樣本的多個區域。由於前述缺點，電子顯微鏡在生產線中的實際使用有其限制。

為了應付前述缺點，已發展使用光學量測方法的技術，舉例來說，該技術包括稱為有效介質近似(Effective Medium Approximation, EMA)的近似技術。使用 EMA 的計算方法具有的問題在於，由於近似僅藉由組成物質在給定週期中的容積比來獲得，而不顧結構的詳細形狀，因此其從未判別該結構的詳細形狀。那就是說，由於具有週期性結構之電路之每一圖案的形狀並未具體判別，而僅判別組成物質在給定週期中的容積比，實際結構和

量測結構之間明顯有差異。具體而言，在週期性結構中，由於使用 EMA 的計算方法無法澄清不同的週期性結構(如果其容積比相同的話)，因而特別需要新的光學量測方法。

【發明內容】

因此，在本發明之一實施例中，一種非破壞性測試方法被提供，其能夠分析週期性結構的特定形狀與其內部成分。

在本發明之一特定實施例中，所提供的用於週期性結構之非破壞性分析，包含以下步驟：(a)照明一實際週期性結構，並響應該照明來量測關於該實際週期性結構之反射率或透射率的至少一個物理性質；(b)藉由設定一具有一維、二維或三維之重複形狀以及至少一個水平重複週期之虛擬週期性結構；藉由將該虛擬週期性結構劃分為垂直堆疊的 N 層；藉由從該虛擬週期性結構定義一零階結構與一擾動結構(該擾動結構是藉由在一擾動區域幾何或實體地變化該零階週期性結構所獲得)；藉由在光入射至該零階結構上時計算該零階反射或透射波；藉由使用 M 階內插 ($2 \leq M \leq N$) 以該虛擬週期性結構的至少一個劃分層離散化 Lippmann-Schwinger 方程式；藉由從該離散化的 Lippmann-Schwinger 方程式計算該擾動反射或透射波；以及藉由從該零階反射或透射波和該擾動反射或透射波計算該擾動反射率或透射率，以響應該照明計

算關於該虛擬週期性結構之反射率或透射率中至少一者之至少一個物理性質；以及(c)比較在步驟(a)中量測之關於反射率或透射率之該至少一個物理性質以及在步驟(b)中計算得到之關於該反射率或透射率中至少一個之該對應的至少一個物理性質。

根據本發明之一實施例，步驟(b)進一步包含以下步驟：分割該虛擬週期性結構的該 N 層為 X 區段(section) ($1 \leq X \leq (N-1)$)，並使用 M_i 階內插 ($1 \leq M_i \leq N$) 與該等分割區段離散化該 Lippmann-Schwinger 方程式。

根據本發明之一實施例，至少一個該等分割區段中之至少一者具有與其他分割區段不同數目的層。

反射率或透射率可以是其他可偵測之繞射階和主階(零階)的反射率或透射率，

該虛擬週期性結構的表面在該層外側可具有一物質，該物質為氣相、液相或固相，

該虛擬週期性結構可被允許具有至少一個表面層，且該表面層包括選自由氧化物層、塗佈層或表面粗糙層所組成之群組中之至少一層。

該等物理性質可關於一入射波之反射波或透射波的振幅或相位。

根據本發明之一實施例，步驟(b)進一步包含以下步驟：以傅立葉級數展開每一劃分層中的擾動勢能；以及根據該層索引，個別實施用於該擾動波之該 M 階內插公式至每一劃分層中之該反射波或透射波。

該虛擬週期性結構可劃分為 N 層，其具有至少兩個不同高度。

因此，根據本發明之一特定實施例，藉由使用 M 階內插離散化該 Lippmann-Schwinger 方程式，關於該虛擬週期性結構之反射率或透射率的準確計算可更迅速地執行。此外，相對於在其上具有天然氧化物層或在其上具有故意形成之表面塗佈層之原始週期性結構的微觀變化可精確地加以測試。半導體工業或其他奈米技術的發展可得利於本發明的這類實施例。

【實施方式】

本發明之特定實施例將在下文參照伴隨圖式更完整地敘述。不過，本發明之實施例可以不同修飾來實現，且不受限於此處所述的示範實施例。

首先，透過第 1 至 3 圖，說明根據本發明之一實施例之測試週期性結構的整體程序。

第 1 圖為概略說明根據本發明之一實施例之測試方法的流程圖，且第 2 和 3 圖為概略說明用於週期性結構之測試裝置的方塊圖。

根據本發明之一特定實施例，非破壞性測試方法包含以下步驟：藉由照明實際週期性結構來量測光學性質的步驟(S10)；設定虛擬週期性結構的步驟(S20)；計算該虛擬週期性結構之物理性質的步驟(S30)；以及比較量測的物理性質與計算的物理性質的步驟(S40)。

各步驟在下文中詳述。

量測週期性結構

首先，光學性質是藉由照明欲測試之實際週期性結構而從量測的反射率或透射率提取而得(S10)。反射率(R)是在週期性結構的反射特性佔優勢時量測，而透射率(T)是在透射特性佔優勢時量測。步驟S10可使用如第2圖或第3圖所繪示之測試裝置執行。

參照第2圖，測試裝置包括光源(100)、偵測器(110)、處理器(120)以及基材(130)。當作為測試對象的週期性結構放置在基材(130)上時，光源(100)發出具有特定波長或不同波長的光至該週期性結構(200)。

入射在週期性結構 200 上的光部分透射且部分反射。反射光在偵測器 110 中偵測，且在處理器 120 中計算偵測器 110 中量測之反射波的反射率。透射光亦在偵測器 110 中偵測，且在處理器 120 中計算偵測器 110 中量測之透射波的透射率。

測試裝置可進一步如第 3 圖所繪示般包括極化器(polarizer) 140。在此實例中，從光源 100 產生的光偏極化為 TE 模式或 TM 模式的光通過極化器 140，以入射在週期性結構 200 上。

當光入射在週期性結構 200 上時，入射光會分為反射光與透射光。在本發明之一實施例中，計算在光的反射或透射中之最基本的兩個偏光狀態(那就是說，TE 模式和 TM 模式)中的反射率或透射率，以執行週期性結構的

非破壞性測試。

舉例來說，藉由允許光入射在週期性結構上所量測之關於反射率或透射率的物理性質，可理解為關於反射波及透射波對 TE 模式電場之入射波的振幅或相位之物理性質，與關於反射波和透射波對 TM 模式磁場之入射波的振幅或相位之物理性質的結合。

如上文所述，步驟 S10 可簡單地藉由在半導體元件之製造製程中將光照射在測試對象上，並量測反射率或透射率來執行。結果，半導體元件的非破壞性量測可在不改變製造環境的情況下輕易執行。

必須建立虛擬對象，其能導致與量測的反射率或透射率相同之計算的反射率或透射率，此虛擬對象的結構將等同於在步驟 S10 中，於其上執行光學量測的週期性結構 (200)。虛擬週期性結構的反射率或透射率在步驟 S20 和 S30 中進行計算。

為了計算虛擬週期性結構的 Ψ 和 Δ ，首先在步驟 S20 中推測虛擬週期性結構。一般而言，當製造半導體元件時，存在著期望結構 (desired structure)，且虛擬週期性結構是以該期望結構為基礎來進行推測。

虛擬週期性結構

第 4 至 8 圖繪示虛擬週期性結構的範例。

第 4 圖為說明虛擬週期性結構之範例的透視圖，第 5 圖為第 4 圖之虛擬週期性結構劃分為複數個層 (N 層) 的剖面圖，第 6 圖為說明虛擬週期性結構之另一範例的透

視圖，而第 7 圖則為第 6 圖之虛擬週期性結構劃分為複數個層的剖面圖。

第 4 和 5 圖以及第 6 和 7 圖繪示虛擬週期性結構的範例。步驟 S30 中的計算可藉由(i)將零階結構(在此實例中，須了解第 4 和 5 圖以及第 6 和 7 圖代表零階結構)(200a 或 200b)劃分為複數個薄層；(ii)以兩種積分常數(integration constant)獲取各層中投影空間之零階反射波或透射波的函數形式(functional form)；以及(iii)藉由在劃分層之邊界表面的匹配條件(matching condition)而固定積分常數，來執行。

不同於第 4 和 5 圖，第 6 和 7 圖繪示在虛擬週期性結構(200b)的表面上之假設表面層(210)，如氧化物層或其類似物。因為一般而言，即使在真空中執行半導體的製造製程，薄表面層仍會迅速形成，藉由考慮如第 6 和 7 圖之表面層(210)，而非如第 4 和 5 圖所示者來實行步驟 S30，可能較為理想。

在虛擬週期性結構(200a)為具有諸如一維、二維或三維週期性形成(formation)之形狀之半導體元件的實例中，虛擬週期性結構(200a)具有形成，其中在每一層中由一物質(例如，矽等)組成之兩個物質或物質部分(折射率從 n_1 至 n_L)，以及入射部分(例如，空氣層等)的物質部分(折射率從 $\tilde{n}_1$ 至 $\tilde{n}_1$)呈現水平週期性。

然而，在半導體製程等的實際環境中，由於不可能在完美真空狀態下製造週期性結構，氧化物層會藉由與空

氣或水接觸而形成在實際週期性結構的表面上。另外，在處理步驟中，由於在週期性結構的表面上形成故意塗佈層(intentional coating layer)，或在週期性結構的表面上存在粗糙層(roughness layer)，第 4 圖的週期性結構有限制在於其有多接近地匹配其實際的幾何形狀。

第 6 和 7 圖繪示在虛擬週期性結構(200b)的表面上之表面層(210)，如氧化物層或其類似物。如第 7 圖所示，當虛擬週期性結構(200b)之一區區段劃分為複數個層時，虛擬週期性結構(200b)具有其中至少三個物質為週期性重複的形成。虛擬週期性結構 200b 包括脊區域(ridge region)，其形成在第三物質的兩側，並對應溝槽區域(groove region)。此脊區域由第一物質和第二物質組成，該第一物質形成中心部分(center part)，而該第二物質包括形成在中心部分之外部表面上的表面層。

在第 7 圖中， $n_1(l=2, \dots, L)$ 、 $\tilde{n}_l(l=2, \dots, L-1)$ 和 $\bar{n}_l(l=1, \dots, L)$ 分別表示脊區域(第一物質)、溝槽區域(第三物質)以及表面層區域(第二物質)的折射率。

表面層區域(第二物質)可為氧化物層或塗佈層，或視情況而定，其可為週期性結構表面的粗糙層。佔據溝槽區域的第三物質可為氣態、液態或固態或其組合。

舉例來說，當虛擬週期性結構(200b)為半導體元件時，除了最高層(層 1)外的複數個層(1 至 L)可由諸如矽等半導體之第一物質組成，且最高層(層 1)為諸如氧化物層或塗佈層的第二物質。空氣層或其他氣態、液態或固

態物質的第三物質可配置在層 1 至 L 間的溝槽中。層 1 至 L 與第三物質可在週期性結構內部水平且週期性地重複。

當藉由考慮諸如表面之氧化物層、塗佈層或粗糙層的表面層，以設定虛擬週期性結構(200b)時，虛擬週期性結構的反射率或透射率會經過計算，以使其更接近地近似實際週期性結構的反射率或透射率。因此，可準確地量測實際週期性結構的形狀和成分。具體而言，比較並分析週期性結構的幾何形狀與內部成分，包括存在於週期性結構內之薄膜結構的厚度，是有可能的。

從如此決定的虛擬週期性結構，反射率或透射率藉由計算手段(S30)來獲得。稍後將敘述計算反射率或透射率的方法。

在下一步驟(S40)中，比較步驟 S30 中計算的反射率或透射率與步驟 S10 中量測的反射率或透射率。週期性結構之實際量測的反射率或折射率或相關的物理量，是與虛擬週期性結構之計算的反射率或透射率或相關的物理量做比較。當這些值在規定的誤差範圍內相同時，如從反射率或透射率量測所決定之實際週期性結構的結構，可決定為相同於虛擬週期性結構的結構。

舉例來說，當比較量測的反射率或透射率與計算的反射率或透射率時，諸如電腦之附加裝置可用於比較量測值與計算值。藉此方法，可精確且有效率地決定實際結構(200)之諸如形狀和尺寸方面的幾何。

此外，由週期性結構反射或透射的波具有數個包括主階(零階)的繞射階。通常是考慮主階波，但在週期性結構之輪廓不對稱的實例中，亦必須考慮其他階(1、2、...、和-1、-2、...)。本發明之一特定實施例可均等地應用至除了主階外之階的反射或透射光。

相較之下，如果計算和量測量兩者在規定的誤差範圍內相同，因為在步驟 S10 量測之實際週期性結構(200)與步驟 S20 中的虛擬週期性結構相同，測試製程便完成。反之，如果它們並不相同，藉由改變虛擬週期性結構之光學和幾何參數來重複步驟 S20 和 S30，以獲得新的反射率或透射率。

計算零階波

接續上述程序，執行利用格林函數(Green function)方法分析一週期性結構的製程。

必須在步驟 S30 實行，以獲得計算之反射率或折射率的計算在下文敘述。

在本發明之一實施例中，為了計算虛擬週期性結構的物理性質，會設定將稱為零階結構之另一具有相同週期之虛擬週期性結構的形狀。接著，藉由在擾動域(perturbation domain)中添加定義擾動勢能(perturbation potential)之幾何或物理變化至零階結構來建立原始的虛擬結構。

零階反射或透射波首先藉由嚴格耦合波分析(rigorous coupled-wave analysis, RCWA)法來計算，接著藉由用於

電場或磁場的 M 階內插公式 ($2 \leq M \leq N$: N 為劃分層的數目) 來離散化 Lippmann-Schwinger 方程式，該 M 階內插公式近似在各劃分層中具有未知係數的二次函數。藉由積分出一連串由離散化所產生的積分式，線性方程式系統因而產生。從此線性方程式系統的解，亦即，擾動反射或透射波，與零階反射率或透射率，可提取初擾動反射率或透射率。一旦獲得擾動反射率或透射率，便可計算擾動結構之計算的反射率或透射率。在此程序中，雖然小數目的劃分層會減少計算時間，但在此同時會降低結果的準確性。因此，為了防止對小數目之劃分層而言之降低的準確性，可使用 M 階內插。可針對從虛擬週期性結構劃分的每一層或每一區域(一批層)來差異化實施 M 階內插。舉例來說，針對區域(或層)A 實施二階內插，針對區域(或層)B 實施四階內插，且針對區域(或層)C 實施一階內插。根據虛擬週期性結構的形狀， M 階內插可針對每一層或每一區域變化。隨著內插變得更高階，計算的準確性至多可藉由二階來增加。結果，本發明的分析保證計算的準確性，以及對小數目的劃分層而言之減少的計算時間。

從虛擬週期性結構劃分的 N 層可進一步分割為 X 區段 ($1 \leq X \leq (N-1)$)。在此實例中，藉由使用針對分割區段之 M_i 階內插 ($1 \leq M_i \leq N$: N 為劃分層的數目)，以離散化 Lippmann-Schwinger 方程式。舉例來說， N 層可分割為 $N/2$ 區段(結果，虛擬週期性結構本質上是劃分為 $N/2$ 對

的層)，並接著針對各區段(或每一對層)實施二階內插。同樣地， N 層可分割為 $N/4$ 區段，並接著針對各區段使用四階內插。

N 層可由每一區段具有不同尺寸的這一類方式分割為 X 區段。那就是說，至少一個分割區段可與其他區段具有不同數目的層。在此實例中， M_i 階內插可針對具有不同數目之層的各區段差異化實施。

如上文所述，零階反射率或透射率可藉由 RCWA 法計算。為此目的，如第 4 至 7 圖所示，將零階結構(須了解在此實例中，第 4 至 7 圖代表零階結構) (200a 或 200b) 以薄矩形截面形狀劃分為複數個層(1 至 L)。

隨後，以傅立葉級數(Fourier series)展開各層中的零階介電函數(dielectric function)。當光入射在零階結構(200a 或 200b)上時，各層中的反射或透射波亦以傅立葉弗羅奎茲級數(Fourier-Floquet series)及係數展開，該係數定義藉由在邊界表面匹配用於電磁波之條件而決定之(z 的)投影空間零階波函數(projected-space zero-th wave function)。

從上述的投影空間零階波函數計算零階結構之 TE 模式電場($R^{[0]}_{TE}$ 和 $T^{[0]}_{TE}$)和 TM 模式磁場($R^{[0]}_{TM}$ 和 $T^{[0]}_{TM}$)的反射率或透射率，並將之用在對應之擾動值的計算。

更精確的解可藉由增加從虛擬週期性結構(200a 或 200b)劃分之層的數目，以及相應地增加傅立葉級數展開項的數目來獲得。計算擾動反射率或透射率的方法將在

下文以第 6 和 7 圖之虛擬週期性結構(200b)敘述。

擾動域中之零階結構的格林函數可藉由實施用於計算零階反射率或透射率的方法來獲得。

一旦以 Lippmann-Schwinger 方程式計算得到 TE 模式電場或 TM 模式磁場在虛擬結構之各層中的投影空間波(projected-space wave)，則可提取 TE 模式電場(R_{TE} 和 T_{TE})和 TM 模式磁場(R_{TM} 和 T_{TM})的擾動反射率或透射率。

根據本發明之一實施例，將介於入射介質(區域 I)和基材(區域 II)間的零階結構劃分為 L 層，包括由均勻物質形成的某些或全部層。設定零階結構存有不同的可能性，在之中會提及下文所列者：在整個擾動區域之所有層中的各層是由均勻物質組成的實例；擾動區域的所有層是由單一均勻物質組成的實例；將擾動區域放置為基材上之空氣層的實例；以及各層不由均勻物質組成，但所有層皆由給定之重複層組成的實例。

實施例

下文將敘述在計算第 6 和 7 圖所示之虛擬週期性結構(200b)之反射率或透射率的中間步驟中的兩個步驟，其一是使用二階內插離散化 Lippmann-Schwinger 方程式，而另一步驟則是針對離散化的投影空間擾動波產生線性方程式系統。

在下文中，將分別針對 TE 和 TM 模式進行計算。首先考慮 TE 模式的實例。

由於任何週期性結構沿 x 方向的週期性，TE 模式分量

的 x 相依性 (x -dependence) 完全以傅立葉弗羅奎茲級數決定：

方程式 (1)

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

方程式 (2)

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

其中， $i = \sqrt{-1}$ ； $k_{xn} = k_0[n_I \sin \theta - n(\lambda_0/\Lambda)]$ ； $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ (連同 λ_0 為真空中入射波的波長， n_I 為入射區域的折射率，以及 θ 為入射角度)； ϵ_0 為真空的電容率 (permittivity)；以及 μ_0 為真空的滲透率 (permeability)。

具有一維週期之任何週期性結構的介電函數等於沿 x 方向之 Λ ，可以傅立葉級數展開：

方程式 (3)

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

由於馬克士威方程式，分量為方程式 (1) 中之展開係數 $\Psi_n(z)$ 的行向量 (column vector) $\Psi(z)$ (投影空間波向量) 滿足下列方程式：

方程式 (4)

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

其中 $\mathbf{K}$ 為具有等於 k_{xn}/k_0 之 (n, n) 元素的對角矩陣 (diagonal matrix)，且 $\mathbf{E}(z)$ 為由電容率諧波分量

(permittivity harmonic component)形成之特普立茲矩陣 (Toeplitz matrix)，其具有等於 $E_{np}(z) = \varepsilon_{(n-p)}(z)$ 的 (n,p) 元素。

以下，傅立葉弗羅奎茲空間指數被截斷，以便其從 $-N$ 進行至 N 。

當週期性結構設定為將幾何或物理變化、擾動勢能，添加至零階結構之擾動結構時，擾動介電函數 $\Delta\varepsilon(x,z)$ 定義為 $\Delta\varepsilon(x,z) = \varepsilon(x,z) - \varepsilon^{[0]}(x,z)$ ： $\varepsilon^{[0]}(x,z)$ 為零階結構的介電函數。

分量分別為零階 $E^{[0]}_y(x, z)$ 和擾動 $E_y(x, z)$ 之 (z) 展開係數函數的行向量 $\Psi^{[0]}_1(z)$ 及 $\Psi_1(z)$ 滿足下列

Lippmann-Schwinger 方程式：

方程式 (5)

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

其中 $V(z)$ 為 $V(z) = k_0^2 [E(z) - E^{[0]}(z)]$ 所給定的擾動勢能，連同 $E(z)$ 和 $E^{[0]}(z)$ 分別為虛擬週期性結構和零階結構的特普立茲矩陣。在方程式 (5) 中，由於在擾動域外側 $V(z) = 0$ ，積分區域因而受限於擾動域內部。

為了在數值上解開 Lippmann-Schwinger 方程式，首先以 RCWA 法計算 $\Psi^{[0]}(z)$ 及 $G(z, z')$ 。

以下，茲敘述用於計算 $\Psi^{[0]}(z)$ 及 $G(z, z')$ 的一般方法。針對 RCWA 法的詳細計算，請參照韓國專利第 10-0892485 號與第 10-0892486 號。

吾人將包括氧化物層、塗佈層或表面層之週期性結構近似為具有共同週期 Λ 之平行矩形層的堆疊。在上述將

週期性結構劃分為層的過程中，某些或全部的層可由均勻物質組成。藉由上述將週期性結構劃分為層，介電函數 $\epsilon(x,z)$ 的 z 相依性會偏移至指示該層的指數 l 。接著，給定層 l 的介電函數僅為 z 的函數，並可以傅立葉級數展開，因為其仍是具有週期 Λ 之 x 的週期性函數。由展開係數構成的特普立茲矩陣 $E^{[0]}_l$ 具有 $(2N+1) \times (2N+1)$ 的尺寸。由各層中之電場的傅立葉弗羅奎茲展開係數函數構成之尺寸為 $(2N+1)$ 的行向量 $\Psi^{[0]}_l(z)$ ，滿足諧波振盪器型 (harmonic-oscillator-type) 的矩陣微分方程式。因此，(在數值上) 解開此方程式相當於，(在數值上) 解開特徵值方矩陣 (eigenvalue square matrix) Q^2_l 以及特徵向量方矩陣 (eigenvector square matrix) S_l 。將邊界條件施用於 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 和其導數會引起兩種積分常數矩陣的遞迴關係 (recurrence relation)。由沒有來自區域 II ($l=L+1$) 的入射光，且來自區域 I ($l=0$) 的入射光已知的特殊條件看來，在數值上會完全獲得投影空間零階波 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 。

$G(z,z')$ 的計算基本上可使用 RCWA 法實行，並可以已針對 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 之實例所獲得之相同的特徵值方矩陣 Q^2_l 及特徵向量方矩陣 S_l ，以及兩種常數方矩陣 $f_{ll'}^\pm(z')$ 及 $g_{ll'}^\pm(z')$ 來表示，如下：

方程式 (6)

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

不同於 $\Psi^{[0]}_l(z)$ 的計算，格林函數的來源為零階結構本身。此外，在此例子中，並沒有來自區域 I 的入射波。因此，用於 $G(z, z')$ 之額外邊界條件是必要的，其是由差量函數(delta function)項所造成之 $G(z, z')$ 導數的不連續性所提供。藉由應用所有邊界條件，兩個 (z) 常數方矩陣 $f_{ll'}^\pm(z')$ 及 $g_{ll'}^\pm(z')$ 如下所述般固定：

方程式 (7)

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

方程式 (8)

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

其中

方程式 (9)

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

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

方程式 (10)

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

$\mathbf{R}_l$ 和 $\bar{r}_l$ 定義為連接 $f_{ll'}^\pm(z')$ 與 $g_{ll'}^\pm(z')$ 以及 $f_{ll'}^\pm(z')$ 與 $g_{ll'}^\pm(z')$ 的方矩陣：同樣地， $\mathbf{u}_l$ 定義為 $\mathbf{u}_l = (\mathbf{I} - \mathbf{R}_l \bar{r}_l)^{-1}$ 。

方程式 (11)

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

方程式 (12)

$$\mathbf{f}_{ll'}^-(z') = \bar{\mathbf{r}}_l \mathbf{g}_{ll'}^-(z') .$$

下文敘述使用以此方式獲得之 $\Psi^{[0]}(z)$ 和 $G(z, z')$ 來離散化 Lippmann-Schwinger 方程式的方法。

以二階內插離散化 Lippmann-Schwinger 方程式

由零階結構之物理性質和幾何形成以及入射波資訊所定義的兩個量， $\Psi^{[0]}(z)$ 和 $G(z, z')$ ，以及擾動勢能 $V(z)$ ，作為輸入函數用。藉由解開離散化的 Lippmann-Schwinger 方程式，來獲得取決於擾動結構之物理性質和幾何形成以及相同入射波之資訊的未知量 $\Psi(z)$ 。

假設擾動勢能 $V(z')$ 在層 j 內具有常數值 V_j 。藉由設定位於層 l ($l=1, \dots, L$) 內之 z 為 $z \rightarrow z_{l-1}$ ，且位於層 L 內之 z 為 $z \rightarrow z_L$ ，以及藉由使用方程式 (7) 和 (8)，吾人將方程式 (5) 轉換如下：

方程式 (13)

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

方程式 (14)

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

須注意在方程式(13)中，如果 $l=1$ ，則 $\sum_{j=1}^{l-1}(\dots)$ 不會產生任何項，且如果 $l=L$ ，則 $\sum_{j=l+1}^L(\dots)$ 不會產生任何項。

為了增強準確性，吾人在各層內藉由使用方程式(15)至(18)所給定的二階內插實行解析積分(analytic integration)；同樣地，可應用 M 階內插。

方程式(15)

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

在使用二階內插的本實施例中， Ψ_A 和 Ψ_B 可展開如下。

方程式(16)

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

方程式(17)

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

方程式(13)中的 z' 積分，可像在為了計算而將兩層配對的方程式(16)和方程式(17)中一樣，針對偶數層和針對奇數層分別實行。在 N 階內插中，咸認為必須將 N 層放入一區段中。因此，類似地，在二階內插中將成對的層視為一單元，且在三階內插中將三層視為一單元。上述形式(或方程式)可應用至 N 階內插。方程式(18)和方程式(19)敘述用於各層之通用的積分形式： II 指示偶數層，而 I 指示奇數層。

方程式(18)

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

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

方程式 (19)

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

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

其中

方程式 (20)

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

方程式 (21)

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

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

方程式 (22)

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

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

方程式 (20) 至 (22) 中的量 W_i 、 $W^{(\pm)}$ 、 $\tilde{W}^{(\pm)}$ 给定如下：

方程式 (23)

$$W_j = \frac{1}{2} (1 - e^{Q_j d_j}) Q_j^{-2} S_j^T$$

方程式 (24)

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

方程式 (25)

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

方程式 (26)

$$W^{(+)} = \frac{1}{2} d_i Q_i^{-2} S_i^T - Q_i^{-1} W_i$$

方程式 (27)

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

方程式 (28)

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

使用方程式 (18)、(19) 的積分公式， ΨA 定義在方程式 (16) 中，且 ΨB 在方程式 (19) 中，方程式 (13) 可針對 $l=0, \dots, L-1$ 表示為

方程式 (29)

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

雖然方程式 (29) 中的指數 l 可為偶數或奇數，針對偶數 l 和奇數 l 之 $\Theta_b^{(\pm)}$ 、 $\bar{\Theta}_b^{(\pm)}$ 、 $\tilde{\Theta}_b^{(\pm)}$ 、 $\hat{\Theta}_b^{(\pm)}$ 的具體表示式仍不相同。此外，矩陣 $\tilde{\Theta}_b^{(\pm)}$ 和 $\hat{\Theta}_b^{(\pm)}$ 的所有偶數行皆會消失。這是由於二階展開的性質所致。

針對 $l=L$ 的離散化 Lippmann-Schwinger 方程式，亦

即，方程式(14)，計算如下：

方程式(30)

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

當層數 L 為奇整數時，首先考慮添加一層至包括 $(L-1)/2$ 對之剩餘 $(L-1)$ 偶數層。就此點而言，可依據添加層是考慮位於給定對上方或給定對下方，來給定欲施用於該添加層之積分公式。一般而言，可將 M 階內插施用於從虛擬週期性結構劃分的各層或分割的各區段。

方程式(29)和(30)可合併在方程式之線性系統之展開的矩陣形式中：

方程式(31)

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

其中 X 和 $X^{[0]}$ 為分別具有層分量 $\Psi(z_1)$ 及 $\Psi^{[0]}(z_1)$ 之尺寸為 $L+1$ 的行向量。每一層分量 $\Psi(z_1)$ 及 $\Psi^{[0]}(z_1)$ 仍是具有耦合波分量之尺寸為 $(2N+1)$ 的行向量。 G 、 $\bar{G}$ 、 $\tilde{G}$ 、 $\hat{G}$ 為具有 $(L+1)^2$ 之層分量的方矩陣，各層分量為位於耦合波空間之 $(2N+1)^2$ 的方矩陣。具有 $(L+1)^2$ 之層分量的方矩陣 V 、 $\bar{V}$ 、 $\tilde{V}$ 、 $\hat{V}$ 實質上是由在耦合波空間中具有分量 $(2N+1)^2$ 的擾動勢能 $V(z_1)$ 構成。

方程式(31)可如下所述般針對 N 階內插一般化：在此實例中，欲計算的矩陣數目以 $2N$ 增加。

方程式 (32)

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

至目前為止，僅顧及 TE 模式量的計算；TM 模式量的計算將在下文敘述。

由於週期性結構沿 x 方向的週期性，馬克士威方程式之 TM 模式的解可寫成

方程式 (33)

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

方程式 (34)

$$E_x(x, z) = -i \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{1}{k_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \epsilon_{(n-n')}^{\#}(z) \partial_z \Phi_{n'}(z) e^{ik_n x}.$$

此處，當反介電函數 $\epsilon(x, z)$ 以傅立葉級數展開時， $\epsilon_{(n-n')}^{\#}(z)$ 為一展開係數：

方程式 (35)

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

根據馬克士威方程式，分量為方程式 (33) 中之展開係數 $\Phi_n(z)$ 的行向量 $\Phi(z)$ (投影空間波向量) 滿足下列方程式：

方程式 (36)

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

其中 $P(z)$ 為具有等於 $\epsilon_{(n-n')}^{\#}(z)$ 之 (n, n) 元素的方矩陣。分別用於零階結構與擾動結構之分量為方程式 (38) 中之 (z) 的)

展開係數函數的行向量 $\Phi^{[0]}(z)$ 和 $\Phi(z)$ 滿足下列的 Lippmann-Schwinger 方程式：

方程式 (37)

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

其中 K 如在 TE 模式中所定義， $\tilde{V}(z) = E(z)^{-1} - (E^{[0]})^{-1}(z)$ 以及 $V(z) = P(z) - P^{[0]}(z)$ 。在方程式 (37) 中，將 Li 的因式分解規則用於快收斂 (rapid convergence)。

行向量 $\Phi^{[0]}(z)$ 與格林函數 $G(z, z')$ 基本上可以類似於 TE 模式的方式來計算。

那就是說，藉由設定位於層 l ($l=1, \dots, L$) 內之 z 為 $z \rightarrow z_{l-1}$ ，且位於層 L 內之 z 為 $z \rightarrow z_L$ ，以及藉由使用方程式 (7) 和 (8)，並假設擾動勢能 $\tilde{V}(z')$ 和 $V(z')$ 分別具有常數值 $\tilde{V}_l$ 和 V_j ，方程式 (37) 對 $l=1, \dots, L-1$ 之離散化如下：

方程式 (38)

$$\begin{aligned} \Phi(z_{l-1}) - \Phi^{[0]}(z_{l-1}) = - \left\{ S_l \left[(1 + R_l) \sum_{j=1}^{l-1} \bar{T}_{l-1} \cdots \bar{T}_j \int_{z_{j-1}}^{z_l} dz' \mathbf{f}_{\beta}^+(z') K \tilde{V}_j K \Phi(z') \right. \right. \\ \left. \left. + (\bar{l}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' \mathbf{g}_{\beta}^-(z') K \tilde{V}_l K \Phi(z') \right. \right. \\ \left. \left. + (\bar{l}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \bar{T}_l \cdots \bar{T}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_l} dz' \mathbf{g}_{\beta}^-(z') K \tilde{V}_j K \Phi(z') \right] \right. \\ \left. + S_l \left[(1 + R_l) \sum_{j=1}^{l-1} \bar{T}_{l-1} \cdots \bar{T}_j \int_{z_{j-1}}^{z_l} dz' (\mathbf{f}_{\beta}^+)(z') V_j \Phi(z_j) \right. \right. \\ \left. \left. + (\bar{l}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' (\mathbf{g}_{\beta}^-)(z') V_l \Phi(z_l) \right. \right. \\ \left. \left. + (\bar{l}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \bar{T}_l \cdots \bar{T}_{j-1} \int_{z_{j-1}}^{z_l} dz' (\mathbf{g}_{\beta}^-)(z') V_j \Phi(z_j) \right] \right\}. \end{aligned}$$

同時，對 $l=L$ 而言，方程式 (37) 成為

方程式 (39)

$$\begin{aligned} \Phi(z_L) - \Phi^{[0]}(z_L) = & - \left\{ S_L (e^{-Q_d} + e^{Q_d} R_L) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \bar{T}_{L-1} \cdots \bar{T}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' f_{jj}^+(z') K \tilde{V}_j K \Phi(z') \right. \right. \\ & \left. \left. + \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz f_{LL}^+(z') K \tilde{V}_L K \Phi(z') \right] \right. \\ & \left. + S_L (e^{-Q_d} + e^{Q_d} R_L) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \bar{T}_{L-1} \cdots \bar{T}_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' (f_{jj}^+)'(z') V_j \Phi(z_j) \right. \right. \\ & \left. \left. + \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz (f_{LL}^+)'(z') V_L \Phi(z_L) \right] \right\} \end{aligned}$$

為了增強準確性，類似於方程式(15)，藉由使用針對投影空間擾動波 $\Phi(z)$ 的二階內插，來獲得用 $K \tilde{V}_i K$ 取代方程式(18)和(19)中之 V_i 的積分，且解析積分是針對方程式(37)中之被積函數的第二部分實行，最終吾人可獲得下列方程式(40)和(41)。以類似 TE 模式的方式，II 及 $\Psi(z_{j-1})$ 是用於偶數層，而 I 及 $\Psi(z_j)$ 是用於奇數層。

方程式(40)

$$\begin{aligned} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_z f_{jj}^+(z') V_j \partial_z \Psi_{II}(z') &= G_j^{[2](+)} V_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[2][B][II](+)} V_j \Psi(z_{j-1}) \\ \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_z f_{jj}^+(z') V_j \partial_z \Psi_I(z') &= G_j^{[2](+)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[2][B][I](+)} V_j \Psi(z_j) \end{aligned}$$

方程式(41)

$$\begin{aligned} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_z g_{jj}^-(z') V_j \partial_z \Psi_{II}(z') &= G_j^{[2](-)} V_j \Psi(z_{j-1}) + G_j^{[2][B][II](-)} V_j \Psi(z_{j-1}) \\ \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \partial_z g_{jj}^-(z') V_j \partial_z \Psi_I(z') &= G_j^{[2](-)} V_j \Psi(z_j) + G_j^{[2][B][I](-)} V_j \Psi(z_j) \end{aligned}$$

其中

方程式(42)

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

方程式 (43)

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

方程式 (44)

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

以這些積分公式，方程式 (38) 最終計算如下：

方程式 (45)

$$\begin{aligned} \Phi(z_l) - \Phi^{[0]}(z_l) = & \sum_{j=1}^l [\Theta_b^{(+)}KV_jK + \Delta_b^{(+)}V_j]\Phi(z_j) \\ & + \sum_{j=0}^{l-1} [\bar{\Theta}_b^{(+)}KV_{j+1}K + \bar{\Delta}_b^{(+)}V_{j+1}]\Phi(z_j) \\ & + \sum_{j=0}^{l-2} [\tilde{\Theta}_b^{(+)}KV_{j+2}K + \tilde{\Delta}_b^{(+)}V_{j+2}]\Phi(z_j) \\ & + \sum_{j=2}^{l+1} [\dot{\Theta}_b^{(+)}KV_{j-1}K + \dot{\Delta}_b^{(+)}V_{j-1}]\Phi(z_j) \\ & + \sum_{j=l+1}^L [\Theta_b^{(-)}KV_jK + \Delta_b^{(-)}V_j]\Phi(z_j) \\ & + \sum_{j=l}^{L-1} [\bar{\Theta}_b^{(-)}KV_{j+1}K + \bar{\Delta}_b^{(-)}V_{j+1}]\Phi(z_j) \\ & + \sum_{j=l-1}^{L-2} [\tilde{\Theta}_b^{(-)}KV_{j+2}K + \tilde{\Delta}_b^{(-)}V_{j+2}]\Phi(z_j) \\ & + \sum_{j=l+2}^L [\dot{\Theta}_b^{(-)}KV_{j-1}K + \dot{\Delta}_b^{(-)}V_{j-1}]\Phi(z_j). \end{aligned}$$

其中 $\Delta_{lj}^{(\pm)}$ 、 $\bar{\Delta}_{lj}^{(\pm)}$ 、 $\tilde{\Delta}_{lj}^{(\pm)}$ 、 $\dot{\Delta}_{lj}^{(\pm)}$ 的具體形式對偶數 l 和奇數 l 是不同的。

同時，對 $l=L$ 而言，方程式 (39) 成為方程式 (46)

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

在奇數 L 的實例中，如在 TE 模式中一般，藉由考慮將一層添加至 $(L-1)$ 層，可實施二階內插法。

類似於 TE 模式的計算，用於 TM 模式中之離散化投影空間擾動磁場 $\Phi(z_1)$ 的線性方程式系統可獲得如下：

方程式 (47)

$$X = X^{[0]} + [G\bar{V} + \bar{G}\bar{V} + \tilde{G}\tilde{V} + \hat{G}\hat{V} + H\bar{V} + \bar{H}\bar{V} + \tilde{H}\tilde{V} + \hat{H}\hat{V}]X$$
，其中 $\Phi(z_1)$ 和 $\Phi^{[0]}(z_1)$ 分別為具有層分量 $\Phi(z_1)$ 和 $\Phi^{[0]}(z_1)$ 之尺寸為 $L+1$ 的行向量， $\Phi(z_1)$ 和 $\Phi^{[0]}(z_1)$ 仍為具有耦合波基底分量之尺寸為 $2N+1$ 的行向量。 G 、 $\bar{G}$ 、 $\tilde{G}$ 、 $\hat{G}$ 如在 TE 模式中所定義。 H 、 $\bar{H}$ 、 $\tilde{H}$ 、 $\hat{H}$ 為具有 $(L+1)^2$ 層分量的方矩陣，各層分量為在一耦合波基底上具有 $(2N+1)^2$ 分量的方矩陣，且具有 $(L+1)^2$ 層分量之方矩陣 V 、 $\bar{V}$ 、 $\tilde{V}$ 、 $\hat{V}$ 實質上由在耦合波空間中具有分量 $(2N+1)^2$ 的擾動勢能 $V(z_1)$ 構成。

一旦決定 TE 模式電場 $\Psi(z_1)$ 和 TM 模式磁場 $\Phi(z_1)$ 的層分量，第 6 和 7 圖所繪示之虛擬週期性結構 (200b) 的反射率或透射率可藉由韓國專利第 10-0892486 號中敘述的方法計算。

上述之 TE 模式和 TM 模式各自計算而得的反射率或透

射率與量測的反射率或透射率相比較。比較結果可應用至多種週期性結構(例如，全像光柵(holographic grating)結構、表面起伏(surface relief)與多層光柵(multilayer grating)結構、平面介電或吸收性全像光柵(absorptive holographic grating)結構、隨機截面介電(random sectional dielectric)與吸收性表面起伏光柵結構、二維表面起伏光柵結構以及各向異性光柵(anisotropic grating)結構)的非破壞性分析。須了解本發明之範圍並未受限於所揭示之實施例。

與具有一階內插的格林函數法比較計算時間

可用第 8 圖所繪示的週期性結構來研究準確性。

第 8 圖為根據本發明之一實施例之示範的虛擬週期性結構之幾何形成的剖面圖。第 9 至 12 圖繪示藉由 RCWA 法、具有一階內插的格林函數法以及根據本發明的方法，亦即，具有二階內插之格林函數法，計算而得之虛擬週期性結構之主階反射率的結果圖。

第 8 圖所繪示之週期性結構的脊區域(堆疊在石英基材上)是由鉻的單一物質組成。週期性結構的週期 Λ 為 600 nm，且鉻脊的寬度和深度皆為 300 nm。

第 9 至 14 圖繪示藉由 RCWA 法、具有一階內插的格林函數法以及根據本發明之一實施例的方法計算而得之一虛擬週期性結構之主階反射率的結果圖。

第 9 至 14 圖是為了檢查根據本發明之一實施例的準確性，且在第 9 至 14 圖中，用於比較的參考資料是來自

RCWA 法的模擬，且 RCWA 法之傅立葉分量數目 $N=81$ ，對第 8 圖的測試樣本而言已足夠大。一方面，此比較必須在相同的準確性條件下完成。另一方面，因為藉由在演繹層數目的同時提高計算速度會伴隨較大的誤差，此比較亦可藉由在相同的層數目條件下比較準確性來完成。因此，為了顯現本發明之實施例的方法提供較佳的方法學，將在下文進行誤差比較。在不同的光學量測方法中，選定橢圓量測法(ellipsometric method)作為典型範例。因此，用於比較的誤差公式給定為：

方程式 (48)

$$\text{error} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{2N} \left(\frac{\psi_s - \psi_\epsilon}{\psi_\epsilon} \right)^2,$$

其中 Ψ_s 表示從格林函數法之模擬獲得之位於橢偏儀(ellipsometry)中之 Ψ 和 Δ 的值，且 Ψ_ϵ 表示由具有高精度之 RCWA 法獲得者。

首先，透過第 9 和 10 圖，檢查現行之格林函數法與本發明之實施例之結果的比較。

第 9 和 10 圖顯示以 10 個劃分層計算關於第 8 圖所繪示之結構的結果。實線表示以具有高精度之 RCWA 法計算的對應量，第 9 圖的虛線表示現行之格林函數法之 Ψ 及 Δ 對波長的圖，且第 10 圖的虛線表示本發明之實施例之 Ψ 及 Δ 對波長的圖。

如可在第 9 圖中所見，在現行之格林函數法與具有高精度之 RCWA 法的計算間會發現顯著的差異。使用方程

式(48)計算的誤差為 $4.7834\text{E}-3$ 。

反之，如可在第 10 圖中所見，本發明之實施例與具有高精度之 RCWA 法之計算間的差異變得較小。誤差為 $6.4878\text{E}-4$ ，其減少了一個數量級。

結果，根據本發明之實施例，具有小數目之劃分層與小誤差之二階內插格林函數法所計算的值接近實際值。

使用第 11 和 12 圖，對現行之格林函數法與本發明之實施例的結果再次進行比較。

不同於第 9 和 10 圖，第 11 和 12 圖顯示以 20 個劃分層計算關於第 8 圖所繪示之結構的結果。

如第 9 和 10 圖，實線表示以具有高精度之 RCWA 法計算的值，第 11 圖的虛線表示現行之格林函數法之 Ψ 及 Δ 對波長的圖，且第 12 圖的虛線表示本發明之實施例(二階內插格林函數法)之 Ψ 及 Δ 對波長的圖。

當然，如可在第 11 圖中所見，當劃分層數目從 10 變化至 20 時，現行的格林函數法會減少誤差。在此實例中，誤差計算為 $8.618\text{E}-4$ 。

反之，如可在第 12 圖中所見，當劃分層的數目 L 為 20 時，本發明的實施例得出幾乎與 RCWA 計算相同的結果。使用方程式(55)所得到的誤差為 $5.3909\text{E}-6$ 。那就是說，於具相同數目的層時，本發明的實施例顯著改善誤差值達 100 倍。

為了以現行的格林函數法達到與第 12 圖相同的誤差值，第 8 圖的週期性結構必須劃分為 85 層。在相同誤差

條件下之計算時間的比為 32.8(現行的格林函數法)：1.5(本發明的實施例)。因此，根據本發明之一實施例，在必須要求規定誤差的計算中，具有二階內插的格林函數法比現行的格林函數法更有效率。

這一點更詳細地繪示在第 13 和 14 圖中。

第 13 圖的 x 軸和 y 軸分別表示誤差和經過時間。在第 14 圖中，x 軸和 y 軸分別表示劃分層數目和誤差比。在第 13 和 14 圖中，實線是用於表示現行的格林函數法，而虛線是用於表示本發明的實施例。

在層數目少的實例中，本發明之實施例的經過時間比現行之格林函數法的時間長。不過，由於僅減少時間而未研究準確性毫無意義，因此需要在相同的誤差條件下比較計算時間。如可在第 13 圖中所見，如果一般會接受的容許誤差為 $1.00\text{E}-5$ ，根據本發明之實施例的格林函數法具有在具有相同誤差之計算中顯著減少計算時間的優點。

同時，在第 14 圖中，由於本發明之實施例的計算在需要相同誤差比的實例中容許小數目的劃分層，因而了解到本發明之另一優點為，相對於現行的格林函數法，其具有較少的添加項(added term)。

綜合上述，與現行的格林函數法相比，本發明的實施例在計算時具有足夠的準確性，甚至使用小數目的層亦然，且在具有相同誤差的計算時顯著減少經過時間。因此，其可在實際的製造製程中用於原位監控(in-situ

monitoring)。

本發明已使用較佳的示範實施例敘述。不過，須了解本發明之範圍並未受限於所揭示之實施例。反之，本發明之範圍意欲包含熟悉此技術者在能力範圍內使用目前已知或未來之技術及等同物所發展之不同的修飾及替代安排。因此，專利請求項之範圍必須與最廣泛的詮釋一致以便包含所有這類修飾及類似的安排。

【圖式簡單說明】

本發明之實施例的特徵與優點根據其較佳實施例參照附加圖式的詳細敘述當可明白，其中：

第 1 圖為概略說明根據本發明之一實施例之測試方法的流程圖；

第 2 和 3 圖為概略說明週期性結構之測試裝置的方塊圖；

第 4 圖為說明虛擬週期性結構之一範例的透視圖；

第 5 圖為第 4 圖之虛擬週期性結構劃分為複數個層的剖面圖；

第 6 圖為說明虛擬週期性結構之另一範例的透視圖；

第 7 圖為第 6 圖之虛擬週期性結構劃分為複數個層的剖面圖；

第 8 圖為根據本發明之一實施例之示範的虛擬週期性結構之幾何形成的剖面圖；以及

第 9 至 14 圖為繪示藉由 RCWA 法、具有一階內插的格林函數法以及根據本發明之一實施例的方法，亦即，具有二階內插之格林函數法，計算而得之虛擬週期性結構之主階反射率的結果圖。

【主要元件符號說明】

S10 步驟

S20 步驟

S30 步驟

S40	步驟
100	光源
110	偵測器
120	處理器
130	基材
140	極化器
200	週期性結構
200a	週期性結構
200b	週期性結構
210	表面層

七、申請專利範圍：

1. 一種用於一週期性結構之非破壞性分析，其包含以下步驟：

(a)照明一實際週期性結構，並響應該照明來量測關於該實際週期性結構之反射率或透射率的至少一個物理性質；

(b)藉由設定一具有一維、二維或三維之重複形狀以及至少一個水平重複週期之一虛擬週期性結構；

藉由將該虛擬週期性結構劃分為垂直堆疊的 N 層；

藉由從該虛擬週期性結構定義一零階結構與一擾動結構，該擾動結構是藉由在一擾動區域幾何或實體地變化該零階週期性結構所獲得；

藉由在光入射至該零階結構上時計算該零階反射或透射波；

藉由使用 M 階內插 ($2 \leq M \leq N$) 於該虛擬週期性結構的至少一個劃分層以離散化 Lippmann-Schwinger 方程式；

藉由從該離散化的 Lippmann-Schwinger 方程式計算該擾動反射或透射波；以及

藉由從該零階反射或透射波和該擾動反射或透射波計算該擾動反射率或透射率，以響應該照明計算關於該虛擬週期性結構之反射率或透射率中至少一者之至少一個物理性質；以及

(c)比較在步驟(a)中量測之關於反射率或透射率之該至少一個物理性質以及在步驟(b)中計算得到之關於該反射率或透射率中至少一者之該對應的至少一個物理性質，

其中該步驟(b)進一步包含以下步驟：

分割該虛擬週期性結構的該 N 層為 X 區段 ($1 \leq X \leq (N-1)$)；以及

使用 M_i 階內插 ($1 \leq M_i \leq N$) 於該等分割區段以離散化該 Lippmann-Schwinger 方程式。

2. 如申請專利範圍第 1 項所述之非破壞性分析，其中該等分割區段中之至少一者具有與其他分割區段不同數目的層。

3. 如申請專利範圍第 1 項所述之非破壞性分析，其中該反射率或透射率為其他可偵測之繞射階和主階(零階)的反射率或透射率。

4. 如申請專利範圍第 1 項所述之非破壞性分析，其中該虛擬週期性結構的表面在該層外側具有一物質，該物質為一氣相、液相或固相。

5. 如申請專利範圍第 1 項所述之非破壞性分析，其中該虛擬週期性結構被允許具有至少一個表面層，且該表面

層包括選自由一氧化物層、一塗佈層或一表面粗糙層所組成之群組中之至少一層。

6. 如申請專利範圍第 1 項所述之非破壞性分析，其中該等物理性質是關於一入射波之一反射波或一透射波的振幅或相位。

7. 如申請專利範圍第 1 項所述之非破壞性分析，其中該步驟(b)進一步包含以下步驟：

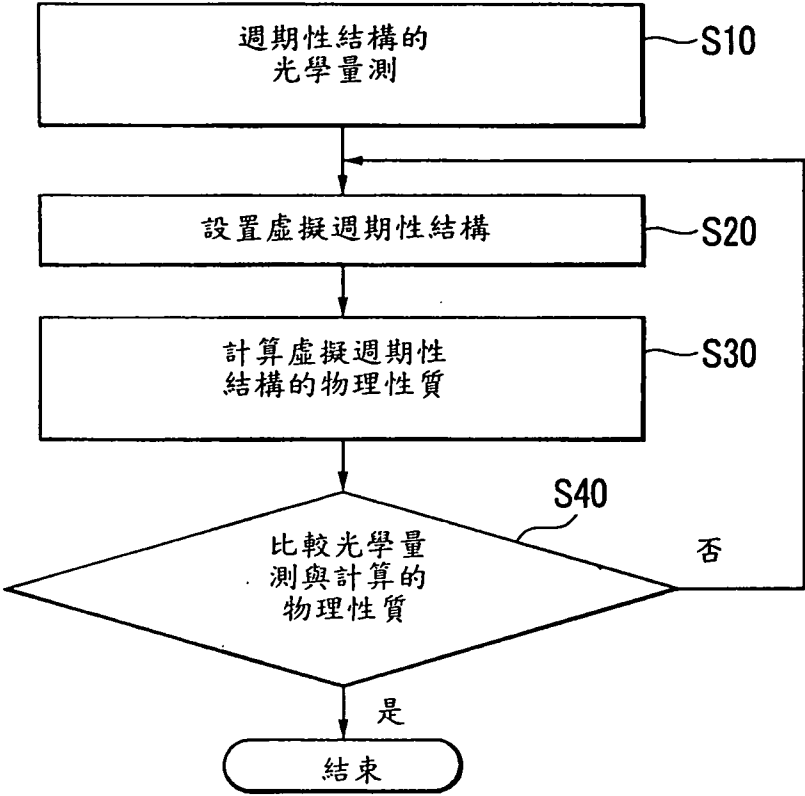
以一傅立葉級數展開各該劃分層中的擾動勢能；以及

根據該層指數，分別實施用於該擾動波的 M 階內插公式至每一劃分層中的該反射波或透射波。

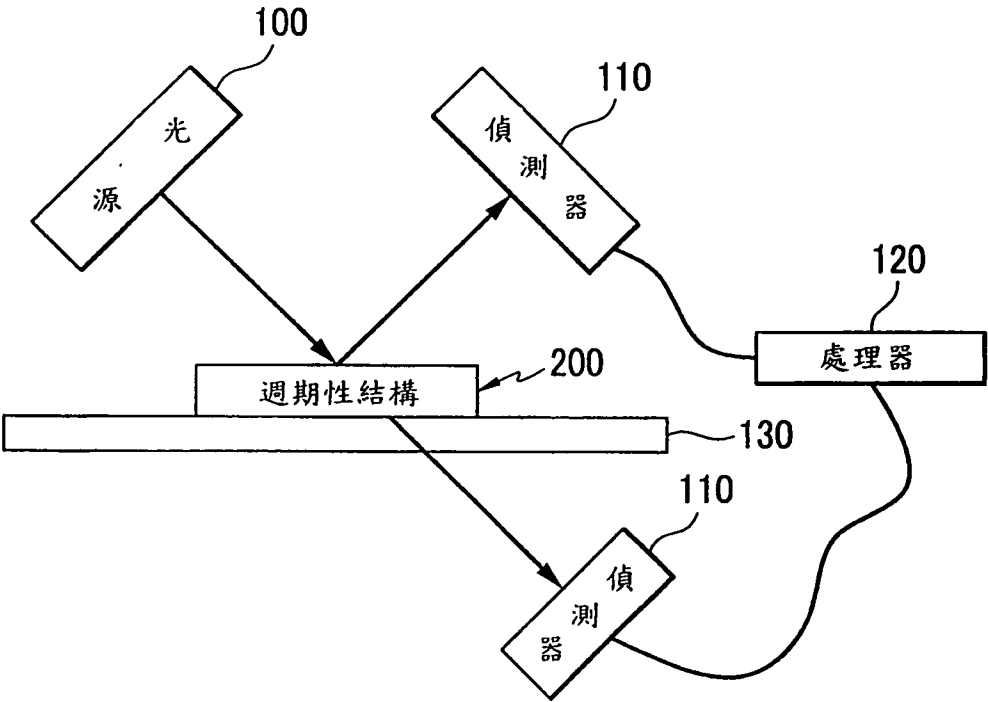
8. 如申請專利範圍第 1 項所述之非破壞性分析，其中該虛擬週期性結構被劃分為具有至少兩個不同高度的 N 層。

八、圖式：

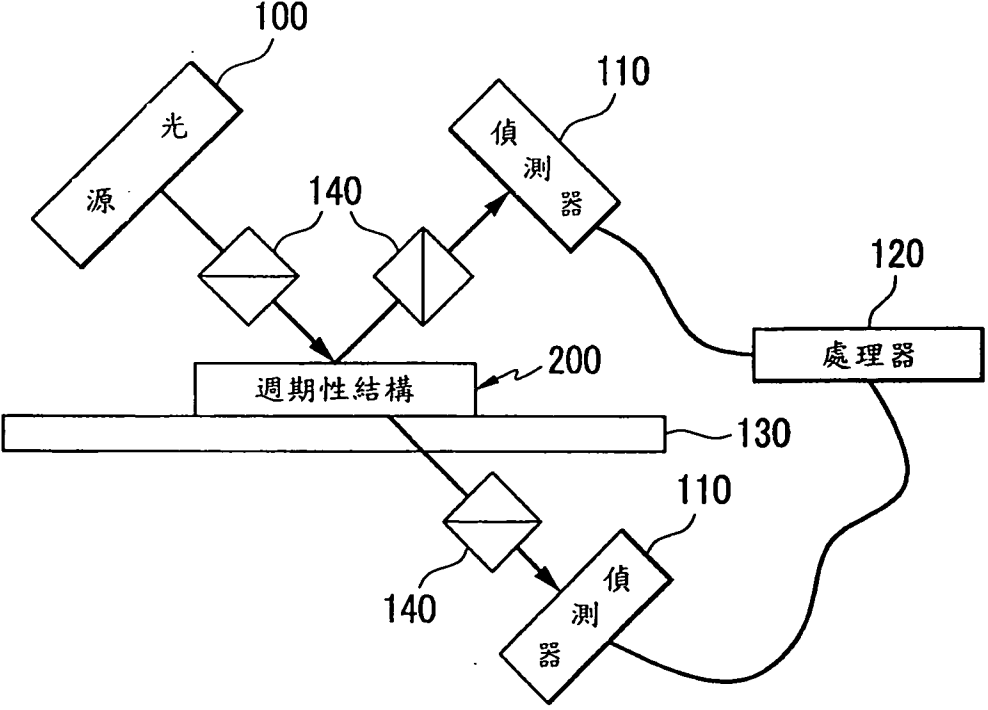
第 1 圖



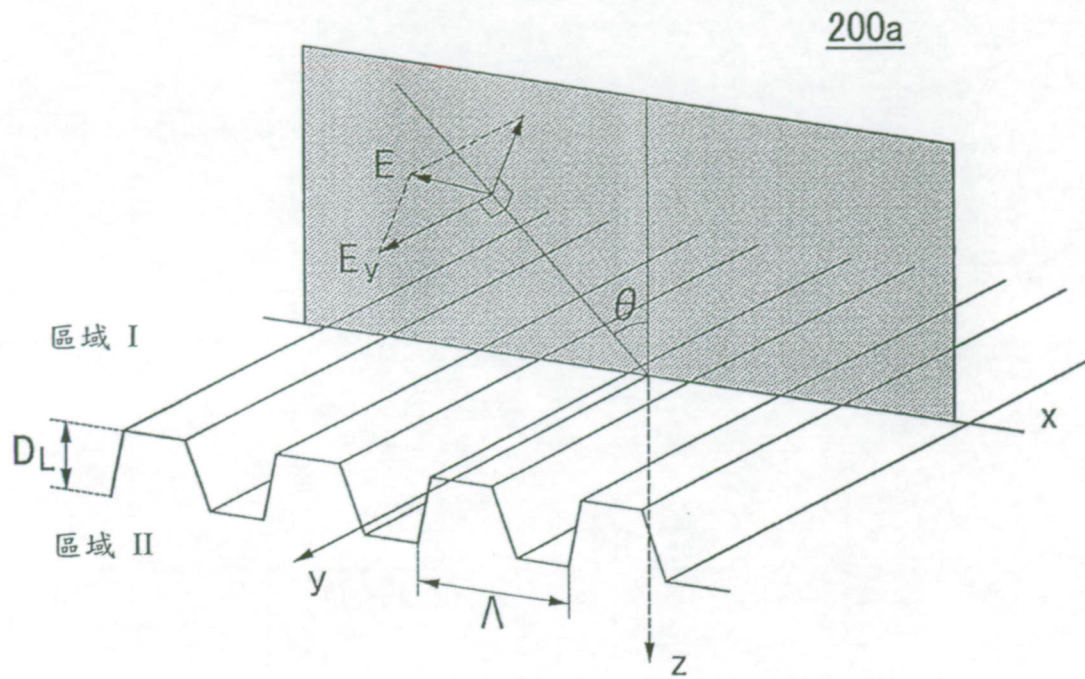
第 2 圖



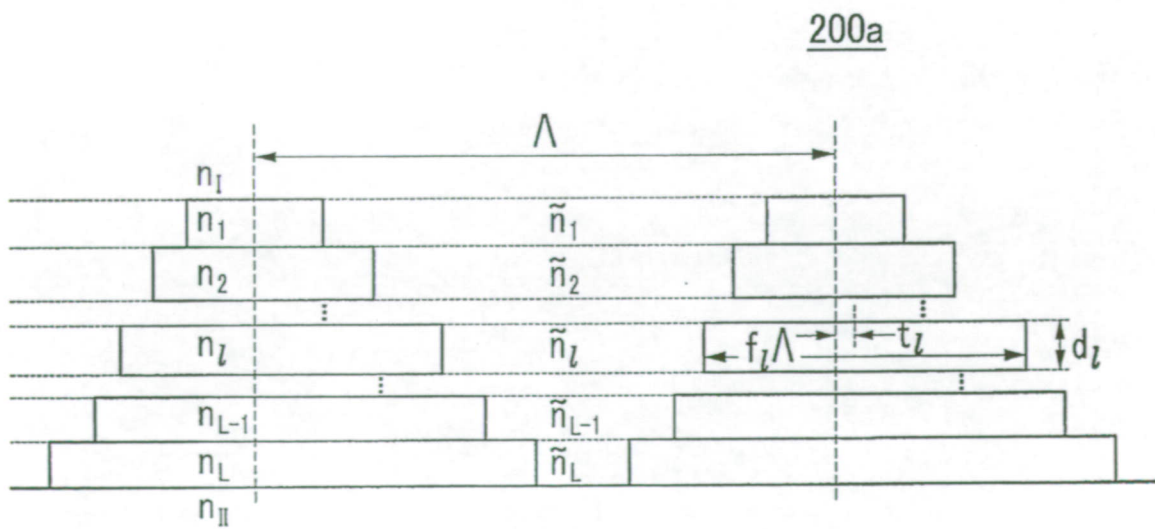
第 3 圖



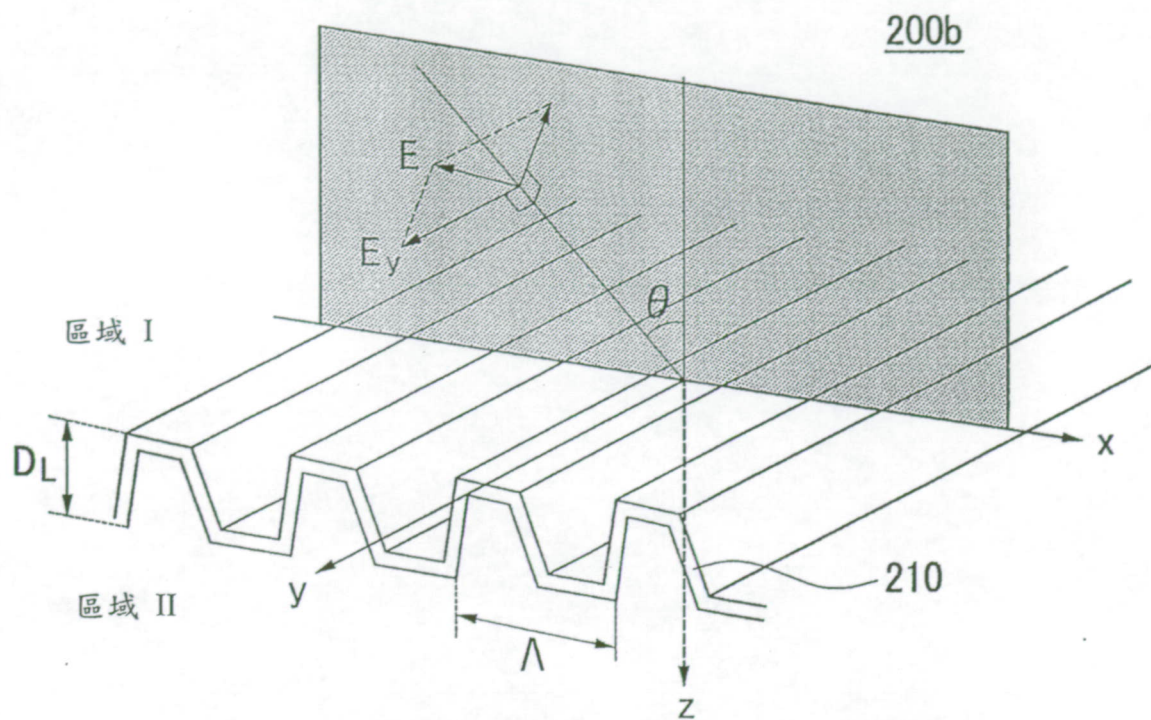
第 4 圖



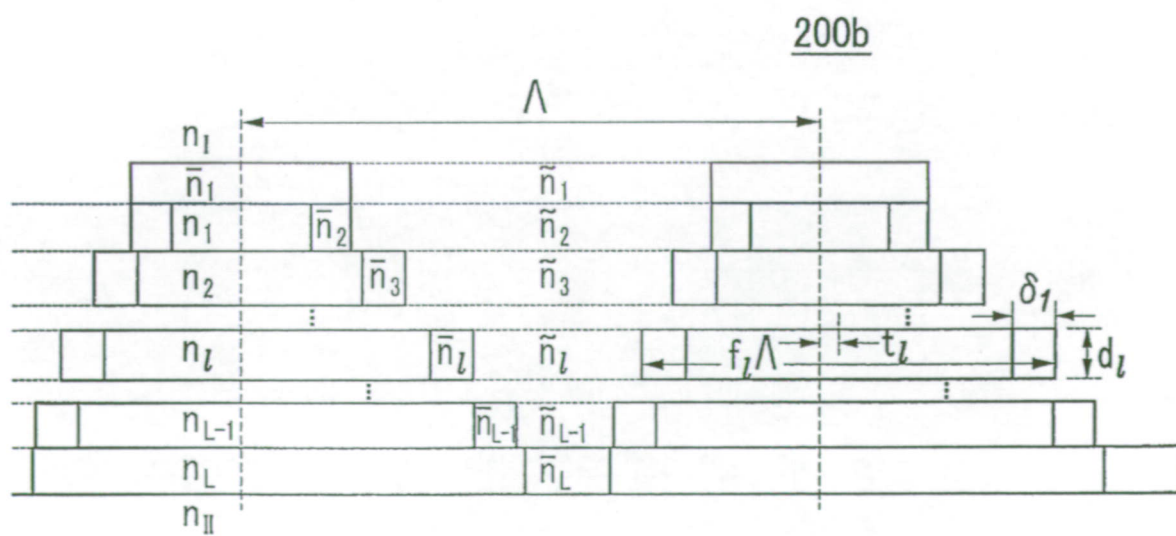
第 5 圖



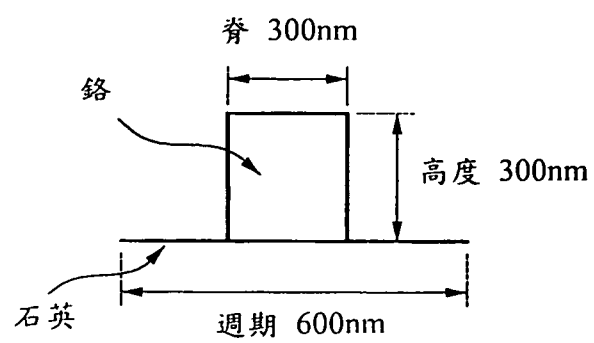
第 6 圖



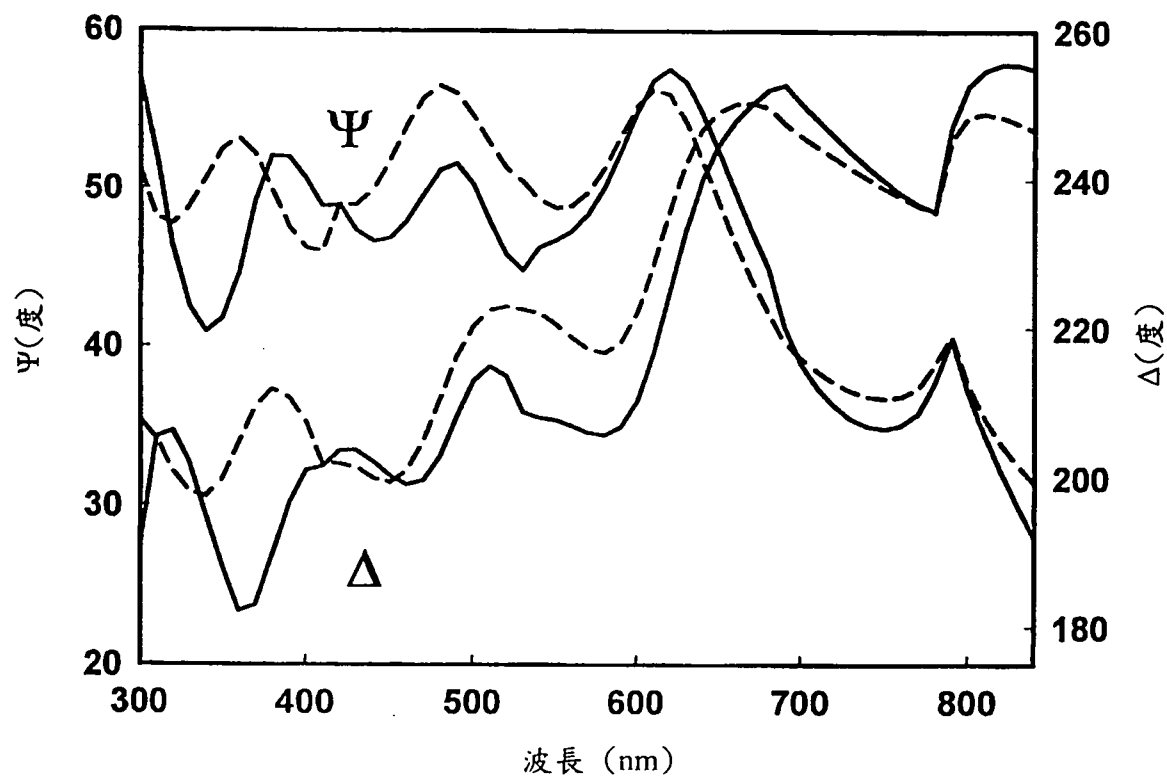
第 7 圖



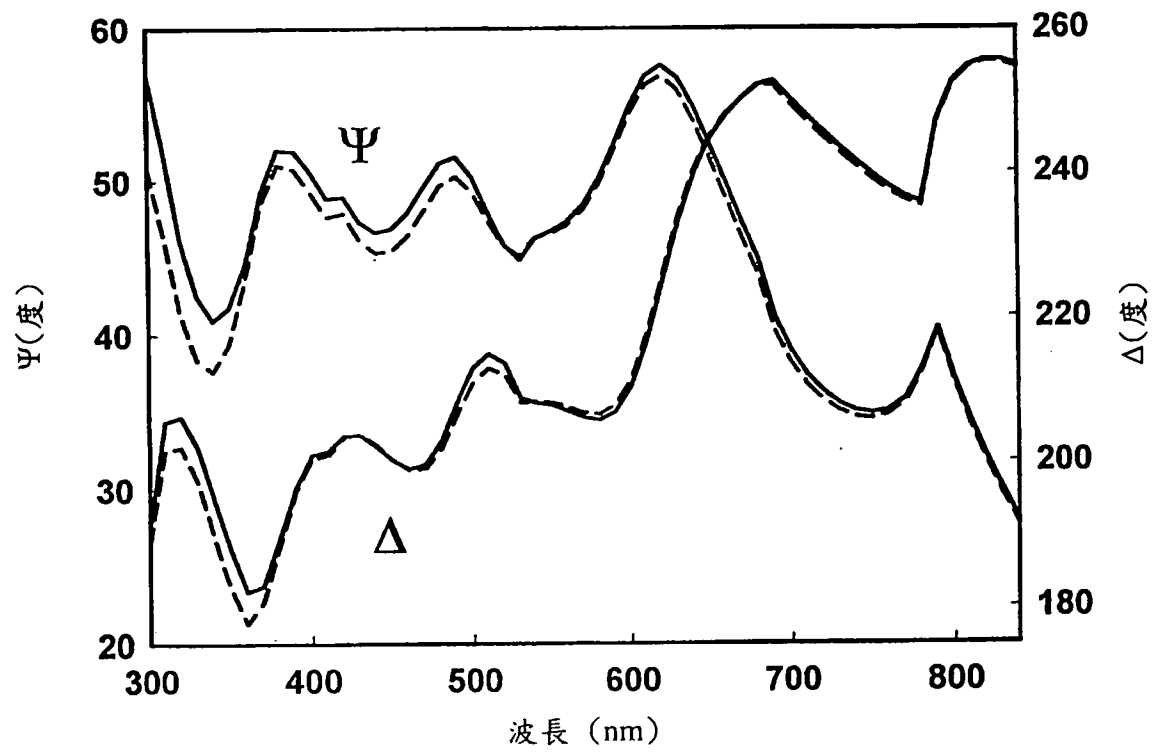
第 8 圖



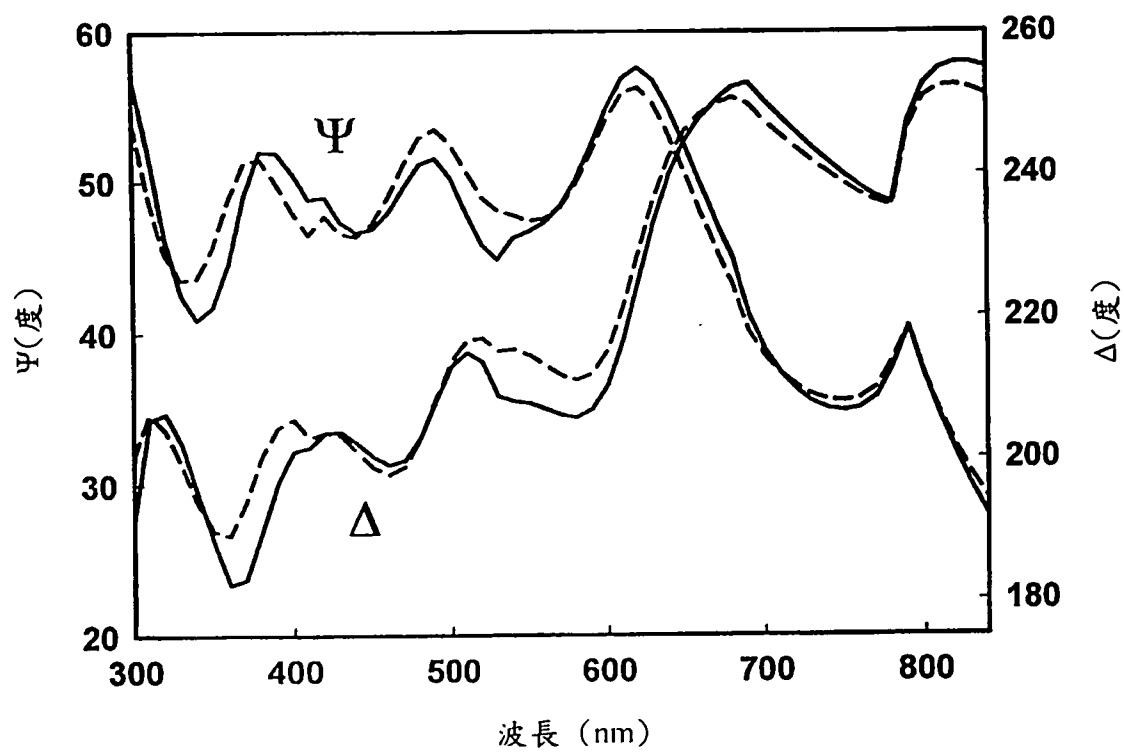
第 9 圖



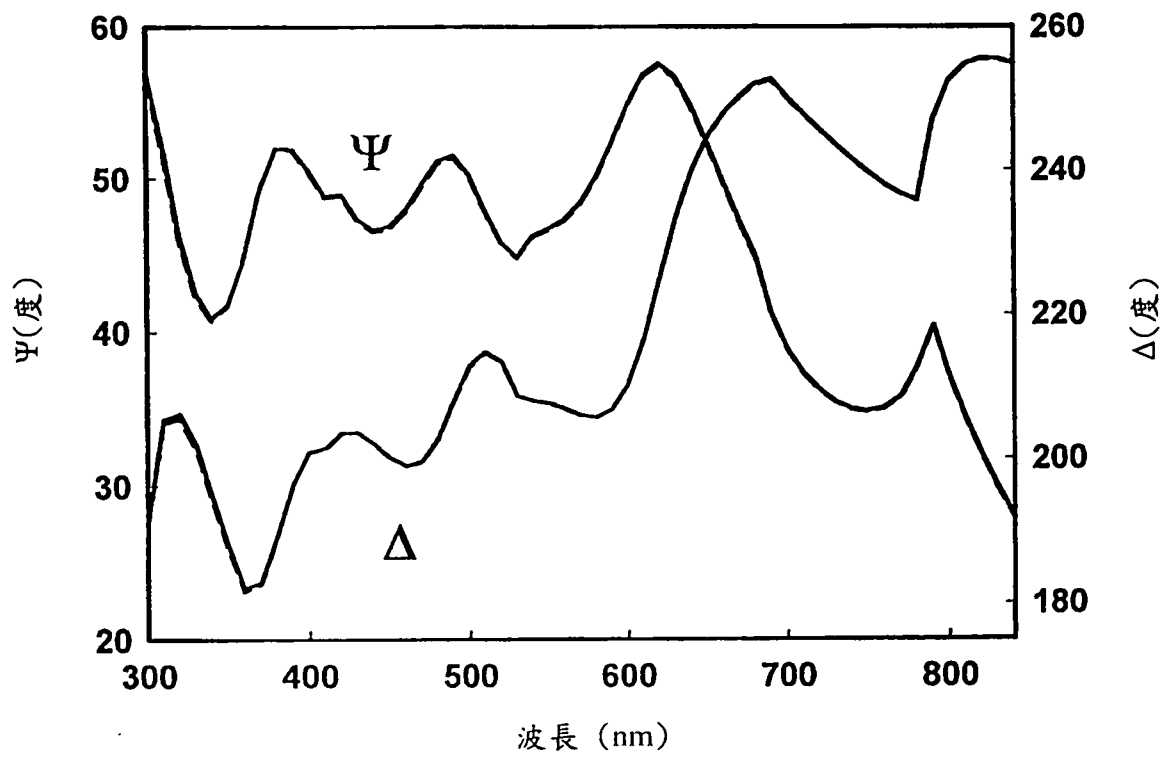
第 10 圖



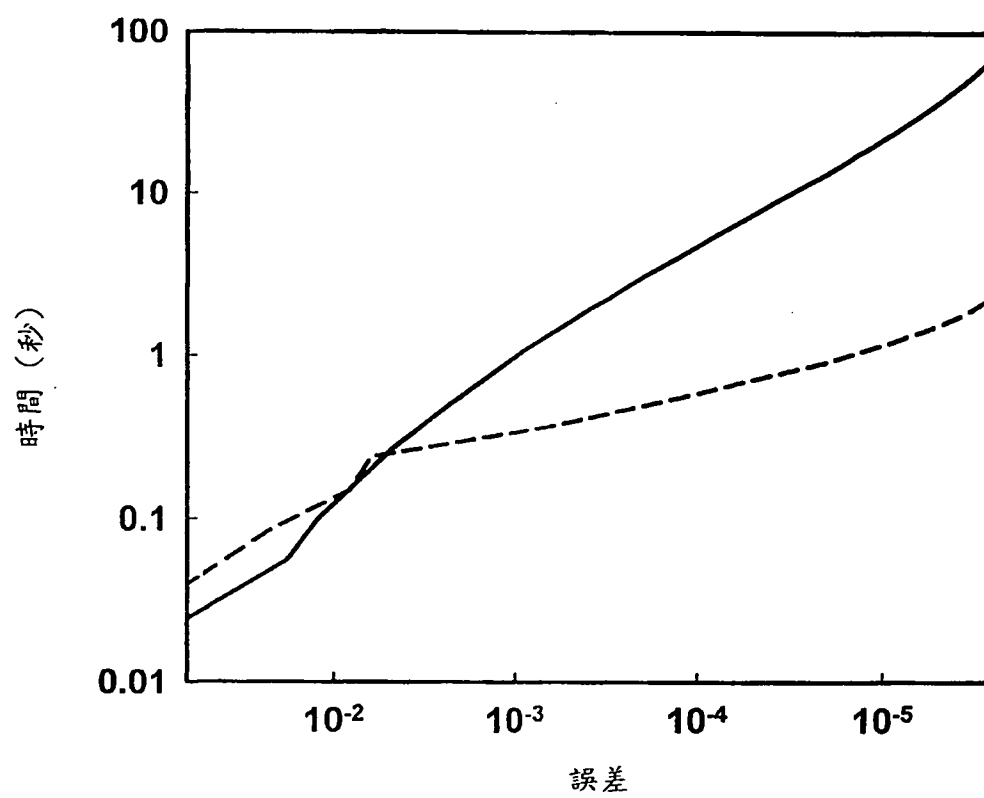
第 11 圖



第 12 圖



第 13 圖



第 14 圖

