

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 (43) 공개일자	10-2009-0013652 2009년02월05일
(51) Int. Cl. ⁹ G01N 21/59 (2006.01) G01N 21/00 (2006.01)	(21) 출원번호 10-2007-0104496 (22) 출원일자 2007년10월17일 심사청구일자 2007년10월17일 (30) 우선권주장 1020070077351 2007년08월01일 대한민국(KR)	(71) 출원인 경희대학교 산학협력단 경기도 용인시 기흥구 서천동 1 경희대학교 국제 캠퍼스내 (72) 발명자 김영동 서울 서초구 잠원동 대림아파트 1동 809호 한승호 경기 안산시 상록구 월피동 495-17 정진모 서울 노원구 상계3동 1293 불암 현대아파트 105-1201호 (74) 대리인 이익배	

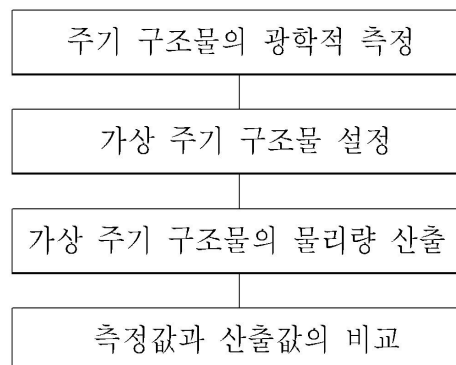
전체 청구항 수 : 총 7 항

(54) 다층 주기 구조물의 물리량 산출 방법

(57) 요약

주기 구조물의 새로운 비파괴 검사 방법을 제안한다. 주기 구조물의 실제 반사율 또는 투과율에 관계된 물리량을 측정하고, 가상 주기 구조물의 반사율 또는 투과율을 계산하여 해당 물리량을 산출한 다음 이것과 상기 측정된 물리량과 비교한다. 가상 주기 구조물을 영차(zero-th order) 구조물과 이 영차 구조물을 기하학적 또는 물리적으로 변화시킨 섭동된 주기 구조물을 얻고, 영차 구조물에 입사된 빛에 대한 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 산출하고, 상기 섭동영역에서의 영차 구조물의 그린함수를 구하고, 리프만-슈빙거 적분 방정식을 통해 상기 가상 주기 구조물의 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 구한다. 상기 가상 주기 구조물은 복수의 층으로 수평적으로 분할할 때, 분할된 구조물에서 중간층들은 적어도 세 가지 물질이 수평적으로 반복적인 주기를 갖는다.

대표도 - 도1



특허청구의 범위

청구항 1

(a) 광원에서 빔을 실제 주기 구조물에 입사시켜 상기 빔의 반사율, 투과율, 또는 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 측정하는 단계;

(b) 상기 빔이 가상 주기 구조물에 입사하였을 경우의 반사율 및 투과율을 계산하는 단계로서,

일차원, 이차원, 또는 삼차원적으로 반복적인 형태를 갖는 가상 주기 구조물을 설정하고,

상기 가상 주기 구조물을 복수의 층으로 수평적으로 분할하고,

분할된 층에서 중간층들은 적어도 세 가지 물질이 수평적으로 반복적인 주기로 형성되도록 설정하고,

상기 가상 주기 구조물을 구성하는 적어도 세 가지 물질의 굴절율을 이용하여 상기 가상 구조물의 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 산출하고,

(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 포함하며,

상기 (b) 단계에서 상기 가상 주기 구조물을 영차(zero-th order) 구조물과 이 영차 구조물을 접동영역에서 기하학적 또는 물리적으로 변화시킨 접동된 주기구조물로 구분하고, 영차 구조물에 입사된 빛의 대한 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 산출하고, 상기 접동 영역에서의 영차 구조물의 그린함수를 구하고, 리프만-슈빙거 적분 방정식을 통해 상기 가상 주기 구조물의 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 구하는 것을 특징으로 하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 (a) 단계에서 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 물리량이고, 상기 (b) 단계에서 산출된 반사율 및 투과율은 TE 모드 전기장의 입사파에 대한 반사파 및 투과파의 진폭 또는 위상, 및 TM 모드 자기장의 입사파에 대한 반사파 및 투과파의 진폭 또는 위상인 것을 특징으로 하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 3

제 1 항에 있어서, 상기 (b) 단계는 상기 가상 주기 구조물의 분할된 층에서의 유전율 함수를 푸리에(Fourier) 급수로 전개하고,

상기 가상 주기 구조물에 입사되는 빔의 입사파, 반사파 및 투과파를 전자기파의 평면파의 합으로 전개하고,

전개계수들의 경계 조건을 사용하여 상기 반사율 및 투과율을 산출하는 단계를 포함하는

주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 4

제 1 항에 있어서, 상기 가상 주기 구조물은 골(groove) 영역에 해당하는 제3물질을 사이에 두고 반복적인 주기로 형성된 마루(ridge) 영역을 포함하며, 이 마루 영역은 제1물질로 구성된 중심부와 제2물질로 구성되며 상기 중심부의 외면에 형성되는 표면층을 포함하는

주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 5

제 4 항에 있어서, 상기 표면층은 산화막 또는 코팅층인 것을 특징으로 하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 6

제 4 항에 있어서, 상기 제3물질은 기상, 액상, 또는 고상인 것을 특징으로 하는 주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

청구항 7

제 4 항에 있어서, 상기 (b) 단계는 상기 가상 주기 구조물의 분할된 층에서의 유전율 함수를 푸리에(Fourier) 급수로 전개하는 것을 포함하며,

상기 가상 주기 구조물의 각 층에서의 푸리에(Fourier) 급수 전개계수는, 마루 영역을 구성하는 제1물질 및 제2물질과 골영역을 구성하는 제3물질 각각의 복소 굴절률, 주기 Λ 에 대해서 분할된 층 l 의 상기 제1물질 및 제2물질이 차지하는 영역의 비율(f_l), 상기 제2물질만이 차지하는 비율($2\delta_l/\Lambda$) 및 분할된 층의 첫 번째 층의 중심에 대해서 층 l 의 중심이 x 축 방향으로 얼마나 떨어져 있는지를 나타내는 변수(t_l)를 사용하여 나타내는 것을 특징으로 하는

주기 구조물의 비파괴 검사 방법.

명세서

발명의 상세한 설명

기술 분야

<1> 본 발명은 주기 구조물의 검사 방법에 관한 것으로서, 실제로 측정된 빛의 반사율 및 투과율에 관계된 물리량과 계산에 의해 추정된 반사율 및 투과율에 관련된 물리량을 비교하여 주기 구조물의 형태를 측정하는 비파괴 검사 방법을 제공한다.

배경 기술

- <2> 일반적으로, 반도체 소자나 디스플레이 소자와 같은 전자 디바이스(device)를 제조하기 위해서는 세척, 박막성장, 포토 리소그래피 및 박막 에칭의 공정을 여러번 반복하여 최종적인 제품을 제조한다. 예를 들어, 포토 리소그래피 공정에서는 제조하고자 하는 이미지가 형성되어 있는 마스크의 회로를 감광성 물질에 전사하여 패턴을 형성하고 이를 에치 장벽(etch barrier)으로 이용하여 박막상에 원하는 회로를 형성하게 된다.
- <3> 이와 같이 포토 리소그래피 공정을 이용하여 제작되는 반도체 및 디스플레이 소자는 각 단계마다 원하는 회로가 박막으로 정확한 형태로 전사되어야 하며 이는 포토 리소그래피 작업의 정확성이 기반되어야만 가능하다. 즉 원하는 패턴의 모양이 감광성 레지스터로 정확하게 전사되고, 이 레지스트 막이 에치 장벽으로써 역할을 제대로 하여야만 정확한 회로를 박막에 형성할 수 있다. 즉 박막에 회로 형성을 하기 전에 정확한 패턴이 감광성 레지스터에 의해서 형성되어야만 하며, 이는 검사작업을 통하여 확인이 가능하다.
- <4> 패턴의 검사를 위하여 일반적으로 패턴검사기를 이용하여 광학적으로 반도체 소자의 형상을 관찰하는 방법이 사용되고 있으나 이는 나노 수준의 패턴을 검사하기에는 그 해상도가 부족하여 정확한 분석이 어렵다. 이러한 단점을 해결하기 위하여, 패턴 검사기를 이용하여 검사를 한 후, 전자현미경 등을 이용하여 구체적인 형상을 분석하는 방법이 반도체 연구 및 생산라인에서 이용되고 있다.
- <5> 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.
- <6> 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 있었다. 즉, 주기적인 구조를 갖는 회로의 각 패턴의 형성을 구체적으로 구별하지 못하고 그 비율만을 구별해 냄으로써 실제의 구조와 측정된 구조 사이의 차이가 크게 발생한다. 특히, 주기 구조물의 경우 유효

물질이론을 이용한 계산방법으로는 주기구조를 밝힐 수 없어 새로운 광학적 측정 방법이 절실히 요구되고 있다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

- <7> 본 발명은 이러한 기술적 배경하에서 창안된 것으로서, 본 발명의 목적은 주기 구조물의 구체적인 형태 및 내부 구성 성분을 분석할 수 있는 비파괴 검사 방법을 제공하는 것이다.
- <8> 본 발명의 다른 목적은 주기 구조물에 형성된 산화막이나 코팅층 등의 표면층을 고려하여 주기 구조물의 실제 형태를 정밀하게 측정할 수 있는 비파괴 검사 방법을 제공하는 것이다.

과제 해결수단

- <9> 상기 목적을 달성하기 위하여 본 발명은 먼저, 광원에서 빛을 실제 주기 구조물에 입사시켜 상기 빛의 반사율, 투과율, 또는 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 측정한다.
- <10> 또한, 본 발명은 가상 주기 구조물을 설정하고, 이 가상 주기 구조물에 빛이 입사하였을 경우의 반사율, 투과율, 또는 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 계산하여 상기 측정된 물리량과 비교한다.
- <11> 상기 가상 주기 구조물은 일차원, 이차원, 또는 삼차원의 기하학적으로 반복적인 형태를 가지며, 계산을 위해 상기 가상 주기 구조물을 복수의 층으로 수평적으로 분할한다. 분할된 가상 주기 구조물에서 중간층들은 적어도 세 가지 물질이 수평적으로 반복적인 주기를 갖는다.
- <12> 상기 가상 주기 구조물을 구성하는 적어도 세 가지 물질의 굴절율을 이용하여 상기 가상 구조물의 반사율 및 투과율과 그 관계된 물리량을 산출한 후, 실제 측정된 반사율 및 투과율과 그 관계된 물리량을 산출된 해당 물리량과 비교함으로써 실제 주기 구조물의 구조가 가상 주기 구조물과 일치하는지를 판단한다.
- <13> 본 발명에서는 상기 가상 주기 구조물을 영차(zero-th order) 구조물과 이 영차 구조물을 섭동영역에서 기하학적 또는 물리적으로 변화시킨 섭동 주기 구조물을 얻고, 영차 구조물에 입사된 빛에 대한 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 산출하고, 상기 섭동영역에서의 영차 구조물의 그린함수를 구하고, 리프만-슈빙거 적분 방정식을 통해 상기 가상 주기 구조물의 반사율 및 투과율과 관계된 물리량을 구한다.

효과

- <14> 본 발명에 따르면, 주기 구조물의 구조 및 내부 구성 성분을 비파괴적으로 검사할 수 있다.
- <15> 특히, 본 발명에 따르면, 주기 구조물에 자연적으로 형성되는 산화막이나 의도적으로 형성된 표면 코팅층 등을 포함한 미세 구조를 정밀하게 검사할 수 있어, 반도체 산업이나 기타 나노 기술의 발전에 크게 이바지할 수 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

- <16> 도 1은 본 발명에 따른 검사 방법을 개략적으로 도시한 순서도이다. 이와 같은 방법으로 주기 구조물의 구조 및 내부 구성 성분을 비파괴적으로 검사할 수 있다. 특히, 주기 구조물에 자연적으로 형성되는 산화막이나 의도적으로 형성된 표면 코팅층 등을 포함한 미세 구조를 정밀하게 검사할 수 있다.
- <17> 주기 구조물의 측정
- <18> 도 2 및 도 3은 주기 구조물의 검사 장치를 개략적으로 도시한 모식도이다. 도 2를 참조하면, 검사 장치는 광원(100), 검출기(110) 및 프로세서(120)를 포함한다. 기판(130)에 검사 대상인 주기 구조물(200)이 위치할 경우, 광원(100)은 주기 구조물(200)에 특정 파장 또는 여러 파장을 갖는 빛을 조사한다. 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.
- <19> 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.
- <20> 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.

<21> 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.

<22> 가상 주기 구조물

<23> 도 4는 가상 주기 구조물의 기하학적 구조를 도시한 사시도이고, 도 5는 도 4의 가상 주기 구조물의 단면을 복수의 층으로 나눈 상태를 도시한 것이다.

<24> 상기 주기 구조물(200a)을 예를 들어 1차원, 2차원, 또는 3차원의 주기구조의 형태를 갖는 반도체 소자라고 가정하면, 상기 가상 주기 구조물(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 두 가지 물질이 수평적으로 주기적인 구조를 갖는다.

<25> 그러나 반도체 공정 등의 실제 환경에서는, 주기 구조물을 완벽한 진공 상태에서 제조하지 못하기 때문에 실제 주기 구조물의 표면에는 공기 또는 수분과의 접촉에 의해 산화막이 형성된다. 또한, 공정단계에서 주기 구조물의 표면에 의도적인 코팅층을 형성하거나, 주기 구조물 표면에 거칠기층(roughness layer)이 존재하여 실제의 기하학적 형태를 추정하는데 도 4의 주기 구조물은 한계가 있다.

<26> 도 6은 본 발명에 따른 가상 주기 구조물(200b)의 기하학적 구조를 도시한 것이다. 이러한 가상 주기 구조물(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 주기 구조물(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

n_l ($l = 2, \dots, L$), $\tilde{n}_l$ ($l = 1, \dots, L-1$), 및 $\bar{n}_l$ ($l = 1, \dots, L$)
포함한다. 도 7에서 n_l ($l = 2, \dots, L$), $\tilde{n}_l$ ($l = 1, \dots, L-1$), 및 $\bar{n}_l$ ($l = 1, \dots, L$)는 층 l 에서 마루(ridge) 영역(제1물질), 골(groove) 영역(제3물질), 표면층 영역(제2물질)을 각각 나타낸다.

<27> 상기 표면층(제2물질)은 산화막 또는 코팅층일 수 있으며, 경우에 따라서는 주기 구조물 표면의 거칠기층일 수도 있다. 상기 골 영역에 해당하는 제3물질은 기상, 액상, 또는 고상일 수 있다.

<28> 예를 들어, 상기 가상 주기 구조물(200b)을 반도체 소자로 가정하면, 직사각형 단면의 구조의 복수 층(1 내지 L)에서, 최상부층(제1층)을 제외하고, 중간에 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.

<29> 이와 같이 산화막이나 코팅층, 또는 표면의 거칠기층 등의 표면층(210)을 고려하여 가상 주기 구조물(200b)을 설정하게 되면 가상 구조물의 반사율 및 투과율을 실제 주기 구조물과 더욱 근사하게 산출할 수 있다. 따라서, 나노 수준의 미세 주기 구조물의 구조 및 성분을 매우 정확하게 측정할 수 있다. 구체적으로는 주기 구조의 기하학적인 외관 형태 및 내부 구성 성분, 그 아래에 존재하는 박막 구조들의 두께까지 비교 분석할 수 있다.

<30> 가상 주기 구조물의 물리량 산출

<31> 본 발명에서는 가상 주기 구조물의 물리량을 산출하기 위해서 가상 주기 구조물의 한 형태를 가정하여 영차 구조물(zero-th order periodic structure)로 정의하고, 이 영차 구조물을 섭동영역에서 기하학적 또는 물리적 변화를 가한 섭동된 주기 구조물(perturbed periodic structure)을 얻는다.

<32> 영차 구조물에 대한 빛의 반사율 및 투과율, 섭동영역에서의 영차 구조물의 그린함수(Green's function)를 계산하고, 리프만-슈빙거 적분방정식 (Lippmann-Schwinger Equation)을 반복법(iteration)으로 풀어서, 이들 결과로부터 섭동된 주기 구조물의 반사율, 투과율, 또는 반사율 및 투과율에 관계된 물리량을 구한다.

<33> 영차 구조물에 대한 빛의 반사율 및 투과율은 맥스웰 방정식에 주기조건을 더한 계산을 통하여 추정할 수 있다. 이를 위하여, 도 7에 도시된 바와 같이 가상 주기 구조물(200b)을 직사각형 단면 형태의 복수의 층(1 내지 L)으로 나눈다.

- <34> 이어서, 가상 주기 구조물의 분할된 층에서의 유전율 함수를 푸리에(Fourier) 급수로 전개한다. 가상 주기 구조물(200b)에 빛이 입사한다고 가정할 때, 입사파, 반사파, 투과파의 전자기파를 평면파의 합으로 두고, 각 층에서의 맥스웰 방정식의 해를 고유함수 모드의 합으로 전개하여 그 전개계수들을 경계치 조건을 사용하여 결정한다.
- <35> 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($\rho_{TE}^{[0]}$ 및 $\rho_{TM}^{[0]}$) 및 투과율($\tau_{TE}^{[0]}$ 및 $\tau_{TM}^{[0]}$)을 계산한다.
- <36> 이때, 가상 주기 구조물(200b)에서 분할된 층의 수와 푸리에 급수 전개항의 항의 수를 크게 하면 보다 정밀한 해를 얻을 수 있다.
- <37> 상기 가상 주기 구조물의 각 층에서의 푸리에(Fourier) 급수 전개계수는, 마루 영역을 구성하는 제1물질 및 제2물질과 골영역을 구성하는 제3물질 각각의 복소 굴절률, 주기 Λ 에 대해서 분할된 층 l 의 상기 제1물질 및 제2물질이 차지하는 영역의 비율(f_l), 상기 제2물질만이 차지하는 비율($2\delta_l/\Lambda$) 및 분할된 층의 첫 번째 층의 중심에 대해서 층 l 의 중심이 x 축 방향으로 얼마나 떨어져 있는지를 나타내는 변수(t_l)를 사용하여 나타낼 수 있으며, 이에 대해서는 후술한다.
- <38> 섭동 영역에서의 영차 구조물의 그린함수도 상기 영차 구조물의 투과율 또는 반사율을 계산하는 방법을 적용하여 구할 수 있다.
- <39> 리프만-슈빙거 적분방정식을 통하여 섭동 영역의 각 층에서 TE 모드 전기장과 TM 모드 자기장의 결합과 전개계수를 계산한 다음, 이들을 사용하여 섭동된 구조물에 의한 반사율(ρ_{TE} 및 ρ_{TM}) 및 투과율(τ_{TE} 및 τ_{TM})을 각각 계산한다.
- <40> 본 발명에서는 입사 매질(영역 I)과 기판(영역 II) 사이의 주기 구조물을 L 층으로 나누는데 일부 또는 전체의 층이 균일한 물질로 이루어진 것을 포함한다. 섭동 영역 전체의 층 모두가 각 층 대로 균일한 물질로 이루어진 경우는 다층 Ga 구조, 모든 층이 하나의 균일한 물질로 이루어진 경우는 단층 Ga 구조, 섭동 영역을 기판 위의 공기층으로 두는 경우는 G0 구조로 정의하고, 각 층이 균일한 물질은 아니면서 모든 층이 주어진 층 하나의 반복으로 이루어진 경우는 단층 G1 구조로 정의할 수 있다.
- <41> 본 발명에서는 후술하는 바와 같이 특히 표면층이 존재하는 주기 구조물을 고려하여 상기 G0, Ga, G1 구조에 대한 구체적인 계산 결과를 제공한다.
- <42> 측정값과 산출값의 비교
- <43> 주기 구조물의 실제 측정된 반사율 및 투과율 또는 그와 관계된 물리량과 가상 주기 구조물의 산출된 반사율 및 투과율 또는 그와 관계된 물리량을 비교하여, 일정 오차 범위 이내에서 동일할 경우, 실제 주기 구조물의 구조가 가상 주기 구조물(200b)의 구조와 일치한다고 판단할 수 있다.
- <44> 측정된 반사율 및 투과율과 산출된 반사율 및 투과율을 비교함에 있어서, 컴퓨터 등의 별도 장치를 이용할 수 있으며 측정값과 산출값의 비교를 위한 소프트웨어를 이용할 수도 있을 것이다. 이와 같은 방법으로 주기 구조물(200)의 실제 구조를 정밀하게 검사할 수 있다.
- <45> 주기 구조물의 측정 실험에서는 반사율(R)과 투과율(T)에 관련된 다양한 물리량을 측정할 수 있으며, 측정된 물리량과 관련된 추정값을 수학적 방법에 따라 계산된 반사율(R)과 투과율(T)을 사용하여 얻을 수 있다.
- <46> 실시예
- <47> 본 발명의 일실시예로서, 도 8에서와 같이 표면층이 형성된 가상 주기 구조물을 설정하였다. 이 주기 구조물은 60nm의 반복적인 주기를 가지며, 실리콘 결정으로 이루어진 마루 영역의 두께가 45nm이고, 마루 영역 표면에 산화물이 5nm 두께로 형성되어 있으며, 마루의 기울기는 81° 인 경우로 설정하였다.
- <48> 이러한 가상 주기 구조물의 기울기, 주기와 마루의 폭 및 높이는 임의의 값으로 얼마든지 변경 가능하다. 또한, 그 기하학적인 형태도 임의의 모양을 가질 수 있다.
- <49> 이와 같은 가상 주기 구조물에 대하여 본 발명에 따른 방법을 이용하여 실제 주기 구조물의 측정값과 비교 가능

한 물리량들을 산출하였다.

<50> 도 9 및 도 10은 TE 모드 및 TM 모드에서 도 8에서와 같이 산화막을 고려한 가상 주기 구조물과 산화막을 고려하지 않은 가상 주기 구조물의 반사율을 계산한 결과를 도시한 그래프들이다. 즉, 가상 주기 구조물이 산화막을 고려한, 즉 산화막이 도포된 실리콘으로 이루어진 경우와 산화막을 고려하지 않은, 즉 순수 실리콘으로 이루어진 경우를 가정하여 입사 파장에 대한 TE 모드와 TM 모드에서의 반사율을 계산한 것이다.

<51> 도시된 결과에 따르면, 순수 실리콘의 반사율과 산화막이 도포된 실리콘의 반사율의 계산값에 차이가 상당히 존재함을 확인할 수 있다. 즉, 산화막 등의 표면층의 존재를 가정했는지 유무에 따라 가상 주기 구조물이 실제 주기 구조물에 근접하는 정도가 크게 달라진다. 따라서, 산화막 등의 표면층이 형성되어 있는 실제 주기 구조물의 구조를 측정하는 경우, 가상 주기 구조물을 순수 실리콘으로만 이루어진 것으로 가정하여 계산하는 경우에는 절대로 실제 주기구조물과 일치하는 계산값을 구해낼 수가 없으며 산화막이 도포된 실리콘으로 가정하여 계산하는 경우에만 실제 주기 구조물과의 일치하는 정도를 증가시킬 수 있음이 자명하다.

<52> 도 11 및 도 12는 도 9 및 도 10의 계산 결과로부터 일반적인 타원편광분석기(ellipsometry)에서 측정하는 물리량들을 추출한 결과를 도시한 그래프이다. 이 그래프들은 본 발명에 따라 산출된 결과로부터 다양한 물리량들을 얻을 수 있음을 보여주고 있으며, 구체적으로는 TM모드(Rp)와 TE모드(Rs)의 반사율의 비의 크기와 위상을 일반적인 타원편광분석법에서 측정하는 물리량들 (ψ , Δ)로 계산한 결과를 도시하고 있다. 이 그래프들의 결과에서도, 순수 실리콘으로 이루어진 가상 주기 구조물과 산화막이 도포된 실리콘으로 이루어진 가상 주기 구조물의 분석 결과에 큰 차이가 있음을 확인할 수 있다. 이와 같이, 반사율 또는 투과율로부터 다양한 물리량을 추출하여 실제 주기 구조물의 구조와 비교할 경우, 산화막의 존재를 고려하여 가상 주기 구조물의 구조를 가정할 경우에 보다 정확한 구조를 예측할 수 있다.

<53> 이하에서는 도 6 및 도 7에 도시된 가상 주기 구조물(200b)의 반사율 및 투과율을 계산하는 과정에 대해 상술한다.

I. 리프만-슈빙거 방정식: TE 모드

<55> 주기 구조물의 x 축 방향 주기성에 의하여 맥스웰(Maxwell) 방정식의 TE 모드 해는,

<56> 식 (1):

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

<57>

<58> 식 (2):

$$H_x(x, z) = i \left(\frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_{xn}(z) e^{ik_{xn}x}$$

<59>

<60> 로 나타낼 수 있다. 여기서 $i = \sqrt{-1}$ 이고, 플로케(Floquet) 조건에 의해 $k_{xm} = k_0 [n_I \sin \theta - n(\lambda_0/\Lambda)]$, $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ 이고, λ_0 는 진공에서의 입사파의 파장이며, n_I 는 입사영역의 굴절율이며, θ 는 입사각이다. 또한, ϵ_0 는 진공의 유전율이며, μ_0 는 진공의 투자율이다.

<61> x 축 방향으로 주기 Λ 를 갖는 주기가 1차원인 주기구조의 유전율 함수 $\epsilon^{(j)}(x, z)$ 를 푸리에(Fourier) 급수로 다음과 같이 전개할 수 있다.

<62> 식 (3):

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

<63>

<64> 맥스웰 방정식으로부터 식 (1)의 $S_{yn}(z)$ 와 식 (2)의 $U_{xn}(z)$ 는 다음과 같이 결합되어 있다.

<65> 식 (4):

$$\begin{bmatrix} (1/k_0)\partial \mathbf{S}_y(z)/\partial z \\ (1/k_0)\partial \mathbf{U}_x(z)/\partial z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \mathbf{A}(z) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{S}_y(z) \\ \mathbf{U}_x(z) \end{bmatrix}$$

<66>

<67> 여기서, I 는 크기가 $2N+1$ 인 단위행렬이고,

<68> 식 (5):

$$\mathbf{A}(z) \equiv \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}(z)$$

<69>

<70> 이며, $\mathbf{K}_x$ 는 (n,n) 원소가 k_{xn}/k_0 인 대각행렬이며, E_I 은 (n,p) 원소가 $E_{np}(z) = \varepsilon_{(n-p)}(z)$ 인 유전율 조화 성분으로 만들어지는 행렬이다.

<71> 이하, 결합파 기저(coupled-wave basis)를 나타내는 첨자의 범위를 $-N$ 에서 N 까지로 제한할 것이다.

<72> 식 (4)에 있는 두 1차 미분방정식을 결합하면,

<73> 식 (6):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathbf{A}(z) \right] \mathbf{S}_y(z) = 0$$

<74>

<75> 이 얻어진다.

<76> 영차 주기구조물에 대한 방정식을 첨자 [0]을 사용하여 나타내면 유사한 식,

<77> 식 (7):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathbf{A}^{[0]}(z) \right] \mathbf{S}_y^{[0]}(z) = 0$$

<78>

<79> 을 얻으며, 이에 대응하는 그린 함수는,

<80> 식 (8):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathbf{A}^{[0]}(z) \right] \mathbf{G}(z, z') = -\delta(z - z') \mathbf{I}$$

<81>

<82> 로 나타낼 수 있다.

<83> 표준적인 방법에 따라 식 (6), 식 (7), 식 (8)을 결합하면 하기의 리프만-슈빙거(Lippmann-Schwinger) 방정식이 얻어진다.

<84> 식 (9):

$$\mathbf{S}_y(z) - \mathbf{S}_y^{[0]}(z) = \int dz' \mathbf{G}(z, z') \mathbf{Y}(z') \mathbf{S}_y(z')$$

<85>

<86> 여기서, $\mathbf{Y}(z) \equiv \mathbf{E}(z) - \mathbf{E}^{[0]}(z)$ 이다. 식 (9)에서 섭동 영역 밖에서는 $\mathbf{Y}(z) = \mathbf{0}$ 이므로 적분영역은 섭동 영역으로 제한된다.

<87> II. $\mathbf{S}_y^{[0]}(z)$ 의 계산

<88> 이 절에서는 영차 주기구조에서의 관련 양을 나타내는 첨자 [0]을 생략한다.

A. 주기구조 영역의 층 나누기

산화막, 코팅막 또는 표면층이 있는 주기구조를 공통의 주기 Λ 를 갖는 평행한 직사각형 모양의 층이 쌓인 것으로 근사한다. 이렇게 함으로써 유전율 함수 $\varepsilon(\mathbf{x}, z)$ 의 z 의존성은 층을 나타내는 지수 l 에게 전가된다. 그러면 주어진 층 l 에서의 유전율 함수는 $\varepsilon^{(l)}(\mathbf{x})$ 로 나타나고 다음과 같이 표현될 수 있다.

식 (10):

$$\varepsilon^{(l)}(\mathbf{x}) = \sum_h \varepsilon_h^{(l)} e^{i2\pi h \mathbf{x} / \Lambda}$$

식 (10)에서의 전개계수 $\varepsilon_h^{(l)}$ 은 각 층에서 다음과 같이 주어진다.

$l=1$:

식 (11):

$$\varepsilon_0^{(1)} = \bar{n}_1^2 f_1 + \tilde{n}_1^2 (1 - f_1)$$

식 (12):

$$\varepsilon_h^{(1)} = (\bar{n}_1^2 - \tilde{n}_1^2) \frac{\sin(\pi h f_1)}{\pi h}$$

$l=2$ 부터 $L-1$ 까지:

식 (13):

$$\varepsilon_0^{(l)} = \left[(n_l^2 - \tilde{n}_l^2) f_l + (\bar{n}_l^2 - \tilde{n}_l^2) \frac{2\delta_l}{\Lambda} + \tilde{n}_l^2 \right] e^{-i2\pi t_l / \Lambda}$$

식 (14):

$$\varepsilon_h^{(l)} = \frac{1}{\pi h} \left[(\bar{n}_l^2 - \tilde{n}_l^2) \sin(\pi h f_l) + (n_l^2 - \tilde{n}_l^2) \sin\left(\pi h f_l - \frac{2\pi h \delta_l}{\Lambda}\right) \right] e^{-i2\pi t_l / \Lambda}$$

$l=L$:

식 (15):

$$\varepsilon_0^{(l)} = \left[n_L^2 \left(f_{L-1} - \frac{2\delta_{L-1}}{\Lambda} \right) + \bar{n}_L^2 \left(1 - f_{L-1} + \frac{2\delta_{L-1}}{\Lambda} \right) \right] e^{-i2\pi t_{L-1} / \Lambda}$$

식 (16):

$$\varepsilon_h^{(l)} = \frac{1}{\pi h} (n_L^2 - \bar{n}_L^2) \sin \left[\pi h \left(f_{L-1} - \frac{2\delta_{L-1}}{\Lambda} \right) \right] e^{-i2\pi t_{L-1} / \Lambda}$$

여기서, $n_l (l = 2, \dots, L)$, $\tilde{n}_l (l = 1, \dots, L-1)$ 및 $\bar{n}_l (l = 1, \dots, L)$ 는 층 l 에서 마루(ridge) 영역, 골(groove) 영역, 표면층 영역에서 각각의 복소수 굴절율을 나타내며, f_l 은 주기 Λ 에 대해서 층 l 의 마루 영역과 표면층 영역이 차지하는 영역의 비율이며, $2\delta_l / \Lambda$ 는 표면층 영역만이 차지하는 비율이며, t_l (단, $t_1 = t_2 = 0$) 은 제1층의 중심에 대해서 층 l 의 중심이 x 축 방향으로 얼마나 떨어져 있는지를 나타내는 변수이다.

상기 층 나누기에서 일부 또는 전체의 층이 균일한 물질로 이루어진 것을 포함한다. 전체의 층 모두가 각 층 대

로 균일한 물질로 이루어진 경우는 상술한 바와 같이, 다층 Ga 구조이며, 모든 층이 하나의 균일한 물질로 이루어진 경우는 단층 Ga 구조이다. 또한 각 층이 균일한 물질은 아니면서 모든 층이 주어진 층 하나의 반복으로 이루어진 경우는 단층 G1 구조이다. 특히, 도 6의 영역 II가 공기층일 수도 있다.

영역 I 과 II에서 전기장과 자기장의 해는 플로케(Floquet) 조건에 의해 다음과 같이 나타낼 수 있다.

식 (17):

$$E_y^{(0)}(x, z) = \sum_{n=-N}^N S_{yn}^{(0)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

식 (18):

$$H_x^{(0)}(x, z) = i \left(\frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-N}^N U_{xn}^{(0)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

식 (19):

$$E_y^{(L+1)}(x, z) = \sum_{n=-N}^N S_{yn}^{(L+1)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

식 (20):

$$H_x^{(L+1)}(x, z) = i \left(\frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-N}^N U_{xn}^{(L+1)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

여기서,

식 (21):

$$S_{yn}^{(0)}(z) = \delta_{0n} e^{ik_{1,zn}z} + \rho_n e^{-ik_{1,zn}z}$$

식 (22):

$$U_{xn}^{(0)}(z) = \delta_{0n} (ik_{1,zn}/k_0) e^{ik_{1,zn}z} - \rho_n (ik_{1,zn}/k_0) e^{-ik_{1,zn}z}$$

식 (23):

$$S_{yn}^{(L+1)}(z) = \tau_n e^{ik_{II,zn}(z-z_L)}$$

식 (24):

$$U_{xn}^{(L+1)}(z) = \tau_n (ik_{II,zn}/k_0) e^{ik_{II,zn}z}$$

식 (25):

$$k_{\ell,zn} = \begin{cases} k_0[n_\ell^2 - (k_{xn}/k_0)^2]^{1/2} & \text{for } k_0 n_\ell > k_{xn} \\ ik_0[(k_{xn}/k_0)^2 - n_\ell^2]^{1/2} & \text{for } k_{xn} > k_0 n_\ell; \quad \ell = \text{I, II} \end{cases}$$

이며, "I" 과 "II" 는 입사 매질과 기판의 복소수 굴절율이다. 식 (21)의 우변의 첫째 항은 입사파를 나타낸다.

주기구조영역($L=1$ 부터 L 까지)에서의 전기장과 자기장을 푸리에(Fourier) 급수 전개에 의해 다음과 같이 결합 파 기저로 전개할 수 있다.

<133> 식 (26):

$$E_y^{(l)}(x, z) = \sum_{n=-N}^N S_{yn}^{(l)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

<134>

<135> 식 (27):

$$H_x^{(l)}(x, z) = i \left(\frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-N}^N U_{xn}^{(l)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

<136>

<137> 식 (7)을 층 l 에 적용하면 식 (26)의 $S_{ym}^{(l)}$ ($m = -N$ 부터 N 까지)들이 만족해야 할 방정식,

<138> 식 (28):

$$(1/k_0^2) \partial^2 S_y^{(l)}(z) / \partial z^2 = \mathbf{A}_l S_y^{(l)}(z)$$

<139>

<140> 를 얻으며, 여기서,

<141> 식 (29):

$$\mathbf{A}_l \equiv \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}_l$$

<142>

<143> 이며, $\mathbf{E}_l$ 의 (n, p) 원소는 $E_{lnp} = \epsilon_{(n-p)}^{(l)}$ 으로 주어진다.

<144> 식 (28)의 해 $S_y^{(l)}(z)$ 와 $U_x^{(l)}(z)$ 를 다음과 같이 적을 수 있다.

<145> 식 (30):

$$\mathbf{S}_y^{(l)}(z) = \mathbf{W}_l [e^{-k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_l + e^{k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_l]$$

<146>

<147> 식 (31):

$$\mathbf{U}_x^{(l)}(z) = \mathbf{V}_l [-e^{-k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_l + e^{k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_l]$$

<148>

<149> 여기서, $\mathbf{W}_l$ 은 $\mathbf{A}_l$ 의 $(2N+1)$ 개의 고유벡터들로 만들어지는 정방행렬이며, $\mathbf{Q}_l$ 은 $\mathbf{A}_l$ 의 $(2N+1)$ 개의 고유값의 양의 제곱근을 원소로 갖는 대각행렬이며, $\mathbf{V}_l = \mathbf{W}_l \mathbf{Q}_l$ 이다. $\mathbf{f}_l$ 과 $\mathbf{g}_l$ 은 경계조건의 적용에 의해 정해져야 하는 열벡터이다. z_{l-1} 은 층 $l-1$ 과 층 l 의 경계면의 z 좌표값이다.

<150> 식 (21), 식 (22), 식 (23), 식 (24)에 있는 결합파 기저의 성분들은 다음과 같이 행렬형태로 적을 수 있다.

<151> 식 (32):

$$\mathbf{S}_y^{(0)}(z) = \mathbf{W}_0 [e^{-k_0 \mathbf{Q}_0 z} \mathbf{f}_0 + e^{k_0 \mathbf{Q}_0 z} \mathbf{g}_0]$$

<152>

<153> 식 (33):

$$\mathbf{U}_x^{(0)}(z) = \mathbf{V}_0 [-e^{-k_0 \mathbf{Q}_0 z} \mathbf{f}_0 + e^{k_0 \mathbf{Q}_0 z} \mathbf{g}_0]$$

<154>

<155> 식 (34):

$$\mathbf{S}_y^{(L+1)}(z) = \mathbf{W}_{L+1} [e^{-k_0 \mathbf{Q}_{L+1}(z-z_L)} \mathbf{f}_{L+1} + e^{k_0 \mathbf{Q}_{L+1}(z-z_L)} \mathbf{g}_{L+1}]$$

<156>

<157> 식 (35):

<158>
$$\mathbf{U}_x^{(L+1)}(z) = \mathbf{V}_{L+1}[-e^{-k_0 \mathbf{Q}_{L+1}(z-z_L)} \mathbf{f}_{L+1} + e^{k_0 \mathbf{Q}_{L+1}(z-z_L)} \mathbf{g}_{L+1}]$$

<159> 여기서, $\mathcal{Q}_0$ 와 $\mathcal{Q}_{L+1}$ 은 n 번째 대각원소가 각각 $-ik_{L,n}/k_0$ 과 $-ik_{L,n}/k_0$ 인 대각행렬이며,
 $\mathbf{f}_0 = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$, $\mathbf{g}_0 = (\rho_{-N}, \dots, \rho_{-1}, \rho_0, \rho_1, \dots, \rho_N)^T$,

$\mathbf{f}_{L+1} = (\tau_{-N}, \dots, \tau_{-1}, \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_N)^T$, $\mathbf{g}_{L+1} = (0, \dots, 0)^T$ 는 모두 $(2N+1)$ 개의 성분을 갖는 열벡터이며, $\mathbf{W}_0 = \mathbf{I}$, $\mathbf{V}_0 = \mathbf{W}_0 \mathcal{Q}_0$, $\mathbf{W}_{L+1} = \mathbf{I}$, $\mathbf{V}_{L+1} = \mathbf{W}_{L+1} \mathcal{Q}_{L+1}$ 이다.

<160> B. $\mathbf{f}_l$, $\mathbf{g}_l$ 의 계산

<161> $z = z_l$ ($l=0$ 부터 L 까지)에서 전기장과 자기장이 만족해야 할 경계조건으로부터,

<162> 식 (36):

<163>
$$\begin{bmatrix} \mathbf{f}_l \\ \mathbf{g}_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_l^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{X}_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{M}_l^+ & \mathbf{M}_l^- \\ \mathbf{M}_l^- & \mathbf{M}_l^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{l+1} \\ \mathbf{g}_{l+1} \end{bmatrix}$$

<164> 을 얻는다. 여기서,

<165> 식 (37):

<166>
$$\mathbf{X}_l \equiv \begin{cases} e^{-k_0 \mathbf{Q}_l d_l} & \text{for } l = 1, \dots, L \\ \mathbf{I} & \text{for } l = 0 \end{cases}$$

<167> 이고,

<168> 식 (38):

<169>
$$\mathbf{M}_l^\pm \equiv \frac{1}{2}[\mathbf{W}_l^{-1} \mathbf{W}_{l+1} \pm \mathbf{V}_l^{-1} \mathbf{V}_{l+1}]$$

<170> 이다.

<171> $\mathbf{A}_l$ 이 대칭행렬이므로 $\mathbf{A}_l$ 의 고유벡터들은 서로 수직이 된다. 따라서 규격화된 고유벡터 행렬 $\mathbf{W}_l$ 을 사용하면 수치계산의 효율을 높이기 위해 $\mathbf{W}_l^{-1}$ 대신 $\mathbf{W}_l^T$ 를 사용할 수 있다.

<172> 식 (36)에서의 순환식은 궁극적으로 다음 형태의 식을 준다.

<173> 식 (39):

<174>
$$\begin{bmatrix} \mathbf{f}_l \\ \mathbf{g}_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_l \\ \mathbf{b}_l \end{bmatrix} \mathbf{f}_{L+1}$$

<175> 이 식에서 $\mathbf{f}_{L+1}$ 을 소거하면,

<176> 식 (40):

<177>
$$\mathbf{g}_l = \mathbf{b}_l \mathbf{a}_l^{-1} \mathbf{f}_l \equiv \mathbf{R}_l \mathbf{f}_l$$

을 얻는다. 이 g_l 과 $g_{l+1} = R_l f_{l+1}$ 을 식 (36)에 대입하면 R_l ($l=0$ 부터 L 까지)에 대한 순환식,

식 (41):

$$R_l = X_l (M_l^- + M_l^+ R_{l+1}) (M_l^+ + M_l^- R_{l+1})^{-1} X_l$$

을 얻는다. 초기화 값 $R_{L+1} = 0$ 을 사용하여 $l=L$ 에서 시작하여 이 순환식을 되풀이하여 적용하면 모든 층에서의 R_l 값들이 얻어진다.

이제 식 (40)의 R_l ($l=0$ 부터 L 까지)을 얻을 수 있는 알고리즘이 구해졌으므로 남은 문제는 f_l 들을 모두 구해야 하는 것이다. f_0 을 알기 때문에 입사 매질로부터 층 l 로 전파행렬법(transfer matrix method)을 적용함으로써 f_l 을 구할 수 있다.

이를 위해 식 (36)의 순환식을 다음과 같이 변형시킨다.

식 (42):

$$f_{l+1} = (N_l^+ X_l + N_l^- X_l R_l) f_l$$

여기서,

식 (43):

$$N_l^\pm = \frac{1}{2} [W_{l+1}^{-1} W_l \pm V_{l+1}^{-1} V_l]$$

이다. 초기화값 $f_0 = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ 을 가지고 식 (42)를 되풀이하여 적용하면 모든 f_l 값들이 정해진다. 이로써 앞에서 구한 R_l 과 식 (40)에 의해 g_l 이 결정되어 식 (30)의 $S_y^{(0)}(z)$ 가 구해진다. 이 절에서 첨자 [0]을 생략한 것을 생각하면, 식 (9)에 나오는 좌변의 $S_y^{(0)}(z)$ 가 결정된 것이다. 다음 절에서 식 (9)의 피적분 함수에 나오는 $G(z, z')$ 을 구한다.

III. $G(z, z')$ 의 계산: TE 모드

z 가 층 l 내부에 위치하면 식 (8)은,

식 (44):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - A_l \right] G(z, z') = -\delta(z - z') I$$

로 된다. 이 절에서도 II절에서와 같이 영차 주기구조물과 관련된 양을 나타내는 첨자 [0]을 생략한다. 주어진 층 l 에 대해서 A_l 은 더 이상 z 의 함수가 아니다. 식 (44)의 해는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

식 (45):

$$G_{ll'}(z, z') = \begin{cases} W_l [e^{-k_0 Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^-(z') + e^{k_0 Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^-(z')] & (\text{for } l < l') \\ W_l [e^{-k_0 Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^-(z') + e^{k_0 Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^-(z')] & (\text{for } l = l'; z < z') \\ W_l [e^{-k_0 Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^+(z') + e^{k_0 Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^+(z')] & (\text{for } l = l'; z > z') \\ W_l [e^{-k_0 Q_l(z-z_{l-1})} f_{ll'}^+(z') + e^{k_0 Q_l(z-z_{l-1})} g_{ll'}^+(z')] & (\text{for } l > l') \end{cases}$$

<197> 여기서, W_l 과 Q_l 은 III절에서와 같이 A_l 의 고유벡터들과 고유값들로부터 만들어지는 정방행렬이며, 주어진 층 l 에서 z 에 무관하고 z' 에 의존하는 정방행렬 $f_{ll'}^{\pm}(z')$ 과 $g_{ll'}^{\pm}(z')$ 은 $G_{ll'}(z, z')$ 과 $\partial G_{ll'}(z, z')/\partial z$ 가 만족해야 하는 경계조건에 의해 결정된다. $G_{ll'}(z, z')$, $f_{ll'}^{\pm}(z')$, $g_{ll'}^{\pm}(z')$ 의 첨자 l' 에서 첫 번째 l 은 관찰점 z 가 층 l 내부에 위치함을 뜻하고 둘째 l' 은 원천점 z' 이 층 l' 내부에 위치함을 뜻한다. 영역 I은 첨자 $l'=0$ 을, 영역 II는 첨자 $l'=L+1$ 을 부여하면 이들 영역에서의 해는,

<198> 식 (46):

$$G_{ll'}(z, z') = \begin{cases} W_0[e^{-k_0 Q_0 z} f_{0l'}^-(z') + e^{k_0 Q_0 z} g_{0l'}^-(z')] & (\text{for } l = 0 < l') \\ W_{L+1}[e^{-k_0 Q_{L+1}(z-z_L)} f_{L+1,l'}^+(z') + e^{k_0 Q_{L+1}(z-z_L)} g_{L+1,l'}^+(z')] & (\text{for } l = L+1 > l') \end{cases}$$

<199>

<200> 로 나타낼 수 있다. 여기서, W_0 , Q_0 , W_{L+1} , Q_{L+1} 은 앞에서 정의한 것과 같으며, $f_{0l'}(z')$ 과 $g_{L+1,l'}^+(z')$ 은 영행렬이다(앞 절에서 f_0 는 영이 아닌 열벡터이다.).

<201> A. 기판($l'=L+1$)으로부터 원천층($l'=l'$)으로 전환행렬법의 적용

<202> $G(z, z')$ 과 $G'(z, z') \equiv \partial G(z, z')/\partial z$ 가 $z=z_l$ ($l=l'$ 부터 L 까지)에서 만족해야 하는 경계조건으로부터 식 (36)과 비슷한 형태의 순환식,

<203> 식 (47):

$$\begin{bmatrix} f_{ll'}^+(z') \\ g_{ll'}^+(z') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_l^{-1} & 0 \\ 0 & X_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_l^+ & M_l^- \\ M_l^- & M_l^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{l+1,l'}^+(z') \\ g_{l+1,l'}^+(z') \end{bmatrix}$$

<204>

<205> 을 얻는다. 여기서 X_l 과 $M_l^{\pm}$ 는 식 (37)과 (38)에서 정의된 대로이다. 식 (47)을 되풀이하여 적용하면 궁극적으로,

<206> 식 (48):

$$\begin{bmatrix} f_{ll'}^+(z') \\ g_{ll'}^+(z') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_l^+ \\ b_l^+ \end{bmatrix} f_{L+1,l'}^+(z')$$

<207>

<208> 이 얻어지고 $f_{L+1,l'}^+(z')$ 을 소거하면,

<209> 식 (49):

$$g_{ll'}^+(z') = b_l^+(a_l^+)^{-1} f_{ll'}^+(z') \equiv R_l f_{ll'}^+(z')$$

<210>

<211> 가 얻어진다. 식 (49)를 식 (47)에 대입하면 식 (41)과 완전히 같은 순환식,

<212> 식 (50):

$$R_l = X_l(M_l^- + M_l^+ R_{l+1})(M_l^+ + M_l^- R_{l+1})^{-1} X_l$$

<213>

<214> 이 얻어진다. 초기화 값 $R_{L+1}=0$ 도 같으므로 같은 계산을 되풀이하지 않고 이미 II절에서 구한 R_l 의 값을 그대로 사용할 수 있다.

<215> $g_{ll'}^+(z')$ 과 $f_{ll'}^+(z')$ 을 연결짓는 식 (49)와 R_l 을 구하는 알고리즘을 주는 식 (50)이 얻었으므로 $l > l'$ 인 $G_{ll'}(z, z')$ 을 구하는 문제에서 남은 일은 $f_{ll'}^+(z')$ 을 구하는 것이다. 첫 단계로 $f_{ll'}^+(z')$ 을 $f_{l+1, l'}^+(z')$ 으로 표현한다. 이를 위해 식 (47)을 다음과 같이 변형시킨다.

<216> 식 (51):

$$\begin{bmatrix} f_{l+1, l'}^+(z') \\ g_{l+1, l'}^+(z') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N_l^+ & N_l^- \\ N_l^- & N_l^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_l & 0 \\ 0 & X_l^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{ll'}^+(z') \\ g_{ll'}^+(z') \end{bmatrix}$$

<218> 이 식은 식 (49)와 함께 다음의 순환식을 준다.

<219> 식 (52):

$$\begin{aligned} f_{l+1, l'}^+(z') &= (N_l^+ X_l + N_l^- X_l R_l) f_{ll'}^+(z') \\ &\equiv \Psi_l f_{ll'}^+(z') \end{aligned}$$

<221> 이 식을 반복하여 적용하면 $l = l' + 1$ 부터 $l = L$ 까지의 모든 l 에 대하여,

<222> 식 (53):

$$f_{ll'}^+(z') = \Psi_{l-1} \cdots \Psi_{l'} f_{l'l'}^+(z')$$

<224> 을 얻는다. 따라서 $f_{l'l'}^+(z')$ 이 일단 구해지면 $f_{ll'}^+(z')$ 과 $g_{ll'}^+(z')$ 이 모두 구해진다. $f_{l'l'}^+(z')$ 을 구하기 전에 $l < l'$ 인 $G_{ll'}(z, z')$ 을 구하는 문제로 돌아간다. 이는 $f_{ll'}^+(z')$ 과 $g_{ll'}^-(z')$ 을 구하는 문제이다.

<225> B. 입사매질($l=0$)로부터 원천층($l=l'$)으로 전환행렬법의 적용

<226> $G(z, z')$ 과 $G'(z, z') \equiv \partial G(z, z') / \partial z$ 가 $z = z_l$ ($l=0$ 부터 $l'-1$ 까지)에서 만족해야 하는 경계조건으로 부터,

<227> 식 (54):

$$\begin{bmatrix} f_{l+1, l'}^-(z') \\ g_{l+1, l'}^-(z') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N_l^+ & N_l^- \\ N_l^- & N_l^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_l & 0 \\ 0 & X_l^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{ll'}^-(z') \\ g_{ll'}^-(z') \end{bmatrix}$$

<229> 을 얻는다. 여기서 X_l 과 $N_l^\pm$ 는 앞에서 정의한 대로이다. 식 (54)를 반복하여 적용하면,

<230> 식 (55):

$$\begin{bmatrix} f_{ll'}^-(z') \\ g_{ll'}^-(z') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_l^- \\ b_l^- \end{bmatrix} g_{0l'}^-(z')$$

<232> 을 얻고 이 식에서 $g_{0l'}^-(z')$ 을 소거하면 다음과 같이 $f_{ll'}^-(z')$ 을 $g_{ll'}^-(z')$ 으로 표현할 수 있다.

<233> 식 (56):

$$f_{ll'}^-(z') = a_l^- (b_l^-)^{-1} g_{ll'}^-(z') \equiv \bar{r}_l g_{ll'}^-(z')$$

<235> 식 (56)을 사용하여 식 (54)에서 $f_{l+1, l'}^-(z')$ 과 $f_{ll'}^-(z')$ 을 소거하면 순환식,

<236> 식 (57):

<237>
$$\bar{\mathbf{r}}_{l+1} = (\mathbf{N}_l^- + \mathbf{N}_l^+ \mathbf{X}_l \bar{\mathbf{r}}_l \mathbf{X}_l) (\mathbf{N}_l^+ + \mathbf{N}_l^- \mathbf{X}_l^{-1} \bar{\mathbf{r}}_l \mathbf{X}_l)^{-1}$$

<238> 을 얻는다. 초기화값 $\bar{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{0}$ 을 가지고 $l=0$ 에서 출발하여 이 순환식을 되풀이하여 적용하면 모든 $\bar{\mathbf{r}}_l$ 이 구해진다.

<239> $f_{ll'}(z')$ 를 알고리즘에 의해 구해지는 $\bar{\mathbf{r}}_l$ 과 아직 미지의 값 $\bar{\mathbf{g}}_{ll'}(z')$ 으로 표현했으므로 남은 문제는 $\bar{\mathbf{g}}_{ll'}(z')$ 을 구하는 것이다. 이를 위해 $\bar{\mathbf{g}}_{ll'}(z')$ 을 $\bar{\mathbf{g}}_{l+1,l'}(z')$ 으로 표현한다. 식 (47)에 주어진 것과 같은 형태의 식,

<240> 식 (58):

<241>
$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{f}}_{ll'}^-(z') \\ \bar{\mathbf{g}}_{ll'}^-(z') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_l^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{X}_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{M}_l^+ & \mathbf{M}_l^- \\ \mathbf{M}_l^- & \mathbf{M}_l^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{f}}_{l+1,l'}^-(z') \\ \bar{\mathbf{g}}_{l+1,l'}^-(z') \end{bmatrix}$$

<242> 이 $l < l'$ 일때 $z = z'$ 에서 경계조건의 적용에 의해 얻어진다. 이 식과 식 (56)으로부터 $\bar{\mathbf{g}}_{ll'}^-(z')$ 에 대한 순환식,

<243> 식 (59):

<244>
$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{g}}_{ll'}^-(z') &= \mathbf{X}_l (\mathbf{M}_l^- \bar{\mathbf{r}}_{l+1} + \mathbf{M}_l^+) \bar{\mathbf{g}}_{l+1,l'}^-(z') \\ &\equiv \Phi_{l+1} \bar{\mathbf{g}}_{l+1,l'}^-(z') \end{aligned}$$

<245> 을 얻고 이것으로부터 $\bar{\mathbf{g}}_{ll'}^-(z')$ ($l=1$ 부터 $l'-1$ 까지)를 $\bar{\mathbf{g}}_{l'l'}^-(z')$ 으로 표현한 식,

<246> 식 (60):

<247>
$$\bar{\mathbf{g}}_{ll'}^-(z') = \Phi_{l+1} \cdots \Phi_{l'} \bar{\mathbf{g}}_{l'l'}^-(z')$$

<248> 을 얻는다. $\bar{\mathbf{g}}_{ll'}^-(z')$ 이 구해지면 $\bar{\mathbf{g}}_{ll'}^-(z')$ 과 $f_{ll'}(z')$ ($l=1$ 부터 $l'-1$ 까지)들이 구해진다.

<249> C. $z = z'$ 에서 G 와 $\partial G / \partial z$ 의 경계조건 적용

<250> 이제 $f_{l'l'}^+(z')$ 과 $\bar{\mathbf{g}}_{l'l'}^-(z')$ 을 구하자. $z = z'$ 에서 $G_{l'l'}(z, z')$ 이 연속이고 식 (44)의 우변의 델타함수에 의해 $G_{l'l'}'(z, z') = \partial G_{l'l'}(z, z') / \partial z$ 가 불연속이므로,

<251> 식 (61):

<252>
$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{f}}_{l'l'}^+(z') \\ \bar{\mathbf{g}}_{l'l'}^-(z') \end{bmatrix} = \frac{k_0}{2} \begin{bmatrix} [\mathbf{I} - \bar{\mathbf{r}}_{l'} \mathbf{R}_{l'}]^{-1} & -\bar{\mathbf{r}}_{l'} [\mathbf{I} - \mathbf{R}_{l'} \bar{\mathbf{r}}_{l'}]^{-1} \\ \mathbf{R}_{l'} [\mathbf{I} - \bar{\mathbf{r}}_{l'} \mathbf{R}_{l'}]^{-1} & -[\mathbf{I} - \mathbf{R}_{l'} \bar{\mathbf{r}}_{l'}]^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{k_0 \mathbf{Q}_{l'}(z' - z_{l'-1})} \\ -e^{-k_0 \mathbf{Q}_{l'}(z' - z_{l'-1})} \end{bmatrix} \mathbf{Q}_{l'}^{-1} \mathbf{W}_{l'}^T$$

<253> 를 얻는다. $\mathbf{u}_{l'} = (\mathbf{I} - \mathbf{R}_{l'} \bar{\mathbf{r}}_{l'})^{-1}$ 을 사용하여 식 (61)을 다음과 같이 표현할 수 있다.

<254> 식 (62):

<255>
$$\bar{\mathbf{f}}_{l'l'}^+(z') = \frac{k_0}{2} \left[e^{k_0 \mathbf{Q}_{l'}(z' - z_{l'-1})} + \bar{\mathbf{r}}_{l'} \mathbf{u}_{l'} [\mathbf{R}_{l'} e^{k_0 \mathbf{Q}_{l'}(z' - z_{l'-1})} + e^{-k_0 \mathbf{Q}_{l'}(z' - z_{l'-1})}] \right] \mathbf{Q}_{l'}^{-1} \mathbf{W}_{l'}^T$$

식 (63):

$$\mathbf{g}_{l'l'}^-(z') = \frac{k_0}{2} \mathbf{u}_{l'} [\mathbf{R}_{l'} e^{k_0 \mathbf{Q}_{l'}(z' - z_{l'-1})} + e^{-k_0 \mathbf{Q}_{l'}(z' - z_{l'-1})}] \mathbf{Q}_{l'}^{-1} \mathbf{W}_{l'}^T$$

식 (62), 식 (63), 식 (53), 식 (60)에 의해 식 (45)의 그린 함수가 완전히 정해진다.

IV. 수치해석: TE 모드

상술한 바와 같이, G0는 섭동 영역이 단층 균일매질이며, Ga는 주어진 층이 균일매질인데 단층과 다층으로 나눌 수 있다. G1은 주어진 층이 균일매질이 아니며 역시 단층과 다층으로 나눌 수 있다. G1 다층은 가장 일반적인 경우로서 위에서 언급한 모든 경우를 포함한다. 따라서, 이하 G1 다층에 대해 분석한다.

A. 리프만-슈빙거 적분방정식의 이산화

영차(zeroth order) 주기 구조물의 물리적 성질 및 기하학적 구조와 입사파의 정보에 의해 정해진 두 양 $S_y^{[0]}(z)$ 및 $G(z, z')$ 과 섭동 퍼텐셜 $Y(z)$ 를 입력변수로 하여, 섭동된 주기구조물의 물리적 성질, 기하학적 구조, 그리고 동일한 입사파 정보에 의해 결정되어야 할 미지수 $S_y(z)$ 를 리프만-슈빙거 방정식의 풀이법인 반복법(iteration)을 사용하여 구할 것이다.

l 층 ($l=1$ 부터 L 까지) 내부에 위치하는 z 를 $z \rightarrow z_{l-1}$ 로 보내고 L 층 내부에 위치하는 z 를 $z \rightarrow z_L$ 로 보내고 식 (53)과 (60)을 사용하여 층 l 에서 섭동 함수 $Y(z')$ 이 상수값 Y_l 를 갖는다고 가정하면 식 (9)가 다음과 같이 됨을 볼 수 있다.

식 (64):

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_y(z_{l-1}) - \mathbf{S}_y^{[0]}(z_{l-1}) = & \mathbf{W}_l \left[(1 + \mathbf{R}_l) \sum_{j=1}^{l-1} \Psi_{l-1} \cdots \Psi_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_{jj}^+(z') \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z') \right. \\ & + (\bar{\mathbf{r}}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' \mathbf{g}_{ll}^-(z') \mathbf{Y}_l \mathbf{S}_y(z') \\ & \left. + (\bar{\mathbf{r}}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \Phi_{l+1} \cdots \Phi_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{g}_{jj}^-(z') \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z') \right] \end{aligned}$$

식 (65):

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_y(z_L) - \mathbf{S}_y^{[0]}(z_L) = & \mathbf{W}_L (\mathbf{X}_L + \mathbf{X}_L^{-1} \mathbf{R}_L) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \Psi_{L-1} \cdots \Psi_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' \mathbf{f}_{jj}^+(z') \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z') \right. \\ & \left. + \int_{z_{L-1}}^{z_L} dz' \mathbf{f}_{LL}^+(z') \mathbf{Y}_L \mathbf{S}_y(z') \right] \end{aligned}$$

식 (64)에서 $l=1$ 일 경우 우변의 $\Sigma_{j=1}^{l-1}(\cdots)$ 은 어떤 항도 발생시키지 않으며 $l=L$ 일 우변의 $\Sigma_{j=l+1}^L(\cdots)$ 은 어떤 항도 발생시키지 않음에 주의해야 한다.

정밀도를 높이기 위해서 내삽 공식,

식 (66):

$$\mathbf{S}_y(z') = \mathbf{S}_y(z_{j-1}) + \mathbf{S}'_y(z_j)(z' - z_{j-1}) \quad (z_{j-1} < z' < z_j; j = 1, \dots, L)$$

식 (67):

$$\mathbf{S}'_y(z_j) \equiv [\mathbf{S}_y(z_j) - \mathbf{S}_y(z_{j-1})]/d_j, \quad d_j \equiv z_j - z_{j-1}$$

<274> 을 사용하여 식 (64)와 식 (65)에 나오는 적분을 해석적으로 수행하면, $l=2$ 부터 $L-1$ 까지에 대해 식 (64)는,

<275> 식 (68):

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_y(z_{l-1}) - \mathbf{S}_y^{[0]}(z_{l-1}) &= \sum_{j=0}^{l-2} \Theta_{l-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_{j+1} \mathbf{S}_y(z_j) + \sum_{j=l-1}^{L-1} \Theta_{l-1,j}^{(-)} \mathbf{Y}_{j+1} \mathbf{S}_y(z_j) \\ &+ \sum_{j=1}^{l-1} \bar{\Theta}_{l-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z_j) + \sum_{j=l}^L \bar{\Theta}_{l-1,j}^{(-)} \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z_j) \end{aligned}$$

<276>

<277> 로 표현되고, $l=1$ 일 때,

<278> 식 (69):

$$\mathbf{S}_y(z_0) - \mathbf{S}_y^{[0]}(z_0) = \sum_{j=0}^{L-1} \Theta_{0j}^{(-)} \mathbf{Y}_{j+1} \mathbf{S}_y(z_j) + \sum_{j=1}^L \bar{\Theta}_{0j}^{(-)} \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z_j)$$

<279>

<280> 로 표현되고, $l=L$ 일 때,

<281> 식 (70):

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_y(z_{L-1}) - \mathbf{S}_y^{[0]}(z_{L-1}) &= \sum_{j=0}^{L-2} \Theta_{L-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_{j+1} \mathbf{S}_y(z_j) + \Theta_{L-1,L-1}^{(-)} \mathbf{Y}_L \mathbf{S}_y(z_{L-1}) \\ &+ \sum_{j=1}^{L-1} \bar{\Theta}_{L-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z_j) + \bar{\Theta}_{L-1,L}^{(-)} \mathbf{Y}_L \mathbf{S}_y(z_L) \end{aligned}$$

<282>

<283> 로 표현된다.

<284> 또한, 식 (65)는,

<285> 식 (71):

$$\mathbf{S}_y(z_L) - \mathbf{S}_y^{[0]}(z_L) = \sum_{j=0}^{L-1} \Theta_{L,j}^{(+)} \mathbf{Y}_{j+1} \mathbf{S}_y(z_j) + \sum_{j=1}^L \bar{\Theta}_{L,j}^{(+)} \mathbf{Y}_j \mathbf{S}_y(z_j)$$

<286>

<287> 로 표현된다.

<288> 식 (68), 식 (69), 식 (70), 식 (71)을 모아서 다음과 같이 하나의 확장된 행렬형태의 1차 방정식계로 나타낼 수 있다.

<289> 식 (72):

<290>

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{G}\mathbf{Y} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}]\mathbf{S}$$

<291>

여기서 $\mathbf{S}$ 와 $\mathbf{S}^{[0]}$ 는 $L+1$ 개의 층성분 $S_y(z_l)$ 과 $S_y^{[0]}(z_l)$ 을 각각 갖는 열벡터이며, 각 층성분 $S_y(z_l)$ 과 $S_y^{[0]}(z_l)$ 은 모두 $(2N+1)$ 개의 결함파 기저성분을 가진 열벡터이다. $\mathbf{G}$, $\bar{\mathbf{G}}$, $\mathbf{Y}$, $\bar{\mathbf{Y}}$ 는 $(L+1)^2$ 개의 층성분을 갖는 정방행렬이며 각각의 층성분은 아래와 같이 주어지며 모두 $(2N+1)^2$ 개의 결함파 기저성분을 갖는 정방행렬이다.

<292> 식 (73):

$$\mathbb{G}_{lm} = \begin{cases} \Theta_{lm}^{(+)} & \text{for } l > m, m \neq L \\ \Theta_{lm}^{(-)} & \text{for } l \leq m, m \neq L \\ 0 & \text{for } m = L \end{cases}$$

<293>

<294> 식 (74):

$$\bar{\mathbb{G}}_{lm} = \begin{cases} 0 & \text{for } l = 0 \\ \bar{\Theta}_{lm}^{(+)} & \text{for } l \neq 0, l \geq m \\ \Theta_{lm}^{(-)} & \text{for } l \neq 0, l < m \end{cases}$$

<295>

<296> 식 (75):

$$\mathbb{Y}_{lm} = \begin{cases} \mathbf{Y}_{l+1}\delta_{lm} & \text{for } l \neq L \\ 0 & \text{for } l = L \end{cases}$$

<297>

<298> 식 (76):

$$\bar{\mathbb{Y}}_{lm} = \begin{cases} 0 & \text{for } l = 0 \\ \mathbf{Y}_l\delta_{lm} & \text{for } l \neq 0 \end{cases}$$

<299>

<300> B. 특수한 사례

<301> 특수한 경우로,

<302> (i) 각 층이 균일 매질이면 (다층 Ga 구조),

<303> 식 (77):

$$\mathbf{W}_1 = \dots = \mathbf{W}_L = \mathbf{I}$$

<304>

<305> 로 되고, 이로 인해 $R_l, \bar{r}_l, u_l, \Psi_l, \Phi_l$ 이 대각행렬이 되고, 그 결과 식 (73) 및 식 (74)의 행렬요소 $\mathbb{G}_{lm}$ 과 $\bar{\mathbb{G}}_{lm}$ 이 모두 대각행렬이 되어 더욱 간단해진 표현식을 얻을 수 있으며,

<306> (ii) 각 층의 영차 유전율 함수가 모두 동일할 경우(단층 G1 경우), 즉 $\epsilon^{[0](1)}(x, z) = \dots = \epsilon^{[0](L)}(x, z)$ 일 때,

<307> 식 (78):

$$\mathbf{W}_1 = \dots = \mathbf{W}_L = \mathbf{W}$$

<308>

<309> 식 (79):

$$\mathbf{Q}_1 = \dots = \mathbf{Q}_L = \mathbf{Q}$$

<310>

<311> 에 의해 간단해진 표현의 행렬요소 $\mathbb{G}_{lm}$ 과 $\bar{\mathbb{G}}_{lm}$ 을 얻을 수 있으며,

<312> (iii) 더 나아가 각 층이 균일하면(단층 Ga 구조),

<313> 식 (80):

$$\mathbf{W}_1 = \dots = \mathbf{W}_L = \mathbf{I}$$

<314>

<315> 식 (81):

$$\mathbf{Q}_1 = \dots = \mathbf{Q}_L = q\mathbf{I}$$

<316>

<317> 에 의해 더욱 간단한 표현의 행렬요소를 얻을 수 있으며,

<318> (iv) 접동영역을 기관 바로 위의 입사매질로 취할 경우(G0 구조), 단층 Ga의 구조에 더하여 $u=0$ 으로 둘 수 있고 행렬요소도 훨씬 간단해진다.

<319> C. $S_s(z)$ 의 계산

<320> 결합과 기저 공간에서의 행렬과 벡터의 곱의 계산속도를 높이기 위해 다음의 행렬,

<321> 식 (82):

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\mathbf{I}_N & \mathbf{0}_c & \mathbf{J}_N \\ \mathbf{0}_r & \mathbf{I}_1 & \mathbf{0}_r \\ \mathbf{J}_N & \mathbf{0}_c & \mathbf{I}_N \end{bmatrix}$$

<322>

<323> (여기서 $\mathbf{I}_K$ 는 $K \times K$ 단위행렬이며 $\mathbf{J}_N$ 는 (i,j) 원소가 $J_{ij} = \delta_{i,N+1-j}$ 로 주어지는 $K \times K$ 정방행렬이며 $\mathbf{0}_c$ 와 $\mathbf{0}_r$ 은 크기가 N 인 영 열벡터와 영 행벡터임)에 의한 상사변환에 의해 접동행렬을 블록대각화 시킬 수 있다.

<324> 식 (72)의 행렬 방정식을 반복법으로 풀기 위해 초기화 값으로 $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{[0]}$ 으로 시작한다. 이것을 식 (72)에 대입하면,

<325> 식 (83):

$$\mathbf{S}^{[0]} = \mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{GY} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}]\mathbf{S}^{[0]}$$

<326>

<327> 을 얻는다. 주어진 오차한계 내에서 식 (83)이 성립하지 않으면 새로운 값 $\mathbf{s}$ 를 식 (83)의 우변의 값으로 둔다.

<328> 식 (84):

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{GY} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}]\mathbf{S}^{[0]}$$

<329>

<330> 이 값을 다시 식 (72)에 대입하여,

<331> 식 (85):

$$\mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{GY} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}]\mathbf{S}^{[0]} = \mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{GY} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}](\mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{GY} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}]\mathbf{S}^{[0]})$$

<332>

<333> 을 얻는다. 이 식의 좌우변의 값을 비교하여 만족스러운 값을 얻지 못하면 새로운 $\mathbf{s}$ 를 식 (85)의 우변의 값으로 둔다.

<334> 식 (86):

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{GY} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}](\mathbf{S}^{[0]} - [\mathbf{GY} + \bar{\mathbf{G}}\bar{\mathbf{Y}}]\mathbf{S}^{[0]})$$

<335>

<336> 이 $\mathbf{s}$ 를 가지고 식 (72)가 성립하는지 시험한다. 만족할 만한 $\mathbf{s}$ 를 얻을 때까지 이 과정을 되풀이한다.

<337> D. g_n 와 f_{L+1} 의 계산

<338> 최종적인 계산목표는 결합파 기저의 차수 n 과 관련된 반사율 ρ_n 들과 투과율 τ_n 들이다. 반사율 열벡터 $\mathbf{g}_0 = (\rho_{-N}, \dots, \rho_{-1}, \rho_0, \rho_1, \dots, \rho_N)^T$ 는 다음과 같이 추출해낼 수 있다.

<339> 식 (87):

$$\mathbf{g}_0 = \mathbf{g}_0^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [\mathbb{G}_{0l} \mathbb{Y}_{lm} + \bar{\mathbb{G}}_{0l} \bar{\mathbb{Y}}_{lm}] \mathbb{S}_m$$

<340>

<341> 여기서 $\mathbf{g}_0^{[0]} = (\rho_{-N}^{[0]}, \dots, \rho_{-1}^{[0]}, \rho_0^{[0]}, \rho_1^{[0]}, \dots, \rho_N^{[0]})^T$ 는 영차 반사율 행렬이다. 주차수(principal order) 반사 회절파의 반사율을 얻고자 하면 $\rho_0 = (\mathbf{g}_0)_0$ 을 추출하면 된다.

<342> 비슷한 방법으로 투과율 열벡터 $\mathbf{f}_{L+1} = (\tau_{-N}, \dots, \tau_{-1}, \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_N)^T$ 는,

<343> 식 (88):

$$\mathbf{f}_{L+1} = \mathbf{f}_{L+1}^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [\mathbb{G}_{0l} \mathbb{Y}_{lm} + \bar{\mathbb{G}}_{0l} \bar{\mathbb{Y}}_{lm}] \mathbb{S}_m$$

<344>

<345> 으로 주어진다. 여기서 $\mathbf{f}_{L+1}^{[0]} = (\tau_{-N}^{[0]}, \dots, \tau_{-1}^{[0]}, \tau_0^{[0]}, \tau_1^{[0]}, \dots, \tau_N^{[0]})^T$ 는 영차 투과율 행렬이며, $\tau_0 = (\mathbf{f}_{L+1})_0$ 는 주차수(principal order) 투과 회절파의 투과율이다.

<346> V. 리프만-슈빙거 방정식: TM 모드

<347> 주기 구조물의 x 축 방향 주기성에 의하여 맥스웰(Maxwell) 방정식의 TE 모드 해 $H_y(x, z)$ 와 $E_x(x, z)$ 는,

<348> 식 (89):

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

<349>

<350> 식 (90):

$$E_x(x, z) = -i \left(\frac{\mu_0}{\epsilon_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} S_{xn}(z) e^{ik_{xn}x}$$

<351>

<352> 로 나타낼 수 있다. 유전율 함수 $\epsilon(x, z)$ 의 역수를 푸리에(Fourier) 급수로 다음과 같이 전개할 수 있다.

<353> 식 (91):

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

<354>

<355> *맥스웰 방정식에 의해 $U_{ym}(z)$ 와 $S_{xm}(z)$ 는 결합된 1차 미분방정식 2개를 만족하는데 $S_{xm}(z)$ 를 소거하면 $U_{ym}(z)$ 에 관한 1개의 2차 미분방정식,

<356> 식 (92):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{k_0^2} \frac{\partial \mathbf{E}(z)}{\partial z} \mathbf{E}^{-1}(z) \frac{\partial \mathbf{U}_y(z)}{\partial z} - \mathbf{E}(z) \mathbf{B}(z) \right] \mathbf{U}_y(z) = 0$$

<357>

<358> 이 얻어진다. 여기서,

식 (93):

$$\mathbf{B}(z) = \mathbf{K}_x \mathbf{P}(z) \mathbf{K}_x - \mathbf{I}$$

이며 $\mathbf{P}(z)$ 는 (n, p) 원소가 $\mathbf{P}_{np}(z) = \epsilon_{(n-p)}^{\#}(z)$ 인 정방행렬이다. 동일 주기의 영차 구조물에 대해서 첨자 [0]을 사용하면 비슷한 식을 얻는다.

식 (94):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{k_0^2} \frac{\partial \mathbf{E}^{[0]}(z)}{\partial z} (\mathbf{E}^{[0]})^{-1}(z) \frac{\partial \mathbf{U}_y^{[0]}(z)}{\partial z} - \mathbf{E}^{[0]}(z) \mathbf{B}^{[0]}(z) \right] \mathbf{U}_y^{[0]}(z) = 0$$

대응하는 그린 함수는,

식 (95):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{k_0^2} \frac{\partial \mathbf{E}^{[0]}(z)}{\partial z} (\mathbf{E}^{[0]})^{-1}(z) \frac{\partial \mathbf{U}_y^{[0]}(z)}{\partial z} - \mathbf{E}^{[0]}(z) \mathbf{B}^{[0]}(z) \right] \mathbf{G}(z, z') = -\delta(z - z') \mathbf{I}$$

로 주어진다. 표준적인 방법에 따라 식 (92), 식 (94), 식 (95)을 결합하면 다음의 TM 모드에 대한 리프만-슈빙거 방정식,

식 (96):

$$\mathbf{U}_y(z) - \mathbf{U}_y^{(0)}(z) = \int dz' \left[k_0^2 \mathbf{G}(z') \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}(z') \mathbf{K}_x \mathbf{U}_y(z') + \frac{\partial \mathbf{G}(z, z')}{\partial z'} \mathbf{Y}(z') \frac{\partial \mathbf{U}_y(z')}{\partial z'} \right]$$

이 얻어진다. 여기서, $\mathbf{Y}(z) \equiv \mathbf{E}^{-1}(z) - (\mathbf{E}^{[0]})^{-1}(z)$ 이다.

VI. $\mathbf{U}_y^{[0]}(z)$ 의 계산

이 절에서는 영차 주기구조에서의 관련 양을 나타내는 첨자 [0]을 생략한다. 영역 I 과 II에서의 전기장과 자기장의 해는 플로케(Floquet) 조건에 의해 결합파 기저로 전개한 형태로 나타낼 수 있다.

식 (97):

$$H_y^{(0)}(x, z) = \sum_{n=-N}^N U_{yn}^{(0)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

식 (98):

$$E_x^{(0)}(x, z) = -i \left(\frac{\mu_0}{\epsilon_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-N}^N S_{xn}^{(0)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

식 (99):

$$H_y^{(L+1)}(x, z) = \sum_{n=-N}^N U_{yn}^{(L+1)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

식 (100):

$$E_x^{(L+1)}(x, z) = -i \left(\frac{\mu_0}{\epsilon_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-N}^N S_{xn}^{(L+1)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

<381> 여기서,

<382> 식 (101):

$$U_{yn}^{(0)}(z) = \delta_{n0} e^{ik_{I,zn}z} + \rho_n e^{-ik_{I,zn}z}$$

<384> 식 (102):

$$S_{xn}^{(0)}(z) = \delta_{n0} \left(\frac{ik_{I,zn}}{n_I^2 k_0} \right) e^{ik_{I,zn}z} - \rho_n \left(\frac{ik_{I,zn}}{n_I^2 k_0} \right) e^{-ik_{I,zn}z}$$

<386> 식 (103):

$$U_{yn}^{(L+1)}(z) = \tau_n e^{ik_{II,zn}(z-z_L)}$$

<388> 식 (104):

$$S_{xn}^{(L+1)}(z) = \tau_n \left(\frac{ik_{II,zn}}{n_{II}^2 k_0} \right) e^{ik_{II,zn}(z-z_L)}$$

<390> 이다. 식 (101)의 우변의 첫째 항은 입사파를 나타내는 항이다. 비슷하게, 주기구조영역($l=1$ 부터 L 까지)에서의 전기장과 자기장을 푸리에(Fourier) 급수 전개에 의해 다음과 같이 결합파 기저로 전개할 수 있다.

<391> 식 (105):

$$H_y^{(l)}(x, z) = \sum_{n=-N}^N U_{yn}^{(l)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

<393> 식 (106):

$$E_x^{(l)}(x, z) = -i \left(\frac{\mu_0}{\epsilon_0} \right)^{1/2} \sum_{n=-N}^N S_{xn}^{(l)}(z) e^{ik_{xn}x}$$

<395> 식 (92)를 층 l 에 적용하면 식 (105)의 $U_{yn}^{(l)}$ ($n=-N$ 부터 N 까지)들이 만족해야 할 방정식,

<396> 식 (107):

$$(1/k_0^2) \partial^2 U_y^{(l)} / \partial z^2 = \mathbf{E}_l \mathbf{B}_l \mathbf{U}_y^{(l)}$$

<398> 를 얻으며, 여기서, E_l 은 II절에서 정의한 대로이며 z 에 무관한 B_l 은 다음과 같이 정의된다.

<399> 식 (108):

$$\mathbf{B}_l = \mathbf{K}_x \mathbf{E}_l^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{I}$$

<401> 식 (107)의 해는 다음과 같이 주어진다.

<402> 식 (109):

$$\mathbf{U}_y^{(l)}(z) = \mathbf{W}_l [e^{-k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_l + e^{k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_l]$$

<404> 식 (110):

$$\mathbf{S}_x^{(l)}(z) = \mathbf{V}_l [-e^{-k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{f}_l + e^{k_0 \mathbf{Q}_l(z-z_{l-1})} \mathbf{g}_l]$$

<406> 여기서 $\mathbf{W}_l$ 은 E/B_l 의 $(2N+1)$ 개의 고유벡터들로 만들어지는 정방행렬이며, $\mathbf{Q}_l$ 은 E/B_l 의 $(2N+1)$ 개의

고유값의 양의 제곱근을 대각원소로 갖는 대각행렬이며, $V_l = E_l^{-1} W_l Q_l$ 이며, f_l 과 g_l 은 경계조건의 적용에 의해 정해져야 하는 $(2N+1)$ 개의 성분을 갖는 열벡터이다.

<407> 식 (101), 식 (102), 식 (103), 식 (104)에 있는 결합파 기저의 성분들은 다음과 같이 행렬형태로 적을 수 있다.

<408> 식 (111):

$$U_y^{(0)}(z) = W_0[e^{-k_0 Q_0 z} f_0 + e^{k_0 Q_0 z} g_0]$$

<410> 식 (112):

$$S_x^{(0)}(z) = V_0[-e^{-k_0 Q_0 z} f_0 + e^{k_0 Q_0 z} g_0]$$

<412> 식 (113):

$$U_y^{(L+1)}(z) = W_{L+1}[e^{-k_0 Q_{L+1}(z-z_L)} f_{L+1} + e^{k_0 Q_{L+1}(z-z_L)} g_{L+1}]$$

<414> 식 (114):

$$S_x^{(L+1)}(z) = V_{L+1}[-e^{-k_0 Q_{L+1}(z-z_L)} f_{L+1} + e^{k_0 Q_{L+1}(z-z_L)} g_{L+1}]$$

<416> 여기서, Q_0 , W_0 , f_0 , g_0 , W_{L+1} , Q_{L+1} , f_{L+1} , g_{L+1} 은 II절에서 정의한 대로이며, $V_0 = (1/n_I^2) W_0 Q_0$, $V_{L+1} = (1/n_{II}^2) W_{L+1} Q_{L+1}$ 이다.

<417> $z = z_l$ ($l=0$ 부터 L 까지)에서 전기장과 자기장이 만족해야 할 경계조건을 적용하면 식 (36)에서 주어진 순환식이 나온다. 계산의 나머지 부분은 TE 모드에서와 정확히 같은 방법으로 행해질 수 있다. $M_l^{\pm}$ 에 나타나는 W_l 의 역행렬과 관련한 논평 하나로 이 절을 마무리한다.

<418> 비록 E_l 과 B_l 이 대칭행렬이더라도 그 곱 $E_l B_l$ 은 일반적으로 대칭행렬이 아니다. 따라서 $E_l B_l$ 의 고유벡터들 $w_m^{(l)}$ ($m=-N$ 부터 N 까지)은 서로 수직이 아니다. 즉, $m \neq n$ 에 대해 $[w_m^{(l)}]^T w_n^{(l)} \neq 0$ 이다. 그러므로 이 경우 적절한 규격화에 의해 $W_l^T W_l$ 은 단위행렬 I 로 표현될 수 없다. 그 대신 $W_l^T E_l^{-1} W_l$ 은 대각행렬이 될 수 있기 때문에 $W_l^T E_l^{-1} W_l = I$ 로 규격화시킬 수 있다. 이 경우 W_l^{-1} 대신 $W_l^T E_l^{-1}$ 를 사용할 수 있다.

<419> VII. $G(z, z')$ 의 계산: TM 모드

<420> z 가 층 l 내부에 위치하면 식 (95)는

<421> 식 (115):

$$\left[\frac{1}{k_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - E_l B_l \right] G(z - z') = -\delta(z - z') I$$

<422> 로 된다. 이 절에서도 II절과 VI절에서와 같이 영차 주기구조물과 관련된 양을 나타내는 첨자 [0]을 생략한다.
<423> 주어진 층 l 에 대해서 E_l 과 B_l 은 더 이상 z 의 함수가 아니다. W_l 과 Q_l 이 $E_l B_l$ 의 고유벡터와 고유치에 의해 만들어진 행렬이라는 것을 제외하고는 식 (115)의 해가 식 (45)의 TE 모드의 해와 완전히 같은 형태이다. 이때 같은 표현의 $f_{il}^{\pm}(z')$ 와 $g_{il}^{\pm}(z')$ 를 가진다. 이 절에서의 W_l 과 Q_l 은 물론 VI절에서 구한 것과 완전히 같다. 영역 I로 표시되는 입사매질과 영역 II로 표시되는 기관에서의 해는 식 (46)에 정의된 그대로이다.

<424> VIII. 수치해석: TM 모드

<425> A. $U_y(z)$ 의 계산

<426> 수치계산의 정밀도를 높이기 위하여 식 (66)과 비슷한 $U_y(z')$ 에 대한 내삽공식을 사용하여 적분을 해석적으로 수행하면 식 (97)의 리프만-슈팅거 적분방정식은 다음과 같이 이산화된다.

<427> 식 (116):

$$\begin{aligned} U_y(z_{l-1}) - U_y^{[0]}(z_{l-1}) &= \sum_{j=0}^{l-2} \left\{ \Theta_{l-1,j}^{(+)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_{j+1} \mathbf{K}_x + \Delta_{l-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_{j+1} \right\} U_y(z_j) \\ &+ \sum_{j=l-1}^{L-1} \left\{ \Theta_{l-1,j}^{(-)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_{j+1} \mathbf{K}_x + \Delta_{l-1,j}^{(-)} \mathbf{Y}_{j+1} \right\} U_y(z_j) \\ &+ \sum_{j=1}^{l-1} \left\{ \bar{\Theta}_{l-1,j}^{(+)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_j \mathbf{K}_x + \bar{\Delta}_{l-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_j \right\} U_y(z_j) \\ &+ \sum_{j=l}^L \left\{ \bar{\Theta}_{l-1,j}^{(-)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_j \mathbf{K}_x + \bar{\Delta}_{l-1,j}^{(-)} \mathbf{Y}_j \right\} U_y(z_j) \quad \text{for } l = 2, \dots, L-1 \end{aligned}$$

<428>

<429> 식 (117):

$$\begin{aligned} U_y(z_0) - U_y^{[0]}(z_0) &= \sum_{j=0}^{L-1} \left\{ \Theta_{0j}^{(-)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_{j+1} \mathbf{K}_x + \Delta_{0j}^{(-)} \mathbf{Y}_{j+1} \right\} U_y(z_j) \\ &+ \sum_{j=1}^L \left\{ \bar{\Theta}_{0j}^{(-)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_j \mathbf{K}_x + \bar{\Delta}_{0j}^{(-)} \mathbf{Y}_j \right\} U_y(z_j) \end{aligned}$$

<430>

<431> 식 (118):

$$\begin{aligned} U_y(z_{L-1}) - U_y^{[0]}(z_{L-1}) &= \sum_{j=0}^{L-2} \left\{ \Theta_{L-1,j}^{(+)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_{j+1} \mathbf{K}_x + \Delta_{L-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_{j+1} \right\} U_y(z_j) \\ &+ \left\{ \Theta_{L-1,L-1}^{(-)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_L \mathbf{K}_x + \Delta_{L-1,L-1}^{(-)} \mathbf{Y}_L \right\} U_y(z_{L-1}) \\ &+ \sum_{j=1}^{L-1} \left\{ \bar{\Theta}_{L-1,j}^{(+)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_j \mathbf{K}_x + \bar{\Delta}_{L-1,j}^{(+)} \mathbf{Y}_j \right\} U_y(z_j) \\ &+ \left\{ \bar{\Theta}_{L-1,L}^{(-)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_L \mathbf{K}_x + \bar{\Delta}_{L-1,L}^{(-)} \mathbf{Y}_L \right\} U_y(z_L) \end{aligned}$$

<432>

<433> 식 (119):

$$\begin{aligned} U_y(z_L) - U_y^{[0]}(z_L) &= \sum_{j=0}^{L-1} \left\{ \Theta_{L,j}^{(+)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_{j+1} \mathbf{K}_x + \Delta_{L,j}^{(+)} \mathbf{Y}_{j+1} \right\} U_y(z_j) \\ &+ \sum_{j=1}^L \left\{ \bar{\Theta}_{L,j}^{(+)} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_j \mathbf{K}_x + \bar{\Delta}_{L,j}^{(+)} \mathbf{Y}_j \right\} U_y(z_j) \end{aligned}$$

<434>

<435> 식 (116), 식 (117), 식 (118), 식 (119)를 모아서 다음과 같이 하나의 확장된 행렬형태의 1차 방정식계로 나타낼 수 있다.

<436> 식 (120):

$$\mathbf{U} - \mathbf{U}^{[0]} = [\mathbf{G}\mathbf{Y}' + \tilde{\mathbf{G}}\tilde{\mathbf{Y}}' + \mathbf{H}\mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{H}}\tilde{\mathbf{Y}}]\mathbf{U}$$

<437>

<438> 여기서 $\mathbf{U}, \mathbf{U}^{[0]}$ 는 $L+1$ 개의 층성분 $U_x(z)$ 과 $U_y^{[0]}(z)$ 을 각각 갖는 열벡터이며 각 층성분 $U_x(z)$ 과 $U_y^{[0]}(z)$ 이 모두 $(2N+1)$ 개의 결합과 기저 성분을 가진 열벡터이다. $\mathbf{G}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{Y}, \bar{\mathbf{Y}}$ 는 식 (73), 식 (74), 식 (75), 식 (76)에서 정의되었으며, $\mathbf{H}, \bar{\mathbf{H}}, \mathbf{Y}', \bar{\mathbf{Y}}'$ 은 $(L+1)^2$ 개의 층성분을 갖는 정방행렬이며 각각의 층성분은 다음과 같이 주어지며 모두 $(2N+1)^2$ 개의 결합과 기저 성분을 갖는 정방행렬이다.

<439> 식 (121):

$$\mathbf{H}_{lm} = \begin{cases} \Delta_{lm}^{(+)} & \text{for } l > m, m \neq L \\ \Delta_{lm}^{(-)} & \text{for } l \leq m, m \neq L \\ 0 & \text{for } m = L \end{cases}$$

<440>

<441> 식 (122):

$$\bar{\mathbf{H}}_{lm} = \begin{cases} 0 & \text{for } l = 0 \\ \bar{\Delta}_{lm}^{(+)} & \text{for } l \neq 0, l \geq m \\ \Delta_{lm}^{(-)} & \text{for } l \neq 0, l < m \end{cases}$$

<442>

<443> 식 (123):

$$\mathbf{Y}'_{lm} = \begin{cases} \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_{l+1} \mathbf{K}_x \delta_{lm} & \text{for } l \neq L \\ 0 & \text{for } l = L \end{cases}$$

<444>

<445> 식 (124):

$$\bar{\mathbf{Y}}'_{lm} = \begin{cases} 0 & \text{for } l = 0 \\ \mathbf{K}_x \tilde{\mathbf{Y}}_l \mathbf{K}_x \delta_{lm} & \text{for } l \neq 0 \end{cases}$$

<446>

<447> TE 모드에서와 비슷하게 다층 Ga 구조, 단층 G1 구조, 단층 Ga 구조, G0 구조에 대한 대응되는 식을 얻을 수 있다.

<448> 식 (120)의 행렬 방정식은 초기화 값 $\mathbf{U} = \mathbf{U}^{[0]}$ 을 가지고 TE 모드에서와 같이 반복법으로 푼다.

<449> B. $\mathbf{g}_0$ 와 $\mathbf{f}_{L+1}$ 의 계산

<450> 반사율 열벡터 $\mathbf{g}_0 = (\rho_{-N}, \dots, \rho_{-1}, \rho_0, \rho_1, \dots, \rho_N)^T$ 는 다음과 같이 추출해낼 수 있다.

<451> 식 (125):

$$\mathbf{g}_0 = \mathbf{g}_0^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [\mathbf{G}_{0l} \mathbf{Y}'_{lm} + \bar{\mathbf{G}}_{0l} \bar{\mathbf{Y}}'_{lm} + \mathbf{H}_{0l} \mathbf{Y}_{lm} + \bar{\mathbf{H}}_{0l} \bar{\mathbf{Y}}_{lm}] \mathbf{U}_m$$

<452>

<453> 여기서 $\mathbf{g}_0^{[0]} = (\rho_{-N}^{[0]}, \dots, \rho_{-1}^{[0]}, \rho_0^{[0]}, \rho_1^{[0]}, \dots, \rho_N^{[0]})^T$ 는 영차 반사율 행렬이다. 주차수(principal order) 반사 회절파의 반사율을 얻고자 하면 $\rho_0 = (\mathbf{g}_0)_0$ 을 추출하면 된다.

<454> 비슷한 방법으로 투과율 열벡터 $\mathbf{f}_{L+1} = (\tau_{-N}, \dots, \tau_{-1}, \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_N)^T$ 는,

<455> 식 (126):

$$\mathbf{f}_{L+1} = \mathbf{f}_{L+1}^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [\mathbf{G}_{Ll} \mathbf{Y}'_{lm} + \bar{\mathbf{G}}_{Ll} \bar{\mathbf{Y}}'_{lm} + \mathbf{H}_{Ll} \mathbf{Y}_{lm} + \bar{\mathbf{H}}_{Ll} \bar{\mathbf{Y}}_{lm}] \mathbf{U}_m$$

<456>

<457> 으로 주어진다. 여기서 $\mathbf{f}_{L+1}^{[0]} = (\tau_{-N}^{[0]}, \dots, \tau_{-1}^{[0]}, \tau_0^{[0]}, \tau_1^{[0]}, \dots, \tau_N^{[0]})^T$ 는 영차 투과율 행렬이며, $\tau_0 = (\mathcal{f}_{L+1})$ 는 주차수(principal order) 투과 회절파의 투과율이다.

<458> 이렇게 하여 계산한 TE 모드와 TM 모드에 대한 각각의 반사율 및 투과율을 실제 측정된 반사율 및 투과율과 비교함으로써, 여러 주기 구조물, 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 주기 구조물은 상술한 예에 한정되지 않음은 물론이다.

<459> 이상에서 설명한 본 발명의 실시예는 단지 예시의 목적을 위해 개시된 것이고, 본 발명에 대한 통상의 지식을 가지는 당업자라면 본 발명의 사상과 범위 안에서 다양한 수정, 변경, 부가가 가능할 것이다.

도면의 간단한 설명

<460> 도 1은 본 발명의 검사 방법을 개략적으로 도시한 순서도이다.

<461> 도 2 및 도 3은 주기 구조물의 검사 장치를 개략적으로 도시한 모식도이다.

<462> 도 4는 가상 주기 구조물의 일례를 도시한 사시도이다.

<463> 도 5는 도 4의 가상 주기 구조물의 단면을 복수의 층으로 나눈 단면도이다.

<464> 도 6은 본 발명에 따른 가상 주기 구조물의 기하학적 구조를 도시한 사시도이다.

<465> 도 7은 도 6의 가상 주기 구조물의 단면을 복수의 층으로 나눈 단면도이다.

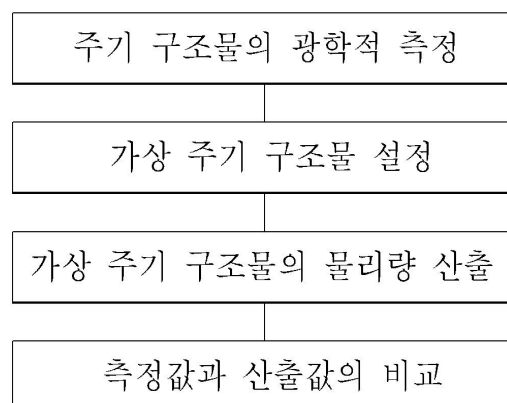
<466> 도 8은 본 발명의 일실시예에 따른 가상 주기 구조물의 기하학적 구조를 보인 단면도이다.

<467> 도 9 및 10은 TE 모드 및 TM 모드에서 산화막을 고려한 가상 주기 구조물과 산화막을 고려하지 않은 가상 주기 구조물의 반사율을 계산한 결과를 도시한 그래프이다.

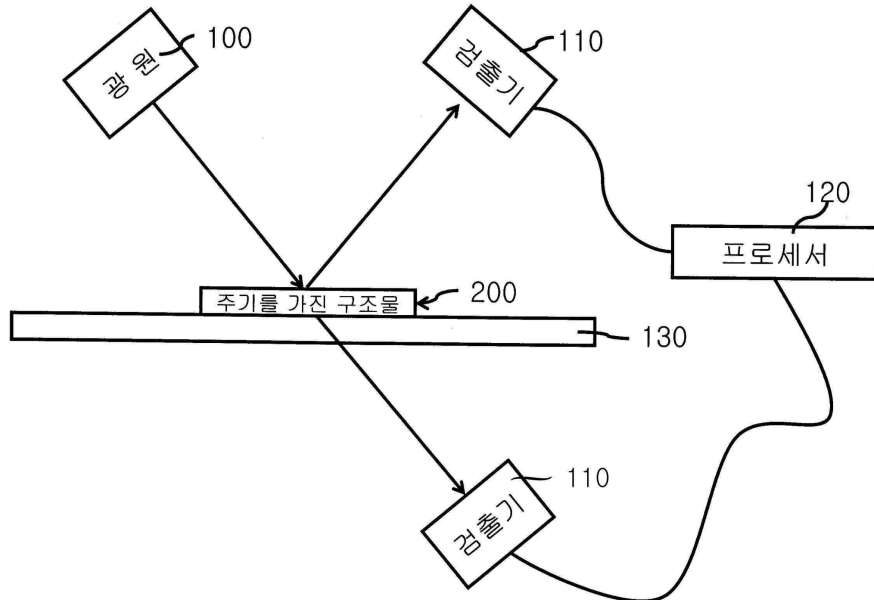
<468> 도 11 및 도 12는 도 9 및 도 10의 계산 결과로부터 타원편광분석법에서 측정하는 물리량들을 추출한 결과를 도시한 그래프이다.

도면

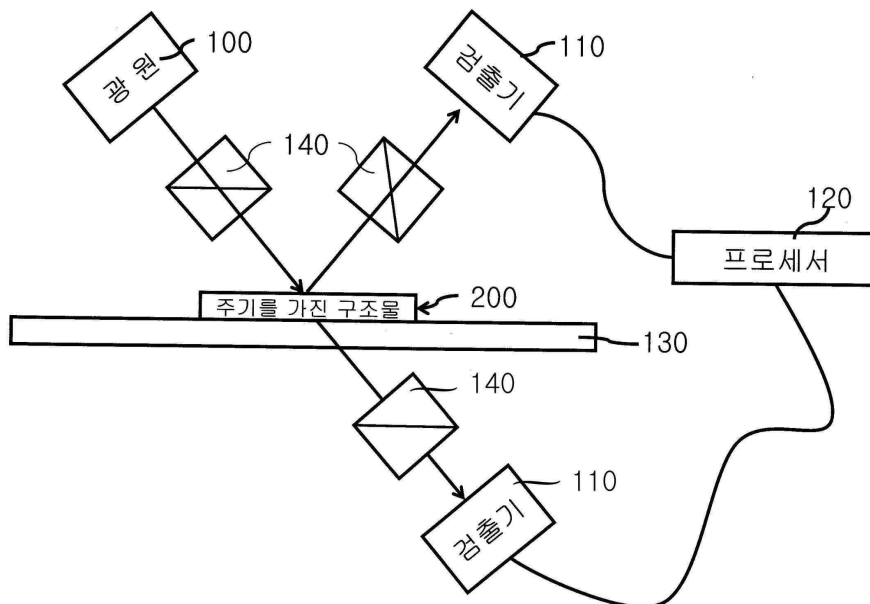
도면1



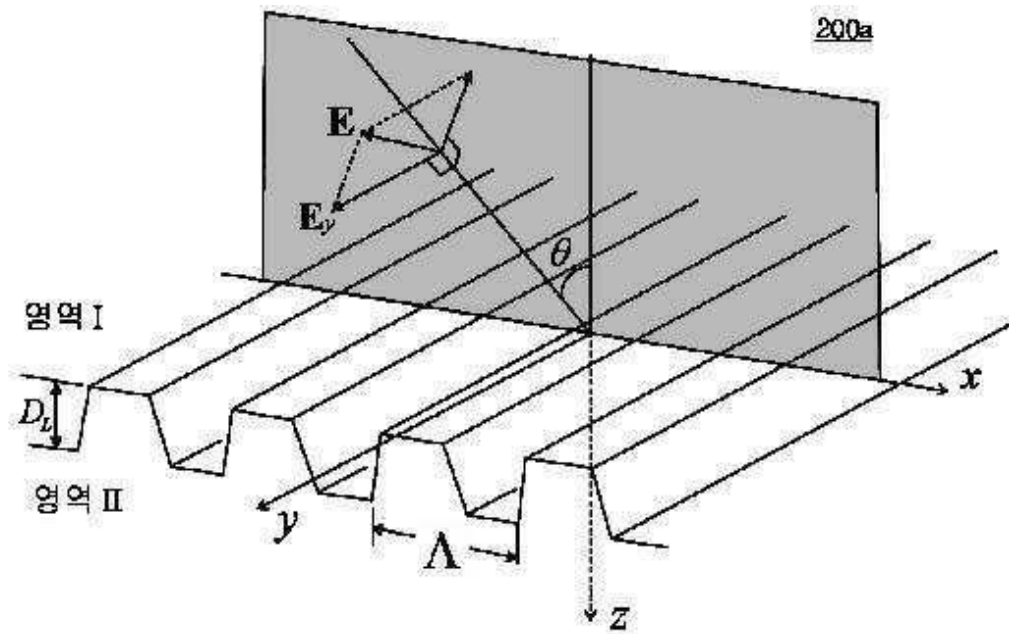
도면2



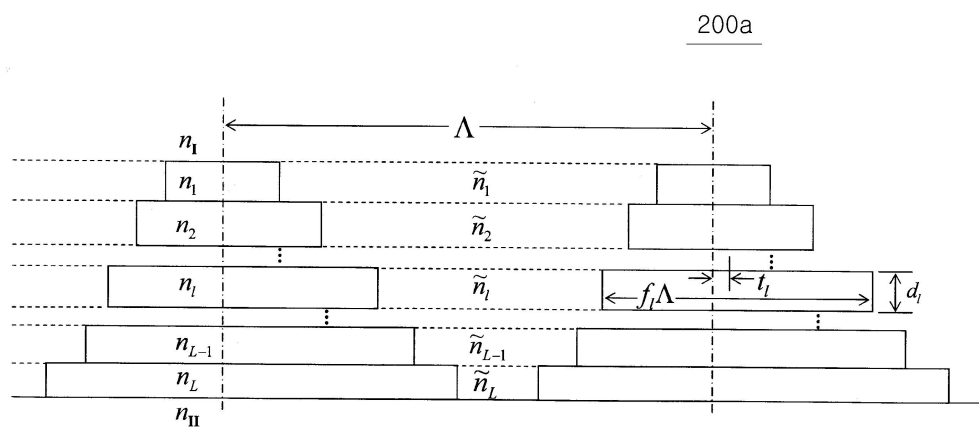
도면3



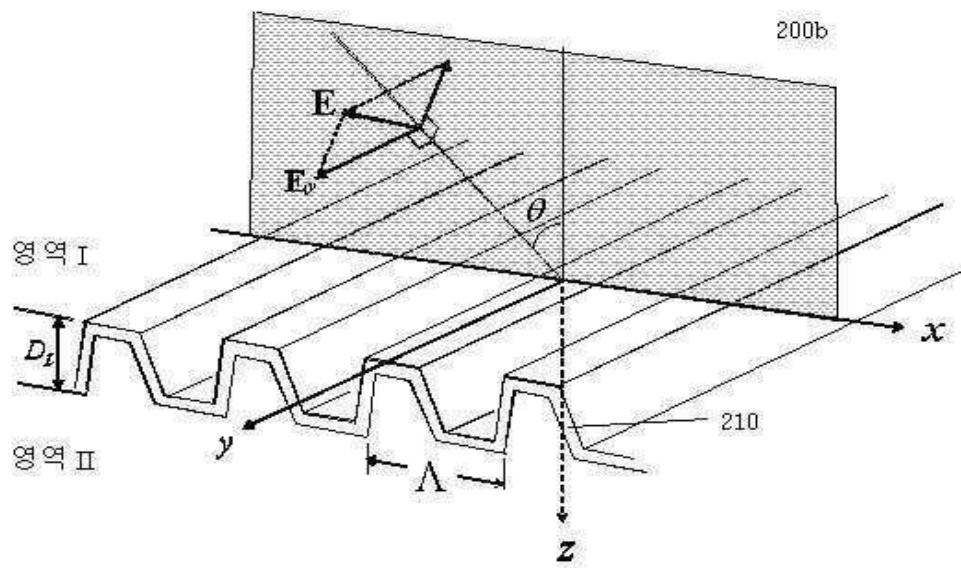
도면4



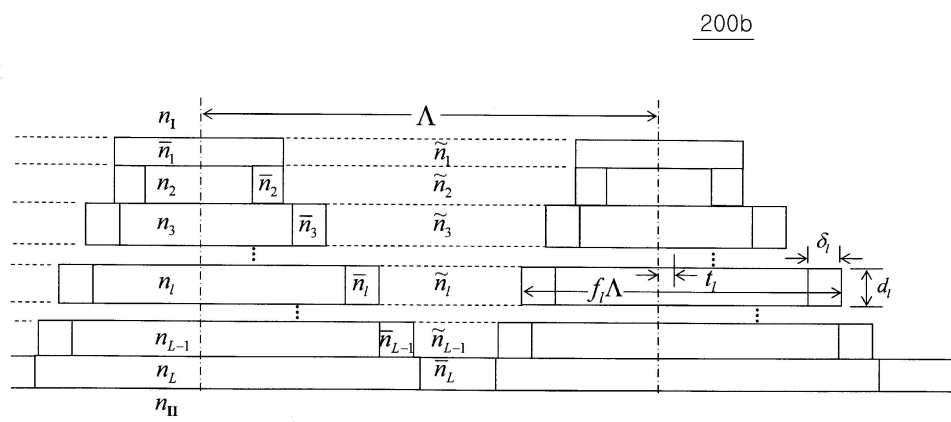
도면5



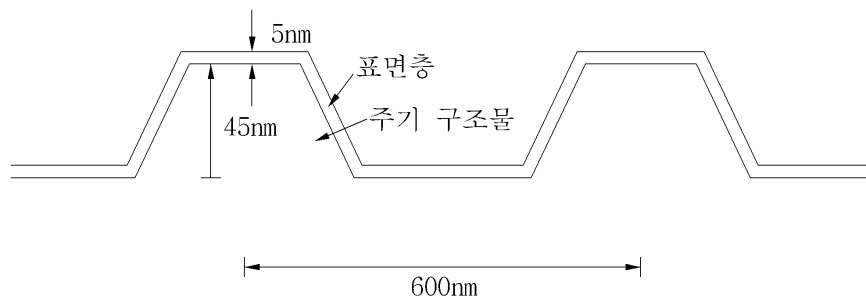
도면6



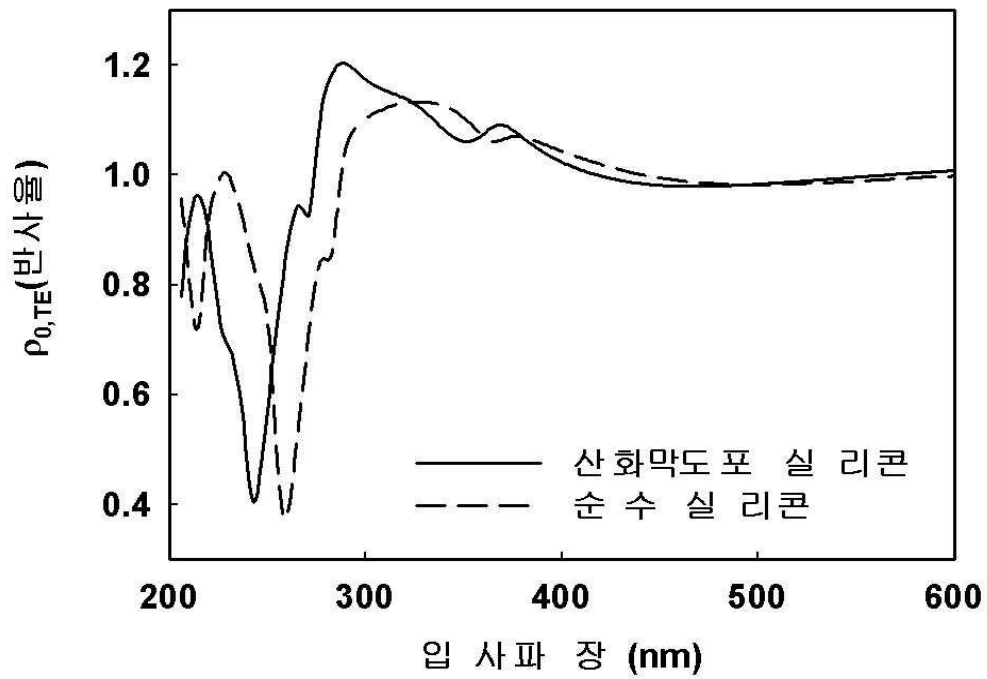
도면7



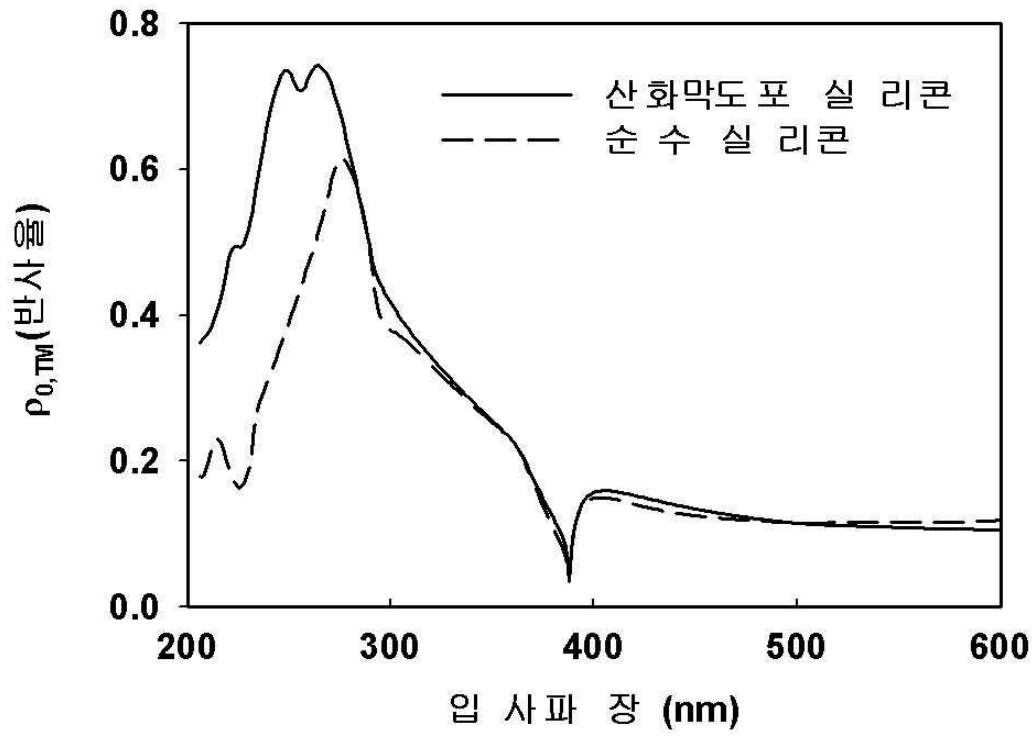
도면8



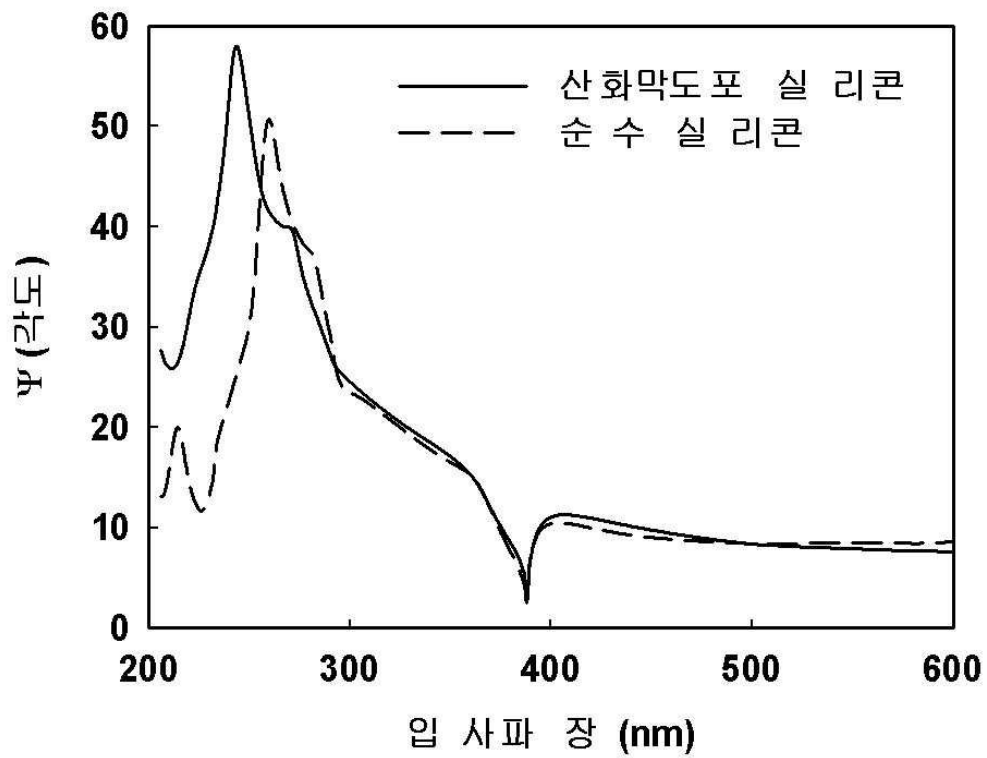
도면9



도면10



도면11



도면12

