

發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：97111443

※申請日期：97年3月28日

※IPC 分類：G01N 1/55 (2006.01)

G01N 1/59 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

多層式週期結構之物理性質的測量方法

METHOD FOR DETERMINING PHYSICAL PROPERTIES OF A
MULTILAYERED PERIODIC STRUCTURE

二、申請人：(共1人)

姓名或名稱：(中文/英文)

熙大學校產學協力團

University-Industry Cooperation Group of Kyung Hee University

代表人：(中文/英文)

金東術

KIM, DONG-SOOL

住居所或營業所地址：(中文/英文)

大韓民國京畿道龍仁市器興區書川洞1

1, Seocheon-dong, Giheung-gu, Yongin-si, Gyeonggi-do 446-701, Republic
of Korea

國籍：(中文/英文)

韓國/Korea

三、發明人：(共3人)

姓名：(中文/英文)

1.金榮東/KIM, YOUNG DONG

2.鄭珍謨/CHUNG, JIN MO

3.韓承鎬/HAN, SEUNG HO

國 籍：(中文/英文)

- 1.韓國/Korea
- 2.韓國/Korea
- 3.韓國/Korea

四、聲明事項：

☐ 主張專利法第二十二條第二項 ☐ 第一款或 ☐ 第二款規定之事實，其事實發生日期為： 年 月 日。

☒ 申請前已向下列國家(地區)申請專利：

【格式請依：受理國家(地區)、申請日、申請案號 順序註記】

☒ 有主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

- 1.韓國；2007年5月30日；10-2007-0052806
- 2.韓國；2007年8月1日；10-2007-0077351
- 3.韓國；2007年10月17日；10-2007-0104495
- 4.韓國；2007年10月17日；10-2007-0104496

☐ 無主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

☐ 主張專利法第二十九條第一項國內優先權：

【格式請依：申請日、申請案號 順序註記】

☐ 主張專利法第三十條生物材料：

☐ 須寄存生物材料者：

國內生物材料 【格式請依：寄存機構、日期、號碼 順序註記】

國外生物材料 【格式請依：寄存國家、機構、日期、號碼 順序註記】

☐ 不須寄存生物材料者：

所屬技術領域中具有通常知識者易於獲得時，不須寄存。

國 籍：(中文/英文)

- 1.韓國/Korea
- 2.韓國/Korea
- 3.韓國/Korea

四、聲明事項：

☐ 主張專利法第二十二條第二項☐第一款或☐第二款規定之事實，其事實發生日期為： 年 月 日。

☒ 申請前已向下列國家(地區)申請專利：

【格式請依：受理國家(地區)、申請日、申請案號 順序註記】

☒ 有主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

- 1.韓國；2007年5月30日；10-2007-0052806
- 2.韓國；2007年8月1日；10-2007-0077351
- 3.韓國；2007年10月17日；10-2007-0104495
- 4.韓國；2007年10月17日；10-2007-0104496

☐ 無主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

☐ 主張專利法第二十九條第一項國內優先權：

【格式請依：申請日、申請案號 順序註記】

☐ 主張專利法第三十條生物材料：

☐ 須寄存生物材料者：

國內生物材料 【格式請依：寄存機構、日期、號碼 順序註記】

國外生物材料 【格式請依：寄存國家、機構、日期、號碼 順序註記】

☐ 不須寄存生物材料者：

所屬技術領域中具有通常知識者易於獲得時，不須寄存。

九、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明之實施例是關於測試週期結構的方法，用以例如判斷出具有一維或多維重複特徵的結構形狀，該方法例如透過測量反射比或透射比進行非破壞性測試。

【先前技術】

一般而言，為了製造諸如半導體裝置或顯示裝置等電子裝置，需重覆多次清洗、薄膜生成、光微影和薄膜蝕刻等製程以製得消費性產品。以光微影製程為例，係形成具有用來製造影像的遮罩電路，並且將影像轉移到感光材料(光阻)上而形成圖案，以該圖案做為蝕刻阻障層而於薄膜上形成預定電路。

利用光微影製程所製得的半導體與顯示裝置中，需在每個步驟中將預定電路的形狀精確地轉移到薄膜。此動作取決於光微影製程的精確度。即，只有當預定圖案的形狀精確轉移到光阻且光阻適當地作為蝕刻阻障層時，精確電路才會形成於薄膜上。也就是說，在形成電路於薄膜前，要在光阻上形成精確圖案，其可利用測試製程來確認之。

為了檢測圖案，通常是使用如圖案測試器來觀察半導體裝置的形狀。然而圖案測試器的解析度不足以判斷長度僅數奈米的「奈米級」圖案形狀。因此使用圖案測試器難以進行精確分析。為解決此問題，半導體研究與生產線已利用如電子顯微鏡之設備來分析特殊形狀。

但使用電子顯微鏡時，需切出半導體裝置的截面以進行形狀分析，以致此半導體裝置不能再利用。再者，測量是在真空環境下進行，故需耗費相當長的時間才能得到測量結果。並且，此法不能選擇特定的樣品區域進行測量。基於以上缺點，要將電子顯微鏡實際應用於生產線上仍有諸多困難。

為解決上述問題，已發展出採行光學測量法之技術，例如包括採用稱為有效介質近似(EMA)的近似法。以EMA計算之方法的問題在於，近似法只考量特定週期內之組成物質的體積比，而不管結構的詳細形狀，故其無法區別結構的詳細形狀。也就是，由於未特別區分具有週期結構之電路圖案的形狀，而只是區分特定週期內之組成物質的體積比，故真實結構與測量結構之間的差異甚大。明確地說，就週期結構而言，以EMA的計算方法不能區分具有相同體積比的不同週期結構，因此迫切需要新的光學測量法。

【發明內容】

因此，本發明一實施例提出一種非破壞性測試方法，其可分析週期結構的特殊形狀和其內部組成。

在本發明一特定實施例中提出一種非破壞性測試方法，其可精確測量週期結構的實際形狀及考量週期結構上的表層，例如氧化物層或塗層。

根據本發明一或多個實施例，光源的光線可入射在真實的週期結構上，以測量入射光的反射比或透射比，或測

量與反射比與透射比相關的物理性質。

另外，在此實施例中，設定一虛擬週期結構(virtual periodic structure)，當光線照射在虛擬週期結構上時，可計算出入射光的反射比或透射比，或計算出與反射比和透射比相關的物理性質，並且將其與測量的物理性質相比較。

虛擬週期結構可具一維、二維或三維的週期性。為了便於計算，可將虛擬週期結構水平地劃分成多層。在所劃分之虛擬週期結構的中間層中，在指定週期內會重複出現三種物質。

虛擬週期結構的反射比、透射比和相關物理性質可利用形成虛擬週期結構之物質的折射率計算而得。實際測量的反射比、透射比和相關物理性質可與計算而得的對應物理性質相比較，從而判斷真實週期結構的構造是否與虛擬週期結構相同。

虛擬週期結構的反射比、透射比或二者可使用例如在 Floquet 條件下之 Maxwell 方程式的傅立葉(Fourier)級數解來求得。

根據本發明一實施例，虛擬週期結構可劃分成第零階結構，以及相對於擾動區域(perturbation region)中之第零階結構而言具有幾何或物理變化的擾動週期結構。藉由匹配所有分層中 Maxwell 方程式的傅立葉級數解，可計算出與照射在第零階結構上之光線的反射比與透射比相關的物理性質。接著，利用第零階結構的 Green 函數(例如參見下式 8)解出相關 Lippmann-Schwinger 方程式(例如參見下式

9)，可得到與擾動虛擬週期結構之反射比或透射比相關的物理性質，或與二者相關的物理性質。

故根據本發明之一或多個實施例，可非破壞性地測試週期結構的構造和內部組成。

根據本發明一特定實施例，可精確測量出具原生氧化物層或特意形成表面塗層之原始週期結構的相關微觀變化。本發明之實施例有益於半導體產業或其他奈米技術的發展。

【實施方式】

本發明之特定實施例現將參照所附圖式詳細說明於下。

第 1 圖為根據本發明一實施例之測試方法的流程圖。利用第 1 圖之測試方法，可非破壞性地測試週期結構的構造和內部組成。明確地說，即使週期結構包括原生氧化物層形成其上或包括特意形成之表面塗層，也能精確判斷出週期結構的形狀、尺寸或二者。

測量週期結構

第 2 及 3 圖為用來測試週期結構 200 之裝置的方塊示意圖。參照第 2 圖，測試裝置包含光源 100、偵測器 110、和處理器 120。當週期結構做為測試目標並且位於基材 130 上時，光源 100 發出特定波長或各種波長的光線照射至週期結構 200。入射在週期結構 200 上的光線會部分穿透且部分反射。偵測器 110 偵測反射光，處理器 120 則計算出

偵測器 110 測得之反射光的反射比。偵測器 110 還偵測穿透光，且處理器 120 計算出偵測器 110 測得之穿透波的透射比。

如第 3 圖所示，測試裝置可更包含偏光器 140。在此例中，光源 100 產生之光線經偏光器 140 偏極化成 TE 模式或 TM 模式而入射在週期結構 200 上。

當光線照射在週期結構 200 上時，入射光分成反射光和穿透光。在本發明一實施例中，計算出在二種最基本偏振狀態下(即 TE 模式和 TM 模式)之反射光和穿透光的反射比和透射比，藉以非破壞性地測試週期結構。

例如，使光線入射在週期結構上而測得與反射比和透射比相關的物理性質可理解為是入射波在 TE 模式電場下與反射波和穿透波之振幅或相位相關的物理性質以及入射波在 TM 模式磁場下與反射波和穿透波之振幅或相位相關之物理性質的結合。

虛擬週期結構

第 4 圖為虛擬週期結構 200a 之幾何構造的透視圖，第 5 圖繪示第 4 圖之虛擬週期結構 200a 被劃分成多層的截面圖。

若虛擬週期結構 200a 為具一維、二維或三維週期結構之形狀的半導體裝置，則組成虛擬週期結構 200a 的各層中，由如矽等物質所形成之物質部份($n_1 \sim n_L$)和如空氣層等入射部份之物質部份($\tilde{n}_1 \sim \tilde{n}_L$)的二種物質具有水平方向上的週期性。

然實際的半導體製程環境不可能在完美的真空狀態下製造週期結構，以致於真實週期結構的表面會接觸到空氣或水後而形成氧化物層。另外，在製程步驟中，特意形成塗層或粗糙層於週期結構表面上，故難以推定出第 4 圖週期結構的實際幾何形狀。

第 6 圖繪示根據本發明一實施例之虛擬週期結構 200b 的幾何形狀態樣。如氧化物層等表層 210 形成在虛擬週期結構 200b 的表面。如第 7 圖所示，當虛擬週期結構 200b 的截面被劃分成多層時，虛擬週期結構 200b 為週期性地重複出現至少三種物質。虛擬週期結構 200b 包括相當於溝槽區域之第三物質兩側的隆起區域。隆起區域由第二物質以及構成中間部份的第一物質所形成。第二物質包括一形成在該中間部份之外表面上的表層。在第 7 圖中， $n_l (l = 2, \dots, L)$ 、 $\tilde{n}_l (l = 1, \dots, L-1)$ 和 $\bar{n}_l (l = 1, \dots, L)$ 分別代表隆起區域(第一物質)、溝槽區域(第三物質)和表層區域(第二物質)。隆起區域可由單一物質，或二個或多個垂直或水平設置的不同物質組成。故隆起區域的第一物質可由複數個物質組成。

表層區域(第二物質)可為氧化物層或塗層，或可為週期結構表面的粗糙層。佔據溝槽區域的第三物質可為氣體、液體或固體或其組合物。

例如，當虛擬週期結構 200b 為半導體裝置時，除了最高層(層 1)以外的多層(層 1~L)可由如矽等半導體之第一物質所形成，並且最高層(層 1)是第二物質(如氧化物層或塗層)。可以是空氣層或其他氣體、液體或固體物質之第三物

質可位在各層 $1 \sim L$ 之間的溝槽內。層 $1 \sim L$ 和第三物質可水平地及週期性地重複出現於週期結構中。

若考量表層 210(如氧化物層、塗層或表面粗糙層)的情況下設定虛擬週期結構 200b, 則虛擬週期結構的反射比和透射比計算結果將更接近真實週期結構的反射比和透射比。如此可精確測量真實週期結構的形狀和組成。明確地說, 其可比較及分析週期結構的幾何形狀和內部組成, 包括週期結構中之薄膜結構的厚度。

計算虛擬週期結構的物理性質

藉由展開傅立葉(Fourier)級數中的折射率和 Floquet 級數中的電場與磁場, 可求得虛擬週期結構的光反射比和透射比。為說明垂直方向(對齊第 4 圖 z 軸之方向)上的折射率垂直變化, 虛擬週期結構 200b 如第 7 圖所示般劃分成複數層(層 $1 \sim L$), 且假設各層折射率在該層的垂直高度上固定不變。增加虛擬週期結構 200b 的分層數目和傅立葉級數展開項數, 可得到更精確的解。

區域 I 和區域 II 中電波與磁波的複展開係數分別代表反射波與穿透波的振幅與相位。各層中介電函數的展開係數可表示成構成隆起區域之第一與第二物質以及構成溝槽區域之第三物質各物質的複折射率, 第一與第二物質所佔據之區域和週期 Λ 的比率 f_1 、第二物質獨佔區域的比率 $2\delta_1/\Lambda$ 和用來指示層 l 之中心在 x 方向上偏離層 1 之中心有多遠的參數 t_l 。

另外, 在本發明一實施例中, 為了計算虛擬週期結構

的物理性質，將虛擬週期結構的形狀假設為第零階週期結構。接著，將擾動區域之第零階週期結構施予幾何或物理變化，可得擾動週期結構。

為取得擾動週期結構的反射比或透射比，可利用 Green 函數的數值計算及使用第零階結構的透射比做為輸入值，來解出 Lippmann-Schwinger 方程式(下式 9)。

如上所述，以 Floquet 條件解 Maxwell 方程式，可求得第零階週期結構的反射比和透射比。為達到此目的，將虛擬週期結構 200b 劃分成具矩形截面的多層(層 1~L)，然後按傅立葉級數展開各層的介電函數。當光線入射在虛擬週期結構 200b 上時，亦以藉著代入電場與磁場條件所決定出之係數按 Floquet 級數來展開各層的反射波和透射波。

從所決定的展開係數可算出第零階週期結構的反射比($\rho_{TE}^{[0]}$ 與 $\rho_{TM}^{[0]}$)和透射比($\tau_{TE}^{[0]}$ 與 $\tau_{TM}^{[0]}$)。

應用計算第零階週期結構之透射比或反射比的方法，可獲得擾動區域中之第零階結構的 Green 函數。

利用由 Lippmann-Schwinger 方程式解得之擾動結構各層中之耦合波在 TE 模式電場下和 TM 模式磁場下的展開係數，可計算出擾動週期結構的反射比(ρ_{TE} 與 ρ_{TM})和透射比(τ_{TE} 與 τ_{TM})。

根據本發明一實施例，入射介質(區域 I)與基材(區域 II)之間的週期結構劃分成 L 層，其某些層或所有層由均一物質組成。劃分後的柵狀結構可分成下列數例：(i)整個擾動區域的各層全由均一物質組成(例 1)；(ii)擾動區域的

所有層是由單一均一物質組成(例 2); (iii)擾動區域當作基材上的空氣層(例 3); 和(iv)各層並非由均一物質組成, 但所有層是由一指定層重複構成(例 4)。

根據本發明一實施例, 考量週期結構和表層後, 可具體求得例 1、例 2、例 3 和例 4 的計算結果, 其將進一步描述於後。

比較測量值與計算值

比較週期結構實際測量的反射比與虛擬週期結構計算出來的反射比。或者, 比較週期結構的實際測量透射比與虛擬週期結構的計算透射比。又或者, 比較週期結構之實際反射比或透射比相關性質與虛擬週期結構之計算反射比或透射比相關性質。若這些數值同樣落在預定誤差範圍內, 則從測量反射比或透射比所判斷出來的真實週期結構將視為與從計算反射比或透射比所決定的虛擬週期結構 200b 相同。

比較測量反射比和透射比與計算反射比和透射比時, 可使用諸如電腦之附加裝置來比較測量值與計算值。藉此方法, 可精確且有效地判斷真實週期結構 200 的幾何構造, 例如形狀和尺寸。

在週期結構的測量實驗中, 可測量各種與反射比 ρ 和透射比 τ 相關的物理性質。由依數學法計算而得的反射比 ρ 和透射比 τ 可獲得測量物理性質相關的推測值。

實施例

第 8 圖繪示本發明一實施例之虛擬週期結構, 其包括

表層。虛擬週期結構的重複週期為 60 奈米 (nm)。結晶矽組成之隆起區域的厚度為 45 奈米，隆起區域表面上的氧化物厚度為 5 奈米，隆起區域的斜度為 81 度。

虛擬週期結構的斜度與週期以及隆起區域的寬度與高度可為任意值。另外，其也可以具有任何形狀。

利用根據本發明一實施例之方法可計算虛擬週期結構的物理性質，並且該虛擬週期結構的計算物理性質將與真實週期結構的測量值相比較。

第 9 及 10 圖分別繪示在 TE 模式和 TM 模式下考量氧化物層 (如第 8 圖所示) 和不考量氧化物層所計算之虛擬週期結構的反射比曲線。也就是，在考量氧化物層 (即虛擬週期結構是由覆蓋著氧化物層的矽所構成) 以及不考量氧化物層 (即虛擬週期結構是由純矽組成) 的情況下，分別在 TE 模式和 TM 模式下所計算出入射波長的反射比。

依據所示結果，純矽的反射比計算值與覆蓋氧化物層之矽的反射比明顯不同。也就是，虛擬週期結構與真實週期結構的近似程度明顯取決於是否假設存在有如氧化物層等表層。以測量含有如氧化物層等表層之真實週期結構的構造為例，倘若虛擬週期結構假設僅由純矽組成，則虛擬週期結構的計算值永遠不會與真實週期結構的測量值相等。若待測量的真實週期結構包括如氧化物層等表層，則只有假設虛擬週期結構是由覆蓋氧化物層的矽所構成時，才會顯著提高與真實週期結構的相似程度。

第 11 及 12 圖分別繪示從第 9 及 10 圖之計算結果中擷

取出利用橢圓儀所測量出的物理性質。圖形顯示可利用根據本發明實施例之方法的計算結果來得到各種物理性質。明確地說，該些圖將反射比在 TM 模式 (ρ_M) 與 TE 模式 (ρ_E) 下的振幅和相位比率表示成利用一般橢圓儀測量出的物理性質 Ψ 和 Δ 曲線。分析圖形後可知，純矽組成的虛擬週期結構和覆蓋氧化物層且由矽組成的虛擬週期結構差別很大。如上述，藉著從反射比或透射比取得各種物理性質來比較真實週期結構的構造時，若假定虛擬週期結構含有氧化物層，越能精確推測出真實週期結構的構造。

根據本發明其他實施例，計算第 6 及 7 圖虛擬週期結構 200b 之反射比和透射比的方法將說明於下：

I. Lippmann-Schwinger 方程式：(TE 模式)

因週期結構在 x 方向具週期性，Maxwell 方程式的 TE 模式解可寫成：

式 (1)

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

式 (2)

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

其中 $i = \sqrt{-1}$ ， $k_{xn} = k_0 [n_l \sin \theta - n(\lambda_0/\Lambda)]$ ， $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ ， λ_0 為入射波在真空下的波長， n_l 為入射區域的折射率， θ 為入射角， ϵ_0 為真空的介電常數 (permittivity)， μ_0 為真空的透磁率 (permeability)。

在 x 方向上，一維週期等於 Λ 的週期結構之介電含數

可按傅立葉級數展開成：

式(3)

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

由 Maxwell 方程式可知，式(1)的 $S_{ym}(z)$ 和式(2)的 $U_{xm}(z)$ 可合併如下：

式(4)

$$\begin{bmatrix} (1/k_0) \partial S_y(z) / \partial z \\ (1/k_0) \partial U_x(z) / \partial z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ A(z) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_y(z) \\ U_x(z) \end{bmatrix}$$

其中 I 為 $(2N+1)$ 維的單位矩陣，以及

式(5)

$$A(z) \equiv K_x^2 - E(z)$$

其中 K_x 為對角矩陣且 (n, n) 元素等於 k_{xn}/k_0 ， $E(z)$ 為介電常數諧波分量組成的矩陣且 (n, p) 元素等於 $E_{np}(z) = \varepsilon_{(n-p)}(z)$ 。

以下，截取耦合波基本係數 (coupled-wave-basis index)，使其從 $-N$ 到 N 。

合併式(4)中的兩個一階微分方程式可得：

式(6)

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

加入上標 $[0]$ 表示第零階結構後，可得類似的式子：

式(7)

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

對應的 Green 函數可表示成：

式(8)

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

由式(6)、式(7)和式(8)可得 Lippmann-Schwinger 方程式：

式(9)

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

其中 $Y(z) \equiv E(z) - E^{[0]}(z)$ 。在式(9)中，因擾動區域外的 $Y(z)=0$ ，故積分範圍限定在擾動區域內。

II. 計算 $S_y^{[0]}(z)$

此節說明將省略在前文中代表第零階週期結構相關量的上標 [0]。

A. 劃分週期結構區域為多層

將包括氧化物層、塗層或表層的週期結構預估成是由具有共同週期 Λ 之矩形平行層所構成的堆疊結構，以將介電函數 $\varepsilon(x, z)$ 的 z 相依性轉換成表示各層的係數 l 。接著將特定層 l 的介電函數寫成 $\varepsilon^{(l)}(x)$ 並以下式表示：

式(10)

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

式(10)中各層的展開係數 $\varepsilon_h^{(l)}$ 如下：

$$l = 1$$

式(11)

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

式 (12)

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

$$l = 2 \sim (L-1)$$

式 (13)

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

式 (14)

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

$$l = L$$

式 (15)

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

式 (16)

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

其中 $n_l (l = 2, \dots, L)$ 、 $\tilde{n}_l (l = 1, \dots, L-1)$ 和 $\bar{n}_l (l = 1, \dots, L)$ 分別代表層 l 之隆起區域、溝槽區域和表層區域的複折射率， f_l 為隆起區域(第一與第二物質)佔據之週期 Λ 的比率， $2\delta_l/\Lambda$ 為氧化物層區域(第二物質)獨佔之週期的比率，而 $t_l (t_1=t_2=0)$ 為層 l 之中心在 x 方向上相對於層 1 之中心而偏離的中心偏離參數。

將週期結構劃分成多層時，部分或全部的分層可由均一物質組成。如上述，多層 Ga 結構表示所有層的各層各由一種均一物質組成，而單層 Ga 結構表示所有層是由單一均一物質組成。另外，若各層並非由單一均一物質組成，但所有層是由一特定層重複地構成時，則定義為單

層 G1 結構。明確地說，第 6 圖的區域 II 可為空氣層。

區域 I 和區域 II 之電場與磁場的解可以 Floquet 條件表示如下：

式 (17)

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

式 (18)

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

式 (19)

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

式 (20)

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

其中：

式 (21)

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

式 (22)

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

式 (23)

$$S_{yn}^{(L+1)}(z) = \tau_n e^{ik_{11,zn}(z-z_L)}$$

式 (24)

$$U_{xn}^{(L+1)}(z) = \tau_n (ik_{11,zn}/k_0) e^{ik_{11,zn}z}$$

式 (25)

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

其中 n_I 和 n_{II} 為入射介質和基材的複折射率。式(21)右側第一項代表入射波。

週期結構區域 ($l = 1, \dots, L$) 的電場與磁場可以耦合波來展開：

式(26)

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

式(27)

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

將式(7)應用到層 l 可得 $S_{yn}^{(l)} (n = -N, \dots, N)$ ，其代入式(26)後變成：

式(28)

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

其中：

式(29)

$$A_l \equiv K_x^2 - E_l$$

其中 E_l 的 (n, p) 元素等於 $E_{l,np} = \epsilon_{(n-p)}^{(l)}$ 。

式(28)的解 $S_y^{(l)}(z)$ 和 $U_x^{(l)}(z)$ 可表示如下：

式(30)

$$S_y^{(l)}(z) = W_l [e^{-k_0 Q_l(z-z_{l-1})} f_l + e^{k_0 Q_l(z-z_{l-1})} g_l]$$

式(31)

$$U_x^{(l)}(z) = V_l [-e^{-k_0 Q_l(z-z_{l-1})} f_l + e^{k_0 Q_l(z-z_{l-1})} g_l]$$

其中 W_l 是從 A_l 之 $(2N+1)$ 特徵向量所獲得的矩陣， Q_l

是對角矩陣，其矩陣元素為 A_l 之 $(2N+1)$ 特徵向量之正平方根，且 $V_l = W_l Q_l$ ； f_l 和 g_l 是由邊界條件所決定的行向量， z_{l-1} 為層 $l-1$ 與層 l 間之介面的 z 座標。

式(21)、式(22)、式(23)和式(24)分別可寫成以下矩陣形式：

式(32)

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

式(33)

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

式(34)

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

式(35)

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

其中 Q_0 和 Q_{L+1} 分別代表第 n 個對角元素為 $-ik_{I,zn}/k_0$ 和 $-ik_{II,zn}/k_0$ 的對角矩陣； $f_0 = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ 、 $g_0 = (\rho_{-N}, \dots, \rho_{-1}, \rho_0, \rho_1, \dots, \rho_N)^T$ 、 $f_{L+1} = (\tau_{-N}, \dots, \tau_{-1}, \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_N)^T$ 、 $g_{L+1} = (0, \dots, 0)^T$ 皆為 $(2N+1)$ 分量之行向量，且 $W_0 = I$ ， $V_0 = W_0 Q_0$ ， $W_{L+1} = I$ ， $V_{L+1} = W_{L+1} Q_{L+1}$ 。

B. 計算 f_l 和 g_l

運用邊界條件，使電場與磁場滿足 $z = z_l (l = 0, \dots, L)$ 可得：

式(36)

$$\begin{bmatrix} f_l \\ g_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_l^{-1} & 0 \\ 0 & X_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_l^+ & M_l^- \\ M_l^- & M_l^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{l+1} \\ g_{l+1} \end{bmatrix}$$

其中：

式(37)

$$X_l \equiv \begin{cases} e^{-k_0 Q_l d_l} & \text{for } l = 1, \dots, L \\ I & \text{for } l = 0 \end{cases}$$

式(38)

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

由於 A_l 為對稱矩陣，因此 A_l 的特徵向量為直角。故使用常態化的特徵向量矩陣 W_l 時，可用 W_l^T 代替 W_l^{-1} 以增強數值計算的效率。

式(36)的遞迴關係最終會變成以下形式：

式(39)

$$\begin{bmatrix} f_l \\ g_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_l \\ b_l \end{bmatrix} f_{L+1}$$

消掉式(39)的 f_{L+1} 後可得：

式(40)

$$g_l = b_l a_l^{-1} f_l \equiv R_l f_l$$

將 g_l 和 $g_{l+1} = R_l f_{l+1}$ 代入式(36)後，得到 $R_l (l = 0, 1, \dots, L)$ 的遞迴關係：

式(41)

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

從 $l=L$ 開始，以 $R_{L+1}=0$ 為初始設定值，反覆運用此遞迴關係來得到 R_l 的所有數值。

現已有用來決定式(40)中之 $R_l (l = 0, \dots, L)$ 的演算法，因此決定 $S^{(l)}$ 的剩餘問題在於計算 f_l 。因 f_0 為已知，故將入射介質的轉移矩陣法應用到層 l 可算出 f_l 。

為此，可反轉式(36)之遞迴關係而得：

式(42)

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

其中：

式(43)

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

以 $f_0 = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ 為初始設定，反覆運用式(42)可決定出所有的 f_l 。

III. 計算 $G(z, z')$ ：TE 模式

若 z 位於層 l 內，則式(8)變成：

式(44)

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

如同第 II 節，此節說明亦將省略前文中用來代表第零階週期結構相關量的上標 $[0]$ 。就特定層 l 而言， A_l 不再是 z 的函數。式(44)的解可表示如下：

式(45)

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

其中 W_l 和 Q_l 為如同第 II 節中由 A_l 之特徵向量與特徵值所建立的方陣， $f_{ll'}^\pm(z')$ 和 $g_{ll'}^\pm(z')$ 為匹配邊界條件而決定的常數方陣(在 z 之內)； $G_{ll'}(z, z')$ 、 $f_{ll'}^\pm(z')$ 和 $g_{ll'}^\pm(z')$ 中的下標 ll' 代表場域位置 z 位於層 l 內，而來源位置 z' 位於層 l' 內。

若下標 $l=0$ 指定為區域 I 且下標 $l=L+1$ 指定為區域 II，這些區域的解則可寫成：

式(46)

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

其中 W_0 、 Q_0 、 W_{L+1} 、 Q_{L+1} 如同前述內容所定義者， $f_{0l'}(z')$ 和 $g_{L+1,l'}(z')$ 為零矩陣。

A. 將基材 ($l=L+1$) 之轉移矩陣法應用到來源層 ($l=l'$)

代入 $G(z, z')$ 和 $G'(z, z') \equiv \partial G(z, z')/\partial z$ 在 $z=z_l (l=l', \dots, L)$

的匹配條件可得到類似式(36)的遞迴關係：

式(47)

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

其中 X_l 和 $M_l^\pm$ 如同式(37)和式(38)所定義者。反覆運用式(47)後將產生：

式(48)

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

消除 $f_{L+1,l'}^+(z')$ 後可得：

式(49)

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

將式(49)代入式(47)可得到與式(41)相同的遞迴關係：

式(50)

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

由於初始設定值 $R_{L+1}=0$ 相同，因此不需重複同樣的計算即可使用在第 II 節中決定出的 R_l 。

因演算 $g_{ll'}^+(z)$ 與 $f_{ll'}^+(z')$ 相關的式 (49) 和式 (50) 可決定出 R_l ，故 $f_{ll'}^+(z')$ 應解得 $G_{ll'}(z, z') (l > l')$ 。首先，先將 $f_{ll'}^+(z')$ 以 $f_{l'l}^+(z')$ 表示。為此，可反轉式 (47) 而得：

式 (51)

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

此式和式 (49) 可求得 $f_{ll'}^+(z')$ 的遞迴關係：

式 (52)

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

以 $l = l'+1, \dots, L$ ，反覆運用式 (52) 可得：

式 (53)

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

一旦取得 $f_{l'l'}^+(z')$ ，即可決定所有的 $f_{ll'}^+(z')$ 和 $g_{ll'}^+(z')$ 。在求得 $f_{ll'}^+(z')$ 前，先回到解出 $l < l'$ 之 $G_{ll'}(z, z')$ 的問題。

B. 將入射介質 ($l=0$) 之轉移矩陣法應用到來源層 ($l=l'$)

代入 $G(z, z')$ 和 $G'(z, z') \equiv \partial G(z, z') / \partial z$ 在 $z=z_l (l = 0, \dots,$

$l'-1)$ 的匹配條件可得：

式 (54)

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

其中 X_l 和 $N_l^\pm$ 如同前述定義般。重複運算式 (54) 可得：

式 (55)

$$\begin{bmatrix} \bar{f}_{ll'}^-(z') \\ \bar{g}_{ll'}^-(z') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{a}_l^- \\ \bar{b}_l^- \end{bmatrix} \bar{g}_{0l'}^-(z')$$

消除此式中的 $\bar{g}_{0l'}^-(z')$ 後， $f_{ll'}(z')$ 可以 $\bar{g}_{ll'}^-(z')$ 表示成：

式(56)

$$\bar{f}_{ll'}^-(z') = \bar{a}_l^-(\bar{b}_l^-)^{-1} \bar{g}_{ll'}^-(z') \equiv \bar{r}_l \bar{g}_{ll'}^-(z')$$

利用式(56)消除式(54)中的 $f_{l+1,l'}(z')$ 和 $f_{ll'}(z')$ 後，可得遞迴關係：

式(57)

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

從 $l=0$ 開始，以 $\bar{r}_0=0$ 為初始設定，反覆運用此遞迴關係可得到 $\bar{r}_l$ 的所有數值。

由於 $f_{ll'}(z')$ 已以 $\bar{g}_{ll'}^-(z')$ 表示，故剩下決定 $\bar{g}_{ll'}^-(z')$ 的問題。為此，將 $\bar{g}_{ll'}^-(z')$ 以 $\bar{g}_{l+1,l'}^-(z')$ 表示。代入 $z=z_l (l < l')$ 的邊界條件可得到式(47)型式的匹配方程式：

式(58)

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

從式(58)與式(56)可得 $\bar{g}_{ll'}^-(z')$ 的遞迴關係：

式(59)

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

如此， $\bar{g}_{ll'}^-(z') (l = 1, \dots, l'-1)$ 可以 $\bar{g}_{l'l'}^-(z')$ 表示：

式(60)

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

取得 $g_{lr}(z')$ 後，可決定所有的 $g_{ul}(z')$ 和 $f_{ul}(z')$ ($l = 1, \dots, l'-1$)。

C. G 和 $\partial G/\partial z$ 在 $z=z'$ 的邊界條件應用

現將修正 $f_{lr}^+(z')$ 和 $g_{lr}(z')$ 。 $z=z'$ 時，就式(44)右側的三角函數來說， $G_{lr}(z, z')$ 為連續，而 $G_{lr}'(z, z') = \partial G_{lr}(z, z')/\partial z$ 為不連續，藉此可得：

式(61)

$$\begin{bmatrix} f_{lr}^+(z') \\ g_{lr}^-(z') \end{bmatrix} = \frac{k_0}{2} \begin{bmatrix} [I - \bar{r}_l R_l]^{-1} & -\bar{r}_l [I - R_l \bar{r}_l]^{-1} \\ R_l [I - \bar{r}_l R_l]^{-1} & -[I - R_l \bar{r}_l]^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{k_0 Q_{lr}(z' - z_{l'-1})} \\ -e^{-k_0 Q_{lr}(z' - z_{l'-1})} \end{bmatrix} Q_{lr}^{-1} W_{lr}^T$$

代入 $u_{lr} = (I - R_l \bar{r}_l)^{-1}$ ，式(61)可寫成：

式(62)

$$f_{lr}^+(z') = \frac{k_0}{2} \left[e^{k_0 Q_{lr}(z' - z_{l'-1})} + \bar{r}_l u_{lr} [R_l e^{k_0 Q_{lr}(z' - z_{l'-1})} + e^{-k_0 Q_{lr}(z' - z_{l'-1})}] \right] Q_{lr}^{-1} W_{lr}^T$$

式(63)

$$g_{lr}^-(z') = \frac{k_0}{2} u_{lr} [R_l e^{k_0 Q_{lr}(z' - z_{l'-1})} + e^{-k_0 Q_{lr}(z' - z_{l'-1})}] Q_{lr}^{-1} W_{lr}^T$$

由式(62)、式(63)、式(53)和式(60)可完全決定式(45)中的 Green 函數。

IV. 數值執行：TE 模式

A. Lippmann-Schwinger 方程式的離散

由第零階週期結構之物理性質與幾何結構和入射波資訊所定義的 $S_y^{[0]}(z)$ 和 $G(z, z')$ ，以及擾動可能性 $Y(z)$ 為輸入參數。反覆解 Lippmann-Schwinger 方程式可求得待由擾動週期結構之物理性質與幾何結構和相同入射波資訊來判斷的未知量 $S_y(z)$ 。

假設擾動函數 $Y(z')$ 在層 j 內的常數為 Y_j 。藉由把層 $l(l$

$= 1, \dots, L$) 內的 z 設為 $z \rightarrow z_{l-1}$ 、層 L 內的 z 設為 $z \rightarrow z_L$ ，並利用式(53)與式(60)，可將式(9)轉換如下：

式(64)

$$\begin{aligned} S_y(z_{l-1}) - S_y^{[0]}(z_{l-1}) = & W_l \left[(1 + R_l) \sum_{j=1}^{l-1} \Psi_{l-1} \cdots \Psi_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' f_{jj}^+(z') Y_j S_y(z') \right. \\ & + (\bar{r}_l + 1) \int_{z_{l-1}}^{z_l} dz' g_{ll}^-(z') Y_l S_y(z') \\ & \left. + (\bar{r}_l + 1) \sum_{j=l+1}^L \Phi_{l+1} \cdots \Phi_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' g_{jj}^-(z') Y_j S_y(z') \right] \end{aligned}$$

式(65)

$$\begin{aligned} S_y(z_L) - S_y^{[0]}(z_L) = & W_L (X_L + X_L^{-1} R_L) \left[\sum_{j=1}^{L-1} \Psi_{L-1} \cdots \Psi_j \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz' f_{jj}^+(z') Y_j S_y(z') \right. \\ & \left. + \int_{z_{L-1}}^{z_L} dz' f_{LL}^+(z') Y_L S_y(z') \right] \end{aligned}$$

應注意在式(64)中，若 $l=1$ ，則 $\sum_{j=1}^{l-1}(\cdots)$ 不會產生項；若 $l=L$ ，則 $\sum_{j=l+1}^L(\cdots)$ 不會產生項。

為提高精確度，可使用內插公式進行各區段的分析整合(analytic integrations)：

式(66)

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

其中：

式(67)

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

$l = 2, \dots, L-1$ 時，式(64)變成：

式(68)

$$S_y(z_{l-1}) - S_y^{[0]}(z_{l-1}) = \sum_{j=0}^{l-2} \Theta_{l-1,j}^{(+)} Y_{j+1} S_y(z_j) + \sum_{j=l-1}^{L-1} \Theta_{l-1,j}^{(-)} Y_{j+1} S_y(z_j) \\ + \sum_{j=1}^{l-1} \bar{\Theta}_{l-1,j}^{(+)} Y_j S_y(z_j) + \sum_{j=l}^L \bar{\Theta}_{l-1,j}^{(-)} Y_j S_y(z_j)$$

$l = 1$ 時，

式(69)

$$S_y(z_0) - S_y^{[0]}(z_0) = \sum_{j=0}^{L-1} \Theta_{0j}^{(-)} Y_{j+1} S_y(z_j) + \sum_{j=1}^L \bar{\Theta}_{0j}^{(-)} Y_j S_y(z_j)$$

$l = L$ 時，

式(70)

$$S_y(z_{L-1}) - S_y^{[0]}(z_{L-1}) = \sum_{j=0}^{L-2} \Theta_{L-1,j}^{(+)} Y_{j+1} S_y(z_j) + \Theta_{L-1,L-1}^{(-)} Y_L S_y(z_{L-1}) \\ + \sum_{j=1}^{L-1} \bar{\Theta}_{L-1,j}^{(+)} Y_j S_y(z_j) + \bar{\Theta}_{L-1,L}^{(-)} Y_L S_y(z_L)$$

式(65)變成：

式(71)

$$S_y(z_L) - S_y^{[0]}(z_L) = \sum_{j=0}^{L-1} \Theta_{L,j}^{(+)} Y_{j+1} S_y(z_j) + \sum_{j=1}^L \bar{\Theta}_{L,j}^{(+)} Y_j S_y(z_j)$$

式(68)、式(69)、式(70)和式(71)可一起併成線性方程式系統形式的展開矩陣：

式(72)

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

其中 S 和 $S^{[0]}$ 分別為具層分量 $S_y(z_i)$ 和 $S_y^{[0]}(z_i)$ 之 $(L+1)$ 維的行向量。各層分量 $S_y(z_i)$ 和 $S_y^{[0]}(z_i)$ 仍為具耦合波基本分量的 $(2N+1)$ 維之行向量。 $G, \bar{G}, Y, \bar{Y}$ 為具 $(L+1)^2$ 層分量的方陣，各層分量為耦合波的 $(2N+1)^2$ 方陣：

式(73)

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

式(74)

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

式(75)

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

式(76)

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

B. 特例

作為特例時，

(i) 各層為均質介質(例 1)，可得：

式(77)

$$W_1 = \dots = W_L = I$$

如此， $R_l, \bar{r}_l, u_l, \bar{\psi}_l, \bar{\phi}_l$ 成為對角矩陣。由於式(73)和式(74)的矩陣元素 $\mathbb{G}_{lm}$ 和 $\bar{\mathbb{G}}_{lm}$ 全變成對角矩陣，因此可進一步簡化公式。

(ii) 各層的第零階介電函數相同(例 4)，即當 $\epsilon^{[0](1)}(x, z) = \dots = \epsilon^{[0](L)}(x, z)$ 時，可得：

式(78)

$$W_1 = \dots = W_L = W$$

式(79)

$$Q_1 = \cdots = Q_L = Q$$

如此可得到簡化的矩陣元素 G_{lm} 和 $\bar{G}_{lm}$ 。

(iii) 再者，各層為均質(例 2)，可得：

式(80)

$$W_1 = \cdots = W_L = I$$

式(81)

$$Q_1 = \cdots = Q_L = qI$$

如此可得到簡化的矩陣元素。

(iv) 擾動區域做為入射介質(例 3)，此相當於例 2 中 $\mu=0$ 的情況。如此可進一步簡化矩陣元素。

C. 計算 $S_p(z)$

為提高矩陣與向量在耦合波基本空間的相乘計算速度，擾動矩陣可進行類似的集區對角轉換：

式(82)

$$T = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -I_N & 0_c & J_N \\ 0_r & I_1 & 0_r \\ J_N & 0_c & I_N \end{bmatrix}$$

其中 I_K 為 $K \times K$ 的單位矩陣， J_N 為 $N \times N$ 的方陣且具元素 $J_{ij} = \delta_{i, N+1-j}$ ， 0_c 和 0_r 分別代表 N 維的零行向量和零列向量。

為反覆解出式(72)的矩陣公式，先設定 $S = S^{[0]}$ 。將此代入式(72)而得，

式(83)

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

若上式兩側在特定誤差範圍內不相等，則將式(83)右側定義為新的 $\mathbf{S}$ 。

式(84)

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

代入式(72)可得：

式(85)

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

比較上式兩側。若比較結果不佳，則將式(85)右側定義為新的 $\mathbf{S}$ 。

式(86)

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

以此 $\mathbf{S}$ 測試式(72)的有效性。一直持續比較直到獲得令人滿意的結果。

D. 計算 g_0 和 f_{L+1}

最終目標是要算出與耦合波基本級數 n 相關的反射比 ρ_n 和透射比 τ_n 。反射比的行向量 $g_0 = (\rho_{-N}, \dots, \rho_{-1}, \rho_0, \rho_1, \dots, \rho_N)^T$ 可擷取如下：

式(87)

$$g_0 = g_0^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [\mathbf{G}_{0l}\mathbf{Y}_{lm} + \bar{\mathbf{G}}_{0l}\bar{\mathbf{Y}}_{lm}]\mathbf{S}_m$$

其中 $g_0^{[0]} = (\rho_{-N}^{[0]}, \dots, \rho_{-1}^{[0]}, \rho_0^{[0]}, \rho_1^{[0]}, \dots, \rho_N^{[0]})^T$ 為第零階反射比的行向量。式(87)的中間分量 $\rho_0 = (g_0)_0$ 因為首階(principal order)而描繪出反射特徵。

同樣地，透射比之行向量 $f_{L+1} = (\tau_{-N}, \dots, \tau_{-1}, \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_N)^T$ 可擷取如下：

式(88)

$$f_{L+1} = f_{L+1}^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [\bar{G}_{0l} Y_{lm} + \bar{G}_{0l} \bar{Y}_{lm}] S_m$$

其中第零階透射比之行向量的分量為 $f_{L+1}^{[0]} = (\tau_{-N}^{[0]}, \dots, \tau_{-1}^{[0]}, \tau_0^{[0]}, \tau_1^{[0]}, \dots, \tau_N^{[0]})^T$, $\tau_0 = (f_{L+1})_0$ 為穿透波之首階的透射比。

V. Lippmann-Schwinger 方程式：TM 模式

由於週期結構在 x 方向上具週期性，因此 Maxwell 方程式的 TM 模式解可表示成：

式(89)

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

式(90)

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

介電函數 $\epsilon(x, z)$ 反轉後可以傅立葉級數展開如下：

式(91)

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

從 Maxwell 方程式，透過二線性微分方程式可聯合 $U_{yn}(z)$ 和 $S_{xn}(z)$ 。消除 $S_{xn}(z)$ 後，可得到 $U_{yn}(z)$ 的二階去耦微分方程式：

式(92)

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

其中：

式(93)

$$B(z) = K_x P(z) K_x - I$$

其中 $P(z)$ 為 (n, p) 元素等於 $P_{np}(z) = \varepsilon_{(n-p)}^{\dagger}(z)$ 的方陣。具相同週期之第零階週期結構可用上標 $[0]$ 表示成類似方程式：

式 (94)

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

對應的 Green 函數如下：

式 (95)

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

依標準方法聯合式 (92)、式 (94) 和式 (95) 可得 TM 模式的 Lippmann-Schwinger 方程式：

式 (96)

$$U_y(z) - U_y^{(0)}(z) = \int dz' \left[k_0^2 G(z') K_x \tilde{Y}(z') K_x U_y(z') + \frac{\partial G(z, z')}{\partial z'} Y(z') \frac{\partial U_y(z')}{\partial z'} \right]$$

其中 $Y(z) \equiv E^{-1}(z) - (E^{[0]})^{-1}(z)$ 。

VI. 計算 $U_y^{(0)}(z)$

此節說明將省略在前文中代表第零階週期結構相關量的上標 $[0]$ 。

區域 I 和區域 II 之電場與磁場的解可以 Floquet 條件展開：

式 (97)

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

式 (98)

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

式(99)

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

式(100)

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

其中：

式(101)

$$U_{yn}^{(0)}(z) = \delta_{n0} e^{ik_{1,zn}z} + \rho_n e^{-ik_{1,zn}z}$$

式(102)

$$S_{xn}^{(0)}(z) = \delta_{n0} \left(\frac{ik_{1,zn}}{n_1^2 k_0} \right) e^{ik_{1,zn}z} - \rho_n \left(\frac{ik_{1,zn}}{n_1^2 k_0} \right) e^{-ik_{1,zn}z}$$

式(103)

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

式(104)

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

式(101)右側的第一項代表入射波。同樣地，週期結構區域($l = 1, \dots, L$)之電場與磁場的解可以耦合波展開如下：

式(105)

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

式(106)

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

式(92)應用到層 l 後可得式(105)中的 $U_{yn}^{(l)} (n = -N, \dots, N)$ ：

式(107)

$$(1/k_0^2)\partial^2 U_y^{(l)}/\partial z^2 = E_l B_l U_y^{(l)}$$

其中 E_l 如同第 II 節中所定義般， B_l 與 z 無關且定義如下：

式(108)

$$B_l = K_x E_l^{-1} K_x - I$$

式(107)的解可寫成：

式(109)

$$U_y^{(l)}(z) = W_l [e^{-k_0 Q_l (z-z_{l-1})} f_l + e^{k_0 Q_l (z-z_{l-1})} g_l]$$

式(110)

$$S_x^{(l)}(z) = V_l [-e^{-k_0 Q_l (z-z_{l-1})} f_l + e^{k_0 Q_l (z-z_{l-1})} g_l]$$

其中 W_l 為出自 $E_l B_l$ 之 $(2N+1)$ 特徵向量的方陣， Q_l 代表對角元素為 $E_l B_l$ 之 $(2N+1)$ 特徵值之正平方根的對角矩陣，且 $V_l = E_l^{-1} W_l Q_l$ ， f_l 和 g_l 為利用邊界條件所決定出具有 $(2N+1)$ 分量的行向量。

式(101)、式(102)、式(103)和式(104)的耦合波基本分量分別可表示成以下矩陣：

式(111)

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

式(112)

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

式(113)

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

式(114)

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

其中 Q_0 、 W_0 、 f_0 、 g_0 、 W_{L+1} 、 Q_{L+1} 、 f_{L+1} 、 g_{L+1} 如同第 II 節中所定義者， $V_0 = (1/n_1^2)W_0 Q_0$ ，且 $V_{L+1} = (1/n_{L+1}^2)W_{L+1} Q_{L+1}$ 。

運用 $z = z_l$ ($l = 0, \dots, L$) 時的電場與磁場邊界條件可產生式 (36) 的遞迴關係。其餘計算部分全然與 TE 模式相同。此節最後說明 $M_l^{\pm}$ 中之 W_l 的反轉矩陣。

雖然 E_l 和 B_l 為對稱矩陣，但 $E_l B_l$ 乘積通常不是對稱矩陣。故 $E_l B_l$ 的特徵向量 $w_m^{(l)}$ ($m = -N, \dots, N$) 不是正交，即 $m \neq n$ 時， $[w_m^{(l)}]^T w_n^{(l)} \neq 0$ 。在此例中， $W_l^T W_l$ 無法經由適當的常態化來表示成單位矩陣 I 。反而因 $W_l^T E_l^{-1} W_l$ 為對角矩陣，故其可常態化成 $W_l^T E_l^{-1} W_l = I$ 。在 TM 模式下， $W_l^T E_l^{-1}$ 可取代 W_l^{-1} 。

VII. 計算 $G(z, z')$: TM 模式

若 z 位於層 l 內，則式 (95) 變成：

式 (115)

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

如同第 II 及 VI 節，此節說明亦將省略在前文中代表第零階週期結構相關量的上標 [0]。就特定層 l 而言， E_l 和 B_l 不再是 z 的函數。除了 W_l 和 Q_l 是由 $E_l B_l$ 之特徵向量與特徵值所建立的矩陣外，式 (115) 之解的形式和 TE 模式下的式 (45) 一樣， $f_{il}^{\pm}(z')$ 和 $g_{il}^{\pm}(z')$ 的表示方式相同。在此節中， W_l 和 Q_l 與第 VI 節中所獲得者完全相同。入射介質 (區域 I) 和基材 (區域 II) 的解與式 (46) 中所定義的形式相同。

VIII. 數值執行：TM 模式

A. 計算 $U_y(z)$:

為提高數值計算的精確度，當使用類似式(66)之用於 $U_y(z')$ 的內插公式及進行分析整合時，Lippmann-Schwinger 方程式的離散(式(97))可表示如下：

式(116)

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

式(117)

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

式(118)

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

式(119)

$$U_y(z_L) - U_y^{[0]}(z_L) = \sum_{j=0}^{L-1} \left\{ \Theta_{L,j}^{(+)} K_x \tilde{Y}_{j+1} K_x + \Delta_{L,j}^{(+)} Y_{j+1} \right\} U_y(z_j) \\ + \sum_{j=1}^L \left\{ \bar{\Theta}_{L,j}^{(+)} K_x \tilde{Y}_j K_x + \bar{\Delta}_{L,j}^{(+)} Y_j \right\} U_y(z_j)$$

式(116)、式(117)、式(118)和式(119)可一起併成線性方程式系統形式的展開矩陣：

式(120)

$$U - U^{[0]} = [GY' + \bar{G}\bar{Y}' + HY' + \bar{H}\bar{Y}]U$$

其中 $U, U^{[0]}$ 分別為具有層分量 $U_y(z_l)$ 和 $U_y^{[0]}(z_l)$ 之 $(L+1)$ 維的行向量，其仍為具耦合波基本分量之 $(2N+1)$ 維的行向量。 $G, \bar{G}, Y, \bar{Y}$ 如同式(73)、式(74)、式(75)和式(76)中所定義者。 $H, \bar{H}, Y', \bar{Y}'$ 為具 $(L+1)^2$ 層分量的方陣，各層分量為耦合波的具有 $(2N+1)^2$ 分量的方陣：

式(121)

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

式(122)

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

式(123)

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

式(124)

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

類似 TE 模式，由此可得到對應於例 1、例 2、例 3 和例 4 的公式。

使用反覆法及 TE 模式下的初始設定 $U = U^{[0]}$ ，可解出式 (120) 的矩陣。

B. 計算 g_0 和 f_{L+1}

反射比行向量 $g_0 = (\rho_{-N}, \dots, \rho_{-1}, \rho_0, \rho_1, \dots, \rho_N)^T$ 可擷取如下：

式 (125)

$$g_0 = g_0^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [G_{0l} Y'_{lm} + \bar{G}_{0l} \tilde{Y}'_{lm} + H_{0l} Y_{lm} + \bar{H}_{0l} \tilde{Y}_{lm}] U_m$$

其中 $g_0^{[0]} = (\rho_{-N}^{[0]}, \dots, \rho_{-1}^{[0]}, \rho_0^{[0]}, \rho_1^{[0]}, \dots, \rho_N^{[0]})^T$ 為第零階反射比行向量。

令 $\rho_0 = (g_0)_0$ 可獲得首階反射的反射比。

同樣地，透射比行向量 $f_{L+1} = (\tau_{-N}, \dots, \tau_{-1}, \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_N)^T$ 可表示如下：

式 (126)

$$f_{L+1} = f_{L+1}^{[0]} + \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^L [G_{Ll} Y'_{lm} + \bar{G}_{Ll} \tilde{Y}'_{lm} + H_{Ll} Y_{lm} + \bar{H}_{Ll} \tilde{Y}_{lm}] U_m$$

其中 $f_{L+1}^{[0]} = (\tau_{-N}^{[0]}, \dots, \tau_{-1}^{[0]}, \tau_0^{[0]}, \tau_1^{[0]}, \dots, \tau_N^{[0]})^T$ 為第零階透射比的行向量， $\tau_0 = (f_{L+1})_0$ 為首階穿透的透射比。

比較上述各自在 TE 模式與 TM 模式下計算而得的反射比與透射比和測量而得的反射比與透射比。比較結果可用來非破壞性分析各種週期結構，例如全像柵狀結構、表面凹凸與多層柵狀結構、平面介電或吸收全像柵狀結構、

隨意切割之介電與吸收表面凹凸柵狀結構、二維表面凹凸柵狀結構或異方性柵狀結構。

本發明已以較佳實施例揭露如上。然應理解本發明之保護範圍不限於所述實施例。反之，本發明之保護範圍包含熟習此技藝者以現存或未來發展之技術或均等物進行更動及潤飾而得的實例。因此，申請專利範圍所界定之保護範圍當涵蓋所有更動與潤飾實例和類似實例。

【圖式簡單說明】

本發明實施例的特徵和優點在配合參閱較佳實施例之詳細說明和所附圖式後，將變得更明顯易懂，其中：

第 1 圖為根據本發明一實施例之測試方法的流程圖；

第 2 及 3 圖為測試週期結構之裝置的方塊示意圖；

第 4 圖為虛擬週期結構之一實施例的透視圖；

第 5 圖為第 4 圖之虛擬週期結構的截面圖，其被劃分成多層；

第 6 圖為根據本發明一實施例之虛擬週期結構之幾何構造的透視圖；

第 7 圖為第 6 圖之虛擬週期結構的截面圖，其被劃分成多層；

第 8 圖為根據本發明一實施例之虛擬週期結構之幾何構造的截面圖；

第 9 及 10 圖分別繪示在 TE 模式和 TM 模式下，考慮氧化物層和不考慮氧化物層所計算出之虛擬週期結構的反

射比曲線圖；以及

第 11 及 12 圖分別繪示從第 9 及 10 圖之計算結果中擷取出以橢圓儀所測得的物理性質。

【主要元件符號說明】

100	光源	110	偵測器
120	處理器	130	基材
140	偏光器	200、200a、200b	週期結構
210	表層		

五、中文發明摘要：

在此提出計算週期結構之物理性質的方法。測量至少一個與週期結構之反射比或透射比相關的物理性質，然後計算至少一個與虛擬週期結構之反射比或透射比相關的物理性質，以獲得該虛擬週期結構的對應物理性質。比較至少一個計算出的物理性質和至少一個測量得到的物理性質。當將虛擬週期結構水平劃分成多層時，分層結構之中間層中的至少三種物質具水平的重複週期。根據本發明一實施例，能以非破壞性且精確的方式來測試具原生氧化物層或特意形成表面塗層之週期結構的微觀構造。

六、英文發明摘要：

There is provided a method of calculating physical properties of a periodic structure. At least one physical property related to reflectivity or transmittance of a periodic structure is measured, and then, at least one physical property related to reflectivity or transmittance of a virtual periodic structure is calculated to obtain corresponding physical properties from the virtual periodic structure. The at least one calculated physical property is compared with the at least one measured physical property. When the virtual periodic structure is horizontally divided into a plurality of layers, at least three substances can have horizontally repeated periods in the middle layers of the divided structure. In accordance with an embodiment of the present invention, the microscopic formation of the periodic structure including a native oxide layer formed on the periodic structure or an intentionally formed surface coating layer thereon can be nondestructively and accurately tested.

十、申請專利範圍：

1. 一種測定多層週期結構之物理性質的方法，包含以下步驟：

(a) 照射一真實週期結構且進行下列至少其中之一：(i) 測量該真實週期結構因應照射而產生的反射比或透射比的至少其中一者，或(ii)測量至少一個與該真實週期結構之反射比或透射比相關的物理性質；

(b) 進行下列至少其中之一：(i)計算出對應於該真實週期結構的一虛擬週期結構因應照射而產生的反射比或透射比之至少其中一者，或(ii)計算出至少一個與該虛擬週期結構因應照射而產生之反射比或透射比相關的物理性質，

設定該虛擬週期結構具有一維、二維或三維的重複形狀和至少一水平重複週期，並且具有複數個垂直堆疊層，該等堆疊層包括位於該些垂直堆疊層之間的複數個中間層，其中每個水平重複週期內會重複出現至少三個物質；

利用形成該虛擬週期結構之該至少三個物質的折射率來計算與該虛擬週期結構之反射比與透射比相關的物理性質；以及

(c) 比較在步驟(a)中所測得之與反射比或透射比相關的該至少一個物理性質和在步驟(b)中所計算出與反射比或透射比至少其中一者相關的該至少一個對應物理性質。

2. 如申請專利範圍第 1 項所述之方法，其中該步驟(b)包

含以下步驟：

將該虛擬週期結構劃分成一第零階週期結構以及一藉著幾何或物理性地變化一擾動區域中之該第零階週期結構所獲得的一擾動虛擬週期結構；

計算與光線入射在該第零階週期結構上的反射比或透射比之至少其中一者相關的物理性質；

利用一近似演算法以及與反射比或透射比之至少其中一者相關的該物理性質，來獲得與該擾動虛擬週期結構的反射比或透射比之至少其中一者相關的物理性質。

3. 如申請專利範圍第 1 項所述之方法，其中在該步驟(a)所測得與反射比或透射比之至少其中一者相關的該物理性質是在一 TE 模式電場下與一反射波或一穿透波之振幅或相位至少其中一者相關的一物理性質，以及在一 TM 模式磁場下與一反射波或一穿透波之振幅或相位至少其中一者相關的一物理性質；並且該步驟(b)所計算出的反射比或透射比至少其中一者是在該 TE 模式電場下該反射波或該穿透波之振幅或相位至少其中一者，以及在該 TM 模式磁場下該反射波或該穿透波之振幅或相位至少其中一者。

4. 如申請專利範圍第 1 項所述之方法，其中該步驟(b)包含以下步驟：

按傅立葉級數展開該虛擬週期結構的一介電函數；

將該入射在該虛擬週期結構上之光束的入射波、反射波和穿透波展開成一電磁波之平面波的總和；以及

利用展開係數的邊界條件來計算出該反射比和該透射比。

5. 如申請專利範圍第 1 項所述之方法，其中該虛擬週期結構包含一隆起區域，位於由一第三物質所形成的多個溝槽區域之間，並且該隆起區域包含由一第一物質所形成的一中間部份，以及由一第二物質所形成且位於該中間部份之表面上的一表層。

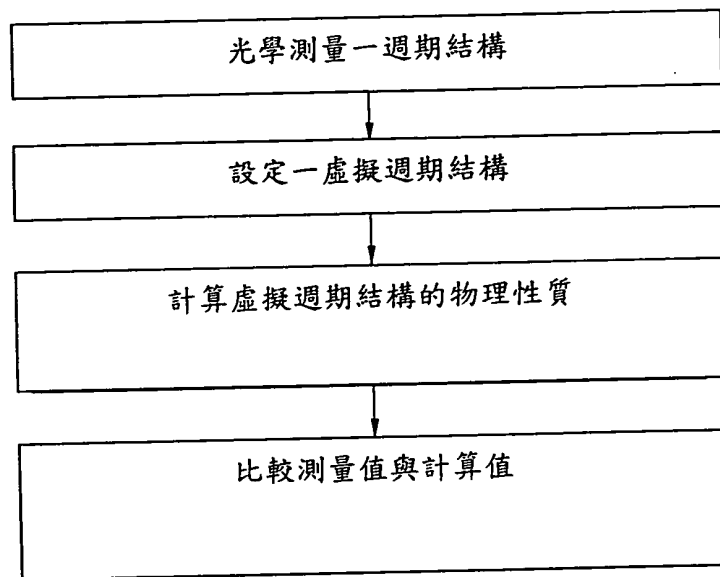
6. 如申請專利範圍第 5 項所述之方法，其中該表層包含至少一層，其選自於由氧化物層、塗層和表面粗糙層所構成之群組中。

7. 如申請專利範圍第 5 項所述之方法，其中該第三物質具有氣體相、液體相或固體相的至少其中一者。

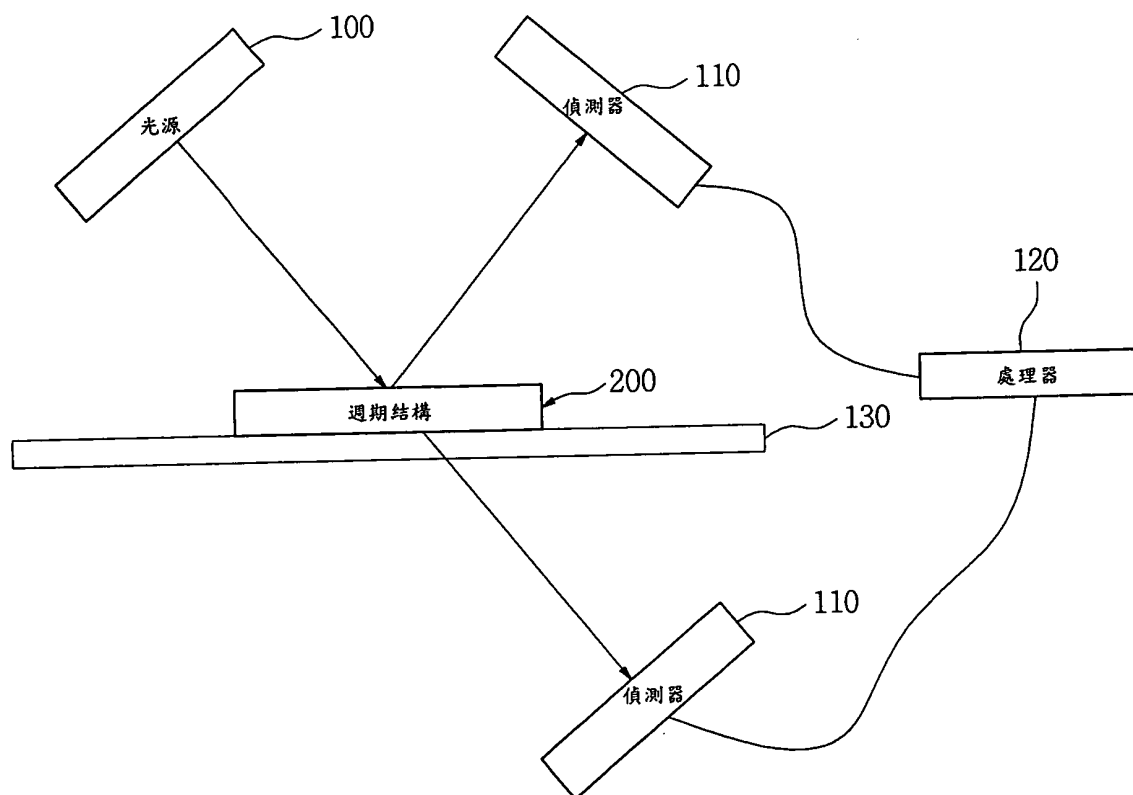
8. 如申請專利範圍第 5 項所述之方法，其中該步驟(b)包含按一傅立葉級數展開該虛擬週期結構中每一垂直堆疊層的介電函數，並且使用形成該隆起區域之該第一物質與該第二物質和形成該溝槽區域之該第三物質各自的複折射率、各層 l 中該第一物質與該第二物質所佔區域相對於一週期 Λ 的比率 f_l 、該第二物質之獨佔區域的比率 $2\delta_l/\Lambda$ 、

以及一指示該層 l 之中心沿著 x 方向偏離該等分層中之一層 1 之中心有多遠的參數 t_l 來表示該虛擬週期結構中各垂直堆疊層之傅立葉級數的展開係數 (expansion coefficient)。

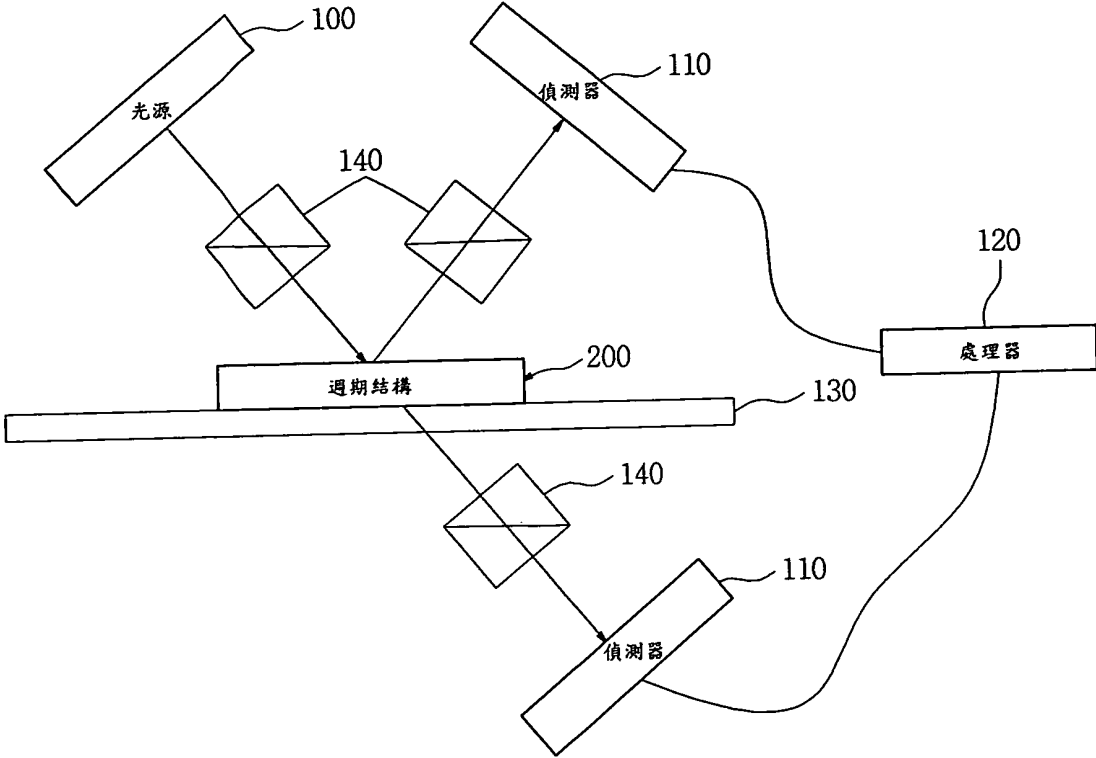
9. 如申請專利範圍第 5 項所述之方法，其中該第一物質由至少二個或多個垂直或水平設置的不同物質所形成。



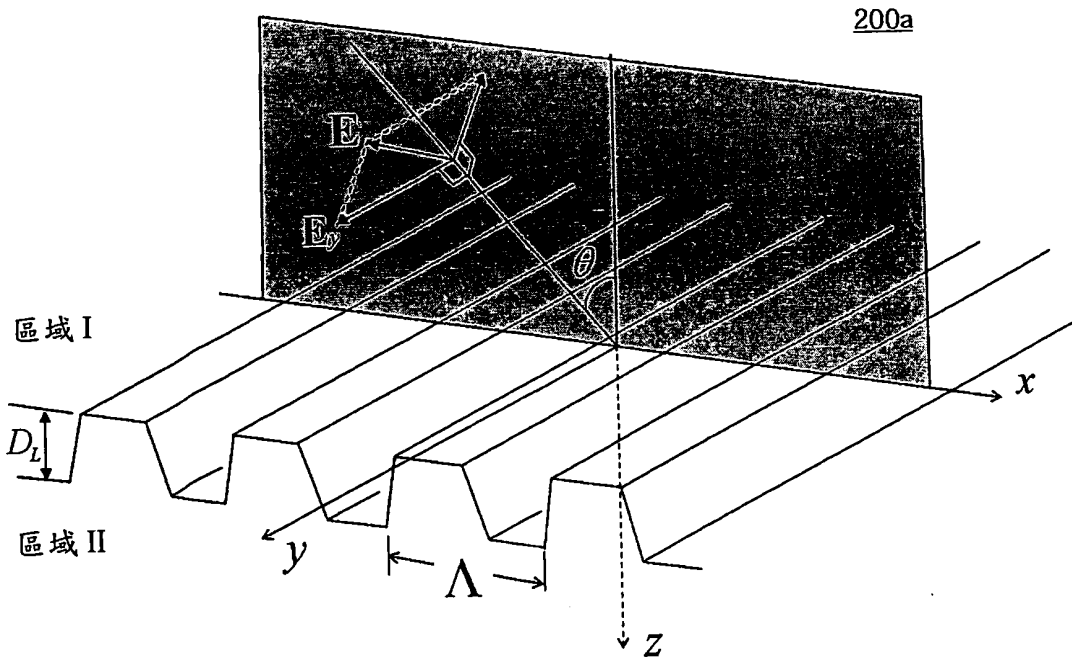
第 1 圖



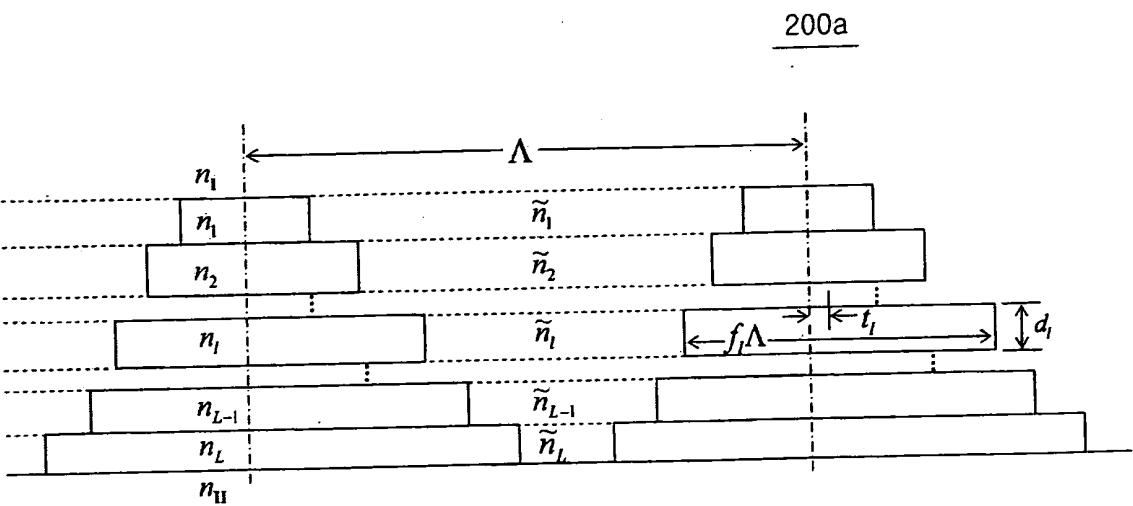
第 2 圖



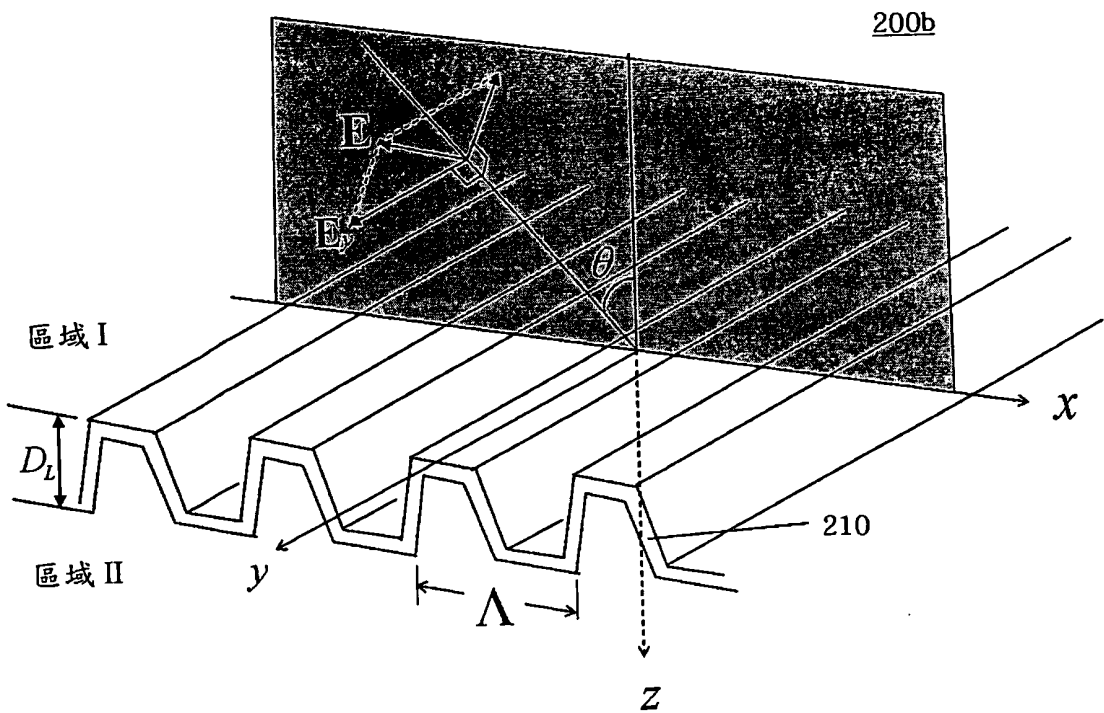
第 3 圖



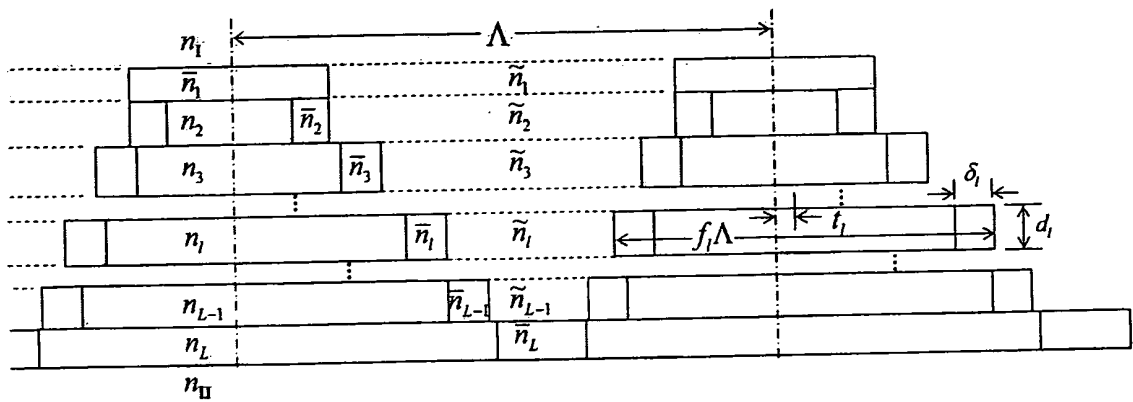
第 4 圖



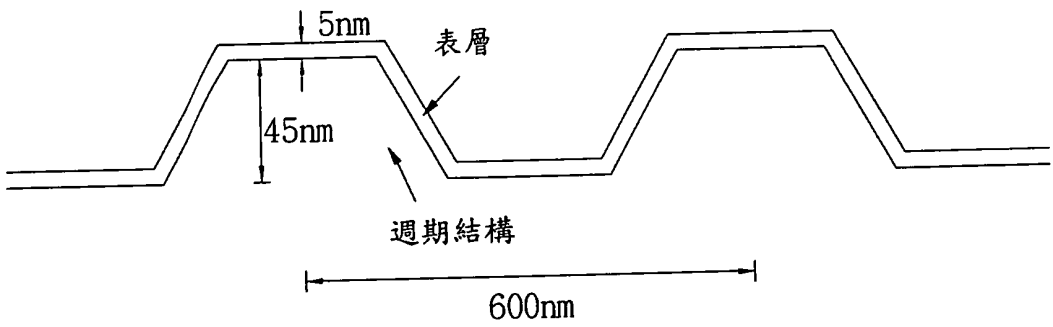
第 5 圖



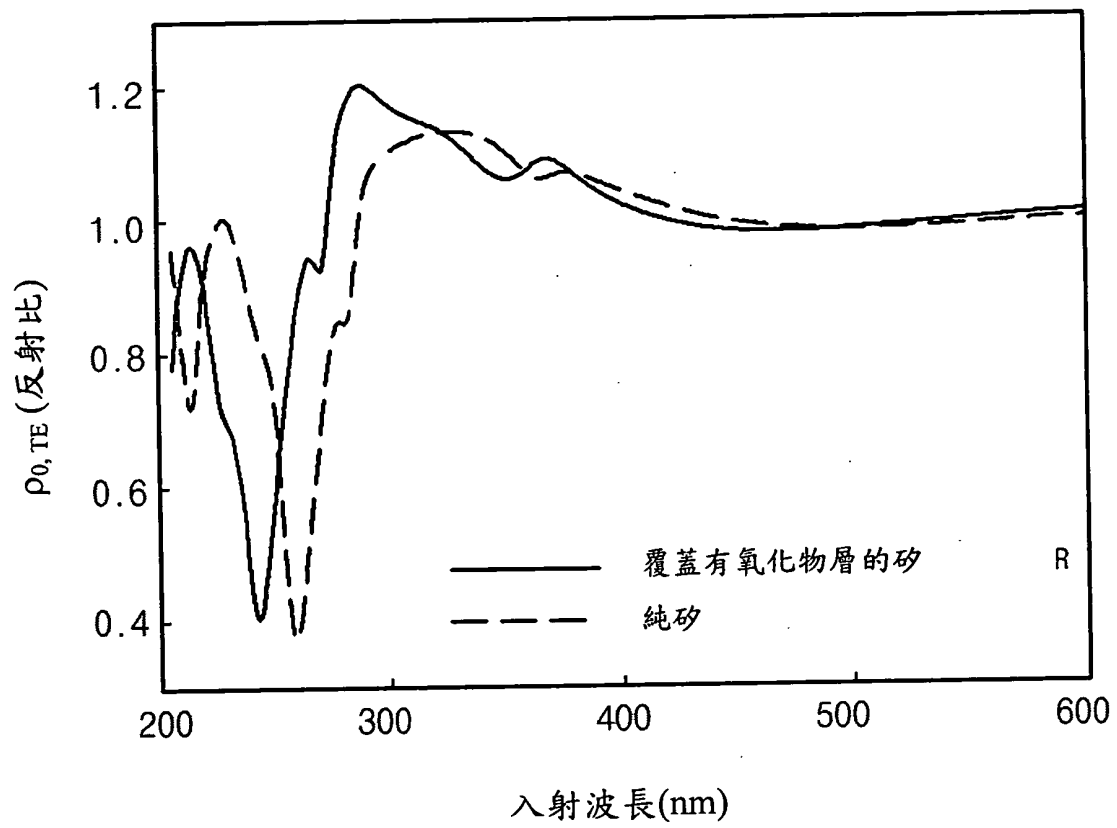
第 6 圖



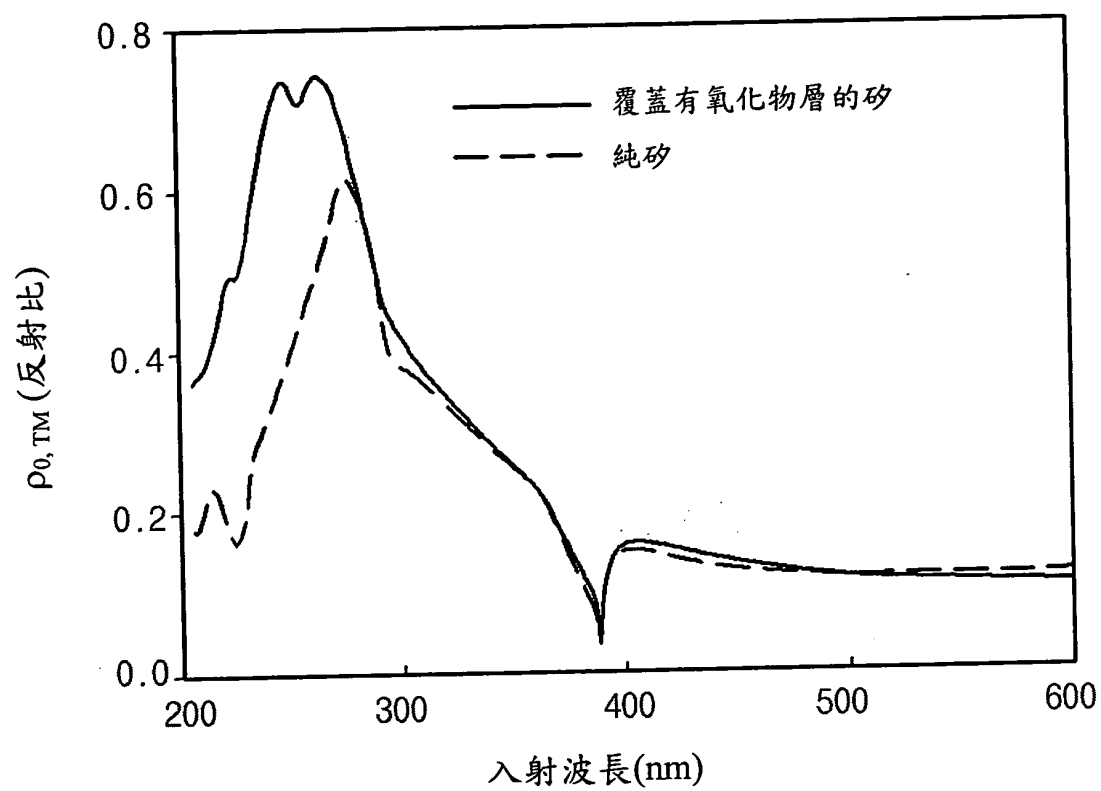
第 7 圖



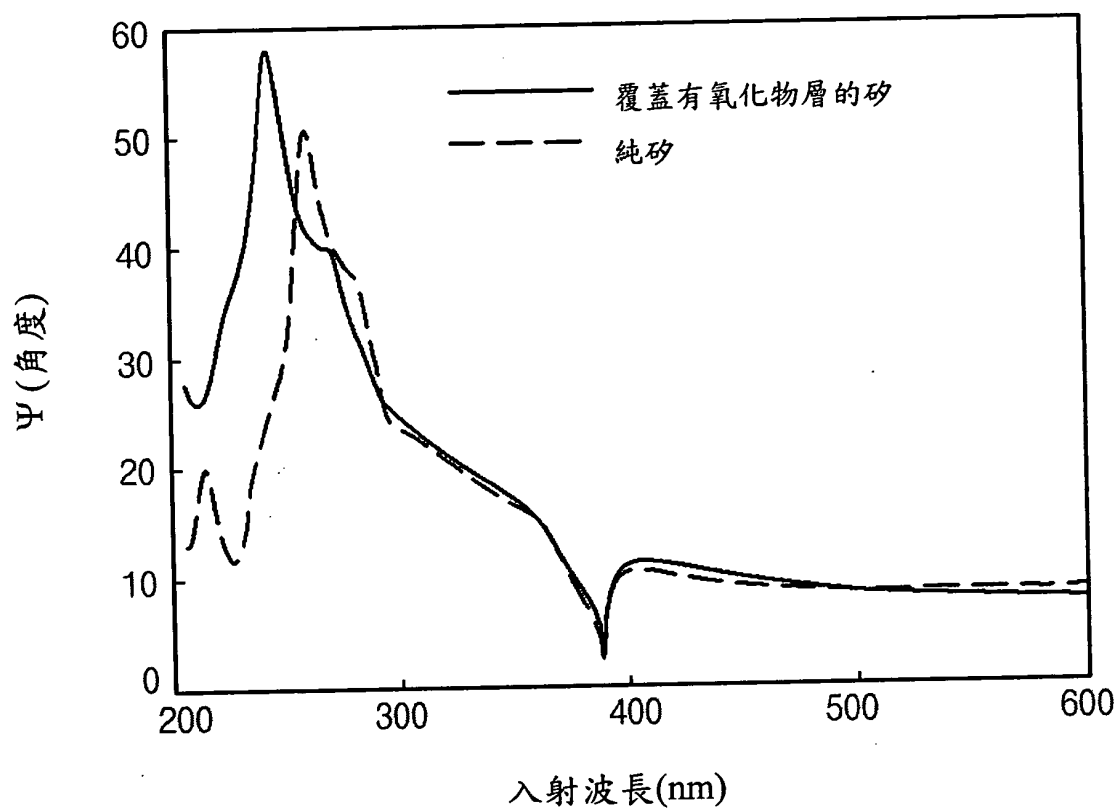
第 8 圖



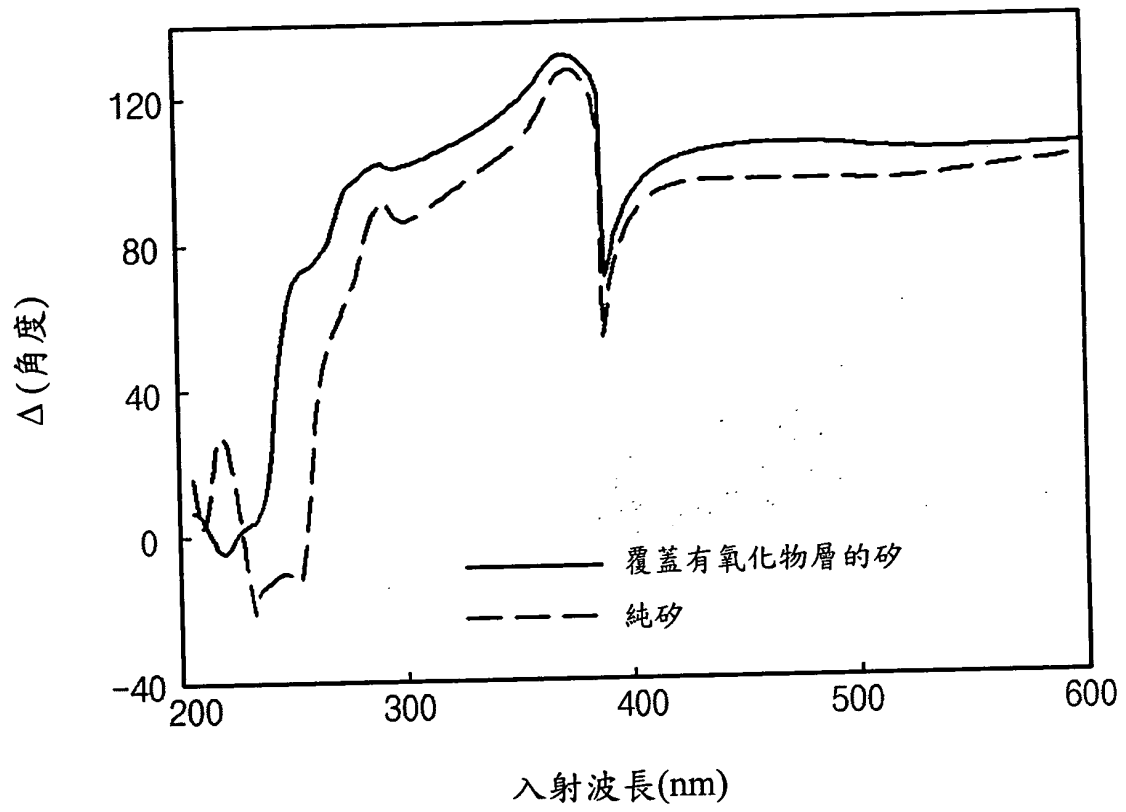
第 9 圖



第 10 圖



第 11 圖



第 12 圖

七、指定代表圖：

(一)、本案指定代表圖為：第(1)圖。

(二)、本代表圖之元件代表符號簡單說明：

無

八、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

無