

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА И МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЁТОК В РАМКАХ СТРОГОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ТЕОРИИ

© 2006 Л.Л. Досколович¹, Е.А. Кадомина², И.И. Кадомин², С.И. Харитонов¹,

¹ Институт систем обработки изображений РАН, г. Самара

² Самарский государственный аэрокосмический университет

Представлено разработанное программное обеспечение Grating для решения задачи дифракции на дифракционных решетках в рамках строгой электромагнитной теории. Проведено сравнение Grating по скорости счета с известной коммерческой программой GSolver на примерах решения одномерных и двумерных задач дифракции. Приведены примеры использования Grating для решения задачи дифракции на линзовых растрах.

Введение

Разработка программного обеспечения для решения задачи дифракции на одномерных и двумерных дифракционных решётках в рамках строгой электромагнитной теории является актуальной задачей для широкого круга прикладных задач. Большое практическое значение данная задача имеет для рефлектометрии. Рефлектометрия – это метод оптической метрологии, основанный на определении геометрических параметров исследуемой микро или наноструктуры по измерению интенсивности отраженного от нее света [1-3]. Методы решения данной задачи сводятся к строгому решению задачи дифракции световой волны на дифракционной решетке [1-3].

Лучшим из существующих на рынке программных продуктов, предназначенных для решения задачи дифракции на дифракционных решетках, является GSolver (Grating Solver Development Company, Texas, США, www.gsolver.com). Данная программа имеет ряд существенных недостатков. В частности, GSolver не обладает достаточной скоростью расчетов, что особенно заметно при решении задач дифракции на двумерных решетках.

В данной работе представлено созданное программное обеспечение (ПО) Grating, предназначенное для решения задач дифракции на дифракционных решётках в рамках строгой теории и проведено его сравнение с программой GSolver. При создании ПО

Grating акцент делался на точность и скорость вычислений, а также на универсальность рассматриваемых структур.

Метод и описание задачи

Методам строгого решения задачи дифракции на дифракционных решетках посвящено большое количество работ. Известные методы решения можно разделить на три группы в зависимости от принадлежности к трем базовым методам – дифференциальному, интегральному и разностным методам [4]. Несомненным лидером по функциональным возможностям, рабочим характеристикам и широте использования является метод связанных волн (rigorous coupled-wave analysis – RCWA) [5-10].

Разработанное ПО Grating и ПО GSolver основаны на этом методе. Поскольку наиболее известно англоязычное название метода, то в работе будем использовать аббревиатуру RCWA. Данный метод решения уравнений Максвелла является модификацией дифференциального метода и позволяет моделировать процесс дифракции световой волны на диэлектрических и металлических дифракционных решетках со сложным профилем периода [5-9].

Решения задачи дифракции на одномерной решётке с непрерывным профилем по методу RCWA включает следующие шаги [5-7].

Профиль решетки аппроксимируется набором “бинарных слоев” (рис. 1). Отраженное

и прошедшее поле в областях над решеткой и под решёткой представляется в виде суперпозиции плоских волн (порядков дифракции):

$$u_R(x, y) = \sum_{j=-N}^N R_j \exp\left(ik_0 n_1 (\alpha_j x + \beta_j y)\right), \quad (1)$$

$$u_T(x, y) = \sum_{j=-N}^N T_j \exp\left(ik_0 n_1 (\alpha_j x - \tilde{\beta}_j y)\right), \quad (2)$$

где $k_0 = \frac{\omega}{c}$, $\alpha_j = \alpha_0 + \frac{j\lambda}{n_1 d}$, $\beta_j = \sqrt{1 - \alpha_j^2}$,

$$\tilde{\beta}_j = \sqrt{1 - \frac{n_1 d}{n_4^2}}$$

волны на решетку, n_1, n_4 – коэффициенты преломления материала в области над решеткой и в области подложки.

Скалярные функции $u_R(x, y), u_T(x, y)$ в (1), (2) соответствует компоненте электрического вектора $E_z(x, y)$ для ТЕ-поляризации и компоненте $H_z(x, y)$ для случая ТМ-поляризации. Остальные компоненты поля выражаются через производные по y от функций $u_R(x, y), u_T(x, y)$. Отметим, что компоненты поля в (1), (2) аппроксимируются отрезками рядов Фурье с числом членов $2N + 1$. Параметр N определяет вычислительную сложность и точность решения задачи.

В каждом слое электромагнитное поле определяется в виде суперпозиции $4N + 2$

модовых функций, являющихся решением уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \text{rot} \mathbf{H} &= -ik_0 \varepsilon(x) \mathbf{E}, \\ \text{rot} \mathbf{E} &= -ik_0 \mathbf{H}, \end{aligned} \quad (3)$$

при “бинарной” функции $\varepsilon(x)$, принимающей в слое значения n_2^2, n_3^2 , и не зависящей от переменной y (рис. 1). Далее, применяются граничные условия равенства тангенциальных компонент полей между областью подложки и решеткой, между бинарными слоями и, наконец, между решеткой и областью над решеткой. Последовательное применение граничных условий сводит расчет отраженного и прошедшего дифракционных полей к решению линейной системы уравнений, относительно амплитуд R_n, T_n отраженных и прошедших дифракционных порядков.

ПО Grating при решении задачи дифракции на одномерных дифракционных решетках (рис. 1) использует устойчивый алгоритм, предложенный в работах [5, 6]. Дополнительно, при определении поля в каждом бинарном слое, используются специальные правила для разложения в ряд Фурье произведения функций, приведенные в работе Lifeng Li [7]. Использование этих правил позволяет достичь лучшей точности представления компонент поля отрезками рядов Фурье. Применение этих правил особенно актуально при решении задачи дифракции на решетках, изготовленных из материалов с высокой проводимостью.

При решении задач дифракции на двумерных бинарных решетках был использован метод RCWA в формулировке работы [8]. Для многоуровневых дифракционных решеток (рис. 2) были использованы методы улучшения устойчивости решения, являющиеся прямым обобщением результатов для одномерной задачи [5]. В двумерном случае были также реализованы корректные правила для Фурье разложений произведения функций [9, 10].

Отметим, что в двумерном случае электромагнитное поле в решётке представляется $4(2N + 1)^2$ гармониками магнитного и электрического полей. При этом количество

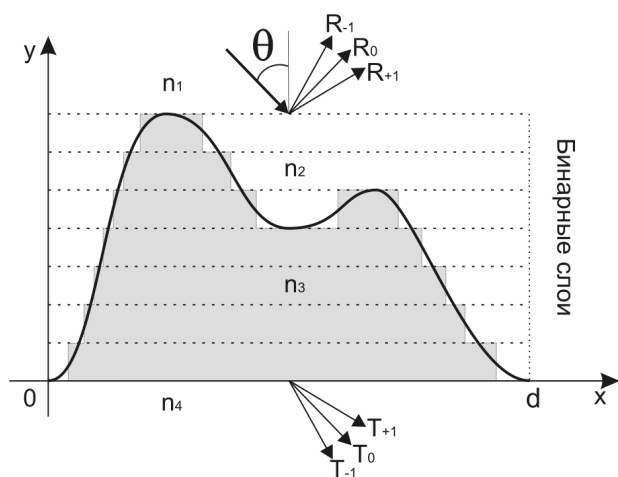


Рис. 1. Геометрия задачи дифракции на многоуровневой одномерной решётке

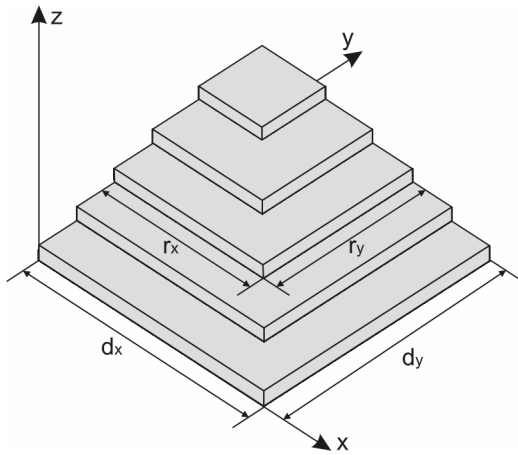


Рис. 2. Геометрия двумерной дифракционной решётки

вычисляемых порядков составляет $(2N + 1)^2$ от $(-N, -N)$ до $(+N, +N)$.

Характеристики и схема работы программного обеспечения

ПО Grating реализовано на языке C, с использованием модулей библиотеки Clapack. ПО Grating может быть скомпилировано под операционные системы Windows и Linux, что позволяет расширить круг использования продукта.

Общая структура Grating представлена на рис. 3. Ядром Grating является динамическая библиотека (DLL), с которой консольное приложение взаимодействует через интерфейс. На вход консольного приложения пользователь подает файл параметров, а на выходе получает файл результатов. Благодаря такой простой схеме, Grating легко переносится с платформы Windows на платформу Linux. При разработке Grating изначально была заложена возможность создания

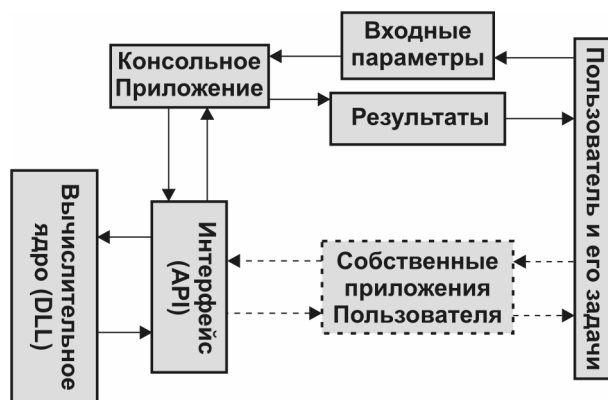


Рис. 3. Структура Grating

пользователем собственного приложения, использующего динамическую библиотеку через ее интерфейс. Таким образом, пользователь получает инструмент для решения конкретных задач. Так же такая структура позволит в дальнейшем разработать графическую оболочку для Grating.

Программный продукт был оптимизирован для увеличения скорости работы продукта. Оптимизированные алгоритмы на языке C сравнивались по скорости со средой разработки MatLab. Результаты сравнения приведены на рис.4. Все измерения представленные в статье проводились на компьютере P4 1.5GHz 512Mb RAM. Графики на рис.4 показывают время решения задачи дифракции на бинарной диэлектрической решетке (случай ТМ поляризации) в зависимости от параметра N, определяющего размерность задачи.

Из рис.4 следует, что C-версия выигрывает по времени у версии MatLab, при N=15 выигрыш составляет более чем 2 раза.

При разработке Grating все промежуточные и окончательные результаты сравнивались с результатами работы программы GSolver. В результате, собственное приложение не уступает по точности программе GSolver. По скорости счета Grating существенно опережает GSolver. В качестве примера на рис.5 приведены графики, показывающие время расчета сигнатур для диэлектрической решетки с трапецидальным профилем в зависимости от параметра N. Под сигнатурой понимается зависимость интенсивности нулевого порядка от угла падения излучения.

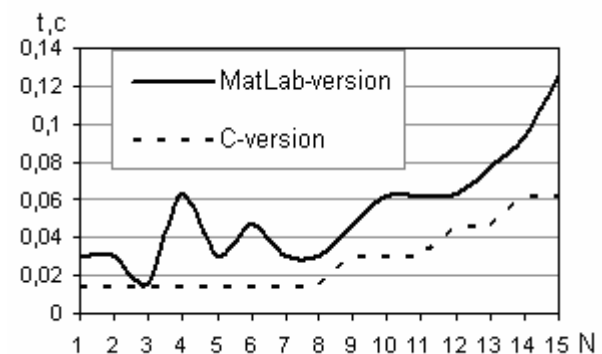


Рис. 4 Сравнение времени работы различных версий приложения (MatLab и C) для бинарной решётки

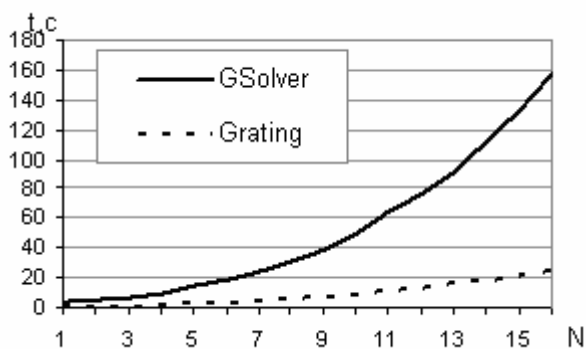


Рис. 5. Сравнение времени работы С-версии приложения и приложения GSolver для расчёта сигнатур трапецидальной решетки в случае ТМ-поляризации

Подобные зависимости широко используются при решении задач рефлектометрии [1-3]. Рис. 5 показывает, что с ростом N скорость счета программы Grating становится на порядок выше, чем у GSolver.

На рис. 6 приведены графики, показывающие время решения задачи дифракции, для бинарной двумерной диэлектрической решетки в зависимости от параметра N. Исследуемая двумерная решетка имела пирамидальную структуру и состояла из пяти 5 бинарных слоев (рис.2). Рисунок 6 также показывает, что с ростом N, Grating становится существенно быстрее, чем GSolver. В частности, при N=10 (при учете порядков от (-10,-10) до (+10,+10)) Grating считает в более чем четыре раза быстрее по сравнению с GSolver.

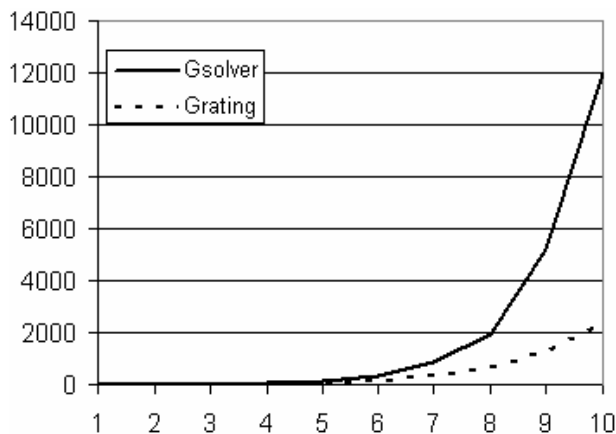


Рис. 6. Сравнение времени работы С-версии приложения и приложения GSolver для расчёта сигнатур двумерной трапецидальной решетки

Примеры использования Grating

В заключение приведем несколько примеров использования Grating, демонстрирующих возможности данного ПО для решения задачи дифракции на линзовых растрах и отдельных линзах.

Было проведено моделирование одномерного растра бинарных линз. Растр бинарных линз представляется бинарной дифракционной решеткой, координаты ступенек x_m которой рассчитываются по формуле:

$$x_m \sin \theta + \sqrt{f^2 + x_m^2} = m\lambda / 2,$$

где θ – угол падения плоской волны, λ – длина волны света. На рис. 7 для случая ТЕ-поляризации приведено расчетное распределение интенсивности в пределах периода при следующих параметрах: $d = 130 \mu\text{m}$, $f = 134 \mu\text{m}$, $\theta = 30^\circ$, $N = 300$, $\lambda = 1 \mu\text{m}$. Единицы длины вдоль осей абсцисс на рис. 7 приведены в длинах волн. Под распределением интенсивности понимается модуль z-компоненты вектора Умова-Пойнтинга, где ось z – перпендикулярна решетке.

На рис. 7 виден резкий пик интенсивности, показывающий высокие фокусирующие свойства линз растра. Отметим, что моделирование растра линз позволяет также оценить работу одной линзы. Для этого достаточно увеличить расстояние между линзами растра (увеличить период решетки), что устранил в области фокуса взаимное влияние полей от соседних линз растра (соседних периодов).

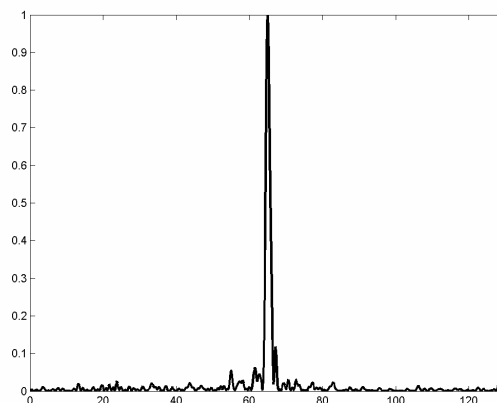


Рис. 7. Распределение интенсивности в фокальной плоскости для одномерного растра бинарных линз

На рис. 8 приведено расчетное распределение интенсивности поля, формируемого растром двумерных бинарных линз в диэлектрике ($n=1,5$) при нормальном падении плоской волны, соответствующей суперпозиции Е и Н волн с равными коэффициентами. Такое представление падающей волны моделирует случай неполяризованного света. Единицы длины вдоль осей на рис.8 также приведены в длинах волн. Расчет поля проводился при следующих параметрах: $l_0=0,55\mu\text{м}$, радиус апертуры $R=3,54l_3$, фокусное расстояние $f=2l_3$. При указанных значениях параметров линза раstra имеет две полных зоны. Период раstra является квадратным со стороной $d=2R$. При этом в зоне периода, расположенной вне апертуры линзы, диэлектрическая проницаемость совпадает с диэлектрической проницаемостью подложки $\epsilon=2,25$. На рис. 8а приведено распределение интенсивности, рассчитанное в фокальной плоскости $z=-f$ в пределах периода $|x|\leq R, |y|\leq R$. Расчет проводился при учете 225 порядков ($N=7$) в разложениях отраженного и прошедшего полей. Для оценки величины интерференции полей от соседних линз проводился расчет поля от раstra линз при большем в 1,6 раза расстоянии между линзами (при периоде раstra $d=11l_3$). Как и ранее, в центре каждого периода располагалась линза с радиусом $R=3,54l_3$ и фокусным расстоянием $f=2l_3$, а в остальной зоне периода диэлектрическая проницаемость считалась постоянной. Результат моделирования показал, что при

увеличении расстояния между линзами величина фокального пика изменилась менее чем на 1%. Это показывает, что при расчете поля в области фокуса взаимным влиянием полей от соседних линз раstra можно пренебречь даже при столь экстремальных параметрах.

Заключение

Разработанное ПО Grating является эффективным инструментом для решения задач дифракции в рамках строгой электромагнитной теории. Проведенное сравнение с коммерческой программой Gsolver показало, что Grating обладает в несколько раз большей скоростью, что особенно актуально при решении задач большой размерности. Приведенные примеры использования Grating для решения задачи дифракции на линзовых растрах демонстрируют его возможности для моделирования сложных дифракционных структур.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 04-01-96517, гранта CRDF RUE1-005064-SA-05, министерства образования РФ, Администрации Самарской области, гранта CRDF SA-014-02.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. C. Logofatu, S. A. Coulombe, B. K. Minhas, J.R. McNeil. Identity of the cross-reflection coefficients for symmetric surface-relief

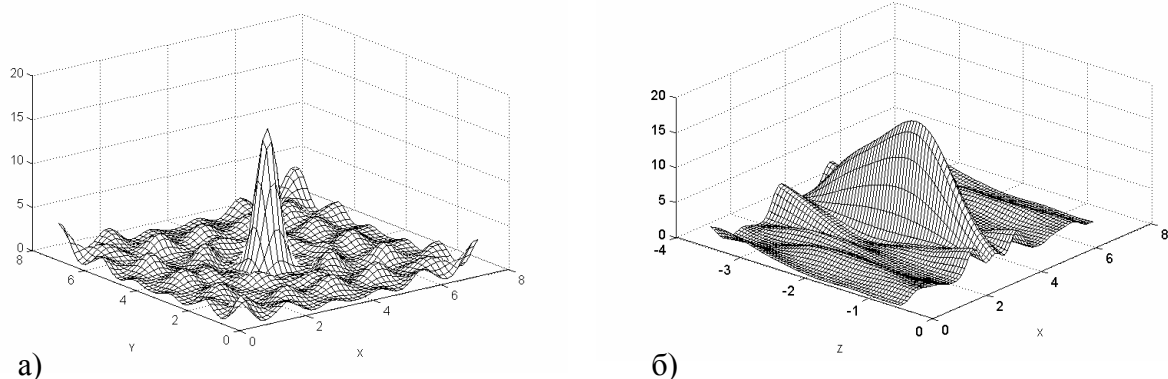


Рис. 8. Распределение интенсивности для двумерного раstra бинарных линз с параметрами $R=3,54l_3$, $f=2l_3$ в фокальной плоскости $z=-f$ (а) и в плоскости XOZ (б).

- gratings // J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 16, N 5, pp. 1108-1114.
2. C. J. Raymond, M. R. Murnane, S. S. H. Naqvi, and J. R. McNeil. Metrology of subwavelength photoresist gratings using optical scatterometry // J. Vac. Sci. Technol. B 13, 1484–1495 (1995).
 3. J. R. McNeil, S. S. H. Naqvi, S. M. Gaspar, K. C. Hickman, K. P. Bishop, L. M. Milner, R. H. Krukar, and G. A. Petersen. Scatterometry applied to microelectronic processing // Microlithography World 1, 16–22 (1992).
 4. Electromagnetic Theory of Gratings: Topics in current physics, Ed. by R. Petit, N.Y.: Springer-Verlag, 1980.
 5. M. Moharam, D. Pommet, E. Grann. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach // Journal of Optical Society of America A. -1995 - Vol.12, №5. - P.1077-1086.
 6. Moharam M.G., Grann E.B., Pommet D.A., Gaylord T.K. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings // Journal of Optical Society of America A. - 1995. - Vol.12, №5. - P.1068-1076.
 7. L. Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures // Journal of Optical Society of America A. - 1996. - Vol.13, № 9. - P.1870-1876.
 8. S. Peng, G. M. Morris. Efficient implementation of rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings // J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 12, No. 5, 1995, pp.1087-1096.
 9. Lifeng Li. Fourier modal method for crossed anisotropic gratings with arbitrary permittivity and permeability tensors // J. Opt. A: Pure Appl. Opt., N 5, 2003, pp. 345–355
 10. Lifeng Li. New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings // J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 14, No. 10, 1997, pp.2758-2767.

SOFTWARE FOR THE DESIGN AND SIMULATION OF DIFFRACTION GRATINGS WITHIN RIGOROUS ELECTROMAGNETIC THEORY

© 2006 L.L. Doskolovich¹, E.A. Kadomina², I.I. Kadomin², S.I. Kharitonov¹

¹ Image Processing Systems Institute of Russian Academy of Science, Samara

² Samara State Aerospace University

The Grating software for the design and simulation of diffraction gratings within the rigorous electromagnetic theory is presented. The software is compared with the well-known commercial software GSolver in terms of computation speed. The comparison is based on the examples of 1D and 2D diffraction problem solutions. The application of Grating to the solution of diffraction problem on lens raster is also considered.