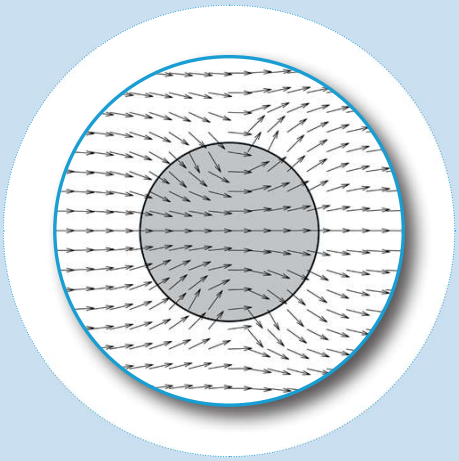
Berichte aus dem
Institut für Technische Optik

Nr. 64

INSTITUT FÜR
TECHNISCHE OPTIK
UNIVERSITÄT STUTTGART

Thomas Schuster

Simulation von Lichtbeugung an Kreuzgitterstrukturen und deren Anwendung in der Scatterometrie



Januar 2010

Universität Stuttgart

Simulation von Lichtbeugung an Kreuzgitter-Strukturen und deren Anwendung in der Scatterometrie

Von der Fakultät für Konstruktions-, Produktions- und
Fahrzeugtechnik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Dipl.-Phys. Thomas Schuster

geboren in Illertissen

Hauptberichter:	Prof. Dr. W. Osten
Mitberichter:	Prof. Dr. K.-H. Brenner
Tag der Einreichung:	17.06.09
Tag der mündlichen Prüfung:	24.11.09

Institut für Technische Optik der Universität Stuttgart

2010

ISBN 978-3-923560-63-9

D93 Stuttgart

Vorwort des Herausgebers

Seit nunmehr 50 Jahren weist der Trend in der Halbleiterindustrie eine kontinuierliche Zunahme der Integrationsdichte aus. Motiviert ist diese Entwicklung durch das Interesse, Prozessoren und Speicherbausteine mit stetig steigender Leistungsfähigkeit bzw. Speicherkapazität bei nahezu unverändertem Platzbedarf, aber merklich reduziertem Stromverbrauch zu schaffen. Als Legitimation für diese Entwicklung wird gerne das Mooresche Gesetz herangezogen, wonach sich die Anzahl der Transistoren pro Chip inzwischen alle 18 Monate verdoppelt. Verbunden damit ist eine drastische Reduzierung der kritischen Dimensionen (critical dimension CD, Linienbreite oder half pitch) der mittels Photolithographie auf den Wafer zu schreibenden Strukturen. So hat Intel am 10. Dezember 2008 bekannt gegeben, dass die Entwicklung des 32nm-Prozesses bereits abgeschlossen ist und mit der Produktion der ersten SRAMS, die mehr als 1,9 Milliarden Transistoren enthalten, im 4. Quartal 2009 begonnen wird. Mit gleicher Verlautbarung wurde für 2011 der nächste Technologieknoten angekündigt, der bei 22nm liegt. Bemerkenswert ist in diesem Zusammenhang der technologische Hintergrund. Die beim photolithographischen Abbildungsprozess eingesetzten VUV-Lichtquellen verwenden seit 2003 Licht der Wellenlänge von 193nm. Da die klassische Beugungsgrenze damit deutlich unterschritten wird, bedurfte es einer Reihe ausgefeilter Technologieverbesserungen, um solche Strukturbreiten überhaupt in Großserienfertigung realisieren zu können. Immersionslithographie, Double-Patterning, High-K und Strained Silicon seien hier beispielhaft genannt.

Neben den technologischen Herausforderungen wird diese Entwicklung naturgemäß von ökonomischen Herausforderungen begleitet. Die Kosten pro Wafer sind inzwischen merklich gestiegen, so dass der gesamte Prozess für den Hersteller nur dann wirtschaftlich erscheint, wenn einerseits die Kosten pro Einzelmatrize (Die) reduziert werden und andererseits die Ausbeute (Yield) deutlich erhöht wird. Bei ersterem erfolgt das insbesondere über die Vergrößerung der Waferfläche (aktuell liegt der Durchmesser bei 300mm, in der Planung sind Chipfabriken mit 450mm Waferdurchmesser). Bei letzterem ist eine sichere Prozessführung gefragt, die leistungsfähige Methoden der fertigungsintegrierten Waferinspektion / -vermessung mit dem Ziel der zeitnahen Detektion von Ungänzen (Fehlstellen, CD-Variationen, …) vorsieht. Dies wiederum stellt die Mess- und Inspektionstechnik vor große Herausforderungen, da hier das Problem der Beugungsbegrenzung in vollem Maße zu Buche schlägt, wenn konventionelle mikroskopische Techniken zum Einsatz kommen. Die Messtechnologie hat daher in den zurückliegenden Jahren einen sichtbaren Wandel von der direkten Vermessung zur modellgestützten Messung unter Rückgriff auf leistungsfähige Simulationswerkzeuge, wie u.a. die Rigorous Coupled-Wave Analysis RCWA, vollzogen. Auf der Basis gesicherter physikalischer Modelle werden sog. rigorose Maxwell-Solver implementiert und eingesetzt, um einen Abgleich zwischen Mess- und Simulationsergebnis zu erreichen bzw. eine systematische Korrektur von ersterem zu gewährleisten. Hilfreich ist hier die Tatsache, dass es sich bei

den geätzten Strukturen um relative einfache geometrische Gebilde handelt, die als Linien- oder Kreuzgitter interpretiert werden. Folglich führt die Untersuchung der elektromagnetischen Wechselwirkung zwischen Licht und Gitter, welche sowohl bei der photolithographischen Erzeugung als auch mikroskopischen Inspektion der Strukturen von Bedeutung ist, unmittelbar auf die Lösung eines Beugungsproblems, dessen Komplexität wesentlich von den Gitterparametern und der Relation zwischen Lichtwellenlänge und Gitterdimension beeinflusst wird. Der oben dargestellte Übergang zu Linienbreiten unterhalb von 40nm bedeutet jedoch, dass bildgebende licht-mikroskopische Techniken mehr und mehr versagen und der Weg der Bildrekonstruktion dem der klassischen Bildgebung vorzuziehen ist. Dies hat jedoch zur Konsequenz, dass der Brückenschlag zwischen Messung, Modellierung und Simulation noch weitaus enger zu fassen ist, da die Auswertung der z.B. mittels Scatterometrie (Überbegriff für eine Klasse von Messtechniken wie Reflektometrie, Ellipsometrie, Diffraktometrie) gewonnenen Messdaten die Lösung des inversen Beugungsproblems bedingt.

Hier setzt die Arbeit von Herrn Schuster an, in der neue Beiträge sowohl zur Simulation der Lichtbeugung an Kreuzgitterstrukturen als auch zum Einsatz der Scatterometrie für die Gewinnung von Rückschlüssen auf die gesuchten Struktur- und Dimensionsparameter von Nanostrukturen geleistet werden. Ein gängiger Weg besteht darin, die mittels Scatterometrie gewonnenen primären Messdaten mit einer Bibliothek vorab simulierter Datensätze zu vergleichen (sog. Bibliothekssuche). Dabei muss jedoch gewährleistet sein, dass diese Datensätze durch Variation aller relevanten Parameter eine hinreichende Untermenge der Gesamtheit abdecken. Aus messtechnischer Sicht bewältigt Herr Schuster die anspruchsvolle Problemstellung, indem er neue Varianten der Scatterometrie, wie die Mueller-Matrix-Scatterometrie, implementiert und zielgerichtet zur Untersuchung komplexer 3D-Strukturen einsetzt. Entsprechend erweiterte Varianten reagieren sensibel auf Änderungen des Polarisationszustandes bei der Wechselwirkung des Messlichts mit den Strukturen und liefern so ein größeres Informationspotential für den Vergleich von Simulations- und Messdaten. Hervorzuheben ist hier die Berücksichtigung eines Phänomens, das derzeit mit hoher Aufmerksamkeit in der Halbleiter-Inspektionstechnik bedacht wird, die sog. Line-Edge-Roughness LER. Seitenwand- und Kantenrauheit gewinnen zunehmend an Bedeutung, da die Dimensionen der Strukturen systematisch kleiner werden und die durch den Prozess verursachte Rauheit, zumindest relativ gesehen, zunimmt. Rauheit und CD-Fluktuationen stellen daher für die Simulations- und Rekonstruktionstechniken eine neue Herausforderung dar, da zum einen die Anzahl der zu berücksichtigenden Parameter im Simulationsmodell sichtbar steigt und zum anderen die für Fourier-basierte Simulationsmethoden geltende Voraussetzung der perfekten Periodizität verletzt wird. Die Verwendung eines Effektiv-Medium-Modells zur Gewinnung einer guten Näherung für hochfrequente Rauschanteile ist hier ein erster wichtiger Schritt, der von Herrn Schuster zur Reduzierung der Rekonstruktionsfehler vorgeschlagen und erfolgreich implementiert wird. Die systematische Verbindung von Simulation und Messung zum Zweck einer modellgestützten Strukturrekonstruktion unter zunehmend komplexer werdenden Randbedingungen ist ein herausragendes Kennzeichen der Dissertation. Herr Schuster zeigt neue Wege auf, bei

denen insbesondere im Themenschwerpunkt Simulation die neue Methode zur Aufstellung des Normalenvektor-Feldes und im Themenschwerpunkt Modellgestützte Messtechnik die Neuland betretenden Ansätze zur Rekonstruktion von Strukturdaten an mit LER versehenen Gittern hervorzuheben sind.

Stuttgart, im Dezember 2009

Prof. Dr. W. Osten
Institut für Technische Optik
Universität Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

Vorwort des Herausgebers....i
Inhaltsverzeichnis....v
Verzeichnis der Abkürzungen und Formelzeichen....vii
Zusammenfassung....xi
Abstract....xxiii
1 Einleitung....1
2 Lichtbeugung....7
2.1 Grundlagen: Elektrodynamik....7
2.1.1 Die Maxwell-Gleichungen, Materialgleichungen und das Ohm'sche Gesetz....7
2.1.2 Die Wellengleichung in Materie mit endlicher Leitfähigkeit....10
2.2 Beugung als Kombination aus Strukturwechselwirkung und Propagation, Näherungslösungen ohne korrekte Beschreibung der Strukturwechselwirkung....12
2.3 Periodische Beugungsgitter....16
2.4 Numerische Methoden zur rigorosen Lösung des Beugungsproblems....23
2.4.1 Einige gängige Methoden zur rigorosen Simulation von Lichtbeugung....24
2.4.2 Die Differentielle Methode und die RCWA....27
3 Die Verwendung von Normalenvektorfeldern in der RCWA....33
3.1 Die RCWA: Bekannte Formulierungen, Konvergenzprobleme, Unterschiede zur und Gemeinsamkeiten mit der Differentiellen Methode....33
3.2 Formulierung der RCWA auf Grundlage der Fast Fourier Factorization....45
3.3 Vergleich verschiedener Formulierungen anhand instruktiver Beispiele....48
3.3.1 Schräges Liniengitter....49
3.3.2 Schachbrettgitter....51
3.4 Strategien zur Aufstellung des Normalenvektorfeldes....54
3.4.1 Vorüberlegungen....54
3.4.2 Verwendung der Schwarz-Christoffel-Transformation....57
3.4.3 Verwendung eines elektrostatischen Modells....58
3.5 Verbesserte Ansätze zur Aufstellung von Normalenvektor-Feldern....62
4 Grundlage der Scatterometrie: Polarisationsoptik und Ellipsometrie....71
4.1 Matrix-Kalküle der Polarisationsoptik....71
4.1.1 Jones-Matrizen....72
4.1.2 Mueller-Matrizen....74
4.2 Ellipsometrie....77
4.3 Generalisierte Ellipsometrie....82
4.4 Rekonstruktion von ellipsometrischen Winkeln, Jones- und Mueller-Matrizen aus simulierten Beugungsspektren....85

5 Scatterometrie als Methode zur quantitativen Charakterisierung von Waferstrukturen.....89
5.1 Quantitative Wafer-Messtechnik, CD-Messtechnik.....89
5.2 Scatterometrie oder Optische CD-Messtechnik (OCD).....91
5.3 Historische Entwicklung und Varianten der Scatterometrie.....95
5.4 Aktuelle Herausforderungen in der Scatterometrie.....101
6 Charakterisierung von Gitterstrukturen mithilfe der Scatterometrie.....103
6.1 Sinnvolle primäre Messgrößen.....103
6.2 Scatterometrie an einer asymmetrischen Kreuzgitterstruktur.....104
6.3 Scatterometrie unter Berücksichtigung von Seitenwand- und Kantenrauheit.....113
6.3.1 Untersuchungen von Seitenwandrauheit und Fluktuationen der Linenbreite.....113
6.3.2 Periodisch modellierte Kantenrauheit.....119
7 Zusammenfassung und Ausblick.....131
Anhang: Modifizierte Version des Enhanced Transmittance Matrix Approach (ETMA).....135
Literatur.....143
Liste der Veröffentlichungen.....161
Lebenslauf.....164
Danksagung.....165

Verzeichnis der Abkürzungen und Formelzeichen

∇	Nabla Operator
$\times$	Kreuzprodukt, Vektorprodukt für 3D Vektoren
$\otimes$	dyadisches Produkt
$\lvert\ \rvert$	Absolutbetrag
$\langle\ \rangle$	zeitlicher Mittelwert
$(\ )^\top$	Transponierte einer Matrix
$(\dot{\ })$	Ableitung nach der Zeit
$\circlearrowleft, \circlearrowright$	linkszirkular, rechtszirkular
$\bullet\!\!-\!\!\circ$	Symbol zur Gegenüberstellung von sich entsprechenden Funktionen in Orts- und Fourierraum
1D	eindimensional
2D	zweidimensional
3D	dreidimensional
A	Drehwinkel des Analysators
$\mathbf{B}$, B	magnetischer Flussdichtevektor, Betrag desselben
BEM	boundary element method – Randelementemethode
c	Vakuumlichtgeschwindigkeit
C	Drehwinkel der Kompensators (engl. compensator)
CD	Critical Dimension, kleinste zu schreibende Strukturbreite in der optischen Lithographie (half pitch)
CD-AFM	Critical Dimension Atomic Force Microscopy – Vermessung von kritischen Dimensionen im Rasterkraftmikroskop
CD-SEM	Critical Dimension Scanning Electron Microscopy – Vermessung von kritischen Dimensionen im Rasterelektronenmikroskop
$\partial/\partial x$ oder ∂_x	partielle Ableitung nach x
δ	Phase einer komplexen Zahl oder relative Phase eines Polarisationszustandes (Jonesvektors)
$\mathbf{D}$, D	dielektrischer Verschiebungsvektor, Betrag desselben
Δ	ellipsometrischer Winkel Delta, Laplace-Operator
DE	Beugungseffizienz (engl. diffraction efficiency)
DGl	Differentialgleichung
DOP	Polarisationsgrad, (engl. degree of polarization)
DUV	deep ultraviolet – tiefes Ultraviolett

ε	komplexe relative dielektrische Konstante
ε_r, ε_i	Real- und Imaginärteil der dielektrischen Konstanten
ε_0	dielektrische Konstante des Vakuums
$[\![\varepsilon]\!]$	Toeplitz oder Block-Toeplitz-Toeplitz-Block-Matrix von ε
$[\![\lceil\varepsilon\rceil]\!]$, $[\![\lfloor\varepsilon\rfloor]\!]$	Li'sche Block-Toeplitz-Toeplitz-Block-Matrizen
$\mathbf{E}$, E	elektrischer Feldstärkevektor, Betrag desselben
$[E]$	Fourier-Vektor, Vektor aller Fourier-Koeffizienten von E
EMA – EMT	Effektiv-Medium-Approximation, Effektiv-Medium-Theorie
ETMA	enhanced transmittance matrix approach
EUV	extreme ultraviolet – extremes Ultraviolett
φ	Azimutwinkel
FDTD	Finite Difference Time Domain
FEM	Finite-Elemente-Methode
FIB	focused ion beam – fokussierter Ionenstrahl
FFF	Fast Fourier Factorization
$\mathbf{H}$, H	magnetischer Feldstärkevektor, Betrag desselben
i	imaginäre Einheit
$\mathbf{j}$, j	elektrische Stromdichte, Betrag derselben
$\mathbf{J}$	Jones-Matrix
J_{jk}	Einträge der Jones-Matrix
$\mathbf{k}$, k	Wellenzahlvektor, Betrag desselben
$\mathbf{K}_x$, $\mathbf{K}_y$	eindimensionale Gittervektoren
λ	Wellenlänge
Λ, Λ_x, Λ_y	Gitterperiode, Gitterperiode in $x-$ bzw. $y-$Richtung
LER	Line Edge Roughness – Kantenrauheit
LGS	Lineares Gleichungssystem
M	Drehwinkel des Modulators
M_{xy}	Gesamtmodenzahl in der RCWA von 2D periodischen Strukturen
M_x, M_y	Modenzahlen in $x-$ bzw. $y-$Richtung
$\mathbf{M}$	Mueller-Matrix
M_{jk}	Eintrag der Mueller-Matrix
μ	relative Permeabilität
μ_0	Permeabilität des Vakuums

n	komplexe Brechzahl
n_r, n_i	Real- und Imaginärteil der Brechzahl
$\mathbf{N}$	Normalenvektor als Formelsymbol
NV	Normalenvektor als Abkürzung im Text
ω	Kreisfrequenz des Lichts
P	Drehwinkel des Polarisators
PSA, PSG	Polarization State Analyzer, Polarization State Generator
$\mathcal{O}(R^2)$	Landausymbol, asymptotisches Verhalten einer Funktion
OCD	Optical CD – optische CD Messtechnik = Scatterometrie
ψ	Winkel des elektrischen Feldvektors bzgl. der $p-$Achse in einem lokalen $ps-$Koordinatensystem einer ebenen Welle
Ψ	ellipsometischer Winkel Psi
RCE	Rotating Compensator Ellipsometer oder Ellipsometrie
PEM	photoelastischer Modulator
PME	phasen- oder polarisationsmodulierende(s) Ellipsometer oder Ellipsometrie
ϱ	elektrische Volumenladungsdichte
RAE	Rotating-Analyzer-Ellipsometer oder Ellipsometrie
RCWA	Rigorous Coupled-Wave Analysis
RPE	Rotating-Polarizer-Ellipsometer oder Ellipsometrie
σ	elektrische Leitfähigkeit, elektrische Flächenladungsdichte
S	Drehwinkel der Probe (engl. sample)
$\mathbf{S}$	Stokes-Vektor
SWA	Sidewall Angle – Seitenwandwinkel von trapezförmigen Linien
SWR	Sidewall Roughness – Seitenwandrauheit
TE, TM	transversal elektrisch, transversal magnetisch
θ	Polarwinkel
X-SEM	Cross Section Scanning Electron Microscopy – Vermessung von Querschnitten im Rasterelektronenmikroskop

Zusammenfassung

Diese Arbeit behandelt sowohl die Simulation von Lichtbeugung an Kreuzgitterstrukturen als auch deren Anwendung in der Scatterometrie, einer Messtechnik für die Prozesskontrolle in der Halbleiterfertigung.

Kreuzgitterstrukturen weisen eine Periodizität entlang von zwei Koordinatenachsen auf. Bei der Verwendung von bekannten Fourier-basierten Methoden erhöht sich hierdurch die Komplexität von numerischen Beugungssimulationen auf $O\left(M^6\right)$ im Vergleich zu Gittern mit nur einer Richtung der periodischen Fortsetzung, bei denen sich lediglich ein Wert von $O\left(M^3\right)$ ergibt. Hierbei ist M die Anzahl der berücksichtigten Fourier-Koeffizienten oder Moden. Die Fourier-Reihen der unbekannten elektrischen und magnetischen Felder konvergieren mit wachsendem M gegen die wahren Werte. Dieser enorme Anstieg der Rechenzeit als Funktion der erwünschten Genauigkeit führt zu einem hohen Maß an Forschungsaktivitäten, die auf eine Reduktion der Rechenzeit abzielen. Für viele Simulationsaufgaben, speziell im Bereich der Prozesskontrolle in der Halbleiterfertigung, ist die Anwendung optimierter Algorithmen ausschlaggebend und entscheidet oft darüber, ob ein gegebenes Problem überhaupt mit der augenblicklich verfügbaren Rechenleistung zu bewältigen ist.

Diese Arbeit liefert einen Betrag zur Reduzierung der Rechenzeiten, indem eine Verbesserung einer der verbreitetsten Methoden vorgeschlagen wird, der Rigorous Coupled-Wave Analysis (RCWA). Mit dieser Verbesserung ist die Konvergenz des RCWA-Algorithmus für die meisten betrachteten Beispiele besser als bei alternativen Formulierungen der Methode. In manchen Fällen, bei denen andere Formulierungen optimal an die Symmetrie der Struktur angepasst sind, ist das Konvergenzverhalten lediglich vergleichbar. In keinem Fall wird aber schlechtere Konvergenz beobachtet.

Den zweite Themenschwerpunkt der Arbeit neben den Simulationsalgorithmen stellt deren Anwendung in der Scatterometrie dar. Im Gegensatz zu vielen anderen optischen Messtechniken zur Prozesskontrolle handelt es sich hierbei um eine nicht-abbildende Methode. Licht, das an typischerweise $> 10^6$ gleichförmigen Nanostrukturen in perdiodischer Anordnung reflektiert oder gebeugt wird, wird insbesondere im Hinblick auf die Änderung seines Polarisationszustandes untersucht. So wird ein Satz von primären Messdaten ausgezeichnet, der aber noch keinen direkten Rückschluss auf die gesuchten Dimensions- und Strukturparameter der Nanostrukturen erlaubt. Letztere können als sekundäre Messgrößen identifiziert werden und können nur durch Lösen des inversen Beugungsproblems ermittelt werden. Der einfachste Weg hierfür besteht in einer Bibliothekssuche, die die primären Messdaten mit einer großen Bibliothek vorab berechneter simulierter Datensätze mit sinnvoller Variation aller interessierender Parameter vergleicht.

Diese Arbeit untersucht verschiedene Lösungsansätze für gegenwärtige Herausforderungen an die Scatterometrie. Erstens werden unterschiedliche Varianten der Scatterometrie, speziell solche, die noch nicht in kommerziellen Geräten erhältlich sind, im Hinblick auf die Untersuchung komplexer 3D Strukturen bewertet. Zweitens wird Scatteromatrie an Strukturen mit Seitenwand- und Kantenrauheit betrachtet. Hierbei wird die Messbarkeit von Mittelwerten geometrischer Abmessungen einerseits und deren Standardabweichungen andererseits untersucht. Weiterhin wird der Einfluss von Kantenrauheit auf die Genauigkeit von rekonstruierten Größen studiert.

Im Folgenden wird eine kurze Zusammenfassung der einzelnen Kapitel gegeben. Kapitel 1 gibt eine Einführung in die beiden Themenschwerpunkte. Die Bedeutung rigoroser Beugungsrechnungen, d.h. von Rechnungen ohne physikalische Näherungen, wird untermauert. Ein kurzer Überblick über Scatterometrie und Inspektion von Nanostrukturen wird gegeben.

Kapitel 2 behandelt die grundlegenden Aspekte von Lichtbeugung mit einem speziellen Fokus auf periodische beugende Objekte. Ausgehend von den Maxwell-Gleichungen werden die Grundlagen der Wellenausbreitung sowohl in homogenen als auch in strukturierten Volumina, die mit verlustbehafteten, nicht-magnetischen Materialien gefüllt sind, beschrieben. Die rigorose Beugungstheorie wird von approximativen Methoden abgegrenzt. Wenn die Strukturgrößen beugender Objekte in der Größenordnung der Lichtwellenlänge sind, müssen rigorose Methoden zum Einsatz kommen. Für Strukturgrößen weit oberhalb der Lichtwellenlängen erhält die skalare Wellenoptik Gültigkeit. Für Strukturgrößen weit unterhalb der Wellenlänge kann die Effektiv-Medium-Theorie angewendet werden.

Die grundlegenden Definitionen für periodische Gitter werden wiedergegeben. Hierunter fallen propagierende und evaneszente Beutungsordnungen sowie verschieden Fälle für die Einfallsrichtung und Polarisation. Insbesondere wird zwischen ebener und konischer Beugung unterschieden. Ebene Beugung bedeutet, dass die Einfallsrichtung in einer Ebene liegt, die sowohl senkrecht auf der Gitteroberfläche als auch auf den Gitterlinien steht. In diesem Fall liegen auch alle Beugungsordnungen in derselben Ebene. Jeder Polarisationszustand kann dann in zwei fundamentale Polarisationen zerlegt werden, was die Komplexität von Simulationsmethoden erheblich reduziert. Konische Beugung bedeutet, dass die Einfallsrichtung nicht in der erwähnten Ebene liegt. Dann bilden die Wellenvektoren, die die Ausbreitungsrichtungen der Beugungsordnungen beschreiben, einen Kegelmantel. Dieser Fall ist wesentlich komplizierter in der Beugungssimulation zu behandeln.

Schließlich wird ein Überblick über Simulationsmethoden gegeben. Verbreitete Verfahren sind die Integralgleichungsmethode, die Methode der Finiten Differenzen, die Finite-Elemente-Methode, die Familien der Multipol- und Koordinatentransformationsmethoden und die klassische Modale Methode. Die Übersicht mündet in einen historischen Abriss der

RCWA und der Differentiellen Methode, die als der RCWA übergeordnete Methode angesehen werden kann.

In Kapitel 3 wird eine Konvergenzverbesserung der RCWA vorgeschlagen. Hierfür wird zunächst die RCWA ausgehend von den Maxwell-Gleichungen entwickelt. Der Bezug zur Differentiellen Methode wird dabei stets hergestellt. Es wird Beugung an 2D periodischen Strukturen aus isotropen, nicht-magnetischen Materialien betrachtet. Sowohl die Differentielle Methode als auch die RCWA basieren auf einer Fourier-Enwicklung der dielektrischen Konstanten, die die Strukturgeometrie beschreibt, sowie der elektrischen und magnetischen Felder. Die Fourier-Entwicklung wird bzgl. der Richtungen der periodischen Fortsetzung ausgeführt, die üblicherweise als x und y bezeichnet werden. Die Ableitungen in den Maxwell-Gleichungen werden somit durch einfache Multiplikationen ersetzt. Die Ableitung entlang der Gitternormalen, der z Achse, kann auf diese Weise aber nicht eliminiert werden. Die Differentielle Methode löst das Beugungsproblem durch numerische Integration entlang z, während die RCWA die Differentialgleichung durch die Modellierung der Struktur mittels einer Treppenstufen-Näherung auf ein Eigenwertproblem reduziert.

Die vorgestellte RCWA-Formulierung basiert auf der Neuformulierung der Differentiellen Methode durch Popov und Nevière und verwendet ein ähnliches Matrixkalkül wie die Arbeiten dieser Autoren. In dieser einheitlichen Matrix-Darstellung wird ein Überblick über die wichtigsten früheren RCWA-Formulierungen gegeben, um deren entscheidende Kernpunkte, insbesondere aber auch deren Nachteile aufzuzeigen.

Eine bestimmte Klasse von Konvergenzproblemen, die auf der fehlerhaften Anwendung der Faltung beruhen, wird umrissen. Diese Probleme sind für 1D periodische Gitter gelöst, sind aber noch immer Gegenstand der Forschung für den Fall 2D periodischer Gitter. Li hat als erster das Problem eingekreist. Er wies darauf hin, dass der wohl bekannte Faltungssatz, der im Fall von diskreten Fourier-Reihen auch "Laurent'sche Regel" heißt, nur dann gilt, wenn mindestens eine von zwei multiplizierten Funktionen stetig ist. In diesem Fall kann das Produkt im Fourier-Raum als diskrete Faltung geschrieben werden. Sind aber beide Funktionen unstetig, während ihr Produkt stetig ist, so muss statt dessen die so genannte inverse Regel angewendet werden. Ein Produkt von unstetigen Funktionen, das selbst unstetig ist, kann nach keiner der beiden ersten Regeln behandelt werden. Diese drei Aussagen wurden später von Popov und Nevière die Li'schen Regeln genannt und bilden die Grundlagen der gesamten Forschung auf diesem Gebiet.

Für 1D periodische Gitter sind die Li'schen Reglen leicht zu erfüllen. Im Fall der transversal elektrischen (TE) Polarisation ist das elektrische Feld $\mathbf{E}$ an Materialgrenzflächen stetig, so dass die Laurent'sche Regel angewendet werden kann. Im Fall der transversal magnetischen (TM) Polarisation ist $\mathbf{E}$ unstetig, aber die dielektrische Verschiebung $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ ist stetig, so dass die inverse Regel gilt.

Für 2D periodische Gitter können dagegen die Materialgrenzflächen beliebige Orientierung im Ortsraum aufweisen. Somit ist eine Zerlegung in zwei fundamentale Polarisationen bzgl. der Grenzfläche nur noch an jedem einzelnen Punkt im Ortsraum möglich. Die Information über die lokale Orientierung der Grenzflächen muss in den Fourier-Raum übertragen werden.

Verschiedene Lösungsansätze für dieses Problem werden wiedergegeben. Der allgemeinste Ansatz wurde von Popov und Nevière vorgestellt. Durch das Einführen eines Normalenvektorfeldes (NV-Feldes) zerlegen sie die elektrischen und magnetischen Feldgrößen an jedem Punkt einer Grenzfläche in Normal- und Tangentialkomponenten. Durch eine Fourier-Entwicklung des NV-Feldes ist es möglich, die Li'schen Regeln zu erfüllen.

Während Popov und Nevière die NV-Felder für die Differentielle Methode eingeführt haben, zeigt diese Arbeit, dass deren Anwendung auch innerhalb der RCWA von Vorteil ist. Der springende Punkt der Methode besteht in der Fortsetzung der an den Grenzflächen definierten NV-Felder in die homogenen Bereiche des Gitters. Die NV Felder werden im gesamten Ortsraum benötigt, um die Fourier-Koefizienten zu berechnen. Popov und Nevière haben die Frage nach einem geeigneten NV-Feld für beliebige Gittergeometrien nicht beantwortet. Zudem betrachten sie auch nicht eine weitere Komplexität, die nur bei der RCWA auftritt. Die Treppenstufen-Näherung erfordert, dass die Normalenvektoren parallel zur Gitteroberfläche sind, was zwangsläufig zu Singularitäten und / oder Diskontinuitäten in den NV-Feldern führt. Da Singularitäten und Diskontinuitäten durch Fourier-Reihen nicht gut dargestellt werden können, ist die Aufgabe, ein optimales NV-Feld zu finden, nicht trivial. Die Konvergenzverbesserung, die durch das Beachten der Li'schen Regeln erzielt wird, darf nicht durch eine schlechte Darstellung der NV-Felder im Fourier-Raum wieder verspielt werden.

Verschiedene Ansätze zum Aufstellen von NV-Feldern, die durch die Elektrostatik motiviert sind, werden vorgestellt. Bekanntermaßen stehen elektrische Feldlinien einerseits senkrecht auf ideal leitenden Körpern und sind andererseits mehr oder weniger glatt innerhalb von homogenen Materialien. Somit kann die Lösung fiktiver elektrostatischer Probleme, die auf der Gittergeometrie basieren, als NV-Feld für die vorgestellte RCWA-Formulierung verwendet werden. Die Anwendung dieser Algorithmen beschränkt sich aber auf Strukturen mit einer einzelne Kavität oder Säule innerhalb der Elementarzelle des Gitters. Das Konvergenzverhalten der RCWA-Rechnungen mit diesen NV-Feldern ist in den meisten Fällen besser als das von früheren RCWA-Formulierungen. Für einige Beispiele wird vergleichbare Konvergenz beobachtet, nie aber schlechtere.

Schließlich wird ein Überblick über die Fortsetzung der präsentierten Arbeiten durch Götz gegeben. In seiner Diplomarbeit entwickelte er einen neuen Algorithmus zum Aufstellen von NV-Feldern, der auch durch die Elektrostatik motiviert ist, aber nicht mehr direkt auf das Lösen von Randwertproblemen zurückgreift. Stattdessen werden die Normalenvektoren an

den Materialgrenzflächen durch Gradientenbildung ermittelt und durch Interpolation mit inverser Distanzgewichtung in die homogenen Bereiche fortgesetzt. Dies ist analog zur Elektrostatik, wo der Einfluss elektrischer Ladungen proportional zu $1/r^2$ abfällt, wobei r der Abstand eines Aufpunktes von der Ladung ist.

Der Interpolationsalgorithmus kann durch einen progressiven Verfeinerungsalgorithmus beschleunigt werden, der eine gute Näherung für die Interpolation darstellt. So kann die numerische Komplexität von $O\left(M^3\right)$ auf $O\left(M^2\right)$ reduziert werden, wobei M die Anzahl der Fourier-Koeffizienten ist. Der optimierte Algorithmus kann die benötigten NV-Felder in einem Bruchteil der Rechenzeit des RCWA-Algorithmus aufstellen und ist auf beliebige Strukturgeometrien anwendbar. In Verbindung mit der neuen automatisierten Erzeugung von NV-Feldern ist die hier präsentierte RCWA-Formulierung somit eine attraktive Alternative zu bisherigen Formulierungen.

Kapitel 4 gibt eine Einführung in Polarisationsoptik und Ellipsometrie. Die meisten Varianten der Scatterometrie basieren auf der Messung von Polarisationsänderungen, was seit über 100 Jahren als Ellipsometrie bekannt ist. Die mathematische Grundlage, um sowohl die Ellipsometrie zu verstehen als auch die Auswertung von simulierten und gemessenen Daten in der Scatterometrie zu analysieren, stellen die Matrix-Kalküle der Polarisationsoptik nach Jones und Mueller dar.

Das Jones-Kalkül beschreibt vollständig polarisierte Lichtbündel durch 2D komplexe elektrische Feldvektoren, die so genannten Jones-Vektoren. Sie sind in der Ebene senkrecht zur Ausbreitungsrichtung ebener Wellen definiert. Die Änderung eines Polarisationszustandes wird durch die Multiplikation des Jones-Vektors mit einer komplexen 2×2 Matrix, der Jones-Matrix, beschrieben. Jones-Matrizen erfassen nur nicht-depolarisierende Wechselwirkungen. Einige grundlegende Eigenschaften von Jones-Matrizen werden umrissen. Insbesondere sind Jones-Matrizen diagonal, wenn die Einfallsrichtung einer ebenen Welle in einer Symmetrieebene eines beugenden Objekts liegt. In diesem Fall sind die beiden nicht-verschwindenden Diagonalelemente äquivalent zu den ellipsometrischen Winkeln Ψ und Δ, die die traditionellen Messgrößen der Ellipsometrie darstellen. Wenn die Symmetrie gebrochen wird, müssen stattdessen Größen wie Jones- oder Mueller-Matrix-Einträge als Messgrößen herangezogen werden.

Das Mueller-Kalkül beschreibt vollständig oder teilweise polarisierte Lichtbündel in Form von reellen 4D Vektoren, den Stokes-Vektoren. Die Änderung dieser allgemeineren Polarisationszustände wird durch Multiplikation mit reellen 4×4 Matrizen vermittelt, den Mueller-Matrizen. Diese erfassen sowohl polarisationserhaltende als auch teilweise oder vollständig depolarisierende Änderungen und stellen somit eine wesentlich allgemeinere Beschreibung dar als die Jones-Matrizen. Jede Jones-Matrix kann in eine Mueller-Matrix konvertiert werden, aber nicht umgekehrt. Mueller-Matrizen sind weniger anschaulich als Jones-Matri-

zen, dafür aber messtechnisch leichter zugänglich, da sie mit Intensitäten statt mit elektrischen Feldern verknüpft sind, die bei den hohen Frequenzen des Lichts nicht gemessen werden können. Aus diesem Grund sind einige kommerzielle Ellipsometer imstande, Mueller- aber keine Jones-Matrizen zu messen.

Ein Überblick über Ellipsometrie wird gegeben. Der Schwerpunkt liegt dabei auf verschiedenen Ellipsometertypen und deren Fähigkeiten, Jones- oder Mueller-Matrizen ganz oder teilweise zu messen. Das weite Feld des Datenfittings und der Materialcharakterisierung, das die traditionelle Anwendung der Ellipsometrie darstellt, wird aber ausgelassen und kann in Lehrbüchern nachgelesen werden. Schließlich werden einige Beziehungen abgeleitet, die für die folgenden Betrachtungen zur Scatterometrie benötigt werden. Sie schließen die Lücke zwischen den Ergebnissen der numerischen Beugungssimulation und den Messungen in verschiedenen Varianten der Scatterometrie.

Kapitel 5 umreißt die historische Entwicklung der Scatterometrie und den Stand der Technik auf diesem Gebiet. Diese Messtechnik ist imstande, geometrische Strukturparameter aus dem Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Beugungsspektren oder Scatterogrammen zu rekonstruieren. Die verschiedene Varianten der Scatterometrie beruhen auf der Vermessung von an nano-strukturierten Proben reflektiertem oder gebeugtem Licht als Funktion eines Geräteparameters wie Einfallswinkel oder Lichtwellenlänge, wobei die Polarisationsabhängigkeit der gemessen Größen ausgenutzt wird.

Da das Verfahren auf numerischen Simulationen basiert, ist ein exaktes Strukturmodell ausschlaggebend. Nur Parameter, die im Modell berücksichtigt sind, können gemessen werden, und eine ungenaue Modellierung kann erfolgreiche Messungen verhindern. Es kann nicht vorhergesagt werden, ob eine gegebene Variante der Scatterometrie ausreichende Sensitivität auf einen interessierenden Parameter aufweist oder nicht. Wenn eine Variation dieses Parameters eine zu geringe Änderung des Scatterogramms verursacht, ist seine Rekonstruktion nicht möglich. Zudem können Korrelationen zwischen Parametern deren gleichzeitige Messung verhindern.

Neben der Rasterelektronenmikroskopie (engl. scanning electron microscopy – SEM) hat sich die Scatterometrie als eine der hauptsächlich eingesetzten Methoden der quantitativen Messtechnik kritischer Dimensionen (engl. critical dimensions – CDs) in der Halbleiterfertigung etabliert. Während die SEM einzelne Strukturen misst und somit CD Variation über ein gleichförmig strukturiertes Gebiet detektieren kann, misst die Scatterometrie eine große Anzahl von typischerweise $> 10^6$ Strukturen auf einmal. Das ist ein Vorteil, da Defekte die Messung nicht beeinträchtigen können. Es kann aber auch ein Nachteil sein, da Fluktuationen wie Rauheit und CD-Variationen zwischen benachbarten Strukturen schwer im zugrunde liegenden Modell berücksichtigt werden können. Der hauptsächliche Vorteil der Scatterometrie besteht in ihrer Zerstörungsfreiheit und Schnelligkeit.

Die Geburtsstunde der Scatterometrie ist schwer auszumachen. Beugungsordnungen und / oder Polarsiationsänderungen zu messen, um Strukturinformationen zu gewinnen, ist eine recht alte Idee. Eine geeignete Abgrenzung von frühen Arbeiten besteht darin, sowohl den Vergleich zwischen numerisch simulierten und gemessenen Spektren als auch das Anwendungsgebiet von Halbleiterstrukturen als wesentliche Merkmale der Scatterometrie zu fordern. Unter diesen Voraussetzungen muss die erste Anwendung von Scatterometrie McNeil und Mitarbeitern in den frühen 1990er Jahren zugeschrieben werden. Sie haben verschiedene Techniken beschrieben, legten ihr hauptsächliches Augenmerk aber auf die $2\theta-$Scatterometrie. Hierbei werden der Einfalls- und Beobachtungswinkel gleichzeitig variiert. Die Reflexion des ungebeugt reflektierten Lichts wird in zwei unterschiedlichen Polarisationen als Funktion des Einfallswinkels untersucht.

Ende der 1990er Jahre wurde erkannt, dass die wertvolle Information der relativen Phase zwischen zwei orthogonalen Polarisationen ausgenutzt werden sollte. Zu dieser Zeit wurde die spektroskopische Ellipsometrie als Variante der Scatterometrie etabliert. Bei konstantem Einfallswinkel in der Nähe des Brewsterwinkels werden die ellipsometrischen Winkel oder eng verwandte Größen als Funktion der Wellenlänge gemessen. Seit dieser Zeit werden $2\theta-$Scatterometrie und spektroskopische Ellipsometrie breit eingesetzt. Normal-Incidence-Reflektometrie spielt dagegen eine geringere Rolle.

Seit 2005 rückt eine neue Variante der Scatterometrie, die Fourier-Scatterometrie in den Mittelpunkt des Interesses. Dieses Verfahren basiert auf der Vermessung des Beugungsspektrums in der Pupille eines Mikroskopobjektivs mit einer Bertrand-Linse, was seit Jahren unter dem Namen Konoskopie bekannt ist. Im Vergleich zur $2\theta-$Scatterometrie wird bei dieser Technik ein wesentlich größerer Anteil des Winkelraums oberhalb der Probe erfasst.

Einige wesentliche aktuelle Herausforderungen an die Scatterometrie sind deren Anwendung auf komplexe 3D Strukturen, die Berücksichtigung von Rauheit und Fluktuationen, die Erweiterbarkeit hin zu kleineren Technologieknoten sowie die Vermessung von EUV-Masken. Letztere sind die Fotomasken für die nächste Generation der optischen Lithographie im extrem ultravioletten (EUV) Spektralbereich bei einer Wellenlänge von 13.5 nm.

Obwohl die erfolgreiche Anwendung der Scatterometrie auf einfache 3D Strukturen wie elliptische Löcher in Resist schon 1999 von Bischoff demonstriert wurde, hat die Methode bei komplexeren Strukturdetails und Materialeigenschaften noch immer mit ernsthaften Schwierigkeiten zu kämpfen.

Rauheit und Fluktuation vergrößern erstens die Anzahl der zu berücksichtigenden Parameter im Simulationsmodell. Zweitens, und das ist viel schlimmer, stören sie die perfekte Periodizität, die eine grundlegende Voraussetzung für die Anwendung Fourier-basierter Simulationsmethoden darstellt. Das Simulationsgebiet muss daher auf ein vielfaches der Lichtwellenlänge vergrößert werden, was Rechenzeit und Speicherbedarf in hohem Maß erhöht.

Obwohl die Scatterometrie gezeigt hat, dass Strukturdetails unterhalb der Auflösungsgrenze optischer Mikroskope noch durch optische Messungen erfasst werden können, ist klar, dass für immer stärker schrumpfende Strukturen weit unterhalb der Wellenlänge das so genannte Rayleigh-Regime erreicht wird, wo jedes Strukturmerkmal dem Licht nur noch als Punktstreuer erscheint.

EUV Masken stellen eine völlig unbekannte Klasse von Proben dar, was eine neuerliche Untersuchung verschiedener Varianten der Scatterometrie auf die interessierenden Parameter erfordert.

Nach dieser Einführung in die Scatterometrie werden in Kapitel 6 die Beiträge dieser Arbeit auf dem Gebiet vorgestellt. Das erste untersuchte Beispiel ist eine komplexe 3D Struktur im Regime $< 100\,\mathrm{nm}$, die sowohl Dielektrika als auch Halbleitermaterialien enthält. Zudem muss die Struktur durch eine Vielzahl von Parametern beschrieben werden. Zwei Parameter sollen aus scatterometrischen Messungen rekonstruiert werden: die Tiefe und die Breite (CD) eines sichelförmigen, geätzten Grabens. Die traditionell eingesetzten Methoden wie 2θ–Scatterometrie und spektroskopische Ellipsometrie zeigen eine ausreichende Sensitivität auf die Tiefe, nicht aber auf die CD.

Wie gezeigt wird, ist ein neuartiger Ansatz, der in ähnlicher Weise bereits in einigen früheren Publikationen zum Einsatz kam, geeignet, die CD zu messen. Anstatt des Polarwinkels der Einfallsrichtung θ oder der Wellenlänge wird der Azimutwinkel φ variiert, was Phi-Scan genannt wird. In der Praxis bedeutet dies, dass die Probe um ihre Normale gedreht wird. Im Gegensatz zu früheren Arbeiten zu dieser Methode wird die Mueller-Matrix als Messgröße herangezogen. Durch das Rotieren der Probe ist die Einfallsebene i.Allg. keine Symmetrieebene mehr. Somit müssen generalisierte Größen wie Jones- oder Muellermatrizen betrachtet werden, um die volle Information über den Polarisationstransfer zu erhalten. Die Mueller-Matrix bietet zwei Vorteile: Erstes ist sie mit dem verfügbaren Ellipsometer messbar, zweitens bietet sie die Möglichkeit, Depolarisation zu messen. Die Annahme, dass keine Depolarisation auftritt, die in der Scatterometrie stets getroffen wird, kann auf diese Weise überprüft werden. Es wird sowohl anhand einer Simulationsstudie als auch von Messungen gezeigt, dass diese Annahme mit ausreichender Genauigkeit erfüllt ist.

Obwohl die simulierten und gemessenen Mueller-Matrix-Scatterogramme vielversprechend aussehen, ist deren Übereinstimmung für eine quantitative Rekonstruktion der CD nicht ausreichend. Einige Mueller-Matrix-Einträge zeigen eine ausreichende Sensitivität auf die CD, aber es sind merkliche Unterschiede zwischen den beiden Datensätzen zu erkennen. Hierfür können mehrere Gründe identifiziert werden. Effekte wie Top Roundings, Footings oder Seitenwandwinkel wurde in dem dieser Studie zugrunde liegenden Modell nicht berücksichtigt. Zudem enthielt der bei der Messung ausgeleuchtete Bereich neben nano-strukturierten Gebieten auch unstrukturierte, was die Messergebnisse verzerrt. Nichtsdestoweniger

konnte demonstriert werden, dass der Phi-Scan den Informationsgehalt scatterometrischer Messungen erhöht und somit für solch komplexe Strukturformen mit geringer Symmetrie geeignet ist.

Der zweite vorgestellte Beitrag zur Scatterometrie untersucht das Problem von Seitenwandrauheit und CD-Fluktuationen, das bislang von der Forschung wenig bearbeitet wurde. In dieser Simulationsstudie werden einfache, rechteckförmige Gräben in Photoresist und in Silizium mit 128 nm CD und 280 nm Pitch untersucht. Die betrachteten Scatterometrie-Varianten sind Normal-Incidence-Reflektometrie und spektroskopische Ellipsometrie.

Als ersten Ansatz zur Berücksichtigung der Fluktuationen wird ein vierfaches Übergitter gewählt, bei dem die CD zwischen benachbarten Gräben variiert. So kann eine Gauss'sche Normalverteilung von CDs um ihren Mittelwert durch die diskrete Binomialverteilung $[1, 2, 1]^\top$ angenähert werden. Das bedeutet, dass der Mittelwert der CD doppelt so oft auftritt wie zwei benachbarte Werte $CD - \Delta CD$ und $CD + \Delta CD$. Dasselbe Modell wird auf Seitenwandrauheit angewendet, also auf eine Variation der Kantenposition zwischen Ober- und Unterseite der Gräben. Hierfür wird die Struktur in acht Schichten unterteilt, wobei die oben beschriebene Abfolge von vier CD-Werten zweimal wiederholt wird.

Mit diesem Modell wird die Sensitivität der Scatterometrie sowohl auf den Mittelwert als auch auf die Standardabweichung der CD untersucht. Man sieht, dass Scatterometrie auf beide Größen sensitiv und damit imstande ist, Fluktuationen von geometrischen Abmessungen ebenso zu messen wie deren Mittelwerte. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass die Mittelwerte und Standardabweichung nicht hoch korreliert und somit gleichzeitig messbar sind.

Obwohl diese Untersuchungen auf einem einfachen Modell beruhen, zeigen sie dennoch, dass Fluktuationen und Rauheit prinzipiell mit der Scatterometrie erfasst werden können. Dies ist aber nur durch eine Erweiterung des Simulationsmodells und die Berücksichtigung von Übergittern möglich, was die benötigte Rechenzeit und den Speicherbedarf erheblich anwachsen lässt.

Der letzte in dieser Arbeit betrachtete Aspekt der Scatterometrie ist der Einfluss von Kantenrauheit (engl. line edge roughness – LER) auf die Rekonstruktion von Strukturparametern. Im Gegensatz zur oben untersuchten Seitenwandrauheit bedeutet LER eine Variation der Seitenwandposition entlang der Linien eines 1D periodischen Gitters. Obwohl eine Messung von LER Parametern selbst wünschenswert ist, beschränken sich die Untersuchungen weitgehend auf die Frage, wie eine LER, die in der Struktur vorhanden, aber im Simulationsmodell nicht berücksichtigt ist, die Genauigkeit von Rekonstruktionsergebnissen beeinflusst.

Die Herausforderung, LER zu Modellieren, besteht in der großen Bandbreite ihres "Rauschspektrums". LER kann Frequenzkomponenten weit unterhalb der Lichtwellenlänge aber auch wesentlich größere enthalten, d.h. LER geht schrittweise in Welligkeit der Linien

und schließlich in eine makroskopische CD-Schwankung über. Für sehr hochfrequente Rauheit im starken Sub-Wellenlängen-Regime stellt ein Effektiv-Medium-Modell eine gute Näherung dar. Hierbei wird die LER durch zwei Materialschichten seitlich an der Linie beschrieben. Diese Schichten bestehen aus einem fiktiven Material, dessen Brechzahl dem arithmetischen Mittel derjenigen des Linienmaterial und der von Luft entspricht. Obwohl erweiterte Effektiv-Medium-Theorien mit anisotropen Brechahlen wohl bekannt sind, beschränken sich die präsentierten Arbeiten auf dieses einfache skalare Modell.

Der generelle Ansatz der Studie ist der folgende: Dichte Linien in Silizium mit 50 nm CD und 100 nm Pitch werden ohne LER, mit dem einfachen Effektiv-Medium-Modell sowie mit sinusförmiger LER mit variabler Tiefe und Periode modelliert. Die resultierenden Scatterogramme ohne LER und diejenigen, die sich aus dem Effektiv-Medium-Modell ergeben, werden als simulierte Datensätze für die Parameterrekonstruktion betrachtet. Die Scatterogramme mit sinusförmiger LER werden als Pseudo-Messdaten betrachtet. Sie werden in den Rekonstruktionsalgorithmus eingegeben, um die Fehler zu studieren, die sich aus einer nicht im Simulationsmodell berücksichtigten LER ergeben. Der Nutzen des Effektiv-Medium-Modells mit der Dicke der Effektiv-Medium-Schicht als zusätzlichem freien Parameter wird untersucht.

Diese Prozedur wird für zwei Varianten der Scatterometrie ausgeführt, nämlich für die spektroskopische Ellipsometrie und für die Fourier-Scatterometrie. Erstere ist eine der in den letzten Jahren hauptsächlich eingesetzten Methoden, letztere ist von großem Interesse in gegenwärtigen Forschungsarbeiten. Von diesem Standpunkt aus gesehen ist es wahrscheinlich, dass diese beiden Verfahren in den kommenden Jahren vorwiegend zum Einsatz kommen werden. Somit ist es interessant zu sehen, ob eine der Methoden für die gegenwärtige Herausforderung der Berücksichtigung von LER besser geeignet ist.

Es zeigt sich, dass beide Techniken ein ähnliches Verhalten aufweisen. In beiden Fällen ist der Einfluss der LER bei sehr kurzen Rauheitsperioden am größten. Für Rauheitsperioden weit oberhalb der Wellenlänge verschwindet der Einfluss der LER. Bei beiden Verfahren kann das Effektiv-Medium-Modell die durch die LER eingeführten Rekonstruktionsfehler erheblich reduzieren. Dies gilt sogar in Bereichen, wo die Effektiv-Medium-Theorie bekanntermaßen nicht gültig ist. In diesen Fällen kann dem Effektiv-Medium-Modell keine physikalische Bedeutung beigemessen werden. Es muss stattdessen als numerisches Hilfsmittel zur Verringerung der Rekonstruktionsfehler betrachtet werden. Im Grenzfall sehr kurzer Rauheitsperioden nähert sich die Dicke der Effektiv-Medium-Schichten dem RMS-Wert der Rautiefe der perdiodischen LER an. Dies weist deutlich darauf hin, dass hier der Gültigkeitsbereich der Effektiv-Medium-Theorie erreicht wird.

Kapitel 7 fasst die erzielten Ergebnisse zusammen und zeigt Aspekte für zukünftige Arbeiten auf. Einige Nachteile der vorgestellten Arbeiten konnten wenigstens teilweise bereits

beseitigt werden. Erstens wurde ein Tool zur verbesserten Strukturmodellierung implementiert, das aber für die Untersuchungen zur Scatterometrie nicht mehr zum Einsatz kommen konnte. Es steht für zukünftige Arbeiten zur Verfügung. Zweitens wurde ein verbessertes LER-Modell entwickelt und auch veröffentlicht. Es handelt sich dabei um einen approximativen Fieldstitching-Algorithmus, der die Nahfelder von periodischen Gittern zusammensetzt, um LER-behaftete Gitter zu beschreiben. Die Näherung ist gültig, so lange die LER-Amplitude genügend klein ist. Erwartungsgemäß hängen die resultierenden Forderungen an die Größe der LER-Amplitude von den Materialeigenschaften ab. Beide Modellierungswerkzeuge sowie der Bedarf nach einer detaillierteren Beschreibung sowohl von komplexen 3D Strukturen als auch von LER-behafteten Proben bilden die Grundlage für zukünftige Untersuchungen.

Ebenso bleiben bzgl. der vorgestellten Verbesserung der RCWA für 2D periodische Gitter offene Fragen. Insbesondere wäre ein Vergleich der präsentierten RCWA-Formulierung, der Differentiellen Methode sowie hybriden Algorithmen im Hinblick auf Rechenzeit und Speicherbedarf lohnend. Gleichwohl ist der Algorithmus in seiner aktuellen Version flexibel und einsatzbereit. Sein Konvergenzverhalten hat sich für alle betrachteten Beispiele als vergleichbar oder besser als das von früheren Formulierungen erwiesen.

Abstract

This thesis deals with both the simulation of light diffraction from crossed grating structures and its application in the field of scatterometry, a measurement technique for process control in semiconductor manufacturing.

Crossed grating structures feature a periodicity along two coordinate axes. Using common Fourier based methods, the complexity of the diffraction simulation is $O\left(M^6\right)$ instead of $O\left(M^3\right)$ as in the case of singly periodic structures, M being the number of retained Fourier modes. The Fourier series of the unkown electric and magnetic fields converge to the true values as M is increased. This enormous rise in computation time as a function of the desired precision gives rise to quite a lot of recent research activities to reduce the simulation durations. For many simulation tasks, particularly in the field of process control in semiconductor manufacturing, the application of optimized algorithms is crucial and often decides whether or not some computation task is feasible at all with the presently available computation power.

This thesis contributes to the activities to reduce computation times by proposing an improvement of one of the most widely used numerical methods, the rigorous coupled-wave analysis (RCWA). With this improvement the convergence of the RCWA algorithm is found to be better than that of alternative formulations for most of the investigated examples. In some cases, however, where other formulations are perfectly adapted to the respective structure symmetries, comparable convergence but never a poorer one has been observed.

The second main issue of this thesis besides the simulation algorithms is their application in the field of scatterometry. In contrast to many other optical measurement techniques for process control, scatterometry is a non-imaging method. Light reflected or diffracted from an extended array of typically $> 10^6$ identical nano-structures in a periodic arrangement is investigated with a particular focus on the change of the polarization state due to the interaction of the light with the structure. This way a set of primary measurement data is collected which does, however, not allow for a direct conclusion on the desired dimension and shape parameters of the nano-structures. The latter can be identified as the secondary measurands and can only be determined by solving the inverse diffraction problem. The simplest way to do so consists of a library search which compares the primary measurement data to a large library of pre-computed simulated data sets which comprise a variation of all dimension and shape parameters within reasonable boundaries.

This thesis investigates different approaches concerning current challenges in the field of scatterometry. Firstly, the capabilities of different variants, particularly those which are not yet available in commercial scatterometers, are investigated with regard to a complex 3D structure. Secondly, scatterometry from structures featuring sidewall roughness and line edge

roughness is considered. Here the respective measurability of mean values of geometric admeasurements on the one hand and their fluctuations of the other hand is analyzed. Furthermore, the influence of line edge roughness on the precision of reconstructed quantities is examined.

In the following a short summary of the individual Sections is presented. In Section 1 an introduction into the two main issues is given. The importance of rigorous diffraction computations, i.e. simulation methods without inherent physical approximation in the underlying model, is substantiated. A short survey on scatterometry and nano-structure inspection is presented.

Section 2 covers the basic aspects of light diffraction with a special focus on periodic objects. Starting from Maxwell's equations the fundamentals of wave propagation in both homogeneous and structured volumes filled with lossy non-magnetic materials are developed. The rigorous diffraction theory is distinguished from approximative methods. Rigorous methods have to be applied, if the structure dimensions of diffracting objects are of the same order of magnitude as the light wavelength. If, however, the structures are much larger, the range of validity of scalar wave optics obtains. For structures much smaller than the wavelength, the effective medium approximation can be applied.

The basic definitions for periodic gratings are given, among which are propagating and evanescent diffraction orders as well as different cases of directions of incidence and polarizations. Particularly the two cases of plane diffraction and conical diffraction have to be distinguished. Plane diffraction means that the direction of incidence lies within a plane which is orthogonal to both the grating surface and the grating rules. In this case the diffraction orders lie in the same plane as well. Any polarization state can then be decomposed into two fundamental polarizations which reduces the complexity of computer simulation methods severely. Conical diffraction means that the direction of incidence does not lie in the mentioned plane. Accordingly the wave vectors describing the propagation directions of the diffraction orders form a cone. This case is much more complicated to deal with in diffraction computation.

Finally, a survey of simulation methods is given. Popular techniques are the integral equation method, the finite difference method, the finite element method, the family of multipole methods as well as that of coordinate transform methods and the classical modal method. This overview ends up in a historic review of the RCWA and the differential method, which can be considered superordinated to the former.

In Section 3 a convergence improvement for the RCWA is proposed. To this end, the RCWA is developed starting from Maxwell's equations constantly pointing out its relation to the differential method. Diffraction from 2D periodic gratings made from isotropic non-magnetic materials is considered. Both differential method and RCWA rely on Fourier expansion of the dielectric constant which represents the structure geometry and of the electric and mag-

netic fields. The Fourier expansion is carried out with respect to the variables of the periodic continuation usually denoted x and y. The derivatives occurring in Maxwell's equations are thus replaced by simple multiplications. The derivative along the grating normal, the z axis, however, is not eliminated. The differential method solves the diffraction problem by numerical integration along z, whereas the the RCWA transforms the differential equation to an eigenvalue problem by modeling oblique sidewalls with a staircase approximation.

The presented RCWA formulation is based on Popov's and Nevière's reformulation of the Differential Method and relies on a similar matrix calculus as used by these authors. The most important prior art formulations of the 2D RCWA are reviewed in this consistent matrix formulation in order to illustrate their key points yet also the drawbacks that they still suffer from.

One particular class of convergence problems, i.e. those arising from an erroneous application of convolution, is outlined. These problems have been solved for 1D periodic gratings but are still a matter of research for 2D periodic gratings. Li first encircled the problem. He pointed out that the well-known convolution theorem, which is called "Laurent's rule" in the case of discrete Fourier series, is only valid, if at least one of two functions which are multiplied in ordinary space is continuous. Then the product can be expressed as a discrete convolution in Fouier space. If, however, both functions are discontinuous and their product is continuous, the so-called inverse rule has to be applied. A product of discontinuous functions which is itself discontinuous cannot be expressed by a convergent Fourier series at all. These three statements have later been named "Li's rules" by Popov and Nevière and are the basis of all recent research in this field.

For 1D periodic gratings Li's rules are easy to comply with. In the case of transversal electric (TE) polarization the electric field $\mathbf{E}$ is continuous at material boundaries and Laurent's rule can be applied. In the case of transversal magnetic (TM) polarization $\mathbf{E}$ is discontinuous at material boundaries, but the dielectric displacement $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ is continuous. Hence the inverse rule is applicable.

For 2D periodic gratings, however, the material boundaries may feature arbitrary orientation in ordinary space. Hence a decomposition into two fundamental polarizations with respect to the boundary can only be performed at each single point of the unit cell of the grating. The information about the local orientation of the boundary has to be transferred to Fourier space.

Different proposals to deal with this problem are reviewed. The most general approach was presented by Popov and Nevière. Introducing a normal vector (NV) field, they decompose the electric field quantities into normal and tangential components with respect to any point of a material boundary in ordinary space. By Fourier expanding the NV field it is possible to comply with Li's rules.

Whereas Popov and Nevière introduced the NV fields for the Differential Method, this thesis shows that its application to the RCWA is beneficial as well. The key point of the method is the continuation of the normal vectors defined at the boundaries into the homogeneous regions of the grating. The NV fields are required at all points of the ordinary space in order to compute the Fourier coefficients. Popov and Nevière did not answer the question of setting up an appropriate NV filed for arbitrary grating geometries. Furthermore, they did not deal with an additional complexity which is introduced by the RCWA. The staircase approximation forces the normal vectors to be parallel to the grating surface which obligatorily leads to singularities and / or discontinuities in the NV fields. Since singularities and discontinuities cannot be represented well by Fourier series, the task of setting up appropriate NV fields is not trivial. The convergence improvement gained by enforcing Li's rules must not be traded against a deterioration in convergence due to the discontinuities.

Different approaches for setting up NV fields are presented which are motivated by electrostatics. It is well-known that the streamlines of the electric field are normal to conducting surfaces on the one hand and more or less smooth within homogeneous materials on the other hand. Hence the solution of fictive electrostatic problems based on the grating geometry can be used as an NV field for the presented RCWA formulation. The algorithms are, however, restricted to single cavities or columns with the grating unit cell. The convergence behavior of the RCWA computations using these NV fields is in most cases better than that of previous RCWA formulations. For some examples the convergence is comparable, but never worse.

To conclude, the continuation of the presented work by Götz is surveyed. In his diploma thesis he developed a new algorithm for setting up NV fields which is still motivated by electrostatics but no longer involves the direct solution boundary value problems. Instead the normal vectors at the boundaries are computed by gradient formation and extended into the homogeneous regions using interpolation with inverse distance weighting. This is similar to electrostatics, where the influence of electric charges decays proportional to $1/r^2$ with the distance r of a test point from the charge.

The interpolation algorithm can be accelerated by a progressive refinement algorithm which is a good approximation to the original interpolation. This way the numerical complexity can be reduced from $O(M^3)$ to $O(M^2)$ where M is the number of retained Fourier coefficients. The optimized algorithm is able to setup the required NV fields in a fraction of the computation time of the RCWA itself. It is applicable to arbitrary structure geometries. Hence the presented RCWA formulation in conjunction with the new automated NV field generation is an attractive alternative to previous formulations of the 2D RCWA.

Section 4 gives an introduction to polarization optics and ellipsometry. Most variants of scatterometry rely on measurement of the change of polarization which has been well-known

under the term ellipsometry for more than 100 years. The mathematical basis to understand both ellipsometry and the analyses of simulated and measured data in scatterometry are the matrix calculi of polarization optics by Jones and Mueller.

The Jones calculus describes bundles of completely polarized light by 2D complex electric field vectors, the so-called Jones vectors. They are defined in the plane which is orthogonal to the propagation direction of plane waves. The change of a polarization state is described by multiplication of the Jones vector with a 2×2 complex matrix, the Jones matrix. Jones matrices comprise only non-depolarizing interactions. Some basic properties of Jones matrices are surveyed. Particularly, Jones matrices are diagonal, if both the direction of incidence and the direction of a plane wave reflected or diffracted from a sample lies within a symmetry plane of a diffracting object. In this case the two non-vanishing diagonal elements are equivalent to the ellipsometric angles Ψ and Δ which are the traditional measurands of ellipsometry. If the symmetry is broken, however, quantities such as the Jones- or Mueller matrix entries have to be chosen as measurands instead.

The Mueller calculus describes bundles of fully or partly polarized light by 4D real vectors called Stokes vectors. The change of these more general polarization states is considered by multiplication of Stokes vectors with 4×4 real matrices, the Mueller matrices. These comprise both polarization conserving and partly or fully depolarizing transfers and thus provide a more general description than the Jones matrices. Any Jones matrix can be converted to an equivalent Mueller matrix but not vice versa. Mueller matrices are less intuitive than Jones matrices but more closely related to practical measurements since they deal with intensities instead of electric fields which are not measurable due to the high frequency of light. For this reason some commercial ellipsometers offer the possibility of measuring Mueller matrices rather than Jones matrices.

A survey on ellipsometry is given. The focus lies on the different types of ellipsometers and their capabilities to measure not only ellipsometric angles but parts of the Jones or Mueller matrix. The wide field of data fitting and material characterization, which is the traditional application of ellipsometry, is skipped and can be read in a variety of standard textbooks. To conclude, some relations which are needed for the following considerations on scatterometry, are derived. They bridge the gap between the results of numerical diffraction simulation and the measurands in different variants of scatterometry.

Section 5 reviews the historic development and the state of the art of scatterometry. This measurement technique is able to reconstruct geometrical shape parameters from the comparison between measured and simulated diffraction spectra which are also called scatterograms. Different variants of scatterometry have in common that light reflected or diffracted from nano-structured samples is measured as a function of some device parameters such as wave-

length or angle of incidence where particularly the polarization dependence of the measured quantities is exploited.

Since the technique relies on numerical simulations, the application of a precise structure model is crucial. Only parameters considered in the model can be measured and inaccurate modeling can prevent successful measurements. It cannot be predicted whether or not some variant of scatterometry features a sufficient sensitivity on a parameter of interest. If a variation of the respective parameter causes no or too little changes of the scatterogram, a reconstruction is impossible. Furthermore correlations between parameters can hinder their simultaneous measurement.

Besides scanning electron microscopy (SEM) scatterometry has established itself as one of the most common methods in quantitative metrology of critical dimensions (CDs) in the field of semiconductor manufacturing. Whereas SEM measures single structures and thus is able to detect CD variations across a uniformly structured field, scatterometry measures a big number of typically $> 10^6$ unit cells at once. This is advantageous, since defects cannot spoil the measurement, but can be disadvantageous as well, since fluctuations such as roughness and CD variations between adjacent structures are difficult to take account of in the underlying model. The main advantage of scatterometry consists of being non-destructive and fast.

The hour of birth of scatterometry is hard to define. Measuring diffraction orders and / or polarization transfers in order to gain structure information is quite an old idea. An appropriate delineation from preliminary work consists of claiming both the comparison between numerically simulated and measured data and the application to semiconductor structures to be essential features of scatterometry. Under these premises, the first application of scatterometry has to be assigned to McNeil and co-workers in the early 1990s. They described different techniques, but mainly focused on the 2θ–scatterometry. Here both the angle of incidence and of observation are varied at the same time. The reflectance of the undiffracted reflected light is measured as a function of the angle of incidence for two different polarizations of the incident light.

In the end of the 1990s it was realized that the valuable piece of information of the relative phase between two orthogonal polarization states had to be exploited. At this time the application of spectroscopic ellipsometry to structured samples as a variant of scatterometry took center stage. At constant angle of incidence close to the Brewster angle, the ellipsometric angles or closely related parameters are measured as a function of the wavelength. Both 2θ–scatterometry and spectroscopic ellipsometry have been largely applied since then. Normal incidence reflectometry, in contrast, has played a minor role.

Since 2005 a new variant called Fourier scatterometry has caught the interest of researchers. This method relies on the measurement of the diffraction spectrum in the pupil of a microscope objective with a Bertrand lens, which has been known for many years under the

term conoscopy. In contrast to the 2θ–scatterometry a much bigger portion of the angular space above the sample is covered by this technique.

Some important challenges scatterometry is currently facing are its application to complex 3D structures, the consideration for roughness and fluctuations, the extendability toward smaller technology nodes and the application to EUV reticles. The latter are the photomasks for the next generation optical lithography using extreme ultra violet (EUV) radiation with a wavelength of 13.5 nm.

Though scatterometry was successfully applied to simple 3D structures like elliptical holes in photoresist already in 1999 by Bischoff, the method is still facing serious problems if both material properties and structure details become more complex.

Roughness and fluctuations firstly increase the number of parameters to be considered in the simulation model. Secondly, which is much worse, they perturb the perfect periodicity which is an essential requirement for the application of Fourier based simulation methods. The simulation domain consequently has to be extended toward a multiple of the light wavelength, which highly increases computation times and memory consumption.

Though scatterometry proved that structure details below resolving power of optical microscopes can still be sensed by optical measurements, it is clear that while shrinking the admeasurements further and further below the wavelength the so called Rayleigh regime is entered, where any feature appears to the light as a point scatterer.

EUV reticles are a completely unknown class of specimens which requires a new investigation on the sensitivity of the different variants of scatterometry onto the parameters of interest.

After this introduction to scatterometry the contributions of the thesis in this field are presented in Section 6. The first investigated example is a complex 3D structure in the regime < 100 nm containing both dielectrics and semiconductor materials. Furthermore the structure geometry can only be described by a large number of parameters. Two main parameters ought to be reconstructed from scatterometric measurements: the depth and the width (CD) of a crescent-shaped etched groove. The traditionally applied methods such as 2θ–scatterometry and spectroscopic ellipsometry feature a sufficient sensitivity to the depth but not to the CD.

As is shown, a novel approach, which has already been applied in a similar manner in some previous publications, is suited to measure the CD. Instead of varying the polar angle of incidence θ or the wavelength, the azimuthal angle φ is varied, which is referred to as phi scan. In practice this means that the sample is rotated around its normal. In contrast to previous work on this technique, the Mueller matrix is chosen as measurand. By rotating the sample the plane of incidence is in general no longer a symmetry plane. Hence generalized quantities such as Jones or Mueller matrices have to be chosen in order to gather all the informa-

tion about the polarization transfer. The Mueller matrix is advantageous for two reasons: firstly it is measurable with the available ellipsometer, secondly it offers the possibility to measure depolarization. The prerequisite that no depolarization occurs, as is always assumed in scatterometry, thus can be checked. It is shown from both a simulation study and measurements that this assumption is fulfilled with sufficient accuracy.

Though both simulated and measured Mueller matrix scatterograms look promising, their agreement is not sufficient for a quantitative reconstruction of the CD. Several Mueller matrix entries feature a fair sensitivity to the CD, but there are still observable differences between the two data sets. Several reasons can be given for this. The modeling facilities for the RCWA simulations were limited at the time when they were performed. Effects like top roundings, footings or sidewall angles thus were skipped in the model used for this study. Furthermore the area covered by the light spot in the ellipsometer contained besides the nanostructured areas also unstructured areas, which distort the measurement results. Anyway, it could be demonstrated that the phi scan can increase the amount of information of the scatterometric measurement and hence is suited for such complex structure shapes with low symmetry.

The second presented contribution to scatterometry investigates the problem of sidewall roughness and CD fluctuations which has been rarely addressed by other researchers so far. Simple rectangular grooves in photoresist and silicon with 128 nm CD and 280 nm pitch are investigated in a simulation study. The considered scatterometry variants are normal incidence reflectometry and spectroscopic ellipsometry.

As a first approach to include the fluctuations a fourfold superlattice with varying CD between neighboring trenches is chosen. This way a Gaussian normal distribution of CDs around their mean value can be approximated by the discrete binomial distribution $[1, 2, 1]^\top$. This means that the mean value has the double frequency of occurrence than two neighbored values $CD - \Delta CD$ and $CD + \Delta CD$. The same model is applied to sidewall roughness, i.e. a variation of the edge position between the top and bottom of the grooves. To this end the structure is sliced into eight layers where the sequence of four CD values described above is repeated twice.

Using this model the sensitivity of scatterometry to both the mean value and the standard deviation of the CD is analyzed. It is found that scatterometry is sensitive to both quantities and hence able to measure fluctuations of geometrical parameters as well as their mean values. Furthermore it can be demonstrated that the mean values and standard deviations are not highly correlated and can consequently both be measured at the same time.

Although being based on a restricted model, these investigations show that fluctuations and roughness can in principle be included in scatterometry. This is, however, only possible

by extending the simulation model and comprising superlattices which highly increases the required computation time and memory.

The last aspect of scatterometry addressed in this work is the influence of line edge roughness (LER) on the reconstruction of structure parameters. In contrast to the above investigated sidewall roughness LER means a variation of the sidewall position along the rules of a 1D periodic grating. Although a measurement of LER parameters itself using scatterometry is desirable, the investigations are largely restricted to the question, in which way LER present in the structure but not considered in the simulation model affects the precision of reconstructions results.

The challenge of modeling LER basically consists of the large bandwidth of its "noise spectrum". LER may contain frequency components far below the light wavelength, but also considerably larger ones which means that LER gradually turns into waviness of the lines and finally into macroscopic CD non-uniformity. For very high-frequency roughness in the subwavelength regime, an effective medium model is a good approximation. Here the LER is described by two material slabs sidewise to the grating lines. These slabs are made from a fictive material whose refractive index is the arithmetic average of those of the line material and air. Though more advanced effective medium theories comprising anisotropic refractive indices are well-known, the presented work is restricted to a simple scalar model.

The general approach of the study is the following: Dense lines in silicon with 50 nm CD and 100 nm pitch are modeled without LER, with the simple effective medium model and with sinusoidal LER of variable depth and roughness period. The resulting scatterograms without LER and those based on the effective medium model are considered simulated data to be used for parameter reconstruction. Those scatterograms, however, which are based on a sinusoidal LER model are considered pseudo-measured data. They are fed into the reconstruction algorithm in order to analyze the reconstruction errors arising from LER which is not included in the simulation model as a function of the roughness period. The benefit of the effective medium model using the thickness of the fictive material slabs as a free parameter is evaluated.

This procedure is performed for two variants of scatterometry, namely for spectroscopic ellipsometry and for Fourier scatterometry. The former has been one of the mainly applied methods throughout the recent years, and the latter is of great interest in current research work. From this point of view, it is likely that these two techniques will predominantly be used in the following years. Hence it is interesting to see, if either method is better suited for the current challenge of dealing with LER afflicted samples.

It is found that both measurement techniques show quite a similar behavior. In both cases the influence of LER is the most severe at very short roughness periods. For roughness periods much larger than the wavelength, the influence of LER vanishes. For both techniques

the effective medium model can highly reduce the reconstruction errors introduced by the LER. This even holds in regimes where the effective medium theory is well-known to be invalid. In these cases no physical meaning may be assigned to the effective medium model. Instead it has to be considered merely a numerical utility to reduce the reconstruction errors. In the limit of very short roughness periods the reconstructed thickness of the effective medium slabs roughly approaches the rms value of the periodic LER fed into the reconstruction algorithm. This is a strong indication that the range of validity of the effective medium theory is entered.

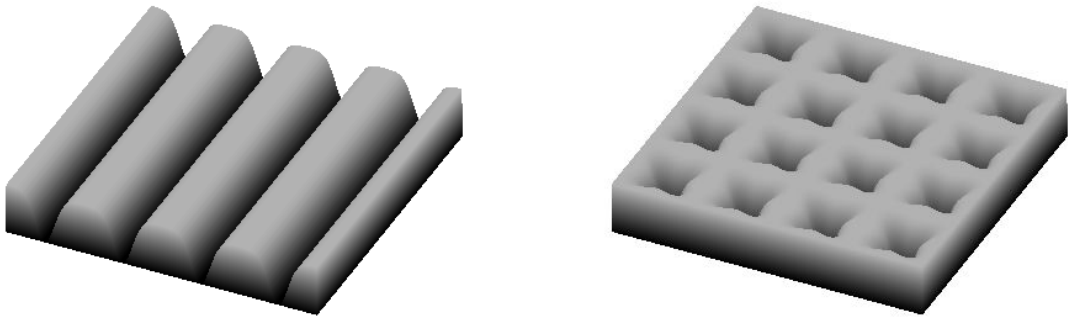
Section 7 summarizes the obtained results and depicts some issues for future work. Some drawbacks that the presented work still suffered from could at least partly already be overcome by the implementation of improved simulation tools. Firstly, a tool for advanced structure modeling was developed but could not be applied to the scatterometry investigations any more. It is available for future work. Secondly, an advanced model for LER was developed and published as well. It is an approximative fieldstitching algorithm which combines the nearfields of periodic gratings in order to describe LER afflicted gratings. The algorithm is valid, as long as the LER amplitude is sufficiently small. Expectedly the resulting restrictions to the LER amplitude depend on the material properties. Both modeling tools and the requirement for a more detailed description of both complex 3D structures and LER afflicted samples form the basis for future investigations.

Similarly the presented improvement of the RCWA for 2D periodic gratings leaves open questions. Particularly a comparison of the presented RCWA formulation, the differential method and hybrid algorithms with respect to computation time and memory demand appear worthwhile. Nevertheless, the algorithm in its current version is flexible and ready for use. Its convergence has been found comparable or better than that of any previous formulation for all considered examples.

1 Einleitung

Die vorliegende Arbeit hat die Simulation von Lichtbeugung an periodischen Gitterstrukturen sowie deren Anwendung in der Scatterometrie zum Inhalt. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf Strukturen, bei denen eine Elementarzelle in zwei Richtungen in einer Ebene periodisch fortgesetzt ist. Diese werden üblicherweise als Kreuzgitter, als zweidimensional periodische (2D periodische) oder als dreidimensionale (3D) Strukturen bezeichnet. Dagegen heißen Liniengitter auch eindimensional periodische (1D periodische) oder zweidimensionale (2D) Strukturen, vgl. Abb. 1. Die betrachteten aktuellen Aufgabenstellungen, die Kooperationsprojekten mit Industriepartnern aus der Halbleiterindustrie entstammen oder dort ihren Niederschlag gefunden haben, zeigen exemplarisch, dass die Simulation von Gitterbeugung von großem Interesse für forschungs- wie auch für fertigungsnahe Anwendungen ist, jedoch nach wie vor mit ungelösten Schwierigkeiten zu kämpfen hat.

Die Arbeit befasst sich also mit der Anwendung physikalisch-mathematischer Modelle zur Lösung von ingenieurwissenschaftlichen Fragestellungen. Bei der Verbesserung bestehender Simulationsalgorithmen steht das grundlegende Verständnis physikalischer Zusammenhänge im Vordergrund, bei der Scatterometrie dagegen klar der Aspekt der praktischen Anwendung. Beide im Titel erwähnten Aspekte – die Simulation sowie deren Anwendung in der Scatterometrie – sollen gleichermaßen in dieser Arbeit ein Stück vorangetrieben werden.



(a) (b)

Abbildung 1: Definition von Linien- und Kreuzgittern. Gitter mit periodischer Fortsetzung in einer Richtung (a) heißen Liniengitter, 1D periodische Gitter oder 2D Strukturen. Gitter mit periodischer Fortsetzung in zwei Richtungen heißen Kreuzgitter, 2D periodische Gitter oder 3D Strukturen.

Der bislang nicht definierte Begriff Scatterometrie soll hier kurz umrissen werden, in Kapitel 5 folgt dann eine ausführlichere Definition und eine Übersicht über die breit gefächerten Varianten der Scatterometrie. Während traditionell wie auch vom Wortsinn her das englische Wort "Scatterometry" die Vermessung von Streulicht meint, wird seit spätestens 1992 [Nei1992] der Begriff für die Vermessung von Beugungsordnungen an mikro- und nanostrukturierten Halbleitern gebraucht. Auf diese Weise können Abweichungen der Strukturen von ihrer Sollgeometrie zu überwacht werden. In dieser Arbeit soll der Begriff in Form von "Scatterometrie" analog ins Deutsche übernommen werden. Ein wesentliches Merkmal der Scatterometrie ist dabei der modellgestützte Ansatz, bei dem die zunächst abstrakten primären Messgrößen, sie sollen Spektren oder Scatterogramme genannt werden, durch den Vergleich mit simulierten Spektren Rückschlüsse auf die Strukturgeometrie liefern.

Oftmals wird in der Scatterometrie nur die nullte Beugungsordnung, also das ungebeugt reflektierte Licht analysiert. Eine reine Messung der Reflektivität würde jedoch nicht genügend Aufschluss über die zu untersuchenden Strukturen bieten, es ist nötig, zusätzlich die Polarisationsänderung, die das Licht bei der Reflexion erfährt, zu untersuchen. Die Vermessung von Polarisationsänderungen ist besser bekannt als Ellipsometrie, die in Kapitel 4.2ff. näher betrachtet wird und die Grundlage einiger Varianten der Scatterometrie darstellt.

Es soll nun abgegrenzt werden, wodurch sich die betrachteten Beugungsprobleme auszeichnen und wie sich die Simulationen von anderen, einfacheren Simulationen unterschieden. Die Methode, die in dieser Arbeit verwendet wird, heißt "Rigorous Coupled-Wave Analysis" (RCWA) [Moh1995a][Moh1995b], auch "Fourier Modal Method" [Li1997] oder "Coupled-Wave Method" genannt. Der Name RCWA ist unter Anwendern im Bereich der Scatterometrie sehr verbreitet und wird daher in dieser Arbeit bevorzugt.

Bereits das erste Wort dieses Namens, "rigorous", kennzeichnet die Art der Simulationen. Die zugrunde liegende Theorie, die Elektrodynamik nach Maxwell wird rigoros, also streng, ohne Näherungen angewendet. Der Begriff rigoros ist heikel, denn was bedeutet schon ohne Näherungen? Im hier verwendeten Sinne ist darunter zu verstehen, dass nicht bereits von vornherein die Physik als solche genähert wird, wie es in der Wellenoptik üblicherweise gemacht wird und für viele Anwendungen ausreichend ist. Es soll aber hier bereits darauf hingewiesen werden, dass auch in einigen als rigoros bezeichneten Methoden inhärente Näherungen und Annahmen über die Modellierung von beugenden Strukturen getroffen werden müssen. Eine genauere Betrachtung folgt in Kapitel 3.1.

Zwei wesentliche Näherungen bestimmen die vereinfachten, im hier verwendeten Wortsinn nicht-rigorosen Beugungsrechnungen: das Postulat einer skalaren Feldamplitude sowie die Beschränkung auf ideal dünne Amplituden- und / oder Phasenobjekte, welche bei Transmission oder Reflexion des Lichtes die Amplitude und / oder Phase unabhängig von lateral benachbarten Punkten modulieren können. Beide Näherungen widersprechen den Maxwell-Gleichungen, die bekanntermaßen den vektoriellen Charakter von elektrischen und magnetischen Feldern beinhalten. Weiterhin folgen aus den Maxwell-Gleichungen Randbedingungen

für die Felder, die durch die Annahme von ideal dünnen Amplituden- und Phasenmodulatoren ohne laterale Kopplung verletzt werden. Eine genauere Betrachtung verschiedener Näherungen und Methoden der Beugungssimulation folgt in Kapitel 2.

Sehr anschaulich lässt sich der Gültigkeitsbereich der verschiedenen Näherungen erfassen. Eine schlüssige Annahme besteht darin, dass die Vernachlässigung der lateralen Kopplung das elektrische Feld in einem Bereich von wenigen Wellenlängen Ausdehnung beeinflusst. Betrachtet man nun Objekte, deren Strukturbreiten sehr viel größer sind als die Wellenlänge, so ist der Anteil fehlerhaft beschriebener Orte im Simulationsvolumen gering, d.h. die Näherung erhält Gültigkeit. Sind dagegen die Strukturen im Bereich der Wellenlänge, so sind die hierdurch entstehenden Artefakte nicht mehr zu vernachlässigen. Sind andererseits die Strukturen wesentlich kleiner als die Wellenlänge, so tritt keine Beugung oder Streuung mehr auf. Man bezeichnet Oberflächen mit solchen Strukturen daher auch als optisch glatt. In diesem Fall kann die Wechselwirkung des Lichts mit den Strukturen durch eine Effektiv-Medium Approximation (EMA) beschrieben werden. Anschaulich gesprochen wird hierbei die Struktur als Material-Luft oder Material-Vakuum-Gemisch betrachtet, für das eine gemittelte Brechzahl angenommen wird. Ein grober Überblick über verschiedene EMA Varianten wird in Kapitel 2.2 gegeben.

Es zeigt sich also, dass die rigorosen Methoden in einem Bereich zur Anwendung kommen (müssen), wo Strukturgrößen von ähnlicher Dimension sind wie die Wellenlänge des Lichts. Ein Blick in die Geschichte zeigt, dass solche Probleme stets von Neuem praktische Relevanz erlangen. Die Anwendungen kommen und gehen, aber die verwendeten Simulationsmethoden bleiben, entwickeln sich weiter, und gewinnen mit zunehmender Rechenleistung an Bedeutung. Daher wurde im Titel bewusst die Simulation vorangestellt.

Betrachtet man allein das Feld der Halbleiter-Strukturierung und Charakterisierung, so stellt man fest, dass man immer von neuem mit Licht-Struktur-Wechselwirkung in dem erwähnten kritischen Bereich konfrontiert wird, in dem Wellenlänge und Strukturbreiten ähnlich groß sind. In den vergangenen Jahren haben sich schrittweise die verwendeten Wellenlängen und Technologien den wachsenden Anforderungen an immer schnellere Schaltkreise und höhere Speicherdichten angepasst. Nach Verwendung von blauem und nahem ultraviolettem Licht der Quecksilber g- und i-Linie mit Wellenlängen von 436 nm bzw. 365 nm kommt bereits seit 1986 [Fay2002] Licht im tiefen ultravioletten Spektralbereich des KrF-Lasers mit einer Wellenlänge von 248 nm zum Einsatz. Seit 1993 [Fay2002] und bis heute bestimmt der ArF-Laser mit 193 nm die optische Lithographie. Diese Technologie wird im Augenblick mit aufwändigen Verfahren wie Doppelbelichtung, engl. double patterning, Wasser-Immersion und perspektivisch auch Immersion mit höherbrechenden Fluiden aufrecht erhalten, so dass die Technologie voraussichtlich bis hin zum 22 nm–Knoten bestehen bleibt.

Durch den aktuell bevorstehenden großen Schritt von der Immersions-Lithographie hin zur Lithographie im extrem ultravioletten Spektralbereich, engl. extreme ultra violet (EUV) bei 13.5 nm, wird nun wieder ein Regime betreten, wo Strukturbreiten von z.B. 28 nm wieder

oberhalb der Belichtungswellenlänge liegen. Damit werden die rigorosen Methoden bei der Simulation sowohl des lithographischen Abbildungsprozesses als auch der optischen Charakterisierungsmethoden in den nächsten Jahren ihre Bedeutung behalten.

Neben dem hier betrachteten Feld von Anwendungen kann eine ganze Reihe von anderen genannt werden, seien es dicke Hologramme, wie sie bei den ersten Arbeiten zur RCWA von Interesse waren [Bur1966], diffraktive Optiken [Tur2000][Rib2007], die gerade in letzter Zeit nicht mehr ohne zumindest teilweise rigorose Berechnung auskommen, Probleme aus der Mikrowellen- und Antennentechnik [Taf2000], photonische Kristalle [Qiu2000] oder Metamaterialien [Dol2007]. Die Liste kann sicherlich um weitere Beispiele aus unterschiedlichsten Anwendungsgebieten ergänzt werden. Es wird also deutlich, dass rigorose elektromagnetische Simulationen von großer Bedeutung sind und auch bleiben werden. Auch die Scatterometrie wird nach Ansicht der Fachwelt [Bun2007] wenigstens bis zum 22 nm−Knoten und damit nach der "International Technology Roadmap for Semiconductors" ITRS [WWW01] bis zum Jahr 2012 Bestand haben. Insofern erscheinen Beiträge zu beiden Gebieten, der rigorosen Beugungssimulation und der Scatterometrie, lohnend.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 wird eine Übersicht über Lichtbeugung gegeben. Ausgehend von allgemeinen Betrachtungen wird zu periodischen Gittern und deren Behandlung in der numerischen Simulation hingeführt. Eine Übersicht über gängige Algorithmen mündet schließlich in einen detaillierten historischen Abriss der RCWA sowie der ihr übergeordneten Differentiellen Methode.

Kapitel 3 arbeitet, ausgehend von bekannten Formulierungen von RCWA und Differentieller Methode, den Beitrag der Arbeit zur Verbesserung der RCWA heraus. Durch das Aufstellen von geeigneten Normalenvektorfeldern im Ortsraum eines periodischen Beugungsgitters und anschließende Fourier-Reihenentwicklung kann, wie von Popov und Nevière für die Differentielle Methode [Pop2001][Pop2003] demonstriert, das Konvergenzverhalten der RCWA verbessert werden. Die Fourier-Reihe des Normalenvektorfeldes überträgt die Information der lokalen Orientierung der Grenzfläche in den Fourier-Raum und gewährleistet so die korrekte Behandlung des Produktes $\mathbf{D} = \varepsilon_r \varepsilon \mathbf{E}$ unter Berücksichtigung der aus den Maxwell-Gleichungen folgenden Randbedingungen für die elektrischen Feldgrößen.

Kapitel 4 leitet vom ersten Themenschwerpunkt, der Simulationsmethodik, über zum zweiten, der Anwendung der Simulation in der Scatterometrie. Es werden die Grundzüge der Polarisationsoptik und Ellipsometrie dargestellt, die eine elementare Grundlage der Scatterometrie darstellen. Die Matrix-Kalküle der Polarisationsoptik, das Jones- und das Mueller-Kalkül werden umrissen. Das breite Thema der Ellipsometrie wird insbesondere aus dem Blickwinkel betrachtet, welche verschiedene Varianten dieser Messtechnik existieren und welche Arten von Polarisationsänderungen bei Reflexion oder Beugung von Licht diese jeweils erfassen können. Das breite Anwendungsspektrum der Ellipsometrie dagegen würde den Rahmen sprengen und vom Thema wegführen. Abschließend wird in Form von Rekonstruktionsalgorithmen für polarisationsoptischen Größen aus elektrischen Feldern das Handwerkszeug für

die Auswertungen von Simulationen und Messungen der folgenden Anwendungsbeispiele zurecht gelegt.

Kapitel 5 liefert eine umfassende Darstellung der Scatterometrie. Das Verfahren wird in den Kontext anderer Methoden der Wafer-Messtechik eingeordnet. Die verschiedenen Varianten der Scatterometrie sowie deren historische Entwicklung werden in einer nach Kenntnis des Verfassers bislang nirgends vorzufindenden Vollständigkeit beschrieben. Schließlich werden aktuelle Herausforderungen in der Scatterometrie identifiziert, die gleichzeitig die folgenden eigenen Beiträge motivieren.

In Kapitel 6 werden die eigenen Arbeiten zur Scatterometrie dargestellt. Anhand einer beispielhaften Anwendung aus der Halbleiterindustrie wird das Potential neuartiger Gerätekonfigurationen im Hinblick auf die Vermessung komplexer 3D Strukturen untersucht. Es folgen Arbeiten zur Seitenwand- und Kantenrauheit in der Scatterometrie. Es wird der Frage nachgegangen, inwiefern die in der Scatterometrie grundsätzlich getroffene Annahme einer ideal periodisch fortgesetzten Struktur gerechtfertigt ist. Der Einfluss von Rauheiten auf rekonstruierte Strukturparameter wird in Abhängigkeit der Rautiefe betrachtet.

Eine zusammenfassende Bewertung der vorgestellten Ergebnisse sowie ein Ausblick auf mögliche weiterführende Untersuchungen stehen in Kapitel 7 am Ende der Arbeit.

2 Lichtbeugung

2.1 Grundlagen: Elektrodynamik

2.1.1 Die Maxwell-Gleichungen, Materialgleichungen und das Ohm'sche Gesetz

James Clerk Maxwell (1831-1879) formulierte die Grundlagen der klassischen, also nicht quantenphysikalischen Elektrodynamik in vier partiellen Differentialgleichungen, die er in ihrer endgültigen Fassung 1873 veröffentlichte. Diese bilden seither die Grundlage der Beschreibung elektrischer und magnetischer Phänomene, mithin auch der Optik, die sich den elektromagnetischen Wellen im sichtbaren und in benachbarten Spektralbereichen widmet.

Neben den Maxwell-Gleichungen werden zur korrekten Beschreibung elektromagnetischer Erscheinungen drei weitere Beziehungen benötigt, die die in den Maxwell-Gleichungen enthaltenen Größen bei deren Betrachtung in polarisierbarer, magnetisierbarer und leitfähiger Materie miteinander verknüpft. Die Rede ist hier von den Materialgleichungen und dem Ohm'schen Gesetz. Es existieren zahllose Lehrbücher über theoretische Elektrodynamik, diese Arbeit orientiert sich in weiten Teilen an dem Buch von Lehner [Leh1990], das eine sehr umfassende und übersichtliche Darstellung gerade auch für Wellen in verlustbehafteten Materialien bietet.

Zunächst seien die Maxwell-Gleichungen wiedergegeben, da diese die Grundlagen der Beugungssimulation darstellen. Hier wird, wie im Bereich der angewandten Physik und Ingenieurwissenschaft üblich, das gesetzliche SI (système international) verwendet. In diesem Einheitensystem lauten die Maxwell-Gleichungen:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}} \tag{1a}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \dot{\mathbf{D}} \tag{1b}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \varrho \tag{1c}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{1d}$$

Hierbei bezeichnen $\mathbf{E}$ die elektrische Feldstärke, $\mathbf{D}$ die elektrische Verschiebungsdichte, $\mathbf{H}$ die magnetische Feldstärke, $\mathbf{B}$ die magnetische Induktion, $\mathbf{j}$ die elektrische Stromdichte, ϱ die Volumenladungsdichte, $\nabla = [\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z]^\top$ den Nabla-Operator der ersten Ortsableitun-

gen und der Punkt über einer Größe wie üblich die Ableitung nach der Zeit. Das linksseitige Kreuzprodukt mit dem Nabla-Operator heißt Rotation, das Skalarprodukt Divergenz. Elektrische und magnetische Feldstärke beschreiben die äußeren Felder, wie sie beispielsweise durch eine einfallende Lichtwelle gegeben sind. Die elektrische Verschiebungsdichte und magnetische Induktion umfassen dagegen auch die Wechselwirkung von polarisierbarer und magnetisierbarer Materie mit äußeren Feldern und stellen daher eine vollständigere Beschreibung in Materie dar.

Beide Effekte, die Polarisation, also die Verschiebung von Ladungen, wie auch die mikroskopischen Ströme in Materie werden über weite Bereiche von praktisch relevanten Feldstärken durch lineare Materialgleichungen beschrieben:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_r \varepsilon_0 \mathbf{E} \tag{2a}$$

$$\mathbf{B} = \mu_r \mu_0 \mathbf{H} \tag{2b}$$

Hierbei beschreiben die dielektrische Konstante ε_r[1] die Polarisierbarkeit und die relative Permeabilität μ_r die Magnetisierbarkeit der Materie, ε_0 und μ_0 sind Konstanten und heißen dielektrische Konstante und Permeabilität des Vakuums. Für praktisch alle in der Optik relevanten Materialien gilt $\mu_r = 1$, d.h. die Materialien sind unmagnetisch. Eine Ausnahme hierzu stellt das hochaktuelle Gebiet der Metamaterialien dar, wo unter anderem bewusst magnetische Materialien in Sub-Wellenlängen-Strukturen eingesetzt werden, um negative Brechzahlen zu erzeugen [Dol2007].

Neben den Materialgleichungen benötigen wir noch das Ohm'sche Gesetz, das die Wirkung von äußeren elektrischen Feldern auf freie Ladungsträger beschreibt. Wie bei den Materialgleichungen gilt hier, dass über weite Bereiche praktisch relevanter Feldstärken ein linearer Zusammenhang vorausgesetzt werden kann:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \tag{3}$$

Hierbei heißt die Materialkonstante σ spezifische Leitfähigkeit.

Alle drei Materialgrößen ε_r, μ_r und σ sind hier als Skalare dargestellt. Diese Vereinfachung gilt bekanntermaßen in isotropen Materialien, wozu amorphe Festkörper wie Gläser oder polykristalline Metalle und Halbleiter gehören, ebenso aber kristalline Festkörper die zum kubischen Kristallsystem gehören, vgl. z.B. [Kop1992]. Im allgemeinen Fall sind diese Größen durch Tensoren zweiter Stufe zu ersetzen. Die Berücksichtigung dieser Anisotropie bei der Formulierung von Beugungstheorien stellt kein prinzipielles Problem dar. So liegt die später zu betrachtende Neuformulierung der Differentiellen Methode durch Popov und Nevière [Pop2001][Pop2003] in dieser allgemeinen Form vor. Ebenso hat auch Li seine Neuformulierung der RCWA für 2D periodische Gitter [Li1997] auf anisotrope Materialien erweitert [Li2003]. Da die Anisotropie von Materialeigenschaften in dieser Arbeit aber keine Rolle spielt, wird sie zugunsten der einfachen Darstellung übergangen. Ebenso wird die oben er-

1 Der Index r steht für reell. Später wird die komplexe dielektrische Konstante eingeführt, die der Einfachheit halber nur mit ε bezeichnet wird.

wähnte Annahme $\mu_r = 1$ stets vorausgesetzt, da die auftretenden Gleichungen in magnetisierbarer Materie zwar nicht prinzipiell komplizierter, aber unhandlicher und unübersichtlicher werden.

Aus den Maxwell-Gleichungen und den Materialgleichungen folgen für die vier Feldgrößen **E**, **D**, **H** und **B** Randbedingungen an Materialgrenzflächen. Die Herleitung dieser Randbedingungen ist wohlbekannt und in jedem Lehrbuch über Elektrodynamik zu finden. Hierbei werden die Rotations-Gleichungen (1a) und (1b) über eine kleine Fläche beiderseits einer Grenzfläche, die Divergenz-Gleichungen (1c) und (1d) über ein kleines Volumen integriert und die Integralsätze von Gauß und Stokes angewendet. Im Grenzwert unendlich kleiner Volumina bzw. Flächen folgen schließlich folgende Randbedingungen:

$$E_{t2} - E_{t1} = 0 \tag{4a}$$

$$D_{n2} - D_{n1} = \sigma_{frei} \tag{4b}$$

$$H_{t2} - H_{t1} = j_{frei} \tag{4c}$$

$$B_{n2} - B_{n1} = 0, \tag{4d}$$

wobei die Indizes 1 und 2 die Felder auf beiden Seiten der Grenzfläche unterscheiden. Die Tangentialkomponente von **E** ist also ebenso stetig wie die Normalkomponente von **B**. Die Normalkomponente von **D** springt dagegen bei der Existenz einer freien Oberflächenladung um den Betrag der Oberflächenladungsdichte σ, die Tangentialkomponente von **H** bei der Existenz freier Oberflächenströme um den Betrag der Stromdichte j. Als frei werden diejenigen Ladungen und Ströme bezeichnet, die im Gegensatz zu den gebundenen nicht durch Polarisation bzw. Magnetisierung der Materie entstehen. Freie Ladungen und Ströme entstehen etwa durch Aufladung von elektrisch leitfähigen Körpern oder durch eine angelegte elektrische Spannung. Es kann bei der im Folgenden betrachteten Lichtbeugung also davon ausgegangen werden, dass freie Ladungen und Ströme nicht existieren.

Damit lässt sich zusammenfassend festhalten, dass die Tangentialkomponenten von **E** und **H** sowie die Normalkomponenten von **D** und **B** stetig sind. Wegen der oben getroffenen Annahme $\mu_r = 1$ folgt die Stetigkeit aller magnetischen Feldgrößen. Aus der Materialgleichung (2a) folgt für die jeweils unstetigen elektrischen Feldkomponenten:

$$\frac{E_{n2}}{E_{n1}} = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \tag{5a}$$

$$\frac{D_{t2}}{D_{t1}} = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \tag{5b}$$

2.1.2 Die Wellengleichung in Materie mit endlicher Leitfähigkeit

Bei der Lichtbeugung wird die Wechselwirkung von Licht mit strukturierten Proben betrachtet, deren Materialeigenschaften im hier betrachteten Fall nichtmagnetischer Medien durch eine Polarisierbarkeit, also eine dielektrische Konstante, sowie durch eine Leitfähigkeit beschrieben werden können. Aus den Rotations-Gleichungen (1a) und (1b) kann für jeden Bereich im Raum, wo die Ortsableitungen der Felder existieren, eine Wellengleichung mit Dämpfungsterm, also eine Telegraphengleichung aufgestellt werden. Wendet man den Rotationsoperator auf (1a) an und ersetzt dann die rechte Seite gemäß (1b), (2a) und (3), so folgt unter Verwendung der Identität $\nabla \times \nabla \times (\cdots) = -\Delta(\cdots)$ mit dem Laplace-Operator $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$:

$$\Delta \mathbf{E} - \varepsilon_0 \mu_0 \varepsilon_r \mu_r \ddot{\mathbf{E}} - \mu_0 \mu_r \sigma \dot{\mathbf{E}} = 0 \tag{6}$$

Da in der Regel zeitharmonische Vorgänge betrachtet werden, kann die Zeitableitung mit dem Ansatz $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ eliminiert werden, hierbei heißt ω Kreisfrequenz des Lichtwellenfeldes. Einsetzen des Ansatzes sowie von $\mu_r = 1$ liefert:

$$\Delta \mathbf{E} + \left(\varepsilon_0 \mu_0 \omega^2 \varepsilon_r + i \mu_0 \omega \sigma\right) \mathbf{E} = \Delta \mathbf{E} + \varepsilon_0 \mu_0 \omega^2 \left(\varepsilon_r + i \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}\right) \mathbf{E} = 0 \tag{7}$$

Dies legt die übliche Definition der komplexen Dielektrizitätskonstante $\varepsilon = \varepsilon_r + i \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$ nahe. Damit lässt sich formal für zeitharmonische Phänomene auch in verlustbehafteten Materialien eine Helmholtz-Gleichung für das elektrische Feld aufstellen, deren Lösungen allerdings mit komplexwertigen Wellenvektoren verknüpft ist:

$$\Delta \mathbf{E} + \varepsilon_0 \mu_0 \omega^2 \varepsilon \mathbf{E} = 0 \tag{8}$$

Es ist bekannt und sofort ersichtlich, dass ebene Wellen der Form $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ mit Wellenvektor $\mathbf{k} = \omega / \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 \mu_0} \mathbf{e}$, $\mathbf{e}$ ein Einheitsvektor, diese Helmholtz-Gleichung lösen. Damit folgt die bekannte Relation für die Vakuumlichtgeschwindigkeit $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$. Weiterhin lässt sich wie für verlustfreie Medien eine nun aber komplexe Phasengeschwindigkeit im Medium sowie eine komplexe Brechzahl im Material definieren. Folgende Beziehungen gelten:

$$c_{\text{Medium}} = c/n, \; n = \sqrt{\varepsilon} = n_r + i n_i \tag{9}$$

Einsetzen einer ebenen Welle in Gl. (8) als Lösungsansatz liefert folgende Dispersionsrelation:

$$k_x^2 + k_y^2 + k_y^2 = \frac{\omega^2}{c^2} n^2 \tag{10}$$

Da n^2 nun komplexwertig ist, muss auch mindestens eine Komponente des Wellenvektors komplexwertig werden, was der Absorption der Welle im leitfähigen Medium entspricht.

Hierbei muss natürlich gefordert werden, dass unphysikalische, exponentiell anwachsende Lösungen nicht betrachtet werden.

Es wird sofort ersichtlich, dass $\mathbf{k} = (k_r + ik_i)\mathbf{e}$ eine, aber nicht die einzige Möglichkeit ist, einen sinnvollen Wellenvektor aufzustellen. Ein solcher Wellenvektor beschreibt eine Welle, die in Ausbreitungsrichtung exponentiell gedämpft wird und heißt homogene Welle. Ebenso gibt es aber auch inhomogene Wellen, bei denen die Richtung der exponentiellen Dämpfung nicht mit der Ausbreitungsrichtung zusammenfällt. Bei Reflexion am leitfähigen Medium läuft eine inhomogene Welle ins Medium, vgl. [Leh1990]. Die Ausbreitungsrichtung ist durch das Snellius'sche Brechungsgesetz unter Verwendung der Realteile der Brechzahlen gegeben. Es lässt sich formal auch ein komplexes Brechungsgesetz aufstellen, was z.B. bei der Herleitung der Fesnel'schen Formeln von Nutzen ist, vgl. z.B. [Bor1965]. Der komplexe Winkel im leitfähigen Medium hat jedoch keine Anschauung. Die inhomogene Welle im Medium klingt in Richtung der Grenzflächennormale ab. Wie in sich in Kapitel 2.3 zeigen wird, sind auch die in ein verlustbehaftetes Medium transmittierten Beugungsordnungen eines periodischen Gitters inhomogene Wellen, die in Richtung der Gitternormalen exponentiell abklingen.

Ebenso wie für das elektrische Feld $\mathbf{E}$ lässt sich auch eine Telegraphengleichung und eine daraus abgeleitete formale Helmholtz-Gleichung für das Magnetfeld $\mathbf{H}$ aufstellen. Für homogene Medien nehmen diese exakt dieselbe Form an wie die Gleichungen für das elektrische Feld. Lässt man allerdings eine räumliche Variation der komplexen dielektrischen Konstanten zu, so lässt sich die stationäre Wellengleichung nicht mehr in Form einer Helmholtz-Gleichung formulieren, da bei deren Herleitung analog zur Herleitung für die elektrischen Felder $\nabla \times \mathbf{D} = \nabla \times (\varepsilon \mathbf{E})$ gebildet werden muss. Wenn aber die dielektrische Konstante nicht konstant ist, kann sie nicht vor den Rotationsoperator gezogen werden.

Es treten nicht nur stetige Inhomogenitäten der dielektrischen Konstanten auf, sondern auch Materialgrenzflächen, also Unstetigkeiten derselben. Da an den Grenzflächen auch jeweils einige der Feldkomponenten unstetig sind, sind deren Ortsableitungen und damit die Maxwell-Gleichungen dort nicht definiert. Die gängigste Vorgehensweise bei den verschiedenen Methoden zur Beugungssimulation besteht also darin, homogene Bereiche zu definieren, wo die Maxwell-Gleichungen gelöst werden. Hierbei ergeben sich freie Konstanten, die durch Anwenden der Randbedingungen an den Grenzflächen ermittelt werden. Lediglich die Integralgleichungsmethoden legen eine andere Betrachtungsweise zugrunde: Hier werden die Felder durch Distributionen beschrieben und die Differentialoperatoren entsprechend der Distributionstheorie erweitert. Diese Beschreibung schließt Unstetigkeiten der dielektrischen Konstanten sowie der Felder ein.

2.2 Beugung als Kombination aus Strukturwechselwirkung und Propagation, Näherungslösungen ohne korrekte Beschreibung der Strukturwechselwirkung

Es existiert eine Vielzahl von Definitionen für den Begriff der (Licht-)Beugung. Anschaulich gesprochen ist oft die Rede vom Eintreten des Lichts in den geometrischen Schattenraum, was sicherlich eine, aber nicht die einzige Erscheinung der Lichtbeugung ist. Allgemeiner gefasst kann man Beugung wohl besser bezeichnen als Wechselwirkung eines beliebigen stationären, kohärenten Lichtwellenfeldes mit einem beugenden Objekt. Neben der unmittelbaren Wechselwirkung des Feldes mit dem beugenden Objekt wird die Propagation des Wellenfeldes von einer Lichtquelle zum Objekt und vom Objekt bis zu einer Detektorfläche in den Begriff der Lichtbeugung mit eingeschlossen.

Was anschaulich unter Beugungserscheinungen verstanden wird, etwa die Lichtausbreitung im geometrischen Schattenraum oder das Auftreten diskreter Beugungsordnungen bei periodischen Strukturen, ist bei Objekten mit beugungsrelevanten Strukturgrößen nicht zu weit oberhalb der Lichtwellenlänge zu beobachten. Objekte mit Strukturgrößen unterhalb der Lichtwellenlänge sind optisch glatt, d.h. es existieren keine propagierenden Beugungsordnungen außer der nullten. Trotzdem nimmt die Strukturierung einen entscheidenden Einfluss auf das reflektierte oder transmittierte Licht, indem die Strukturen unterschiedlich auf die verschiedenen Polarisationen des Lichts wirken. Man spricht von künstlicher oder strukturinduzierter Doppelbrechung. Bei Objekten mit Strukturgrößen weit oberhalb der Wellenlänge liegen die Beugungsordnungen so dicht beieinander, dass sie als solche nicht mehr wahrgenommen werden. Innerhalb der betrachteten Propagationsdistanzen führt der geringe Winkelabstand der Beugungsordnungen nicht zu einer nennenswerten Aufweitung paralleler Lichtbündel. Dies ist der Gültigkeitsbereich der geometrischen Optik.

Für viele praktische Anwendungen genügt eine vereinfachte Betrachtungsweise der Strukturwechselwirkung, so dass die Beugung vielfach auf die Propagation reduziert wird. Es wird davon ausgegangen, dass ein ebenes Objekt, etwa ein Schirm mit einer transmittierenden Öffnung oder mit periodisch modulierter Reflektivität oder Transmissivität durch eine skalare, komplexe Transmissionsfunktion beschrieben werden kann, die ein einfallendes, vereinfachend als skalar angenommenes Feld in Amplitude und Phase moduliert. Verschiedene Formalismen zur Beschreibung der Propagation einer so erzeugten Wellenfront sind die Beugungsintegrale von Kirchhoff sowie Rayleigh und Sommerfeld, außerdem Näherungslösungen derselben für achsnahe Detektorflächen, nämlich die Fresnel- und Fraunhofer-Näherung in der Nah- und Fernzone. Diese Formulierungen der skalaren Beugungstheorie sind in zahlreichen Lehrbüchern beschrieben und brauchen hier nicht weiter ausgeführt werden, da sie nicht zum Einsatz kommen. Es wird stattdessen auf das bekannte Buch von Goodman [Goo1968] verwiesen.

Es ist zu bemerken, dass die verschiedenen Formulierungen und Näherungen in der skalaren Beugungstheorie darauf basieren, dass eine skalare Helmholtz-Gleichung in einem Halbraum mit homogener Brechzahl und vorgegebener Feldverteilung in der den Halbraum begrenzenden Ebene zu lösen ist. Wie oben anhand der Maxwell-Gleichungen gezeigt wurde, gilt in einem Raumbereich mit homogener Brechzahl für jede Komponente des elektrischen Feldes eine skalare Helmholtz-Gleichung, vgl. Gl. (8). Eine Kopplung der Vektorkomponenten der elektrischen und magnetischen Feldkomponenten tritt in homogenen Raumbereichen nicht auf. Insofern sollte weniger von skalarer Beugungstheorie als eher von Propagationsalgorithmen die Rede sein, die gleichermaßen auf skalare und vektorielle Felder angewendet werden können. Das Wesen der skalaren Beugungstheorie besteht also in erster Linie in einer stark vereinfachte Strukturwechselwirkung, die zu physikalisch nicht korrekten Feldern führt.

Die Kirchhoff-Randbedingung fordert, dass sowohl das Feld selbst als auch seine Normalenableitung unmittelbar hinter lichtdurchlässigen Öffnungen in einem Schirm identisch wie vor dem Schirm sind, während sowohl Feld als auch Normalenableitung hinter undurchsichtigen Bereichen des Schirms null sind. Aus der Potentialtheorie ist jedoch bekannt, dass wenn in einem gewissen Bereich einer Ebene eine Funktion und ihre Normalenableitung gleich null sind, sie in der gesamten Ebene null sein müssen [Goo1968]. Die Kirchhoffsche Beugungstheorie startet also bereits mit physikalischen nicht korrekten Voraussetzungen. Die Rayleigh-Sommerfeldsche Formulierung vermeidet diese Inkonsistenz, indem keine Forderung mehr an die Normalenableitung gestellt wird, allerdings um dem Preis, dass zu jedem Punkt des einfallenden Lichtquellenfeldes ein fiktiver, an der beugenden Ebene gespiegelter Punkt ergänzt werden muss, der in Wirklichkeit nicht vorhanden ist.

Die beiden leicht unterschiedlichen Formulierungen haben also gemeinsam, dass in einer Ebene unmittelbar hinter einem beugenden Objekt unphysikalische Feldverteilungen erzeugt werden. Folgende Überlegung kann auch zur Veranschaulichung dieses Sachverhalts dienen. Wir betrachten ein transmissives Liniengitter mit unendlich dünnen, ideal absorbierenden Gitterstegen, vgl. Abb. 2. Die Gitterlinien sind von der Zeichenebene aus nach vorn und hinten (in y-Richtung) unendlich fortgesetzt, und es falle Licht von oben auf das Gitter. Wir betrachten die zwei fundamentalen Fälle der TE (transversal elektrischen) und TM (transversal magnetischen) Polarisation, die in Kapitel 2.3 genau eingeführt werden. Als TE wird im Moment definiert, dass der elektrische Feldvektor parallel zur $y-$Achse orientiert ist, während der magnetische Feldvektor in der $xz-$Ebene schwingt. Bei TM ist die Situation genau umgekehrt.

Die beiden elektrischen Feldvektoren $\mathbf{E}_1$ und $\mathbf{E}_2$ stellen im TE-Fall bezüglich der virtuellen lateralen Grenzflächen, die durch die Gitterstege definiert sind, rein tangentiale Felder dar und sind somit stetig. Damit ist die oben beschriebene Annahme von Kirchhoff und Rayleigh-Sommerfeld-Formulierung, dass das Feld hinter undurchsichtigen Teilen eines Schirms verschwindet, hinter durchsichtigen aber unverändert dem Feld vor dem Schirm entspricht, nicht konform mit den Maxwell-Gleichungen.

Für den TM Fall könnte ebenfalls das obere Teilbild von Abb. 2, diesmal aber mit dem Magnetfeld, zur Veranschaulichung dienen. Es ist aber auch eine Betrachtung anhand des elektrischen Feldes möglich, die wenigstens für ebene Wellen unter schrägem Einfall eine gute Anschauung liefert. Die beiden eingezeichneten elektrischen Feldvektoren erfüllen die aus den Maxwell-Gleichungen abgeleiteten Randbedingungen, dass nämlich die Tangentialkomponente stetig ist. Ist diese wiederum unmittelbar hinter den Gitterstegen null, so muss sie das auch daneben innerhalb der Öffnung sein. Diese Anschauung versagt für senkrechten Einfall, da hier das elektrische Feld wegen seiner Transversalität vollständig normal zu den virtuellen Grenzflächen wird und somit springen darf. Das heißt natürlich nicht, dass die skalare Beugungstheorie dort Gültigkeit besitzt, da wie gesagt die hier für TE dargestellte Betrachtung für den TM Fall analog für das Magnetfeld angestellt werden kann. Eine korrekte Beschreibung von Beugungsphänomenen muss aber für magnetische und elektrische Felder richtig sein, da diese bei Wellenerscheinungen immer gekoppelt auftreten.

Für dünne beugende Objekte, deren laterale Strukturgrößen genügend weit oberhalb der Wellenlänge liegen, stellen jedoch die skalaren Beugungstheorien eine ausreichend genaue Beschreibung dar. Der genaue Gültigkeitsbereich kann und soll hier nicht untersucht und dargestellt werden. Es sei kurz ein Richtwert zitiert, den der frühere Mitarbeiter am Institut für Technische Optik (ITO), Norbert Kerwien, für eine vektoriell erweiterte Version der Kirchhoffschen Näherung angibt: Für laterale Strukturgrößen ab ca. 10-15 Wellenlängen hat die Näherung Gültigkeit [Ker2007a]. Ähnliche Faustregeln dürften für die rein skalare Kirchhoff- oder Rayleigh-Sommerfeld-Theorie gelten, solange keine zu tiefen Gitter betrachtet werden.

Der bereits erwähnte und am ITO verfolgte Ansatz, die Kirchhoff-Theorie auf eine vektorielle Formulierung auszudehnen, soll die Betrachtungen über skalare Näherungen abschließen. Die Methode wurde ursprünglich VKA (Vektorielle Kirchhoff-Approximation) und später VTEA (Vectorial Thin Element Approximation) genannt [Ker2007a][Pet2006]. Ihr Wesen

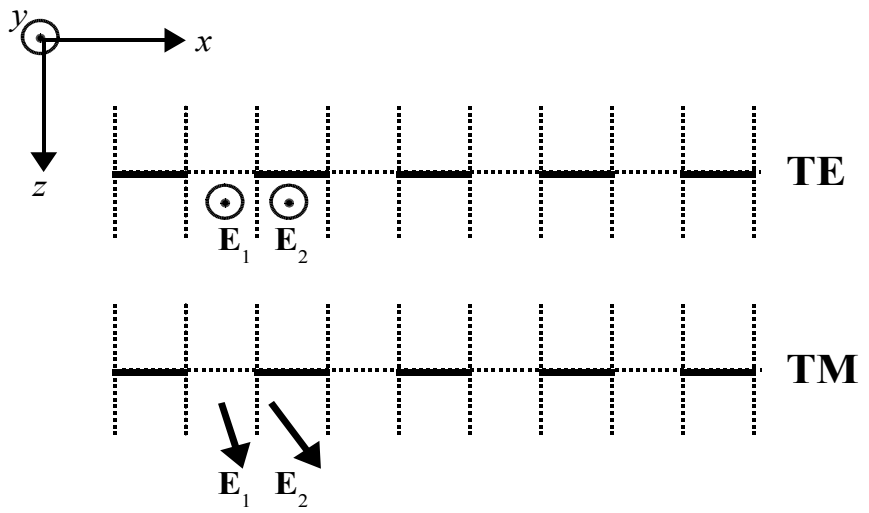


Abbildung 2: Zur Veranschaulichung physikalischer nicht korrekter Näherungen in skalaren Beugungstheorien

besteht darin, dass an lateralen Grenzflächen physikalische nicht korrekte Sprünge zugelassen werden, während an Schichtgrenzflächen eine korrekte, polarisationsabhängige Beschreibung gemäß der Fresnel'schen Formeln gewählt wird. Damit werden im Gegensatz zu einer rein skalaren Theorie Effekte, die von der Reflexion des Lichts aus tiefer liegenden Schichten rühren, polarisationsoptisch korrekt beschrieben. Die fehlerhafte Beschreibung an lateralen Grenzflächen führt jedoch zu der oben erwähnten Forderung, dass Strukturgrößen sich mindestens im Bereich von 10-15 Lichtwellenlängen bewegen müssen.

Neben den eben kurz dargestellten Näherungsmethoden für hinreichend große Strukturen existieren auch solche für Strukturen, deren Größe genügend weit unterhalb der Wellenlänge ist. Lediglich der Bereich um die Lichtwellenlänge entzieht sich gültigen Näherungslösungen und macht die rigorosen Simulationen notwendig. Wie eingangs in diesem Kapitel erwähnt, wirken Sub-Wellenlängen-Strukturen unterschiedlich auf die verschiedenen Polarisationen des Lichts und können damit durch Struktur-induzierte Doppelbrechung beschrieben werden. Dies leuchtet unmittelbar ein, denn eine Strukturierung bricht die Symmetrie. Ähnlich wie die polarisierbaren Atome und Atomgruppen im Kristall je nach Symmetrie deren Anordnung zu einer dielektrischen Konstanten oder Brechzahl führen, die von der Orientierung des elektrischen Feldvektors abhängt, kann auch eine anisotrope Strukturierung von optisch isotropen Materialien im Sinne eines Übergitters zu solchen Effekten führen. Eine rigorose Lösung des Beugungsproblems für Sub-Wellenlängen-Strukturen ist natürlich imstande, die ordentlichen und außerordentlichen Brechzahlen dieser künstlichen Doppelbrechung zu bestimmen. Da diese aber sehr zeitaufwändig ist, wird unter dem Sammelbegriff der Effektiv-Medium-Theorien (EMT) oder Effektiv-Medium-Approximationen (EMA) versucht, diese Brechzahlen durch Näherungslösungen zu erhalten.

Oft zitierte frühe Arbeiten zur EMA sind die von Bruggeman [Bru1935] oder Rytov [Ryt1956]. Was einfache Liniengitterstrukturen ohne Gradientenindex-Profile betrifft, ist letztere nach wie vor Stand der Technik. Moderne Erweiterungen der Theorie bestehen im Wesentlichen in der Verwendung von Fourier-Ansätzen, die auch Gradientenindex-Profile zulassen, sowie in der Erweiterung auf Kreuzgitterstrukturen. Diese Weiterentwicklung ist analog zur Entwicklung der Fourier-modalen Methoden aus der klassischen Modalen Methode zu sehen, vgl. Kapitel 2.4.

Ein relativ umfassender Artikel stammt von Lalanne [Lal1996b]. Hier wird, basierend auf einem Fourier-Ansatz, eine EMA für beliebige Liniengitterstrukturen und inversionssymmetrische Kreuzgitterstrukturen formuliert. Die Äquivalenz zur Formulierung von Rytov für Liniengitterstrukturen wird gezeigt. Dies ist nach Kenntnis des Verfassers die allgemeinste bekannte Formulierung einer EMA für Kreuzgitterstrukturen, die andererseits eine echte Vereinfachung gegenüber rigorosen Methoden darstellt. Noch allgemeinere Formulierungen, etwa [Gra1994], basieren letztlich auf der RCWA, so dass kein nennenswerter Vorteil bei der Rechenzeit zu erwarten ist. Allerdings beschränkt sich die Formulierung von Lalanne leider auf senkrechten Einfall. Insofern besteht noch Forschungsbedarf in der Erweiterung der EMA auf

beliebige Kreuzgitterstrukturen und beliebige Einfallsgeometrien. Einen vergleichsweise aktuellen Überblick über bereits existierende Ansätze geben Turunen et al. [Tur2000].

Die Grundidee der Formulierung von Lalanne sowie vieler moderner Fourier-basierter EMA-Formulierungen besteht in dem Postulat einer einzigen effektiven Brechzahl für alle evaneszenten Wellen, die in der Struktur angeregt werden. Es wird ein DGl-System formuliert, das äquivalent zum Grundgleichungssystem der RCWA, Gl. (27) ist, auf das an dieser Stelle vorgegriffen wird. Wie bei der RCWA wird durch einen Fourier-Ansatz das DGl-System in ein algebraisches lineares Gleichungssystem umgewandelt, allerdings mit einem einzigen Eigenwert, der Wurzel des gesuchten effektiven Brechungsindex. Dieser wird in eine Taylor-Reihe der Variablen Λ/λ (Λ die Gitterperiode, λ die Wellenlänge) entwickelt und durch Nullsetzen der Determinante des LGS ermittelt. Aus in [Lal1996b] gezeigten Vergleichsrechnungen mit rigorosen Simulationen kann als grober Richtwert ermittelt werden, dass die Gültigkeit der EMA auf Perioden einer Zehntel Lichtwellenlänge und darunter beschränkt ist. Eine genauere Untersuchung des Gültigkeitsbereichs kann hier ebenso wenig erfolgen wie im Fall der skalaren Beugungstheorien.

Abschließend sei erwähnt, dass die EMA breiten Einsatz in der Scatterometrie findet, siehe z.B. [Abd2007]. Durch die Verfügbarkeit von Ellipsometern im infraroten Spektralbereich lässt sich die Bedingung einer starken Sub-Wellenlängen-Struktur einhalten. Die EMA geht von einem in z–Richtung (entlang der Gitternormalen) konstanten Gitterprofil aus, so dass ähnlich wie bei der RCWA eine Unterteilung in Schichten erfolgen muss. Da jeweils nur die propagierenden nullten Beugungsordnungen betrachtet werden, ist die Propagation durch den Schichtstapel im Gegensatz zu den rigorosen Beugungstheorien ein rechentechnisch vergleichsweise harmloses Problem. Es müssen lediglich an jeder Grenzfläche die Randbedingungen der Felder eingehalten werden. Aus der Ellipsometrie sind Algorithmen für intrinsisch doppelbrechende Vielschichtsysteme bekannt, etwa von Berreman [Ber1972] oder Yeh [Yeh1980]. Es handelt sich hierbei jeweils um 4x4-Matrix-Formalismen, die in Kapitel 4.3 beim Thema der generalisierten Ellipsometrie nochmals erwähnt werden.

2.3 Periodische Beugungsgitter

Die in dieser Arbeit verwendete Methode der RCWA, aber auch etliche andere Methoden zur Beugungssimulation, wie die Differentielle Methode oder Integralgleichungsmethode, setzen inhärent eine ideal periodische Fortsetzung von Strukturen voraus. Bei vielen Anwendungen ist diese Voraussetzung gut erfüllt, etwa bei Beugungsgittern für die Spektroskopie oder auch in der Scatterometrie, die das Anwendungsbeispiel dieser Arbeit darstellt. Daher sollen hier die Grundbegriffe ein- und zweidimensional periodischer Beugungsgitter eingeführt werden.

Abb. 3 zeigt ein allgemeines eindimensional periodisches Beugungsgitter (Liniengitter). Anhand der Abbildung werden aber gleichzeitig die Begriffe der zweidimensional periodischen Gitter (Kreuzgitter) eingeführt. Die eindimensionale Darstellung wurde nur zur besse-

ren Übersicht gewählt. Außerdem wurde eine Einfallsrichtung in einer Ebene senkrecht zu den Gitterlinien (xz–Ebene) gewählt, um hier zunächst mit dem einfachsten möglichen Fall zu beginnen. Diese Einfallsgeometrie heißt ebene Beugung. Gleichzeitig wurde aber eine alternative Einfallsebene gestrichelt eingezeichnet, die um einen Azimutwinkel φ gegen die xz–Ebene um die z–Achse, also um die Gitternormale rotiert ist. Diese Einfallsgeometrie heißt konische Beugung, was unten noch veranschaulicht wird.

Eine ebene Welle, deren Richtung durch den Wellenzahlvektor $\mathbf{k}_{in}$ beschrieben wird, fällt von oben unter einem Polarwinkel θ zur Gitternormalen auf das Gitter. Die Einfallsrichtung legt zusammen mit der Gitternormalen die Einfallsebene fest. Wie in Abb. 3 gezeigt, liegen bei dieser Einfallsgeometrie die Wellenzahlvektoren der einfallenden Welle wie auch aller gebeugten Wellen innerhalb der Einfallsebene, daher der Name ebene Beugung. Diese Eigenschaft wird unten begründet. Es bietet sich an, für jeden Wellenzahlvektor in der auf ihm senkrecht stehenden Ebene ein zweidimensionales Koordinatensystem zu definieren, das ps–System. Ein Einheitsvekor weist parallel zur Einfallsebene und bekommt daher die Bezeichnung **p**, der andere senkrecht zu derselben und heißt somit **s**. Wegen der Transversalität elektromagnetischer Wellen muss der elektrische Feldvektor in der durch das ps–System festgelegten Ebene liegen.

Die beiden Spezialfälle, in denen elektrische Feld parallel zu den Einheitsvektoren **p** oder **s** ist, heißen p– und s–Polarisation. Ebenfalls gebräuchlich sind die Namen TE (trans-

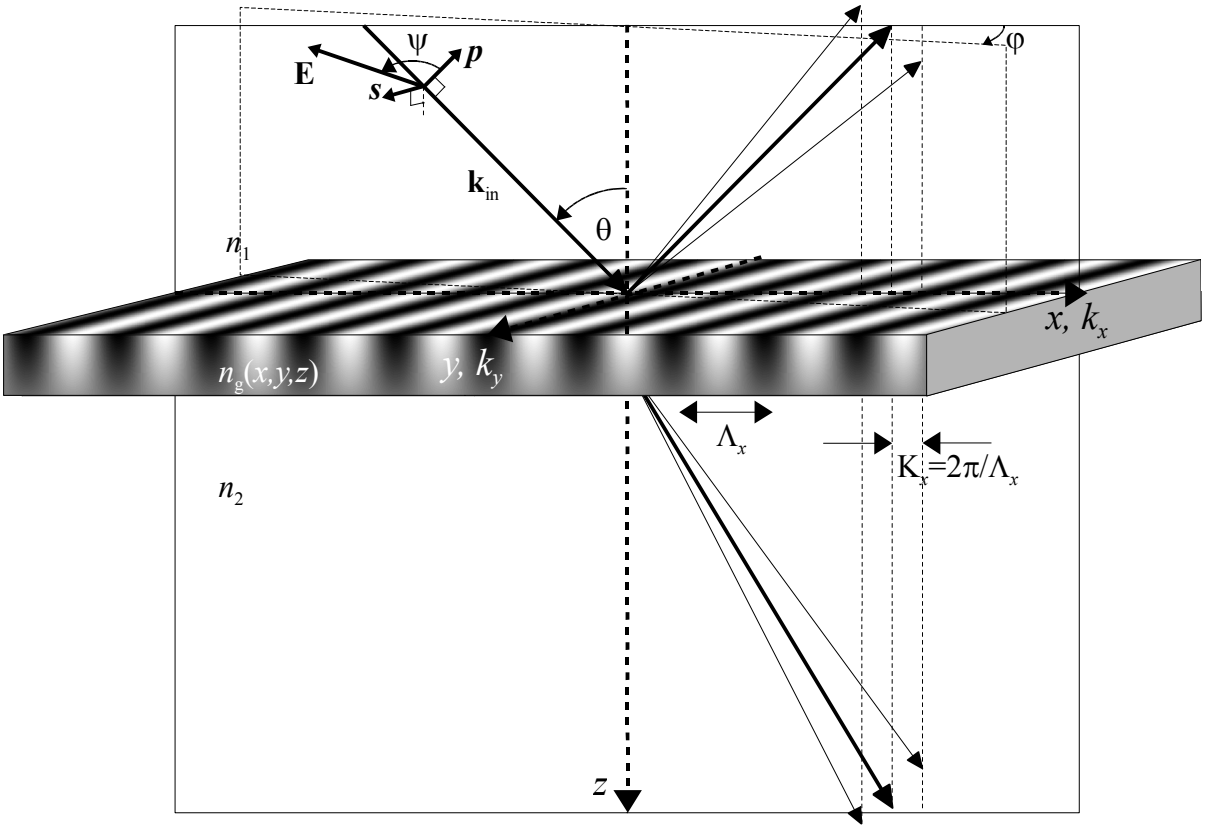


Abbildung 3: Eindimensionales Beugungsgitter mit Einfallsrichtung in der Symmetrieebene (ebene Beugung)

versal elektrische) und TM (transversal magnetische) Polarisation, die hier synonym für s und p verwendet werden. Die bezeichneten Eigenschaften des Feldes beziehen sich in dieser Nomenklatur stets auf die Einfallsebene, nicht aber auf die Gitterfurchen. Diese Konvention scheint sich wenigstens in der jüngsten Vergangenheit für Beugungsprobleme durchgesetzt zu haben. Leider wird aber vor allem in älteren Publikationen die ebenso naheliegende Konvention verwendet, dass sich die Bezeichnungen parallel und senkrecht auf die Seitenwände der Gitterfurchen beziehen, was gerade zu einer Vertauschung von p und s führt. Für senkrechten Einfall ist die Einfallsebene nicht mehr definiert, da Einfallsrichtung und Gitternormale zusammenfallen. In diesem Fall soll die Einfallsebene, wie in Abb. 3 dargestellt, senkrecht zu den Gitterfurchen stehen. In den beiden fundamentalen Polarisationen TE und TM ergibt sich in den verschiedenen Methoden zur Beugungssimulation eine Entkopplung von i.Allg. gekoppelten Gleichungen. Daher werden diese Fälle in der Regel immer zuerst betrachtet, bevor dann eine Theorie auf beliebige Einfallsgeometrien verallgemeinert wird. Ein allgemeiner linearer Polarisationszustand der einfallenden ebenen Welle wird durch den Winkel ψ des Vektors gegenüber der $p-$Achse charakterisiert. Ein allgemeiner elliptischer Polarisationszustand kann dagegen nur durch einen komplexen elektrischen Feldvektor (Jonesvektor, vgl. Kapitel 4.1.1) im $ps-$System charakterisiert werden. Die Spitzen seines Real- und Imaginärteils beschreiben eine elliptische Schraubenbahn in der $ps-$Ebene.

Der Bereich oberhalb des Gitters soll hier als Cover bezeichnet werden. Er ist durch eine homogene Brechzahl n_1 bzw. homogene dielektrische Konstante ε_1, gekennzeichnet. Der Bereich unterhalb des Gitters wird als Substrat bezeichnet, hier ist die ebenfalls homogene Brechzahl n_2 bzw. die dielektrische Konstante ε_2 bestimmend. Der Bereich des Gitters selbst wird im Fall der Liniengitter durch eine periodische Brechzahlverteilung

$$n_g(x,z) = n_g\left(x + m_x\Lambda_x, z\right), m_x \in \mathbb{Z} \tag{11}$$

gekennzeichnet. Bei Kreuzgittern gilt dagegen:

$$n_g(x,y,z) = n_g\left(x + m_x\Lambda_x, y + m_y\Lambda_y, z\right), m_x, m_y \in \mathbb{Z} \tag{12}$$

Hierbei sind Λ_x und Λ_y die Perioden in $x-$ und $y-$Richtung.

Für praktisch relevante Probleme sind nur reelle Werte für n_1 von Bedeutung, da die einfallende ebene Welle sonst absorbiert würde, bevor sie das Gitter erreicht. n_2 und n_g können dagegen auch komplexwertig sein.

Die beiden Koordinatenachsen in der Gitterebene in Abb. 3 sind sowohl mit Ortskoordinaten als auch mit Koordinaten des reziproken Raumes gekennzeichnet. Damit können die wichtigsten Eigenschaften des Beugungsproblems in einer Abbildung veranschaulicht werden. Die Behandlung ein- und zweidimensional periodischer Beugungsgitter kann völlig analog zur Theorie dreidimensional periodischer Strukturen behandelt werden, wie sie in der Festkörperphysik zum Einsatz kommt. Bekanntermaßen liegen die Achsen im direkten und reziproken Raum je

nach Kristallsystem nicht unbedingt übereinander. Lediglich in zwei der sieben Kristallsysteme, dem orthorhombischen und dem kubischen ist dies der Fall [Kop1992]. Hier stehen die Achsen der periodischen Fortsetzung senkrecht zueinander. Auch bei der zweidimensionalen periodischen Fortsetzung brauchen im allgemeinen Fall die beiden Achsen der periodischen Fortsetzung nicht senkrecht zueinander zu stehen. Diese Fälle sollen jedoch nicht betrachtet werden. Auf die praktische Bedeutung der Simulation von Beugung an Kreuzgittern in schiefwinkligen Koordinatensystemen, die von Li [Li1997] formuliert wurde, wird in Kapitel 3.3.2 eingegangen.

In Abb. 3 sind neben dem Wellenzahlvektor der einfallenden ebenen Welle auch Beugungsordnungen eingezeichnet. Wegen der Übersichtlichkeit sind jeweils nur die 0. Ordnung sowie die ± 1. Ordnungen des reflektierten und transmittierten Lichtwellenfeldes dargestellt. Die 0. Ordnungen entsprechen den Richtungen der reinen Reflexion bzw. Brechung, die auch ohne periodische Brechzahlverteilung im Gitterbereich vorhanden wären. Durch die periodische Brechzahlverteilungen treten die höheren Beugungsordnungen in Erscheinung. Die Richtungen der Beugungsordnungen sind gegeben durch die Fraunhofer-Gittergleichung, die für eindimensionale Gitter lautet:

$$k_{x,M_x} = k_{x,in} + M_x K_x, \; M_x \in \mathbb{Z} \tag{13a}$$

$$\mathrm{Re}\,(n_{1/2})\sin(\theta_{r/t,M_x}) = \mathrm{Re}\,(n_1)\sin(\theta) + M_x \frac{\lambda}{\Lambda_x} \tag{13b}$$

Hierbei bezeichnet $n_{1/2}$ die komplexe Brechzahl in Cover bzw. Substrat und $\theta_{r/t,M_x}$ den Polarwinkel derjenigen Richtung, unter der sich die M_x–te Beugungsordnung des reflektierten bzw. transmittierten Beugungswellenfeldes ausbreitet. $K_x = 2\pi/\Lambda_x$ heißt eindimensionaler Gittervektor. Beide Darstellungen unterscheiden sich nur durch einen Faktor $k_0 = 2\pi/\lambda$, also um den Betrag des Vakuum-Wellenvektors.

Die Gittergleichung lässt sich aus rein geometrischen Überlegungen gewinnen, was in jedem Optik-Lehrbuch zu finden ist und hier deswegen vorausgesetzt wird. Von jedem Punkt der Gitter-Oberfläche werden Huygens'sche Elementarwellen emittiert. Es werden nun diejenigen Richtungen gesucht, unter denen die Welle eines beliebigen Punktes innerhalb einer Periode sowie der um eine Gitterperiode verschobenen Punkte gleichphasig schwingen und somit konstruktiv interferieren können. Das Ergebnis dieser Überlegung ist die Gittergleichung. Die Laue-Gleichungen der Röntgenbeugung entsprechen einer Erweiterung derselben auf 3D periodische Strukturen.

Man findet die Gittergleichung aber auch in der rigorosen Lösung des Beugungsproblems wieder, vgl. Kapitel 3.1. Wegen der periodischen Brechzahlverteilung im Medium folgt aus dem Floquet-Theorem [Moh1995a], dass die Lösung in der Gitterregion sich als Summe aus ebenen Wellen mit den durch Gl. (13a) gegebenen Wellenvektoren schreiben lässt. Die Koeffizienten dieser ebenen Wellen hängen für allgemeine Gitterprofile von z ab. Bekanntermaßen sind die tangentialen Komponenten des Wellenzahlvektors beim Durchgang durch eine

Grenzfläche stetig [Leh1990]. Damit gibt Gl. (13a) auch die zulässigen Tangentialkomponenten der Wellenzahlvektoren für das Feld in Cover und Substrat an. Der Index M_x läuft hierbei von $-\infty \ldots \infty$, so dass eine unendliche Anzahl von Beugungsordnungen vorliegt.

Es sind jedoch nur diejenigen Beugungsordnungen *propagierend*, für die alle Komponenten des Wellenzahlvektors reellwertig sind. Wird die $z-$Kompontente des Wellenzahlvektors komplexwertig, so heißen die Beugungsordnungen quergedämpft oder *evaneszent*. Wegen der erwähnten Tatsache, dass die Tangentialkompenten des Wellenzahlvektors stetig sind, kann jeweils nur die $z-$Komponente komplexwertig sein. Bei einer reellen Brechzahl ist sie rein imaginär, während sie für komplexe Brechzahlen i.Allg. echt komplexe Werte annimmt. In jedem Fall muss vereinbart werden, dass das Vorzeichen des Imaginärteils so gewählt wird, dass keine unphysikalischen, exponentiell anwachsenden Wellen dargestellt werden.

In einem Cover oder Substrat, das mit einem Medium mit reeller Brechzahl n ausgefüllt ist, kann also folgende Bedingung für die Propagationsfähigkeit ebener Wellen formuliert werden:

$$k_x^2 + k_y^2 < (nk_0)^2 \tag{14}$$

Die Gittergleichung lässt sich in der Wellenvektordarstellung sofort auf zweidimensional periodische Gitter (Kreuzgitter) erweitern. Die Umformung in Einfallswinkel folgt mit der Darstellung eines Wellenzahlvektors, genauer seines Realteils, in Kugelkoordinaten $\mathrm{Re}\,(\mathbf{k}) = k_0 \cdot \mathrm{Re}(n) \cdot [\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta]^\top$:

$$\begin{bmatrix} k_{x,[M_x,M_y]} \\ k_{y,[M_x,M_y]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{x,in} + M_x K_x \\ k_{y,in} + M_y K_y \end{bmatrix}, \; M_x, M_y \in \mathbb{Z} \tag{15a}$$

$$\begin{bmatrix} \mathrm{Re}\,(n_{1/2})\sin(\theta_{r/t,[M_x,M_y]})\cos(\varphi_{r/t,[M_x,M_y]}) \\ \mathrm{Re}\,(n_{1/2})\sin(\theta_{r/t,[M_x,M_y]})\sin(\varphi_{r/t,[M_x,M_y]}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{Re}\,(n_1)\sin(\theta)\cos(\varphi) + M_x\frac{\lambda}{\Lambda_x} \\ \mathrm{Re}\,(n_1)\sin(\theta)\sin(\varphi) + M_y\frac{\lambda}{\Lambda_y} \end{bmatrix} \tag{15b}$$

Die Darstellung in Winkelkoordinaten ist zwar ein wenig unübersichtlich, macht aber sofort deutlich, dass jede Beugungsordnung eine eigene Richtung und damit zusammen mit der Gitternormalen eine eigene Beugungsebene analog zur Einfallsebene definiert. Somit ist für jede Beugungsordnung ein eigenes $ps-$Koordinatensystem zu definieren. Für die Umrechnung zwischen einem ortsfesten kartesischen Koordinatensystem und dem jeweiligen $ps-$Koordinatensystem werden die durch Gl. (15b) definierten Winkel benötigt. Dies wird in Anhang wieder aufgegriffen.

Zum Abschluss dieser Übersicht grundlegender Eigenschaften von periodischen Beugungsgittern sollen die bereits erwähnten Begriffe der ebenen und konischen Beugung veranschaulicht werden. Wird in Gl. (15b) $\Lambda_y \to \infty$ und $\varphi = 0$ gesetzt, so ergibt sich der in Abb. 3 dargestellte Fall eines Liniengitters mit Einfallsrichtung in der Ebene senkrecht zu den Gitterfurchen. Dieser wurde oben als ebene Beugung bezeichnet. Die zweite Zeile von Gl. (15b) fällt weg und der Index M_y verliert seine Bedeutung und kann in der ersten Zeile unterdrückt

werden. Aus der ersten Zeile ist ersichtlich, dass $\varphi_{r/t,M_x} = 0 \; \forall \; M_x$ eine zulässige Wahl ist. Damit wird klar, dass alle Beugungsebenen mit der Einfallsebene zusammenfallen.

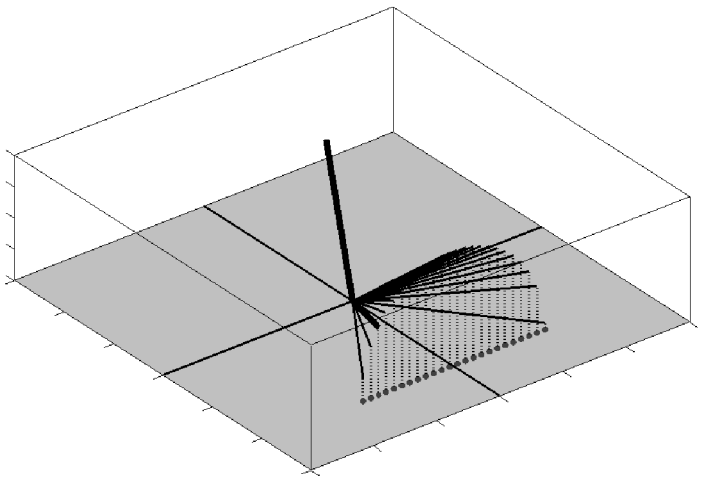
Setzt man dagegen in Gl. (15b) $\Lambda_y \to \infty$ aber $\varphi \neq 0$, so fällt die zweite Zeile nicht weg. Es bleiben zwei Gleichungen für die beiden Unbekannten $\theta_{r/t,M_x}, \varphi_{r/t,M_x}$ übrig. Damit wird klar, dass die Beugungsordnungen nicht mehr in einer Ebene liegen. Die Wellenzahlvektoren von Beugungsordnungen bei Liniengittern mit einem Azimutwinkel der Einfallrichtung $\varphi \neq 0$ sowie bei Kreuzgittern liegen auf Kegelmänteln, die nur für den Fall $\varphi = 0$ und $M_x = 0 \; \vee \; M_y = 0$ zu Ebenen entarten. Daher wird dieser allgemeine Fall als konische Beugung bezeichnet.

Anstatt diese Aussage rechnerisch herzuleiten, wird der Begriff der konischen Beugung anhand zweier Bilder, Abb. 4 (a) und (b); veranschaulicht. Teilbild (a) zeigt die Wellenzahlvektoren der einfallenden ebenen Welle sowie der reflektierten Beugungsordnungen eines stark beugenden Liniengitters, d.h. es existiert eine nennenswerte Anzahl propagierender Beugungsordnungen. Die Einfallsrichtung ist durch den Polar- und Azimutwinkel $\theta = 70°$ und $\varphi = 60°$ gegeben. Die Punkte in der $k_x k_y$–Ebene symbolisieren die durch Gl. (13a) gegebenen k_x–Werte. Sie sind jedoch um den konstanten Betrag $k_y = k_0 \sin\theta \sin\varphi$ gegenüber der k_x–Achse verschoben, da bereits die einfallende Welle eine y–Komponente $\neq 0$ aufweist. Diese bleibt als Lateralkomponente des Wellenzahlvektors erhalten. Die Punkte legen also zwei der drei Komponenten der gebeugten Wellenzahlvektoren fest. Die z–Komponente ist durch die beiden anderen Komponenten sowie den Betrag des Wellenzahlvektors $k_0 = 2\pi n/\lambda$ eindeutig festgelegt.

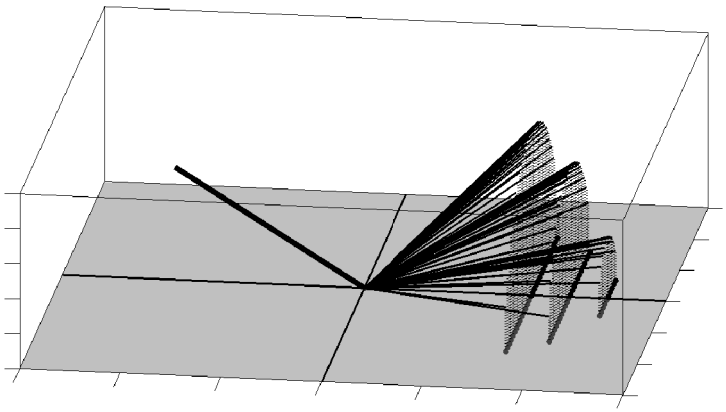
Anschaulich gesprochen wird der Fußpunkt der Wellenzahlvektoren der Beugungsordnungen im Ursprung festgehalten, während die Spitze bei vorgegebener Länge sich auf einer Kugel bewegen kann. Die feststehenden Lateralkomponenten definieren diskrete Punkte innerhalb einer Ebene, die mit der Kugel geschnitten eine diskrete Punktmenge auf einer Kreisbahn ergibt. Damit liegen die Vektorspitzen auf einer Kreisbahn und die Vektoren selbst auf einem Kegelmantel.

Teilbild (b) zeigt dieselbe Situation für ein Kreuzgitter. Hier liegen alle Beugungsordnungen mit festgehaltenem Index M_y und Laufindex M_x jeweils auf einem Kegelmantel. Insgesamt bilden die Beugungsordnungen eine Schar von Kegelmänteln mit veränderlichem Öffnungswinkel. Existiert ein M_y, so dass die zugehörige y–Komponente des Wellenzahlvektors verschwindet, dann entartet einer der Kegel zur yz–Ebene. In Abb. 4 (b) wurden die Beugungsordnungen in k_x–Richtung wesentlich dichter gewählt als in k_y–Richtung. Dies kann ganz einfach durch eine 20 mal größere Gitterperiode in x–Richtung erreicht werden. Dadurch fasst der Betrachter gedanklich die Beugungsordnungen in Kegelmänteln zusammen, die sich zur k_x–Achse hin öffnen. Diese Auffassung wird noch dadurch gestärkt, dass hier exemplarisch drei Werte für den hier als Scharparameter aufgefassten Index M_y gezeigt sind.

Ebenso richtig ist jedoch die umgekehrte Vorstellung, M_y als Laufindex zu wählen und M_x als Scharparameter anzusehen. Wählt man die Beugungsordnungen in k_x−Richtung dichter und zeichnet nur ausgewählte Werte von M_x, so ergibt sich für den Betrachter eine Schar von Kegelmänteln, die sich zur k_y−Achse hin öffnen. Betrachtet man dagegen ein typisches Gitter mit ähnlichen oder identischen Gitterperioden in x− und y−Richtung und stellt man hierfür alle propagierenden Beugungsordnungen dar, so erhält man eine unübersichtliche Ansammlung von Richtungen, die durch den Schnitt beider Kegelscharen gegeben ist.



(a)



(b)

Abbildung 4: Veranschaulichung von konischer Beugung. (a) zeigt die Wellenzahlvektoren der reflektierten Beugungsordnungnen eines Liniengitters mit Azimutwinkel der Einfallsrichtung $\varphi = 60°$, *(b) die eines Kreuzgitters in derselben Konfiguration.*

2.4 Numerische Methoden zur rigorosen Lösung des Beugungsproblems

Es existiert eine Vielzahl verschiedener Methoden, um Gitterbeugung rigoros zu simulieren. Es soll hier weder versucht werden, eine umfassende Darstellung aller existierenden Methoden zu liefern, noch eine Bewertung der Methoden nach Eignung, Einsatzgebieten usw. zu geben. Eine vergleichende Bewertung der Methoden ist aus zwei Gründen zum Scheitern verurteilt. Zum einen ist der Nutzen einer Methode immer stark von der verfolgten Anwendung abhängig, zum anderen scheinen auch die wenigen bekannten Versuche einer solchen Bewertung immer stark von einseitigem Wissen und Vorlieben des jeweiligen Verfassers geprägt. Ein fairer Vergleich einiger weniger Methoden ist wohl nur möglich, wenn sie alle für ein eingeschränktes Anwendungsgebiet entweder ausdrücklich entwickelt oder speziell angepasst wurden, und wenn der Vergleichende ein hohes Maß an Erfahrung in allen verglichenen Methoden hat.

Mehr oder weniger vollständige Zusammenstellungen verschiedener Methoden sind bei mehreren Autoren zu finden. Kleemann [Kle2001] stellt in seiner Dissertation eine sehr umfassende Auflistung von bekannten, aber auch weniger bekannten Methoden sowie eine Klassifizierung derselben vor. Loewen und Popov [Loe1997] geben in ihrem Buch über Beugungsgitter und deren Anwendungen einen guten Überblick über die gängigsten Methoden sowie ebenfalls eine Klassifizierung. Maystre [May1984] gibt eine Einführung in ausgewählte Methoden, wobei auch der theoretische Hintergrund dargestellt wird. Popov und Nevière [Pop2003] geben in ihrem Buch über die Differentielle Methode ebenfalls eine kurze Übersicht über gängige Methoden. Hafner [Haf1999] dagegen beleuchtet die Thematik aus einem anderen Blickwinkel, da bei ihm nicht periodische Beugungsgitter im Mittelpunkt des Interesses stehen.

Im folgenden Abschnitt werden also lediglich einige oft verwendete Methoden aufgezählt, die als Alternativen zur hier verwendeten Rigorous Coupled-Wave Analysis (RCWA) zu sehen sind. Ziel ist eine grobe Einordnung der RCWA in den Kontext alternativer Verfahren, wodurch letztlich die Relevanz der vorgestellten Arbeiten untermauert werden soll. Kapitel 3 versteht sich als Beitrag zur Verbesserung von aktuell verwendeten Formulierungen der RCWA, wodurch in der Praxis eine erhebliche Einsparung von Rechenzeit erzielt werden kann. Daher soll die Bedeutung und Berechtigung der RCWA hier im Vergleich mit alternativen Methoden wenigstens auf der Basis einer grundlegenden Kenntnis anderer Verfahren herausgestellt werden. Die Vorstellung alternativer Methoden mündet schließlich in eine Darstellung von RCWA und Differentieller Methode. Letztere kann als ein der RCWA übergeordnetes Verfahren angesehen werden.

2.4.1 Einige gängige Methoden zur rigorosen Simulation von Lichtbeugung

a) Integralgleichungsmethode

Die historisch gesehen älteste Methode zur Lösung des Beugungsproblems stellt die *Integralgleichungsmethode* dar. Eine gute Einführung in die klassische Integralgleichungsmethode liefert das bekannte Buch von Petit [Pet1980], hierin insbesondere der Beitrag von Maystre [May1980]. Wie in Kapitel 2.1.2 angedeutet wurde, stellen Materialgrenzflächen und deren Behandlung den entscheidenden Schritt zur numerischen Lösung des Beugungsproblems dar, da hier jeweils einige der elektrischen und magnetischen Feldkomponenten unstetig sind, und damit die Ortsableitungen nicht existieren.

Im Gegensatz zu den übrigen Methoden behandelt die Integralgleichungsmethode das Problem mithilfe der Distributionstheorie. Die Differentialoperatoren werden entsprechend der Distributionstheorie erweitert und die Felder, also die Unbekannten, werden als Distributionen aufgefasst. Da Distributionen per definitionem unendlich oft differenzierbar sind, existieren die Ortsableitungen, die in den Maxwell-Gleichungen auftauchen, im gesamten Raum. Der Sprung der Felder an der Materialgrenzfläche wird formal durch einen Oberflächenstrom beschrieben, der als impulsartige Inhomogenität in der Helmholtz-Gleichung auftritt. Das Beugungsproblem wird schließlich auf eine Integralgleichung auf der Materialgrenzfläche reduziert, deren Unbekannte der Oberflächenstrom ist. Aus diesem kann mittels eines Integralkerns das Feld im gesamten Raum berechnet werden.

Die Stärke der Integralgleichungsmethode liegt darin, dass auch Gitter mit stark leitfähigen Materialien und hohen Aspektverhältnissen der Gitterfurchen behandelt werden können, die bei anderen Methoden zu numerischen Problemen führen. Allerdings existieren keine Formulierungen für konische Beugung [Kle2001] und die Anwendung der Methode erfordert einen hohes Maß an numerischen Kenntnissen und führt zu komplexen Programm-Codes [Loe1997].

Eine Vielzahl von Varianten, auch für die Behandlung nicht periodischer Strukturen, kann hier vereinfachend unter dem Stichwort der Integralgleichungsmethode mit abgehandelt werden. Eine vergleichsweise aktuelle Übersicht liefert Prather [Pra1997]. Der Begriff Randelementmethode, engl. Boundary Element Method (BEM siehe auch [Pra1997]) soll hier noch eigens erwähnt werden. Die BEM stellt eine Kombination von Integralgleichungsmethode und Finite-Elemente-Methode dar.

b) FDTD / FDM

Eine weit verbreitete Methode ist die *Finite Difference Time Domain* (FDTD) oder *Finite-Differenzen-Methode* (FDM). Sie wird wegen ihrer langjährigen und breiten Anwendung in anerkannten Lehrbücher behandelt, allen voran in dem bekannten Buch von Taflove und Hagness [Taf2000], aber z.B. auch von Hafner [Haf1999]. Es handelt sich hierbei um eine

sehr einfache Methode, die die Maxwell-Gleichungen auf einem rechtwinkligen Raster in Raum und Zeit diskretisiert. Differentialoperatoren, die ähnlich wie in der Bildverarbeitung in Form von Faltungsmasken vorliegen, verknüpfen die Felder und ihre Ableitungen miteinander und erzeugen so algebraische Gleichungen aus den ursprünglich partiellen Differentialgleichungen. Diese können dann mit vorgegebenen Anfangs- und Randbedingungen gelöst werden. Durch die Wahl unterschiedlicher Randbedingungen eignet sich die Methode sowohl für periodische als auch für nicht periodische Strukturen. Nicht periodische Strukturen werden durch absorbierende Randbereiche, Perfectly Matched Layers (PMLs), berücksichtigt, die Reflexionen von den Rändern des Simulationsvolumens vermeiden. Wegen der inhärenten Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit sind die hier betrachteten stationären Beugungsprobleme weniger im Fokus der FDM. Neben klassischen Anwendungsgebieten wie Modellierung von Antennen [Taf2000] wird die FDM in der jüngeren Vergangenheit vielfach beim Design von 2D photonischen Kristallen eingesetzt [Qiu2000].

c) FEM

Gerade in letzter Zeit wird auch die *Finite-Elemente-Methode* (FEM) verstärkt für die Simulation von Gitterbeugung eingesetzt. Hierbei handelt es sich um eine weit verbreitete Methode, um partielle Differentialgleichungen verschiedenster Art zu lösen. Im Fall des stationären Beugungsproblems werden die zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen zugrunde gelegt. Wie bei der FDM können je nach Wahl der Randbedingungungen periodische oder nicht periodische Strukturen untersucht werden. Die Gleichungen werden ebenfalls im Raum diskretisiert, allerdings nicht auf einem rechtwinkligen Raster, sondern üblicherweise mit Netzen aus Dreiecken oder Tetraedern mit adaptiver Größe, je nachdem ob 2D oder 3D Probleme betrachtet werden. Die Elementgröße orientiert sich an der erwarteten Variation der Simulationsergebnisse und wird daher beispielsweise in der Nähe von Ecken oder Grenzflächen kleiner gewählt als mitten in einem homogenen Bereich. Die gesuchten Felder werden in jeder Zelle mit Ansatzfunktionen, z.B. Polynomen, interpoliert. Die Stützwerte werden so bestimmt, dass die Felder an den Zellgrenzen stetig sind bzw. falls diese mit Materialgrenzen zusammenfallen, den aus den Maxwell-Gleichungen bekannten Randbedingung genügen. Speziell für die Beugung an periodischen Gittern entwickelte FEM-Formulierungen stellen eine häufig verwendete Alternative zur RCWA dar [Els1998][Bur2005].

Sowohl die FDM als auch die FEM liefern als Ergebnis zunächst das Nahfeld im Simulationsvolumen, nicht aber die Amplituden der Planwellen, die bei einem periodischen Beugungsgitter vom beugenden Objekt weg propagieren. Oftmals ist man aber gerade an diesen Amplituden der Beugungsordnungen im jeweiligen $ps-$Koordinatensystem interessiert. Die RCWA liefert diese unmittelbar als Ergebnis. Will man aber eine der hier beschriebenen Methoden verwenden, so muss das Planwellenspektrum in einem nachgeschalteten Prozess berechnet werden. Dazu wird das Feld in einer Ebene unmittelbar oberhalb des beugenden Objekts fein abgetastet und z.B. mittels der FFT in eine Fourier-Reihe entwickelt. Da in den Halbräumen oberhalb und unterhalb der beugenden Struktur entkoppelte Helmholtz-Glei-

chungen für die einzelnen Feldkomponenten gelten, ist dieser Prozess für jede Komponente im kartesischen Koordinatensystem identisch zu der skalaren Planwellenzerlegung, wie sie in der digitialen Holographie unter dem Stichwort Wellenfrontpropagation verwendet wird [Goo1968]. Die Transformation ins jeweilige ps–Koordinatensystem ist dann eine einfache Projektion. Die gesamte Prozedur wird ausführlich in [Ker2007a] beschrieben.

Alternativ kann eine spezielle Formulierung der FEM gewählt werden, die nur innerhalb der beugenden Struktur eine Interpolation mittels Ansatzfunktionen zur Beschreibung der Felder heranzieht, außerhalb aber unmittelbar eine Planwellenzerlegung ansetzt. Durch eine spezielle Wahl der Ansatzfunktionen können beim Abgleichen der Randbedingungen direkt die Amplituden der Beugungsordnungen berechnet werden. Ein Beispiel einer solchen Formulierung stellen Delort und Maystre vor [Del1993].

d) Multipolmethoden

Der Darstellung von Hafner [Haf1999] folgend sollen hier eine Vielzahl untereinander verwandter Methoden unter dem Stichwort *Multipolmethoden* zusammengefasst werden. Ihnen ist gemeinsam, dass fiktive statische oder zeitlich veränderliche Ladungen, also elektrische Monopole oder aber Multipole höherer Ordnung im Simulationsvolumen platziert werden müssen. Die Platzierung der Multipole in einem gewissen Abstand von Materialgrenzflächen, um Singularitäten auf der Grenzfläche zu vermeiden, stellt den entscheidenden Punkt bei der Anwendung der Methoden dar. Die Methoden sind damit zwar flexibel und auf eine Vielzahl verschiedenartiger Probleme anwendbar, erfordern aber große Erfahrung für die erfolgreiche Anwendung [Haf1999].

e) Koordinatentransformationsethoden

Eine weitere Familie von Methoden sind die *Koordinatentransformationsmethoden*. Zwei prominente Vertreter hieraus sind die Chandezon oder C Methode [Li1999] sowie die Methode der konformen Abbildungen [Dep1989]. Erstere bildet eine modulierte Gitteroberfläche durch eine Substitution der z–Koordinate auf eine ebene Grenzfläche ab. Dies führt letztlich auf ein Eigenwertproblem und damit zu einem der RCWA sehr ähnlichen Algorithmus. Letztere bildet die Querschnittsfläche in der xz–Ebene unterhalb der modulierten Oberfläche durch eine konforme Abbildung auf die unter Halbebene ab. Die C Methode ist mit bestehenden Formulierungen für Kreuzgitter, beliebige Einfallsgeometrie und Schichtstapel ähnlich flexibel einsetzbar wie die RCWA. Die Methode der konformen Abbildungen ist dagegen nur für ideal leitende sowie endlich aber stark leitfähige Materialien und Liniengitter formuliert.

f) Modale Methode

Abschließend soll hier die klassische *Modale Methode* erwähnt werden, die wegen ihrer engen Verwandtschaft zur RCWA oft mit dieser unter dem Begriff der Modalen Methoden zusammengefasst wird. Die Grundlage der Modalen Methode in der heute verwendeten Form wurde durch drei Artikel von Botten et al. [Bot1981a][Bot1981b][Bot1981c] gelegt, die die

Fälle dielektrischer, endlich leitfähiger und ideal leitender Strukturen abdecken. Durch die Erweiterung auf konische Beugung und auf Schichtstapel aus binären Gittern zur Modellierung beliebiger Profilformen mittels Treppenstufen-Näherung durch Li [Li1993a][Li1993b] hat sie eine wesentliche Erweiterung des Anwendungsspektrums erfahren.

Die klassische Modale Methode beschränkt sich im Gegensatz zur RCWA auf Liniengitter, die aus homogenen Materialien zusammengesetzt sind. Sie betrachtet zunächst in einem binären Gitter, also einem Gitter, das nur aus Gräben oder Stegen mit rechteckigem Querschnitt zusammengesetzt sind, jeden homogenen Bereich als Wellenleiter. Je nach Einfallgeometrie und betrachteter Polarisation ergeben sich für jeden dieser Wellenleiter aus den Maxwell-Gleichungen unterschiedliche gewöhnliche Differentialgleichungen entlang des Wellenleiterquerschnitts, deren Lösungen Wellenleitermoden heißen. Sie sind die Eigenfunktionen des jeweiligen Differentialoperators. Es handelt sich schlichtweg um harmonische Funktionen. An den Materialgrenzflächen müssen natürlich die Randbedingungen gemäß der Maxwell-Gleichungen erfüllt sein. Somit ergeben sich für eine gesamte Gitterperiode Eigenfunktionen, die aus harmonischen Funktionen zusammengesetzt sind. Die Eigenwerte können als effektive Brechungsindizes für die jeweilige Mode identifiziert werden.

Für eindimensional periodische Gitter aus homogenen Materialien kann die RCWA als numerischer Lösungsansatz für die Modale Methode mittels Fourier-Entwicklung aufgefasst werden. Daher wird die RCWA auch Fourier-modale Methode genannt. Der Mehrwert der RCWA gegenüber der klassischen Modalen Methode besteht bei Liniengittern in der möglichen Behandlung von Gradientenindex-Profilen, für die sie auch ursprünglich entwickelt wurde. Bei Gradientenindex-Profilen sind die Koeffizienten der DGl im Querschnitt nicht mehr konstant, so dass keine geschlossene Lösung in Form von harmonischen Funktionen mehr möglich ist. Daher ist hier der Fourier-Ansatz erforderlich. Zudem ist hierdurch die RCWA im Gegensatz zur klassischen Modalen Methode vergleichsweise leicht auf beliebige Kreuzgitterstrukturen erweiterbar. Die damit verbundenen Konvergenzprobleme werden in Kapitel 3 ausführlich beschrieben. Wie die RCWA hat auch die klassische Modale Methode mit Konvergenzproblemen bei sehr tiefen und metallischen Strukturen zu kämpfen [Loe1997].

2.4.2 Die Differentielle Methode und die RCWA

In dieser Arbeit wird ausschließlich die RCWA verwendet. Sie ist gegenüber der Differentiellen Methode wesentlich stärker verbreitet. Durch eine Neuformulierung der Differentiellen Methode durch Popov und Nevière [Pop2001][Pop2003] hat diese in letzter Zeit große Aufmerksamkeit auf sich gezogen. Für ausgewählte Beispiele, wie etwa ein Aluminiumgitter mit sinusförmig modulierter Oberfläche, finden Popov et al. eine gegenüber der RCWA erheblich verbesserte Konvergenz. Als Konvergenz soll hier die Annäherung von Simulationsergebnissen an einen konstanten Wert in Abhängigkeit der gewählten Zahl von Fourier-Koeffizienten oder Moden bezeichnet werden. Die konsequent richtige Behandlung der Randbedingun-

gen in Popovs und Nevières Formulierung der Differentiellen Methode wird in dieser Arbeit auf die RCWA übertragen.

Daher werden hier beide Methoden zunächst gemeinsam dargestellt. Dies bedeutet aber *nicht*, dass hier alle Feinheiten der Differentiellen Methode wiedergegeben werden können oder sollen. Die Formulierung des grundsätzlichen Gleichungssystems ist nicht gleichbedeutend mit einer erschöpfenden Darstellung der Theorie. Es geht lediglich darum, die Unterschiede herauszuarbeiten, die später zu unterschiedlichen Wahlfreiheiten der Normalenvektorfelder führen wird, vgl. Kapitel 3. Die Differentielle Methode wird aktuell in der Arbeitsgruppe HMS am ITO ebenfalls untersucht, vorwiegend von Stephan Rafler und Matthias Petschow [Raf2008b][Pet2008].

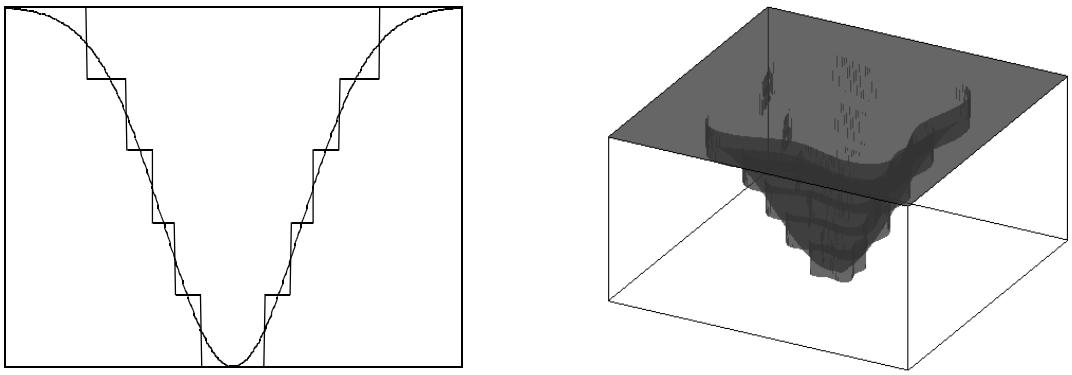
Beide Methoden, Differentielle Methode und RCWA, sind gekennzeichnet durch eine Fourier-Reihenentwicklung der dielektrischen Konstanten sowie der unbekannten Felder in der Struktur. Aus den Maxwell-Gleichungen ergeben sich je nach betrachteter Einfallsgeometrie und Polarisation unterschiedliche partielle DGln, die jeweils zwei Ortsableitungen in jeder Raumrichtung enthalten. Durch die Fourier-Entwicklung in lateraler Richtung werden die Ableitungen nach x und y gemäß Abb. 3 eliminiert, da eine Ableitung im Fourier-Raum zu einer Multiplikation wird. Lediglich die Ableitung in $z-$Richtung bleibt erhalten. In der Behandlung dieser Ableitung unterscheiden sich beide Methoden. Die Differentielle Methode lässt diese Ableitung bestehen, was zu einem gekoppelten System gewöhnlichen DGln für die Fourier-Koeffizienten der Felder führt, das mittels numerischer Integration gelöst wird. Die RCWA dagegen wählt als Modellierung der Strukturen eine Treppenstufen-Näherung, die ein Gitter in lauter Einzelschichten aus binären Gittern unterteilt. Damit wird die Ableitung in $z-$Richtung gleich null und die DGln reduzieren sich auf ein Eigenwertproblem.

Abb. 5 veranschaulicht die Treppenstufennäherung für 1D periodische und 2D periodische Gitter. Durch die Wahl von senkrechten Seitenwänden ergeben sich Schichten, in denen die dielektrische Konstante nicht von z abhängt. Die dielektrische Konstante ist in jeder Schicht eine abschnittsweise konstante Funktion von x und y. Dies ist in allen in dieser Arbeit betrachteten Anwendungen der Fall. Es sei hier aber nochmals darauf hingewiesen, dass jede beliebige Variation in lateraler Richtung zulässig ist, solange keine $z-$Abhängigkeit vorliegt. Dies ist ja gerade der Mehrwert der RCWA gegenüber der klassischen Modalen Methode und war auch Motivation für deren Entwicklung. Die ursprünglich verfolgte Anwendung war die Beugung an dicken Hologrammen, also Fotoplatten mit lokal sinusförmig modulierter Brechzahl [Bur1966].

Eine kurze Übersicht über die historische Entwicklung beider Methoden soll dieses Kapitel über Lichtbeugung abschließen. In Kapitel 3 wird dann wie erwähnt die RCWA unter Berücksichtigung ihrer Verwandtschaft zur Differentiellen Methode genau beschrieben, um schließlich die innerhalb dieser Arbeit erzielten Verbesserungen der Methode vorzustellen.

Die Differentielle Methode wurde erstmals 1974 von Nevière et al. publiziert [Nev1974]. Eine ausführliche Darstellung dieser ursprüngliche Formulierung ist auch in Petits Buch [Pet1980] im Kapitel von Vincent [Vin1980] zu finden. Wie bereits erwähnt haben Popov, Nevière und z.T. weitere Co-Autoren Ende der 1990er Jahre eine Neuformulierung der Methode entwickelt, die auf den Li'schen Regeln [Li1996a] basiert. Die Grundidee dieser Neuformulierung wird in Kapitel 3 ausführlich erläutert und wird dort in die RCWA übernommen. Exemplarisch seien hier nur zwei Publikationen angegeben: Ein Artikel [Pop2001] sowie eine Monographie [Pop2003], die beide die Ergebnisse zahlreicher vorangegangener Veröffentlichungen der Autoren zusammenfassen. Ausgewählte dieser früheren Artikel werden im weiteren Lauf dieser Arbeit noch erwähnt.

Die Li'schen Regeln besagen sehr anschaulich gesprochen, dass man ein Beugungsproblem mit einer auf Fourier-Entwicklung basierten Methode am besten mit derjenigen Feldgröße **D** oder **E** als Unbekannter löst, die an einer betrachteten Grenzfläche stetig ist. Gleichzeitige Unstetigkeiten von Feldgrößen und der dielektrischen Konstanten, die an Materialgrenzflächen natürlich unstetig ist, führen dazu, dass die Fourier-Reihen an der Grenzfläche nicht und in einer Umgebung derselben nicht gleichmäßig konvergieren. Dies ergibt insgesamt ein verschlechtertes Konvergenzverhalten. Popov und Nevière ziehen hieraus die Konsequenz, dass eine Struktur zunächst im Ortsraum nicht nur durch die räumliche Verteilung der dielektrischen Konstanten sondern zusätzlich durch ein Normalenvektorfeld (NV-Feld) charakterisiert werden muss. Mittels dieses Feldes erfolgt lokal im Ortsraum eine Zerlegung der Felder in Normal- und Tangentialkomponenten. Die Information über die lokale Orientierung der Grenzflächen wird durch Fourier-Entwicklung des NV-Feldes in den Fourier-Raum transportiert. Hierzu muss das Feld in den gesamten Raum abseits der Grenzflächen fortgesetzt werden. Diese Aufgabe, das NV-Feld möglichst geeignet zu ergänzen, stellt den kritischen Punkt der neu formulierten Methode dar. Er wird für die auf die RCWA übertragene Version der Theorie in Kapitel 3 untersucht.



(a) (b)

Abbildung 5: Treppenstufen-Näherung in der RCWA. (a) zeigt eine Elementarzelle eines 1D periodischen Gitters, (b) eines 2D periodischen Gitters. Entscheidend sind in jeder der jeweils fünf gezeigten Schichten die senkrechten Wände.

Die RCWA ist unter verschiedenen Namen bekannt. Eine frühe Version wurde BKK Methode nach den Autoren früher Arbeiten Burckhardt, Kaspar und Knop genannt. Manchmal liest man auch einfach die Bezeichnung Methode von Moharam und Gaylord nach den Autoren neuerer Formulierungen. Der von eben diesen Autoren eingeführte Begriff Rigorous Coupled-Wave Analysis (RCWA) taucht auch in abgewandelter Form, etwa Rigorous Coupled-Wave Theory (RCWT) oder einfach als RCW Methode auf. Ähnlich ist auch der Begriff Coupled-Wave Method. Ein anderer Name, der die Verwandtschaft zur klassischen Modalen Methode herausstreicht, ist Fourier-modale Methode. In dieser Arbeit wird der Name RCWA bevorzugt, weil er in dem betrachteten Anwendungsgebiet der Scatterometrie am weitesten verbreitet scheint.

Die erste bekannte Formulierung der RCWA geht auf Burckhardt [Bur1966] zurück. Hier wird vor der Hintergrund der Anwendung in der Holografie eine eindimensional sinusförmig modulierte Brechzahl in einer dicken Schicht für den Fall ebener Beugung betrachtet. Trotz des gewählten Beispiels des Sinusgitters ist die dargestellte Theorie im Gegensatz zu vorangegangenen Arbeiten nicht prinzipiell auf diesen Spezialfall beschränkt. Weitere frühe Arbeiten sind die Erweiterung auf komplexe Brechzahlen und explizite Berücksichtigung nicht-sinusförmiger Modulationen von Kaspar [Kas1973] sowie die Anwendung auf binäre Gitter und eine Vergleichsstudie zur Kirchhoff'schen Beugungstheorie von Knop [Kno1978]. Unabhängig von den drei genannten Autoren stellen auch die Arbeiten von Peng et al. [Pen1975] eine Art frühe Formulierung der RCWA dar, die allerdings nicht die Beugung von ebenen Wellen, sondern die Einkopplung von Wellenleitermoden aus Filmwellenleitern in modulierte Bereiche betrachtet. Es werden dielektrische Strukturen angenommen, die bereits in mehrfach übereinander gestapelten Schichten vorliegen können.

In den 1980er Jahren wurden erste Arbeiten von Moharam und Gaylord veröffentlicht. In [Moh1981] taucht erstmals der Name RCWA auf. Es wird die Beugung an binären 1D periodischen Gittern in ebener Beugung betrachtet. Hierbei kann im Gegensatz zu vorangegangenen Arbeiten die Richtung der periodischen Fortsetzung um einen Winkel gegenüber der Gitterebene verkippt sein. [Moh1982] stellt eine Erweiterung dieser Arbeiten auf beliebige Profilformen durch Schichtstapel und Treppenstufen-Näherung vor. In [Moh1983] wird die Theorie nicht etwa, wie der Titel "Three-dimensional vector coupled-wave analysis of planar-grating diffraction" vermuten lässt auf 3D oder 2D periodische Strukturen ausgedehnt, sondern auf den Fall konischer Beugung, wodurch natürlich die Beugungsordnungen eine dreidimensionale Beugungsfigur aufspannen. Der Konferenzbeitrag [Moh1988] ist der einzige Hinweis von Moharam auf die leicht mögliche Erweiterung der Theorie auf 2D periodische Gitter. Die Theorie wird dort allerdings nicht ausführlich dargestellt. Auch die späteren Arbeiten von Moharam und Gaylord [Moh1995a][Moh1995b], auf die wir unten zurückkommen, gehen nicht explizit auf 2D periodische Gitter ein. Erste ausführliche Beschreibungen von Implementierungen für 2D periodische Gitter sind von Bräuer und Bryngdahl [Brä1993] sowie von Noponen und Turunen [Nop1994] bekannt.

Zwei zusammengehörige Veröffentlichungen von Moharam et al. bilden die Grundlage vieler moderner RCWA Programme, auch des am ITO verwendeten Mikroskop-Simulators MicroSim [Tot2001], auf dem die hier vorgestellten Arbeiten basieren. In [Moh1995a] wird die RCWA für konische Beugung an einer dicken Schicht mit lateral periodisch modulierter, aber in $z-$Richtung konstanter Brechzahl neu formuliert. Gegenüber früheren Darstellungen sind hier numerische Schwierigkeiten durch Inversion schwach besetzter Matrizen und durch physikalisch unmögliche, exponentiell anwachsende Wellen, auch anti-evaneszente Wellen genannt, deren Extinktionskoeffizient durch numerisches Rauschen positiv und leicht von null verschieden ist, vermieden. In [Moh1995b] werden verschiedene Versionen eines speziell auf die RCWA zugeschnittenen Algorithmus zur Erweiterung einer Einzelschicht auf einen Schichtstapel gemäß Abb. 5 vorgestellt. Der Algorithmus heißt "Enhanced Transmittance Matrix Approach" und soll hier mit ETMA abgekürzt werden. Eine Übersicht über alternative Algorithmen, die auch auf andere Methoden anwendbar sind, allen voran den S-Matrix Algorithmus, der auf Li [Li1996b] zurückgeht, sind in Popovs und Nevières Buch [Pop2003] zu finden. Diese werden hier nicht weiter betrachtet.

Nach den viel beachteten Artikeln von Moharam et al. [Moh1995a][Moh1995b] folgte eine Diskussion über Konvergenzprobleme für den TM-Fall sowie für 2D periodische Strukturen, in die sich die vorliegende Arbeit einreiht. Zunächst wurde die schlechte Konvergenz für 1D periodische Strukturen in TM durch eine empirisch eingeführte Änderung verbessert [Lal1996a][Gra1996]. Dies führte schließlich zur Formulierung der Li'schen Regeln [Li1996a], die für 1D periodische Gitter trivial anzuwenden sind, was von Lalanne und Morris [Lal1996a] und Granet und Guizal [Gra1996] bereits vorweggenommen wurde. Es ist jedoch nach wie vor offen, wie die Li'schen Regeln für 2D periodische Gitter am besten anzuwenden sind. In den meisten aktuell verwendeten Codes dürfte die von Li [Li1997] vorgeschlagene Neuformulierung zum Einsatz kommen. Diese stellt im Augenblick den besten breit anwendbaren Kompromiss dar. Allerdings erfordert er eine Modellierung der lateralen Berandungskurven durch Zickzacklinien und kann somit auch nicht als optimal angesehen werden. Wie in Kapitel 3 gezeigt wird, kann durch Einführung von NV-Feldern, wie von Popov und Nevière für die Differentiellen Methode vorgeschlagen, auch für die RCWA eine bessere Konvergenz als mit dem Li'schen Verfahren erzielt werden. Diese Ergebnisse wurden auch bereits publiziert [Sch2007a][Goe2008a][Goe2008b][Goe2008c]. Abgesehen von der bislang angeschnittenen Frage, wie die Li'schen Regeln korrekt anzuwenden sind, wie also Produkte im Fourier-Raum korrekt formuliert werden können, sind nach wie vor Konvergenzprobleme stark leitfähiger Gitter im Mittelpunkt des Interesses, die auf ein reines Gibbs-Phänomen zurückzuführen sind. Ansätze zur Behandlung solcher Probleme wurden von Popov et al. [Pop2004] und Lyndin et al. [Lyn2007] vorgestellt.

Abschließend werden zwei aktuell verfolgte Forschungsthemen im Zusammenhang mit der RCWA erwähnt. Eine ganze Reihe von Veröffentlichungen von Bai und Li beschäftigt sich mit der Verringerung des Rechenaufwandes bei Symmetrien innerhalb der Elementarzelle. Exemplarisch sei hier nur der neueste Artikel zitiert [Bai2006]. Zudem wurde in jüngster Zeit

eine Erweiterung der RCWA auf beliebige Profilformen ohne Verwendung einer Treppen-Näherung unter dem Namen Pseudo-FMM [Kim2008] untersucht. Hierbei wird die dielektrische Konstante nicht nur innerhalb der Gitterebene, sondern auch in $z-$Richtung Fourier-entwickelt. Hierdurch vergrößert sich aber die Systemmatrix des letztlich zu lösenden Eigenwertproblems enorm, weshalb dieser Ansatz nicht als besonders aussichtsreich angesehen werden kann. Vielmehr scheint die Differentielle Methode für beliebige Profilformen die sinnvollste Ergänzung oder Alternative zur RCWA darzustellen.

3 Die Verwendung von Normalenvektorfeldern in der RCWA

3.1 Die RCWA: Bekannte Formulierungen, Konvergenzprobleme, Unterschiede zur und Gemeinsamkeiten mit der Differentiellen Methode

Es folgt zunächst eine Darstellung der RCWA, die sich an [Moh1995a][Moh1995b] orientiert. Beide Artikel, verbunden mit einigen kleinen, aber entscheidenden, im Folgenden ebenfalls zu erläuternden Korrekturen, stellen wohl die Grundlage der meisten aktuell verwendeten RCWA Implementierungen dar. Im Gegensatz zu den zitierten Artikeln werden die Spezialfälle ebener Beugung in TE und TM Polarisation hier ausgelassen. Diese können aus der allgemeinen Darstellung durch die entsprechende Wahl von Strukturgeometrie, Einfallsrichtung und Polarisation einfach zurückgewonnen werden. Ebenso soll hier anders als in [Moh1995a] unmittelbar der komplizierteste Fall von Kreuzgittern oder 2D periodische Gittern betrachtet werden. Der Fall von Liniengittern folgt daraus unmittelbar, indem eine der Perioden unendlich bzw. der entsprechende Gittervektor null gewählt wird. Die Bezeichnungen orientieren sich im Folgenden an Abb. 3. Wie dort angegeben, wird der Raum in drei Regionen unterteilt: Das Cover mit Brechzahl n_1 oder dielektrischer Konstante ε_1, die Gitter-Region mit Brechzahl $n_g(x,y,z)$ oder dielektrischer Konstante $\varepsilon_g(x,y,z)$ sowie das Substrat mit Brechzahl n_2 oder dielektrischer Konstante ε_2.

Wie in [Moh1995a] wird zunächst ein binäres Gitter betrachtet. D.h. auf einem Substrat befindet sich eine einzelne in $z-$Richtung homogene Schicht, die innerhalb der $xy-$Ebene beliebig, aber periodisch moduliert ist. In [Moh1995b] wird mit dem Enhanced Transmittance Matrix Approach (ETMA) ein Algorithmus vorgestellt, der die Beugung an einer einzelnen, lateral modulierten Schicht durch eine Treppenstufen-Näherung gemäß Abb. 5 auf beliebige Profilformen erweitert. Eine leicht modifizierte Form dieses Algorithmus wurde am ITO von Totzeck [Tot2001] implementiert und in dieser Arbeit unverändert verwendet. Er wird in diesem Kapitel nur sehr grob umrissen und im Anhang der Vollständigkeit halber im Detail wiedergegeben. Der Schwerpunkt der hier gewählten Darstellung liegt auf der folgenden Beschreibung der Beugung an binären Gittern, die die Grundlage der innerhalb dieser Arbeit vorgeschlagenen Verbesserungen der RCWA [Sch2007a] bildet.

Betrachten wir nun also das Beugungsproblem aus Abb. 3. Eine ebene Welle, charakterisiert durch den Polarwinkel θ und den Azimutwinkel φ, fällt auf ein periodisches Beugungsgitter. Die Polarisation eines einfallenden linearen Polarisationszustandes wird durch den Winkel ψ beschrieben.[2] In der modulierten Schicht sollen nun die Maxwell-Gleichungen gelöst werden. Die Zeitabhängigkeit kann wegen der Betrachtung des stationären Beugungsproblems durch einen Ansatz der Form $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{kx}) \exp(-i\omega t)$ eliminiert werden. Damit lassen sich die Rotations-Gleichungen (1a) und (1b) schreiben als:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H} \tag{16a}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon(x, y, z)\mathbf{E} = -i\omega\mathbf{D} \tag{16b}$$

Hierbei wurde $\mu_r = 0$ angenommen, also nicht magnetisierbare Materie. Die Stromdichte $\mathbf{j}$ wird über das Ohm'sche Gesetz und eine komplexe dielektrische Konstante durch das elektrische Feld ausgedrückt. Die ortsabhängige dielektrische Konstante $\varepsilon(x, y, z)$ beschreibt das Gitter. Im Augenblick sei wegen dem herzustellenden Bezug zur Differentiellen Methode die $z-$Abhängigkeit noch zugelassen. Später wird dann gefordert, dass die dielektrische Konstante innerhalb einer betrachteten Schicht keine Funktion der $z-$Koordinate mehr ist, wobei dann beliebige Profilformen durch Schichtstapel modelliert werden.

Die Ortsableitungen nach x und y in Gl. (16) werden eliminiert, indem $\varepsilon(x, y, z)$ in eine Fourier-Reihe und die Felder $\mathbf{E}$ und $\mathbf{H}$ in Pseudo-Fourier-Reihen entwickelt werden, deren Koeffizienten im Augenblick noch von z abhängen. Pseudo-Fourier-Reihe bedeutet, dass die Basisfunktionen neben dem harmonischen Anteil einen Phasenkeil enthalten, der eine i.Allg. gegenüber der Gitternormalen verkippte Einfallsrichtung beschreibt. Das Problem wird also bzgl. der lateralen Koordinaten in den diskreten Fourier-Raum transformiert, während es bzgl. der $z-$Koordinate im Ortsraum verbleibt. Folgende Ansätze für die Felder $\mathbf{E}$ und $\mathbf{H}$ werden hierzu in der Gitter-Region in Gl. (16) eingesetzt:

$$\mathbf{E_g} = \sum_{\mu=-M_x}^{M_x} \sum_{\nu=-M_y}^{M_y} \left[S_{x,\mu\nu}(z)\mathbf{e}_x + S_{y,\mu\nu}(z)\mathbf{e}_y + S_{z,\mu\nu}(z)\mathbf{e}_z\right] \exp\left[i\left(k_{x,\mu}x + k_{y,\nu}y\right)\right] \tag{17a}$$

$$\mathbf{H_g} = -i\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_{\mu=-M_x}^{M_x} \sum_{\nu=-M_y}^{M_y} \left[U_{x,\mu\nu}(z)\mathbf{e}_x + U_{y,\mu\nu}(z)\mathbf{e}_y + U_{z,\mu\nu}(z)\mathbf{e}_z\right] \exp\left[i\left(k_{x,\mu}x + k_{y,\nu}y\right)\right] \tag{17b}$$

Hierbei bezeichnen $\mathbf{e}_{x,y,z}$ Einheitsvektoren des kartesischen Koordinatensystems, $S_{x,\mu\nu}$ und $U_{x,\mu\nu}$ normierte Fourier-Koeffizienten des elektrischen und magnetischen Feldes, M_x und M_y die Modenzahlen in $x-$ und $y-$Richtung und μ, ν Laufindizes für die beiden Fourier-Entwicklungen. Die Komponenten der Wellenzahlvektoren sind gegeben durch:

2 Obwohl hier die Darstellung nach [Moh1995a] gewählt wird, die sich auf lineare Polarisation des einfallenden Feldes beschränkt, ist eine Erweiterung auf allgemeine, elliptische Polarisation einfach möglich. Der Winkel ψ taucht nur in Zusammenhang mit Komponenten des elektrischen Feldes innerhalb der Cosinus- oder Sinusfunktion auf. Wird vor einer der beiden Funktion ein komplexer Vorfaktor mit der relativen Phase von $p-$ und $s-$Komponente des einfallenden Feldes ergänzt, so wird ein elliptisch polarisierter einfallender Zustand elliptisch beschrieben. Zugunsten einer übersichtlichen Darstellung wird dieser Vorfaktor hier aber nicht eingeführt.

$$k_{x,\mu} = n_1 \sin\theta \cos\varphi + \mu K_x \tag{18a}$$

$$k_{y,\nu} = n_1 \sin\theta \sin\varphi + \nu K_y, \tag{18b}$$

wobei der zweidimensionale Gittervektor $[K_x, K_y]^\top$ analog zu Gl. (13) definiert ist. Das Floquet-Theorem besagt, dass Lösungen der durch die Gln. (17) und (18) dargestellten Form existieren [Moh1995a]. Die ersten Summanden in beiden Zeilen von Gl. (18) sind Ausdruck der Erhaltung der lateralen Wellenzahlkomponenten beim Durchgang durch eine Grenzfläche. Ohne diese Terme heißen die Summen in Gl. (17) Fourier-Reihen, mit ihnen wie Pseudo-Fourier-Reihen. Durch diese Erhaltung der lateralen Wellenzahlkomponenten folgt auch, dass allein durch die Einfallsrichtung die Winkel aller Beugungsordnungen des reflektierten und transmitterten Beugungssprektrums festgelegt sind. Wir haben also die Gittergleichung im Floquet-Theorem wiedergefunden.

Die nun folgende Diskussion über unterschiedliche Formulierungen der RCWA hat durchgehend das Produkt $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}$ und dessen Darstellung nach Einsetzen des Fourier-Ansatzes Gl. (17) zum Inhalt. Zunächst soll ohne Beachtung der exakten Voraussetzungen die Laurent'sche Regel, das ist die Faltungsregel für diskrete Fourier-Reihen, sowie eine Schreibweise mittels Toeplitz-Matrizen einer eindimensionalen Faltung bzw. mittels Block-Toeplitz-Toeplitz-Block-Matrizen (BTTB) einer zweidimensionalen Faltung eingeführt werden. Sind die noch zu spezifizierenden Voraussetzungen erfüllt, so gilt folgende Faltungsregel, die hier der Einfachheit halber für skalare Funktionen ε und E (z.B. eine Komponente des elektrischen Feldes) dargestellt ist:

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon E \bullet\!\!-\!\!\circ\, D_{\sigma\tau} = \varepsilon_0 \sum_{\mu=-M_x}^{M_x} \sum_{\nu=-M_y}^{M_y} \varepsilon_{\sigma-\mu,\tau-\nu} E_{\mu\nu} \tag{19}$$

Hierbei bezeichnet wie üblich das Symbol $\bullet\!\!-\!\!\circ$ ein Fourier-Transformations-Paar und die doppelt indizierten Größen die Fourier-Koeffizienten der zweidimensionalen Pseudo-Fourier-Reihen. Die auftretende Doppelsumme kann als Matrix-Produkt aus einer BTTB Matrix $[\![\varepsilon]\!]$ und einem Vektor aus Fourier-Koeffizienten, kurz Fourier-Vektor $[E]$ geschrieben werden:

$$[D] = \varepsilon_0 [\![\varepsilon]\!] [E] \tag{20}$$

Zur Veranschaulichung der Matrizen und Vektoren beginnen wir mit dem Fall 1D periodischer Strukturen mit $M_y = 0$. In diesem Fall ist $[E]$ der Vektor mit den Einträgen E_μ und die Matrix $[\![\varepsilon]\!]$ wird zu einer einfachen Toeplitz-Matrix, deren Einträge gegeben sind durch:

$$\varepsilon_{\sigma\mu} = \varepsilon_{\sigma-\mu} \tag{21}$$

Eine Toeplitz-Matrix ist also eine Matrix, deren erste Zeile in allen weiteren Zeilen wiederholt wird, aber jeweils um einen Spaltenindex verschoben.

Im Fall 2D periodischer Strukturen muss die Matrix von Fourier-Koeffizienten $E_{\mu\nu}$ durch eine bijektive Indexsubstitution formal in einen Vektor umgeschrieben werden und die Matrix $[\![\varepsilon]\!]$ wird zu einer BTTB Matrix, damit die Faltung wieder als Matrixprodukt gemäß

Gl. (20) geschrieben werden kann. Anschaulich bedeutet dies, dass die Matrix in Blöcke zerfällt, innerhalb derer die Einträge in Toeplitz-Gestalt gemäß Gl. (21) vorliegen, während die Blöcke ihrerseits wiederum in Toeplitz-Gestalt angeordnet sind. Die in Gl. (19) auftretende Doppelsumme wird hierzu mittels der Substitution

$$\rho = 1 + \nu + M_y + (2M_y + 1)(\mu + M_x) \tag{22}$$

in eine Einfachsumme umgeschrieben:

$$D_\zeta = \varepsilon_0 \sum_{\rho=1}^{(2M_x+1)(2M_y+1)} \varepsilon_{\zeta-\rho} E_\rho = \sum_{\rho=1}^{(2M_x+1)(2M_y+1)} \varepsilon_{\nu_\zeta-\nu_\rho+(2M_y+1)(\mu_\zeta-\mu_\rho)} E_\rho \tag{23}$$

Die erste Identität von Gl. (23) definiert eine Toeplitz-Gestalt der BTTB Matrix bzgl. des neuen Index ρ und verschleiert zunächst die Unterstruktur in Blöcken. Im zweiten Schritt von Gl. (23) wird die Definition von ρ, Gl. (22), zur Veranschaulichung der Block-Gestalt der Matrix wieder eingesetzt. Man erkennt, dass die Matrix in Blöcke der Größe $2My + 1$ zerfällt. Innerhalb der Blöcke sind die Einträge bzgl. des ursprünglichen Index ν der $y-$Summation in Toeplitz-Gestalt angeordnet. Die Blöcke ihrerseits sind in der Gesamtmatrix bzgl. des ursprünglichen Index μ der $x-$Summation in Toeplitz-Gestalt angeordnet. Wird entweder die $x-$ oder die $y-$Summation in Gl. (19) durch die Wahl $M_x = 0$ oder $M_y = 0$ eliminiert, so bleiben von der BTTB Matrix entweder ein einzelner Block oder aber Blöcke der Größe 1×1 übrig, so dass sie zu einer gewöhnlichen Toeplitz-Matrix degeneriert. Die Schreibweise $[\![\varepsilon]\!]$ kann somit ohne Unterscheidung zwischen 1D und 2D periodischen Gittern verwendet werden. Dasselbe gilt für die Schreibweise $[E]$ für einen Fourier-Vektor.

Nach diesen Definitionen können nun die Fourier-Ansätze aus den Gln. (17) in die zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen (16) eingesetzt werden, was in Matrix-Darstellung wie folgt aussieht:

$$i\mathbf{K}_y[S_z] + \partial_{z'}[S_y] = U_x \tag{24a}$$

$$-\partial_{z'}[S_x] - i\mathbf{K}_x[S_z] = U_y \tag{24b}$$

$$i\mathbf{K}_x[S_y] - i\mathbf{K}_y[S_x] = U_z \tag{24c}$$

$$i\mathbf{K}_y[U_z] + \partial_{z'}[U_y] = [\![\varepsilon]\!][S_x] \tag{24d}$$

$$-\partial_{z'}[U_x] - i\mathbf{K}_x[U_z] = [\![\varepsilon]\!][S_y] \tag{24e}$$

$$i\mathbf{K}_x[U_y] - i\mathbf{K}_y[U_x] = [\![\varepsilon]\!][S_z] \tag{24f}$$

Hierbei ist[3] $z' = -k_0 z$ und $\mathbf{K}_{x,y,z}$ sind Diagonalmatrizen mit den Einträgen $K_{x,y,z,\rho\rho} = k_{x,y,z,\rho}/k_0$. Wie durch den Index ρ angedeutet, sind die Komponenten der Wellenzahlvektoren hierin wiederum gemäß der Substitution Gl. (22) entlang der Hauptdiagonalen angeordnet.

3 Das hier unmotiviert erscheinende Minuszeichen rührt daher, dass entgegen der Darstellung in [Moh1995a] $e^{-i\omega t}$ die in dieser Arbeit durchgehend verwendete und in der Literatur üblichere negative Zeitabhängigkeit einer harmonischen ebenen Welle verwendet wird. Um wieder formal identische Ergebnisse wie in [Moh1995a] zu erhalten, ist das Minuszeichen in dieser Definition nötig.

Bei der Herleitung von Gl. (24) wurde, wie oben angedeutet, nicht hinterfragt, ob die Laurent'sche Faltungsregel aus Gl. (19) angewendet werden darf. Dies ist *nicht* immer der Fall, so dass Gl. (24) erweitert werden muss. Um nun eine möglichst kompakte Darstellung verschiedener Formulierungen der RCWA zu geben, wird folgende Darstellung der Fourier-Koeffizienten der dielektrischen Verschiebung nach [Pop2001][Pop2003] eingeführt:

$$\begin{bmatrix} [D_x] \\ [D_y] \\ [D_z] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{\varepsilon,xx} & \mathbf{Q}_{\varepsilon,xy} & \mathbf{Q}_{\varepsilon,xz} \\ \mathbf{Q}_{\varepsilon,yx} & \mathbf{Q}_{\varepsilon,yy} & \mathbf{Q}_{\varepsilon,yz} \\ \mathbf{Q}_{\varepsilon,zx} & \mathbf{Q}_{\varepsilon,zy} & \mathbf{Q}_{\varepsilon,zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [S_x] \\ [S_y] \\ [S_z] \end{bmatrix} \tag{25}$$

Es wird also, zunächst ohne Grundlage, zwischen den Fourier-Vektoren der dielektrischen Verschiebung und denen des elektrischen Feldes ein quasi tensorieller Zusammenhang mit einer Koeffizientenmatrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$ postuliert. Dies führt dazu, dass sich Gl. (24) verkompliziert zu:

$$i\mathbf{K}_y[S_z] + \partial z'[S_y] = U_x \tag{26a}$$

$$-\partial z'[S_x] - i\mathbf{K}_x[S_z] = U_y \tag{26b}$$

$$i\mathbf{K}_x[S_y] - i\mathbf{K}_y[S_x] = U_z \tag{26c}$$

$$i\mathbf{K}_y[U_z] + \partial z'[U_y] = \mathbf{Q}_{\varepsilon,xx}[S_x] + \mathbf{Q}_{\varepsilon,xy}[S_y] + \mathbf{Q}_{\varepsilon,xz}[S_z] \tag{26d}$$

$$-\partial z'[U_x] - i\mathbf{K}_x[U_z] = \mathbf{Q}_{\varepsilon,yx}[S_x] + \mathbf{Q}_{\varepsilon,yy}[S_y] + \mathbf{Q}_{\varepsilon,yz}[S_z] \tag{26e}$$

$$i\mathbf{K}_x[U_y] - i\mathbf{K}_y[U_x] = \mathbf{Q}_{\varepsilon,zx}[S_x] + \mathbf{Q}_{\varepsilon,zy}[S_y] + \mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}[S_z] \tag{26f}$$

Aus diesen Gleichungen werden nun durch Einsetzen von Gln. (26c) und (26f) in die übrigen Teilgleichungen die $z-$Komponenten der Felder eliminiert. Es ergibt sich ein DGl-System aus 4×4 Blöcken, das als grundlegendes Gleichungssystem der Differentiellen Methode wie auch der RCWA betrachtet werden kann:

$$\partial_{z'} \begin{bmatrix} [S_y] \\ [S_x] \\ [U_y] \\ [U_x] \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} [S_y] \\ [S_x] \\ [U_y] \\ [U_x] \end{bmatrix} \tag{27}$$

Die Matrix $\mathbf{M}$ wird wegen ihrer Größe in Tabelle 1 dargestellt. Hierin wird zusätzlich die Bezeichnung $\mathbf{I}$ für die Einheitsmatrix verwendet.

Bevor nun ausführlich verschiedene Formulierungen der RCWA in Form von unterschiedlichen Matrizen $\mathbf{Q}_\varepsilon$ und deren Auswirkungen auf die Systemmatrix $\mathbf{M}$ diskutiert werden, soll kurz die weitere Vorgehensweise der RCWA nach Aufstellen dieses Gleichungssystems geschildert werden. Im Gegensatz zur Differentielle Methode, die die $z-$Abhängigkeit in Gl. (27) bestehen lässt, wird in der RCWA gefordert, dass ε, das in Gl. (27) im Augenblick noch in undefinierter Form in $\mathbf{Q}_\varepsilon$ gekapselt ist, keine $z-$Abhängigkeit aufweist. Dies kann durch die in Kapitel 2.4.2 erläuterte Treppenstufen-Näherung erzwungen werden. Somit ist die gesamte Systemmatrix $\mathbf{M}$ bzgl. der Ableitung nach z eine Konstante und das DGl-System reduziert sich auf ein Eigenwert-Problem.

$i\mathbf{K}_y\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zy}$	$i\mathbf{K}_y\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zx}$	$\mathbf{K}_y\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_x$	$\mathbf{I}-\mathbf{K}_y\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_y$
$i\mathbf{K}_x\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zy}$	$i\mathbf{K}_x\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zx}$	$\mathbf{K}_x\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_x-\mathbf{I}$	$-\mathbf{K}_x\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_y$
$\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y+\mathbf{Q}_{\varepsilon,xy}$ $-\mathbf{Q}_{\varepsilon,xz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zy}$	$-\mathbf{K}_y^2+\mathbf{Q}_{\varepsilon,xx}$ $-\mathbf{Q}_{\varepsilon,xz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zx}$	$i\mathbf{Q}_{\varepsilon,xz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_x$	$-i\mathbf{Q}_{\varepsilon,xz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_y$
$\mathbf{K}_x^2-\mathbf{Q}_{\varepsilon,yy}$ $+\mathbf{Q}_{\varepsilon,yz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zy}$	$-\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y-\mathbf{Q}_{\varepsilon,yx}$ $+\mathbf{Q}_{\varepsilon,yz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zx}$	$-i\mathbf{Q}_{\varepsilon,yz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_x$	$i\mathbf{Q}_{\varepsilon,yz}\mathbf{Q}_{\varepsilon,zz}^{-1}\mathbf{K}_y$

Tabelle 1: Matrix des Grundgleichungssystems der RCWA, Gl. (27)

Die Lösung des DGl-Systems kann nach numerischer Eigenwertbestimmung von **M** geschlossen dargestellt werden, wobei für jede Kombination lateraler Wellenzahlkomponenten $\{k_{x,\mu\nu}, k_{y,\mu\nu}\}$, oder anders gesprochen für jede propagierende oder evaneszente Beugungsordnung, eine freie Integrationskonstante eingeführt wird. Die freien Integrationskonstanten sowie die gesuchten Amplituden der reflektierten und transmittierten Beugungsordnungen müssen durch Gleichsetzen der Felder in der Gitterregion und in Cover und Substrat beiderseits der oberen und unteren Grenzfläche des Gitters ermittelt werden. Die Stetigkeit der Felder an diesen Grenzflächen ist gewährleistet, da die $z-$, also die Normalkomponenten der Felder eliminiert wurden. Die verbleibenden lateralen Komponenten des elektrischen und magnetischen Feldes sind bzgl. der Gitterober- und unterseite Tangentialkomponenten und damit stetig. Eine Erweiterung auf mehrere gestapelte Binärgitter ist damit auch naheliegend. Die freien Integrationskonstanten müssen dann an jeder Grenzfläche zwischen zwei Schichten durch Gleichsetzen der Felder ermittelt werden. Eine ausführliche Darstellung findet sich im Anhang.

Nun soll anhand Gl. (27) eine Übersicht über existierende Formulierungen der RCWA gegeben werden. Die ursprünglich von Moharam und Gaylord entwickelte Formulierung [Moh1995a] resultiert in Gl. (24). Sie geht davon aus, dass die Laurent'sche Faltungsregel für alle auftretenden Produkte der Form εE angewendet werden kann. Dies ist gleichbedeutend mit:

$$\mathbf{Q}_\varepsilon = \begin{bmatrix} [\![\varepsilon]\!] & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & [\![\varepsilon]\!] & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & [\![\varepsilon]\!] \end{bmatrix} \tag{28}$$

und führt zu der in [Moh1995a] dargestellten Systemmatrix:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{MG}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x & \mathbf{I}-\mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x-\mathbf{I} & -\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & [\![\varepsilon]\!]-\mathbf{K}_y^2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2-[\![\varepsilon]\!] & -\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{29}$$

Die Indizes MG bezeichnen die beiden Autoren Moharam und Gaylord. Diese Matrix hat block-antidiagonale Gestalt, was auch für alle weiteren hier betrachteten Systemmatrizen der Fall sein wird. Damit lässt sich durch Einsetzen der ersten beiden in die letzten beiden Zeilen von Gl. (27) das System 1. Ordnung zu einem System 2. Ordnung mit halber Größe reduzieren, was in einem erheblichen Gewinn an Rechenzeit resultiert. Die Systemmatrix des neuen DGl-Systems erhält man durch Matrixmultiplikation des linken unteren mit dem rechten oberen Block. Die Wahl dieser Reihenfolge ist willkürlich, ebenso gut könnte man die beiden letzten in die beiden ersten Zeilen einsetzen, und würde so ein DGl-System für die Unbekannten $S_{x,y}$ erhalten. Mit unserer Wahl erhält man:

$$\partial_{z'}^2 \begin{bmatrix} [U_y] \\ [U_x] \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{K}_y^2 + [\![\varepsilon]\!]\mathbf{B} & [\mathbf{K}_x - [\![\varepsilon]\!]\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}]\mathbf{K}_y \\ [\mathbf{K}_y - [\![\varepsilon]\!]\mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}]\mathbf{K}_x & \mathbf{K}_x^2 + [\![\varepsilon]\!]\mathbf{D} \end{bmatrix}}_{\mathbf{\Omega}_{\mathrm{MG}}} \begin{bmatrix} [U_y] \\ [U_x] \end{bmatrix} \tag{30}$$

mit den Abkürzungen:

$$\mathbf{B} = \mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x - \mathbf{I} \tag{31a}$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y - \mathbf{I} \tag{31b}$$

Dieses System wird mittels Diagonalisierung der Systemmatrix $\mathbf{\Omega}_{\mathrm{MG}}$ gelöst. Der weitere Verlauf der Rechnung wurde oben bereits skizziert und ist im Anhang ausführlich wiedergegeben.

Im Ergebnis der Veröffentlichung dieser RCWA-Formulierung entwickelte sich eine Diskussion über deren schlechtes Konvergenz-Verhalten in TM-Polarisation bei Gittern aus leitfähigen Materialien. Da das elektrische Feld in dieser Polarisation normal zur Seitenwand der Gitterstege steht, ist es nicht stetig, sondern springt beim Durchgang durch die Grenzfläche. Damit ergibt sich bei der Darstellung des Feldes durch Fourier-Reihen ein Gibbs-Phänomen und prinzipiell ohnehin eine schlechtere Konvergenz als für die TE-Polarisation. Dieser Effekt wird auch aktuell noch diskutiert, vgl. [Pop2004] und [Lyn2007]. So war zunächst nicht klar, dass die Konvergenz in dieser ursprünglichen Formulierung durch ein zusätzliches numerisches Problem verschlechtert wurde.

1996 gelang es unabhängig von einander Lalanne und Morris [Lal1996a] sowie Granet und Guizal [Gra1996], das Problem für den Fall 1D periodischer Gitter durch eine empirisch eingeführte Änderung zu beheben. Diese lässt sich in der hier verwendeten Darstellung beschreiben durch:

$$\mathbf{Q}_\varepsilon = \begin{bmatrix} [\![1/\varepsilon]\!]^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & [\![\varepsilon]\!] & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & [\![\varepsilon]\!] \end{bmatrix} \tag{32}$$

Die Auswirkungen auf die Systemmatrizen $\mathbf{M}$ des DGl-Systems 1. Ordnung und $\mathbf{\Omega}$ sehen wie folgt aus:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{LG}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & [\![1/\varepsilon]\!]^{-1} - \mathbf{K}_y^2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2 - [\![\varepsilon]\!] & -\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{33}$$

$$\mathbf{\Omega}_{\mathrm{LG}} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_y^2 + [\![1/\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{B} & [\mathbf{K}_x - [\![\varepsilon]\!]\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}]\mathbf{K}_y \\ [\mathbf{K}_y - [\![1/\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}]\mathbf{K}_x & \mathbf{K}_x^2 + [\![\varepsilon]\!]\mathbf{D} \end{bmatrix} \tag{34}$$

Die Indizes LG bezeichnen die beiden Erstautoren der erwähnten Veröffentlichungen, Lalanne und Granet. Die Motivation für die Änderung bestand darin, dass die dielektrische Konstante in den im Ortsraum formulierten Gleichungen auf die linke Seite der Gl. (16b) gebracht werden kann, wodurch sich eine scheinbar äquivalente Formulierung ergibt. Nach Transformation des Problems in den Fourier-Raum wird die nun links entstandene Toeplitz-Matrix durch Multiplikation mit ihrer Inversen wieder auf die rechte Seite verschoben. Da beide Formulierungen korrekt erschienen, wurde schlichtweg diejenige ausgewählt, die zu einem besseren Konvergenzverhalten geführt hat.

Die theoretische Erklärung des Phänomens lieferte Li [Li1996a] durch die Formulierung von drei Regeln, die später von Popov et al. [Pop2001][Pop2003] als Li'sche Regeln bezeichnet wurden. Diese werden hier, der Darstellung von Popov et al. folgend [Pop2003], in vereinfachter Form wiedergegeben. Obwohl sie natürlich für beliebige periodische Funktionen gelten, werden sie gleich anhand des hier betrachteten Produkts $D = \varepsilon_0\varepsilon E$ dargestellt:

1. Es seien ε und E periodische Funktionen, wobei mindestens eine von beiden an einem Ort $x = x_0$ stetig ist. Die andere kann dort unstetig sein. Dann gilt die *Laurent'sche Faltungsregel*:

$$D = \varepsilon_0\varepsilon E \bullet\!\!-\!\!\circ\ [D] = \varepsilon_0[\![\varepsilon]\!][E] \tag{35a}$$

2. Es seien ε und E periodische Funktionen, die beide an einem Ort $x = x_0$ unstetig sind, während aber das Produkt dort stetig ist. Dann gilt die *inverse Regel*:

$$D = \varepsilon_0\varepsilon E \bullet\!\!-\!\!\circ\ [D] = \varepsilon_0[\![1/\varepsilon]\!]^{-1}[E] \tag{35b}$$

3. Es seien ε und E periodische Funktionen, wobei beide Funktionen wie auch deren Produkt an einem Ort $x = x_0$ unstetig sind. Dann kann am Ort x_0 das Produkt mit keiner der beiden ersten Regeln durch eine Faltung dargestellt werden.

Wenn man die erste Regel als wahr annimmt, so folgt die zweite durch einen sehr einfachen Beweis, der in der ursprünglich verwendeten Heuristik schon fast enthalten ist. Bringt man die Funktion ε im Ortsraum auf die linke Seite, so erhält man das Produkt $(1/\varepsilon)D = \varepsilon_0 E$, für das die Voraussetzungen der ersten Regel erfüllt sind. Man wendet diese an und bringt den Term $1/\varepsilon$ durch Multiplikation mit der inversen Toeplitz-Matrix nach rechts.

Li [Li1996a] untersuchte das Phänomen genauer, als es hier dargestellt wird. Demnach liegt der tiefere Grund für die resultierenden Konvergenzprobleme darin, dass am Ort x_0 die

durch das Faltungsprodukt aus der mit falschen Voraussetzungen angewandten Laurent'schen Regel gegen einen falschen Wert konvergiert. In einer Umgebung von x_0 konvergiert damit die Fourier-Reihe nicht mehr gleichmäßig, wodurch insgesamt das Konvergenzverhalten verschlechtert wird. Eine noch ausführlichere Diskussion der Thematik gibt Li in [Li2001].

Mit den empirisch eingeführten und durch Li theoretisch untermauerten Änderungen der RCWA Formulierung sind Konvergenzprobleme, die aus einer fehlerhaften Anwendung von Faltungsregeln herrühren, für 1D periodische Gitter endgültig behoben. Die Anwendung der Li'schen Regeln stellt hier keine Schwierigkeit dar, da die Orientierung der lateralen Grenzflächen im Ortsraum immer gleich ist, nämlich parallel zur yz–Ebene. Damit sind die y– und z–Komponenten der Felder bzgl. dieser Grenzflächen stets Tangentialkomponenten und mit der Laurent'schen Regel zu behandeln. Die x–Komponente ist dagegen stets eine Normalkomponente, so dass diese nach der inversen Regel zu transformieren ist. Damit ist die Gestalt der Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$ aus Gl. (32) klar verständlich.

Für 2D periodische Gitter ist die Lage allerdings komplizierter. Die Orientierung der lateralen Grenzflächen variiert über die Elementarzelle, wie zwei beispielhafte Strukturen in Abb. 6 veranschaulichen. Ein 2D periodisches Gitter kann etwa aus einer periodischen Anordnung quadratischer oder kreisförmiger Löcher in einem Substrat bestehen. Abb. 6 zeigt die Ansicht jeweils eines dieser Löcher von oben. Beim quadratischen Loch stellen wenigstens entlang der Seitenlinien die kartesischen Komponenten des elektrischen Feldes jeweils reine Normal- oder Tangentialkomponenten dar. An den Ecken allerdings tauschen sie ihre Rollen. Beim kreisförmigen Loch gilt dies jeweils nur an den Schnittpunkten der Berandungskurven mit den Koordinatenachsen, an allen anderen Punkten ändert sich die Orientierung der Grenzfläche kontinuierlich. Die Gleichungen der RCWA, insbesondere Gl. (27), sind im diskreten Fourier-Raum bzgl. der lateralen Koordinaten formuliert. Die Orientierung der Grenzfläche kann daher im Fourier-Raum zunächst nicht mit einfachen Mitteln beschrieben werden.

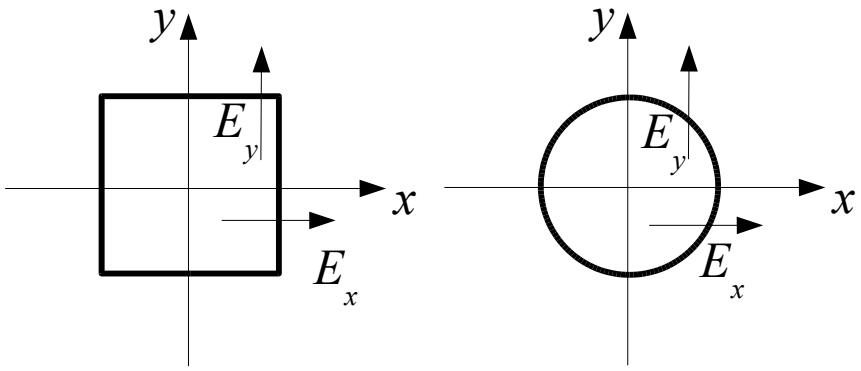


Abbildung 6: Veranschaulichung der Schwierigkeit, die Li-Regeln für 2D periodische Gitter zu erfüllen. Die Orientierung der lateralen Grenzfläche ändert sich innerhalb der Elementarzelle, so dass die Feldkomponenten Tangential- oder Normalkomponente wie auch Überlagerungen beider Extremfälle darstellen können.

Eine erste Herangehensweise an dieses Problem wurde von Lalanne [Lal1997] vorgestellt. Diese kann durch die folgende Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$ beschrieben werden:

$$\mathbf{Q}_\varepsilon = \begin{bmatrix} \alpha[\![1/\varepsilon]\!]^{-1} + (1-\alpha)[\![\varepsilon]\!] & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \alpha[\![\varepsilon]\!] + (1-\alpha)[\![1/\varepsilon]\!]^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & [\![\varepsilon]\!] \end{bmatrix} \tag{36}$$

In der Systemmatrix des DGl-Systems 1. Ordnung führt dies zu folgenden Änderungen:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{Lal}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & \alpha[\![1/\varepsilon]\!]^{-1} + (1-\alpha)[\![\varepsilon]\!] - \mathbf{K}_y^2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2 - \alpha[\![\varepsilon]\!] - (1-\alpha)[\![1/\varepsilon]\!]^{-1} & -\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{37}$$

Der Gewichtungsfaktor α hängt hierbei von der genauen Struktur des Beugungsgitters innerhalb der Elementarzelle ab. Lalanne gibt empirische Regeln zur Aufstellung dieses Faktors für eine rechteckförmige Kavität als Funktion der Füllfaktoren in $x-$ und $y-$Richtung an. Da die Lalanne'sche Formulierung nicht weiter betrachtet wird, wird die Darstellung der Systemmatrix $\mathbf{\Omega}$ ausgelassen. Sie folgt, wie in den anderen Fällen, sofort durch Matrixmultiplikation der Außer-Diagonal-Blöcke.

Anschaulich gesprochen versucht dieser Ansatz nichts anderes, als denjenigen Anteil der Grenzfläche zu minimieren, bei dem die Li'schen Regeln fehlerhaft angewendet werden. Bei dieser extrem leicht zu implementierenden Änderung werden die Gleichungen im Fourier-Raum, wo die Information über die Orientierung der Grenzfläche nicht mehr fassbar ist, durch einen empirischen Ansatz so gut wie möglich optimiert, aber nicht korrigiert. Die Formulierung von Lalanne zeigt bereits ein merklich besseres Konvergenzverhalten als die ursprüngliche Formulierung von Moharam und Gaylord.

Eine wesentlich wirkungsvollere Konvergenzverbesserung mit korrekter Anwendung der Li'schen Regeln wurde von Li selbst nur wenige Monate nach Lalannes Formulierung vorgestellt [Li1997]. Allerdings, obwohl die Formulierung mathematisch korrekt die Li'schen Regeln berücksichtigt, ist dies nur um den Preis einer Einschränkung an die Modellierung möglich: Die laterale Begrenzung muss durch eine Zickzack-Linie beschrieben werden, wie es Abb. 7 veranschaulicht. Durch diese Modellierung wird gewährleistet, dass die kartesischen Komponenten des elektrischen Feldes bzgl. jedes Teilstücks der Zickzack-Linie entweder normal oder tangential orientiert sind. Lis Formulierung ist noch allgemeiner gehalten als es hier skizziert wird. Anders als in Abb. 7 dargestellt, lässt diese auch Winkel $\neq 90°$ zwischen dem Gitternetzlinien zu, mithilfe derer die Zickzack-Linie gebildet wird. Damit lassen sich in einigen Fällen kleinere Elementarzellen und somit möglicherweise auch bessere Konvergenzeigenschaften erzielen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Li'sche Formulierung allerdings ohne Berücksichtigung schiefwinkliger Gitternetze implementiert und verwendet[4].

4 Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, dass diese Implementierung in Zusammenarbeit mit den Kollegen Norbert Kerwien und Stephan Rafler erfolgt ist.

Die Li'sche Formulierung soll hier nicht umfassend dargestellt werden, da dies vergleichsweise aufwändig ist und in der Originalveröffentlichung [Li1997] nachgelesen werden kann. Stattdessen soll versucht werden, den Kern der Formulierung zu veranschaulichen. Wie aus Abb. 7 ersichtlich, lässt sich die Struktur jeweils durch feine Streifen in $x-$ und $y-$Richtung abtasten. Innerhalb jedes Streifens in $x-$Richtung treten nur Grenzflächen parallel zur $y-$Achse auf und umgekehrt.

Li definiert eine neue Klammer-Schreibweise, die hier kurz erläutert wird. Mit $[\![\lceil\varepsilon\rceil]\!]$ wird eine Matrix bezeichnet, bei deren Berechnung die dielektrische Konstante zunächst in jedem Streifen in $x-$Richtung bzgl. der $x-$Koordinate Fourier-entwickelt wird, während sie bzgl. der $y-$Koordinate im Ortsraum verbleibt. Das Ergebnis dieser Rechnung wird für jeden Wert der $y-$Koordinate in Toeplitz-Gestalt angeordnet und invertiert. Danach wird bzgl. der $y-$Koordinate Fourier-entwickelt und die Fourier-Koeffizienten innerhalb von Blöcken in Toeplitz-Gestalt gebracht.

Bei einer zweiten Matrix $[\![\lfloor\varepsilon\rfloor]\!]$ erfolgt die Prozedur in genau umgekehrter Reihenfolge. Die dielektrische Konstante wird in jedem Streifen in $y-$Richtung bzgl. y Fourier-entwickelt und das Ergebnis in Toeplitz-Gestalt angeordnet und invertiert. Danach wird bzgl. der $x-$Koordinate Fourier-entwickelt und die Fourier-Koeffizienten blockweise in Toeplitz-Gestalt gebracht.

Der Ausdruck $[\![\lceil\varepsilon\rceil]\!][E]$ behandelt daher an jeder Grenzfläche parallel zur $y-$Achse das Produkt nach der inversen Regel und an jeder Grenzfläche parallel zur $x-$Achse nach der Laurent'schen Regel. Bei $[\![\lfloor\varepsilon\rfloor]\!][E]$ ist die Lage genau umgekehrt. Ohne dass hier die Li'sche Formulierung vollständig hergeleitet wird, wird damit anschaulich, dass in Gl. (24d) die Ersetzung $[\![\varepsilon]\!] \rightarrow [\![\lceil\varepsilon\rceil]\!]$ und in Gl. (24e) die Ersetzung $[\![\varepsilon]\!] \rightarrow [\![\lfloor\varepsilon\rfloor]\!]$ eine korrekte Behandlung des Produkts εE ermöglicht. Denn in Gl. (24d) tritt die $x-$Komponente des elektrischen Feldes auf, die bzgl. Kurvenstücken parallel zur $y-$Achse normal und bzgl. Kurvenstücken parallel zur $x-$Achse tangential ist. In Gl. (24e) ist die $y-$Komponente enthalten, so dass wiederum genau das Umgekehrte gilt.

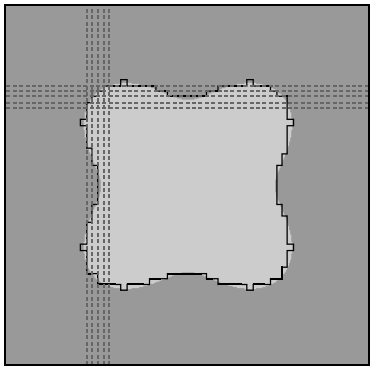


Abbildung 7: Zickzack-Näherung der Li'schen Formulierung für die RCWA an Kreuzgitterstrukturen. Dargestellt ist der Fall eines rechtwinkligen Gitters, wie er auch in MicroSim implementiert ist. Lis Formulierung umfasst dagegen auch schiefwinklige Gitter.

Damit ist, um wieder in der durchweg hier gewählten Darstellung zu bleiben, die Li'sche Formulierung durch folgende Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$ charakterisiert:

$$\mathbf{Q}_\varepsilon = \begin{bmatrix} \lceil\!\lceil \varepsilon \rceil\!\rceil & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lceil\!\lfloor \varepsilon \rfloor\!\rceil & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & [\![\varepsilon]\!] \end{bmatrix} \tag{38}$$

Diese ergibt wie oben die Systemmatrizen der beiden äquivalenten DGl-Systeme 1. und 2. Ordnung:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{Li}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & \lceil\!\lceil \varepsilon \rceil\!\rceil - \mathbf{K}_y^2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2 - \lceil\!\lfloor \varepsilon \rfloor\!\rceil & -\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{39}$$

$$\mathbf{\Omega}_{\mathrm{Li}} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_y^2 + \lceil\!\lceil \varepsilon \rceil\!\rceil\mathbf{B} & [\mathbf{K}_x - \lceil\!\lceil \varepsilon \rceil\!\rceil\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}]\mathbf{K}_y \\ [\mathbf{K}_y - \lceil\!\lfloor \varepsilon \rfloor\!\rceil\mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}]\mathbf{K}_x & \mathbf{K}_x^2 + \lceil\!\lfloor \varepsilon \rfloor\!\rceil\mathbf{D} \end{bmatrix} \tag{40}$$

Nach dieser Übersicht über verschiedene Formulierungen der RCWA soll abschließend nochmals darauf hingewiesen werden, dass alle wiedergegebenen Darstellungen durch Systemmatrizen **M** in block-antidiagonaler Gestalt gekennzeichnet sind. Ein voll besetztes **M** ist nach dem bislang nur in Form eines Postulats, Gl. (25), eingeführten quasi-tensoriellen Zusammenhang zwischen den Fouriervektoren von elektrischem Feld und dielektrischer Verschiebung und der daraus resultierenden allgemeinen Systemmatrix aus Gl. (27) bzw. Tabelle 1 aber nicht undenkbar. Es gibt auch Formulierungen der RCWA, bei denen die Diagonal-Blöcke von **M** besetzt sind, allerdings nicht in dieser allgemeinen Darstellung sondern nur für den TM Fall bei 1D periodischen Gittern [Li2000][Pop2002]. Diese stellen Mischformen aus RCWA und Differentieller Methode dar und werden im folgenden Kapitel erläutert, da sie dann besser verständlich gemacht werden können. Erstaunlicherweise ist offenbar keine systematische Untersuchung dieser Methoden für 2D periodische Strukturen bekannt. Solch eine Untersuchung und vor allem ein Vergleich mit der im Folgenden vorgeschlagenen Verwendung von Normalenvektoren in der RCWA erscheint lohnend, da zwar einerseits mit der Mischform ein besseres Konvergenzverhalten bzgl. der Fourier-Moden zu erwarten ist, wobei aber andererseits durch die Systemmatrix doppelter Größe wieder ein Rechenzeitnachteil entsteht. Hiermit ist gemeint, dass statt **Ω** nun die Matrix **M** diagonalisiert werden müsste, weil eine Umwandlung in ein System 2. Ordnung durch einfaches ineinander Einsetzen der Gleichungen nicht mehr möglich ist. Es wäre interessant zu untersuchen, welcher dieser beiden gegenläufigen Effekte bestimmend ist und welche Methode schließlich mit geringeren Rechenzeiten auskommt.

3.2 Formulierung der RCWA auf Grundlage der Fast Fourier Factorization

Wie bereits erwähnt, besteht der Beitrag dieser Arbeit darin, die Fast Fourier Factorization [Pop2001][Pop2003] von Popov und Nevière von der Differentiellen Methode auf die RCWA zu übertragen. Hierzu ist das Aufstellen adäquater Normalenvektorfelder (NV-Felder) nötig. Unter Fast Fourier Factorization verstehen Popov und Nevière eine Methode zur Erfüllung der Li'schen Regeln, bei der im Ortsraum an jedem Punkt einer Materialgrenzfläche die Orientierung derselben durch den jeweiligen Normalenvektor gekennzeichnet wird.

Durch eine Projektion des elektrischen Feldes auf diesen Vektor erfolgt lokal im Ortsraum eine Zerlegung in dessen Normal- und Tangentialkomponente. Für jede der Komponenten kommt die jeweils korrekte Li'sche Regel zur Anwendung, für die Tangentialkomponente die Laurent'sche Faltungsregel und für die Normalkomponente die inverse Regel. *Erst nach der Zerlegung* wird also das Problem in den diskreten Fourier-Raum transformiert. Die Information über die lokale Orientierung der Grenzflächen im Ortsraum wird in den Fourier-Raum übertragen, indem auch die NV-Felder Fourier-entwickelt und in Form von Toeplitz-Matrizen geschrieben werden. Zu diesem Zweck ist eine Fortsetzung der eigentlich nur an der Grenzfläche selbst klar definierten Normalenvektoren in die gesamte Elementarzelle des Gitters nötig. Die Art dieser Fortsetzung ist nicht offensichtlich und stellt den kritischen Punkt sowohl der Differentiellen Methode als auch der RCWA dar. Die Frage nach einer optimalen Methode dieser Fortsetzung wird von Popov und Nevière [Pop2003] nur für den Fall der Differentiellen Methode und hierfür nur unzureichend beantwortet.

Die eben beschriebene Zerlegung des elektrischen Feldes im Ortsraum durch Projektion auf den Normalenvektor führt schließlich auf eine Darstellung einer *nicht-diagonalen* Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$ und liefert damit die Begründung, warum der in Gl. (25) beschriebene Zusammenhang als allgemeinste Darstellung des Produkts $\varepsilon\mathbf{E}$ im Fourier-Raum angenommen wurde. Es sind die Normal- und Tangentialkomponente des elektrischen Feldes gegeben durch

$$\mathbf{E}_N = \mathbf{N}\,(\mathbf{N}\cdot\mathbf{E}) = (\mathbf{N}\otimes\mathbf{N})\,\mathbf{E},\ \mathbf{E}_T = \mathbf{E} - \mathbf{E}_N, \tag{41}$$

wobei $\mathbf{N}$ der Normalenvektor ist, $\otimes$ das dyadische Produkt zweier Vektoren und das Multiplikationszeichen deren Skalarprodukt kennzeichnet. Wendet man für die Normalkomponente die inverse und für die Tangentialkomponente die Laurent'sche Faltungsregel an, so erhält man die Fourier-Koeffizienten der dielektrischen Verschiebung:

$$[\mathbf{D}_N] = \left[\!\!\left[\frac{1}{\varepsilon}\right]\!\!\right]^{-1} [\![\mathbf{N}\otimes\mathbf{N}]\!]\,[\mathbf{E}],\ [\mathbf{D}_T] = [\![\varepsilon]\!]\,[\mathbf{E}] - \left[\!\!\left[\frac{1}{\varepsilon}\right]\!\!\right]^{-1} [\![\mathbf{N}\otimes\mathbf{N}]\!]\,[\mathbf{E}] \tag{42}$$

Die Summe aus beiden liefert die Fourier-Koeffizienten der gesamten dielektrischen Verschiebung und damit die Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$, wie sie von Popov und Nevière definiert wurde:

$$[\mathbf{D}] = \mathbf{Q}_\varepsilon[\mathbf{E}] \text{ mit } \mathbf{Q}_\varepsilon = [\![\varepsilon]\!] - \underbrace{\left([\![\varepsilon]\!] - \left[\!\left[\frac{1}{\varepsilon}\right]\!\right]^{-1}\right)}_{\boldsymbol{\Delta}} [\![\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}]\!] \tag{43}$$

In ausführlicherer Darstellung lautet die Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$:

$$\mathbf{Q}_\varepsilon = \begin{bmatrix} [\![\varepsilon]\!] - \boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_x^2\right]\!\right] & -\boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_xN_y\right]\!\right] & -\boldsymbol{\Delta}\,[\![N_xN_z]\!] \\ -\boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_xN_y\right]\!\right] & [\![\varepsilon]\!] - \boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_y^2\right]\!\right] & -\boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_yN_z\right]\!\right] \\ -\boldsymbol{\Delta}\,[\![N_xN_z]\!] & -\boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_yN_z\right]\!\right] & [\![\varepsilon]\!] - \boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_z^2\right]\!\right] \end{bmatrix} \tag{44}$$

Diese Matrix in der hier dargestellten allgemeinsten Form führt zu einem Grundgleichungssystem gemäß Gl. (27), wie es als Grundlage für die Neuformulierung der Differentiellen Methode nach Popov und Nevière dient. Es lässt eine beliebige Orientierung der Grenzfläche im Raum und damit des Normalenvektors zu. Insbesondere dürfen die Normalenvektoren z–Komponenten $\neq 0$ aufweisen. In der Orientierung der Grenzflächen besteht ja gerade der entscheidende Unterschied zwischen Differentieller Methode und RCWA.

Wie am Ende von Kapitel 3.1 angedeutet, lässt sich eine Mischform aus RCWA und Differentieller Methode formulieren, die bzgl. der Lösung des DGl-Systems senkrechte Wände fordert, um, wie in der RCWA, eine Lösung durch Matrix-Diagonalisierung verwenden zu können, die aber bzgl. der Anwendung der Li'schen Regeln durch Zerlegung des elektrischen Feldes an der Grenzfläche eine beliebige Orientierung der Grenzfläche zulässt. Hierbei ist die Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$ aus Gl. (44) anzuwenden und somit ein Eigenwertproblem der doppelten Größe der bislang vorgestellten Formulierungen der RCWA zu lösen. Li [Li2000] und Popov et al. [Pop2002] stellen solche Formulierungen vor, allerdings nur für 1D periodische Gitter ausformuliert. Eine Untersuchung dieser Mischform für 2D periodische Gitter sowie ein Vergleich der Rechenzeiten mit der im Folgenden dargestellten RCWA bei Verwendung von Normalenvektoren wie auch mit der Diffenerentiellen Methode, erscheint lohnend.

Will man im Gegensatz zur Differentiellen Methode oder zu Mischformen beider Methoden aber gerade die block-antidiagonale Gestalt der Systemmatrix $\mathbf{M}$ des DGl-Systems 1. Ordnung erhalten und somit eine Reduktion des Systems auf ein System 2. Ordnung halber Größe ermöglichen, so muss $N_z = 0$ gefordert werden. Das heißt, man fordert die senkrechten Wände in jeder einzelnen Schicht nicht nur im Sinne einer in z konstanten Systemmatrix und damit im Hinblick auf die Lösung des DGl-Systems durch Eigenwertbestimmung, sondern bewusst auch für die Zerlegung des elektrischen Feldes an der Grenzfläche. Der beste Grund dies zu fordern ist schlicht der, dass Strukturen betrachtet werden, deren Grenzflächen ohnehin senkrecht sind, also z.B. Gitter die aus periodisch angeordneten Löchern oder Säulen bestehen.

Es ist jedoch eine naheliegende Vermutung, dass auch für schräge, aber doch nahezu senkrechte Wände, wie sie typischerweise bei realistischen Prozessen, etwa Ätzprozessen, entstehen, diese Formulierung von Vorteil ist. Es besteht die Hoffnung, dass der durch die leicht fehlerhaft angenommene Orientierung der Grenzfläche eingeführte Fehler ausreichend

klein ist, so dass sich durch die Reduktion des DGl-Systems auf halbe Größe insgesamt noch immer geringere Rechenzeiten bei gleicher Genauigkeit des Ergebnisses ergeben als ohne die Forderung senkrechter Wände.

Die Vermutung wird noch gestärkt durch die Tatsache, dass nahezu senkrechte Seitenwände von Löchern bei Aufstellen des NV-Feldes ohne die Forderung $N_z = 0$ zu starken Änderungen im NV-Feld in unmittelbarer Umgebung der Grenzfläche führen. Dies ist nicht verwunderlich, da sich die Orientierung ja tatsächlich stark ändert. Trotzdem könnte eine solche Wahl des NV-Feldes von Nachteil sein, da die starke Änderung durch wenige Fourier-Moden nur unzureichend dargestellt werden kann. Der Sinn der Einführung von Normalenvektoren besteht aber gerade darin, Fourier-Moden einzusparen. Die angestellten Überlegungen sind aber rein anschaulicher Natur und bleiben bis zu ausführlicheren Untersuchungen des Sachverhalts, die im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr erfolgen konnten, letztlich Spekulation. Sie untermauern aber die Relevanz der hier dargestellten Arbeiten nicht nur im Hinblick auf Strukturen mit vollständig senkrechten Wänden sondern auch zum Einsatz bei beliebigen Strukturen.

Die Forderung $N_z = 0$ führt mit Gl. (44) zu folgender Matrix $\mathbf{Q}_\varepsilon$:

$$\mathbf{Q}_\varepsilon = \begin{bmatrix} [\![\varepsilon]\!] - \boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_x^2\right]\!\right] & -\boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_x N_y\right]\!\right] & 0 \\ -\boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_x N_y\right]\!\right] & [\![\varepsilon]\!] - \boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_y^2\right]\!\right] & 0 \\ 0 & 0 & [\![\varepsilon]\!] - \boldsymbol{\Delta}\left[\!\left[N_z^2\right]\!\right] \end{bmatrix} \tag{45}$$

Setzt man diese, wie in Kapitel 3.1 bei allen bisherigen RCWA Formulierungen gezeigt, in die allgemeine Darstellung der Matrix $\mathbf{M}$ gemäß Tabelle 1 ein, so erhält man wieder eine blockantidiagonale Systemmatrix $\mathbf{M}_{\mathrm{NV}}$, und durch Multiplikation der beiden Blöcke die Systemmatrix eines Systems 2. Ordnung mit halber Größe $\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{NV}}$. Die beiden Matrizen lauten:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{NV}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x\mathbf{K}_y + \boldsymbol{\Delta}[\![N_x N_y]\!] & -\mathbf{K}_y^2 + [\![\varepsilon]\!] - \boldsymbol{\Delta}[\![N_x^2]\!] & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2 - [\![\varepsilon]\!] + \boldsymbol{\Delta}[\![N_y^2]\!] & -\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y + \boldsymbol{\Delta}[\![N_x N_y]\!] & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{46}$$

$$\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{NV}} = \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{MG}} + \begin{bmatrix} -\Delta[\![N_x^2]\!]\mathbf{B} - \Delta[\![N_x N_y]\!]\mathbf{F} & \Delta[\![N_x N_y]\!]\mathbf{D} + \Delta[\![N_x^2]\!]\mathbf{G} \\ \Delta[\![N_x N_y]\!]\mathbf{B} + \Delta[\![N_y^2]\!]\mathbf{F} & -\Delta[\![N_y^2]\!]\mathbf{D} - \Delta[\![N_x N_y]\!]\mathbf{G} \end{bmatrix} \tag{47}$$

Hierbei ist $\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{MG}}$ die Systemmatrix des Systems 2. Ordnung aus der ursprünglichen Formulierung von Moharam und Gaylord, Gl. (30). Die Matrizen $\mathbf{B}$ und $\mathbf{D}$ sind Abkürzungen, die bereits in Gl. (31) definiert wurden, und die Matrizen $\mathbf{F}$ und $\mathbf{G}$ die folgenden zusätzlichen Abkürzungen:

$$\mathbf{F} = \mathbf{K}_y[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_x \tag{48a}$$

$$\mathbf{G} = \mathbf{K}_x[\![\varepsilon]\!]^{-1}\mathbf{K}_y \tag{48b}$$

Die Matrix $\mathbf{M}_{\mathrm{NV}}$ wurde bereits von Popov und Nevière aufgestellt, Gl. IX.28 in [Pop2003] ist äquivalent zu Gl. (46). Die Autoren weisen darauf hin, dass die Frage nach einem optimalen NV-Feld in ihrer Darstellung offen bleibt. Dies gab den Anstoß zu den hier dargestellten Untersuchungen. Die Ergebnisse wurden in [Sch2007a] veröffentlicht. Die Inhalte dieser Veröffentlichung werden im Folgenden dargestellt[5].

3.3 Vergleich verschiedener Formulierungen anhand instruktiver Beispiele

Bevor in Kapitel 3.4 Strategien zur Aufstellung des NV-Feldes entwickelt werden, sollen die verschiedenen Formulierungen nach Moharam und Gaylord, nach Li und die NV-Formulierung anhand instruktiver Beispiele verglichen werden. Die NV-Felder sind hierbei entweder trivial aufzustellen oder werden als Ergebnisse aus Kapitel 3.4 zunächst vorweggenommen, um die grundlegenden Eigenschaften der verschiedenen Formulierungen zu untersuchen. Zu diesem Zweck wird zunächst eine kurze Einführung in die Methodik von MicroSim gegeben.

Für eine flexible Anwendbarkeit der RCWA auf beliebige laterale Brechzahlverteilungen werden die 2D Fourier-Reihen im allgemeinen Fall mithilfe der schnellen Fourier-Transformation (Fast Fourier Transform, FFT) aufgestellt. Hierzu wird die Brechzahlverteilung in der Elementarzelle in einem Pixelraster mit variabler Abtastrate dargestellt. Nach der FFT werden nur so viele Fourier-Koeffizienten zurückbehalten, wie durch die für den RCWA-Algorithmus gewählte Modenzahl vorgegeben. Die Anzahl der Abtastpunkte entlang jeder der beiden lateralen Koordinatenachsen ist dem Benutzer als freier Parameter zugänglich. Für die folgenden Beispiele wurden meist 2048 Abtastpunkte gewählt, zum Teil auch nur 512, was sich in vielen Fällen als ausreichend herausgestellt hat. Bei sehr detailreichen Strukturen innerhalb der Elementarzelle zeigt sich aber, dass selbst 2048 kein ausreichender Wert ist. Das Aufstellen der Fourier-Koeffizienten kann in diesem Fall an die Grenzen der benötigten Genauigkeit geraten. Daher wurde am ITO[6] auch ein Algorithmus implementiert, der eine einzelne Kavität in der Elementarzelle in Drei- und Vierecke zerlegt, die dann analytisch Fourier-entwickelt werden können. Dieser kommt aber in dieser Arbeit nicht zum Einsatz.

Die Zeilen und Spalten des erwähnten Pixelrasters werden außerdem für die in Kapitel 3.1 nur kurz umrissene Aufstellung der Li'schen BTTB Matrizen $[\![\lceil\varepsilon\rceil]\!]$ und $[\![\lfloor\varepsilon\rfloor]\!]$ verwendet. Da für die NV-Formulierung neben den Toeplitz-Matrizen der dielektrischen Konstanten auch diejenigen der NV-Feldkomponenten benötigt werden, müssen für eine allgemeine Behandlung mittels FFT auch die Fourier-Koeffizienten der NV-Feldkomponenten auf einem Pixelraster berechnet werden.

5 Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, dass Teile hiervon, insbesondere die Betrachtungen zu schrägen 1D periodischen Gittern sowie zum Schachbrett-Gitter in weiten Teilen vom Co-Autor von [Sch2007a], Johannes Ruoff, Carl Zeiss Oberkochen, erarbeitet wurden. Ebenso geht die in Kapitel 3.4.2 ausgeführte Idee, Schwarz-Christoffel-Transformationen zur Aufstellung des NV-Feldes anzuwenden, auf ihn zurück.

6 von Stephan Rafler

3.3.1 Schräges Liniengitter

Als erstes Beispiel wird ein Liniengitter betrachtet, dessen Linien schräg unter einem Winkel von $\alpha = 45°$ in einer quadratischen Elementarzelle liegen. Das Gitter ist in Abb. 8 (a) dargestellt. Es ergibt sich ein senkrecht zu den Linien periodisch fortgesetztes Linienmuster. Bei diesem Gitter handelt es sich um ein 1D periodisches Problem, das in der Praxis natürlich nicht durch die Wahl der schrägen Orientierung unnötig kompliziert beschrieben würde. Hier geht es allein darum, die verschiedenen RCWA Formulierungen zu vergleichen und insbesondere die Auswirkung der Li'schen Zickzack-Näherung zu demonstrieren. Zu diesem Zweck wird das Problem in ein scheinbar 2D periodisches Problem transformiert.

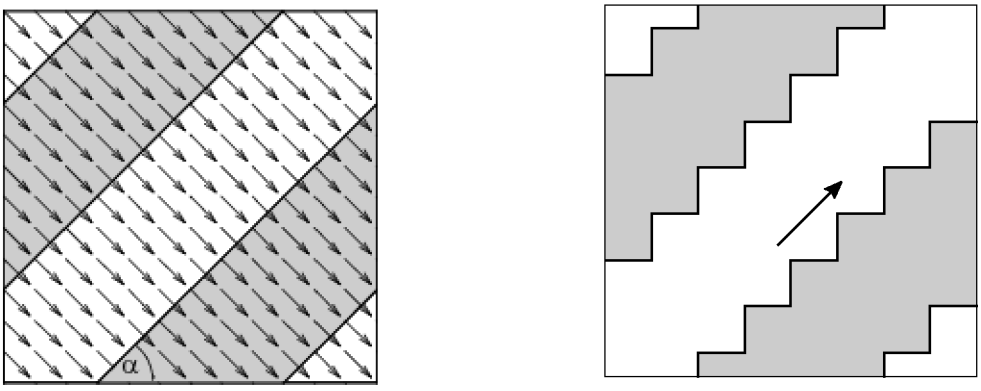
Das NV-Feld für dieses Gitter kann innerhalb der gesamten Elementarzelle konstant gewählt werden und ist gegeben durch:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} -\sin\alpha \\ \cos\alpha \end{bmatrix} \tag{49}$$

Als konstante Funktion enthält die Fourier-Reihe des NV-Feldes nur den Entwicklungskoeffizient nullter Ordnung, so dass die Toeplitz-Matrizen der NV-Komponenten in der Systemmatrix $\mathbf{M}_{\mathrm{NV}}$, Gl. (46), sich zu Skalaren reduzieren. Da sich die unterschiedlichen Formulierungen der RCWA nur auf den linken unteren Block von $\mathbf{M}$ auswirken, wird hier nur dieser dargestellt und mit $\mathbf{M}_{\mathrm{LU}}$ bezeichnet. Es ergibt sich:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{LU}} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_x\mathbf{K}_y + \mathbf{\Delta}\sin\alpha\cos\alpha & -\mathbf{K}_y^2 + [\![\varepsilon]\!]\cos^2\alpha + [\![1/\varepsilon]\!]^{-1}\sin^2\alpha \\ \mathbf{K}_x^2 - [\![\varepsilon]\!]\sin^2\alpha + [\![1/\varepsilon]\!]^{-1}\cos^2\alpha & -\mathbf{K}_x\mathbf{K}_y + \mathbf{\Delta}\sin\alpha\cos\alpha \end{bmatrix} \tag{50}$$

Für $\alpha = 90°$ ergibt sich die in der Literatur übliche Darstellung von 1D periodischen Gittern, bei der die Linien parallel zur $y-$Achse verlaufen. Da wie in Kapitel 3.1 erläutert die Anwendung der Li'schen Regeln für den Fall 1D periodischer Gitter unproblematisch ist, ist es nicht



(a) (b)

Abbildung 8: Liniengitter mit schräg im xy–Koordinatensystem verlaufenden Gitterlinien. Dargestellt und für die Rechnung verwendet ist nur der Winkel $\alpha = 45°$. (a) Das NV-Feld kann konstant gewählt werden. (b) Die Li'sche Zickzack-Beschreibung vermischt im TE-Fall die Laurent'sche und die inverse Regel, obwohl die Laurent'sche Regel anzuwenden wäre.

verwunderlich, dass sich Gl. (50) in diesem Fall auf den linken unteren Block von Gl. (33) reduziert. Es ergibt sich also die von Lalanne und Morris sowie Granet und Guizal vorgestellte Neuformulierung für 1D periodische Gitter.

Ein ähnliches Ergebnis erhält man für $\alpha = 0°$, nur dass hier gegenüber Gl. (33) die Matrizen $[\![\varepsilon]\!]$ und $[\![1/\varepsilon]\!]^{-1}$ gerade vertauscht sind. Auch das entspricht unseren Erwartungen, denn für $\alpha = 0°$ laufen die Gitterlinien entgegen der üblichen Konvention in x–Richtung, so dass die x– und y–Komponenten des elektrischen Feldes ihre Rolle als Normal- bzw. Tangentialkomponente gegenüber dem Fall $\alpha = 90°$ wechseln. Wie in [Sch2007a] gezeigt wird, ergibt sich Gl. (50) auch ohne Herleitung aus der allgemeinen NV-Formulierung, indem man sowohl die Felder als auch die Systemmatrix gemäß Gl. (33) mittels einer Drehmatrix in ein neues Koordinatensystem transformiert.

Betrachten wir nun das Konvergenzverhalten der verschiedenen Formulierungen. Als Beispiel wurde ein Liniengitter mit Periode 2λ und Gitterstegen aus Glas mit Brechzahl $n = 1.5$ gewählt. Die Brechzahl im Cover war ebenfalls $n = 1.5$, im Substrat $n = 1$. Die Modenzahl wurde in x– und y–Richtung jeweils gleich gewählt und mit $M = M_x = M_y$ bezeichnet. Abb. 9 zeigt die berechneten Konvergenzkurven. Für 2D periodische Gitter können auf einem gewöhnlichen PC mit 4GB Hauptspeicher maximal 13 oder 14 Moden aufgrund des Speicherbedarfs gewählt werden. Daher wurde die Modenzahl in allen gezeigten Konvergenzkurven jeweils von 4 bis 13 variiert. Da es sich in Wahrheit um ein 1D periodisches Problem handelt, lässt sich zum Vergleich das Ergebnis einer 1D Rechnung mit ausreichend hoher Modenzahl berechnen, was hier mit "1D exakt" bezeichnet wird. Wie in Kapitel 2.3 erwähnt, soll für den senkrechten Einfall die Konvention gelten, dass mit TE die Polarisation bezeichnet wird, bei der der elektrische Feldvektor parallel zu den Gitterlinien verläuft, mit TM diejenige, bei der er senkrecht darauf steht. Aufgetragen sind jeweils die Beugungseffizienzen in

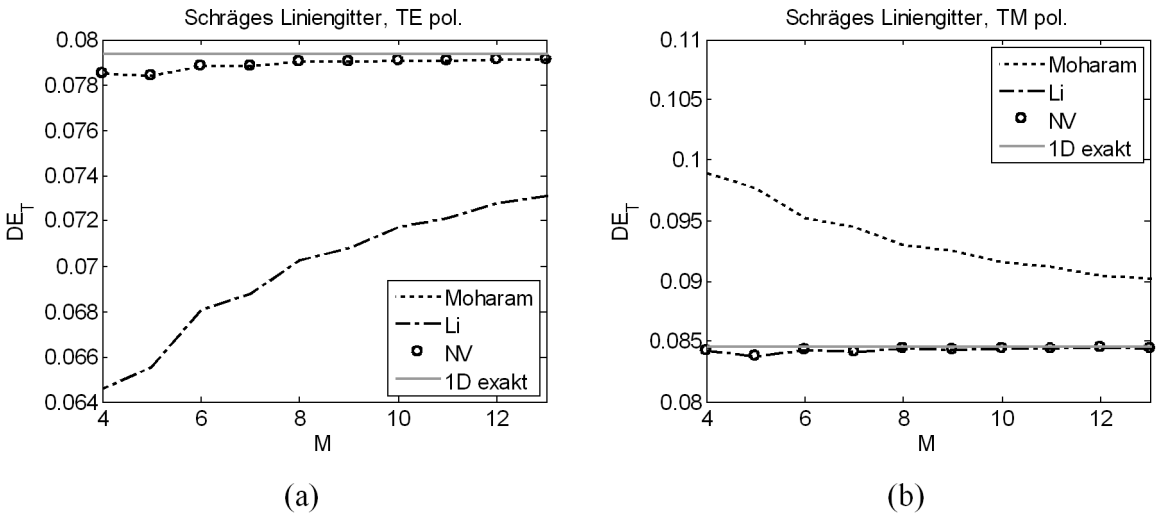


Abbildung 9: Konvergenzkurven in TE und TM Polarisation für senkrechten Einfall. Die Modenzahl M wurde in x– und y–Richtung jeweils gleich gewählt. Es sind die transmittierten Beugungseffizienzen (engl. diffraction efficiency, DE) aufgetragen.

Transmission der nullten Beugungsordnung. Die Berechnung von Beugungseffizienzen ist im Anhang, Gl. (104) dargestellt.

Die Formulierung von Moharam und Gaylord zeigt erwartungsgemäßes Konvergenzverhalten. In TE Polarisation konvergiert sie gut, während sich in TM Polarisation die fehlerhafte Anwendung der Laurent'schen Faltungsregel negativ auswirkt. Das Verhalten der Li'schen Formulierung dagegen erstaunt. Sie zeigt für TE Polarisation langsame Konvergenz, während sie für TM Polarisation gut konvergiert.

Das Verhalten der Li'schen Methode für TE Polarisation ist verständlich. Sie modelliert die schräge Linie als Zickzack-Linie mit lokal stets falscher Orientierung. Das elektrische Feld in TE Polarisation ist bzgl. keinem der Linienstücke Tangentialkomponente, sondern schließt stets einen Winkel von 45° mit der Grenzfläche ein. Es wird also ohne Notwendigkeit eine Mischung aus Laurent'scher und inverser Regel angewendet, obwohl die Laurent'sche Regel anzuwenden wäre. Dieser Sachverhalt wird in Abb. 8 (b) visualisiert. Unverständlich ist dagegen, dass diese Mischung beider Faltungsregeln nicht auch im TM Fall zu schlechter Konvergenz führt, wo ja in diesem Fall nur die inverse Regal anzuwenden wäre. Diese offene Frage wurde auch in [Sch2007a] festgehalten. Li, der auf die erwähnte Veröffentlichung mit einigen Kommentaren reagiert hat, hat hierfür aber auch keine Erklärung gegeben.

Erwartungsgemäß zeigt die NV-Formulierung für beide Polarisationen gutes Konvergenzverhalten und ist jeweils mit der besseren der beiden anderen vergleichbar. Das allein wäre aber noch kein Grund für übertriebenen Optimismus, da ja ein trivialer Fall betrachtet wurde und die Erzeugung von NV-Feldern für kompliziertere Fälle noch zu erläutern ist.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die NV-Formulierung stets gutes Konvergenzverhalten zeigt, und dass sich die Problematik der Li'schen Zickzack-Formulierung gerade bei diagonalen Kanten offenbart, da hier die lokale Orientierung und auch die Länge der Grenzfläche im Modell maximal vom wahren Wert abweicht.

3.3.2 Schachbrettgitter

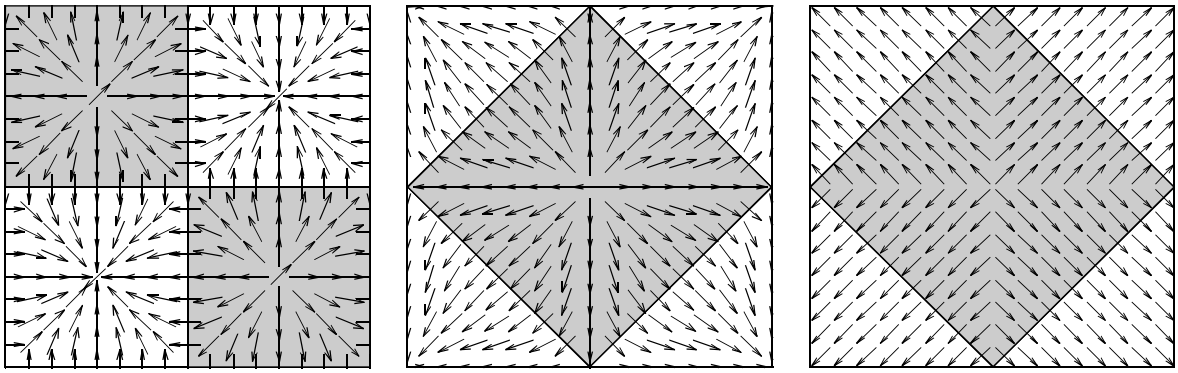
Als nächstes Beispiel wird ein Schachbrettgitter betrachtet. Dasselbe Beispiel hat Li [Li1997] gewählt, um seine Neuformulierung für 2D periodische Gitter zu untersuchen. Es scheint daher besonders gut geeignet, um die Unterschiede zwischen der Li'schen und der NV-Formulierung zu untersuchen.

Abb. 10 zeigt mögliche Elementarzellen und mögliche NV-Felder. Nach Li's Bezeichnung [Li1997] soll die Elementarzelle in (a) als Zelle A bezeichnet werden, die in (b) und (c) als Zelle B. Bei gleicher Seitenlänge der Schachbrett-Quadrate zeichnet sich Zelle B gegenüber Zelle A durch eine Fläche der halben Größe aus. Li verwendet noch eine weitere Zelle, die er mit C bezeichnet, und die ein schiefwinkliges Koordinatensystem verwendet. Da in MicroSim nur die Implementierung der Li'schen Formulierung mit rechtwinkligem Raster vorliegt, wird diese Zelle hier nicht untersucht.

Es ist eine Erfahrungstatsache, dass die RCWA umso schlechter konvergiert, je detailreicher die Struktur in der Elementarzelle, und je größer die Elementarzelle in Bezug auf die Wellenlänge ist. Ersteres liegt schlichtweg daran, dass die Fourier-Reihe der dielektrischen Konstanten mehr Entwicklungsterme benötigt, um die Details mit ausreichender Genauigkeit darzustellen. Letzteres kann man sich am besten veranschaulichen, wenn man von Sub-Wellenlängen-Strukturen ausgeht. Je kleiner diese sind, umso eher erscheinen sie dem Licht als homogenes, anisotropes Medium. Dies ist ja gerade der Gültigkeitsbereich der verschiedenen EMA Formulierungen. Wird die Struktur größer, so setzt Beugung ein, und die Anzahl der propagierenden Beugungsordnungen nimmt schrittweise zu. Da aber die Beugungsordnungen äquivalent zu den Fouier-Moden sind, ist klar, dass größere Strukturen mehr Fourier-Moden für eine exakte Darstellung benötigen.

Aufgrund dieser Erfahrung ist zu erwarten, dass die gegenüber Zelle A nur halb so große Zelle B zu einem verbesserten Konvergenzverhalten führt. Wie sich gleich zeigen wird, ist dies aber für die Li'sche Formulierung nicht der Fall, was auch Li [Li1997] selbst bereits zur Kenntnis nahm. Er wies bei der Veröffentlichung seiner Formulierung darauf hin, dass die Zickzack-Modellierung in diesem Fall offenbar eine nachteilige Auswirkung auf das Konvergenzverhalten zeigt.

Abbildungen 10 (b) und (c) stellen verschiedene mögliche NV-Felder am Beispiel der Zelle B dar. Das Feld in Teilbild (c) wird dadurch festgelegt, dass entlang der Diagonalen des Quadrats Linien-Diskontinuitäten eingeführt werden, an denen das NV-Feld seine Richtung ändert. In den entstehenden Teilgebieten wird das Feld jeweils konstant und senkrecht zur einzigen im Gebiet noch enthaltenen Seitenlinie des Quadrats gewählt. Das NV-Feld in Teilbild (b) wurde mit dem in Kapitel 3.4.2 vorzustellenden Algorithmus auf Grundlage der Schwarz-Christoffel-Transformation erzeugt. Ohne an dieser Stelle bereits auf den Algorithmus selbst einzugehen, kann festgehalten werden, dass das Feld im Gegensatz zu Teilbild (c) keine Lini-



(a) (b) (c)

Abbildung 10: Mögliche Elementarzellen und mögliche NV-Felder für ein Schachbrettgitter. (a) und (b) zeigen ein NV-Feld ohne Linien-Diskontinuitäten, dafür aber mit Punktsingularitäten auf der Grenzfläche. (c) zeigt ein NV-Feld mit Linien-Diskontinuitäten, dafür aber ohne Punktsingularitäten auf der Grenzfläche. Die Zelle (a) wurde von Li als Zelle A bezeichnet, die Zelle in (b) und (c) als Zelle B.

en-Diskontinuitäten aufweist, dafür aber Punktsingularitäten, die sogar auf den Materialgrenzflächen liegen, also dort, wo das NV-Feld eigentlich nur benötigt wird.

Abb. 11 zeigt die Konvergenzkurven für das Schachbrettgitter. Die Gitterdaten wurden wie in [Li1997] gewählt. Die Seitenlänge der Schachbrettquadrate ist 1.25λ, die Höhe λ. Das Material ist ebenfalls Glas mit der Brechzahl $n = 1.5$, wobei auch das Cover aus Glas besteht und das Substrat aus Luft. Dargestellt ist wieder die Beugungseffizienz in Transmission, wobei die Polarisation parallel zur Seitenlinie der Quadrate gewählt ist. Die Teilbilder 11 (a) und (b) zeigen die nullte und erste Beugungsordnung für Zelle A, (c) und (d) für Zelle B.

Für Zelle A zeigen die Li'sche Formulierung und die NV Formulierung mit beiden möglichen NV-Feldern sehr ähnliches Konvergenzverhalten. Hier kann wohl keine Methode als überlegen angesehen werden. Für Zelle B zeigt sich die erwartete Konvergenzverbesserung durch die Wahl einer kleineren Elementarzelle im Falle der NV Formulierung. Die Li'sche Methode hat dagegen sogar schlechtere Konvergenz als als für Zelle A. Wie bereits oben er-

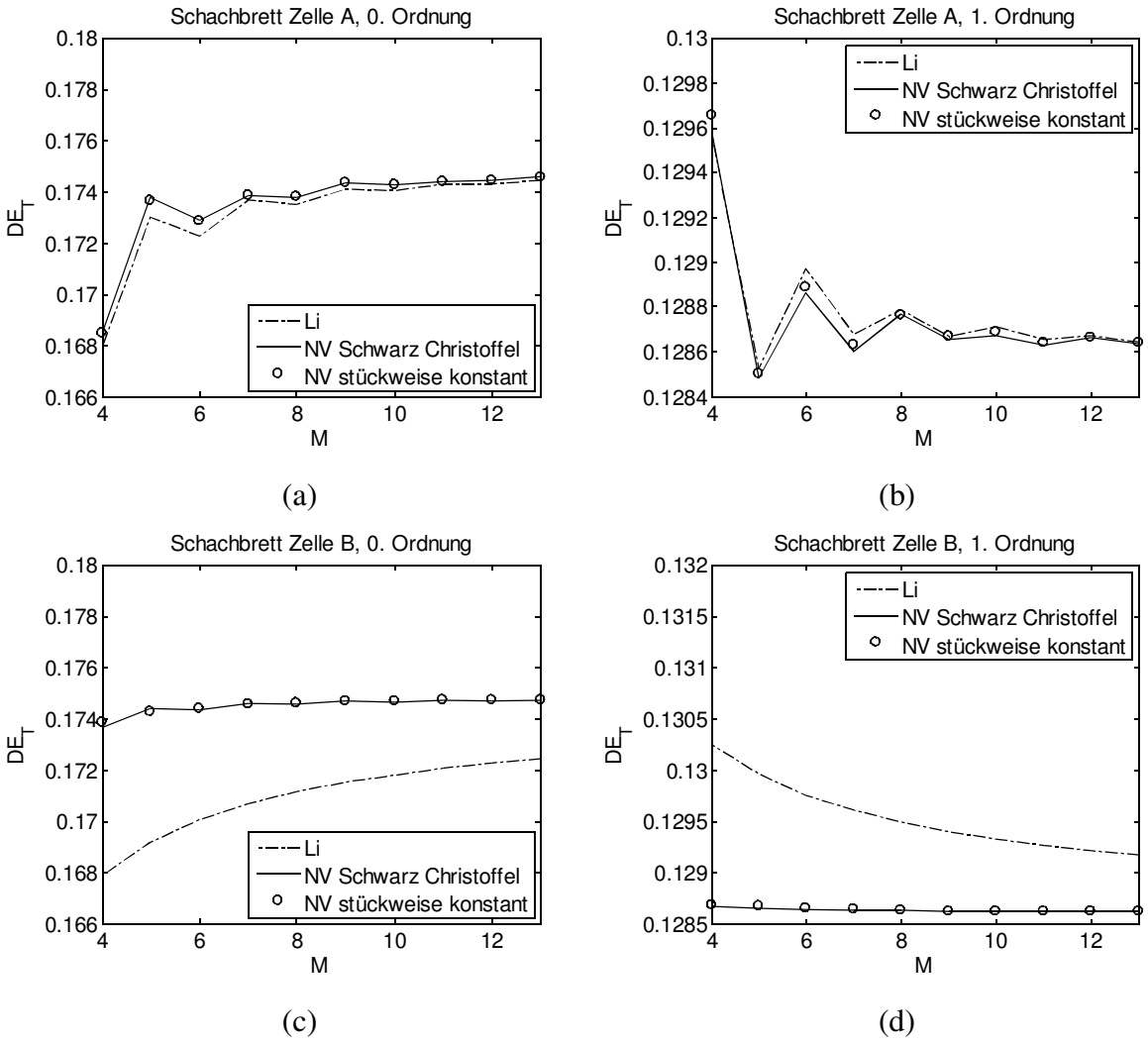


Abbildung 11: Konvergenzkurven für Schachbrett-Gitter. Die Polarisation ist parallel zur Seitenlinie des Schachbrett-Quadrats. (a) und (b) zeigen Zelle A (c) und (d) Zelle B. (a) und (c) stellen die 0. Beugungsordnung dar, (b) und (d) die 1.

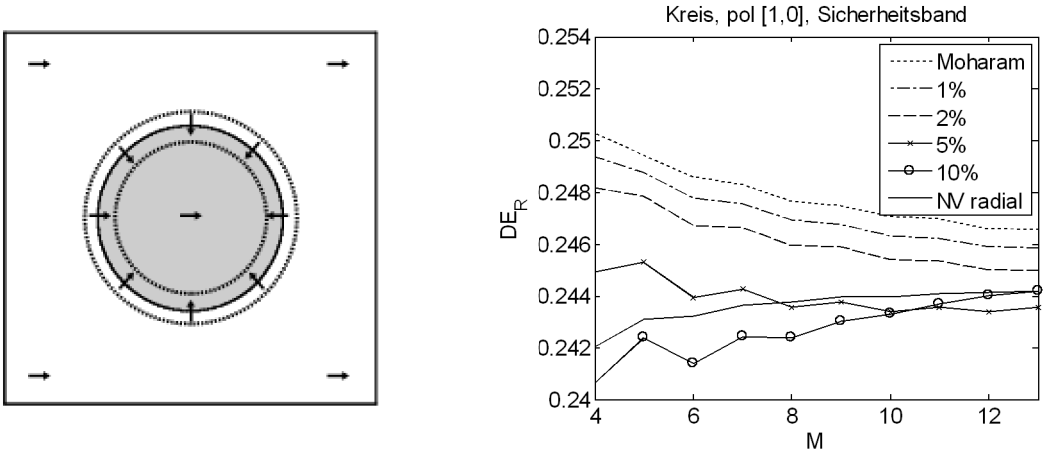
wähnt, offenbart sich hier wie im Fall des schrägen Liniengitters ein negativer Einfluss der Zickzack-Näherung.

Dass die Li'sche Formulierung für Zelle A ebenso gut konvergiert wie die NV Formulierung, ist nicht verwunderlich. In diesem Fall kommt ja die Zickzack-Näherung nicht zum Tragen, da die Materialgrenzflächen ohnehin parallel zu den Achsen des kartesischen Koordinatensystems verlaufen.

3.4 Strategien zur Aufstellung des Normalenvektorfeldes

3.4.1 Vorüberlegungen

Es wurde bereits hervorgehoben, dass die auferlegte Beschränkung $N_z = 0$ den Vorteil einer block-antidiagonalen Gestalt der Systemmatrix **M** und somit einer möglichen Reduzierung der Systemgröße mit sich bringt. Wie die beiden in Abb. 10 vorgestellten möglichen NV-Felder für ein Schachbrettgitter demonstrieren, kommen die möglichen NV-Felder nicht ohne Diskontinuitäten aus. Man hat die Wahl zwischen Punktsingularitäten, die schlimmstenfalls sogar auf der Materialgrenzfläche zu liegen kommen, und Linien-Diskontinuitäten, deren Verläufe innerhalb der Elementarzelle von einem geeigneten Algorithmus beliebig platziert werden können. Das Schachbrettgitter weist gegenüber den in Kapitel zu 3.4.3 betrachtenden Beispielen von periodisch angeordneten konvexen Kavitäten den Vorteil auf, dass die Punktsingularitäten, wenn sie schon teilweise auf der Materialgrenzfläche zu liegen kommen, wenigstens an den Ecken platziert werden können, wo die Orientierung des NV-Feldes ohnehin unbestimmt ist, vgl. Abb. 10 (a). Diese Wahl wird nur durch die spezielle Symmetrie der Schachbrettanordnung ermöglicht.



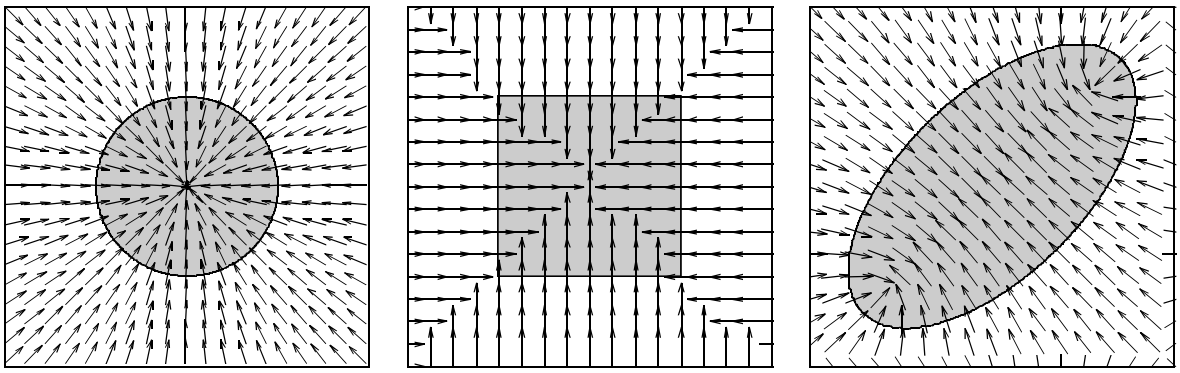
(a) (b)

Abbildung 12: Empirische Untersuchung des Einflusses einer starken Änderung des NV-Feldes in der Nähre einer Grenzfläche. (a) skizziert das für eine beispielhaft betrachtete kreisförmige Kavität verwendete NV-Feld, das innerhalb eines "Sicherheitsbandes" von konzentrischen Kreisen in radiale Richtung und außerhalb konstant in positive x–Richtung weist. (b) zeigt eine Schar von Konvergenzkurven, wobei die Breite des Sicherheitsbandes, bezogen auf die Seitenlänge der Elementarzelle, als Scharparameter verwendet wird.

Da das NV-Feld nur an der Grenzfläche benötigt wird, besteht ein naheliegender Ansatz für dessen Fortsetzung darin, das Feld in einer kleinen Umgebung der Grenzfläche sehr glatt fortzusetzen. Dies kann etwa durch Tiefpassfilterung einer scan-konvertierten[7] Darstellung des NV-Feldes an der Materialgrenze geschehen, wobei daneben das Feld aber willkürlich gewählt wird. Dieser Ansatz wird in Abb. 12 (a) für einen Kreis dargestellt. Für dieses Beispiel sind nicht einmal numerische Methoden zu einer glatten Fortsetzung innerhalb einer kleinen Umgebung der Grenzfläche notwendig, ein in radialer Richtung orientiertes Feld erscheint für diesen Zweck ideal geeignet. Die Umgebung der Grenzfläche soll mit dem anschaulichen Begriff "Sicherheitsband" bezeichnet werden. Man kann sich nun fragen, wie breit man das Sicherheitsband wählen muss, um ein geeignetes NV-Feld zu erhalten.

Abb. 12 (b) zeigt Konvergenzkurven für $x-$polarisiertes Licht bei senkrechtem Einfall mit verschiedenen Breiten des Sicherheitsbandes, die Breite ist dabei relativ zur Seitenlänge der Elementarzelle angegeben. Zum Vergleich sind auch die Formulierung von Moharam und Gaylord, die einem in positiver $x-$Richtung orientierten NV innerhalb der gesamten Elementarzelle entspricht, sowie ein über die gesamte Zelle radial gewähltes Feld aufgeführt. Letzteres wird in Abb. 13 (a) visualisiert. Die Konvergenzkurven zeigen einen graduellen Übergang zwischen der schlechten Konvergenz der Moharam'schen Formulierung und der NV-Formulierung mit einem NV-Feld, das in maximaler Umgebung der Materialgrenzfläche glatt ist.

Aus dieser Betrachtung lässt sich wenigstens als grobe Faustregel ableiten, dass Sprünge im NV-Feld soweit wie möglich von Materialgrenzflächen entfernt zu platzieren sind. Dies leuchtet auch anschaulich ein, da ein Sprung des NV-Feldes in der Nähe einer Materialgrenzfläche mit wenigen Fourier-Koeffizienten nur unzureichend dargestellt werden kann, was an der Grenzfläche zu einer leicht falschen Orientierung des als Fourier-Reihe synthetisierten



(a) (b) (c)

Abbildung 13: Naheliegende NV-Felder für geometrische einfache Strukturen. Punktsingularitäten, vor allem auf der Materialgrenzfläche, werden möglichst vermieden, Linien-Diskontinuitäten treten an den Rändern der Elementarzelle auf.

7 Mit Scan-Konversion bezeichnet man in der Computergrafik den Vorgang, aus einer durch eine Parameterdarstellung oder impliziten Darstellung gegebene Kurve eine zusammenhängende Pixelmenge innerhalb eines vorgegebenen Pixel-Rasters zu generieren.

NV-Feldes führt. Eine nähere Untersuchung dieses Sachverhalts erfolgte im Rahmen der Arbeit von [Goe2008a][Goe2008b][Goe2008c], die in Kapitel 3.5 kurz behandelt wird. Die hier formulierte Faustformel muss anhand dieser Ergebnisse relativiert bzw. präzisiert werden.

Die eben dargestellten Überlegungen legen für geometrisch einfache Strukturen wie die in Abb. 13 gezeigten Kavitäten oder Säulen innerhalb einer periodisch fortgesetzten Elementarzelle einfache NV-Felder nahe. Teilbild (a) zeigt eine kreisförmige Struktur. Das NV-Feld weist an der Grenzfläche in radialer Richtung und kann innerhalb der gesamten Elementarzelle analog fortgesetzt werden. Dadurch ergibt sich eine Punktsingularität in der Mitte des Kreises sowie Linien-Diskontinuitäten an den Grenzen der Zelle. Teilbild (b) zeigt eine quadratische Struktur, die völlig analog zum Fall des Schachbrettgitters gemäß Abb. 10 (c) durch ein stückweise konstantes NV-Feld beschrieben werden kann. Es ergeben sich Linien-Diskontinuitäten entlang der Diagonalen des Quadrats sowie an den Grenzen der Elementarzelle.

Abb. 13 (c) zeigt eine schräg innerhalb der Elementarzelle liegende elliptische Struktur. Auch für Ellipsen lässt sich ein einfaches NV-Feld finden. Die Grundlage hierfür bilden elliptische Zylinderkoordinaten, die in mathematischen Handbüchern wie [Sne1976] beschrieben sind. Die Linien konstanter Koordinaten bilden hierbei Scharen von konfokalen Ellipsen und Hyperbeln, die lokal stets orthogonal zueinander stehen. Insbesondere stehen alle Hyperbeln senkrecht auf einer herausgegriffenen Ellipse, die mit der elliptischen Kavität der Struktur identifiziert wird.

Der Zusammenhang zwischen den kartesischen Koordinaten x und y und den elliptischen Zylinderkoordinaten u und v ist gegeben durch [Sne1976]

$$x^2 = c^2(1-u)(1-v) \text{ und} \tag{51a}$$

$$y^2 = c^2 uv, \tag{51b}$$

wobei $c = \sqrt{a_x^2 - a_y^2}$ die Exzentrizität der Ellipse ist, die sich aus den Halbachsen a_x und a_y berechnet. Die Linien $u = const.$ bilden die konfokale Ellipsenschar, der auch die Materialgrenzfläche angehört. Die Linien $v = const.$ bilden die hierauf orthogonale Schar konfokaler Hyperbeln. Es ist zu beachten, dass die Halbachsen der Ellipse in dieser Darstellung entlang der kartesischen Koordinatenachsen orientiert sind, so dass im Fall einer schrägen Ellipse das auf diese Weise erzeugte NV-Feld noch gedreht werden muss.

Die praktische Vorgehensweise beim Aufstellen des NV-Feldes ist wie folgt: Gln. (51a) und (51b) werden nach u aufgelöst. Die Mehrdeutigkeit beim Ziehen der Wurzel kann hierbei aufgrund einer äquivalenten Darstellung der elliptischen Zylinderkoordinaten aufgelöst werden, was zu einem Pluszeichen vor der Wurzel führt:

$$u = \frac{x^2 + y^2 - c^2 + \sqrt{(x^2 + y^2 - c^2)^2 - 4c^2y^2}}{2c^2} \tag{52}$$

Bei den Details sei hier auf [Sne1976] verwiesen. Für eine Pixelabtastung der Elementarzelle im kartesischen Koordinatensystem werden zunächst die Werte für u an jedem Pixel berechnet. Hieraus ergibt sich durch numerische Gradientenbildung das NV-Feld, dessen Vektoren tangential zu der konfokalen Hyperbelschar sind. Es ergeben sich Linien-Diskontinuitäten entlang der langen Halbachse der Ellipse zwischen den Brennpunkten sowie an den Grenzen der Elementarzelle.

Für alle in Abb. 13 gezeigten NV-Felder sind die zwangsläufig auftretenden Sprünge möglichst weit von der Materialgrenzfläche entfernt gewählt. Sie sollten daher eine geeignete Wahl darstellen. Die Konvergenzkurven werden im Kapitel 3.4.3 betrachtet, wo sie mit einem alternativen Ansatz verglichen werden. Sie sind zwar für die betrachteten geometrisch einfachen Formen naheliegend, allerdings scheint eine Verallgemeinerung auf beliebige Strukturformen nicht ersichtlich. Aus diesem Grund werden in den folgenden beiden Kapitel Methoden vorgestellt, die wenigstens für ausgewählte Strukturklassen eine automatische Generierung der NV-Felder erlauben.

3.4.2 Verwendung der Schwarz-Christoffel-Transformation

Schwarz-Christoffel-Transformationen [WWW02] sind konforme Abbildungen in der komplexen Zahlenebene. Bekanntermaßen sind konforme Abbildungen lokal winkeltreu, so dass eine naheliegende Idee darin besteht, eine einfache Strukturgeometrie mit bekanntem NV-Feld auf eine kompliziertere Geometrie abzubilden. Die ursprüngliche Variante der Schwarz-Christoffel-Transformation stellt eine Abbildung der oberen Halbebene auf das Innere eines Polygons dar. Die $x-$Achse ist hierbei das Urbild des Polygon-Randes. Damit kann hier ein NV-Feld gewählt werden, das konstant in $y-$Richtung weist.

Eine abgewandelte Form der Schwarz-Christoffel-Transformationen bildet den Einheitskreis auf ein Polygon ab. Ein mit dieser Abbildung erzeugtes NV-Feld für das bereits in Kapitel 3.3.2 betrachtete Schachbrettgitter soll hier exemplarisch vorgestellt werden. Hierfür wurde eine im Internet frei verfügbare Programmbibliothek [WWW02] verwendet. Abb. 13 (a) zeigt einen Kreis, wobei das NV-Feld über die ganze Elementarzelle in radialer Richtung gewählt ist. Bildet man die Kreisscheibe auf das Innere des zentralen, gedrehten Quadrats von Zelle B, Abb. 10 (b), ab, so ergibt sich das in Abb. 14 gezeigte NV-Feld. Ähnlich wie bei der in Kapitel 3.4.1 betrachteten schrägen Ellipse ergeben sich auch hier Kurvenscharen von wechselseitig orthogonalen Kurven. Im Urbild entsprechen diese den Linien konstanter Werte der ebenen Polarkoorinaten r und φ, d.h. Radius und Azimutwinkel. Die Normalenvektoren folgen den Linien des konstanten Azimutwinkels φ. Bei der Transformation werden diese Linien konstanter Koordinaten, wie in Abb. 14 gezeigt, deformiert. Die vier Ecken können analog zum Inneren des Quadrats ergänzt werden, in dem bildlich gesprochen die ihnen gegenüberliegenden Dreiecke nach außen geklappt werden. Die Orientierung an der Materialgrenzfläche wird dabei umgekehrt, um einen Sprung dort zu vermeiden. Das Konvergenzverhalten des so erzeugten NV-Feldes wurde bereits in Kapitel 3.3.2 betrachtet.

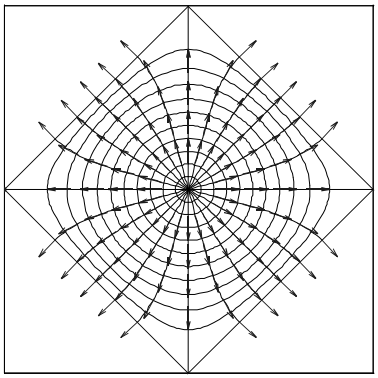


Abbildung 14: Veranschaulichung der Erzeugung eines NV-Feldes für das Schachbrett-Gitter am Beispiel der Zelle B (vgl. Abb. 10 (b)) mithilfe der Schwarz-Christoffel-Transformation. Der Einheitskreis in der komplexen Ebene wird mittels einer konformen Abbildung auf das bzgl. der Elementarzelle um 45° gedrehte Quadrat abgebildet.

Die vorgestellte Methode, sei es wie hier betrachtet mit dem Einheitskreis oder aber mit der oberen komplexen Halbebene als Urbild der konformen Abbildung, ist prinzipiell für jedes Kreuzgitter geeignet, bei dem sich eine einzelne Kavität oder Säule innerhalb der Elementarzelle befindet. Kavitäten mit glatten Berandungen lassen sich hierbei durch Polygone mit vielen Ecken beliebig genau annähern. Allerdings steigt der Rechenaufwand mit der Anzahl der Ecken an, so dass sich schnell große Rechenzeiten für das Aufstellen des NV-Feldes ergeben. Damit ist der durch das verbesserte Konvergenzverhaltenen gewonnene Effizienzgewinn wieder verloren. Ein Vorteil ergibt sich allerdings weiterhin dann, wenn eine große Zahl von Beugungsrechnungen an gleichartigen Strukturen mit unterschiedlichen Parametern wie Materialien, Einfallsrichtungen und Wellenlängen durchzuführen ist, wobei dann das NV-Feld nur ein einziges Mal berechnet wird.

3.4.3 Verwendung eines elektrostatischen Modells

Bereits die Verwendung der Schwarz-Christoffel-Transformationen war motiviert durch die Elektrostatik, wo diese breite Anwendung finden. Das Problem, eine flächenhafte oder räumliche Verteilung von Vektoren zu finden, die auf einer vorgegebenen Grenzfläche senkrecht stehen, stellt sich ebenfalls bei der Suche nach der elektrostatischen Feldverteilung eines ideal leitenden, geladenen Objektes. Bekanntermaßen werden elektrostatische Probleme in homogenen, ungeladenen Bereichen durch die Laplace-Gleichung des elektrostatischen Potentials Φ beschrieben, aus dem sich dann das elektrische Feld durch Gradientenbildung ergibt:

$$\nabla^2\Phi = 0, \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi \tag{53}$$

Aus dieser Überlegung ergibt sich ein weiterer Algorithmus zur Erzeugung geeigneter NV-Felder, der anhand Abb. 15 erläutert wird. Er besteht aus zwei Schritten, denen jeweils ein unterschiedliches elektrostatisches Modell zugrunde liegt. Die Anwendung ist auf Gitter be-

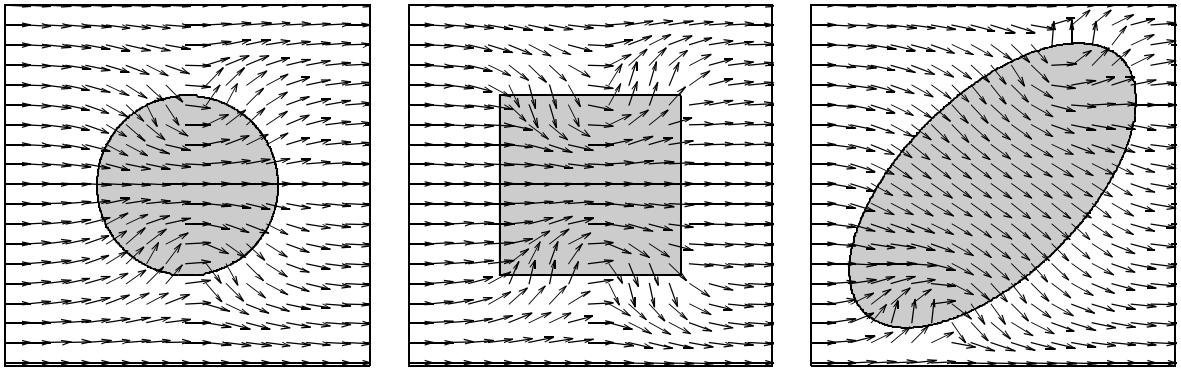
schränkt, die aus einer einzelnen konvexen Kavität oder Säule innerhalb der Elementarzelle bestehen.

In einem ersten Schritt wird die Kavität als ideal leitfähiges Objekt innerhalb eines Plattenkondensators betrachtet, dessen Platten durch den linken und rechten Rand der Elementarzelle gebildet werden. Die Lösung der Laplace-Gleichung mit diesen Randbedingungen ergibt das elektrische Feld im Außenraum der Kavität, während das Innere eines Leiters bekanntermaßen feldfrei ist. Das Feld kann normiert und als das gesuchte NV-Feld im Außenraum gewählt werden. An der Grenzfläche ergeben sich zwei Nullstellen des Feldes, an denen die Feldlinien ihre Richtung ändern.

Im zweiten Schritt des Algorithmus wird die Grenzfläche an den Nullstellen des Feldes unterteilt und die beide Teile als gekrümmte Kondensatorplatten betrachtet, an die wiederum eine Spannung angelegt wird. Die Lösung der Laplace-Gleichung mit diesen Randbedingungen ergibt das elektrische Feld im Innenraum der Kavität, das wiederum durch Normierung zum gesuchten NV-Feld wird.

Wie in Abb. 15 zu erkennen ist, werden durch die vorgestellte Methode Singularitäten auf der Materialgrenzfläche in Kauf genommen, an denen die Richtung des NV-Feldes unbestimmt ist. Ansonsten ergibt sich aber ein sehr glatter Feldverlauf, der im Gegensatz zu den in Abb. 13 gezeigten Feldern auch keine Linien-Diskontinuitäten an den Grenzen der Elementarzelle aufweist. Wie sich im Weiteren zeigen wird, sind beide eben verglichenen Klassen von NV-Feldern in ähnlicher Weise zur Verbesserung der Konvergenz geeignet. Im Gegensatz zu den anhand anschaulicher Überlegungen gewonnenen Feldern demonstrieren die hier berechneten, dass für eine bestimmte Klasse von Strukturen automatisch ein geeignetes Feld gewonnen werden kann, ohne dass die genaue Form der Struktur bekannt sein muss.

Die in Abb. 15 gezeigten NV-Felder wurden mit der durch Lösen der Laplace-Gleichung mithilfe der Finiten-Elemente-Methode (FEM) ermittelt. Die Berechnung erfolgt innerhalb von Sekundenbruchteilen, allerdings erfordert die anschließende Interpolation des Ergeb-



(a) (b) (c)

Abbildung 15: Erzeugung von NV-Feldern mithilfe eines elektrostatischen Modells. Der Algorithmus ist auf einzelne konvexe Kavitäten oder Säulen innerhalb der Elementarzelle anwendbar.

nisses auf ein äquidistantes Pixel-Raster mehrere Minuten Rechenzeit. Unmittelbar nach der FEM-Rechnung liegt das Feld zunächst auf dreieckigen Flächenelementen variabler Größe in Form von Koeffizienten von Ansatz-Funktionen vor. Damit ist der Nutzen der Methode prinzipiell demonstriert, wobei aber ähnlich wie bei den Schwarz-Christoffel-Transformationen noch praktische Fragen offen sind. Im Gegensatz zu den Schwarz-Christoffel-Transformationen ergibt sich wenigstens keine nennenswerte Rechenzeiterhöhung bei gekrümmten Berandungskurven. Eine Lösung der Laplace-Gleichung mit einer alternativen Methode zur FEM lässt zum einen auf praxistauglichere Rechenzeiten hoffen, zum anderen scheint auch eine Erweiterung der Methode auf komplexere Strukturklassen, wie konkave Kavitäten oder mehrfach zusammenhängende Gebiete, möglich. Diese Ansätze wurden von Götz [Goe2008a] [Goe2008b][Goe2008c] aufgegriffen, wobei aber nicht mehr die hier zugrunde liegende enge Kopplung an das elektrostatische Modell verwendet wurde, vgl. Kapitel 3.5.

Betrachten wir schließlich das Konvergenzverhalten der NV-Formulierung mit beiden vorgestellten Klassen von NV-Feldern im Vergleich mit den Formulierungen der RCWA nach Moharam et al. und Li. Der Rechnung liegen wieder Materialdaten aus [Li1997] zugrunde, diesmal wurde für das Cover sowie das Innere der Kavitäten Luft, für das umgebende Medium ein leitfähiges Material mit Brechzahl $n = 1.75 + 1.5i$ und für das Substrat Glas mit $n = 1.5$ gewählt. Die Wahl eines leitfähigen Materials in der periodisch modulierten Schicht führt generell zu einem verschlechterten Konvergenzverhalten, was die zu beobachtenden Effekte deutlicher hervorhebt.

Abb. 16 zeigt berechnete Konvergenzkurven, die jeweils Beugungseffizienzen in der nullten reflektierten Beugungsordnung bei senkrechtem Einfall als Funktion der Modenzahl darstellen. Teilbilder (a) und (b) zeigen die Ergebnisse für eine kreisförmige Kavität, (c) und (d) für eine quadratische, (e) und (f) schließlich für eine elliptische mit schräger Lage der Ellipse innerhalb der Elementarzelle. Für jede Struktur sind jeweils zwei unterschiedliche Polarisationen der einfallenden Welle dargestellt. Bei Kreis und Quadrat wurde diagonal zu den Grenzen der Elementarzelle polarisiertes Licht ((a) bzw. (c)) mit in $x-$Richtung polarisiertem Licht ((b) bzw. (d)) verglichen. Die Wahl begründet sich darin, dass zueinander orthogonale Polarisationen, etwa in $x-$ und $y-$Richtung wegen der Symmetrie der Strukturen identische Fälle darstellen. Für den Fall der schrägen Ellipsen wurden dagegen zwei zueinander orthogonale Polarisationen, nämlich in anti-diagonaler ($\mathbf{E} = [1, -1]^\top$) und diagonaler ($\mathbf{E} = [1, 1]^\top$) Richtung verglichen.

Für den Limes einer immer länger werdenden langen Halbachse geht die schräge Ellipse in einen schrägen Graben über, wie er in Kapitel 3.3.1 betrachtet wurde. In diesem Fall geht die anti-diagonale Polarisation in TE und die diagonale in TM über. Daher wurden diese Polarisationen in Abb. 16 (e) und (f) als "überwiegend TE" und "überwiegend TM" bezeichnet. Für den Fall "überwiegend TE" ist derjenige Anteil der Grenzfläche größer, bei dem der elektrische Feldvektor eine größere Tangentialkomponente hat, bei "überwiegend TM" gilt das Umgekehrte. Daher ist hier ähnliches Verhalten wie für die fundamentalen Polarisationen

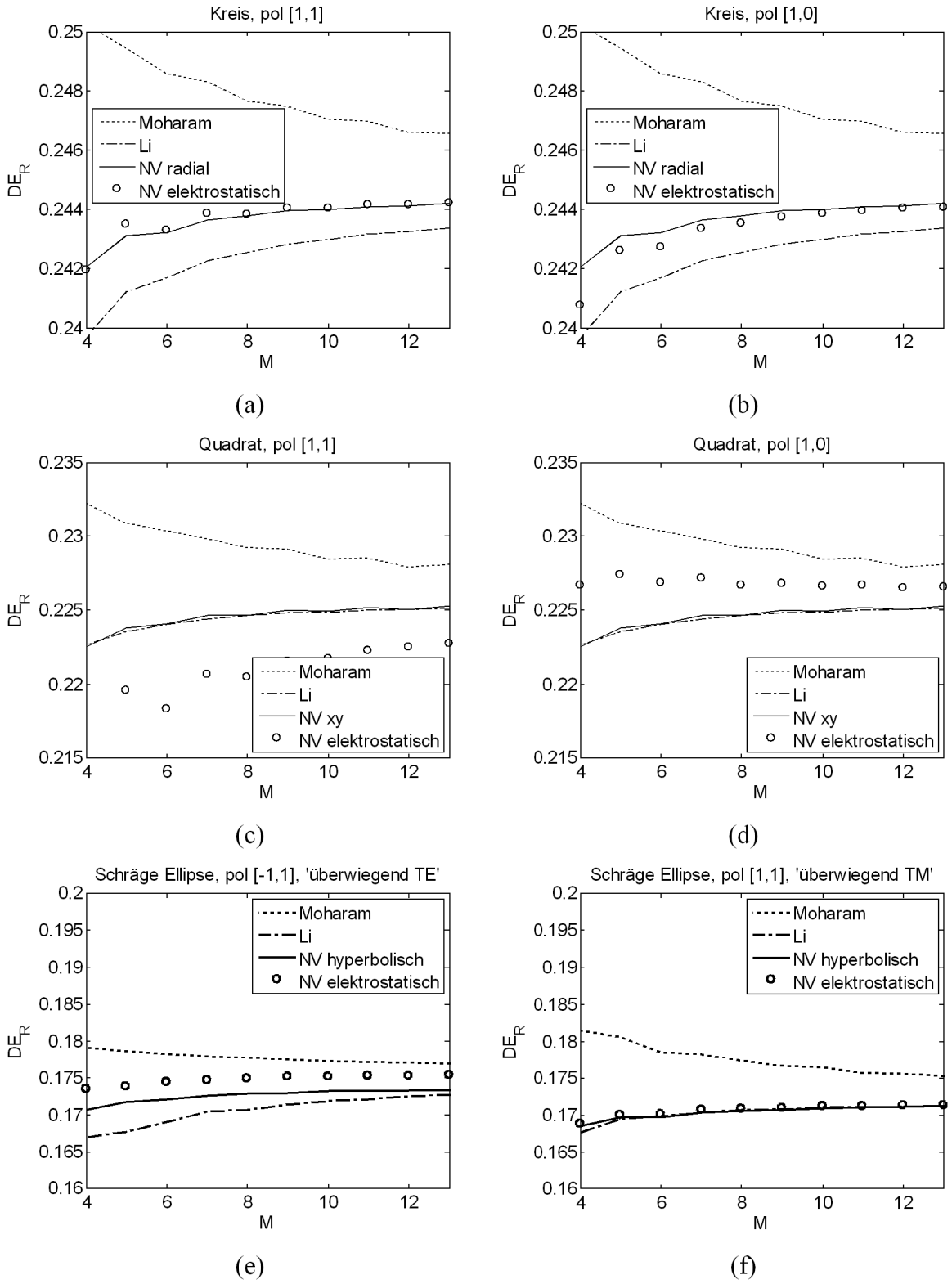


Abbildung 16: Konvergenzkurven für die konvexen Kavitäten aus Abb. 13 bzw. 15. (a) zeigt die Ergebnisse für einen Kreis in x–, (b) in diagonaler Polarisation. (c) und (d) stellen analoge Kurven für ein Quadrat dar. (e) und (f) zeigen Konvergenzkurven für die schräge Ellipse in antidiagonaler und diagonaler Polarisation. Sie gehen bei einer Verlängerung der langen Halbachse in den TE und TM Fall eines schrägen Grabens über.

beim schrägen Graben zu erwarten. Die unterschiedlichen NV-Felder wurden für den hier vorgestellten Algorithmus mit "elektrostatisch" und für die aus anschaulichen Überlegungen gewonnenen Felder mit den einleuchtenden Bezeichnungen "xy" beim Quadrat, "radial" beim Kreis und "hyperbolisch" bei der Ellipse versehen.

Bei der kreisförmigen Struktur, Abb. 16 (a) und (b), ergibt sich eindeutig eine verbesserte Konvergenz der NV-Formulierung gegenüber den älteren Formulierungen. Hierbei sind nur geringfügige Unterschiede zwischen den beiden betrachteten NV-Feldern zu erkennen. Für diagonale Polarisation scheint das NV-Feld aus dem elektrostatischen Modell leicht überlegen, während für $x-$Polarisation das radiale NV-Feld zu einer geringfügig schnelleren Konvergenz führt.

Im Fall der quadratischen Kavität zeigen jeweils die Li'sche Formulierung sowie die NV-Formulierung mit stückweise konstantem NV-Feld vergleichbare Konvergenz. Die NV-Formulierung mit dem Feld aus dem elektrostatischen Modell dagegen konvergiert für diagonale Polarisation schlechter, für $x-$Polarisation aber besser als die beiden anderen. Die Formulierung von Moharam et al. zeigt erwartungsgemäß jeweils das schlechteste Konvergenzverhalten. Das gute Abschneiden der Li'schen Formulierung beim Quadrat verwundert nicht, da nur Grenzflächen parallel zur $x-$ und $y-$Achse vorliegen, so dass die von Li geforderte Zickzack-Beschreibung der Grenzfläche exakt ist.

Für die elliptische Kavität sind wieder wie beim Kreis die beiden Kurven der NV-Formulierung am vielversprechendsten. Das elektrostatische Modell scheint in diesem Fall überlegen. Für den Fall diagonaler Polarisation, die wie erwähnt mit "überwiegend TM" bezeichnet wurde, liegen beide Kurven der NV-Formulierung sowie die der Li-Formulierung nahezu gleich auf. Die Moharam'sche Formulierung ist hier ebenfalls erwartungsgemäß schlecht. Bei anti-diagonaler Polarisation oder "überwiegend TE" dagegen zeigt die NV-Formulierung klare Vorteile gegenüber der Li-Formulierung, aber auch die Moharam'sche zeigt hier besseres Verhalten als die Li'sche. Dies deckt sich mit den Beobachtungen aus Kapitel 3.3.1 an einer schrägen Grabenstruktur, was die Berechtigung der gewählten anschaulichen Bezeichnungen "überwiegend TE" und "überwiegend TM" untermauert.

Mit dem auf einem elektrostatischen Modell basierenden Algorithmus konnte eine Methode vorgestellt werden, die im Fall konvexer Kavitäten innerhalb der Elementarzelle ein geeignetes NV-Feld aufstellt, ohne dass die genaue Form der Kavität bekannt sein muss. Damit ist ein erster Schritt in Richtung einer allgemeinen Anwendbarkeit der NV-Formulierung getan.

3.5 Verbesserte Ansätze zur Aufstellung von Normalenvektor-Feldern

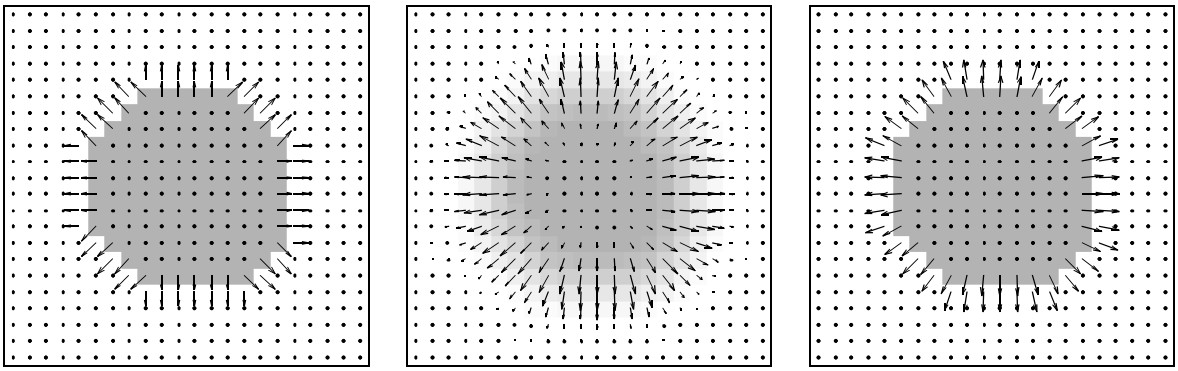
Die im Kapitel 3.4 vorgestellten Strategien zur Aufstellung von geeigneten NV-Feldern demonstrieren zwar die breiten Einsatzmöglichkeiten der NV-Formulierung der RCWA, wei-

sen aber noch entscheidende Nachteile auf. Während das elektrostatische Modell bereits mit moderater Laufzeitperformance funktioniert und das Potential für eine schnellere Implementierung hat, ist seine Anwendbarkeit auf konvexe Kavitäten beschränkt und kann weder konkave Kavitäten noch mehrfach zusammenhängende Gebiete oder Strukturen mit mehr als zwei Materialien behandeln. Die Methode der Schwarz-Christoffel-Transformationen dagegen kann prinzipiell bereits konkave Kavitäten behandeln, eine Erweiterung auf mehrfach zusammenhängende Gebiete oder Systeme aus mehreren Materialien ist aber auch nicht unmittelbar naheliegend. Die größte Einschränkung dieses Verfahrens stellt jedoch die Modellierung der Strukturen als Polygone dar, die im Fall runder oder glatter Strukturen zu einer hohen Eckenzahl und damit zu untragbar langen Rechenzeiten führt.

In der Arbeit von Götz [Goe2008a] wurde ein dem elektrostatischen Modell ähnlicher Gedanke aufgegriffen und weiterentwickelt, so dass nun ein auf allgemeine Brechzahlverteilungen in der Elementarzelle anwendbarer Algorithmus mit geeigneter Laufzeitperformance vorliegt. Sein Konvergenzverhalten erwies sich in zahlreichen Tests in keinem als Fall schlechter und in vielen Fällen als besser als das der herkömmlichen Formulierungen von Moharam und Li. Die Ergebnisse dieser Arbeit werden in diesem Kapitel kurz vorgestellt.

Der entwickelte Algorithmus gliedert sich in zwei Schritte. Im ersten Schritt werden durch Gradientenbildung einer in Form einer Bitmap vorliegenden Brechzahlverteilung sogenannte Randvektoren auf der Grenzfläche berechnet. Im zweiten Schritt werden die Randvektoren durch eine Interpolation mit quadratischer Abstandsgewichtung auf den Raum zwischen den Grenzflächen fortgesetzt.

Abb. 17 (a) zeigt die Gradientenbildung ohne weitere Verarbeitungsschritte. Durch die Pixellierung des Bildes entsteht eine treppenartige Modulation der Vektoren, die den Grenzflächenverlauf nicht zutreffend wiedergibt. Daher wird unter der Annahme, dass die Pixellierung des Bildes wesentlich feiner ist als die feinsten zu beschreibenden Strukturdetails, die Pi-



(a) (b) (c)

Abbildung 17: Erster Schritt des verbesserten Algorithmus: Erzeugung von Randvektoren mittels Gradientenbildung. (a) Ohne Tiefpassfilterung führt die Pixellierung zu Treppeneffekten. (b) Ein Gauß'scher Tiefpass verhindert die Treppeneffekte. (c) Das Ergebnis von b maskiert mit dem Ergebnis von a liefert ein schmales Band von kontinuierlich in einander übergehenden Vektoren

xellierung durch ein Gauß'sches Tiefpassfilter geglättet. Eine anschließende Gradientenbildung führt zu verbesserten Randvektoren, vgl. Teilbild (b). Da aber durch die Tiefpassfilterung gleichsam auch der Materialübergang aufgeweicht wird, erhält man so ein breites Band von Vektoren um die Grenzfläche. Um die Zahl der Anfangswerte für den zweiten Schritt des Algorithmus wieder zu reduzieren, kann mit dem Ergebnis der Gradientenbildung aus dem ungeglätteten Bild eine Maske erstellt werden, die die Grenzflächen lokalisiert. Diese Maske angewendet auf das Gradientenfeld der geglätteten Struktur mit anschließender Normierung auf Betrag 1 liefert das erwünschte Zwischenergebnis der Randvektoren, vgl. Teilbild (c). Der eben beschriebene erste Schritt des Algorithmus wurde von Rafler [Raf2007] vorgeschlagen.

Durch die Gradientenbildung zeigen die Randvektoren bei einfachen Kavitäten stets nach innen oder außen, also in Richtung des Brechzahlsprungs. Damit entspricht das Feld der Randvektoren beim bislang betrachteten Beispiel des Kreises dem radialen Feld aus Abb. 13 (a) und nicht dem des elektrostatischen Modells aus Abb. 15 (a). Natürlich könnte aber ebensogut das radiale Feld von Randvektoren durch ein alternatives elektrostatisches Modell erzeugt werden, etwa durch gleichförmiges Aufladen der Kreisoberfläche.

Umgekehrt kann nun auch das in Abb. 17 (c) gezeigte Feld problemlos mit einer Vorzugsrichtung versehen werden. Es werden dann schlichtweg alle Vektoren, die stärker als 90° von einer beliebig gewählten Richtung abweichen, in ihrer Orientierung um 180° geändert. Wie in [Goe2008a] ausführlich untersucht, zeigt in zahlreichen Beispielen eine Vorzugsrichtung keinen Vorteil gegenüber einem Feld von Randvektoren ohne Vorzugsrichtung. Daher wird hier im Weiteren nur einmal der Vergleich zwischen beiden Fällen betrachtet. Für die Implementierung der Methode zum Einsatz in der Praxis wurde in [Goe2008a] willkürlich der Fall ohne Vorzugsrichtung gewählt.

Der zweite Schritt des Algorithmus besteht wie erwähnt in einer Interpolation des Feldes auf die Bereiche zwischen den Grenzflächenpunkten mittels quadratischen Abstandsgewichtung. Somit ist wieder eine Ähnlichkeit zur Elektrostatik gegeben, wo etwa Ladungen oder Multipole höherer Ordnung sich auch mit räumlich abfallender Stärke gegenseitig beeinflussen. Die quadratische Abstandsgewichtung mit anschließender Normierung der Vektoren auf Betrag 1 ist definiert durch

$$\mathbf{N}^*(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_{\text{Grenz}}} \frac{\mathbf{N}_j}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|^2} \text{ und } \mathbf{N}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{N}^*(\mathbf{x})}{|\mathbf{N}^*(\mathbf{x})|}, \tag{54}$$

wobei n_{Grenz} die Anzahl der im ersten Schritt ermittelten Grenzflächenvektoren ist.

Das erläuterte Interpolationsverfahren zeigt eine Komplexität von $O(R^3)$ wobei R die Anzahl der Pixel in einer Dimension ist. Bei einer typischen Auflösung der Bitmap von 2048×2048 ergibt sich eine lange Laufzeit des Algorithmus, die je nach Bild im Bereich mehrerer Stunden liegt. Im Hinblick auf das verfolgte Ziel – eine Beschleunigung der RCWA Rechnung durch verbessertes Konvergenzverhalten – wäre das ein unbefriedigendes Ergebnis.

Ein progressiverer Verfeinerungsalgorithmus stellt eine Näherung mit sehr geringen Abweichungen von der bislang vorgestellten Interpolation dar. Gleichzeitig kann er die Komplexität auf $O(R^2)$ reduzieren was bei einer optimierten Implementierung in C bei derselben Auflösung zu Rechenzeiten von rund 40 Sekunden führt. Bei typischen Rechenzeiten der RCWA im Bereich von zehn Minuten bis einigen Stunden bedeutet dies, dass das verbesserte Konvergenzverhalten nun nicht mehr durch ein unverhältnismäßig rechenintensives Aufstellen der NV-Felder erkauft werden muss.

Abb. 18 zeigt das Prinzip des progressiven Verfeinerungsalgorithmus am Beispiel einer kreisförmigen Struktur und einem Feld von Randvektoren mit Vorzugsrichtung nach rechts als Startwert. Das Gebiet um einen Punkt, aus dem die bereits vorhandenen Normalenvektoren zur Berechnung eines neuen Vektors herangezogen werden, ist grau gezeichnet und wird schrittweise verkleinert. Der aktuell zu berechnende Vektor ist grau und durch einen grauen

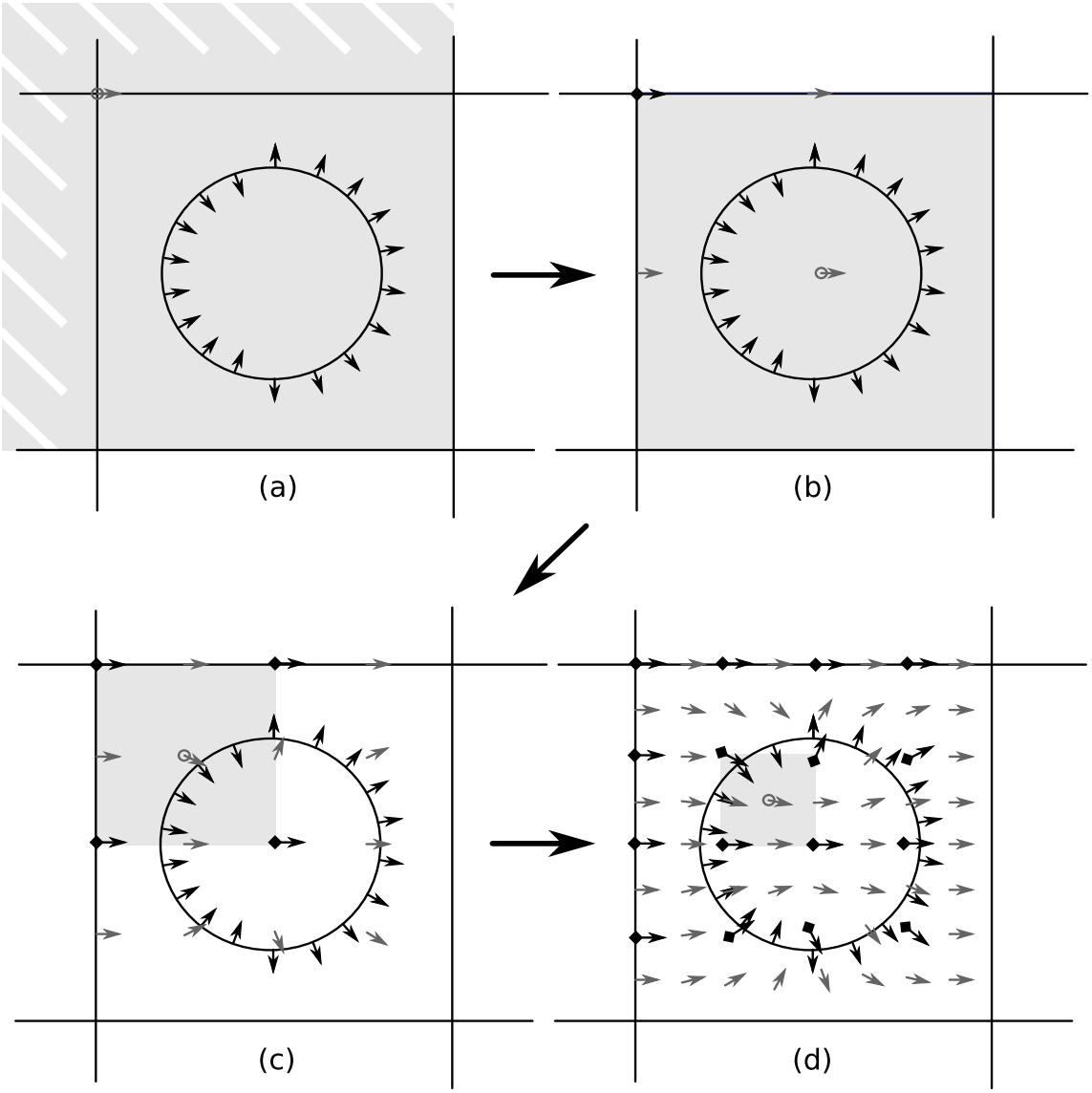
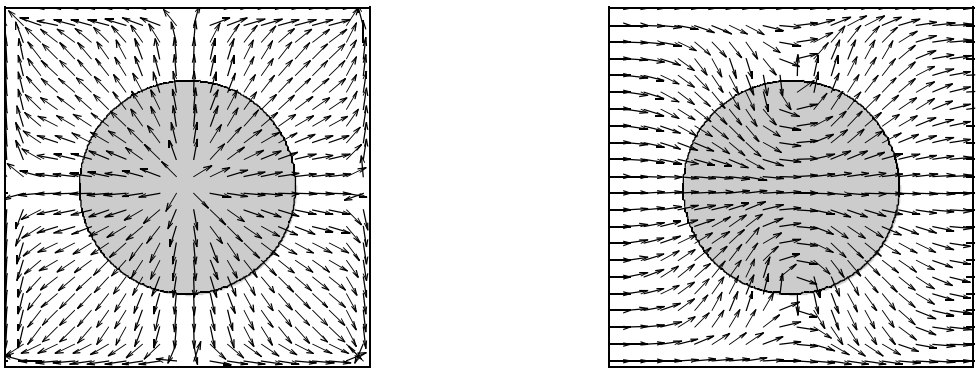


Abbildung 18: Prinzip des progressiven Verfeinerungsalgorithmus zur beschleunigten Interpolation der Randvektoren

Kringel markiert. Randvektoren sind schwarz dargestellt, bereits berechnete Vektoren werden nun Rastervektoren genannt und sind schwarz mit Rautenfußpunkt gezeichnet.

Im ersten Schritt, Teilbild (a), entspricht das berücksichtigte Gebiet der vierfachen Elementarzelle zur korrekten Behandlung der periodischen Fortsetzung. Berechnet wird nur der Vektor in der linken oberen Ecke. Im zweiten Schritt wird das Gebiet geviertelt und hat somit die Größe der Elementarzelle. Es werden die Randvektoren und die Rastervektoren – bisher ein einziger – im grauen Gebiet berücksichtigt. In den nächsten beiden Schritten, die in den Teilbildern (c) und (d) veranschaulicht sind, wird die beschriebene Prozedur identisch weitergeführt. Die graue Fläche wird jeweils geviertelt wobei die neu berechneten Vektoren schrittweise das Raster der bisher berechneten Rastervektoren auffüllen. Die Zahl der zu berücksichtigenden Vektoren für die Berechnung eines neuen nimmt in jedem Schritt ab.

Das vorgeschlagene Verfeinerungsverfahren trägt der Tatsache Rechnung, dass durch das Prinzip der Interpolation benachbarte Vektoren nur wenig von einander abweichen, und dass wegen der quadratischen Abstandsgewichtung weiter entfernte Vektoren einen geringeren Einfluss auf einen betrachteten Punkt haben. Insofern bringt die nur noch mittelbare Berücksichtigung einer Auswahl weiter entfernter Vektoren durch das Prinzip der Verfeinerung nur kleine Fehler mit sich. Das in Abb. 18 skizzierte und hier beschriebene Verfahren kann jedoch zu stark asymmetrischen NV-Feldern führen. Beim betrachteten Beispiel ist der Vektor am Kreismittelpunkt undefiniert und muss willkürlich orientiert werden. Durch seine Eigenschaft als einer der ersten vier Rastervektoren ist sein Einfluss auf das gesamte NV-Feld aber groß, so dass er die Symmetrie stören würde. Aus rein ästhetischen Gründen wurde daher in [Goe2008a] statt eines einzelnen Rastervektors ein ohne Näherung berechnetes Raster aus 5×5 Vektoren als Startwert verwendet. Eine signifikante Verbesserung gegenüber den asymmetrischen Feldern wurde jedoch nicht beobachtet. Die hier gezeigten Beispiele sind mit dem feineren Raster berechnet, wodurch sich die Symmetrie der Struktur nahezu auf die NV-Felder überträgt.



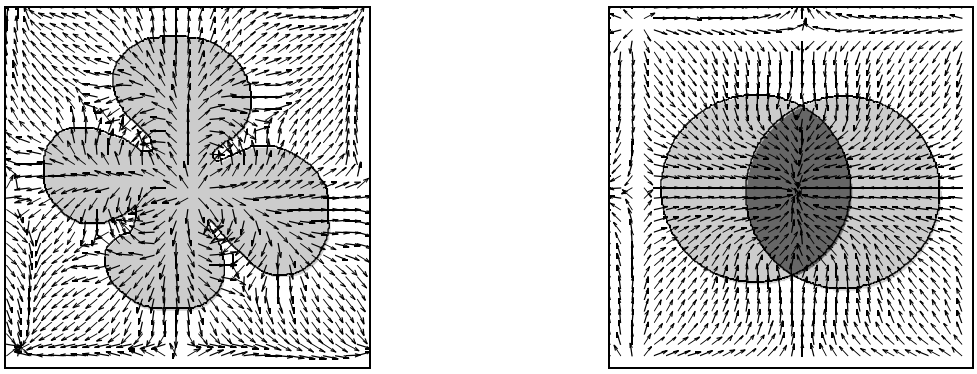
(a) (b)

Abbildung 19: NV-Felder für einen Kreis erzeugt mit dem neuen Algorithmus. (a) ohne Vorzugsrichtung (b) mit Vorzugsrichtung nach rechts

Im Folgenden wird an ausgewählten Beispielen aus [Goe2008a] der Erfolg des neuen Algorithmus zur NV-Feld-Erzeugung demonstriert. Abb. 19 zeigt zwei alternative NV-Felder, die ohne bzw. mit Vorzugsrichtung der Vektoren nach rechts berechnet wurden. Wie zu erkennen ist, ist das Feld mit Vorzugsrichtung aus Teilbild (b) nahezu identisch mit dem Feld aus dem elektrostatischen Modell, Abb. 15 (a). Teilbild (a) dagegen erinnert weniger an das radiale NV-Feld der Kreisstruktur aus Abb. 13 (a), sondern vielmehr an das NV-Feld des Schachbrettgitters der gedrehten Zelle B, Abb. 10 (b). Wie sich unten zeigt, sind beide NV-Felder gleichermaßen zur Konvergenzverbesserung geeignet.

Weitere Beispiele, die im Gegensatz zum Kreis nicht mit den Algorithmen aus Kapitel 3.4 behandelt werden können, zeigt Abb. 20. Hier sind jeweils nur die Ergebnisse dargestellt, die sich aus den Randvektoren ohne Vorzugsrichtung ergeben. Teilbild (a) zeigt mit einer Kleeblattstruktur eine konkave Kavität, Teilbild (b) zeigt eine Kombination von drei Materialien. Durch die Bildung von Schnittmengen ergeben sich links und rechts der Mitte zwei unabhängige Gebiete, die aber dieselbe Brechzahl haben sollen. Auch wenn das innere Gebiet nicht die Schnittmenge zweier Kreise, sondern ein Einschluss eines Materials in einem anderen wäre, könnte der Algorithmus angewendet werden. Er eignet sich auch für mehrfach zusammenhängende Gebiete.

Für die drei gezeigten Strukturen, Kreis, Kleeblatt und Doppelkreis wird nun das Konvergenzverhalten betrachtet und mit den herkömmlichen RCWA-Formulierungen verglichen. Die Parameter der Simulation lauten: Wellenlänge $\lambda = 500\,\text{nm}$, Periode in $x-$ und $y-$Richtung $\Lambda_x = \Lambda_y = 1000\,\text{nm}$, Dicke $d = 50\,\text{nm}$, Brechzahl in Cover und Substrat $n_1 = 1$ und $n_2 = 1.5$. Die Brechzahlen in der strukturierten Schicht sind 1 (außen) und $1.75 + 1.5i$ (innen) bei Kreis und Kleeblatt sowie 1.5 (außen), 1 (äußere Kreisteile) und $1.75 + 1.5i$ (Schnittmenge) bei der Doppelkreisstruktur. Die Konvergenzkurven sind für senkrechten Einfall mit $y-$polarisiertem Licht in Reflexion gerechnet, es werden die Beugungseffizienzen der nullten Beugungsordnung betrachtet. Bei allen Kurven, für den Kreis in Abb. 21, fürs Kleeblatt in Abb. 22 (a) und für den Doppelkreis in Abb. 22 (b) ist klar zu erkennen, dass die NV-Formu-



(a) (b)

Abbildung 20: NV-Felder für ausgewählte Beispiele von komplexeren Strukturen, die mit den Algorithmen aus Kapitel 3.4 nicht behandelt werden können: (a) Kleeblattstruktur (b) Doppelkreisstruktur

lierung jeweils das beste Konvergenzverhalten zeigt. Ein klarer Vorteil von NV-Feldern mit oder ohne Vorzugsrichtung ist in keinem der Diagramme zu sehen.

Mit dem hier vorgestellten Algorithmus stellt die NV-Formulierung der RCWA nun eine attraktive und vergleichsweise einfach zu implementierende Alternative zu der bisher klar zu favorisierenden Li-Formulierung dar. Abschließend sei erwähnt, dass in [Goe2008a] erheblich weiter führende Untersuchungen über ein theoretisch optimales NV-Feld ausgeführt sind. Die in Kapitel 3.4.1 formulierte Faustregel, dass NV-Felder möglichst glatt und Sprünge möglichst weit von Grenzflächen entfernt zu platzieren sind, muss diesen Untersuchungen zufolge relativiert werden. Es wird der Weg zu einem theoretisch optimalen NV-Feld aufgezeigt, das sich *als Funktion der gewählten Modenzahl* ändern müsste. Eine praktische Implementierung eines optimalen NV-Feldes ist aber nach den ersten Vorarbeiten in [Goe2008a] noch nicht greifbar.

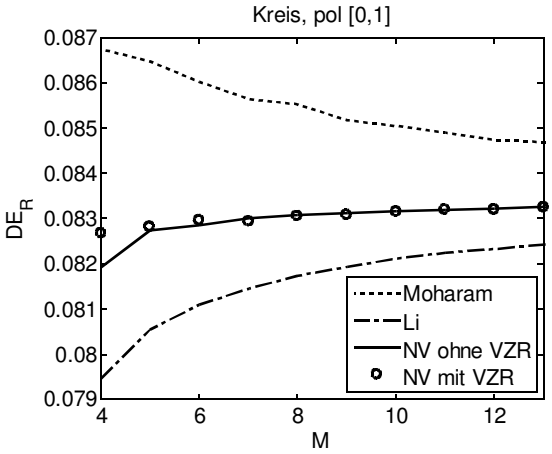
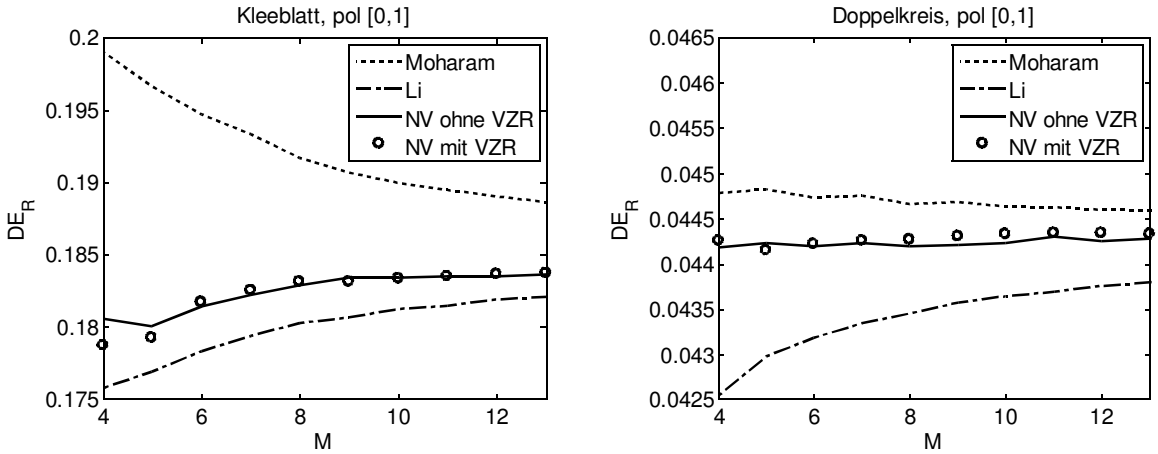


Abbildung 21: Konvergenzkurven für die Kreisstruktur, verglichen werden die herkömmlichen Methoden von Moharam und Li sowie die NV Methode mit dem neuen Algorithmus mit und ohne Vorzugsrichtung



(a) (b)

Abbildung 22: Konvergenzkurven für die in Abb. 20 gezeigten Strukturen. Verglichen werden wieder die herkömmlichen Methoden nach Moharam und Li sowie die NV Methode mit dem neuen Algorithmus mit und ohne Vorzugsrichtung nach rechts. Die NV-Felder mit Vorzugsrichtung sind nicht eigens dargestellt.

Andererseits zeigt der hier vorgestellte Algorithmus, dessen Komplexität in [Goe2008a] auch quantifiziert wird, bereits eine enorme Verbesserung gegenüber bisherigen RCWA Formulierungen, so dass fraglich ist, welchen Gewinn ein theoretisch optimales NV-Feld in der Praxis noch bringen kann. Erste Ergebnisse aus [Goe2008a] fanden Eingang in Konferenzbeiträge [Raf2008b][Goe2008b]. Eine praktische Anleitung zur Anwendung des Algorithmus wurde in [Goe2008c] veröffentlicht.

4 Grundlage der Scatterometrie: Polarisationsoptik und Ellipsometrie

4.1 Matrix-Kalküle der Polarisationsoptik

Als Polarisation des Lichts wird die Orientierung des elektrischen Feldstärkevektors bezüglich der Ausbreitungsrichtung des Lichts bezeichnet. Elektromagnetische Wellen im Freiraum sind stets transversal, d.h. der elektrische Feldstärkevektor liegt in einer Ebene senkrecht zur Ausbreitungsrichtung. Die Beschreibung von Polarisation erfolgt daher üblicherweise in einem $ps-$Koordinatensystem, das von einem parallelen ($\mathbf{p}$) und einem senkrechten ($\mathbf{s}$) Einheitsvektor bezüglich einer festgelegten Ebene aufgespannt wird. Hierbei liegt die Ausbreitungsrichtung in dieser Ebene. Bei Reflexion oder Beugung heißt sie Einfallsebene und wird von der Einfallsrichtung und der Normalen zur Oberfläche der reflektierenden oder beugenden Probe aufgespannt, vgl. Abb. 23. Die $p-$Polarisation wird auch mit TM (transversal magnetisch), die $s-$Polarisation mit TE (transversal elektrisch) bezeichnet.

Im Folgenden werden der Jones- und der Mueller-Formalismus kurz eingeführt, die Beschreibungen von Polarisationszuständen sowie von Polarisationsänderungen darstellen. Beide Kalküle sind seit langem bekannt und kommen vielfach zum Einsatz. Die originalen Arbeiten der Namensgeber R.C. Jones und H. Mueller sind zwar zugänglich[8], bieten jedoch für den praktischen Anwender in der heutigen Zeit kein tieferes Verständnis als eine Reihe gut einge-

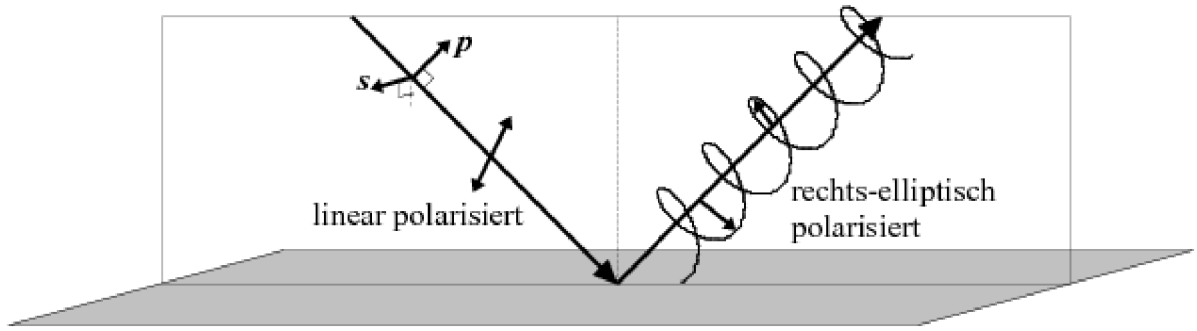


Abbildung 23: Das $ps-$Koordinatensystem und Polarisationsänderung bei Reflexion

8 Jones' Arbeiten sind leicht zu finden, es handelt sich um drei zusammengehörige Teilveröffentlichungen in J. Opt. Soc. Am. [Jon1941]. Mueller dagegen wird zwar ebenfalls oftmals in J. Opt. Soc. Am. zitiert [Mue1948], es handelt sich hierbei jedoch nur um ein Abstract eines Tagungsbeitrages, ein zugehöriger Artikel ist nicht zu finden. Ein unwesentlich später erschienener Artikel von Walker [Wal1954] fasst die Ergebnisse zusammen, vermutlich genau aus dem Grund, weil Muellers Beitrag der Öffentlichkeit nicht zugänglich zu sein scheint.

führter Lehrbücher wie etwa [Azz1977][Tom1993][Bro1998][Tom2005]. Daher wird hier sowohl auf eine historische Betrachtung als auch auf ausführlichere Herleitungen oder Beweise verzichtet und auf die o.g. Lehrbücher verwiesen. Die Jones- und Mueller-Matrizen dienen im Rahmen der Scatterometrie als abstrakte Messgrößen.

4.1.1 Jones-Matrizen

Der Jones-Formalismus ist eine einfache und naheliegende Beschreibung von vollständig polarisiertem Licht sowie von vollständig kohärenten Polarisationsänderungen. Depolarisation ist im Jones-Kalkül nicht enthalten. Der Polarisationszustand eines Lichtwellenfeldes wird beschrieben durch den komplexen elektrischen Feldstärkevektor $\mathbf{E} = \left[E_p, E_s\right]^\top$ im $ps-$System, dieser heißt nun Jones-Vektor. Die absolute Phase dieses Vektors, $\omega t - \mathbf{kx} + \varphi_0$ mit Wellenvektor $\mathbf{k}$, Kreisfrequenz ω und unbekannter Anfangsphase φ_0, die die Propagation des Wellenfeldes ebenso beschreibt wie die Phasenbeziehung zu lateral benachbarten Punkten im Feld, also die Krümmung von Wellenfronten, wird hierbei vor den Vektor gezogen und in Rechnungen nicht mitgeführt. Die absolute Phase einer einzelnen ebenen Welle ist aufgrund der hohen Frequenzen des Lichts von $10^{14...15}$ Hz nicht messbar. Etwa mittels interferometrischer Messungen kann wieder nur die Phasendifferenz zwischen benachbarten Punkten im Raum gemessen werden. Dies ist jedoch nicht unmittelbar Gegenstand der Polarisationsoptik, die zunächst als Phase nur die relative Phase zwischen zwei orthogonalen Polarisationszuständen betrachtet.

Die Polarisationsänderung bei Wechselwirkung mit einem optischen Element wird durch eine 2×2 Matrix mit komplexen Einträgen beschrieben, sie heißt Jones-Matrix[9] $\mathbf{J}$:

$$\begin{bmatrix} E_{p,out} \\ E_{s,out} \end{bmatrix} = \mathbf{J} \begin{bmatrix} E_{p,in} \\ E_{s,in} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} J_{pp} & J_{ps} \\ J_{sp} & J_{ss} \end{bmatrix} \tag{55}$$

Da die absolute Phase eines Lichtbündels nicht zugänglich ist, kann willkürlich z.B. die Phase des $(p, p)-$Elementes null gesetzt werden. Es bleiben somit sieben unabhängige reelle Konstanten, die den Polarisationstransfer beschreiben. Ebenso gilt für den Jones-Vektor, dass willkürlich z.B. die Phase des $p-$Elements null gewählt werden kann. Beispiele für Jones-Vektoren sind für linear in $p-$Richtung polarisiertes Licht $[1, 0]^\top$, für diagonal polarisiertes Licht $[1, 1]^\top$ oder für rechts-zirkular polarisiertes Licht $[1, i]^\top$. Da die Gesamtintensität oftmals nicht von Interesse ist, werden Jones-Vektoren in der Regel normiert, die Vorfaktoren wurden in den angegebenen Beispielen weggelassen. Der allgemeinste Fall ist elliptisch polarisiertes Licht, das durch den Jones-Vektor $\left[a_p, a_s \exp(i\delta)\right]^\top$ beschrieben wird, alle anderen Zustände

9 Leider ist die Bezeichnung der Koordinatenachsen sowie die Indizierung der Matrix alles andere als einheitlich. Wenigstens scheint in der Literatur durchgängig das $p-$ Element das erste eines Jones-Vektors zu sein. Leider gibt es aber sowohl die hier gewählte in der linearen Algebra übliche Indizierung der Jones-Matrix (Zeilenindex, Spaltenindex) wie auch die entgegengesetzte, die rechts oben die Indizes sp schreibt, weil es für anschaulicher angesehen wird den erste Index mit dem einfallenden Licht und den zweiten mit dem reflektierten zu verknüpfen. In dieser Anschauung beschreibt das obere rechte Element den Transfer von $s-$ nach $p-$polarisiertem Licht.

können als entartete Zustände des elliptischen betrachtet werden. Hierbei sind a_p und a_s reelle Amplituden und δ die relative Phase. Beispiele für Jones-Matrizen sind in den oben zitierten Lehrbüchern zu finden. Die beiden wichtigsten polarisierenden Elemente, die auch für ein grundlegendes Verständnis der Ellipsometrie benötigt werden, seien hier noch kurz erwähnt, nämlich der lineare Polarisator sowie der Phasenretarder oder Kompensator, der oft in Gestalt einer $\lambda/4-$Platte mit einer Phasenretardierung zwischen $p-$ und $s-$Polarisation von $\delta = \pi/2$ anzutreffen ist:

$$\mathbf{J}_{Pol} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J}_{Ret} = \begin{bmatrix} \exp(i\delta/2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\delta/2) \end{bmatrix} \tag{56}$$

Zwei für uns entscheidende Eigenschaften von Jones-Matrizen sind die Transformation unter Drehung oder einer allgemeineren unitären Transformation des Koordinatensystems sowie die Multiplikativität bei Anordnung mehrerer polarisierender Elemente in Folge. Bei einer unitären Transformation verhalten sich Jones-Matrizen wie ein Tensor 2. Stufe, was am Beispiel einer Drehung um φ lautet:

$$\mathbf{J}_\varphi = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \mathbf{J} \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \tag{57}$$

Bei mehreren in Folge angeordneten polarisierenden Elementen, die durch die Jones-Matrizen $\mathbf{J}_1$, $\mathbf{J}_2$, ..., $\mathbf{J}_n$ beschrieben werden, wobei $\mathbf{J}_1$ das erste, $\mathbf{J}_2$ das zweite, usw. Element in Ausbreitungsrichtung des Lichts beschreibt, berechnet sich die gesamte Jones-Matrix der Anordnung als:

$$\mathbf{J}_{ges} = \mathbf{J}_n \cdot \ldots \cdot \mathbf{J}_2 \cdot \mathbf{J}_1 \tag{58}$$

Beide Aussagen sind offensichtlich und bedürfen keiner weiteren Herleitung. Gl. (58) folgt direkt aus dem Assoziativgesetz für Matrizen und Gl. (57) ergibt sich durch das "Einschieben" von Einheitsmatrizen in Form von Produkten zweier zueinander inverser Dreh- oder sonstiger unitärer Transformationsmatrizen in eine Gleichung, die einen Polarisationstransfer beschreibt.

Die Polarisationsänderung bei Reflexion an einer Grenzfläche zwischen isotropen Materialien oder an einem entsprechenden Schichtsystem wird durch eine diagonale Jones-Matrix beschrieben. Dasselbe gilt aber auch für strukturierte oder intrinsisch anisotrope Proben, solange die Ein- und Ausfallsebene eine Symmetrieebene der Probe darstellen. Dies kann leicht durch Symmetriereduktion gezeigt werden. Wendet man analog zu Gl. (57) statt einer Drehung eine Spiegelung an der Einfallsebene, also $s \to -s$, an und setzt die Matrix des gespiegelten Elements mit der des ursprünglichen gleich, so folgt die Diagonalität:

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{pp} & J_{ps} \\ J_{sp} & J_{ss} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_{pp} & -J_{ps} \\ -J_{sp} & J_{ss} \end{bmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{bmatrix} J_{pp} & J_{ps} \\ J_{sp} & J_{ss} \end{bmatrix} \\ &\Rightarrow J_{ps} = J_{sp} = 0 \end{aligned} \tag{59}$$

Aus historischen Gründen betrachtet die Ellipsometrie nicht die diagonale Jones-Matrix, sondern die ellipsometrischen Winkel Ψ und Δ, die sich aus dem komplexen Verhältnis ϱ der Diagonalelemente definieren zu:

$$\varrho = \tan\Psi e^{i\Delta} = \frac{E_{p,out}/E_{p,in}}{E_{s,out}/E_{s,in}} = \frac{J_{pp}}{J_{ss}} \tag{60}$$

Abschließend sei erwähnt, dass Jones-Matrizen zwar keine Depolarisation beinhalten, aber dennoch auf partiell polarisierte Lichtwellenfelder angewendet werden können. Diese müssen dann in Form so genannter zweidimensionaler Kohärenzmatrizen beschrieben werden, die jedoch in dieser Arbeit nicht zum Einsatz kommen [Bro1998]. Stattdessen wird im folgenden Kapitel die zu den Kohärenzmatrizen äquivalente Darstellung als Stokes-Vektoren eingeführt.

4.1.2 Mueller-Matrizen

Der Mueller-Formalismus schließt im Gegensatz zum Jones-Formalismus Depolarisation mit ein. Wie im vorigen Abschnitt zu sehen war, beschreiben Jones-Vektoren stets vollständig polarisiertes Licht. Unpolarisiertes oder teilweise polarisiertes Licht stellt dagegen eine inkohärente Überlagerung verschiedener vollständig polarisierter Zustände dar. Es kann also nur ein Kalkül zum Einsatz kommen, das statt komplexen elektrischen Feldern Intensitäten betrachtet. Das Mueller-Kalkül ist damit, obwohl in mancher Hinsicht unbequemer und weniger anschaulich als das Jones-Kalkül, besser an allgemeine Probleme angepasst, da Intensitäten im Gegensatz zu den hochfrequenten elektrischen Lichtfeldern messtechnisch zugänglich sind.

Ein Polarisationszustand wird im Mueller-Formalismus durch vierdimensionale Stokes-Vektoren beschrieben. Diese sind im Gegensatz zu den Jones-Vektoren weniger anschaulich und vergleichsweise willkürlich gewählt. Dafür sind sie mit einer klaren Messvorschrift verbunden. Bezeichnen wir den Jones-Vektor bzw. den durch ihn gekennzeichneten Polarisationszustand $[1,1]^\top$ als diagonale Polarisation und den hierzu senkrechten $[1,-1]^\top$ als antidiagonal und definieren weiterhin, dass linkszirkulares Licht durch $[1,i]^\top$ und rechtszirkulares durch $[1,-i]^\top$ gekennzeichnet sei, so lässt sich der Stokes-Vektor als Messgröße folgendermaßen definieren:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} I_0 \\ I_p - I_s \\ I_{diag} - I_{antidiag} \\ I_{\circlearrowleft} - I_{\circlearrowright} \end{bmatrix}, \tag{61}$$

wobei I die Intensität der jeweiligen Polarisation, I_0 die Gesamtintensität und die Symbole $\circlearrowleft$ und $\circlearrowright$ links- bzw. rechtszirkulare Polarisation bezeichnen. Diese Definition bildet unmittelbar eine Messvorschrift für den Stokes-Vektor, da sich aus einem linearen Polarisator und einer $\lambda/4-$Platte Anordnungen zusammensetzen lassen, die jeweils nur für Licht der geforderten

Polarisation durchlässig sind. Da sich diese Definition an der Messung von Intensitäten orientiert, beinhaltet sie auch den Fall partieller Polarisation. Die wichtigste Eigenschaft des Stokes-Vektors lautet:[10]

$$S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 \leq S_1^2, \tag{62}$$

wobei das Gleichheitszeichen ein vollständig polarisiertes Lichtbündel beschreibt.

Aus Gl. (61) lässt sich unmittelbar der Zusammenhang zwischen Jones- und Stokes-Vektoren ableiten. Wendet man die zugehörigen Jones-Matrizen der oben beschriebenen polarisierenden Anordnungen auf den allgemeinsten Jones-Vektor $\left[a_p, a_s \exp(i\delta)\right]^\top$ an, und bildet dann das Zeitmittel $\langle ... \rangle$ der Betragsquadrate der so erhaltenen Werte, so folgt die Stokes-Vektor-Darstellung des vollständig polarisierten Zustands:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \left\langle a_p^2 + a_s^2 \right\rangle \\ \left\langle a_p^2 - a_s^2 \right\rangle \\ \left\langle 2a_p a_s \cos\delta \right\rangle \\ \left\langle 2a_p a_s \sin\delta \right\rangle \end{bmatrix} \tag{63}$$

Da Stokes-Vektoren Intensitäten enthalten, entspricht ihre Addition einer inkohärenten und damit i.Allg. einer nicht polarisations-erhaltenden Überlagerung verschiedener Lichtbündel. Mit Gl. (62) lässt sich der Polarisationsgrad DOP (degree of polarization) eines Lichtbündels definieren als:

$$DOP = \frac{\sqrt{S_2^2 + S_3^3 + S_4^2}}{S_1} \tag{64}$$

Eine möglicherweise depolarisierende Wechselwirkung mit einem optischen Element kann beschrieben werden durch eine 4×4 Matrix mit reellen Einträgen, die Mueller-Matrix $\mathbf{M}$. Diese wird analog zum Jones-Kalkül mit einem Stokes-Vektor multipliziert, der den Polarisationszustand des einfallenden Lichtwellenfeldes beschreibt:

$$\mathbf{S}_{out} = \mathbf{M}\mathbf{S}_{in} \tag{65}$$

Analog zu den Jones-Matrizen gilt bei hintereinander angeordneten Elementen eine Multiplikativität der Mueller-Matrizen wie sie in Gl. (58) beschrieben ist. Es gibt bestimmte Bedingungen, die eine reelle 4×4 Matrix erfüllen muss, damit sie als physikalisch sinnvolle Mueller-Matrix in Betracht kommt. Für eine detaillierte Beschreibung dieses Sachverhalts wird hier wieder auf Lehrbücher wie [Bro1998] verwiesen. Schließlich sei noch erwähnt, dass oftmals Mueller-Matrizen auf das $(1,1)-$Element normiert dargestellt werden.

Da Mueller-Matrizen auch Depolarisation beschreiben, enthalten sie mehr Information als Jones-Matrizen. Darauf weist auch die Anzahl der unabhängigen Elemente hin, die bei der

10 Wie es sich in letzter Zeit mehr und mehr durchsetzt, werden die Stokes-Parameter und die Mueller-Matrix-Elemente von 1 bis 4 statt, wie oft zu sehen, von 0 bis 3 durchnummeriert.

Jones-Matrix wie oben festgestellt 7 beträgt, bei der Mueller-Matrix aber 16. Da laut Gl. (63) eine eindeutige Vorschrift zur Umrechnung von Jones- nach Stokes-Vektoren besteht, ist es naheliegend, dass auch Jones-Matrizen in Mueller-Matrizen umgeformt werden können. Die Formel hierzu findet man unter anderem in [Azz1977]:

$$\mathbf{MJ} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\left(|J_{pp}|^2 + |J_{ps}|^2 + |J_{sp}|^2 + |J_{ss}|^2\right) & \frac{1}{2}\left(|J_{pp}|^2 - |J_{ps}|^2 + |J_{sp}|^2 - |J_{ss}|^2\right) & Re\left(J_{pp}^* J_{ps} + J_{sp}^* J_{ss}\right) & -Im\left(J_{pp}^* J_{ps} + J_{sp}^* J_{ss}\right) \\ \frac{1}{2}\left(|J_{pp}|^2 + |J_{ps}|^2 - |J_{sp}|^2 - |J_{ss}|^2\right) & \frac{1}{2}\left(|J_{pp}|^2 - |J_{ps}|^2 - |J_{sp}|^2 + |J_{ss}|^2\right) & Re\left(J_{pp}^* J_{ps} - J_{sp}^* J_{ss}\right) & -Im\left(J_{pp}^* J_{ps} - J_{sp}^* J_{ss}\right) \\ Re\left(J_{pp}^* J_{sp} + J_{ps}^* J_{ss}\right) & Re\left(J_{pp}^* J_{sp} - J_{ps}^* J_{ss}\right) & Re\left(J_{pp}^* J_{ss} + J_{ps}^* J_{sp}\right) & -Im\left(J_{pp}^* J_{ss} - J_{ps}^* J_{sp}\right) \\ Im\left(J_{pp}^* J_{sp} + J_{ps}^* J_{ss}\right) & Im\left(J_{pp}^* J_{sp} - J_{ps}^* J_{ss}\right) & Im\left(J_{pp}^* J_{ss} + J_{ps}^* J_{sp}\right) & Re\left(J_{pp}^* J_{ss} - J_{ps}^* J_{sp}\right) \end{bmatrix} \quad (66)$$

Diese Matrix heißt, wie schon die Bezeichnung **MJ** andeutet, Mueller-Jones-Matrix und stellt eine Untermenge aller sinnvollen Mueller-Matrizen dar. Wie unmittelbar aus der Gestalt dieser Matrix ersichtlich ist, entspricht eine diagonale Jones-Matrix einer Mueller-Matrix die block-diagonal ist, d.h. bei einer Unterteilung in vier 2×2 Blöcke sind die beiden Blöcke auf der Hauptdiagonalen besetzt und die beiden anderen enthalten nur Nullen. Es lassen sich aus der Mueller-Jones-Matrix neun Nebenbedingungen herleiten, die Beziehungen zwischen den Matrix-Elementen darstellen. Umgekehrt stellt eine Mueller-Matrix genau dann eine Mueller-Jones-Matrix dar, wenn diese Nebenbedingungen erfüllt sind.

Wie bei den Jones-Matrizen seien nun auch die (normierten) Mueller-Matrizen der einfachsten polarisierenden Elemente linearer Polarisator und Phasenretarder angegeben:

$$\mathbf{M}_{Pol} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}_{Ret} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\delta & -\sin\delta \\ 0 & 0 & \sin\delta & \cos\delta \end{bmatrix} \quad (67)$$

Weiterhin benötigen wir noch für die Ellipsometrie das Transformationsverhalten unter Drehung des Koordinatensystems. Wie im Fall der Jones-Matrizen wird die Mueller-Matrix durch eine Rotations-Matrix **R** orthogonal transformiert:

$$\mathbf{M}_\varphi = \mathbf{R}_\varphi^\top \mathbf{M} \mathbf{R}_\varphi, \; \mathbf{R}_\varphi = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2\varphi) & \sin(2\varphi) & 0 \\ 0 & -\sin(2\varphi) & \cos(2\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (68)$$

Schließlich ergibt sich aus der Mueller-Jones-Matrix, Gl. (66), sowie der Definition der ellipsometrischen Winkel, Gl. (60), die normierte Mueller-Matrix einer isotropen reflektierenden Probe als Funktion der ellipsometrischen Winkel:

$$\mathbf{M}_{isotrop} = \begin{bmatrix} 1 & -\cos(2\Psi) & 0 & 0 \\ -\cos(2\Psi) & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin(2\Psi)\cos\Delta & \sin(2\Psi)\sin\Delta \\ 0 & 0 & -\sin(2\Psi)\sin\Delta & \sin(2\Psi)\cos\Delta \end{bmatrix} \quad (69)$$

In der Simulation kann man beliebig zwischen dem Jones- und Mueller-Kalkül wechseln. Solange keine inkohärenten Summationen auftreten, bleiben die Mueller-Matrizen Mueller-Jones-Matrizen, da das numerische Rauschen in der Regel nicht ausreicht, um die erwähn-

ten neun Nebenbedingungen signifikant zu verletzen. Hat man dagegen mit gemessenen Matrizen zu tun, so stellt die Reduzierung von Mueller-Matrizen zu Jones-Matrizen auch dann eine extrem anspruchsvolle Aufgabe dar, wenn davon ausgegangen werden kann, dass das zu untersuchende optische Element keine Depolarisation einführt. Allein die Messunsicherheiten in realen Messsystemen führen dazu, dass die Phase der berechneten Jones-Matrix massiv fehlerbehaftet ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Algorithmus entwickelt, der aus den ersten drei Spalten einer Mueller-Matrix die Jones-Matrix bis auf zwei unbekannte Vorzeichen berechnet, da das verwendete Ellipsometer genau diese Auswahl an Elementen messen kann. Der Algorithmus funktioniert tadellos für ideale Mueller-Jones-Matrizen. Ein nur minimales Rauschen der Mueller-Matrix-Elemente führt zu erheblichen Phasenfehlern in der Jones-Matrix. Der Algorithmus wurde daher in der Praxis nicht eingesetzt und es wurden Mueller- statt Jones-Matrizen als Messgrößen für die Scatterometrie gewählt, vgl. Kapitel 6.2. Die Reduktion von Mueller-Jones- auf Jones-Matrizen ist bereits dann ein schwieriges Thema, wenn man die vollständige Mueller-Matrix zur Verfügung hat. Es muss versucht werden, den Fehler beim Erfüllen der neun Nebenbedingungen [Bro1998] zwischen den Elementen zu minimieren [Sav1998]. Offenbar ist dies noch schwieriger, wenn die Mueller-Matrix nur teilweise gemessen wird und damit das Problem weniger stark überbestimmt ist.

4.2 Ellipsometrie

Ellipsometrie bezeichnet die Vermessung von Polarisationsänderungen bei Reflexion von Licht unter nicht-senkrechtem Einfall zur Charakterisierung von ebenen Schichtsystemen. Die ursprüngliche und heute noch routinemäßig eingesetzte Aufgabe der Ellipsometrie besteht in der Vermessung von Schichtdicken und / oder Brechungsindizes. Die Ellipsometrie geht zurück auf Paul Drude (1863-1906), der in den Jahren 1887-89[11] den Grundstein dafür legte, was später als Ellipsometrie bezeichnet wurde. Einen schönen historischen Abriss liefert Vedam [Ved1998], gute Einführungen in die Vielfalt der Messtechnik z.B. Hauge [Hau1980] oder Collins [Col1990] sowie etliche Lehrbücher wie [Azz1977][Tom1993][Tom2005].

Fällt linear polarisiertes Licht auf eine Probe, so ist das reflektierte Licht i.Allg. elliptisch polarisiert. Diese Polarisationsellipse wird vermessen, woher der Name Ellipsometrie rührt. Da bei senkrechtem Einfall und isotropen Proben die beiden Polarisationen p und s identisch sind, wird in einer klassischen Ellipsometeranordnung immer schräger Einfall gewählt, oft in der Nähe des Brewster-Winkels, wo sich die Reflektivität in Betrag und Phase für beide Polarisationen stark unterscheidet.

11 Den Auftakt der Pionierarbeiten zur Ellipsometrie machte Drude mit einer theoretischen Abhandlung über die Berechnung der komplexen Reflexionskoeffizienten an absorbierenden Kristallen [Dru1887]. Es folgte ein Bericht über das, was später als ellipsometrische Messungen bezeichnet wird [Dru1888]. Schließlich wurden in einer zweiteiligen Veröffentlichung die Reflexionskoeffizienten an Schichtsystemen hergeleitet, was das Anwendungsgebiet der Ellipsometrie, die Charakterisierung von Mehrfachschichten begründete. [Dru1889a] [Dru1889b]

Bis in die 1970er Jahre wurde die Ellipsometrie überwiegend mit monochromatischen Lichtquellen betrieben, seither trat die spektroskopische Ellipsometrie ihren Siegeszug an, sicherlich getrieben von zahlreichen Messaufgaben aus der Halbleitertechnologie. Viele Halbleiter zeigen über das Wellenlängenspektrum von verfügbaren Lichtquellen erhebliche Änderungen in der Dispersion. Damit kann in der spektroskopischen Ellipsometrie die gesamte Reichhaltigkeit an der Dispersion zugrunde liegenden Phänomenen studiert und messtechnisch ausgenutzt werden. Weiterhin können durch die Vermessung einer Vielzahl von Wellenlängen komplexe Schichtsysteme mit unbekannten Schichtdicken und Brechzahlen untersucht werden. Die Brechzahlen werden je nach Materialklasse durch Dispersionsmodelle mit einigen wenigen freien Parametern beschrieben. Zusammen mit den Schichtdicken liegt die Zahl der Unbekannten meist noch immer weit unter der Zahl der Messwerte, so dass in einer Fit-Prozedur die unbekannten Werte ermittelt werden können.

An dieser Stelle soll nur eine kurze Einführung zum besseren Verständnis der Ellipsometrie gegeben werden. Konkrete metrologische Fragen, wie Messunsicherheiten oder Gerätekonzepte, sind ebenso wenig das Thema wie die vielfältigen Anwendungen neben der Scatterometrie, die eine vergleichsweise junge und spezielle Anwendung darstellt. Es werden hier nur die benötigten Grundlagen der Messtechnik beschrieben, da in dieser Arbeit Messungen mit kommerziellen Ellipsometern betrachtet werden und nicht die Messung an sich das Thema ist. Die Arbeit von Kauffmann [Kau2008] behandelt dieses Thema dagegen ausführlich.

Wie bereits erwähnt stellen die in Gl. (60) definierten ellipsometrischen Winkel Ψ und Δ die traditionellen Messwerte der Ellipsometrie dar. Der Grund ist vermutlich darin zu sehen, dass in einem frühen, einfachen Ellipsometertyp, dem Null-Ellipsometer, diese Größen im Wesentlichen echten Winkelstellungen polarisierender Elemente entsprechen. Ein Ellipsometer ist nichts anderes als eine Anordnung aus einer näherungsweise kollimierten Lichtquelle, einer reflektierenden Probe, einem Detektor sowie polarisierenden Elementen, die in den Strahlengang gebracht werden. Abb. 24 zeigt eine übliche Konfiguration, bestehend aus Polarisator, Kompensator (engl. compensator), Probe (engl. sample) und einem weiteren Polarisator, der wegen seinem Einsatzzweck, das reflektierte Licht zu analysieren, üblicherweise Analysator genannt wird. Kurz wird dies als PCSA Konfiguration bezeichnet. Die Drehwinkel der polarisierenden Elemente werden üblicherweise mit denselben Großbuchstaben P, C und A bezeichnet.

Wie in Abb. 24 angedeutet, wird der Polarwinkel der Einfallsrichtung oft als θ, der Azimutwinkel gegenüber einer ausgewiesenen Achse, etwa bei anisotropen kristallinen oder aber bei strukturierten Proben, als φ bezeichnet. Bei einem flexiblen Ellipsometer für den Einsatz in der Forschung sind oftmals durch Goniometer und Drehtische beide Einfallswinkel sowie durch ein Spektrometer die Lichtwellenlänge als Freiheitsgrade der Messung zugänglich. Beim Null-Ellipsometer werden nun bei einem fest vorgegebenen Winkel, beispielsweise $C = 45°$ die beiden anderen Elemente so lange gedreht, bis die am Detektor gemessene Intensität null wird. In der beispielhaft gezeigten PCSA Konfiguration entspricht in diesem Fall der

Analysatorwinkel A dem ellipsometrischen Winkel Ψ, während der Polarisatorwinkel mit dem anderen ellipsometrischen Winkel über die einfache Beziehung $\Delta = 2P + \pi/2$ verknüpft ist. Hierbei wurde vorausgesetzt, dass der Kompensator eine ideale $\lambda/4-$Platte ist, die das Amplitudenverhältnis beider Polarisationen nicht beeinflusst. Die hier ohne Herleitung angegebenen Aussagen folgen durch einfache Durchrechnung des Ellipsometers im Jones-Kalkül, wobei die oben angegebenen Jones-Matrizen der polarierenden Elemente sowie deren Transformation unter Drehung angewendet wird. Eine detailliertere Betrachtung ist in [Hum2005] zu finden.

Moderne Ellipsometer beruhen i.d.R. nicht mehr auf dem Prinzip des Null-Ellipsometers, sondern überwiegend auf rotierenden polarisierenden Elementen, was zu einem harmonisch modulierten Intensitätssignal führt, das einer Fourier-Analyse unterzogen wird. Die Fourier-Koeffizienten, die beim Rotating-Polarizer- bzw. Rotating-Analyzer-Ellipsometer (RPE bzw. RAE) üblicherweise mit α und β (erster Cosinus- und Sinus-Fourier-Koeffizient der Intensität als Funktion des doppelten Analysatorwinkels $I(2A)$) bezeichnet werden, hängen über einfache Beziehungen mit den Ellipsometrischen Winkeln zusammen, siehe z.B. [Hum2005]. Oftmals zeigen die Winkel- oder Wellenlängenspektren von α und β einen glatteren Verlauf als die Spektren der ellipsometrischen Winkel selbst. Außerdem sind sie die unmittelbaren Messgrößen, während die ellipsometrischen Winkel über nichtlineare Beziehungen aus ihnen berechnet werden müssen, was zu einer ungleichmäßigen Verstärkung des Rauschens führen kann. Daher werden üblicherweise für Fit-Prozeduren statt der ellipsometrischen Winkel diese Fourier-Koeffizienten als Messgrößen herangezogen.

Da die Fourier-Koeffizienten in Kapitel 6.3.2 verwendet werden, sollen sie hier ohne Herleitung als Funktion der Jones-Matrixelemente angegeben werden. Sie folgen aus einer einfachen Durchrechnung des RAE bzw. RPE im Jones-Kalkül und werden hier aus [Sch1996] übernommen. Es ist

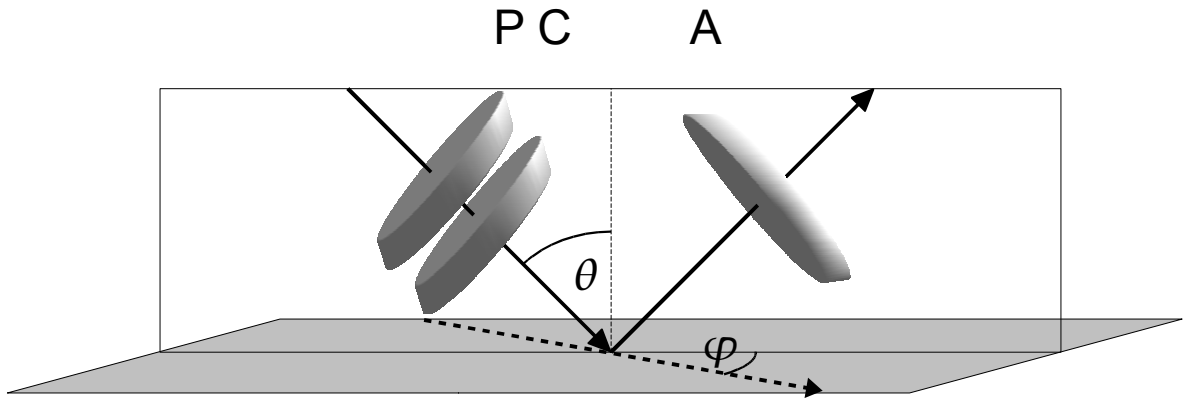


Abbildung 24: Prinzip des Ellipsometers, beispielhaft in der PCSA Konfiguration

$$\alpha = \frac{|J_1|^2 - |J_2|^2}{|J_1|^2 + |J_2|^2} \text{ und } \beta = \frac{J_1 J_2^* + J_2 J_1^*}{|J_1|^2 + |J_2|^2} \text{ mit} \tag{70a}$$

$$\begin{bmatrix} J_1 \\ J_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_{pp} \cos P + J_{ps} \sin P \\ J_{sp} \cos P + J_{ss} \sin P \end{bmatrix} \tag{70b}$$

wobei P der Winkel des feststehenden Polarisators ist, gleich ob sich dieser auf der Beleuchtungsseite ("Polarisator") oder auf der Beobachtungsseite ("Analysator") befindet.

Es sei noch erwähnt, dass oftmals für standardisierte Aufgaben der einfachere Ellipsometertyp PSA, also ohne Kompensator zum Einsatz kommt. Die Konsequenz lässt sich auf einen Blick an Gl. (69) ablesen. Weder der Beleuchtungsarm (polarization state generator – PSG) noch der Detektionsarm (polarizazion state analyzer – PSA) sind imstande, zirkular polarisiertem Licht zu erzeugen bzw. zu detektieren.

Man kann die Messsignale jedes Ellipsometer-Typs im Mueller-Kalkül formulieren und hierbei dem PSG und dem PSA einen Stokes-Vektor zuweisen, der durch Multiplikation des Stokesvektors $[1, 0, 0, 0]^\top$, also der unpolarisierten Quelle, oder dem Detektor mit den Mueller-Matrizen der im Strahlengang befindlichen Elemente entspricht. Ohne Kompensator ist das Element S_4 der Stokes-Vektoren von PSG und PSA gemäß Gl. (61) gleich null. Durch verschiedene Winkelstellungen lassen von Polarisator und Analysator sich also Gleichungen erzeugen, die es erlauben, alle Elemente der Mueller-Matrix außer der vierten Zeile und der vierten Spalte zu rekonstruieren. Damit ist nicht Δ selbst, sondern nur $\cos\Delta$ messtechnisch zugänglich, wodurch dessen Vorzeichen verloren geht. Dies stellt allerdings kein grundsätzliches Problem dar, da das Vorzeichen anhand eines Vergleichs zwischen Simulation und Experiment ergänzt werden kann.

In dieser Arbeit kam ein Jobin Yvon UVISEL Ellipsometer [WWW03] zum Einsatz, das auf einem photoelastischen Modulator (PEM) beruht. Dieses Prinzip wird phasen- oder polarisationsmodulierende Ellipsometrie genannt. Ein photoelastischer Modulator ist ein eingespannter Kristall, z.B. aus Quarz, der durch einen Piezo-Oszillator zu hochfrequenten Schwingungen von z.B. 50 kHz angeregt wird. Dadurch wird eine zeitlich veränderliche Phasenretardierung zwischen $p-$ und $s-$Polarisation eingeführt, so dass das phasenmodulierende Ellipsometer (PME) im Prinzip äquivalent zu einem Rotating Compensator Ellipsometer (RCE) ist. Allerdings ist die Theorie des PME einiges komplizierter, da die Phasenretardierung δ sinusförmig moduliert wird, ihrerseits aber in den Jones- oder Mueller-Matrizen des Phasenretarders wiederum innerhalb von Sinus- oder Cosinusfunktionen steht, vgl. Gln. (56) und (67). Diese unhandliche Funktion $\sin(A \sin(\omega t) + \delta_0)$ wird üblicherweise durch eine Reihenentwicklung nach Besselfunktionen handhabbar gemacht. Das Prinzip des PME geht zurück auf Jasperson und Schnatterly [Jas1969], wurde später jedoch intensiv bearbeitet und in der Literatur beschrieben von Jellison Jr. und Modine [Jel1990][Jel1997a][Jel1997b][Jel2005]. Von den letzteren existieren sehr gute und verständliche Abhandlungen, unter anderem im relativ modernen Lehrbuch "Handbook of Ellipsometry" hrsg. von Tompkins [Jel2005][Tom2005].

Daher soll an dieser Stelle wieder nur ein grobes Verständnis erlangt werden. Für die Details wird auf die Literatur verwiesen.

Die bereits erwähnten Autoren Jellison Jr. und Modine propagieren insbesondere einen Ellipsometertyp mit zwei Paaren aus PEM und Polarisator – eines im Beleuchtungs- und eines im Detektionsarm [Jel1997a][Jel1997b]. Dies hat den Vorteil, dass sowohl PSG als auch PSA zwischen linear und zirkular polarisiertem Licht transferieren können, oder anders gesprochen können so in Beleuchtung und Detektion jeweils eine volle Basis von Stokes-Vektoren generiert werden. Damit ist mit unterschiedlichen Winkelstellungen der polarisierenden Elemente die volle Mueller-Matrix messtechnisch zugänglich. Am ITO wurde von Jochen Kauffmann [Kau2005][Kau2008] ein solches Doppel-PEM Ellipsometer in Kombination mit einem Laser-Diffraktometer realisiert. Dieses kam jedoch in dieser Arbeit nicht zum Einsatz.

Im bereits erwähnten Buchkapitel [Jel2005] findet sich neben einer ausführlichen Beschreibung des Doppel-PEM-Ellipsometers auch eine genaue Abhandlung einschließlich Herleitung der Messsignale im Mueller-Kalkül für unterschiedliche Konfigurationen. Hier ist die Konfiguration PSMA von Interesse, wobei M für Modulator steht. Bis auf die oben kurz angedeutete Entwicklung der geschachtelten Sinus-Funktion nach Besselfunktionen ist die Durchrechnung der Theorie im Mueller-Kalkül unproblematisch. Es wird die Probe durch eine unbekannte Mueller-Matrix beschrieben, alle polarisierenden Elemente, die in beliebiger Winkelstellung stehen können, werden gemäß den oben angegebenen Mueller-Matrizen aus Gl. (67) sowie der Drehtransformation Gl. (68) berücksichtigt. Aus der Bessel-Entwicklung ergeben sich drei relevante Messsignale, nämlich das unmodulierte Intensitätssignal I_0 sowie die Vorfaktoren der beiden Bessel-Reihen, die sich aus der Entwicklung der Sinus- und Cosinus-Funktion ergeben, I_s und I_c. Das Ergebnis dieser drei Messsignale sei hier wiedergegeben:

$$\begin{aligned} I_0 = {} & M_{11} + \cos(2P)M_{12} + \sin(2P)M_{13} + \cos(2(A-M))\times \\ & [\cos(2M)(M_{21} + \cos(2P)M_{22} + \sin(2P)M_{23}) + \\ & \sin(2M)(M_{31} + \cos(2P)M_{32} + \sin(2P)M_{33})] \end{aligned} \tag{71a}$$

$$I_s = \sin(2(A-M))(M_{41} + \cos(2P)M_{42} + \sin(2A)M_{43}) \tag{71b}$$

$$\begin{aligned} I_c = {} & \sin(2(A-M))[\cos(2M)(M_{31} + \cos(2P)M_{32} + \sin(2P)M_{33}) - \\ & \sin(2M)(M_{21} + \cos(2P)M_{22} + \sin(2P)M_{23})] \end{aligned} \tag{71c}$$

wobei P und A wie bisher die Winkel von Polarisator und Analysator[12] sind, M der Winkel des Modulators und M_{jk} die Einträge der Mueller-Matrix der Probe.

Diese Gleichungen enthalten alle Mueller-Matrix-Elemente der ersten drei Spalten, nicht aber der vierten Spalte. Dies ist aufgrund der Überlegungen weiter oben in diesem Kapi-

12 Wie üblich wird hier der Polarisator im Beleuchtungsarm Polarisator und der im Detektionsarm Analysator genannt. Beim verwendeten Gerät sind diese Bezeichnungen umgekehrt, da beim Vorgängermodell der Strahlengang entgegen der jetzigen Richtung verlief und die ursprünglichen Bezeichnungen beibehalten wurden.

tel leicht verständlich. Im Beleuchtungsarm befindet sich kein Kompensator, so dass dieser durch einen Stokes-Vektor mit $S_4 = 0$ beschrieben wird. Bei der Multiplikation dieses Vektors mit der Mueller-Matrix fällt somit die vierte Spalte weg. Das heißt natürlich, dass nur drei Spalten der Matrix messtechnisch zugänglich sind. Wie aus Gl. (69) ersichtlich ist, genügt dies zur Messung der ellipsometrischen Winkel inklusive des Vorzeichens von Δ. Die Gln. (71a-c) vereinfachen sich je nach Messkonfiguration erheblich. Analysator und Modulator sind mit einer festen Winkeldifferenz von $A - M = 45°$, durch die Wahl von einfachen Werten wie 0° und ±45° für Polarisator- und Modulatorwinkel fallen jeweils einige Terme weg. Für eine eindeutige Messung der ellipsometrischen Winkel ist die sequentielle Messung von zwei unterschiedlichen Messkonfigurationen nötig.

Damit wurde die Ellipsometrie mit ausreichender Ausführlichkeit für die weitere Arbeit eingeführt. Im folgenden Unterkapitel werden noch kurze Betrachtungen zur Generalisierten Ellipsometrie angestellt, für weitere Aspekte der Ellipsometrie muss auf die zahlreichen Lehrbücher verwiesen werden.

4.3 Generalisierte Ellipsometrie

Wie oben erwähnt, geht die gewöhnliche Ellipsometrie zunächst von isotropen Proben und damit von diagonalen Jones-Matrizen aus, vgl. Gl. (60). Sollen nun Proben mit nicht-diagonaler Jones-Matrix charakterisiert werden, so muss die Ellipsometrie erweitert, also generalisiert werden. In diesem Fall werden dann Jones- oder Mueller-Matrizen oder hieraus abgeleitete Größen aus mehreren ellipsometrischen Messungen rekonstruiert. Der Ursprung nicht-diagonaler Jones-Matrizen kann bei klassischen Messaufgaben der Ellipsometrie, also der Charakterisierung von homogenen Schichtsystemen, in geringer Kristallsymmetrie und einem daraus resultierenden nicht degenerierten Tensorcharakter der dielektrischen Konstante ε liegen. Bei der Scatterometrie dagegen wird die Symmetrie durch Strukturen im Bereich oder unterhalb der Wellenlänge gebrochen.

Ein üblicher Ansatz in der Generalisierten Ellipsometrie besteht in der Messung von Betrag und Phase der auf das $(s, s)-$Element normierten Jones-Matrix-Einträge. Diese können definiert werden als:

$$\tan \Psi_{pp} e^{i\Delta_{pp}} = J_{pp}/J_{ss} \tag{72a}$$

$$\tan \Psi_{ps} e^{i\Delta_{ps}} = J_{ps}/J_{ss} \tag{72b}$$

$$\tan \Psi_{sp} e^{i\Delta_{sp}} = J_{sp}/J_{ss} \tag{72c}$$

Die Normierung auf das $(s, s)-$, also in der üblicherweise gewählten Reihenfolge $(2, 2)-$Element mag unschön erscheinen, da oft Matrizen, wie z.B. auch die Mueller-Matrizen, auf das $(1, 1)-$Element normiert werden. Der Grund dieser Wahl ist jedoch naheliegend: Die Außer-Diagonal-Elemente sind im Eigensystem der Jones-Matrix = 0, das $(p, p)-$Element wird beim

Brewsterwinkel 0. Nur das $(s, s)-$Element ist stets $\neq 0$ und damit am besten als Divisor für eine Normierung geeignet.

Die Definition gemäß Gl. (72) folgt der frühesten dem Verfasser bekannten Veröffentlichung zur Generalisierten Ellipsometrie [Azz1972a][Azz1972b][Azz1972c]. Azzam und Bashara scheinen damit die Begründer der Methode wie auch des Begriffs zu sein. In den vergangenen Jahren kann hauptsächlich Schubert [Sch1996][Sch1998][Sch2005a] mit dem Begriff der Generalisierten Ellipsometrie in Verbindung gebracht werden, der die Technik intensiv in der Halbleiterphysik angewendet hat. Unglücklicherweise verwendet dieser wie in der Fußnote auf Seite 72 angedeutet eine gegenüber Azzam und Bashara vertauschte Indizierung der Jones-Matrix, so dass bei der bei der Anwendung von Formeln Vorsicht geboten ist. Zudem weicht auch die Definition der Kenngrößen von Gl. (72) ab, indem das $(p, s)-$Element auf das $(p, p)-$ statt auf das $(s, s)-$Element normiert wird. Die in der Polarisationsoptik ohnehin herrschende Verwirrung um Indizierungs- und Vorzeichenkonventionen erfährt also in der Generalisierten Ellipsometrie noch eine Steigerung.

In einem Messvorgang eines aus zwei Polarisatoren und einem Retarder aufgebauten Ellipsometers lassen sich je zwei der in Gl. (72) definierten Größen messen, gleich ob es sich um eine Null-Ellipsometer oder ein Ellipsometer mit einem rotierenden Element handelt [Azz1977][Sch2005a]. Damit sind mindestens drei Messungen bei unterschiedlichen Winkelstellungen eines während der Messung unveränderlich orientierten Elements nötig, um den vollen Satz an Parametern zu messen, eine weitere, falls auch noch der Betrag von J_{ss} als siebte und letzte unabhängige reelle Größe der Jones-Matrix ermittelt werden soll. In der Praxis werden zur Erhöhung der Messgenauigkeit i.d.R. mehr als drei Stellungen verwendet.

Neben der hier sehr kurz umrissenen Rekonstruktion der Jones-Matrix lässt sich mit Ellipsometern, die aus festen und rotierenden Elementen aufgebaut sind, auch die Mueller-Matrix rekonstruieren. Wie bereits bei der Diskussion in Kapitel 4.2 um die messtechnische Zugänglichkeit des Vorzeichens von Δ ausgeführt, ist die vierte Spalte der Mueller-Matrix nur zugänglich, falls sich im PSG ein phasenretardierendes Element befindet, die vierte Zeile nur dann, falls im PSA eines enthalten ist. Übliche Anordnungen verwenden z.B. ein- und ausklappbare Kompensatoren [Hau1980] oder rotierende Kompensatoren [Che2004].

Für das in dieser Arbeit verwendete phasenmodulierende Ellipsometer in der Konfiguration PSMA wurden bereits in Gl. (71) alle erforderlichen Beziehungen für die Rekonstruktion der Mueller-Matrix angegeben. Mithilfe mehrerer verschiedener Stellungen von Polarisator- und Modulatorwinkel lassen sich hiermit drei Spalten rekonstruieren. Wie aus Gl. (71) unmittelbar ersichtlich ist, werden i.Allg. auch Messungen der Gesamtintensität I_0 benötigt, während für die reinen ellipsometrischen Messungen nur die Fourier-Koeffizienten I_c und I_s ausgewertet werden. Die Berücksichtigung von I_0 ist insofern ein Nachteil, als Intensitätsschwankungen der Lampe mit erfasst werden. Der exakte im verwendeten Ellipsometer UVISEL implementierte Algorithmus zur Rekonstruktion verwendete Algorithmus ist dem Verfas-

ser zwar bekannt, kann jedoch aus Gründen der Geheimhaltung hier nicht wiedergegeben werden.

Während bei Ellipsometern mit rotierenden Elementen sowohl die Mueller- als auch die Jones-Matrix-Rekonstruktion in der Literatur beschrieben ist, beschränkt sich die Betrachtung von phasenmodulierenden Ellipsometern in der Literatur nach Kenntnis des Verfassers auf das Mueller-Kalkül. Eine Beschreibung im Jones-Formalismus ist ebenso denkbar. Die im Kapitel 4.2 erwähnte Entwicklung der Phasenmodulation von Bessel-Funktionen muss hierfür in die Jones-Matrix eines allgemeinen Retarders, Gl. (56), eingesetzt werden. Es ist aber zu erwarten, dass die Mathematik dieser Berechnung schnell unhandlich wird, was auch eine Optimierung des Rekonstruktionsalgorithmus hinsichtlich Messfehlern schwierig macht.

Die Rückführung von Mueller- auf Jones-Matrizen ist wie erwähnt alles andere als trivial. Jellison Jr. und Modine, die in zahlreichen Veröffentlichungen [Jel1990][Jel1997a] [Jel1997b][Jel2005][13] demonstrieren, dass sie die phasenmodulierende Ellipsometrie in allen Facetten beherrschen, weisen zwar darauf hin [Jel1997b], dass mit einer einzigen Messung eines Doppel-PEM-Ellipsometers die Mueller-Jones-Matrix und damit die Jones-Matrix gemessen werden könne. Allerdings zeigen Sie kein nicht-triviales Messbeispiel, sondern lediglich die Vermessung einer diagonalen Jones-Matrix einer isotropen Silizium-Probe.

Nach den obigen Ausführungen wurde in dieser Arbeit nicht der Versuch unternommen, Jones-Matrizen mit dem PME zu messen oder mit dem PME gemessene partielle Mueller-Matrizen in Jones-Matrizen zurückzuführen. Dies wäre zwar in mehrfacher Hinsicht wünschenswert. Zum einen kann, wie sich zeigen wird, für alle betrachteten Beispiele davon ausgegangen werden, dass das Jones-Kalkül eine ausreichende Beschreibung liefert und alle auftretenden Mueller-Matrizen damit Mueller-Jones-Matrizen sind. Damit ist die Beschreibung des Problems im Mueller-Formalismus allgemeiner gewählt als nötig. Zum anderen wäre eine Anlehnung an die Terminologie der Generalisierten Ellipsometrie im Jones-Formalismus wie sie im Bereich der intrinsisch anisotropen Schichtsysteme verwendet wird erstrebenswert, da Anschauungen und Begrifflichkeiten aus der Welt der intrinsischen Doppelbrechung in die Welt der strukturinduzierten Doppelbrechung übertragen werden könnten. Dies wurde ja auch bereits an anderer Stelle in der Scatterometrie getan [Rei2007]. Andererseits muss aber gesagt werden, dass aufgrund der hier dargestellten Arbeiten nicht und schon gar nicht allgemein gültig entschieden werden kann, welche Messgrößen für die Scatterometrie an Proben mit geringer Symmetrie am geeignetsten sind. Dies hängt sicherlich von vielen Faktoren ab, etwa von der betrachteten Struktur(klasse), dem verwendeten Ellipsometertyp, der Größenordnung der strukturinduzierten Doppelbrechung usw. usf. Die Diskussion um geeignete Messgrößen wird in Kapitel 6.1 wieder aufgegriffen.

Abschließend sei erwähnt, dass, wie auch schon bei der allgemeinen Einführung in die Ellipsometrie gesagt wurde, hier nur die Grundlagen zum Verständnis der Messtechnik als

13 Neben den hier angeführten vier Veröffentlichungen, die die Messtechnik als solche im Detail beschreiben, sind etliche weitere der beiden Autoren, etwa über verschiedenste Anwendungen des PME verfügbar.

solcher kurz vorgestellt werden können. Unter dem Begriff der Generalisierten Ellipsometrie muss aber weit mehr verstanden werden. Insbesondere umfasst die Generalisierte Ellipsometrie wie auch schon die gewöhnliche Ellipsometrie die analytische Berechnung der Messsignale anhand der Materialdaten sowie Fit-Prozeduren, die aus den Messdaten und den berechneten Messsignalen mit freien Parametern Schichtdicken und Brechzahlen, im allgemeinen Fall Einträge eines Brechzahltensors ermitteln. Etliche ausführliche Darstellungen der Theorie und Anwendung der Generalisierten Ellipsometrie wurden von Schubert gegeben [Sch1998] [Sch2005a]. Insbesondere findet hier die analytische Berechnung der Reflexion und Transmission an Schichtstapeln mit anisotropen Schichten breiten Raum, die auf $4 \times 4-$Matrix-Kalkülen basieren, die auf Berreman [Ber1972] bzw. Yeh [Yeh1980] zurückgehen.

In der Scatterometrie sind analytische Berechnungen der Messsignale überwiegend nicht möglich, so dass die eben erwähnten Theorien dort keinen Einsatz findet. Eine Aufweichung dieser Grenze ist allerdings denkbar, beispielsweise bei Scatterometrie an starken Sub-Wellenlängen-Strukturen, deren Strukturparameter mittels einer Effektiv-Medium-Theorie erfasst werden können. Treten diese in Kombination mit komplexen Schichtstapeln auf, so würde sich zunächst ein Fit einer Messung nach der Theorie der Generalisierten Ellipsometrie anbieten, der gleichzeitig Schichtdicken und Brechzahlen homogener Schichten sowie die effektiven Brechzahlen der zu untersuchenden Strukturen ermittelt. In einem zweiten Schritt könnte dann von den effektiven Brechzahlen auf die Struktur geschlossen werden.

4.4 Rekonstruktion von ellipsometrischen Winkeln, Jones- und Mueller-Matrizen aus simulierten Beugungsspektren

In diesem Abschnitt wird die Berechnung von ellipsometrischen Winkeln, Jones- und Mueller-Matrizen anhand von simulierten Beugungsspektren dargestellt. Anders als in der Messung können die Ergebnisse zweier Simulationsrechnungen mit unterschiedlicher Polarisation des Beleuchtungsarms miteinander verknüpft werden. Die Phasendifferenz zwischen beiden Jones-Vektoren kann zu 0 gewählt werden, so dass anhand von nur zwei Rechnungen die vollständige Jones-Matrix rekonstruiert werden kann, während im Experiment drei bzw. vier Messungen nötig sind um die normierte oder nicht normierte Jones-Matrix zu erhalten.

Im Anhang wird in Gl. (103) dargestellt, wie aus der RCWA die phasenrichtigen komplexen elektrischen Felder berechnet werden. Fällt die Einfallsebene mit einer Symmetrieebene der Struktur zusammen, so ist die Jones-Matrix diagonal und kann aus einer einzelnen Beugungsrechnung ermittelt werden. Voraussetzung ist nur, dass die Polarisation des einfallenden Zustandes weder ein $p-$ noch ein $s-$Zustand ist, sondern eine Überlagerung aus beiden. Dies lässt sich ausdrücken durch einen Polarisationswinkel[14] ψ, der den Winkel der elektrischen Feldvektors zur Einfallsebene angibt. Damit wird der Jones-Vektor der einfallenden

14 Unglücklicherweise wird das kleine ψ üblicherweise für diesen Winkel verwendet, was eine Verwechslungsgefahr mit dem ellipsometrischen Winkel groß Ψ birgt. Trotzdem wird dies hier so übernommen, um mit vielen Veröffentlichung wie etwa [Moh1995a] kompatibel zu sein.

ebenen Welle im ps–System $\mathbf{E_{in}} = [\sin\psi, \cos\psi]^\top$. Gemäß der Definition der ellipsometrischen Winkel, Gl. (60), folgt dann sofort:

$$\varrho = \tan\Psi e^{i\Delta} = \frac{E_{p,out}/\sin\psi}{E_{s,out}/\cos\psi} \tag{73}$$

Liegt die Einfallsrichtung nicht mehr in einer Symmetrieebene der Struktur, dann verlieren die ellipsometrischen Winkel ihre Bedeutung als allgemeine Messgrößen, die das polarisierende Verhalten der Struktur vollständig beschreiben. Man könnte in diesem Fall lediglich ellipsometrische Winkel als spezielle Messgrößen eines bestimmten Ellipsometer in einer vorgegebenen Messkonfiguration berechnen, die jedoch in keiner Weise vergleichbar mit solchen Werten sind, die mit einem anderen Ellipsometertyp oder in einer anderen Gerätekonfiguration gemessen werden. In diesem Fall stellen nur Jones- oder Mueller-Matrizen oder hieraus abgeleitete Größen sinnvolle und vergleichbare Messgrößen dar.

Wie eingangs erwähnt, ist die Phasenbeziehung zwischen zwei zueinander orthogonalen einfallenden Polarisationszuständen für den Fall der Simulation bekannt und kann zu 0 gewählt werden. Die unbekannte Jones-Matrix kann somit gleichzeitig auf beide einfallenden Zustände angewendet werden, indem diese in einer Matrix zusammengefasst werden:

$$\begin{bmatrix} E_{p,out1} & E_{p,out2} \\ E_{s,out1} & E_{s,out2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_{pp} & J_{ps} \\ J_{sp} & J_{ss} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{p,in1} & E_{p,in2} \\ E_{s,in1} & E_{s,in2} \end{bmatrix} \tag{74}$$

Da die einfallenden Polarisationen orthogonal gewählt werden, ist der zweite Faktor auf der rechten Seite mit Sicherheit nicht singulär und die Jonesmatrix folgt sofort:

$$\begin{bmatrix} J_{pp} & J_{ps} \\ J_{sp} & J_{ss} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{p,out1} & E_{p,out2} \\ E_{s,out1} & E_{s,out2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{p,in1} & E_{p,in2} \\ E_{s,in1} & E_{s,in2} \end{bmatrix}^{-1} \tag{75}$$

Wenn Depolarisation beim simulierten Polarisationstransfer ausgeschlossen werden kann, so lässt sich aus der gewonnenen Jones-Matrix nach Gl. (66) sofort auch die Mueller-Matrix berechnen. Wie sich herausstellen wird, ist dies bei den in dieser Arbeit betrachteten Beispielen der Fall.

Die direkte Rekonstruktion der Mueller-Matrix ohne den Umweg über die Jones-Matrix stellt keinen bedeutenden Mehraufwand dar, bietet aber die Möglichkeit Depolarisation durch endliche zeitliche oder räumliche Kohärenz des einfallenden Lichtbündels in der Simulation zu erfassen. Um nicht nur anhand der Messung sondern bereits in der Simulation abzuschätzen, ob Depolarisation eine Rolle spielt, wird dieser Weg hier zusätzlich zur Berechnung aus der Jones-Matrix vorgeschlagen.

Wie im Fall der Jones-Matrix-Rekonstruktion gilt es wieder, ein Gleichungssystem mit einer regulären Matrix, diesmal aber von einfallenden Stokes-Vektoren aufzustellen. Gemäß Gl. (63) lassen sich Jones-Vektoren, die die unmittelbaren Eingabeparameter einer Beugungssimulation darstellen, in Stokes-Vektoren umwandeln. Damit lassen sich aus einer willkürlich

gewählten Basis von Jones-Vektoren, die jeweils vollständig polarisierte Zustände beschreiben, die zugehörigen Stokes-Vektoren bestimmen. Naheliegende Zustände sind $p-$, $s-$, diagonal und rechtszirkular polarisiertes Licht, deren Jones-Vektoren $\mathbf{E}_{in1} = [1, 0]^\top$, $\mathbf{E}_{in2} = [0, 1]^\top$, $\mathbf{E}_{in3} = [1, 1]^\top$ und $\mathbf{E}_{in4} = [1, i]^\top$ lauten. Die zugehörigen Stokes-Vektoren sind $\mathbf{S}_{in1} = [1, 1, 0, 0]^\top$, $\mathbf{S}_{in2} = [1, -1, 0, 0]^\top$, $\mathbf{S}_{in3} = [1, 0, 1, 0]^\top$ und $\mathbf{S}_{in4} = [1, 0, 0, 1]^\top$. Diese sind linear unabhängig und können in einer regulären Matrix zusammengefasst werden. Daraus folgt analog zu Gl. (75) sofort das Ergebnis der Mueller-Matrix-Rekonstruktion:

$$M = \begin{bmatrix} S_{out1,1} & S_{out2,1} & S_{out3,1} & S_{out4,1} \\ S_{out1,2} & S_{out2,2} & S_{out3,2} & S_{out4,2} \\ S_{out1,3} & S_{out2,3} & S_{out3,3} & S_{out4,3} \\ S_{out1,4} & S_{out2,4} & S_{out3,4} & S_{out4,4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \tag{76}$$

Hierfür sind genau wie bei der Jones-Matrix-Rekonstruktion nur zwei Beugungsrechnungen notwendig, da die vier Jones-Vektoren $\mathbf{E}_{in1}$ bis $\mathbf{E}_{in4}$ als Linearkombinationen zweier linear unabhängiger Jones-Vektoren geschrieben werden können. Wegen der Linearität der RCWA können auch die Jones-Vektoren der reflektierten bzw. gebeugten Wellen $\mathbf{E}_{out1}$ bis $\mathbf{E}_{out4}$ in der gleichen Weise als Linearkombination der Simulationsergebnisse der zwei linear unabhängigen Jones-Vektoren gebildet werden.

Wird die eben beschriebene Prozedur ein einziges Mal angewendet, so erhält man wie beim Umweg über die Jones-Matrix eine Mueller-Jones-Matrix als Ergebnis, da zu keinem Zeitpunkt eine inkohärente Überlagerung verschiedener Zustände auftritt. Will man den Einfluss endlicher zeitlicher oder räumlicher Kohärenz studieren, so muss in Gl. (76) eine Summe von gebeugten bzw. reflektierten Stokes-Vektoren gebildet werden, die unterschiedlichen Wellenlängen oder Einfallsrichtungen des Lichts beschreiben.

5 Scatterometrie als Methode zur quantitativen Charakterisierung von Waferstrukturen

5.1 Quantitative Wafer-Messtechnik, CD-Messtechnik

Die Herstellung aktueller Halbleiterbauelemente wie Speicherchips oder Prozessoren erfordert eine Vielzahl von Herstellungsschritten sowie die zugehörige Inline-Messtechnik, die das Ergebnis der einzelnen Schritte überprüft. Neben qualitativen Kontrollen wie Defekt-Inspektion sind quantitative Kontrollen zur Überprüfung der Strukturdimension und -form der prozessierten Nanostrukturen notwendig. Da gerade die kleinsten mithilfe der aktuellen Technologie erzeugten Strukturbreiten am kritischsten zu kontrollieren sind, hat sich der Begriff der kritischen Dimension, engl. Critical Dimension (CD) etabliert. Die Vermessung von Dimensionen und Strukturformen wird oft unter dem Begriff CD-Messtechnik zusammengefasst. Zuweilen ist auch von Critical Shape Measurement die Rede, um zu betonen, dass nicht nur die kleinsten lateralen Abmessungen sondern weitere Parameter wie Seitenwandwinkel etc. von Interesse sind. Eine umfassende Übersicht über das Thema liefert Diebolds "Handbook of Silicon Semiconductor Metrology", [Die2001a]. Etwas weniger umfassend, dafür aktueller ist Diebolds Buchkapitel "In-Line Metrology" [Die2008] im "Handbook of Semiconductor Manufacturing Technology" von Doering und Nishi.

Als aktuell hauptsächlich eingesetzte Methoden der CD-Messtechnik sind die Inspektion mit dem Elektronenmikroskop, engl. Critical Dimension Scanning Electron Microscopy (CDSEM), sowie die Scatterometrie zu nennen. Letztere wird auch mit dem Namen optische CDMesstechnik (OCD) bezeichnet. Die Scatterometrie gliedert sich wiederum in zahlreiche Varianten, die im Kapitel 5.3 ausführlich dargestellt werden. Ergänzend zur reinen lateralen CD-Messtechnik mit dem SEM, engl. Top-Down-SEM, können auch Strukturquerschnitte betrachtet werden. Zu diesem Zweck wird mit einem fokussierten Ionenstrahl, engl. Focused Ion Beam (FIB), eine Kavität so gefräst, dass eine senkrechte Schnittfläche unter schrägem Winkel im Rasterelektronenmikroskop betrachtet werden kann. Die englische Bezeichnung für eine solche Messung lautet Cross-Section-SEM oder X-SEM. In letzter Zeit wird aber auch verstärkt versucht, aus Top-Down-SEM-Bildern Information über einfache Merkmale der Profilform, etwa Seitenwandwinkel von Linien zu erhalten [Die2008]. Hierzu wird die Information aus mehreren Einzelaufnahmen mit unterschiedlichen Kippwinkeln der Probe mit ähnlichen Ansätzen wie in der Photogrammetrie zu einem 3D-Datensatz zusammengeführt. Einen

alternativen Ansatz stellt der Vergleich von CD-SEM Bildern mit Bibliotheken von simulierten Bildern bei Formvariation dar, d.h. der modellbasierte Ansatz, wie er in der Scatterometrie verwendet wird, wird zur Formvermessung auf die CD-SEM Technik übertragen [Gor2004].

Neben den beiden erwähnten Methoden spielen auch elektrische CD-Messungen nach dem Prinzip von Widerstandsmessungen sowie Rasterkraftmikroskopie, engl. Critical Dimension Atomic Force Microscopy (CD-AFM), eine Rolle [Die2008]. Elektrische Messungen setzen eine Kontaktierung der Probe voraus und sind daher erst in einem vergleichsweise späten Stadium der Prozessierung einsetzbar. CD-AFM ist bei aktuellen *dichten Strukturen*, solchen also, bei denen der Abstand der Strukturen ungefähr so groß ist wie ihr Durchmesser, durch die Größe der Spitze limitiert und kommt vermehrt nur noch bei *isolierten Strukturen* zum Einsatz. Der enorme Vorteil von CD-AFM besteht jedoch darin, dass die Vermessung der Strukturgeometrie bei harten Materialien nahezu unabhängig vom Material erfolgt. Damit dient es vor allem als Referenz für CD-SEM und Scatterometrie. Durch den Einsatz stempelförmiger Spitzen lassen sich auch Seitenwände von tiefen Strukturen abtasten.

Wie erwähnt kommen in der Prozesskontrolle überwiegend CD-SEM und Scatterometrie zum Einsatz. CD-SEM erfordert keine Modellierung der Probe, so dass auch grobe oder unerwartete Abweichungen von der Soll-Geometrie erkannt werden können. Es wird stets die lokale Geometrie von gleichförmig oder periodisch fortgesetzten Strukturen erfasst, so dass mit einer Stichprobe von Messungen auch laterale Schwankungen über eine gleichförmig strukturierte Fläche detektiert werden können. Nachteilig sind lange Messzeiten sowie teilweise Zerstörung und Kontamination der Probe. Insbesondere Strukturen in Fotolack, engl. Photoresist oder einfach Resist, erleiden bei CD-SEM-Messungen eine Schrumpfung des Materials.

Die Scatterometrie als optische Methode hat genau hier ihre Vorteile, sie ist schnell und zerstörungsfrei. Ihr Prinzip wird im nächsten Kapitel genauer erläutert. Ihre grundlegende Eigenschaft ist der Ansatz der modellgestützten Rekonstruktion. Es werden primäre Messgrößen erfasst, die zunächst sehr abstrakt und unanschaulich sind, sie sollen hier einfach als Spektren oder auch als Scatterogramme bezeichnet werden. Beispiele für Scatterogramme sind Reflektivitäten bei polarisierter Beleuchtung als Funktion des Einfallswinkels oder ellipsometrische Winkel als Funktion der Wellenlänge. Erst durch den Abgleich zwischen gemessenen und simulierten Spektren erfolgt die eigentliche Rekonstruktion von Strukturdimensionen, den sekundären Messgrößen. Damit können prinzipiell nur diejenigen Parameter rekonstruiert werden, die vom Benutzer in die Modellierung eingeschlossen werden. Noch wichtiger: nicht in der Modellierung erfasste Größen können zu einer Verfälschung der Werte von erfassten Größen führen.

Weiterhin ist bei einer Messaufgabe nicht von vornherein klar, ob Scatterometrie einer gegebenen Variante in einer bestimmten Konfiguration auf einige oder alle interessierenden Parameter sensitiv ist, und ob eine möglicherweise zu hohe Korrelation zwischen den Parametern besteht. Anschaulich gesprochen bedeutet mangelnde Sensitivität, dass sich die Spektren

bei Variation eines Parameters nicht oder nur wenig ändern. Eine Rekonstruktion ist in diesem Fall schlicht nicht möglich. Korrelation bedeutet anschaulich, dass verschiedene Parameter die Spektren in sehr ähnlicher Weise ändern, so dass Mehrdeutigkeiten entstehen können.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Scatterometrie durch ihre Schnelligkeit und Zerstörungsfreiheit entscheidende Vorteile gegenüber CD-SEM bietet. Außerdem lassen sich im Prinzip beliebige Formen nicht nur lateraler sondern auch axialer Merkmale von Nanostrukturen vermessen, immer vorausgesetzt, dass sich in einer Messkonfiguration ausreichende Sensitivität und keine zu hohe Korrelation mit anderen unbekannten Parametern zeigen. Die große Herausforderung der Scatterometrie besteht in der Modellierung. Die Rekonstruktion kann nur so gut sein wie das zugrunde liegende Modell.

In der Praxis muss in erster Linie gewährleistet sein, dass sich Parameter im Lauf des Produktionsprozesses nicht ändern. Daher ist die Wiederholgenauigkeit, engl. precision, die entscheidende Kenngröße. Die absolute Messgenauigkeit, engl. accuracy, kann aufgrund systematischer Fehler sowohl bei CD-SEM als auch bei Scatterometrie vergleichsweise schlecht sein, was sich insbesondere in einem Offset zwischen verschiedenen Methoden und verschiedenen Geräten äußert. Die Wiederholgenauigkeit moderner Methoden der CD-Messtechnik liegt im Bereich weniger Nanometer und darunter. So wird beispielsweise in [Sen2003] für die Messung einer CD von 70 nm ein bester Wert von 0.35 nm für die $3\sigma-$Precision eines Scatterometrie-Tools angegeben, d.h. die Messung einer Probe mit identischem CD-Wert liegt mit 99% Wahrscheinlichkeit in einem Intervall von ± 0.35 nm um den gemessenen Wert. [Tho2003] gibt Werte zwischen 0.5 nm und 0.8 nm für eine CD von 65 nm an. Metrologische Detailfragen spielen in dieser Arbeit keine Rolle, schon deshalb nicht, weil bei den betrachteten Beispielen noch zu große Unterschiede zwischen Rekonstruktion und Simulation auftreten. Es ist aber wichtig, die erzielbare Wiederholgenauigkeit im Blick zu haben, sie sollte mindestens in einer ähnlichen Größenordnung oder idealerweise Faktor 5 bis 10 unterhalb der kleinsten Variationen liegen, die in Scatterogrammen detektiert werden sollen.

5.2 Scatterometrie oder Optische CD-Messtechnik (OCD)

Bevor nun das Prinzip der Scatterometrie ausführlich dargestellt wird, soll zunächst der Einsatz der Scatterometrie trotz des damit verbundenen Aufwands motiviert werden. Hierzu wurden für eine einfache Struktur Mikroskopbilder und einfache Scatterogramme mit MicroSim berechnet, siehe Abb. 25. Es handelt sich um einen 100 nm tiefen Graben in Silizium mit variabler Grabenbreite. Der Graben wird in dichter Anordnung, d.h. mit einer Wiederholperiode der doppelten Grabenbreite, periodisch fortgesetzt. Als Wellenlänge wurde $\lambda = 365$ nm, die Quecksilber i-Linie gewählt, die in Lichtmikroskopen oft das untere Ende der verfügbaren Wellenlängen darstellt.

Die Grabenbreite wurde, beginnend bei 10000 nm, bis hin zu 100 nm variiert. Die linke Spalte visualisiert die Ausbreitungsrichtungen der propagierenden Beugungsordnungen, die im Aperturkegel eines hochaperturgien Mikroskopobjektivs liegen. Hierbei ist exemplarisch

ein ebenes Wellenbündel am linken Rand des Aperturkegels als Beleuchtung gewählt, diese Richtung ist durch eine etwas breitere Linie markiert. Die dünnen Linien kennzeichnen die Richtungen der propagierenden Beugungsordnungen, die zu einem Mikroskopbild beitragen können.

Die zweite Spalte zeigt die ellipsometrischen Winkel der nullten Beugungsordnung bei variiertem Polarwinkel der Einfallsrichtung, d.h. mögliche Scatterogamme. Da die ellipsometrischen Winkel bei schrägem Einfall auch für ein unstrukturiertes Silizium-Substrat stark von null abweichen, wurden hier die Differenzen zu den an unstrukturiertem Silizium gemessenen Winkeln angegeben. Dies wurde plakativ mit "Polarisations-Information" überschrieben, da es als Maß dafür angesehen werden kann, wie stark die Wechselwirkung des Lichts mit der Struktur die Polarisation ändert. Die dritte und vierte Spalte zeigen mikroskopische Bilder mit Polarisation der Beleuchtung in $x-$Richtung, d.h. senkrecht zum Graben und in $y-$ Richtung, also parallel zum Graben. Die Helligkeit der Bilder wurde dabei so normiert, dass beide abso-

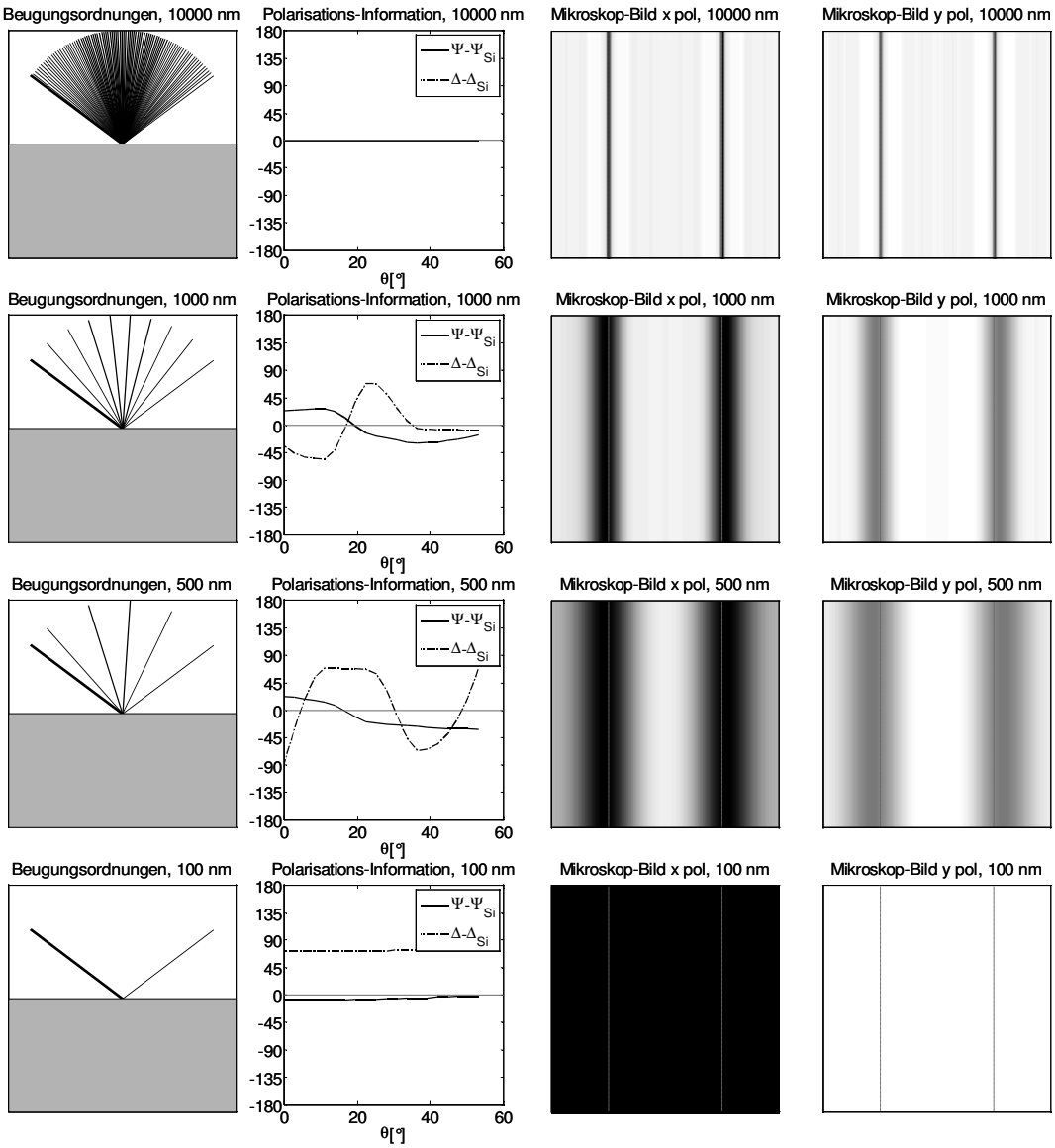


Abbildung 25: Motivation der Scatterometrie durch den Vergleich zur optischen Mikroskopie

lut miteinander vergleichbar sind. Diese Darstellung hat den Vorteil, dass der Einfluss der Polarisationsänderung durch die Probe auf das Mikroskopbild klar erkennbar ist, dafür aber den Nachteil, dass der Kontrast in den einzelnen Bildern bei zunehmender Größe der Polarisationseffekte immer flauer erscheint.

Bei der größten Grabenbreite von 10000 nm ist eine große Zahl von propagierenden Beugungsordnungen sichtbar. Die Polarisationsinformation in der nullten Ordnung ist sehr gering. Die Mikroskopbilder sehen für beide Polarisationen nahezu identisch aus und zeigen die Kanten als scharfe, dunkle Linien. Bei 1000 nm sieht die Situation völlig anders aus. Nur noch wenige propagierende Beugungsordnungen sind erkennbar. Die nullte Beugungsordnung trägt bereits erhebliche Polarisationsinformation. Die Kanten werden im Mikroskopbild nur noch unscharf abgebildet und die Gesamthelligkeit des Bildes mit $y-$polarisierter Beleuchtung ist höher. Es zeigt sich also auch in den Bildern das polarisierende Verhalten der Nanostruktur. Bei 500 nm verringert sich die Zahl der propagierenden Ordnungen weiter, die Polarisationsinformation nimmt zu, die Bilder werden noch unschärfer und zeigen stärkere Helligkeitsunterschiede. Bei 100 nm Strukturbreite bleibt schließlich nur die nullte Beugungsordnung übrig, die Probe ist optisch glatt. Die Polarisationsinformation ist noch größer, die Mikroskopbilder zeigen erwartungsgemäß keine Struktur mehr, sondern nur noch gleichförmige Intensitätsverteilung, die von der Polarisation abhängt.

Diese Betrachtungen zeigen eingängig, wie bei Reduktion der Strukturgrößen in den Bereich der Wellenlänge und deutlich darunter die optische Mikroskopie zunehmend an ihre Grenzen stößt, während die immer geringer werdende Anzahl von propagierenden Beugungsordnungen ein zunehmendes Maß an Polarisationsinformation trägt. Solange die Strukturen nicht optisch glatt sind, lassen sich auch aus mikroskopischen Bildern noch quantitative Strukturinformationen gewinnen. Auch hier kann der abnehmende Informationsgrad der Intensität, der sich in der zunehmenden Verwaschung der Kanten äußert, dadurch kompensiert werden, dass die Polarisationsinformation genutzt wird. Ähnlich wie bei der Scatterometrie ist aber auch hier eine Modellierung der Struktur und ein Abgleich zwischen simulierten und gemessenen Bildern nötig. Untersuchungen zur modellgestützten Rekonstruktion bei verschiedenen Varianten der Mikroskopie wurden am ITO in den vergangen Jahren durchgeführt, exemplarisch sei hier Kerwien [Ker2007b] erwähnt. Die Scatterometrie ist aber imstande, auch bei optisch glatten Strukturen anhand der Polarisationsinformation Strukturparameter zu rekonstruieren.

Nach dieser Motivation wird nun anhand Abb. 26 das Prinzip der Scatterometrie erläutert. Eine periodische Nanostruktur wechselwirkt mit einfallendem Licht. Hierbei wird ein Scatterogramm, also ein zunächst abstrakter Messdatensatz aufgezeichnet. Die Struktur ist aber bis auf kleine Abweichungen von der Sollform bekannt. Dies ermöglicht den Rückschluss von einem gemessenen Spektrum auf die Struktur, also das Lösen des inversen Problems der Scatterometrie anhand einer Bibliothek simulierter Spektren. Der einfachste Ansatz zur Lösung des inversen Problems besteht in der Bibliothekssuche. Hierbei wird vor der Mes-

sung eine Bibliothek von Scatterogrammen berechnet, wobei jeder zu messende Parameter mit kleiner Schrittweite um den Sollwert variiert wird. Der gesamte interessierende Parameterraum wird also dicht gesampelt. Nach der Messung wird dann dasjenige simulierte Spektrum gesucht, bei dem die Summe der quadratischen Abweichungen über alle Messwerte minimal wird.

Neben der einfachen Bibliothekssuche haben sich ausgefeiltere Verfahren zum Lösen des inversen Problems etabliert, bei denen während der Messung in Echtzeit die Simulationen durchgeführt werden. Hierbei wird aber nur ein Teil des Parameterraums abgetastet. Es besteht also die Gefahr, dass nicht das globale, sondern ein lokales Minimum der Summe der quadratischen Abweichungen gefunden wird. Als Vorteil ist natürlich zu sehen, dass die zeitaufwändige Berechnung der Datenbank im Voraus entfällt. Übliche Verfahren beruhen auf Levenberg-Marquardt-Regression, Random Recursive Search oder Genetischen Algorithmen. Einen schönen Überblick über das Thema gibt Raymond [Ray2004]. Bei 3D oder 2D periodischen Strukturen findet die Bibliothekssuche noch immer breite Anwendung, da die Rechenzeiten für Echtzeitsimulation zu lang sind.

Bei den meisten aktuell verwendeten Verfahren der Scatterometrie wird Polarisationsinformation ausgenutzt. Meist werden nur wenige, oft nur die nullte Beugungsordnung betrachtet. In der jüngsten Vergangenheit wurden von Kauffmann Untersuchungen an Strukturen durchgeführt, deren Größen leicht oberhalb der Wellenlänge liegen, so dass mehrere Beugungsordnungen ausgewertet werden konnten [Kau2005][Kau2008]. Für solche Messungen wurde der etwas treffendere Ausdruck Diffraktometrie verwendet. Der Ausdruck Scatterome-

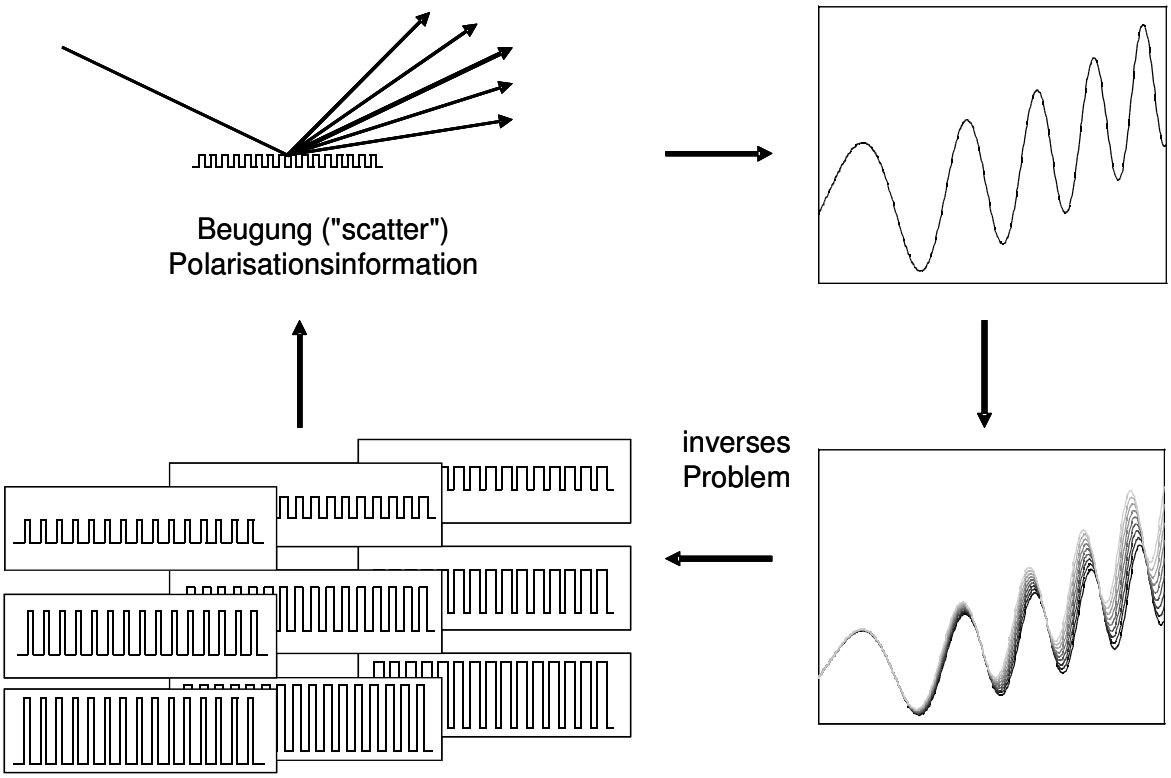


Abbildung 26: Prinzip der Scatterometrie schematisch dargestellt

trie wird allerdings mit dem speziellem Fokus auf Anwendungen aus der Halbleitertechnologie, d.h. auf die Untersuchung von prozessierten Wafern, aber auch von Fotomasken für jegliche Messtechnik verwendet, bei der eine oder mehrere Beugungsordnungen mit oder ohne Ausnutzung von Polarisationsinformation vermessen und zur modellgestützten Strukturrekonstruktion verwendet werden.

5.3 Historische Entwicklung und Varianten der Scatterometrie

Die Vermessung von Beugungsordnungen wurde im Lauf der Zeit mit verschiedenen Namen bezeichnet, und ihr erster Einsatz ist schwer auszumachen. Zwei wesentliche Merkmale können dazu dienen, das, was im heutigen Sinn als Scatterometrie bezeichnet wird, von älteren Arbeiten abzugrenzen: das Anwendungsgebiet der Halbleitertechnologie mit strukturierten Wafern und Fotomasken als Messobjekten sowie die modellgestützte Rekonstruktion, also der Abgleich von gemessenen und berechneten Scatterogrammen.

Unter diesem Blickwinkel wird die erste Anwendung von Scatterometrie oft Kleinknecht und Meier [Kle1978][Kle1980] im Jahr 1978 bzw. 1980 zugeschrieben. Sie verwendeten die Intensität einer Beugungsordnung bei einer einzigen Einfallsrichtung und Wellenlänge zur Kontrolle der Ätztiefe in Halbleiterstrukturen und als nächsten Schritt ein komplettes Spektrum vieler Beugungsordnungen eines Liniengitters auf einer Fotomaske zur Vermessung der Linienbreite. In beiden Fällen genügte wegen der großen Periode von 10 µm der Vergleich mit anhand von skalarer Fraunhofer-Beugungstheorie berechneten Messgrößen. Bemerkenswert an diesen Arbeiten ist, dass neben der Linienbreite an der Oberfläche auch die Tiefe einer *Unterätzung* gemessen werden konnte. Es war also bereits auf der Basis solcher einfachen Modelle Information über die axiale Strukturgeometrie zugänglich, so dass die Methode einen echten Mehrwert gegenüber der Mikroskopie zu verzeichnen hatte.

Bei genauerer Betrachtung stellt sich heraus, dass eine eindeutige Geburtsstunde der Scatterometrie nicht auszumachen ist. So zitieren etwa Kleinknecht und Meier ihrerseits Kasdan und George [Kas1976], die bereits 1976 das vorweggenommen haben, was in der jüngeren Vergangenheit unter dem Namen Fourier-Scatterometrie wieder Interesse findet: Sie bildeten das Beugungsspektrum aus der Pupille eines Mikroskopobjektives mittels einer Bertrand-Linse auf einen Detektor ab.

In den 1980er Jahren waren keine großen Fortschritte zu verzeichnen, vermutlich weil die optische Mikroskopie bei damaligen Strukturgrößen auch ohne den Ansatz der modellbasierten Messtechnik als quantitative Messmethode geeignet war. Moharam et al. [Moh1984] stellten 1984 einen umfassenden Vergleich simulierter und gemessener Beugungsspektren bei unterschiedlichen Wellenlängen vor. Hier stand allerdings weniger der messtechnische Aspekt im Vordergrund als vielmehr eine Überprüfung von frühen Algorithmen der rigorosen Beugungstheorie.

Größeres Interesse an der Scatterometrie kam erst wieder Anfang der 1990er Jahre auf, getrieben von kleiner werdenden Strukturgrößen, vor allem aber von Fortschritten in der Simulationstechnik sowohl bei den Algorithmen der rigorosen Beugungstheorie als auch bei der verfügbaren Rechenleistung. Eine ganze Reihe von Veröffentlichungen aus dieser Zeit stammt aus der Gruppe um John McNeil von der University of New Mexico: [Naq1990a][Naq1990b] [Nei1992][Hat1994][Hat1995][Zai1994][Mil1992][Hic1992][Mil1993][Naq1992][Naq1994a] [Naq1994b]. Oft zitiert wird ein Übersichtsartikel von John McNeil [Nei1992] selbst aus der Zeitschrift "Microlithography World", der als einer der ersten das Wort "Scatterometry" verwendet. Naqvi [Naq1990a] verwendet 1990 das Wort "Scatterometer" aber noch nicht "Scatterometry".

McNeils früher Übersichtsartikel [Nei1992] erwähnt bereits verschiedene Varianten. Als hauptsächlich verwendete Methode Anfang und Mitte der 1990er Jahre ist die $2\theta-$Scatterometrie zu nennen. Sie ist in Abb. 27 (a) schematisch dargestellt. Eine ebene, monochromatische Welle, meist ein Laserstrahl, in der Regel linear polarisiert, fällt unter dem Winkel θ auf die Probe. Unter demselben Winkel zum Lot wird die nullte Beugungsordnung reflektiert. Mit einem Doppelgoniometer wird der Ein- und Ausfallswinkel variiert und die Reflektivität als Funktion des Einfallswinkels gemessen. Meist werden die beiden fundamentalen Polarisationen TE und TM betrachtet. Als weitere Methoden erwähnt McNeil [Nei1992] das Vermessen aller propagierenden Beugungsordnungen unter senkrechtem Lichteinfall bei isolierten, also stark beugenden Strukturen mit einem Goniometer sowie die Dome-Scatterometrie. Bei der letzteren werden alle Beugungsordnungen insbesondere von 3D Strukturen im gesamten Halbraum oberhalb der Probe auf einer diffus streuenden Kuppel (engl. dome) aufgefangen und mit einer Kamera aufgenommen.

Die Vermessung vieler Beugungsordnungen bei isolierten Strukturen war seither von geringerer Bedeutung, da die Existenz vieler Beugungsordnungen gleichbedeutend damit ist, dass die Struktur im Mikroskop gut aufgelöst werden kann, vgl. Abb. 25. Auch das Dome-Scatterometer wurde seit den frühen Arbeiten [Nei1992][Hat1994][Hat1995] selten erwähnt. Aus heutiger Sicht ist es aus zweierlei Gründen interessant. Zum einen nimmt es gewissermaßen die Idee der Fourier-Scatterometrie vorweg, die weiter unten beschrieben wird. Anstatt auf einer weit entfernten Kugel werden hier die Beugungsordnungen in der Fourier-Ebene eines Mikroskop-Objektivs betrachtet, was eine kompaktere Bauweise ermöglicht. Rayomond et al. [Ray2006] gehen sogar soweit, beide Techniken gleichzusetzen und die Fourier-Scatterometrie als Dome-Scatterometrie zu bezeichnen. Zum anderen ist die Dome-Scatterometrie streng genommen die erste Anwendung von Scatterometrie auf 3D Strukturen. Allerdings wurde nur ein Parameter vermessen, nämlich die Tiefe von geätzten Löchern. Außerdem erfolgte kein Abgleich zwischen simulierten und gemessenen Spektren. Stattdessen wurde das Verhältnis ausgewählter Beugungsordnungen als Funktion der Ätztiefe durch den Vergleich mit alternativen Messmethoden kalibriert. Von Scatterometrie im hier verwendeten Begriffssinn an 3D Strukturen wurde erstmalig 1999 berichtet [Bis1999], was unten noch ausführlicher dargelegt wird.

Als wesentliches Merkmal der Scatterometrie etablierte sich in der erwähnten Arbeiten Anfang der 1990er Jahre die Anwendung von rigoroser Beugung. Zunächst ist noch von einer semi-rigorosen Methode [Naq1990b] die Rede, die die Näherung ideal dünner Strukturen beinhaltet. Seit 1994 [Naq1994b] hat sich die RCWA als bis heute vorranigig verwendete Methode durchgesetzt.

Während, wie erwähnt, zunächst die in Abb. 27 (a) veranschaulichte $2\theta-$Scatterometrie dominierend war, kamen Ende der 1990er Jahre und nach der Jahrtausendwende alternative Messtechniken auf. 1997 schlugen Ziger et al. ein reflektometrisches Messverfahren bei senkrechtem Einfall vor [Zig1997], das seither als Normal-Incidence-Reflektometrie bekannt ist. Hier wird nicht mehr der Einfallswinkel, sondern die Wellenlänge variiert. Messgrößen sind aber weiterhin Reflektivitäten in unterschiedlichen Polarisationen. Eine schematische Darstellung findet sich in Abb. 27 (b). Im selben Jahr wurde erstmalig von Takeuchi et al. [Tak1997] über ellipsometrische Winkel als Messgrößen in der Scatterometrie berichtet. Dass dies aus

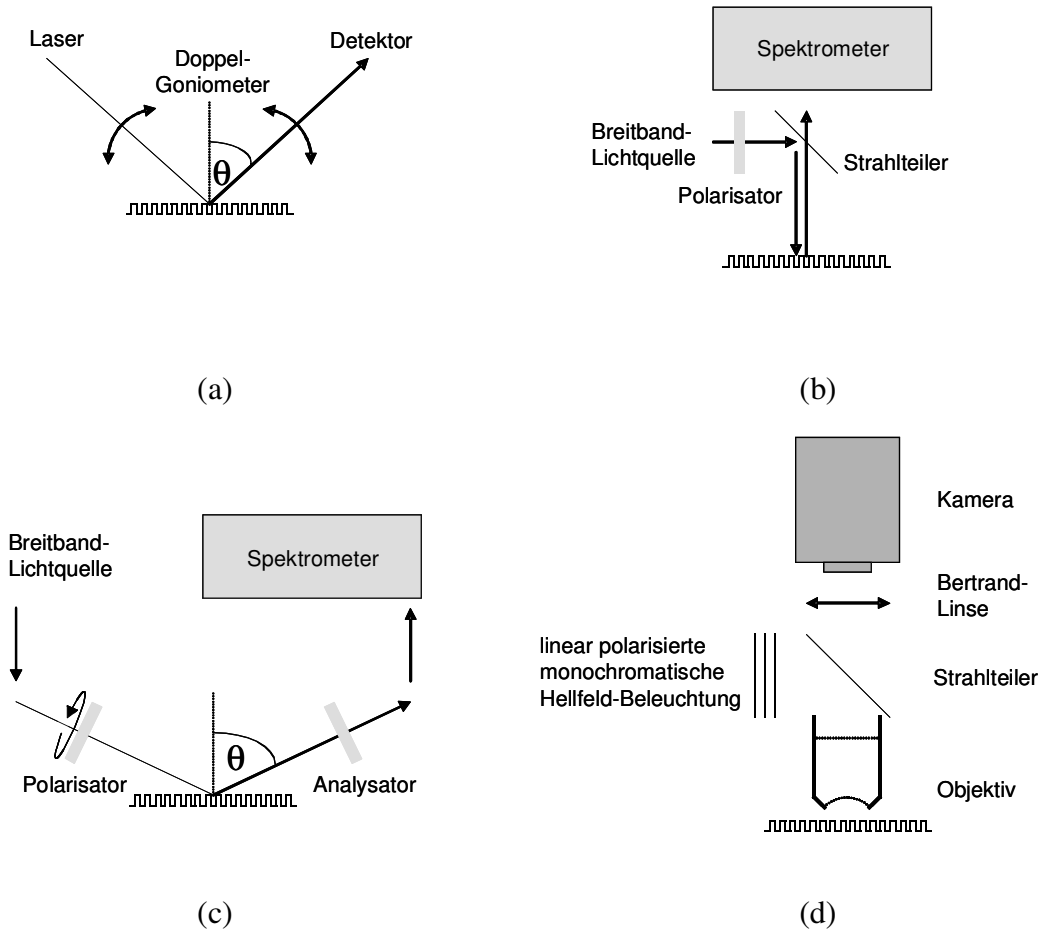


Abbildung 27: Wichtige Mess-Konfigurationen in der Scatterometrie: (a) 2θ-Scatterometrie, (b) Normal-Incidence-Reflektometrie, (c) Fourier-Scatterometrie und (d) Spektroskopische Ellipsometrie

heutiger Sicht so spät vorgeschlagen wurde, ist erstaunlich, da die Ellipsometrie eine seit über hundert Jahren bekannte und beherrschte Technik war und da zu erwarten war, dass eine Polarisationsänderung nicht nur das Amplitudenverhältnis $\tan\Psi$ von zwei zueinander orthogonal polarisierten Wellen sondern auch deren Phasendifferenz Δ signifikant beeinflussen würde. 1998 wurde das Verfahren von Minhas et al. winkelaufgelöst angewendet [Min1998]. Erst 1999 wurde schließlich von Niu et al. [Niu1999][Niu2001] die Anwendung von spektroskopischer Ellipsometrie vorgeschlagen, die sich schnell zu einer der hauptsächlich angewendeten Methoden etabliert hat. Diese ist exemplarisch in der Anordnung als Rotating-Polarizer-Ellipsometer in Abb. 27 (c) dargestellt. Bei konstantem Einfallswinkel werden hier die ellipsometrischen Winkel oder hieraus abgeleitete Größen als Funktion der Wellenlänge gemessen.

In den vergangenen Jahren ist die Fourier-(Transformations)-Scatterometrie [Boh2004] [Pet2004][Boh2005][Pet2005] alias Scatterfield-Microscopy [Sil2007a][Sil2007b] verstärkt in den Mittelpunkt des Interesses gerückt. Hierbei wird die Fourier-Transformationseigenschaft einer abbildenden Optik ausgenutzt. Das Beugungsspektrum erscheint demnach in der Fourier-Ebene eines Mikroskop-Objektives und kann mittels einer Bertrand-Linse abgebildet werden. Eine schematische Anordnung zeigt Abb. 27 (d). Hier ist exemplarisch polarisierte Hellfeld-Beleuchtung und Detektion ohne weiteren Polarisator genannt. Geringfügig veränderte Anordnungen, etwa mit ringförmiger Beleuchtung und zusätzlichen Polarisatoren im Beobachtungsstrahlengang, sind denkbar und werden in der Literatur erwähnt. Diese Technik ist viel älter als die Scatterometrie und seit langem unter der Bezeichnung Konoskopie bekannt, vgl. z.B. [Kub1959]. Und sie war, wenigstens in vereinfachter Form, im Hinblick auf die CD-Metrologie eine der ersten angewendeten Techniken [Kas1976]. Dass sie in der jüngsten Vergangenheit verstärkt Beachtung findet, ist nicht verwunderlich. Die Fourier-Scatterometrie ist wie die $2\theta-$Scatterometrie eine winkelaufgelöste Technik, die aber nicht nur eine Ebene sondern einen nahezu kompletten Halbraum an Ein- und Ausfallsrichtungen abdecken kann.

Eine ähnliche Erweiterung des verfügbaren Winkelraumes bezwecken auch die verschiedenen Varianten der Phi-Scatterometrie, die letztlich Erweiterungen von $2\theta-$Scatterometrie oder spektroskopischer Ellipsometrie darstellen. Der Azimutwinkel φ der Einfallsrichtung wird bzgl. einer Symmetrieebene der Struktur von null verschieden gewählt oder sogar kontinuierlich variiert, was hier zur besseren Unterscheidung von konstantem Azimutwinkel ungleich null als Phi-Scan bezeichnet wird. Die erste Anwendung der Phi-Scatterometrie wurde 2001 von Benesch et al. [Ben2001] und 2002 aus derselben Gruppe von Hettwer et al. [Het2002] berichtet. Eine ausführlichere Darstellung der Arbeiten von Hettwer et al. findet man in der Dissertation von Andrea Weidner [Wei2005][15]. Nahezu zeitgleich wurden ähnliche Arbeiten von Bloess et al. [Blo2002] vorgestellt. Als Messgrößen wurden von ersteren Intensitäten und von letzteren ellipsometrische Winkel gewählt, wobei unklar bleibt, wie diese bei Beleuchtung außerhalb einer Symmetrieebene definiert sind, vgl. die allgemein übliche Definition Gl. (60). Damit wurde der entscheidende Mehrwert einer Einfallsrichtung außerhalb der

15 Beide Veröffentlichungen, [Het2002] und [Wei2005] stammen von derselben Autorin Andrea Weidner, geb. Hettwer.

Symmetrieebene, nämlich das Auftreten von Kreuzpolarisationen, nicht ausgenutzt. Kreuzpolarisation meint einen Transfer von Intensität zwischen den fundamentalen Polarisationen TE und TM.

Von Geiler [Gei2005] wurden Jones-Matrizen als Messgrößen gewählt, deren Außer-Diagonal-Elemente gerade die Kreuzpolarisationen quantifizieren. Jones-Matrizen scheinen daher als Messgrößen besser geeignet. Die Ergebnisse dieser Arbeit wurden in kompakterer Form nochmals von Reinig et al. [Rei2007] veröffentlicht. Denselben Vorteil, dass nämlich die Kreuzpolarisation explizit gemessen werden kann, bietet die von Novikova et al. [Nov2006][Nov2005][Nov2007] betrachtete Mueller-Matrix als Funktion der Wellenlänge bei festen von null verschiedenen Azimutwinkeln. Auch in der vorliegenden Arbeit wird die Mueller-Matrix bei variiertem Azimutwinkel als Messgröße verwendet. Die Ergebnisse wurden in [Sch2007b] veröffentlicht und werden in Kapitel 6.2 vorgestellt.

Wie erwähnt, wurde Scatterometrie an 3D Strukturen in der hier verwendeten Bedeutung, also unter Verwendung eines Abgleichs zwischen gemessenen und simulierten Spektren, erstmalig 1999 von Bischoff et al. [Bis1999] vorgestellt. Seither gibt es eine Reihe von Beiträgen zu dem Thema, wovon einige hier aufgeführt seien: [Ray2003][Bar2004][Hin2004] [Qui2004][Hua2005][Qui2005a][Rei2005][Zan2007]. Auch im Rahmen dieser Arbeit entstanden zwei Beiträge zu diesem Thema [Sch2006][Sch2007b], die Ergebnisse sind in ebenfalls Kapitel 6.2 zusammengefasst. Obwohl bereits seit knapp zehn Jahren 3D Strukturen im Mittelpunkt des Interesses stehen, hat die Technologie noch immer mit ernsthaften Schwierigkeiten zu kämpfen. Zum einen ist die Genauigkeit der simulierten Spektren sowie die Größe von berechenbaren Bibliotheken nach wie vor durch Speicher und Rechenzeit limitiert. Dies gilt insbesondere für geätzte Strukturen, bei denen die Halbleitermaterialien selbst und nicht nur der Resist strukturiert ist. Zum anderen ist die Genauigkeit bei der Vermessung komplexerer Strukturformen, insbesondere in Verbindung mit einem vielfältigem Material-Schichtstapel, durch die verfügbaren Modellierungsmöglichkeiten begrenzt.

Wie auch bei Arbeiten anderer Forscher zu dem Thema, wird sich in dieser Arbeit zeigen, dass die Modellierungsmöglichkeiten nicht ausreichend sind, um einen Abgleich zwischen Messung und Simulation mit hinreichender Genauigkeit zu erzielen. Die Messung einiger weniger Parameter wie CD, Tiefe oder in einzelnen Fällen auch Seitenwandwinkel von kreisrunden oder elliptischen Kontaktlöchern mit vereinfachten Modellen wurde überwiegend für Strukturen in Resist, zum Teil auch in komplizierteren Schichtstapeln bereits berichtet [Bis1999][Ray2003][Bar2004][Qui2004][Hua2005][Qui2005a][Zan2007]. Die Vermessung komplexerer Strukturformen ist allerdings nach wie vor das Thema aktueller Forschungsarbeiten [Hin2004][Rei2005], die sich mit Teilerfolgen begnügen müssen. Die hier vorgestellten Arbeiten müssen vor diesem Hintergrund betrachtet werden.

Neben der Anwendung von Scatterometrie auf 3D Strukturen hat sich in den vergangenen Jahren Kantenrauheit, engl. Line Edge Roughness (LER), als einer der wichtigsten Aspekte für die Anwendung der Scatterometrie in der nahen Zukunft erwiesen. Während bis-

lang Rauheiten und Schwankungen klein gegenüber den zu messenden Strukturgrößen waren, kann die LER für aktuelle und zukünftige Strukturen nicht mehr vernachlässigt werden. Dies liegt zum einen an den immer kleiner werdenden Strukturen bei bislang etwa gleich bleibender Rauheit. Zum anderen wird aber für kommende Technologieknoten eine Zunahme der absoluten Rautiefe erwartet, da die Prozesse technologisch schwieriger werden. Eine etwas feinere Unterscheidung spricht von Seitenwandrauheit oder *Sidewall Roughness* (SWR), wenn die Kanten eine Rauheit entlang des Querschnittes aufweisen, also nach dem in dieser Arbeit gewählten Koordinatensystem in der $xz-$Ebene. Von LER ist die Rede, wenn eine einzelne Kante einer Linienstruktur eine Rauheit aufweist. Weisen zwei gegenüber liegende Kanten einer Linie LER auf, so schwankt i.d.R. auch die Breite der Linie, was mit *Line Width Roughness* (LWR) bezeichnet wird.

Grob gesagt lassen sich im Hinblick auf die Scatterometrie zwei wesentliche Fragen formulieren. Zum einen ist zu untersuchen, ob sich Strukturparameter, oder besser gesprochen deren Mittelwerte, trotz signifikanter Rauheiten messen lassen, und ob evtl. die Rauheit in einem Modell erfasst und korrigiert werden kann. Zum anderen ist man natürlich an einer Messung der Rauheit selbst interessiert, d.h. in erster Linie ihrer Amplitude, aber ebenso an ihrer spektralen Charakteristik.

Eine Reihe von Arbeiten über den Einfluss von LER auf die Scatterometrie wurden bereits veröffentlicht. [Boh2005] et al. untersuchen den Einfluss von LER auf Fourier-Scatterometrie. Sie schlagen ein Verfahren vor, um zwischen reiner LWR und einer Variation der Linienposition zu unterscheiden. Diese beruht auf der Vermessung von Asymmetrie höherer Beugungsordnungen und ist daher für aktuelle dichte Strukturen nicht geeigent. Quintanilha et al. [Qui2005b] stellen eine rein auf Messungen basierende Studie vor, die zu dem Schluss kommt, der Einfluss von LER könne für die untersuchten Strukturen vernachlässigt werden. Germer [Ger2007a] untersucht den Einfluss von CD-Schwankungen zwischen benachbarten Gräben, also noch ohne echte Rauheit entlang der Linien. Er stellt für die betrachteten Beispiele einen erhebliche Auswirkung auf scatterometrische Messsignale fest, so dass bei der allgemein getroffenen Annahme, die Scatterometrie detektiere einfach Mittelwerte, Vorsicht geboten sei. In einer zweiten Studie [Ger2007b] untersucht er den Einfluss von Schwankungen der Linienhöhe und -form und beobachtet wiederum eine erhebliche Auswirkung der Fluktuationen. Yaakobovitz et al. [Yaa2007] zeigen, dass eine Messung der Rautiefe mit spektroskopischer Ellipsometrie oberhalb einer gewissen Schwelle möglich ist. Auch innerhalb dieser Arbeit entstanden Beiträge zu dem Thema [Sch2005b][Sch2008a][Sch2008b] [Sch2008c], die im Kapitel 6.3 vorgestellt werden.

Abschließend seien einige Übersichtsartikel zur Scatterometrie angegeben. Raymond hat in einem Buchkapitel [Ray2001] sowie in einem Konferenzbeitrag [Ray2005] allgemeine Übersichten systematisch zusammengestellt, allerdings mit starkem Fokus auf die $2\theta-$Scatterometrie. In einem weiteren Konferenzbeitrag [Ray2004] fasst er Strategien zur Lösung des inversen Problems zusammen. Etwas ausgewogener sind die Übersichtsartikel von Thony et

al. [Tho2003] und Allgair et al. [All2005], letzter mit besonderem Fokus auf 3D Strukturen. Da nach Kenntnis des Verfassers bisher keine Übersicht in der hier dargestellten Breite verfügbar ist, wurde die Einleitung von [Sch2008a] in dieser Hinsicht etwas ausführlicher gehalten, so dass auch dieser Tagungsbeitrag, obwohl kein Übersichtsartikel i.e.S., einen umfassenden Überblick über das Thema bietet.

5.4 Aktuelle Herausforderungen in der Scatterometrie

Zwei wesentliche aktuelle Herausforderungen an die Scatterometrie wurden bereits genannt: die Vermessung komplexer Strukturformen von 3D Strukturen sowie die Untersuchung des Einflusses von LER auf die Scatterometrie. Wie in Kapitel 5.3 ausführlich dargelegt wurde, sind beide Themen bereits seit geraumer Zeit Gegenstand von Forschungsprojekten. So widmen sich auch die in Kapitel 6 folgenden Beiträge dieser Arbeit genau diesen Fragestellungen.

Ohne Anspruch auf Vollständigkeit sollen zwei weitere Aspekte genannt werden, die sich derzeit als entscheidende Herausforderungen abzeichnen. Dies ist zum einen die Erweiterbarkeit der Methode hin zu kleineren Technologieknoten und zum anderen die Untersuchung von EUV Fotomasken.

Es ist klar, dass die Scatterometrie nicht für Strukturen zur Anwendung kommen kann, deren Größe beliebig weit unterhalb der Wellenlänge liegt. Ab einem bestimmten Verhältnis zwischen Strukturbreite und Wellenlänge erscheint die Struktur als Punktstreuer, und das reflektierte Signal enthält keinerlei Information mehr über die Strukturgeometrie. Eine schöne Veranschaulichung dieses Umstands findet sich in Kerwiens Dissertation [Ker2007b], allerdings nicht für die Scatterometrie, sondern für die Mikroskopie an isolierten und daher auflösbaren, aber sehr kleinen Strukturen. Die Grenzen der Scatterometrie zu erkunden, ist ein im Augenblick vielfach verfolgtes Thema, vgl. z.B Ferreras Paz [Fer2009]. Bunday et al. [Bun2007] zitieren unveröffentlichte Studien, die zeigen sollen, dass die Methode bis hinunter zum 22 nm–Knoten anwendbar sei, während darunter ernsthafte Schwierigkeiten zu erwarten seien.

In dieser Arbeit wird schwerpunktmäßig die scatterometrische Vermessung von Strukturen auf dem Wafer betrachtet. Daneben kommt sie aber auch bei der Inspektion von Fotomasken zum Einsatz. Mit dem bevorstehenden Schritt hin zur EUV Lithographie bei einer Wellenlänge von 13.5 nm werden völlig andere Fotomasken benötigt als bisher. Da es bei dieser Wellenlänge keine transmissiven Materialien gibt, basieren EUV-Masken auf Bragg-Spiegeln mit absorbierenden Strukturen. Die Charakterisierung solcher Masken mit optischer Scatterometrie in bislang typischen Wellenlängenbereichen vom DUV bis hin zum Sichtbaren stellt neue Anforderungen an die Masken-Modellierung und ist Gegenstand aktueller Forschungsarbeiten [Wur2007]. Daneben wird auch der Einsatz einer scatterometrische Charakterisierung von EUV Masken mit EUV Strahlung selbst untersucht [Sch2007c].

6 Charakterisierung von Gitterstrukturen mithilfe der Scatterometrie

6.1 Sinnvolle primäre Messgrößen

Bevor in Kapitel 6.2f der Blick auf die sekundären Messgrößen wie CDs oder Seitenwandwinkel gerichtet wird, soll hier kurz dargelegt werden, welche primären Messgrößen aus welchen Gründen ausgewählt werden. Bei winkelaufgelösten Techniken der Scatterometrie sowie bei der Normal-Incidence-Reflektometrie sind oftmals die reflektierten Intensitäten bei polarisierter Beleuchtung die betrachteten primären Messgrößen. Bei der spektroskopischen Ellipsometrie dagegen werden i.d.R. ellipsometrische Winkel oder hieraus abgeleitete Größen verwendet. Eine häufig verwendete Konfiguration ist das Rotating-Polarizer-Ellipsometer (RPE), so dass die Fourier-Koeffizienten desselben, α und β, vgl. Gl. (70), übliche Messgrößen darstellen. Im Fall einer diagonalen Jones-Matrix sind diese einfach eine alternative Darstellung für die ellipsometrischen Winkel. Beide Datensätze stellen in diesem Fall eine vollständige Beschreibung des Polarisationstransfers dar.

Nach Kapitel 4.4 geht die nicht-generalisierte Ellipsometrie von diagonalen Jones-Matrizen aus, und die ellipsometrischen Winkel verlieren im Fall nicht-diagonaler Jones-Matrizen in zweifacher Hinsicht ihre Allgemeinheit. Zum einen beschreiben sie, wie immer sie definiert sind, den Polarisationstransfer nicht mehr eindeutig, zum anderen ergibt sich eben das Problem ihrer Definition und somit der Vergleichbarkeit von auf unterschiedlichen Geräten gemessenen Größen. Man könnte die ellipsometrischen Winkel weiterhin über den Quotienten der Jones-Matrix-Diagonalelemente gemäß Gl. (60) definieren und die Außer-Diagonal-Elemente schlichtweg ignorieren. Die so erhaltenen Größen entsprechen aber nicht den Messwerten, die ein Ellipsometer tatsächlich liefert.

Für die unterschiedlichen Ellipsometer-Typen lassen sich die unmittelbaren Messgrößen, heißen sie nun α und β beim RAE / RPE, I_s und I_c beim PME oder wieder anders bei anderen Ellipsometer-Typen, als Funktion der Geräteparameter, etwa fest eingestellte Winkel von polarisierenden Komponenten im Strahlengang, und der Jones-Matrix-Einträge formulieren. Bei der Umrechnung der unmittelbaren Messgrößen in die ellipsometrischen Winkel wird jeweils die Diagonalität der Jones-Matrix vorausgesetzt, so dass von null verschiedene Außer-Diagonal-Elemente derselben je nach Ellipsometer-Typ und Konfiguration *in unterschiedlicher Weise* die Messwerte verändern. Damit hängen im Fall nicht-diagonaler Jones-Matrizen

die gemessenen ellipsometrischen Winkel vom verwendeten Gerätetyp und der jeweiligen Konfiguration ab.

Nach dem Gesagten stellen also die ellipsometrischen Winkel in mehrfacher Hinsicht ungeeignete Messgrößen dar. Trotzdem werden sie z.T. hier verwendet, und zwar dort, wo erstens die Jones-Matrix mit Sicherheit diagonal ist, und die ellipsometrischen Winkel somit klar definiert sind, und zweitens keine Rekonstruktionen explizit durchgeführt werden, so dass ein glatter Verlauf der Spektren benötigt würde, siehe Kapitel 6.3.1. Die Wahl der ellipsometrischen Winkel in diesem Fall begründet sich schlichtweg darin, dass diese anschaulichere Größen darstellen als etwa die verschiedenen Fourier-Koeffizienten der jeweiligen Ellipsometer-Typen. Aus ihnen lässt sich unmittelbar ersehen, ob etwa eine Probe bei einer Wellenlänge stark polarisierend wirkt oder eine große Phasenretardierung zwischen den fundamentalen Polarisationen induziert wird.

Dort wo tatsächlich Rekonstruktionsalgorithmen zum Einsatz kommen, siehe Kapitel 6.3.2, werden zum einen Intensitäten und zum anderen die Fourier-Koeffizienten α und β eines RPE verwendet. Im Fall von Messungen und Simulationen, bei denen die Jones-Matrix nicht-diagonal ist, werden Mueller-Matrix-Elemente als Messgröße betrachtet, siehe Kapitel 6.2. Diese Wahl erfolgt aus rein pragmatischen Gründen, da das verfügbare Ellipsometer die Mueller-Matrix, nicht aber die Jones-Matrix messen kann. Wie in Kapitel 4.1.2 erwähnt, ist eine Rückführung von Mueller- auf Jones-Matrizen ein nicht-triviales Problem, so dass nur die Mueller-Matrix als Messgröße in Betracht kommt. Mit dieser Wahl soll aber nicht zum Ausdruck gebracht werden, dass die Mueller-Matrix aus messtechnischer Sicht, etwa wegen glatter Spektren oder geringer Messfehler, ideal geeignet sei. Welche Messgröße sich im Fall von generalisierten ellipsometrischen Messungen an Proben mit geringer Symmetrie auf lange Sicht durchsetzen wird, wird sich erst zeigen. So verwenden z.B. Novikova et al. [Nov2005] [Nov2006][Nov2007] ebenfalls die Mueller-Matrix, Reinig et al. [Rei2007] dagegen die Jones-Matrix bzw. daraus abgeleitete Größen, wie sie eher in der generalisierten Ellipsometrie anisotroper Kristallschichten zum Einsatz kommen [Sch1996]. Eine ideal geeignete Messgröße kann sich für die noch junge Technologie nur durch systematische Simulationen und Sensitivitätsanalysen einer Vielzahl von repräsentativen Strukturen ergeben.

6.2 Scatterometrie an einer asymmetrischen Kreuzgitterstruktur

Im Rahmen einer Kooperation mit Qimonda wurde eine asymmetrische Kreuzgitterstruktur untersucht, die in der Draufsicht in Abb. 28 links gezeigt wird. In einer schachbrettartigen Anordnung sind zunächst elliptische Löcher in einen Siliziumwafer geätzt, die mit einem anderen Material gefüllt sind. Die Füllung ist teilweise auf dem gesamten Querschnitt zurückgeätzt, zusätzlich ist seitlich ein Teil der Füllung in einem weiteren Ätzschritt asymmetrisch entfernt. Eine Querschnittsansicht der für die Simulation modellierten Struktur ist in Abb. 29 (a) zu sehen. Die genauen Materialien und Abmessungen werden aus Gründen der

Geheimhaltung hier nicht genannt, die Abmessungen bewegen sich im Bereich unter 100 nm, was bekanntermaßen bei aktuellen Speicherstrukturen der Fall ist [WWW01].

Die Modellierung dieser Strukturen stellt sich als extrem anspruchsvolle Aufgabe heraus. Bereits Abb. 29 (a) weist implizit eine Vielzahl von Parametern für die axiale Strukturgeometrie auf. Es sind aber nur die beiden Parameter gekennzeichnet, die gemessen werden sollen, nämlich die Breite der asymmetrischen Ätzung, die als "CD" bezeichnet wird und deren Tiefe. Daneben kann die Dicke der Deckschicht, die Rückätztiefe des Füllmaterials unter-

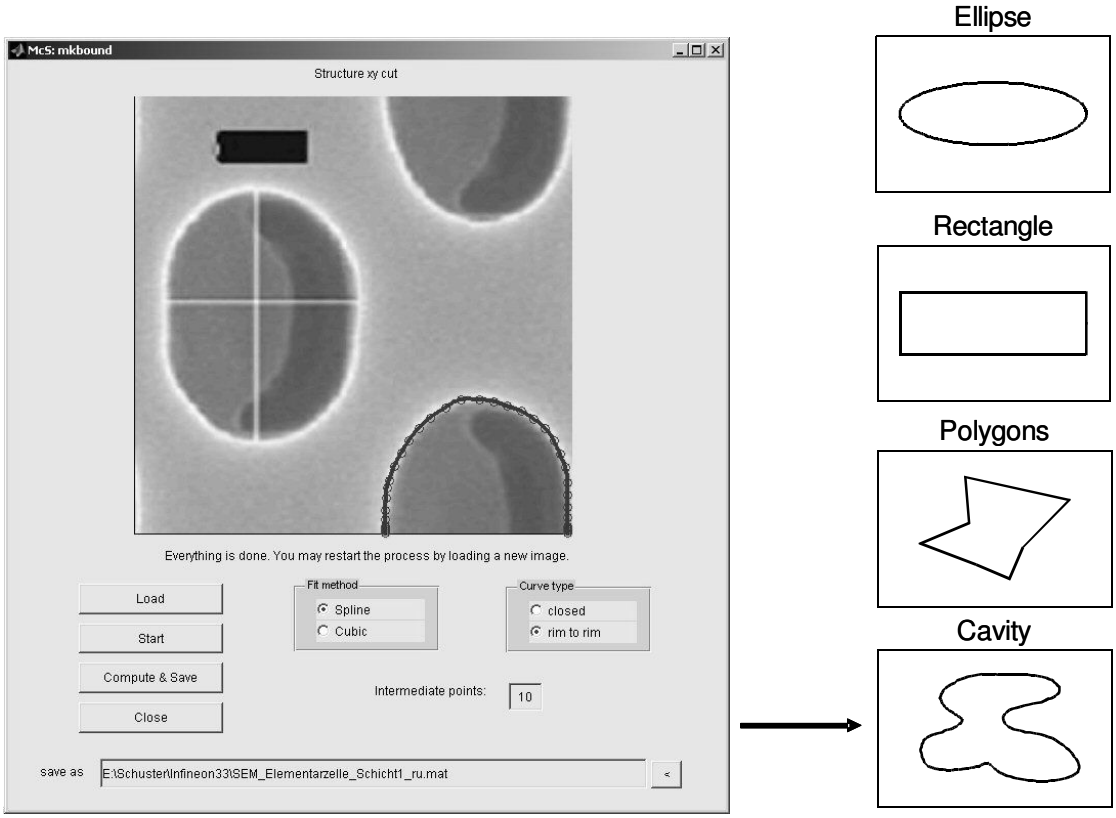


Abbildung 28: Übersicht über die Gittertypen in MicroSim. Die untersuchte Struktur wird als Gittertyp "Cavity" modelliert.

(a) (b)

Abbildung 29: Querschnitt (a) und mögliche Einfallsgeometrien (b) für die asymmetrische Struktur

halb dieser Deckschicht sowie die Tiefe der gefüllten elliptischen Löcher variiert werden. Weitere Feinheiten wie Seitenwandwinkel ("sidewall angles", SWAs), Verrundungen ("roundings", "footings"), unter dem Loch vergrabene Strukturen ("liners") etc. wurden im Modell nicht berücksichtigt. Abb. 29 (b) zeigt diese Merkmale in einem X-SEM-Bild. Aber schon die im Modell erfassten Größen weisen Schwankungen über den Wafer hinweg auf und können nur anhand von X-SEM Messungen ermittelt werden, die bekanntermaßen durch eine hohe Wiederholgenauigkeit, aber nicht durch eine ausreichend hohe absolute Messgenauigkeit gekennzeichnet sind.

Für die laterale Strukturmodellierung standen zum Zeitpunkt der Studie die in Abb. 28 gezeigten Gittertypen "Ellipse", "Rectangle", "Polygons" und "Cavity" zur Verfügung. Während die ersten drei Typen bei eingeschränkter Flexibilität eine analytische Fourier-Entwicklung der dielektrischen Konstanten ermöglichen, bietet der Typ "Cavity" maximale Flexibilität und verwendet eine FFT zur Berechnung der Fourier-Koeffizienten. Die Berandungsfunktionen der Kavitäten müssen in diesem Fall vom Benutzer in Matlab programmiert werden. Die Benutzereingabe wird während der Simulation von Matlab interpretiert. Als Hilfsmittel zur Modellierung wurde das in Abb. 28 dargestellte Tool "mkbound", kurz für "make boundaries" geschrieben. Hierin können mit einem SEM Bild als Vorlage Punkte eingezeichnet und durch Polynome interpoliert werden. Dies ermöglicht eine genaue Modellierung von Strukturen, aber keine systematische Variation, wie sie für die Berechnung einer Bibliothek benötigt wird. Eine verbesserte Modellierungssoftware wurde aufgrund dieser Erfahrungen für zukünftige Anwendungen entwickelt. Diese wird in Kapitel 7 beschrieben, konnte aber im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr zum Einsatz kommen.

Abb. 30 zeigt drei unterschiedliche mit "mkbound" erstellte laterale Brechzahlverteilungen, die als Eingabe für die RCWA Simulationen dienen. Sie sind mit den Bezeichnungen "Slot 7, site 3", "Slot 8, site 4" und "Slot 8, site 7" bezeichnet. Dabei sind die "Slots" einfach zwei verschiedene Wafer und die "Sites" verschiedene Stellen auf dem Wafer. Wie zu sehen ist, zeigt die laterale Strukturgeometrie an diesen verschiedenen Stellen durch bewusste Varia-

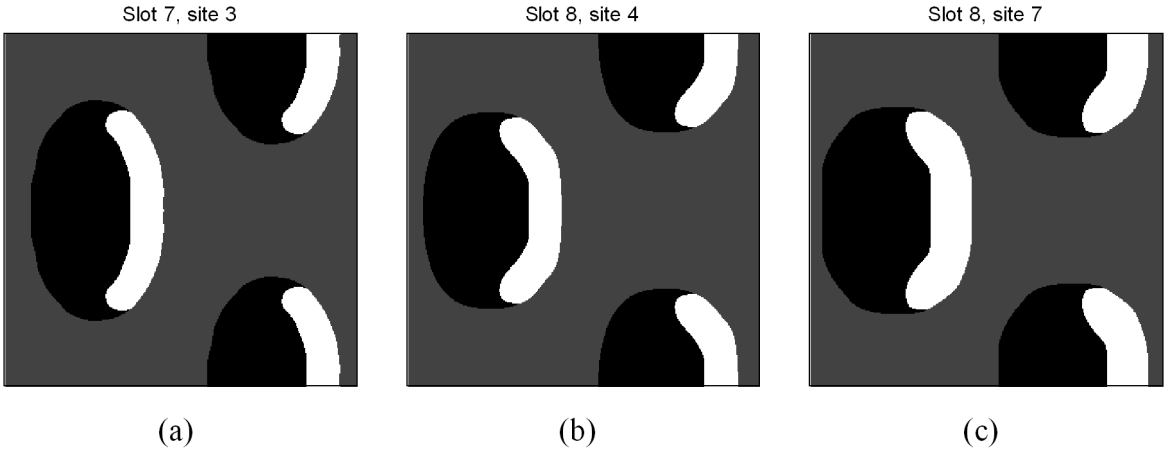


Abbildung 30: Asymmetrische Struktur von Qimonda mit 3 unterschiedlichen Sätzen von lateralen Strukturparametern. Bei (a) beträgt die $CD = 40.0\,\mathrm{nm}$, *bei (b)* $46.8\,\mathrm{nm}$ *und bei (c)* $50.7\,\mathrm{nm}$.

tion der Prozessparameter merkliche Unterschiede. Insbesondere variiert auch die CD, leider aber nicht nur diese, sondern auch andere laterale Strukturparameter. Anhand dieser Proben wurde nun versucht, die CD scatterometrisch zu vermessen. Die Sensitivität von Scatterometrie auf die Tiefe der asymmetrischen Strukturen wurde ebenfalls untersucht.

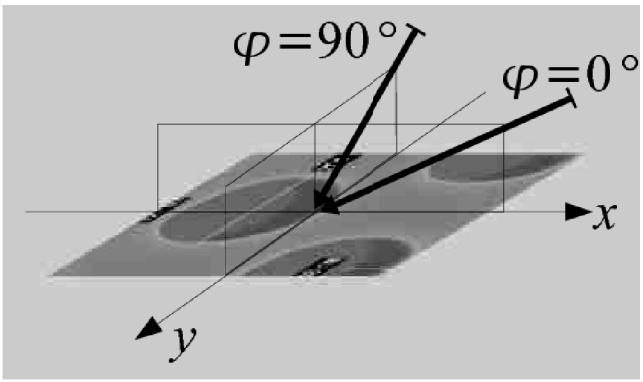
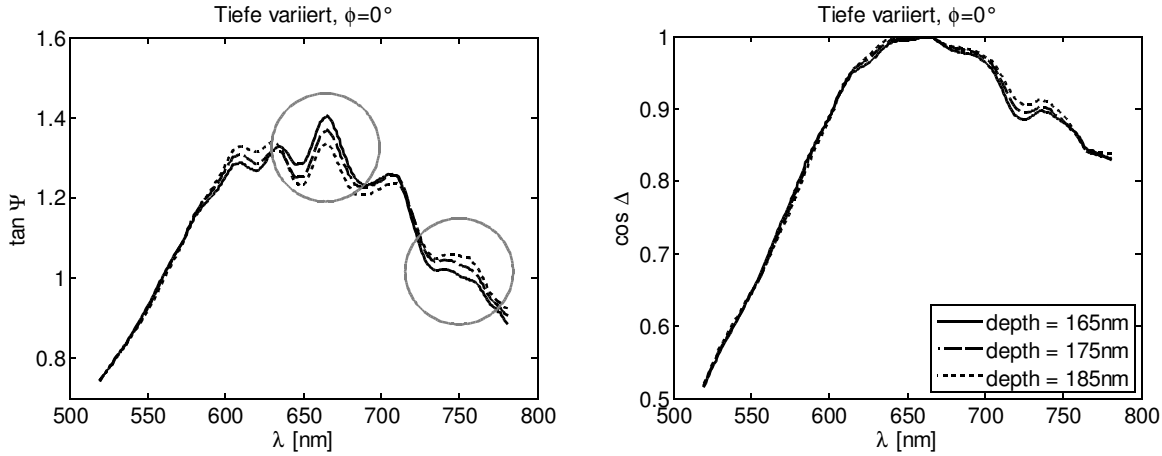
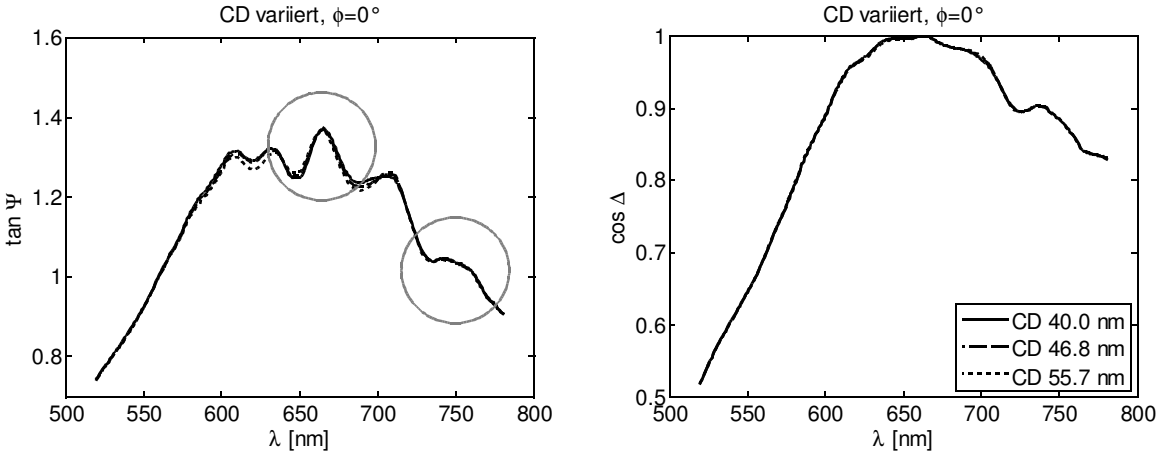


Abbildung 31: Definition des Azimutwinkels φ bei der asymmetrischen Struktur und mögliche Einfallsgeometrien



(a) (b)

Abbildung 32: Simulation spektroskopische Ellipsometrie: Sensitivität auf die Tiefe



(a) (b)

Abbildung 33: Simulation spektroskopische Ellipsometrie: Sensitivität auf die CD

Als erstes wurde das Potential der spektroskopische Ellipsometrie als eine der am häufigsten verwendeten Methoden im Hinblick auf die betrachtete Struktur untersucht. Es wurde der repräsentative Einfallswinkel $\theta = 71.6°$ angenommen. Der Azimutwinkel, wie in Abb. 31 definiert, wurde zunächst zu $\varphi = 0°$ gewählt. Nur für $\varphi = 0°$ und $\varphi = 180°$ liegt die Einfallsrichtung innerhalb einer Symmetrieebene der Struktur, so dass der Polarisationstransfer durch eine diagonale Jones-Matrix beschrieben werden kann. In diesem Fall sind, wie erwähnt, die ellipsometrischen Winkel sinnvolle Messgrößen. Die Abbildungen 32 und 33 zeigen die ellipsometrischen Winkel in der üblichen Darstellung von $\tan\Psi$ und $\cos\Delta$ als Funktionen des Wellenlänge. Der simulierte Wellenlängenbereich war ursprünglich $\lambda = 250\,\text{nm}\ldots780\,\text{nm}$, was ein typischer verfügbarer Bereich von Ellipsometern ist. Der kurzwellige Teil bis 520 nm ist allerdings nicht dargestellt, da hier die Spektren für die unterschiedlichen lateralen Strukturgeometrien nahezu identisch sind, sich also keine Sensitivität auf die Parameter zeigt.

In Abb. 32 wurde die Tiefe der asymmetrischen Ätzung variiert, in Abb. 33 die CD. Es gibt zwei Merkmale im Spektrum von $\tan\Psi$, die eine schöne Aufspaltung der Kurven und damit eine hohe Sensitivität der spektroskopischen Ellipsometrie auf die Tiefe zeigen, sie sind in Abb. 32 eingekreist. Dagegen ergibt sich eine sehr geringe Sensitivität hinsichtlich der CD, was in Abb. 33 zu sehen ist. Die spektroskopische Ellipsometrie ist also nicht zur Messung der CD geeignet. Da für alle Azimutwinkel außer $\varphi = 0°$ und $\varphi = 180°$ die Jones-Matrix nicht-diagonal bzw. die Mueller-Matrix nicht block-diagonal wird, ist eine Variation des Azi-

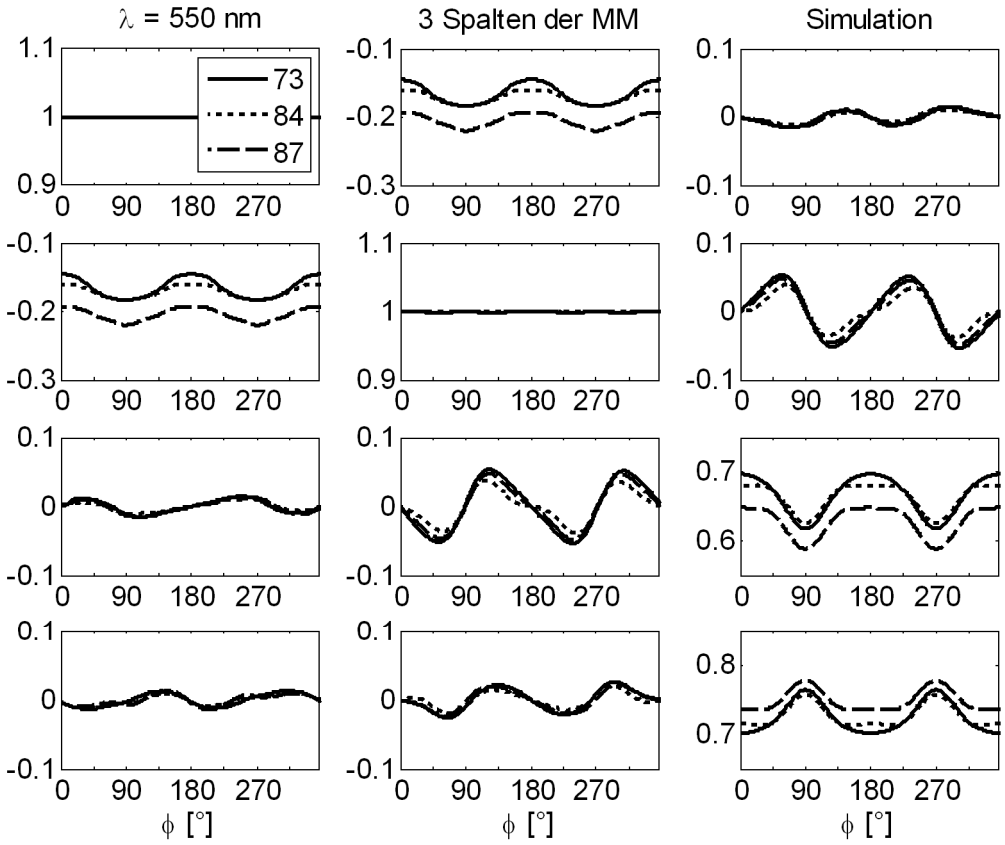


Abbildung 34: Simulation zum Mueller-Matrix Phi-Scan bei $\lambda = 550\,\text{nm}$

mutwinkels ein naheliegender Weg, den Informationsgehalt der Messung zu erhöhen. Die Technik soll hier als Phi-Scan bezeichnet werden. Da, wie erwähnt, mit dem am ITO verfügbaren Ellipsometer Jobin Yvon UVISEL die ersten drei Spalten der Mueller-Matrix gemessen werden können, wurden diese als Messgrößen ausgewählt.

Abbildungen 34 und 35 zeigen simulierte Mueller-Matrix-Spektren als Funktion des Azimutwinkels bei zwei exemplarisch ausgewählten Wellenlängen $\lambda = 550\,\text{nm}$ und $650\,\text{nm}$, normiert auf das $(1,1)-$Element. Die Skalierung der $y-$Achsen ist bei allen Diagrammen bis auf einen für jedes Element frei gewählten Offset gleich. Bevor die Sensitivität bzgl. der CD-Messung betrachtet wird, lohnt sich ein Blick auf die Diagonal- und Außer-Diagonal-Blöcke der Matrix. Der linke untere Außer-Diagonal-Block ist vollständig dargestellt, während vom rechten oberen wegen der Darstellung von lediglich drei der vier Spalten nur die beiden linken Elemente zu sehen sind. Erwartungsgemäß sind die Elemente der Außer-Diagonal-Blöcke bei $\varphi = 0°$ und $\varphi = 180°$ gleich null. Dazwischen nehmen sie Werte im Bereich von etwa $M_{ij} = 0\ldots0.05$ an. Diese Werte sind von ähnlicher Größe wie sie auch bei intrinsisch doppelbrechenden Proben zu erwarten sind [Che2004]. Die Sub-Wellenlängen-Strukturen erzeugen also eine künstliche Doppelbrechung, die in etwa mit einer natürlichen Doppelbrechung vergleichbar ist. Wie anhand der Abbildungen 34 und 35 zu sehen ist, zeigen jeweils einige der Mueller-Matrix-Elemente schöne Aufspaltungen der Spektren je nach gewählter lateraler Geometrie und somit eine ausreichende Sensitivität auf die CD. Der Phi-Scan mit Mueller-

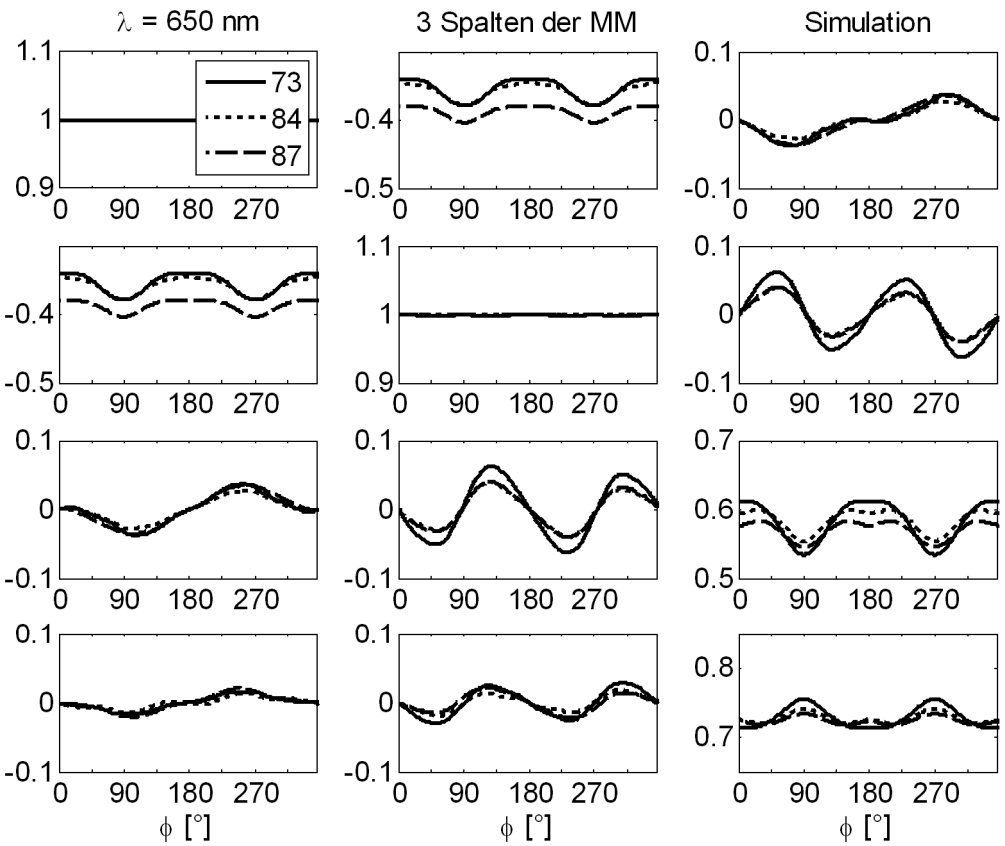


Abbildung 35: Simulation zum Mueller-Matrix Phi-Scan bei $\lambda = 650\,\text{nm}$

Matrix-Elementen als Messgrößen stellt also eine aussichtsreiche Konfiguration dar, um die CD der betrachteten Probe zu messen.

Diese Aussage wird bestärkt durch die gemessenen Spektren, siehe Abbildungen 36 und 37. Auch hier spalten die Kurven mehrerer Matrix-Elemente in einem Maß auf, das sichtlich oberhalb der Messunsicherheit liegt. Die Skalierung der $y-$Achsen wurde wie im Fall der simulierten Spektren für alle Graphen bis auf einen Offset gleich gewählt. Obwohl also sowohl die simulierten als auch die gemessenen Spektren in der vorgeschlagenen Konfiguration eine ausreichende Sensitivität auf die zu messende CD aufweisen, zeigt ein Vergleich von Abb. 34 mit 36 und von Abb. 35 mit 37 leider, dass eine quantitative Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment nicht gegeben ist. Auch wenn die Spektren zum Teil qualitativ ähnlich sind, erscheint auf der Grundlage der vorliegenden Daten der Versuch einer Rekonstruktion der CD nicht aussichtsreich.

Die Gründe sind zum einen in den unzureichenden Möglichkeiten der Modellierung zu sehen, die oben bereits dargelegt wurden. Zum anderen konnte nicht sichergestellt werden, dass neben gleichartig strukturierten Bereichen nicht auch unstrukturierte Bereiche im Beleuchtungsspot des Ellipsometers lagen. Zudem ist die Modellierung anhand eines CD-SEM Bildes einer einzelnen Elementarzelle erfolgt. Da aber die Form der einzelnen Strukturen auch Schwankungen von einer Zelle zur nächsten aufweist, wäre eine Modellierung anhand einer aus vielen CD-SEM Bildern gemittelten Vorlage wohl sinnvoller. Es soll nicht unerwähnt

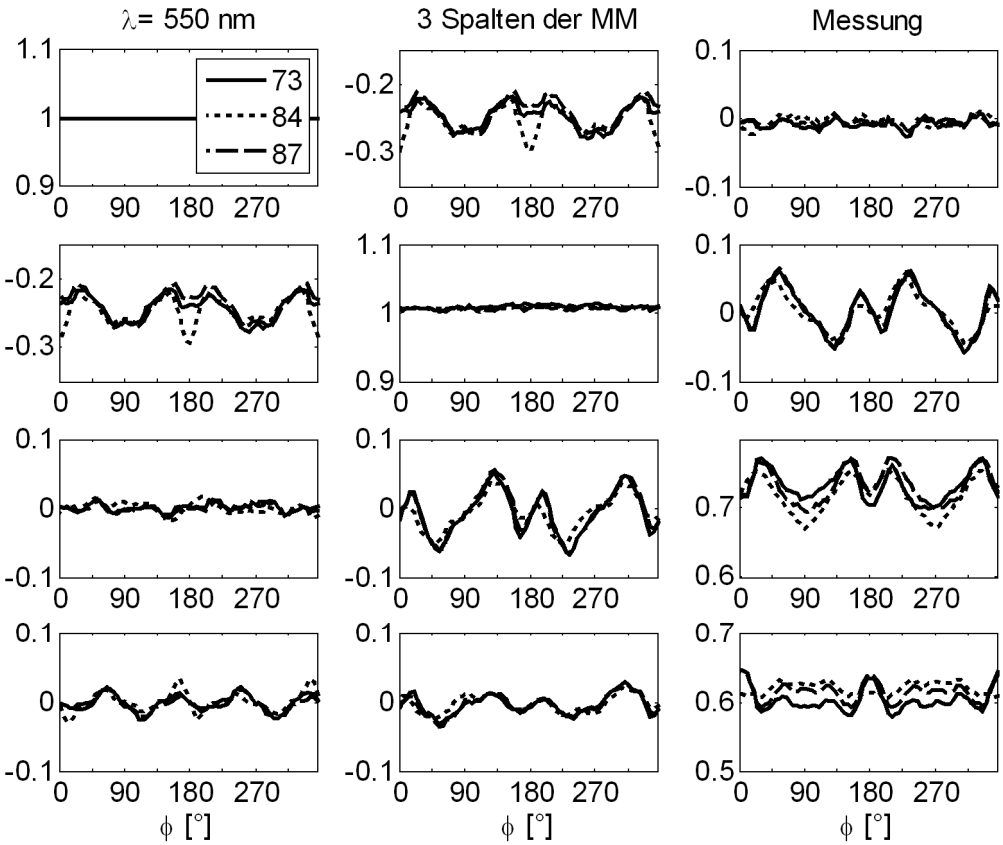


Abbildung 36: Messung zum Mueller-Matrix Phi-Scan bei $\lambda = 550\,\mathrm{nm}$

bleiben, dass bereits bei der Betrachtung von spektroskopischer Ellipsometrie, d.h. noch ohne Phi-Scan, etliche Versuche unternommen wurden, mit den bestehenden, eingeschränkten Möglichkeiten der Modellierung, das Ergebnis der Übereinstimmung zu verbessern. Eine Variation der Dicke der Deckschicht sowie Seitenwandwinkel in der Deckschicht und innerhalb der asymmetrischen Ätzung konnten keine wesentliche Verbesserung bringen. Wegen des hohen Rechenaufwandes inbesondere bei systematischer Variation aller relevanten Parameter wurden diese Versuche aber nicht für den Phi-Scan wiederholt. Die hier beobachteten, vergleichsweise großen Unterschiede zwischen Experiment und Simulation gaben Ausschlag zur Entwicklung der in Kapitel 7 vorgestellten verbesserten Modellierungsmöglichkeiten für zukünftige Untersuchungen.

Abschließend zu dieser Studie wurde der mögliche Einfluss von Depolarisation überprüft. Während sonst in der Scatterometrie bei Messung und Simulation von ellipsometrischen Winkeln oder verwandten Größen i.d.R. eine vollständig polarisationserhaltende Wechselwirkung vorausgesetzt wird, bietet gerade die Mueller-Matrix die Möglichkeit, das Auftreten von Depolarisation zu erfassen. In Kapitel 4.4 wurden zwei Wege skizziert, wie aus dem Ergebnis der rigorosen Beugungsrechnung die Mueller-Matrix berechnet werden kann. Entweder wird gemäß Gl. (75) zunächst die Jones-Matrix berechnet und daraus die Mueller-Jones-Matrix nach Gl. (66) gebildet, oder aber die Mueller-Matrix wird direkt aus einer Basis von Stokes-Vektoren gemäß Gl. (76) rekonstruiert. Während beim ersten Weg Depolarisation

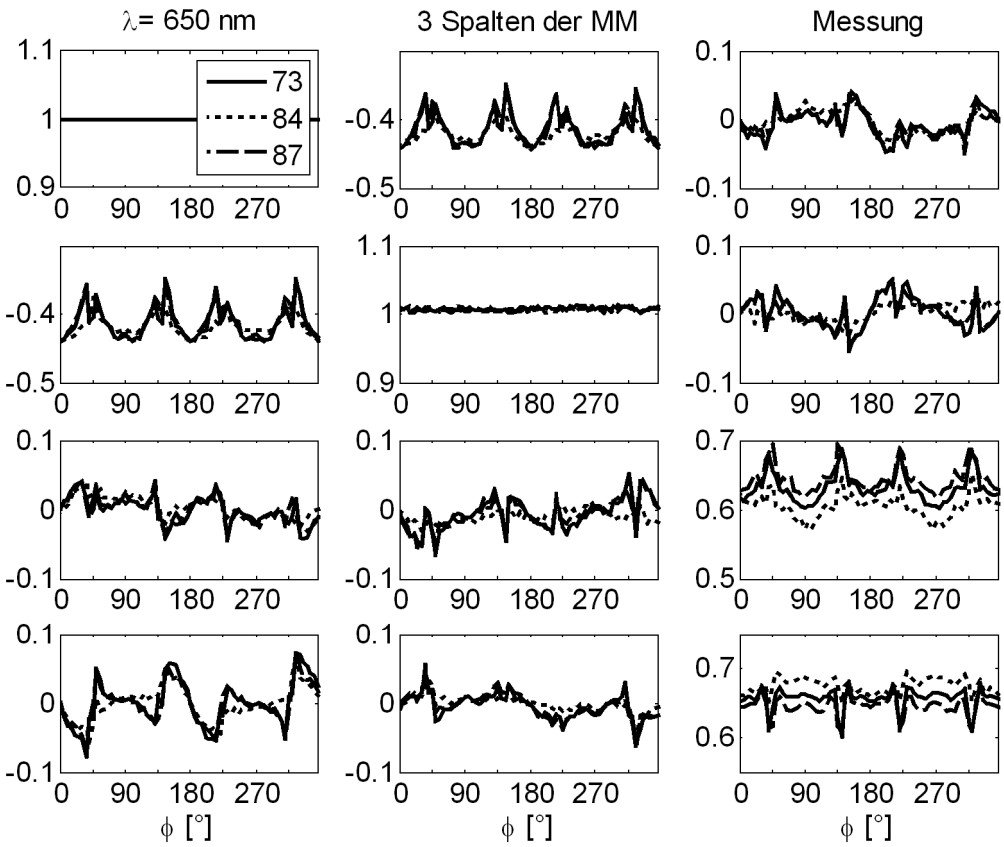


Abbildung 37: Messung zum Mueller-Matrix Phi-Scan bei $\lambda = 650\,\mathrm{nm}$

von vornherein ausgeschlossen wird, bietet der zweite Weg die Möglichkeit, verschiedene Wellenlängen und / oder verschiedene Einfallsrichtungen inkohärent zu überlagern und damit Depolarisation zuzulassen.

Zur Abschätzung eines größtmöglichen Fehlers durch unzulässige Annahme eines *zeitlich* vollständig kohärenten Polarisationstransfers wurden zusätzlich zur Mittenwellenlänge zwei benachbarte Wellenlängen mit $\pm 1\,\mathrm{nm}$ Differenz berücksichtigt. Alle drei wurden der Einfachheit halber mit gleicher Stärke inkohärent überlagert. Eine Gauß- oder Lorentz-förmige Gewichtung wäre jedoch realistischer. In jedem Fall liegt die so gewählte spektrale Bandbreite deutlich oberhalb derer eines üblichen Gitterspektrometers, wie es in einem spektroskopischen Ellipsometer zum Einsatz kommt. Zur Abschätzung der größtmöglichen Fehlers bei Ignorieren der endlichen *räumlichen* Kohärenz dient folgende Überlegung. Wird das Licht durch eine Optik auf Mikrospots mit typischerweise $d = 50 \ldots 100\,\mu\mathrm{m}$ Durchmesser fokussiert, so ist dafür eine numerische Apertur von $NA = \lambda/2d = 0.005$ nötig. Diese wird vereinfacht modelliert durch fünf statt einer einfallenden ebenen Welle, eine zentrale sowie je vier um ca. $0.3°$ nach unterschiedlichen Richtungen verkippte Wellen. Wiederum werden alle gleich gewichtet und inkohärent überlagert. Für beide Rechnungen, also die Berücksichtigung endlicher zeitlicher wie auch räumlicher Kohärenz ergeben sich gemäß Gl. (64) Polarisationsgrade von $DOP > 0.997$. Damit ist bestätigt, dass ein vollständig kohärenter Polarisationstransfer in sehr guter Näherung vorausgesetzt werden kann.

Abb. 38 zeigt ergänzend hierzu eine Messung des Polarisationsgrades als Funktion des Azimutwinkels φ bei diagonaler Polarisation der Beleuchtung. Die drei Spalten der gemessenen Mueller-Matrix wurden hierfür mit dem entsprechenden Stokes-Vektor $\mathbf{S}_{in} = [1, 0, 1, 0]^\top$ multipliziert. Die fehlende vierte Spalte wird nicht benötigt, da kein elliptischer oder zirkularer Eingangszustand gewählt wurde. Die so erhaltenen Elemente des ausfallenden Stokes-Vektors liefern nach Gl. (64) den dargestellten Polarisationsgrad. Wie zu erkennen ist,

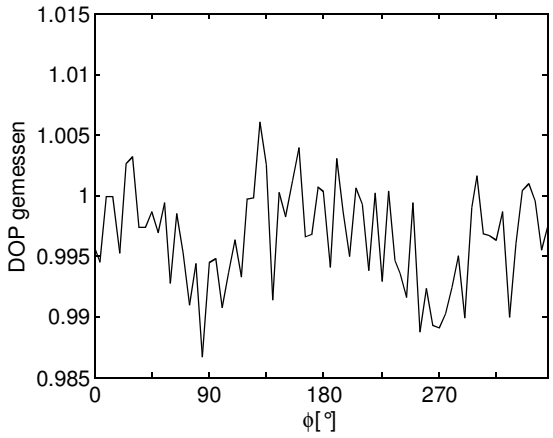


Abbildung 38: Gemessener Polarisationsgrad, exemplarisch wurde diagonale Polarisation für die Beleuchtung gewählt

schwankt der Messwert mit Abweichungen < 0.015 um den Wert eins. Damit zeigt auch die Messung, dass die Vernachlässigung von Depolarisationseffekten gerechtfertigt ist.

6.3 Scatterometrie unter Berücksichtigung von Seitenwand- und Kantenrauheit

Wie in Kapitel 5.3 dargelegt, rücken Abweichungen von einer perfekt periodischen Anordnung von Nanostrukturen innerhalb der Scatterometrie in den vergangenen Jahren verstärkt in den Mittelpunkt des Interesses. Wegen der immer kleiner werdenden Strukturen in der Halbleitertechnologie werden die Prozesse immer kritischer, und es ist zu erwarten, dass sogar die absolute Größe von Schwankungen kritischer Größen zwischen benachbarten Zellen wie auch von Seitenwand- und Kantenrauheit zunehmen werden [Boe07]. Bei schrumpfenden Strukturgrößen nimmt somit die relative Größe dieser Schwankungen überproportional zu. In jüngster Zeit wird auch intensiv der Einfluss von Schwankungen auf die Funktionalität der prozessierten Bauelemente diskutiert [Gog2006]. Wegen dieser offensichtlichen Relevanz des Problems wurden die in diesem Kapitel vorgestellten Untersuchungen durchgeführt, Kapitel 6.3.1 beschäftigt sich mit Fluktuationen zwischen benachbarten Zellen und Seitenwandrauheit, Kapitel 6.3.2 mit Kantenrauheit.

Es ist eine überaus anspruchsvolle Aufgabe, Proben mit gezielt eingebrachten und gut charakterisierten Fluktuationen oder Rauheit herzustellen, insbesondere, wenn sich die Amplituden der Schwankungen in der Größenordnung von ansonsten ungewollten Abweichungen befinden und nicht von unbekannter ungewollter Rauheit überlagert sein soll. Aus diesem Grund sind die folgenden Untersuchungen reine Simulationsstudien. Während Kapitel 6.3.1 sich auf eine qualitative Sensitivitätsanalyse beschränkt, untersucht Kapitel 6.3.2 als weiteren Schritt in Richtung Messung den Einfluss von Kantenwandrauheit auf scatterometrische Rekonstruktionen, indem simulierte Spektren mit Rauheit als pseudo-gemessene Spektren betrachtet werden. In der näheren Zukunft sollen am ITO auch Vergleichsmessungen mit eigens hergestellten Proben durchgeführt werden, was jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr möglich war.

6.3.1 Untersuchungen von Seitenwandrauheit und Fluktuationen der Linenbreite

Abb. 39 zeigt eine X-SEM Aufnahme von Löchern in Resist. Wie zu erkennen ist, weist zum einen der Durchmesser der Löcher eine Schwankung auf, zum anderen ist eine Seitenwandrauheit zu beobachten. Der Einfluss beider Phänomene auf scatterometrische Messsignale wird im Folgenden untersucht. Obwohl hier 2D periodische Strukturen vorliegen – periodische Arrays von elliptischen Löchern – beschränken sich die Untersuchungen auf 1D periodische Gitter, um die Rechenzeiten zu reduzieren. Ansonsten orientiert sich das Strukturmodell vergleichsweise eng an den Daten der gezeigten Struktur. Als mittlere CD und Periode der

Struktur sind aus SEM-Messungen die Werte 128 nm und 280 nm bekannt, die Tiefe der Gräben beträgt 350 nm. Als realistischen Wert für Schwankungen der CD kann aus den SEM Aufnahmen eine maximale Abweichung von 5 nm abgeschätzt werden. Neben Gräben in Resist wurden auch solche in Silizium untersucht. Beide modellhafte Strukturen sollen stellvertretend für typische Messobjekte in der Scatterometrie stehen. Als Messkonfigurationen wurden Normal-Incidence-Reflektometrie und spektroskopische Ellipsometrie betrachtet. Beispielhaft werden hier nur die Ergebnisse für Siliziumstrukturen wiedergegeben. In [Sch2005b] sind die Ergebnisse für beide Materialien dargestellt. Daraus geht hervor, dass die Ergebnisse für Resist vergleichbar sind.

Beide Phänomene, Schwankungen zwischen benachbarten Zellen und Seitenwandrauheit, werden mit einem gemeinsamen Rauheitsmodell beschrieben werden. Damit soll der Frage nachgegangen werden, ob *Mittelwerte* und *Standardabweichungen* dimensioneller Größen unabhängig von einander gemessen werden können. Abb. 40 erklärt die Idee des Rauheitsmodells. Bekanntermaßen geht die diskrete Binomialverteilung mit den Parametern

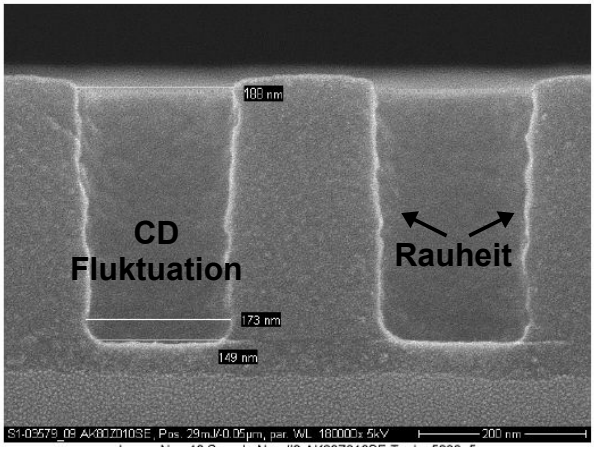


Abbildung 39: CD Fluktuationen und Seitenwandrauheit im SEM Bild

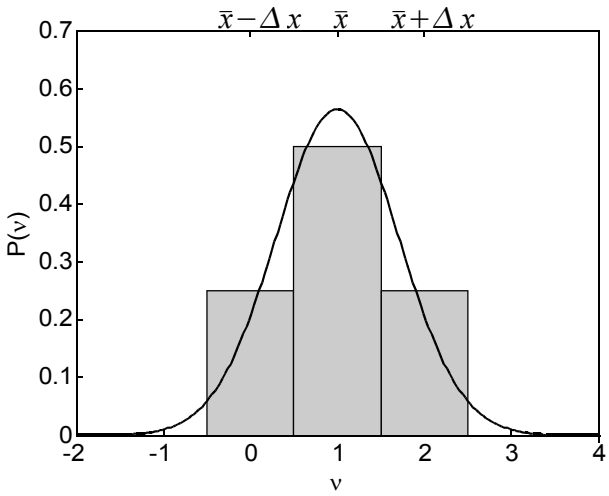


Abbildung 40: Rauheitsmodell auf der Grundlage der Binomialverteilung

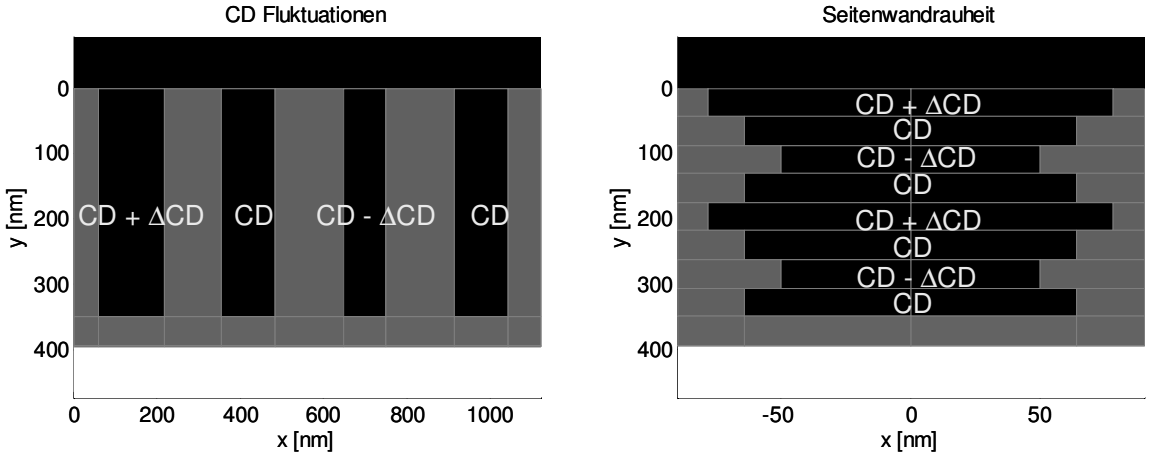
$p = 1/2$ und n für den Grenzübergang $n \to \infty$ in die Gauß'sche Normalverteilung über. Letztere wiederum stellt in vielen Fällen eine zutreffende Beschreibung von zufälligen Schwankungen dar. Betrachtet man nun die Dichtefunktion der Binomialverteilung

$$P(\nu) = \frac{n!}{n!(n-\nu)!} p^{\nu}(1-p)^{n-\nu}, \quad \nu = 0 \ldots n \tag{77}$$

für $p = 1/2$ und $n = 2$, so ergibt sich die in Abb. 40 dargestellte diskrete Wahrscheinlichkeitsdichte $P = (1/4) \cdot [1, 2, 1]$ für die Zufallsvariable ν. Identifiziert man nun $\nu = 1$ mit dem Mittelwert $\bar{x}$ einer dimensionellen Messgröße und die Werte $\nu = 0$ und $\nu = 2$ mit $\bar{x} \pm \Delta x$, so zeigt sich, dass der Mittelwert doppelt so oft auftritt wie die beiden benachbarten Werte. Zudem lässt sich leicht zeigen, dass der Abstand Δx der diskreten Werte mit der Standardabweichung σ_x über die Beziehung $\Delta x = \sqrt{2}\sigma_x$ verknüpft ist.

Abb. 41 zeigt schließlich die hieraus abgeleiteten Strukturmodelle. In Teilbild (a) wird die Fluktuation der *CD* zwischen benachbarten Gräben durch ein vierfaches Übergitter in willkürlicher, Sinus-ähnlicher Anordnung realisiert, wobei wie angenommen der Mittelwert zweimal und die benachbarten Werten je einmal auftreten. In Teilbild (b) ist die Seitenwandrauheit durch 8 Schichten realisiert, wobei die Abfolge der *CD* Werte aus Teilbild (a) zweimal wiederholt ist. Diese Wahl rührt daher, dass in der CD-SEM Aufnahme aus Abb. 38 eine dominante, tiefste Frequenzkomponente der Seitenwandrauheit abgeschätzt werden kann, die etwa einer Periode von 40...50 nm entspricht. Bei einer Tiefe der Gräben von 350 nm spiegelt eine Einteilung in 8 Schichten diese Rauheit damit hinreichend realistisch wider, ohne dass die Zahl der Schichten und damit die Rechenzeit unverhältnismäßig groß wird.

In Abb. 42 werden für Fluktuationen zwischen benachbarten Zellen simulierte Scattergramme mit konstanter Standardabweichung der *CD* und variiertem Mittelwert ((a) und (b)) verglichen mit solchen mit konstantem Mittelwert und variierter Standardabweichung ((c) und (d)). Als Messkonfiguration wird die spektroskopische Ellipsometrie mit den ellipsometrischen Winkeln als primären Messgrößen betrachtet. Wie zu erkennen ist, zeigt sich in ver-



(a) (b)

Abbildung 41: Simulationsmodelle für (a) CD Fluktuationen und (b) Seitenwandrauheit

schiedenen Wellenlängenbereichen eine deutliche Aufspaltung der Spektren für unterschiedliche Parameterwerte. Besonderes Augenmerk wird jeweils auf ein Merkmal im Bereich um $\lambda = 650\,\text{nm}$ im Spektrum von $\tan\Psi$ und um $\lambda = 700\,\text{nm}$ im Spektrum von $\cos\Delta$ gelegt. Hieran ist zu erkennen, dass die spektroskopische Ellipsometrie eine deutliche Sensitivität sowohl auf die Mittelwerte bei konstanter Standardabweichung als auch auf die Standardabweichungen bei konstantem Mittelwert aufweist.

Zusätzlich sind Richtungspfeile eingezeichnet, die anschaulich die Änderung des Merkmals bei der Variation des jeweiligen Parameters kennzeichnen. Ein Vergleich von Teilbild (a) mit (c) sowie von (b) mit (d) zeigt, dass diese Pfeile bei Änderung des Mittelwerts nicht in dieselbe Richtung weisen wie bei Änderung der Standardabweichung. Diese Tatsache stellt einen deutlichen Hinweis dar, dass Mittelwerte und Standardabweichungen unabhängig von einander gemessen werden können. Wären die Richtungspfeile nahezu parallel, so könnte bei einer Rekonstruktion nicht zwischen beiden Größen unterschieden werden.

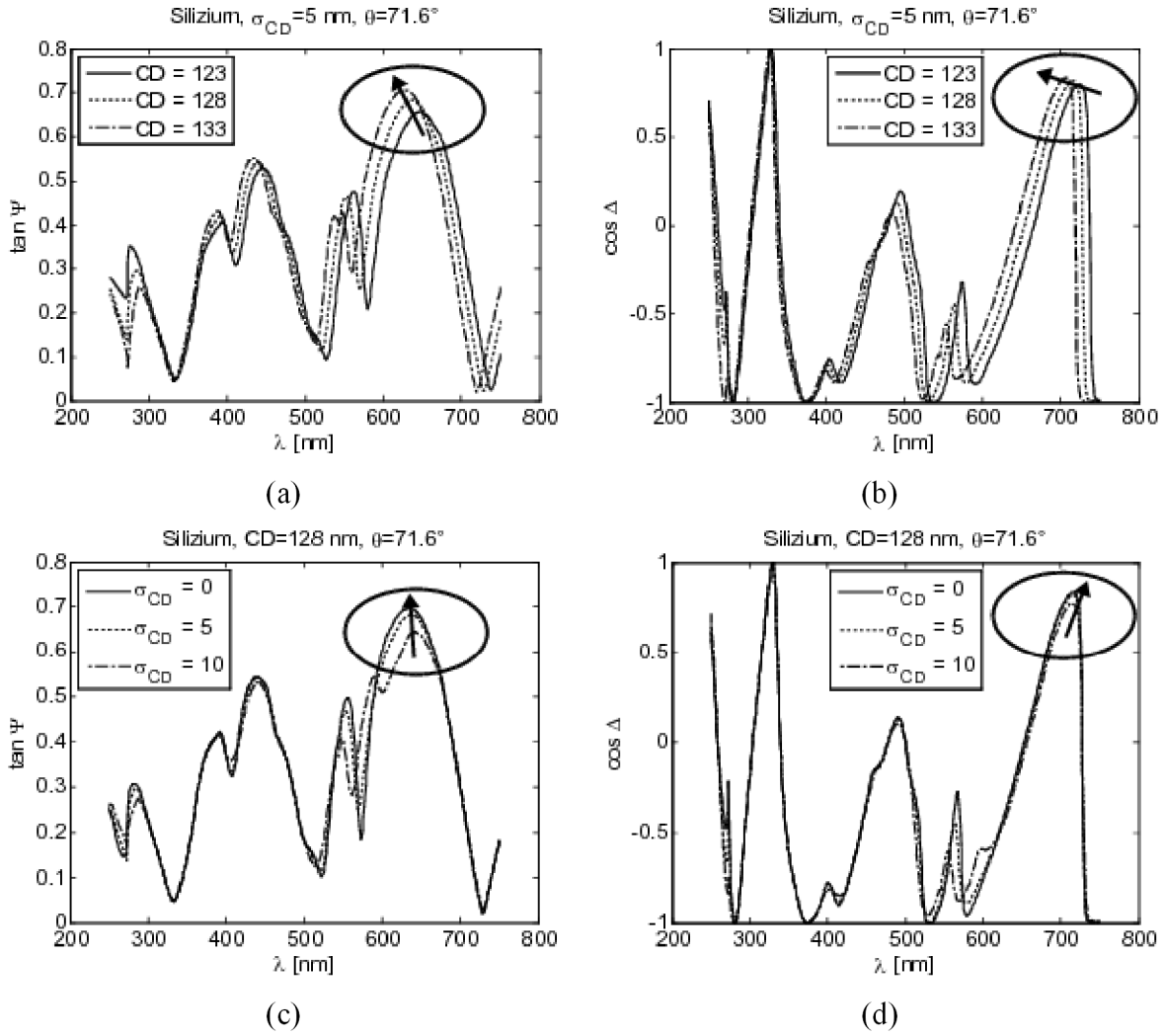


Abbildung 42: Simulationsergebnisse für CD Fluktuationen. (a) und (b): Spektren der ellipsometrischen Winkel $\tan\Psi$ *und* $\cos\Delta$ *bei Variation der Mittelwerte mit konstanter Standardabweichung, (c) und (d) entsprechend für die Variation der Standardabweichung bei konstantem Mittelwert*

Abb. 43 zieht denselben Vergleich wie Abb. 42. Diesmal wird aber Seitenwandrauheit untersucht, und als Messkonfiguration ist hier exemplarisch die Normal-Incidence-Reflektometrie mit den Reflektivitäten in $p-$ und $s-$Polarisation als primären Messgrößen ausgewählt. Wie oben wird in beiden Spektren je ein Merkmal herausgegriffen, das sowohl die Sensitivität der Methode auf Mittelwerte bei konstanter Standardabweichung und umgekehrt zeigt, als auch durch die nicht-parallelen Richtungspfeilen eine unabhängige Messbarkeit von Mittelwerten und Standardabweichungen verspricht.

Abschließend zu diesen Untersuchungen wurde der Frage nachgegangen, ob die zwangsläufig vereinfachten Modelle der betrachteten Schwankungen dem Problem gerecht werden, oder ob die gezogenen Schlussfolgerungen bloße Artefakte der getroffenen Vereinfachungen sein könnten. Zwei Beschränkungen des Modells wurden zu diesem Zweck identifiziert: die willkürliche, Sinus-ähnliche Anordnung der CD Werte, vgl. Abb. 41, sowie die Beschränkung auf vier Subperioden, die durch die Wahl des Parameters $n = 2$ in der Binomial-

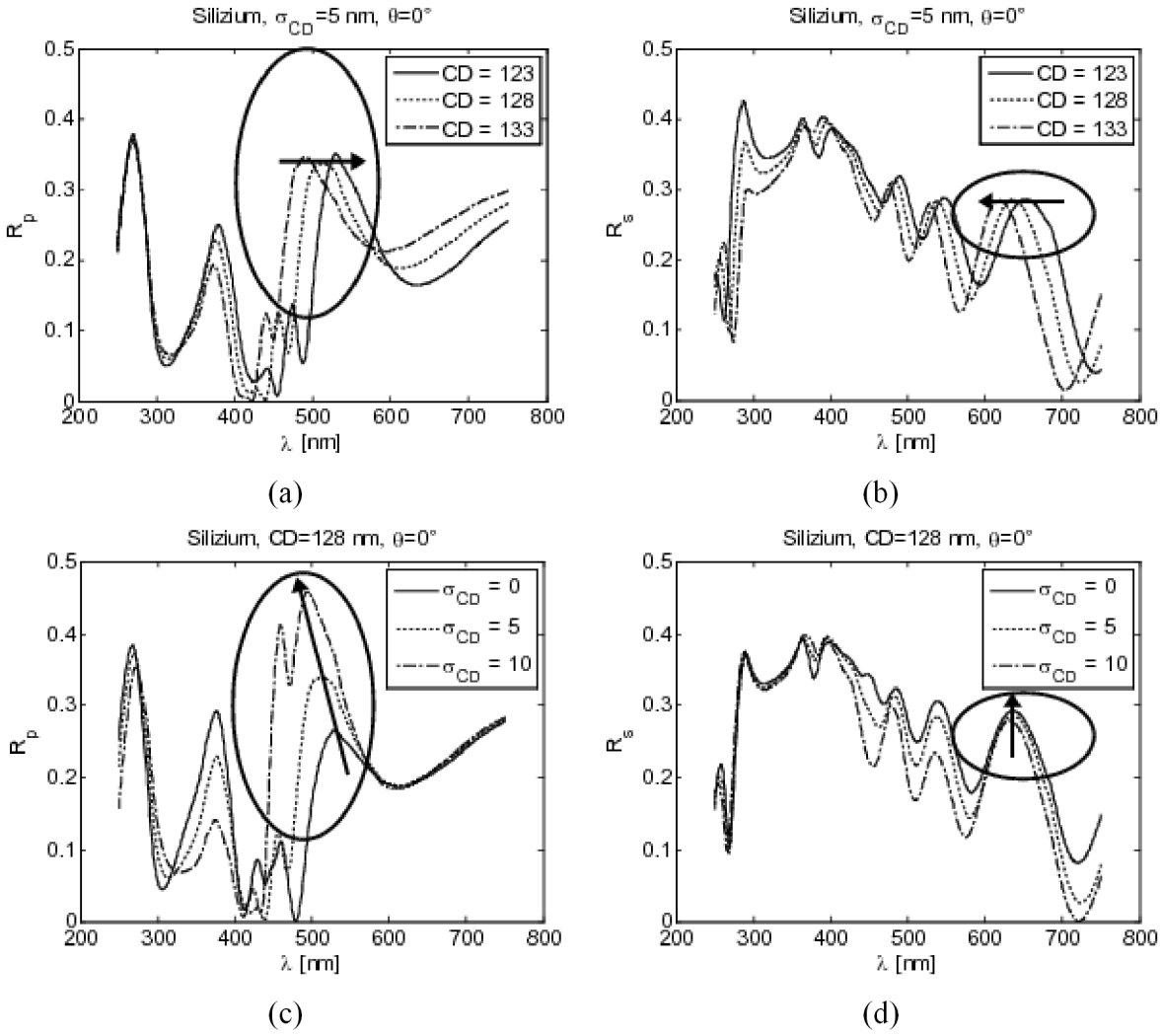


Abbildung 43: Simulationsergebnisse für Seitenwandrauheit (a) und (b): Spektren der ellipsometrischen Winkel $\tan\Psi$ *und* $\cos\Delta$ *bei Variation der Mittelwerte mit konstanter Standardabweichung, (c) und (d) entsprechend für die Variation der Standardabweichung bei konstantem Mittelwert*

verteilung gegeben ist. Für größere Werte von n würde die Zahl der benötigten Subperioden überproportional ansteigen, was einen erheblich höheren Rechenaufwand zur Folge hätte.

Ein erster Vergleich zwischen der willkürlichen, Sinus-ähnlichen Anordnung und einer zufälligen Modellierung von Rauheit fiel unbefriedigend aus. Es musste klar festgestellt werden, dass zwischen den Spektren der unterschiedlichen Modelle ähnlich große Unterschiede zu beobachten sind, wie zwischen Spektren innerhalb eines Modells mit unterschiedlichen Parameterwerten. Ein etwas komplizierterer Test zeigt aber, dass die gezogenen Schlussfolgerungen trotzdem Gültigkeit behalten. Abb. 44 veranschaulicht die Idee des Tests. Das willkürliche, Sinus-ähnliche Rauheitsmodell ist willkürlich ganz rechts in der Elementarzelle platziert, eingebettet in ein vierfaches Übergitter mit drei zufälligen Rauheitsmodellen. Es muss erwähnt werden, dass die Wandpositionen in diesen zufälligen Modellen zwar anhand von Zufallszahlen ermittelt wurden; es wurden aber zu diesem Zweck aus einer Zufallszahlenfolge Sequenzen so ausgewählt, dass die vorgegebenen Standardabweichungen auch für die kleine

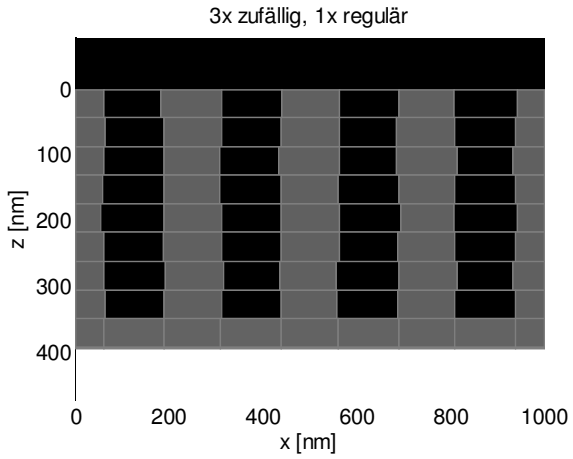
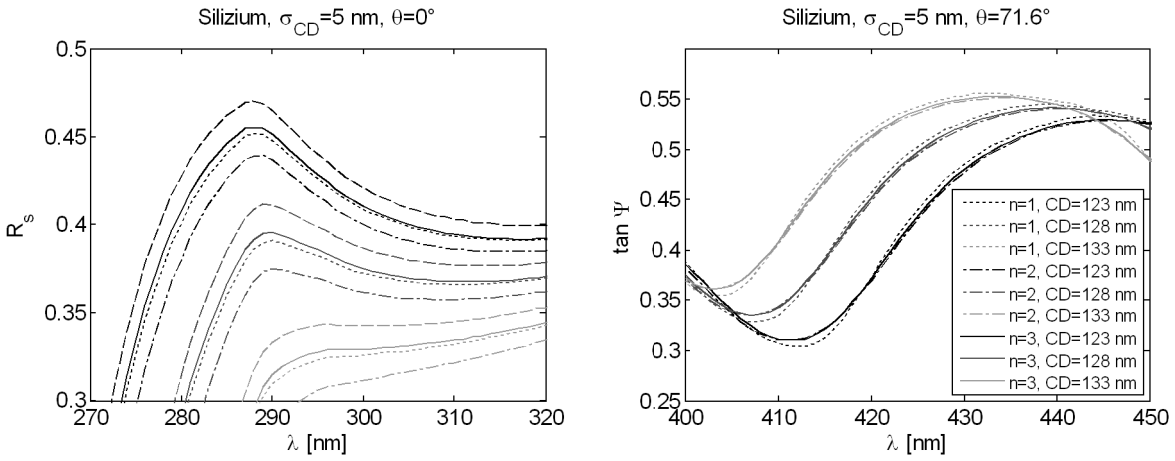


Abbildung 44: Test des Einflusses der willkürlichen Anordnung



(a) (b)

Abbildung 45: Simulationsergebnisse von zwei Tests: (a) Einbindung der willkürlichen Anordnung in zufällige Anordnungen für den Fall von Seitenwandrauheit, (b) Variation des Parameters n der Binomialverteilung für den Fall der CD Fluktuationen

ausgewählte Stichprobe von Zahlen dem vorgegebenen Wert entsprechen. Im Test wurde die in Abb. 44 gezeigte Struktur verglichen mit zwei weiteren, die jeweils einem vierfaches Übergitter aus zufälligen Einzelstrukturen entsprechen.

Die Ergebnisse des Tests zeigt Abb. 45 (a). Das gezeigte Diagramm entspricht einem Ausschnitt aus Abb. 43 (b). Die verschiedenen Werte der variierten CD sind dabei wie in Abb. 45 (b) als Grauwert codiert, die verschiedenen Linientypen entsprechen verschiedenen Modellen, wovon eines, wie erwähnt, die willkürliche, Sinus-ähnliche Struktur gemäß Abb. 44 enthält. Wie zu erkennen ist, verringert sich durch die Mittelung über verschiedene Modelle der Einfluss des konkreten Modells und der Einfluss der variierten CD wird dominant. Bereits im betrachteten Fall eines vierfachen Übergitters ist diese Tendenz erkennbar. Bei Berücksichtigung eines noch größeren Übergitters ist zu erwarten, dass der Einfluss des Modells verschwindet. Insofern kann über das willkürlich gewählte, Sinus-ähnliche Modell gefolgert werden, dass die *absoluten Kurvenverläufe* zwar nur für das vereinfachte Modell korrekt sind, dass aber *Änderungen von Merkmalen*, etwa die Verschiebung des in Abb. 45 (a) gezeigten Peaks, bei Variation eines Parameters mit dem gewählten einfachen Modell mit $n = 2$ durchaus richtig vorhergesagt werden, da die Ergebnisse mit den Vorhersagen komplexerer Modelle übereinstimmen.

Als zweiten Test wurde, wie erwähnt, der Einfluss des Parameters n der Binomialverteilung untersucht. Zu diesem Zweck wurde der oben gewählte Wert $n = 2$ mit den benachbarten Werten $n = 1$ und $n = 3$ verglichen. In diesen Fällen lauten die Wahrscheinlichkeitsdichten $P = (1/2) \cdot [1, 1]$ bzw. $P = (1/8) \cdot [1, 3, 3, 1]$. Somit erfordern die zugehörigen Modelle 2 bzw. 8 Subperioden. Abb. 45 (b) zeigt die Simulationsergebnisse, wobei wieder der Parameterwert der CD im Grauwert und das Modell im Linientyp kodiert ist. Dieser Test bestätigt sehr deutlich die Zulässigkeit der Wahl $n = 2$, denn die Unterschiede zwischen den Spektren der unterschiedlichen Modelle fallen wesentlich geringer aus als die Unterschiede zwischen den Spektren der unterschiedlichen Parameterwerte.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass für die untersuchte Struktur eine erhebliche Sensitivität verschiedener scatterometrischer Methoden sowohl auf den Mittelwert als auch auf die Standardabweichung der CD beobachtet werden kann. Weiterhin versprechen die nicht-parallelen Richtungspfeilen, die eine Änderung charakterisischer Merkmale in den Scatterogrammen visualisieren, eine unabhängige Messbarkeit von Mittelwert und Standardabweichung.

6.3.2 Periodisch modellierte Kantenrauheit

Es wurde mehrfach darauf hingewiesen, dass Kantenrauheit oder line edge roughness (LER) in der Scatterometrie ein hochaktuelles Thema ist , dem sich zahlreiche Publikationen in der jüngsten Vergangenheit widmen [Boh2005][Qui2005b][Sch2005b][Ger2007a] [Ger2007b][Yaa2007]. Abb. 46 zeigt eine CD-SEM Aufnahme von isolierten Linien, die sichtlich eine LER aufweisen. Es ergeben sich in diesem Zusammenhang zwei entscheidende

Fragen. Zum einen ist zu untersuchen, ob eine Störung der perfekten Periodizität bei den ständig schrumpfenden Strukturgrößen weiterhin in Scatterometrie-Modellen ignoriert werden kann, oder falls nicht, wie eine Berücksichtigung der LER und eine Korrektur ihres Einflusses in erweiterten Simulationsmodellen mit akzeptabler Komplexität und Rechenzeit aussehen kann. Zum anderen ist als konsequente Fortführung die Vermessung von LER-Parametern mittels Scatterometrie ein wünschenswertes Ziel.

Einen ersten Schritt in diese Richtung stellen unter anderem die Untersuchungen im Kapitel 6.3.1 dar. Es soll aber nochmals festgehalten werden, dass hier das isolierte Auftreten eines einzelnen Rauheitseffektes angenommen wurde, ohne den Einfluss von überlagerten weiteren Rauheiten, etwa entlang der Kante, zu untersuchen. Zudem war die Standardabweichung der CD, also im wesentlichen eine Maß für die Tiefe der Rauheit, die einzige potenzielle Messgröße. Das Spektrum der enthaltenen Ortsfrequenzen dagegen wurde weder variiert noch realistisch modelliert.

Es sind bei beiden Fragen, der nach dem störenden Einfluss der LER auf scatterometrische Messungen wie auch nach der Messbarkeit von LER-Parametern, die Forschungsarbeiten noch in einem frühen Stadium, vgl. Kapitel 5.3. Die in diesem Kapitel vorgestellten Arbeiten beschränken sich daher darauf, die erste Frage teilweise zu beantworten sowie eine Stoßrichtung für weitere Untersuchungen aufzuzeigen. Es wird der Frage nachgegangen, wie stark eine nicht im Modell berücksichtigte, monochromatische LER das Ergebnis einer scatterometrischen Rekonstruktion verfälscht. Weiterhin wird der Nutzen einer Berücksichtigung der LER in Form einer einfachen Effektiv-Medium-Approximation (EMA) [Lal1996b] untersucht. Die hier gezeigten Ergebnisse wurden in [Sch2008a] publiziert.

Die Beschränkung auf "monochromatische" LER bringt den erheblichen Vorteil, dass insbesondere in Verbindung mit Resist als betrachtetem Material die Rechnung mit sehr wenigen Fourier-Moden konvergiert, was zu tragbaren Rechenzeiten führt. Eine Mischung verschiedener Frequenzanteile führt dagegen zwangsläufig zu detailreicheren Strukturen innerhalb der Elementarzelle, wodurch mehr Fourier-Moden benötigt werden, allein um die dielek-

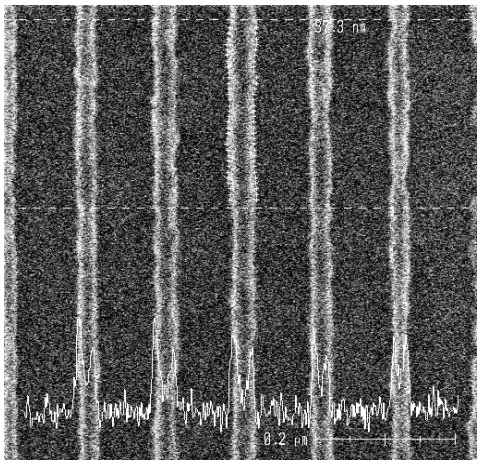


Abbildung 46: CD-SEM Aufnahme von Linien mit Kantenrauheit, line edge roughness (LER)

trische Konstante mit ausreichender Genauigkeit im Fourier-Raum darstellen zu können. Wenn es also um die Beschreibung von "polychromatischer" LER für rigorose Simulationen geht, gelangt man schnell an die Grenzen der Rechenleistung. Es sind modellhafte Beschreibungen gefordert, die zwangsläufig Näherungen gegenüber voll rigorosen Simulationen einschließen.

Als Fortführung dieser Arbeiten wurde demonstriert, dass ein Fieldstitching-Algorithmus mit Kirchhoff-Grenzflächen [Sch2008b][Sch2008c] eine geeignete Näherungsmethode darstellt. Er steht für weiterhin am ITO geplante Aktivitäten, die insbesondere auf die Messung unterschiedlicher LER Parameter abzielen, zur Verfügung. Da der Algorithmus in dieser Arbeit nicht mehr zum Einsatz kommt, wird auf eine detaillierte Darstellung verzichtet.

Abb. 47 zeigt nun verschiedene Modelle die hier zum Einsatz kommen. Teilbild (a) zeigt den Querschnitt der untersuchten Struktur, einer trapezförmigen Linie aus Resist mit darunter liegender Antireflex-Schicht (engl. back side antireflection coating – BARC) auf einem Silizium-Wafer mit natürlichem Oxid. Die Modellierung mit nur 4 Schichten führt gegenüber Modellen mit sehr vielen Schichten zu Abweichungen < 1%. Als CD der Linien wurde 50 nm gewählt. Es wurden dichte Linien mit einem Pitch von Λ_x = 100 nm und isolierte

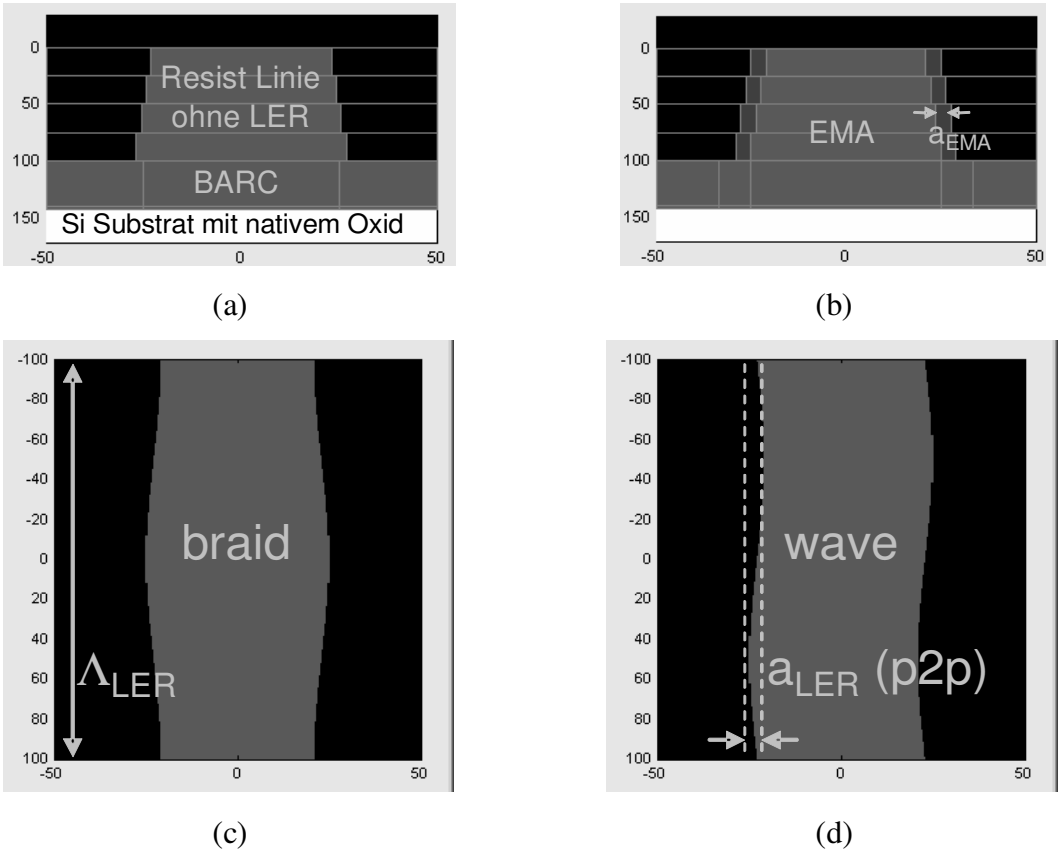


Abbildung 47: Verschiedene LER Modelle: (a) Modell einer Resist-Linie ohne LER (b) Berücksichtigung der LER mittels einer EMA-Schicht seitlich an der Linie (c) "braid" Modell: reine Variation der Linienbreite (d) "wave" Modell: reine Variation der Linienposition

Linien mit $\Lambda_x = 350\,\text{nm}$ betrachtet. Der Sollwert für den Seitenwandwinkel beträgt $SWA = 87°$ bei den dichten und $SWA = 84°$ bei den isolierten Linien.

Teilbild (b) zeigt die Berücksichtigung von LER in Form eines einfachen EMA-Modells, bei dem seitlich an der Linie EMA-Schichten angeordnet sind, deren Brechzahl dem arithmetischen Mittel der Brechzahlen von Luft und Resist entspricht. Die Dicke dieser Schicht wird als a_{EMA} bezeichnet und wird später als freier Parameter bei der Rekonstruktion der Strukturgeometrie zugelassen. Teilbilder (c) und (d) zeigen zwei mögliche Modelle in der Draufsicht, wie monochromatische LER mit einer sinusförmigen Kantenvariation berücksichtigt werden kann. In (c) ist eine reine Variation der Linienbreite mit der anschaulichen Bezeichnung "braid" (engl. Zopf, Kordel) dargestellt, in (d) eine reine Variation der Linienposition, die "wave" (engl. Welle) genannt wird. Die Periode der Rauheit heißt bei beiden Modellen Λ_{LER} und die peak to peak Tiefe a_{LER}. Als Standardwert für diese Tiefe wird der Wert $a_{LER} = 3\,\text{nm}$ verwendet. Eine Beschränkung der Modenzahl auf 5×5 liefert für alle betrachteten Rauheitsperioden Abweichungen $< 1\%$ gegenüber konvergierten Rechnungen.

Die grundsätzliche Vorgehensweise im Folgenden besteht darin, dass simulierte Scatterogramme ohne Berücksichtigung der LER sowie solche mit dem einfachen EMA-Modell als Datensatz zur Rekonstruktion herangezogen werden. Bei letzteren wird zusätzlich zu den freien Parametern CD und SWA die Dicke der EMA-Schicht a_{EMA} rekonstruiert. Als Pseudo-Messdaten werden ebenfalls simulierte Scatterogramme verwendet, diesmal aber mit monochromatischer LER nach den "braid" und "wave" Modellen. Somit kann untersucht werden, wie stark die rekonstruierten Parameterwerte durch eine nicht im Modell berücksichtigte LER verfälscht werden und in welchem Maß diese Verfälschung durch die EMA-Schicht abgemildert werden kann. Beide Aspekte werden dabei als Funktion der Periode Λ_{LER} studiert.

Die beschriebene Vorgehensweise wird auf zwei Typen von Scatterometern angewendet, das spektroskopische Ellipsometer vom Rotating-Polarizer Typ nach Abb. 27 (c) sowie das Fourier-Scatterometer nach Abb. 27 (d). Von diesen beiden Gerätekonfigurationen kann angenommen werden, dass sie in den kommenden Jahren breit zum Einsatz kommen werden. Das spektroskopische Ellipsometer ist seit 1999 eine der am häufigsten verwendeten Konfigurationen, das Fourier-Scatterometer gewinnt in der jüngsten Vergangenheit zunehmend an Interesse und verwirklicht das umfassendste Konzept eines winkelaufgelösten Scatterometers. Während das $2\theta-$Scatterometer auf eine einzige Ebene im Halbraum oberhalb der Probe beschränkt ist und die Phi-Scatterometrie bereits versucht, aus diesem engen Korsett auszubrechen, kann das Fourier-Scatterometer bei Verwendung eines hochaperturigen Objektivs nahezu einen Raumwinkel von 2π erfassen. Wegen dieser Relevanz der genannten Konfigurationen erscheint es interessant, beide im Hinblick auf die aktuelle Herausforderung der LER zu untersuchen.

Für die Parameterrekonstruktion von Fourier-Scatterogrammen konnte auf ein Programmpaket mit Echtzeit-Simulation bei Verwendung eines iterativen Gauss-Newton-Solvers zurückgegriffen werden [Boe08]. Im Fall der spektroskopischen Ellipsometrie wurde dagegen

das Prinzip der Bibliothekssuche mit zusätzlicher parabolischer Subpixel-Interpolation verwendet. Als Merit-Funktion der Suche dient die Summe der quadratischen Differenzen von simulierten und (pseudo-)gemessenen Spektren über alle Wellenlängen. Die Subpixel-Interpolation nimmt an, dass das gefundene Minimum gleichzeitig ein globales und lokales Minimum ist, so dass die Ableitung der Merit-Funktion dort verschwindet. Letztere lässt sich dann bei n Rekonstruktionsparametern in Form einer Taylor-Reihe als n-dimensionales Paraboloid mit $2n$ freien Koeffizienten entwickeln. Aus den $2n$ Werten der Merit-Funktion auf den Achsen des n-dimensionalen Parameterraums an den Abtastpunkten in unmittelbarer Nachbarschaft des Minimums lassen sich dann in einem eindeutig bestimmten linearen Gleichungssystem die freien Koeffizienten bestimmten. Der Scheitel des Paraboloids markiert im Parameterraum den Ort des durch die Interpolation exakter bestimmten Minimums.

Als Standardparameter wurde für das Fourier-Scatterometer eine NA von 0.95 und eine Wellenlänge von $\lambda = 400\,\text{nm}$ gewählt, für das spektroskopische Ellipsometer ein Einfallswinkel von $\theta = 71.6°$ und ein Analysatorwinkel von $A = 25°$. Abb. 48 zeigt Beispiele von Scatterogrammen beider Konfigurationen. In den Teilbildern (a) und (b) sind Pupillenbilder, also Fourier-Scatterogramme zu sehen, in (c) und (d) ellipsometrische Spektren der Größen α und β gemäß Gl. (70), die den Zusammenhang dieser Größen mit der Jones-Matrix wiedergibt. Die Rekonstruktion von Jones-Matrizen aus simulierten Daten wurde in Kapitel 4.4 ausführlich beschrieben.

Für die Berechnung der Pupillenbilder wird zunächst die Beleuchtungspupille äquidistant diskretisiert. Jeder Punkt der Beleuchtungspupille entspricht einer Einfallsrichtung charakterisiert durch die lateralen Komponenten der Wellenzahlvektoren k_x und k_y wobei $-NA\ k_0 \leq \{k_x, k_y\} \leq NA\ k_0$. Der Zusammenhang zu den üblichen Definitionen von Polar- und Azimutwinkel ist durch $k_x = k_0 \sin\theta \cos\varphi$ und $k_y = k_0 \sin\theta \sin\varphi$ gegeben. Üblicherweise wird die Pupille mit den um k_0 reduzierten normierten Pupillenkoordinaten $NA_{x,y} = k_{x,y}/k_0$ bemaßt.

Für jeden Pupillenpunkt der Beleuchtungspupille wird nun ein Beugungspektrum mit der RCWA berechnet. Die Feldamplituden der einzelnen Beugungsordnungen werden mittels einer einfachen Drehung aus ihrem jeweiligen ps–Koordinatensystem in das globale xy–Koordinatensystem der Abbildungspupille transformiert. Hier werden dann die Beugungsspektren der einzelnen Einfallsrichtungen entsprechend der Köhlerbeleuchtung inkohärent aufsummiert. Eine detaillierte Beschreibung des Pupillenkonzepts in MicroSim ist in [Tot2001] und in [Ker2007b] zu finden.

Bei einer optisch glatten Probe entspricht die Helligkeit in jedem Punkt des Pupillenbildes der Reflektivität der Probe unter der Einfallsrichtung, die durch den am Mittelpunkt gespiegelten Punkt in der Beleuchtungspupille gegeben ist. Tritt aber Beugung auf, weil eine Gitterstruktur mit einer Periodenlänge von $\Lambda \geq \lambda/2NA$ vorliegt, so erscheinen als höhere Beugungsordnungen wiederum Pupillenbilder, die um λ/Λ gegenüber dem ursprünglichen Bild verschoben sind und die sich mit dem Bild der nullten Ordnung überlappen und dann in

Form von Ringen zu sehen sind. Bei der Wellenlänge $\lambda = 400\,\text{nm}$ und $NA = 0.95$ tritt Beugung für Perioden von $\Lambda \geq 205.1\,\text{nm}$ auf.

Während die linke Spalte von Abb. 48 die Scatterogramme einer LER-behafteten Probe enthält, sind rechts die Differenzen zwischen den Spektren mit und ohne LER zu sehen. In Teilbild (b), also in der Differenz der Pupillenbilder, sind die oben beschriebenen Ringe zu erkennen. Die Periode der Rauheit ist hier $\Lambda_{LER} = 800\,\text{nm}$. Die Rauheit verursacht also Beugung, die stellvertretend für die Streuung einer realistischer modellierten Rauheit mit verschiedenen Frequenzkomponenten steht. Der Einfluss dieser Beugung auf die Pupillenbilder ist immerhin so gering, dass im eigentlichen Scatterogramm, Abb. 48 (a), die Ringe wegen zu geringem Kontrast nicht sichtbar sind. Das Differenzbild (b) dagegen deckt sie auf.

Da das spektroskopische Ellipsometer im Gegensatz zum Fourier-Scatterometer stets nur die nullte Ordnung detektiert, kann nicht, wie in der eben geführten Diskussion, der Ein-

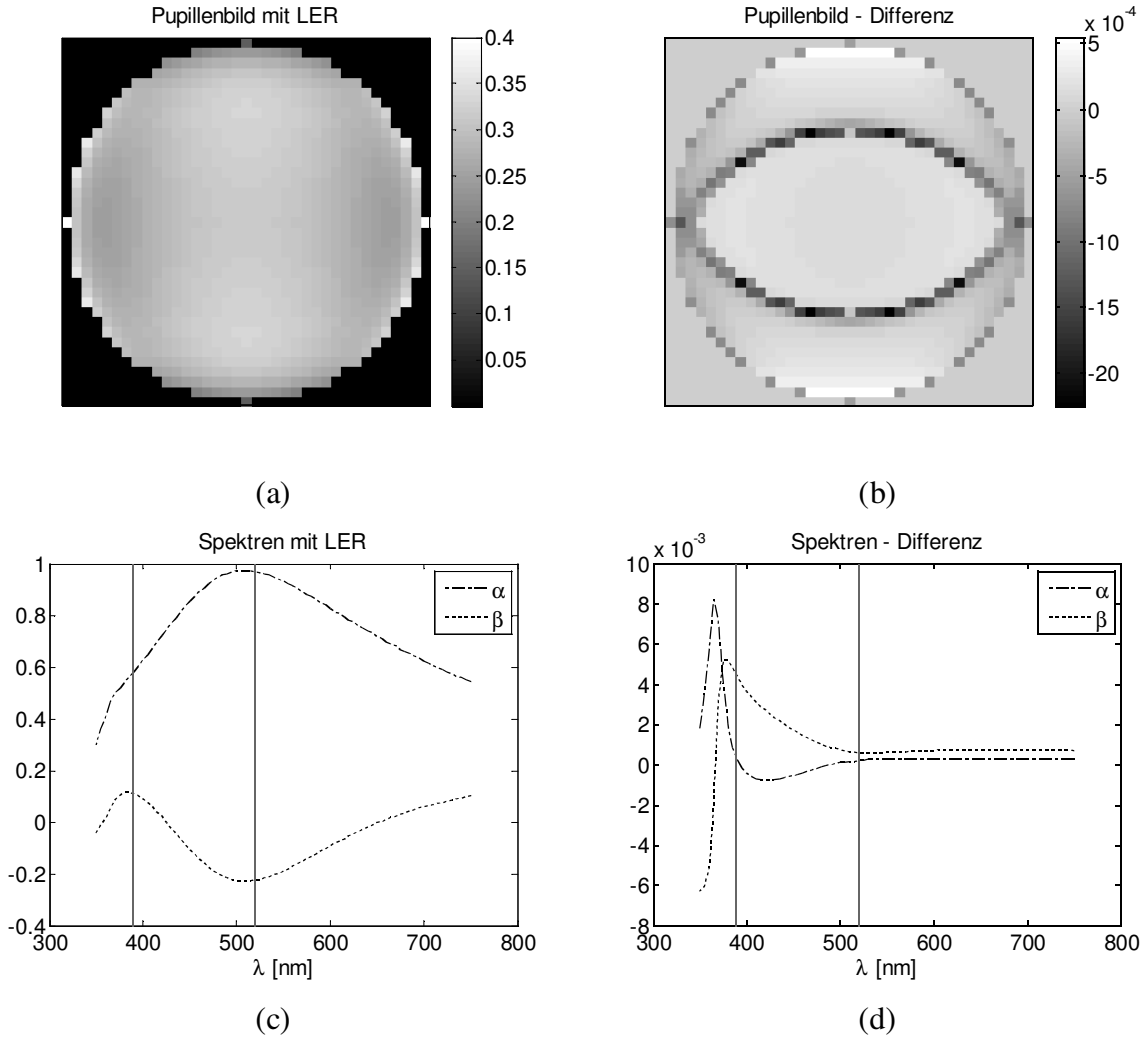
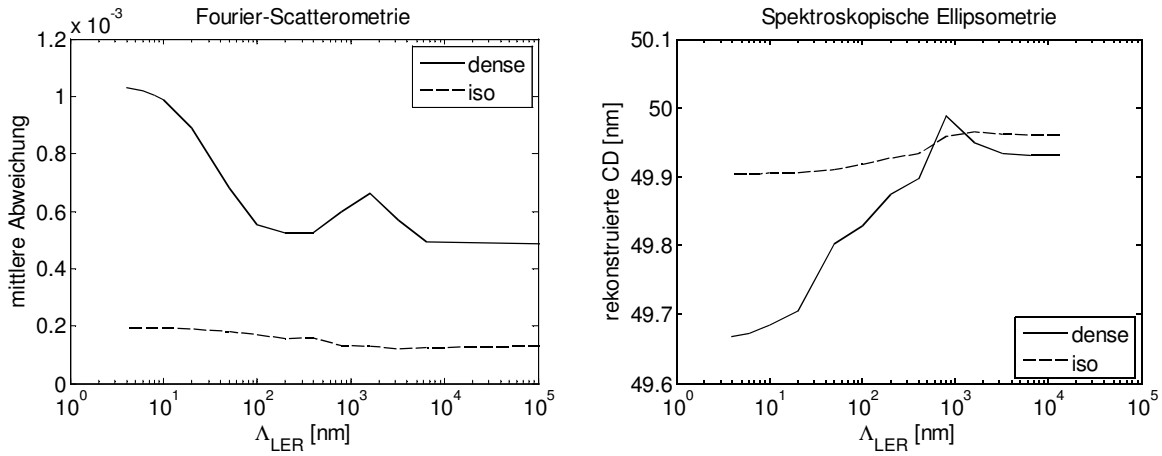


Abbildung 48: Beispiel-Scatterogramme für Fourier-Scatterometrie ((a) und (b)) sowie spektroskopische Ellipsometrie ((c) und (d)). (a) und (b) zeigen die Scatterogramme für Proben mit LER, (b) und (d) zeigen die Differenz zwischen einer Probe mit und einer ohne LER.

fluss der Beugung oder Streuung der Rauheit in Form von unmittelbaren Anteilen aus höheren Beugungsordnungen im Scatterogramm festgemacht werden. Stattdessen kann aber ein indirekter Einfluss vermutet werden. Gemäß der Gittergleichung, Gl. (13), lassen sich diejenigen Wellenlängen berechnen, bei denen sich die Zahl der propagierenden Beugungsordnungen ändert. Während bei diesen Wellenlängen im Intensitätssignal eine klare Änderung in der nullten Ordnung zu erwarten ist – die Intensität der neu hinzutretenden propagierenden Ordnungen reduziert die der bisherigen, also auch der nullten – kann bzgl. der polarisationsoptischen Größen α und β hier ein entsprechender Einfluss nur vermutet werden.

Die senkrechten Linien in Abb. 48 (c) und (d) kennzeichnen genau diese Wellenlängen, bei denen sich die Zahl der propagierenden Ordnungen ändert. Im Gegensatz zu den Fourier-Scatterogrammen ist hier keine Änderung zu sehen, auch nicht im Differenzsignal, und somit anhand dieser anschaulichen Betrachtungen kein Einfluss der Beugung bzw. Streuung aufgrund der Rauheit festzustellen. Dies legt die Vermutung nahe, dass die spektroskopische Ellipsometrie weniger sensitiv für Störungen durch nicht im Modell berücksichtigte LER sein könnte. In den Rekonstruktionsergebnissen ist diese Tendenz allerdings nicht zu erkennen.

Die durchgeführten Simulationen zeigen, dass der Einfluss der LER bei dichten Linien wesentlich größer ist als bei isolierten Linien. Abb. 49 verdeutlicht diese Beobachtung. Teilbild (a) zeigt für dichte und isolierte Linien die über alle Bildpunkte gemittelte Abweichung von Fourier-Scatterogrammen mit LER von solchen ohne LER als Funktion der Rauheitsperiode, wobei exemplarisch der Fall der $y-$polarisierten Beleuchtung betrachtet wird. Ein wesentlich geringerer Einfluss der LER bei isolierten Linien ist deutlich erkennbar. Teilbild (b) zeigt die rekonstruierte CD aus ellipsometrischen Spektren. Hier erkennt man eine wesentlich stärkere Abweichung vom Sollwert $CD = 50\,\text{nm}$ für die dichten Linien und somit wieder



(a) (b)

Abbildung 49: Vergleich zwischen dichten und isolierten Linien für Fourier-Scatterometrie und spektroskopische Ellipsometrie. (a) zeigt die mittlere Abweichung zwischen Spektren mit und ohne LER im Fall der Fourier-Scatterometrie mit y-polarisierter Beleuchtung, (b) zeigt die mittels spektroskopischer Scatterometrie rekonstruierte CD.

einen erheblich geringeren Einfluss bei isolierten Linien. Daher wurden die weiteren Untersuchungen auf dichte Linien beschränkt.

Zusätzlich zur Beschränkung auf dichte Linien wurde für einen Großteil der Untersuchungen nur das "braid" Modell betrachtet. Die Ergebnisse für das "wave" Modell sehen sehr ähnlich aus, so dass angenommen wird, dass der Einfluss des genauen Modells eine untergeordnete Rolle spielt. Das "braid" Modell bietet aber Vorteile bezüglich der Rechenzeit, da es mit der doppelten Achssymmetrie eine höhere Symmetrie aufweist als das "wave" Modell. Im Fall der Fourier-Scatterometrie muss dann nur ein Viertel der Pupille statt der halben berechnet werden, der Rest der Spektren kann durch Spiegelungen ergänzt werden. Im Fall der spektroskopischen Ellipsometrie kann die Jones-Matrix aus einer Beugungsrechnung mit einer einzigen Polarisation der Beleuchtung anstatt zwei orthogonalen Polarisationen im allgemeinen Fall rekonstruiert werden, da die Matrix durch die Symmetrie diagonal wird. In beiden Fällen reduziert sich somit die Rechenzeit auf die Hälfte.

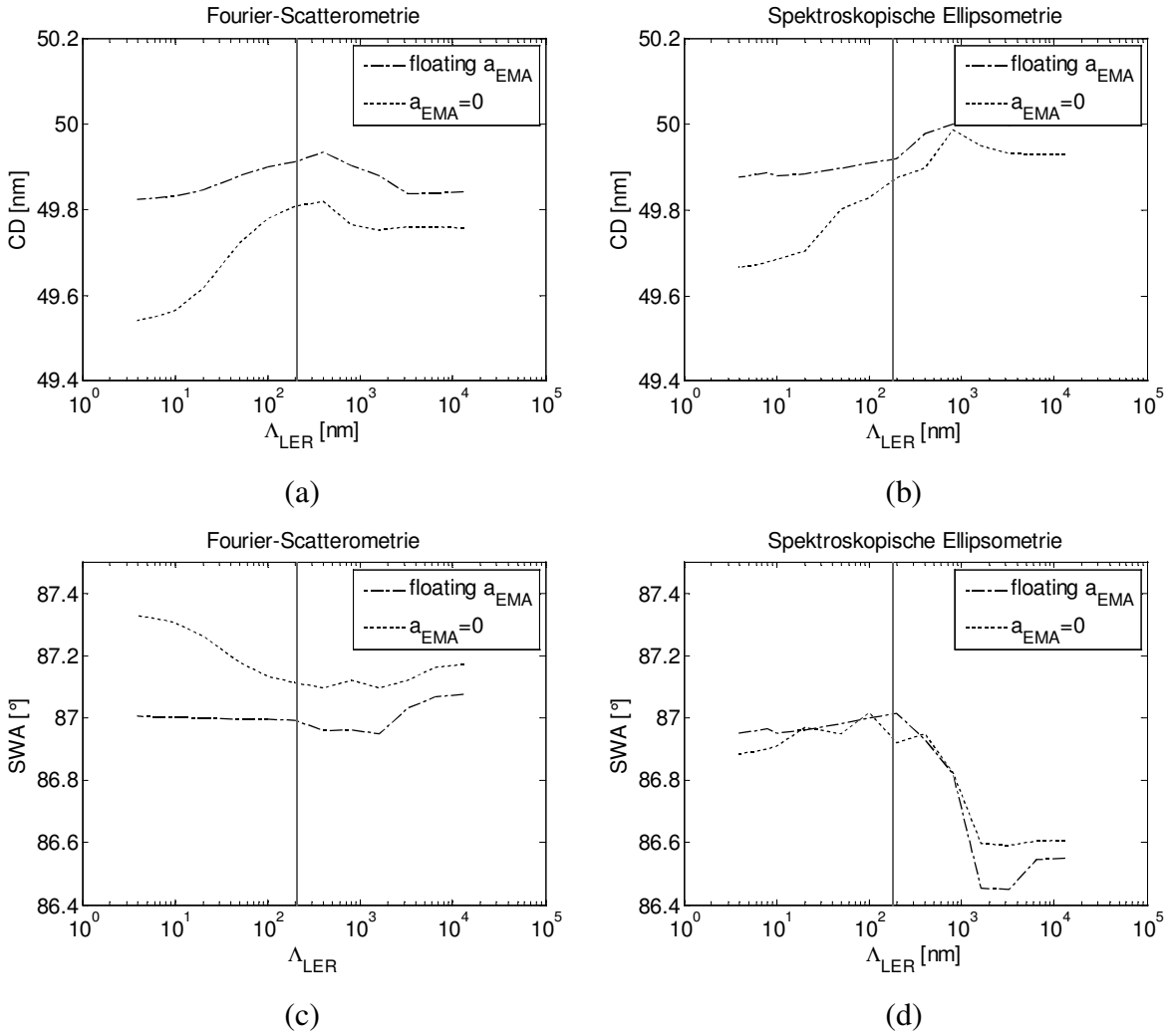


Abbildung 50: Ergebnisse der Rekonstruktionen, wobei simulierte LER-behaftete Spektren als Pseudo-Messungen verwendet werden. Links (a) und (c) Fourier-Scatterometrie, rechts (b) und (d) Spektroskopische Ellipsometrie. Erste Zeile (a) und (b) Rekonstruktion der CD, zweite Zeile (c) und (d) Rekonstruktion des Seitenwandwinkels SWA.

Als zentrales Ergebnis dieser Untersuchungen werden nun die Rekonstruktionsergebnisse als Funktion der Rauheitsperiode in den Abbildungen 50 und 51 betrachtet. Abb. 50 zeigt die Rekonstruktion von CD und SWA mit und ohne Berücksichtigung der EMA-Schicht für beide Messkonfigurationen. In Abb. 51 sind die rekonstruierten EMA-Schichtdicken aufgetragen. Zunächst kann anhand aller Teilbilder, mit Ausnahme von 50 (d), das ein unerklärliches Verhalten zeigt, gefolgert werden, dass der Einfluss der LER im Regime $\Lambda_{LER} \gg \lambda$ verschwindet. Anschaulich gesprochen geht die LER in eine "Welligkeit" oder makroskopische Schwankung der CD über.

Dies ist eine gute Nachricht sowohl im Hinblick auf die Vermessung im Scatterometer als auch im Hinblick auf die Modellierung der Rauheit in der Simulation. Im Scatterometer kann dadurch die Größe des Beleuchtungsflecks im Bereich weniger zehn Mikrometer gewählt werden, was wegen immer kleiner werdender Testfelder ohnehin ein aktueller Trend ist. Bei der Modellierung der LER für die Simulation kann guten Gewissens ab einer je nach Anwendung festzulegenden Rauheitslänge das zu modellierende Spektrum abgeschnitten werden. Andernfalls müsste man sehr große Einheitszellen verwenden, was bei gleichzeitiger Berücksichtigung von sehr feinen Merkmalen eine enorme Herausforderung an die Rechenleistung stellt.

Betrachten wir nun Abb. 50 genauer. Die erste Zeile zeigt die Rekonstruktion der CD, die zweite Zeile des SWA. In der linken Spalte liegt Fourier-Scatterometrie, in der rechten spektroskopische Ellipsometrie der Rekonstruktion zugrunde. Abgesehen von Teilbild (d) kann Folgendes festgehalten werden: Für sehr kleine Rauheitsperioden $\Lambda_{LER} \ll \lambda$ ist die Abweichung der rekonstruierten Werte von den Sollwerten $CD = 50\,\text{nm}$ und $SWA = 87°$ ohne Berücksichtigung der LER in Form einer EMA-Schicht deutlich sichtbar. Für größer werdende Rauheitslängen nähert sich der rekonstruierte Wert ungefähr dem Sollwert an. Abb. 50 zeigt auch, dass eine EMA-Schicht die Rekonstruktionsfehler erheblich reduzieren kann, und zwar über den gesamten betrachteten Bereich von Rauheitslängen, der sich über Größenord-

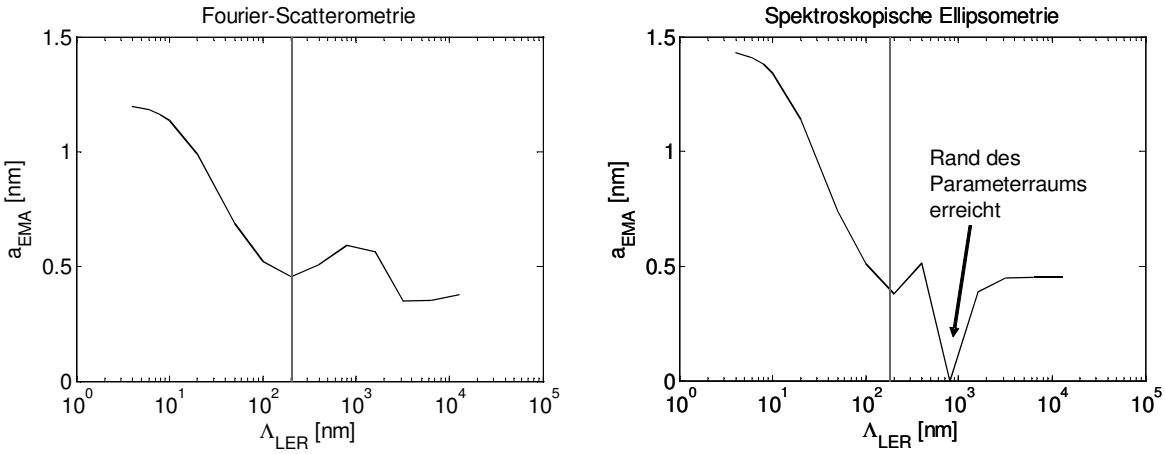


Abbildung 51: Rekonstruierte Dicke der EMA Schicht für (a) Fourier-Scatterometrie und (b) spektroskopische Ellipsometrie

nungen erstreckt. Man beachte die logarithmische Skala der $x-$Achse. Dies ist äußerst erstaunlich, aber auch erfreulich, da bekanntermaßen die verschiedenen Effektiv-Medium-Theorien erst im starken Sub-Wellenlängenbereich Gültigkeit erreichen.

Die senkrechten Linien in Abb. 50 kennzeichnen das Einsetzen der Beugung durch die Rauheit. Während unterhalb der Beugungsgrenze angenommen werden kann, dass sich wegen der zunehmenden Mittelung der Materialeigenschaften kein großer Einfluss der genauen Kantenform zeigt, sorgt oberhalb die streng sinusförmige Modellierung für ein klares Herausbilden von diskreten Beugungsordnungen, die im Fall einer realistischeren Modellierung der Rauheit zu Streukeulen aufgefächert würden. Es liegt die Vermutung nahe, dass die "Störungen" des ansonsten glatten und annähernd monotonen Kurvenverlaufs oberhalb der Beugungsgrenze auf diese Beugung zurückzuführen sind und durch ein realistischeres Rauheitsmodell reduziert werden könnten.

Teilbild (d) zeigt ein unerklärliches Verhalten. Während im Bereich unterhalb der Beugungsgrenze ein ähnlicher, wenngleich etwas welligerer Kurvenverlauf beobachtet wird wie in den anderen Bildern, weisen beide Kurven oberhalb der Beugungsgrenze einen Sprung auf, was bedeuten würde, dass langwellige LER in der spektroskopischen Ellipsometrie zu einem Offset im rekonstruierten Wert des SWA führt. Eine Erklärung für dieses Verhalten ist liegt nicht auf der Hand. Wegen der ansonsten allgemein zu beobachtenden Tendenz eines abnehmenden Einflusses der LER im Bereich langer Rauheitslängen, erscheint es wahrscheinlich, dass hier ein numerisches Artefakt vorliegt.

In Abb. 51 sind die rekonstruierten Dicken der EMA-Schicht a_{EMA} für beide Gerätekonfigurationen in Abhängigkeit der Rauheitsperiode aufgetragen. Der Abfall von a_{EMA} zu langen Perioden hin ist wieder ein Hinweis auf den kleiner werdenden Einfluss der LER in diesem Regime. Wie in den Rekonstruktionskurven von CD und SWA sind hier "Störungen" oberhalb der Beugungsgrenze erkennbar. Im Fall der spektroskopischen Ellipsometrie, Teilbild (b), führen diese dazu, dass bei der Suche des Minimums der Rand des Parameterraums erreicht wird. Das heißt, dass das globale Minimum vermutlich außerhalb des berechneten Parameterraumes, also im Bereich $a_{EMA} < 0$ liegt. Es ist unklar, wie eine negative Schichtdicke im Modell berücksichtigt werden müsste, so dass der Parameterraum auch nicht erweitert wurde. Daher versagt hier die Subpixel-Interpolation, da diese erstens die Spektren zweier benachbarter Werte entlang jeder Achse des Parameterraums benötigt und zweitens von einer Steigung von null der Merit-Funktion ausgeht. Beides ist bei einem globalen Minimum am Rand nicht erfüllt. Daher wird hier der nicht interpolierte Wert $a_{EMA} = 0$ aufgetragen.

Für den Grenzübergang $\Lambda_{LER} \to 0$ scheinen die rekonstruierten EMA-Schichtdicken gegen einen konstanten Wert zu konvergieren. Die rekonstruierten Werte bei der niedrigsten betrachteten Rauheitsperiode $\Lambda_{LER} = 4\,\text{nm}$ lauten $a_{EMA} = 1.20\,\text{nm}$ im Fall der Fourier-Scatterometrie und $a_{EMA} = 1.43\,\text{nm}$ im Fall der spektroskopischen Ellipsometrie. Beide Werte liegen damit in der Größenordnung des RMS Wertes eines Sinussignals mit der verwendeten peak to peak Tiefe $a_{LER} = 3\,\text{nm}$, welcher $1.06\,\text{nm}$ beträgt. Hier zeigt sich offenbar, dass in diesem Re-

gime der starken Sub-Wellenlängen-Strukturen die EMA Gültigkeit erlangt. Für Rauheitsperioden im Bereich der Wellenlänge und darüber muss die Verbesserung der Rekonstruktionsgenauigkeit mittels einer EMA-Schicht somit als glücklicher Umstand ohne physikalischen Hintergrund betrachtet werden. Der zusätzliche Rekonstruktionsparameter a_{EMA} hilft zwar die Genauigkeit zu verbessern, wird selbst aber grob falsch ermittelt.

Ein erstrebenswertes Ziel besteht darin, nicht nur, wie hier aufgezeigt, den Einfluss der LER auf die Rekonstruktion anderer Strukturparameter zu untersuchen und möglichst zu eliminieren, sondern zusätzlich Kenngrößen der LER anhand scatterometrischer Messungen zu rekonstruieren. Ein erster Schritt in diese Richtung besteht darin, neben der Rautiefe die Frequenz bzw. Rauheitsperiode einer monochromatischen LER zu rekonstruieren. Perspektivisch kann dies dann erweitert werden auf ein Spektrum von Frequenzen, was die LER schließlich vollständig charakterisiert. Nach den Ergebnissen der bisherigen Rekonstruktionen kann *bei bekannten Strukturparametern* CD und SWA aus der Größe des Rekonstruktionsfehlers auf die Rauheitsperiode zurückgeschlossen werden. Um nun aber alle Größen gleichzeitig zu messen, die Strukturparameter und die Rauheitsperiode, erscheint eine Erweiterung der vorhandenen Informationskanäle zwingend.

Diese könnte z.B. darin bestehen, die spektroskopische Ellipsometrie mit einer zusätzlichen Winkelvariation zu kombinieren. Oder, und dieser Ansatz wird hier abschließend kurz andiskutiert, die Fourier-Scatterometrie könnte um ein Durchstimmen der Wellenlänge erweitert werden. Abb. 52 zeigt rekonstruierte Strukturparameter CD und SWA als Funktion der Wellenlänge mit Scharparameter Λ_{LER}. Wie unschwer zu sehen ist, zeigen die Kurven eine deutliche Sensitivität auf Λ_{LER}. Gleichzeitig gibt es Wellenlängen, wo die Strukturparameter für alle Λ_{LER} nahezu gleich, wenn auch nicht richtig, sondern mit einem gewissen Offset behaftet, rekonstruiert werden.

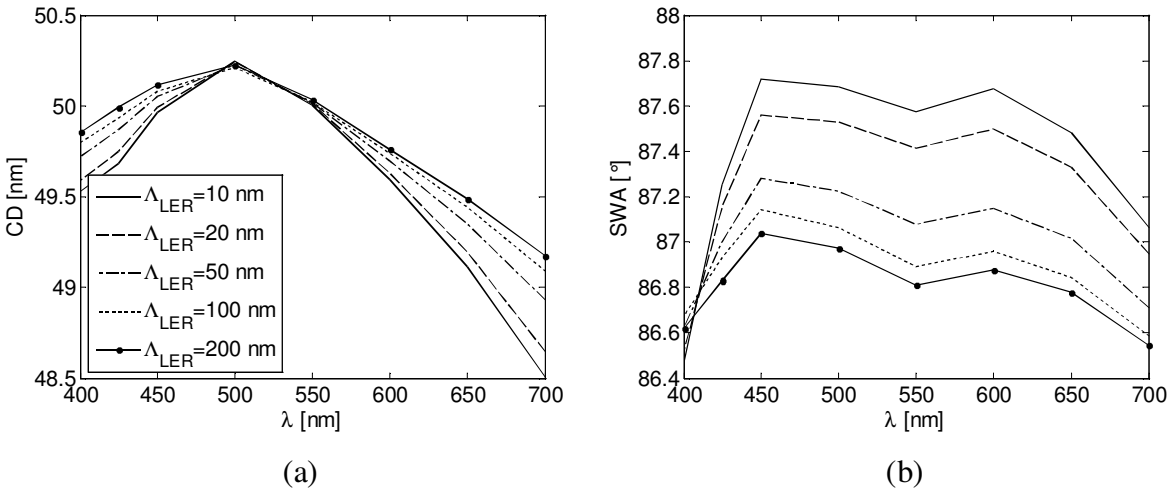


Abbildung 52: Rekonstruktion von CD (a) und SWA (b) mittels Fourier-Scatterometrie mit Verwendung mehrerer Wellenlängen. Eine Erhöhung des Informationsgehalts bietet die Perspektive, LER Parameter zu messen.

Rein anschaulich wird klar, dass eine Rekonstruktion anhand einer solchen Messung alle drei Parameter liefern muss. So kann z.B. bei einer Wellenlänge von ca. 500 nm die CD unabhängig von Λ_{LER} bestimmt werden, es wird ein leicht zu hoher Wert von ca. $CD = 50.2\,\mathrm{nm}$ ermittelt. Dieser kann mithilfe der simulierten Bibliothek korrigiert werden. Bei bekanntem CD Wert ist aber die Aufspaltung der gezeigten Kurven bei einer beliebigen anderen Wellenlänge bekannt, woraus auf Λ_{LER} geschlossen werden kann. Der hier anschaulich aufgezeigte Weg müsste nun durch eine ausführliche Sensitivitäts- und Korrelationsanalyse untermauert werden. Es wird jedoch das Potential und vermutlich auch die Notwendigkeit von kombinierten Ansätzen aus wellenlängen- und winkelaufgelöster Scatterometrie für die Herausforderungen der näheren Zukunft an die Scatterometrie demonstriert, zu denen zweifelsfrei auch die Vermessung von LER Parametern zählt.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit liefert sowohl Beiträge zur Simulation von Lichtbeugung an Kreuzgitterstrukturen als auch zur Scatterometrie. Die vor allem in der Scatterometrie verbreitete Simulationsmethode der RCWA wird anhand Popovs und Nevières Neuformulierung der Differentiellen Methode für 2D periodische Strukturen gegenüber bislang bekannten Ansätzen optimiert. Die verbesserte Formulierung benötigt ein für jede Struktur individuell aufzustellendes Normalenvektorfeld (NV-Feld). Sie zeigt nie schlechteres und oft besseres Konvergenzverhalten als bisher bekannte Formulierungen, insbesondere als die bislang klar zu favorisierende Formulierung von Li [Li1997]. Mit der Fortführung der Arbeiten durch Götz [Goe2008a], die im Kapitel 3.5 in überblicksartig wiedergegeben wird, liegt damit eine ernst zu nehmende Alternative zur Li'sche Formulierung vor.

Nach [Goe2008a] ist davon auszugehen, dass ein von der Modenzahl abhängiges, ideales NV-Feld für jede Struktur existiert. Dies bietet Anstoß zu weiteren Forschungsarbeiten. Allerdings ist fraglich, wie groß der praktische Nutzen des idealen NV-Feldes in Anbetracht der ohnehin bereits beachtlichen Verbesserung des Konvergenzverhaltens noch sein kann. Daneben erscheint ein ausführlicher Vergleich von *Rechenzeiten,* nicht von *Konvergenzkurven,* zwischen RCWA und Differentieller Methode für den Übergang von Strukturen mit ideal senkrechten Seitenwänden hin zu Strukturen mit schrägen Wänden mit verschiedenen Materialien interessant. Auch die für 1D periodische Gitter bereits bekannten Mischformen zwischen RCWA und Differentieller Methode [Li2000][Pop2002] sollten auf 2D periodische Strukturen erweitert und hinsichtlich ihres Rechenzeitverhaltens untersucht werden.

Die vorgestellten Arbeiten zur Scatterometrie an komplexen 3D Strukturen müssen sich in eine Reihe anderer Versuche einordnen, die Scatterometrie in diesem Gebiet zu etablieren. Wie in vorangegangen Arbeiten, etwa [Hin2004][Rei2005], wird hier zwar das Potential der Methode aufgezeigt, der Schritt zur echten quantitativen Vermessung von Strukturdimensionen ist damit aber noch nicht getan. Die Vielzahl an möglichen Variationen bei sehr komplexen Strukturen, der große Einfluss dieser Variationen auf die Scatterogramme und die bislang unzureichenden Modellierungsmöglichkeiten für 3D Strukturen, die insbesondere eine systematischen Variation von Strukturparametern einschließen müssten, stehen hier im Weg.

Dieser offensichtliche Mangel in bislang verfügbaren Simulationstools gab Anstoß zur Entwicklung von verbesserten Modellierungsprogrammen im Rahmen dieser Arbeit. Diese werden als mkboundxy ("make boundaries in xy plane") und mkboundz ("make boundaries

along z axis") bezeichnet und sind in den Abbildungen 53 und 54 dargestellt. In einem ersten Schritt wird mkboundxy angewendet. Anhand eines Top-Down-SEM-Bildes als Vorlage kann der Querschnitt einer Struktur modelliert und parametrisiert werden. Punkte an markanten Stellen des Querschnitts werden einerseits durch verschiedene auswählbare Kurvenstücke verbunden und andererseits an Strukturparameter wie die *CD* gekoppelt, wobei definiert wird wie sich die Punkte bei Änderung der Strukturparameter verschieben. Aus den so entstehenden geschlossenen Kurvenzügen werden alle nicht-leeren Schnittmengen gebildet, die anschließend als Bereiche mit konstanter Brechzahl interpretiert werden.

In einem zweiten Schritt können mit mkboundz anhand von X-SEM Bildern axiale Strukturgeometrien modelliert werden. Hierzu wird die Struktur in mehrere Schichtstapel ("stacks") eingeteilt, die sich jeweils durch eine nur geringfügige Variation der lateralen Brechzahlverteilung durch die bekannten Erscheinungen bei Strukturierungsprozessen wie sidewall angle, notching, footing, bowing oder top rounding, auszeichnen. Für eben diese häufig auftretenden Abweichungen von ideal senkrechten Seitenwänden sind vorgefertigte Module verfügbar, mit denen die lateralen Strukturparameter als Funktion von z variiert werden können. Daneben bietet die Möglichkeit einer benutzerdefinierten Variation volle Flexibilität. Die vorliegenden Programme stellen damit ein Handwerkszeug dar, das zweifelsfrei weniger komfortabel als kommerzielle CAD-Programme, dafür aber besser an die in der Scatterome-

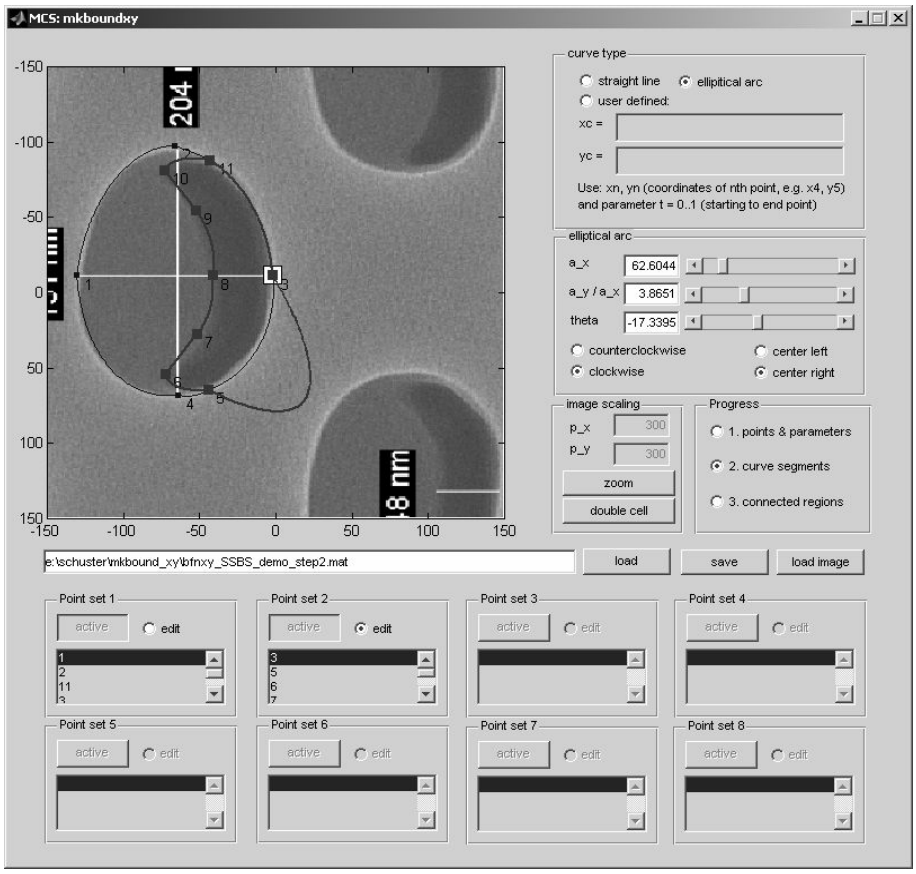


Abbildung 53: Modellierung von lateralen Strukturgeometrien anhand von Top-Down-SEM-Bildern mit dem Tool "mkboundxy"

trie betrachteten Strukturen angepasst ist und insbesondere die Möglichkeit der systematischen Variation von anschaulichen Strukturparametern wie CD, SWA oder ähnlichen bietet. Die verbesserte Modellierung konnte in dieser Arbeit nicht mehr zum Einsatz kommen und steht für zukünftige Arbeiten am ITO zur Verfügung.

Auch wenn, wie eben dargelegt, die Arbeiten zur Scatterometrie an komplexen 3D Strukturen nicht soweit fortgeschritten sind, wie ursprünglich erhofft, so zeigt doch der verfolgte und als aussichtsreich identifizierte Ansatz des Phi-Scans mit der Mueller-Matrix als primärer Messgröße, dass die herkömmlichen Gerätekonfigurationen in der Scatterometrie erweitert und kombiniert werden müssen. Aus diesem Grund fokussieren sich auch die Untersuchungen über den Einfluss von LER auf scatterometrische Rekonstruktionen neben der spektroskopischen Ellipsometrie als der hauptsächlich in den letzten Jahren verwendeten Methode auf die Fourier-Scatterometrie, die als der umfassendste Ansatz winkelaufgelöster Techniken angesehen werden kann. Die Herausforderungen der Scatterometrie in den kommenden Jahren, wie die Vermessung von LER-Parametern, die Erweiterung der Methode zu kleineren Technologieknoten etc., erfordern eine Erhöhung des Informationsgehalts von Messungen. Der Phi-Scan mit Mueller-Matrix-Messung ist ein Beispiel, eine andere denkbare Kombination wäre Fourier-Scatterometrie mit Mueller-Matrix-Messung, zusätzlich erweiterbar durch eine Wellenlängenvariation und / oder durch ausgeklügelte Beleuchtungssettings.

Die Beiträge dieser Arbeit zur Seitenwand- und Kantenrauheit in der Scatterometrie ordnen sich in eine ganze Reihe weiterer Arbeiten auf diesem noch sehr jungen Gebiet ein, das innerhalb kurzer Zeit enormes Interesse erlangt hat. Für den Fall von Seitenwandrauheit sowie von Schwankungen zwischen benachbarten Elementarzellen wurde in einer grafischen Sensitivitätsanalyse gezeigt, dass die Scatterometrie prinzipiell imstande ist, Mittelwerte und

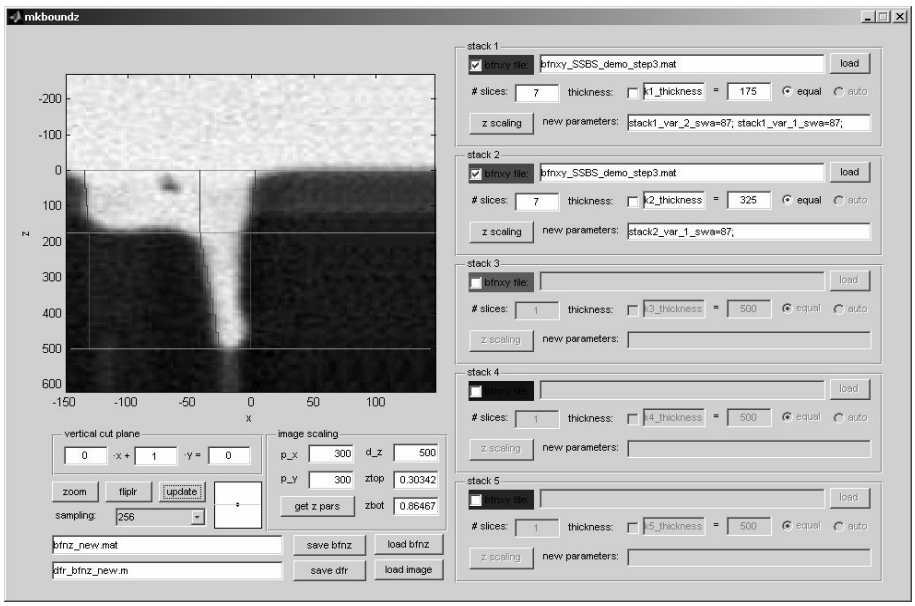


Abbildung 54: Modellierung von axialen Strukturgeometrien anhand von Cross-Section-SEM-Bildern mit dem Tool "mkboundz"

Standardabweichungen von Strukturdimensionen unabhängig von einander zu messen. Weiterhin wurde der Einfluss von im Simulationsmodell nicht berücksichtigter Kantenrauheit auf die Rekonstruktionsgenauigkeit untersucht. Im Fall einer als "monochromatisch" angenommen Kantenrauheit zeigen sich erhebliche Rekonstruktionsfehler für Rauheitsperioden, die stark unterhalb der Wellenlänge liegen. Für Rauheitsperioden oberhalb der Wellenlänge verschwindet der Einfluss. Ein einfaches EMA Modell hilft in allen Fällen, die Rekonstruktionsgenauigkeit zu verbessern. Der Weg von einer bloßen Korrektur von Messfehlern aufgrund der Rauheit hin zur Vermessung von Rauheitsparametern wird aufgezeigt. Eine Erweiterung der verfügbaren Informationskanäle gegenüber den Möglichkeiten aktuell verwendeter Varianten der Scatterometrie erscheint hierfür notwendig.

Bei den Arbeiten zu Schwankungen und Rauheiten zeigt sich immer wieder, dass die realistische Modellierung dieser Abweichungen von der perfekten Periodizität, deren Ortsfrequenzen sich über Größenordnungen hinweg erstrecken können, eine extrem anspruchsvolle Aufgabe darstellt. Auch hier stehen am Ende dieser Arbeit wie auch bei den komplexen 3D Strukturen neue Modellierungsmöglichkeiten zur Verfügung, die innerhalb der Arbeit nicht mehr zum Einsatz kommen konnten. Wie in Kapitel 6.3.2 festgestellt, wurde in [Sch2008b] [Sch2008c] ein approximativer Fieldstitching-Algorithmus vorgestellt, der die Möglichkeit einer realistischen Beschreibung komplexer LER-Modelle bietet, ohne dass, wie bei voll rigorosen Simulationen, die Grenzen der Rechenleistung erreicht werden.

Wenn nun schon die Scatterometrie, die seit weniger als zwanzig Jahren breite Anwendung findet, seit fast zehn Jahren mit den hier angetroffenen Problemen bei komplexen 3D Strukturen zu kämpfen hat, so besteht doch die Hoffnung, dass sie bei allem Aufwand der gegenwärtig hinsichtlich der Berücksichtigung und Messung von Rauheiten getrieben wird, zumindest auf diesem Gebiet in den kommenden Jahren ihre Stärken gegenüber der Elektronenmikroskopie ausspielen kann. Dann hätte diese Arbeit einen gewissen Anteil an der Einführung eines neuen Anwendungsbereiches der Scatterometrie. In jedem Fall besteht die Aussicht, dass die vorgestellten Beiträge zur RCWA an Kreuzgitterstrukturen auf breites Interesse stoßen und über das aktuelle Anwendungsgebiet der Scatterometrie hinaus Verwendung finden.

Anhang: Modifizierte Version des Enhanced Transmittance Matrix Approach (ETMA)

Hier soll der in MicroSim implementierte modifizierte ETMA Algorithmus im Detail wiedergegeben werden. Grundlage dieser Darstellung sind neben der ursprünglichen Formulierung [Moh1995b] ein unveröffentlichtes Arbeitsmanuskript von Michael Totzeck [Totz_oJ] sowie die Dissertation von Norbert Kerwien [Ker2007b], wo der Algorithmus ebenfalls skizziert ist.

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist das in der modulierten Schicht eines Beugungsgitters zu lösende DGl-System 1. Ordnung für die normierten Fourier-Koeffizienten $S_{\mu\nu}$ und $U_{\mu\nu}$, Gl. (27), das durch ineinander Einsetzen der Gleichungen in ein System 2. Ordnung für $U_{\mu\nu}$ halber Größe umgewandelt wurde, Gl. (30). Wie in Kapitel 3.1 angedeutet wurde, wird die Lösung von Gl. (30) wegen der konstanten Systemmatrix $\mathbf{\Omega}$ auf ein Eigenwertproblem reduziert. Um wieder mit der ursprünglichen Koordinate z statt der in Kapitel 3.1 verwendeten $z' = -k_0 z$ zu rechnen, definieren wir nun $\mathbf{\Omega}' = -k_0\mathbf{\Omega}$. Bezeichnet man die Eigenvektoren von $\mathbf{\Omega}'$ mit $\mathbf{w}_\rho$ und die Wurzeln mit positivem Realteil der zugehörigen Eigenwerte mit q_ρ, so ist die Lösung von Gl. (30) gegeben durch:

$$\begin{bmatrix} [U_y] \\ [U_x] \end{bmatrix} = \sum_{\rho=1}^{M_{xy}} \mathbf{w}_\rho \left[c_\rho^+ \exp(-iq_\rho z) + c_\rho^- \exp(iq_\rho(z-d)) \right] \tag{78}$$

Hierbei sind c_ρ^+, c_ρ^- freie Integrationskonstanten, die durch das Gleichsetzen der lateralen Feldkomponenten an den Grenzflächen zwischen Cover und modulierter Schicht und zwischen modulierter Schicht und Substrat ermittelt werden müssen, im Falle eines Schichtstapels aus mehreren modulierten Schichten zusätzlich an jeder Grenzfläche zwischen zwei Schichten. d ist die Dicke der modulierten Schicht. Für die gesamte Anzahl der Fourier-Koeffizienten wurde die Abkürzung $M_{xy} = (2M_x + 1)(2M_y + 1)$ eingeführt.

In Matrix-Schreibweise lässt sich das formulieren als:

$$\begin{bmatrix} [U_y] \\ [U_x] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}\mathbf{\Phi}^- & \mathbf{W}\mathbf{\Phi}^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{bmatrix}, \tag{79}$$

wobei $\mathbf{W}$ die Matrix aller Eigenvektoren $\mathbf{w}_\rho$ und $\mathbf{\Phi}^\pm$ Diagonalmatrizen mit den Einträgen $\Phi_{\rho\rho}^+ = \exp k_0 q_\rho (z-d)$ und $\Phi_{\rho\rho}^- = \exp(-k_0 q_\rho z)$ sind. Aus den so erhaltenen normierten Fourier-Koeffizienten des magnetischen Feldes lassen sich durch Einsetzen des Ergebnisses Gl. (79) in die Gln. (27) und (30) auch diejenigen des elektrischen Feldes gewinnen:

$$\begin{bmatrix} [S_y] \\ [S_x] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{V}\mathbf{\Phi}^- & \mathbf{V}\mathbf{\Phi}^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{bmatrix} \tag{80}$$

Hierbei ist $\mathbf{V} = \mathbf{\Omega}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{Q}$, wobei $\mathbf{Q}$ eine Diagonalmatrix mit den Wurzeln der Eigenvektoren q_ρ darstellt.

Damit sind sowohl das magnetische als auch das elektrische Feld bis auf unbekannte Konstanten in einer modulierten Schicht gegeben. In Cover und Substrat können die Felder nun ebenfalls in Pseudo-Fourier-Reihen entwickelt werden. Im Cover setzt sich das Feld zusammen aus einfallender ebener Welle plus einer Pseudo-Fourier-Reihe, die die Beugungsordnungen in Reflexion darstellt. Im Substrat dagegen sind nur die Beugungsordnungen in Transmission vorhanden.

Das elektrische Feld einer einfallenden ebenen Welle mit normierter Amplitude ist gemäß Abb. 3 gegeben durch:

$$\mathbf{E}_{in} = \mathbf{u}\exp(-i\omega t)\exp(i\mathbf{k}_{in}\mathbf{x}) \tag{81}$$

mit Polarisationsvektor $\mathbf{u}$ und Wellenzahlvektor $\mathbf{k}_{in}$:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \cos\psi\cos\theta\cos\varphi - \sin\psi\sin\varphi \\ \cos\psi\cos\theta\sin\varphi + \sin\psi\cos\varphi \\ -\cos\psi\sin\theta \end{bmatrix}, \mathbf{k}_{in} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{bmatrix} \tag{82}$$

Die elektrischen Felder in Cover und Substrat lassen sich damit schreiben als:

$$\mathbf{E}_I = \mathbf{E}_{in} + \sum_{\rho=1}^{M_{xy}} \mathbf{R}_\rho \exp\Big(i(k_{x\rho}x + k_{y\rho}y - k_{I,z\rho}z)\Big) \tag{83a}$$

$$\mathbf{E}_{II} = \sum_{\rho=1}^{M_{xy}} \mathbf{T}_\rho \exp\Big(i(k_{x\rho}x + k_{y\rho}y + k_{II,z\rho}(z-d))\Big) \tag{83b}$$

Die lateralen Wellenzahlkomponenten $k_{x\rho}$, $k_{y\rho}$ wurden bereits in Gl. (18) definiert und hier mit der Index-Substition Gl. (22) dargestellt, wodurch die in Gl. (83) gezeigten zweidimensionalen Pseudo-Fourier-Reihen formal in Einfachsummen umgeschrieben sind. Die axialen Wellenzahlkomponenten sind gegeben durch:

$$k_{I/II,z\rho} = \sqrt{(k_0 n_{I/II})^2 - k_{x\rho}^2 - k_{y\rho}^2} \tag{84}$$

Da wie im Kapitel 2.3 erwähnt im allgemeinen Fall jede Beugungsordnung ihre eigene Beugungsebene, charakterisiert durch den Winkel φ_ρ, definiert, müssen für jede Beugungsordnung die die $s-$ und $p-$Komponenten in das globale kartesische Koordinatensystem gedreht werden. Hierzu werden folgende komplexe Feldgrößen definiert:

$$R_{s\rho} = \cos\varphi_\rho R_{y\rho} - \sin\varphi_\rho R_{x\rho} \tag{85a}$$

$$R_{p\rho} = -\frac{i}{k_0}\left[\cos\varphi_\rho\left(k_{I,z\rho}R_{x\rho} + k_{x\rho}R_{z\rho}\right) + \sin\varphi_\rho\left(k_{y\rho}R_{z\rho} + k_{I,z\rho}R_{y\rho}\right)\right] \tag{85b}$$

Die Azimutwinkel der einzelnen Beugungsordnungen sind dabei durch

$$\varphi_\rho = \arctan\left(k_{y\rho}/k_{x\rho}\right) \tag{86}$$

gegeben.

Die Koeffizienten $R_{s\rho}$ beschreiben die $s-$Komponente des elektrischen Feldes, $R_{p\rho}$ die $s-$Komponente der magnetischen Feldes im Sinne einer Normierung gemäß Gl. (17b). Diese wenig anschauliche Definition ist so gewählt, um mit den üblichen Bezeichnungen der TE und TM Polarisation bei 1D periodischen Strukturen konform zu sein. Dividiert man die Koeffizienten $R_{p\rho}$ durch den Faktor in_I, so beschreiben sie, was eher anschaulich ist, die $p-$Komponente des elektrischen Feldes. Nach dieser Division lassen sich die Größen $R_{s\rho}$ und $R_{p\rho}$ anhand einfacher Projektionen gemäß der Definitionen in Abb. 3 veranschaulichen.

Analog kann für die transmittierten Felder definiert werden:

$$T_{s\rho} = \cos\varphi_\rho T_{y\rho} - \sin\varphi_\rho T_{x\rho} \tag{87a}$$

$$T_{p\rho} = \frac{i}{k_0}\left[\cos\varphi_\rho\left(k_{I,z\rho}T_{x\rho} - k_{x\rho}T_{z\rho}\right) + \sin\varphi_\rho\left(-k_{y\rho}T_{z\rho} + k_{I,z\rho}T_{y\rho}\right)\right] \tag{87b}$$

Die Interpretation diese Größen ist analog zur Reflexion, so dass wiederum $T_{p\rho}$ durch in_{II} dividiert werden muss, um die $p-$Komponente des elektrischen Feldes zu erhalten.

Durch das Gleichsetzen der Tangentialkomponenten der Felder an der Grenzfläche zwischen Cover und modulierter Schicht erhält man schlussendlich in Matrix-Darstellung:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\varphi\mathbf{V} & \mathbf{D}_\varphi\mathbf{V}\mathbf{\Phi} \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi\mathbf{W} & -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi\mathbf{W}\mathbf{\Phi} \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}_o}\begin{bmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_I \\ \hat{\mathbf{Y}}_I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} [R_s] \\ [R_p] \end{bmatrix} + \mathbf{L}_{in} \tag{88}$$

Hierbei wurden folgende Abkürzungen eingeführt:

$$\mathbf{D}_\varphi = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_c & -\mathbf{F}_s \\ \mathbf{F}_s & \mathbf{F}_c \end{bmatrix}, \tilde{\mathbf{D}}_\varphi = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_s & -\mathbf{F}_c \\ \mathbf{F}_c & -\mathbf{F}_s \end{bmatrix} \tag{89a}$$

$$\hat{\mathbf{Y}}_I = \begin{bmatrix} i\mathbf{Y}_I & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \hat{\mathbf{Z}}_I = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & i\mathbf{Z}_I \end{bmatrix} \tag{89b}$$

Die Matrizen $\mathbf{F}_s$, $\mathbf{F}_c$, $\mathbf{Y}_I$, $\mathbf{Z}_I$ und $\mathbf{\Phi}$ sind dabei Diagonalmatrizen mit den Diagonalelementen $\sin\varphi_\rho$, $\cos\varphi_\rho$, $k_{I,z\rho}/k_0$, $k_{I,z\rho}/(k_0 n_I^2)$ und $\exp\left(-k_0 q_\rho d\right)$. Die einfallenden Felder werden gemäß Abb. 3 beschrieben durch:

$$\mathbf{L}_{in} = \begin{bmatrix} \sin\psi\ \delta_{\rho 0} \\ \cos\psi\cos\theta\ \delta_{\rho 0} \\ -in_I \sin\psi\cos\theta\ \delta_{\rho 0} \\ in_I \cos\psi\ \delta_{\rho 0} \end{bmatrix} \tag{90}$$

Die rechte Seite von Gl. (88) folgt also aus den Gln. (81)-(87), die linke Seite dagegen enthält die Gln. (79) und (80), die durch Anwendung der in Gl. (89a) definerten Drehmatrizen in die jeweiligen $ps-$Systeme der einzelnen Beugungsordnungen transformiert wurden.

Analog zu Gl. (88) ergibt sich durch Gleichsetzen der tangentialen Feldkomponenten an der Grenzfläche zwischen modulierter Schicht und Substrat:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\varphi \mathbf{V}\mathbf{\Phi} & \mathbf{D}_\varphi \mathbf{V} \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi \mathbf{W}\mathbf{\Phi} & -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi \mathbf{W} \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}_u} \begin{bmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_{II} \\ \hat{\mathbf{Y}}_{II} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [T_s] \\ [T_p] \end{bmatrix} \tag{91}$$

mit den Abkürzungen:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{II} = \begin{bmatrix} -i\mathbf{Y}_{II} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \hat{\mathbf{Z}}_{II} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -i\mathbf{Z}_{II} \end{bmatrix}, \tag{92}$$

wobei $\mathbf{Y}_{II}$ und $\mathbf{Z}_{II}$ analog zu $\mathbf{Y}_I$ und $\mathbf{Z}_I$ definiert sind.

Die Gln. (88) und (91) genügen im Fall einer einzelnen modulierten Schicht zur Bestimmung der gesuchten Feldamplituden $[R_p]$, $[R_s]$, $[T_p]$ und $[T_s]$. sowie der freien Integrationskonstanten $\mathbf{c}^+$ und $\mathbf{c}^-$. Diese werden nur zur Berechnung des Nahfeldes in der modulierten Schicht benötigt. Die Berechnung von Nahfeldbildern ist in [Tot2001] beschrieben und wird hier ausgelassen.

Aufgrund der mehrfachen Blockbildung im Hinblick auf eine kompakte Darstellung ist schwer ersichtlich, dass Gln. (88) und (91) ein eindeutig bestimmtes Gleichungssystem darstellen. Es sei daher nochmals aufgeschlüsselt, dass $[R_p]$, $[R_s]$, $[T_p]$ und $[T_s]$, wie die eckige Klammer andeutet, Fourier-Vektoren mit je M_{xy} Unbekannten sind, während $\mathbf{c}^+$ und $\mathbf{c}^-$ wegen der doppelten Blockbildung die doppelte Länge, also $2M_{xy}$ aufweisen. Dies ergibt eine gesamte Zahl von $8M_{xy}$ Unbekannten. Jede der Gln. (88) und (91) besteht aber aus $4M_{xy}$ Zeilen, so dass in der Tat ein eindeutig bestimmtes, lineares Gleichungssystem vorliegt.

Für den Fall eines Schichtstapels aus modulierten Schichten gemäß Abb. müssen nun zusätzlich an jeder Grenzfläche zwischen zwei Schichten die Tangentialkomponenten der Felder beiderseits der Grenzfläche gleichgesetzt werden. Für jede einzelne Schicht wird hierzu ein kartesisches Koordinatensystem so gewählt, dass wie im Fall einer einzelnen Schicht gemäß Abb. 3 der Koordinatenursprung am oberen Ende der Schicht liegt. Im Fall von L Schichten würde das zu einem Gleichungssystem mit $8M_{xy}L$ Gleichungen und Unbekannten führen. Dieses Gleichungssystem vollständig zu formulieren und in einem Schritt zu lösen führt zu erheblichem Speicherbedarf, so dass dieser Weg nicht gewählt werden kann. Stattdessen müs-

sen die Randbedingungen an jeder Grenzfläche sukzessive erfüllt werden und das Gesamtergebnis durch einen iterativen Algorithmus bestimmt werden. Wählt man hierzu den naheliegendsten Weg, an jeder Grenzfläche die oben beschriebene Prozedur mit den Gln. (88) und (91) auszuführen, wobei die Integrationskonstanten $\mathbf{c}^+$ und $\mathbf{c}^-$ in jedem Schritt eliminiert werden, so ergibt sich folgender Ausdruck für die gesuchten Beugungsamplituden [Moh1995b]:

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_I \\ \hat{\mathbf{Y}}_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [R_s] \\ [R_p] \end{bmatrix} + \mathbf{L}_{in} = \prod_{\ell=1}^{L} \begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\varphi \mathbf{V} & \mathbf{D}_\varphi \mathbf{V}\mathbf{\Phi} \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi \mathbf{W} & -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi \mathbf{W}\mathbf{\Phi} \end{bmatrix}_\ell \begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\varphi \mathbf{V}\mathbf{\Phi} & \mathbf{D}_\varphi \mathbf{V} \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi \mathbf{W}\mathbf{\Phi} & -\tilde{\mathbf{D}}_\varphi \mathbf{W} \end{bmatrix}_\ell^{-1} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_{II} \\ \hat{\mathbf{Y}}_{II} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [T_s] \\ [T_p] \end{bmatrix} \tag{93}$$

Hierbei treten allerdings numerische Probleme auf, da die Matrizen $\mathbf{\Phi}$ in den einzelnen Schichten Diagonalelemente $\exp\left(-k_0 q_\rho d\right)$ enthalten, die sehr klein werden können. Damit ist die zu invertierende Matrix nahezu singulär. Um diese numerischen Probleme zu umgehen, entwickelten Moharam et al. [Moh1995b] den Enhanced Transmittance Matrix Approach. In der zitierten Veröffentlichung werden zwei Versionen desselben vorgestellt, der Full-Solution Approach, der sowohl die reflektierten als auch die transmittierten Beugungsordnungen berechnet, sowie der Partial-Solution Approach, der nur entweder die reflektierten oder die transmittierten Beugungsordnungen berechnet. Hier wird nun eine von Michael Totzeck [Totz_oJ] modifizierte Version des Partial-Solution Approach dargestellt, die im Gegensatz zur ursprünglichen Version reflektierte und transmittierte Beugungsordnungen sowie die Integrationskonstanten in den einzelnen Schichten berechnet.

Im Hinblick auf eine kompakte Schreibweise werden die Einträge der in den Gln. (88) und (91) definierten Matrizen $\mathbf{M}_o$ und $\mathbf{M}_u$ in durch folgende Abkürzungen vereinfacht:

$$\mathbf{M}_o = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{V}}_1 & \bar{\mathbf{W}}_1 \\ \bar{\mathbf{V}}_2 & \bar{\mathbf{W}}_2 \end{bmatrix}, \mathbf{M}_u = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{W}_2 & \mathbf{V}_2 \end{bmatrix} \tag{94}$$

Mithilfe dieser Abkürzungen lassen sich nun die Randbedingungen an der Grenzfläche zwischen Cover und erster Schicht ($\ell = 0 \rightarrow \ell = 1$, ℓ ein Schichtindex), zwischen einer modulierten Schicht und der darauf folgenden ($\ell \rightarrow \ell + 1$) sowie zwischen der letzten Schicht und dem dem Substrat ($\ell = L \rightarrow \ell = L + 1$, L die Anzahl der modulierten Schichten) formulieren. Alle Größen, die von Schicht zu Schicht variieren, erhalten zusätzlich einen Schichtindex ℓ:

$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{V}}_{1,1} & \bar{\mathbf{W}}_{1,1} \\ \bar{\mathbf{V}}_{2,1} & \bar{\mathbf{W}}_{2,1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_I \\ \hat{\mathbf{Y}}_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [R_s] \\ [R_p] \end{bmatrix} + \mathbf{L}_{in} \tag{95a}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_{1,\ell} & \mathbf{V}_{1,\ell} \\ \mathbf{W}_{2,\ell} & \mathbf{V}_{2,\ell} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^+ \\ \mathbf{c}_\ell^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{V}}_{1,\ell+1} & \bar{\mathbf{W}}_{1,\ell+1} \\ \bar{\mathbf{V}}_{2,\ell+1} & \bar{\mathbf{W}}_{2,\ell+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_{\ell+1}^+ \\ \mathbf{c}_{\ell+1}^- \end{bmatrix} \tag{95b}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_{1,L} & \mathbf{V}_{1,L} \\ \mathbf{W}_{2,L} & \mathbf{V}_{2,L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_L^+ \\ \mathbf{c}_L^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_{II} \\ \hat{\mathbf{Y}}_{II} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [T_s] \\ [T_p] \end{bmatrix} \tag{95c}$$

Betrachten wir zunächst den Übergang $\ell \to \ell + 1$, also Gl. (95b). In diese wird der Ansatz $\mathbf{c}_\ell^- = \mathbf{a}_\ell \mathbf{c}_\ell^+$ eingesetzt. Nach Ausmultiplizieren beider Seiten und Umsortieren der Terme erhält man:

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{V}_{1,\ell} & \bar{\mathbf{V}}_{1,\ell+1} + \bar{\mathbf{W}}_{1,\ell+1}\mathbf{a}_{\ell+1} \\ -\mathbf{V}_{2,\ell} & \bar{\mathbf{V}}_{2,\ell+1} + \bar{\mathbf{W}}_{2,\ell+1}\mathbf{a}_{\ell+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^- \\ \mathbf{c}_{\ell+1}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{1,\ell} \\ \mathbf{W}_{2,\ell} \end{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^+ \tag{96}$$

Die beiden rechten Terme in der Matrix auf der linken Seite werden wie folgt abgekürzt:

$$\mathbf{f}_\ell = \bar{\mathbf{V}}_{1,\ell} + \bar{\mathbf{W}}_{1,\ell}\mathbf{a}_\ell \tag{97a}$$

$$\mathbf{g}_\ell = \bar{\mathbf{V}}_{2,\ell} + \bar{\mathbf{W}}_{2,\ell}\mathbf{a}_\ell \tag{97b}$$

Umgekehrt kann nun anhand der ersten Zeile von Gl. (96) ein Ausdruck für das bislang nur in Form eines Ansatzes eingeführte $\mathbf{a}_\ell$ gefunden werden:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^- \\ \mathbf{c}_{\ell+1}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{V}_{1,\ell} & \mathbf{f}_{\ell+1} \\ -\mathbf{V}_{2,\ell} & \mathbf{g}_{\ell+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{1,\ell} \\ \mathbf{W}_{2,\ell} \end{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^+ =: \begin{bmatrix} \mathbf{a}_\ell \\ \mathbf{b}_\ell \end{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^+ \tag{98}$$

Während die erste Zeile schlichtweg aus dem Ansatz für $\mathbf{a}_\ell$ folgt, ist die zweite Zeile eine Definition für eine neue Matrix $\mathbf{b}_\ell$. Die Gln. (97) und (98) definieren nun eine Iteration mit abnehmenden Index ℓ ("Rückwärts-Iteration") für die Matrizen $\mathbf{a}_\ell$, $\mathbf{b}_\ell$, $\mathbf{f}_\ell$ und $\mathbf{g}_\ell$. Bei gegebenem $\mathbf{f}_{\ell+1}$ und $\mathbf{g}_{\ell+1}$ folgen mit Gl. (98) $\mathbf{a}_\ell$ und $\mathbf{b}_\ell$ und mit Gl. (97) $\mathbf{f}_\ell$ und $\mathbf{g}_\ell$.

Jetzt wird für die Iteration ein Startwert sowie die Ankopplung an die Unbekannten $\mathbf{c}_\ell^\pm$, $\mathbf{R} := \left[[R_s], [R_p]\right]^\top$ und $\mathbf{T} := \left[[T_s], [T_p]\right]^\top$ benötigt. Der Startwert der Iteration folgt, indem Gl. (95c) in ähnlicher Weise umgestellt wird wie Gl. (95b):

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{V}_{1,L} & \hat{\mathbf{Z}}_{II} \\ -\mathbf{V}_{2,L} & \hat{\mathbf{Y}}_{II} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_L^- \\ \mathbf{T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{1,L} \\ \mathbf{W}_{2,L} \end{bmatrix} \mathbf{c}_L^+ \tag{99}$$

Diese Gleichung ist analog zu Gl. (96), was sofort die Definition der Startwerte sowie die Anbindung der transmittierten Beugungsamplituden an den Algorithmus nahe legt:

$$\mathbf{f}_{L+1} := \hat{\mathbf{Z}}_{II},\ \mathbf{g}_{L+1} := \hat{\mathbf{Y}}_{II},\ \mathbf{c}_{L+1}^+ := \mathbf{T} \tag{100}$$

Die Anbindung an die reflektierten Beugungsamplituden liefert eine Umstellung von Gl. (95a). Mit den Abkürzungen aus Gl. (97) folgt:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{R} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 & -\hat{\mathbf{Z}}_I \\ \mathbf{g}_1 & -\hat{\mathbf{Y}}_I \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{L}_{in} \tag{101}$$

Der gesamte Ablauf des Algorithmus ist nun wie folgt: Die ersten beiden Identitäten in Gl. (100) stellen die Startwerte für die Rückwärts-Iteration dar. Diese wird durch die Gln. (97) und (98) definiert und liefert alle Werte $\mathbf{a}_\ell$, $\mathbf{b}_\ell$, $\mathbf{f}_\ell$ und $\mathbf{g}_\ell$, $\ell = 1 \ldots L$. Mit Gl. (101) folgen die reflektierten Beugungsamplituden $\mathbf{R}$ sowie $\mathbf{c}_1^+$. Alle weiteren $\mathbf{c}_\ell^\pm$ folgen durch eine "Vorwärts-

Iteration", also mit aufsteigendem Index ℓ. Diese ist durch den gewählten Ansatz für $\mathbf{a}_\ell$ sowie durch Gl. (98) gegeben:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^- \\ \mathbf{c}_{\ell+1}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_\ell \\ \mathbf{b}_\ell \end{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^+ \tag{102}$$

Die transmittierten Beugungsamplituden schließlich liefert die dritte Identität von Gl. (100).

Diese gegenüber Gl. (93) vergleichsweise komplexe Prozedur ist durch zwei Vorteile gerechtfertigt. Zum einen fallen die für die Berechnung der Nahfelder benötigten Konstanten $\mathbf{c}_\ell^\pm$ als Nebenprodukt der Rechnung ab, zum andern, und das ist der eigentliche Sinn des Ganzen, treten keine numerisch instabilen Matrix-Inversionen mehr auf. Gl. (101) ist ohnehin unkritisch, da hier keine Exponentialterme in der Matrix enthalten sind, in Gl. (98) treten durch die gemachten Umformungen die Exponentialterme nur noch als Summanden und nicht mehr als Faktoren innerhalb der invertierten Matrix auf. Sie sind in den Matrizen $\bar{\mathbf{W}}_{1/2,\ell}$ enthalten.

Es wurde bereits erläutert, wie die Ergebnisse der RCWA Rechnung in komplexe elektrische Felder umgerechnet werden können. Dies sei hier nochmals zusammengestellt. Es ist:

$$[E_{R_p}] = \frac{1}{in_I}[R_p],\ [E_{R_s}] = [R_s], \tag{103a}$$

$$[E_{Tp}] = \frac{1}{in_{II}}[T_p],\ [E_{Ts}] = [T_s]. \tag{103b}$$

Damit lassen sich auch die Beugungseffizienzen, also die Intensitäten der jeweiligen Beugungsordnung bei einfallender Einheitsamplitude formulieren. Diese sind wie üblich definiert als Produkt aus dem Betragsquadrat des elektrischen Feldes und einem Projektionsfaktor. Der erste Faktor ist proportional zur Leistung, wobei die Proportionalitätsfaktoren wegen der Normierung auf das einfallende Feld wegfallen, der zweite Faktor berücksichtigt eine Cosinus-Abhängigkeit der Querschnittsfläche vom jeweiligen Polarwinkel des einfallenden und gebeugten Lichtbündels. Es ergibt sich also für die Beugungseffizienzen, engl. diffraction efficiencies (DE):

$$DE_{R_p,\rho} = |E_{R_p,\rho}|^2 \frac{\mathrm{Re}\left(k_{I,z\rho}\right)}{k_0 n_I \cos\theta},\ DE_{R_s\rho} = |E_{R_s\rho}|^2 \frac{\mathrm{Re}\left(k_{I,z\rho}\right)}{k_0 n_I \cos\theta}, \tag{104a}$$

$$DE_{T_p,\rho} = |E_{T_p,\rho}|^2 \frac{\mathrm{Re}\left(k_{II,z\rho}\right)}{k_0 n_I \cos\theta},\ DE_{T_s\rho} = |E_{T_s\rho}|^2 \frac{\mathrm{Re}\left(k_{II,z\rho}\right)}{k_0 n_I \cos\theta}. \tag{104b}$$

Literatur

[Abd2007] I. Abdulhalim,
Simplified optical scatterometry for periodic nanoarrays in the near-quasi-static limit,
Appl. Opt. **46** (2007) 12 2219-2228

[All2005] J. Allgair, B. Bunday,
A Review of Scatterometry for Three-Dimensional Semiconductor Feature Analysis,
Future Fab Intl. **19** (2005)

[Azz1972a] R.M.A. Azzam, N.M. Bashara,
Polarization Transfer Function of an Optical System as a Bilinear Transformation,
J. Opt. Soc. Am. **62** (1972) 2 222-229

[Azz1972b] R.M.A. Azzam, N.M. Bashara,
Ellipsometric Measurement of the Polarization Transfer Function of an Optical System,
J. Opt. Soc. Am. **62** (1972) 3 336-340

[Azz1972c] R.M.A. Azzam, N.M. Bashara,
Generalized Ellipsometry for Surfaces with Directional Preference: Application to Diffraction Gratings,
J. Opt. Soc. Am. **62** (1972) 1521-1523

[Azz1977] R.M.A. Azzam, N.M. Bashara,
Ellipsometry and polarized light,
North Holland, Amsterdam, New York, Oxford, 1977

[Bai2006] B. Bai, L. Li,
Group-theoretic approach to enhancing the Fourier modal method for crossed gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **23** (2006) 3 572-580

[Bar2004] K. Barry, A. Viswanathan, X. Niu, J. Bischoff,
Scatterometry for contact hole lithography,
Proc. SPIE **5375** (2004) 1081-1086

[Ben2001] N. Benesch, A. Hettwer, C. Schneider, L. Pfitzner, H. Ryssel,
Phi-Scatterometry for Integrated Linewidth Control in DRAM manufacturing,
Proc. of the IEEE Semiconductor Manufacturing Symposium,
08.10.-10.10.2001, 129-132

[Ber1972] D.W. Berreman,

Optics in Anisotropic and Stratified Media: 4x4 Matrix Formulation,
J. Opt. Soc. Am. **62** (1972) 4 502-510

[Bis1999] J. Bischoff, L. Hutschenreuther, H. Truckenbrodt, A. Bauer, U. Haak, T. Skaloud,
Characterization of 3D rersist patterns by means of optical scatterometry,
Proc. SPIE **3743** (1999) 49-60

[Blo2002] H. Bloeß, J.W. Schultze, A. Michaelis, O. Genz, U. Mantz, G. Ballantyne,
Spectroscopic anisotropy micro-ellipsometry for determination of lateral dimensions of form birefringent structures,
Thin Solid Films **414** (2002) 246-250

[Boe07] A. den Boef,
Persönliche Mitteilung,
2007

[Boe08] A. den Boef,
Persönlichen Mitteilung,
2008

[Boh2004] P. Boher, M. Luet, J. Petit, P. Barritault, J. Hazart, P. Chaton,
Innovative Rapid Photo-goniometry method for CD Metrology,
Proc. SPIE **5375** (2004) 1302-1313

[Boh2005] P. Boher, J. Petit, T. Leroux, J. Foucher, Y. Desières, J. Hazart, P. Chaton,
Optical Fourier Transform Scatterometry for LER and LWR Metrology,
Proc. SPIE **5725** (2005) 192-203

[Bor1965] M. Born, E. Wolf,
Principles of Optics,
Pergamon Press, Oxford, London, Edinburgh, New York, Paris, Frankfurt, 1965[3]

[Bot1981a] I.C. Botten, M.S. Craig, R.C. McPhedran, J.L. Adams, J.R. Andrewartha,
The dielectric lamellar diffraction grating,
Optica Acta **28** (1981) 3 413-428

[Bot1981b] I.C. Botten, M.S. Craig, R.C. McPhedran, J.L. Adams, J.R. Andrewartha,
The finitely conducting lamellar diffraction grating,
Optica Acta **28** (1981) 8 1087-1102

[Bot1981c] I.C. Botten, M.S. Craig, R.C. McPhedran,
Highly conducting lamellar diffraction gratings,
Optica Acta **28** (1981) 8 1103-1106

[Brä1993] R. Bräuer, O. Bryngdahl,

Electromagnetic diffraction analysis of two-dimensional gratings,
Opt. Commun. **100** (1993) 1-5

[Bro1998] C. Brosseau,
Fundamentals of polarized light,
John Wiley & Sons, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, 1998

[Bru1935] D.A.G. Bruggemann,
Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen,
Ann. Phys. **24** (1935) 5 636-679

[Bun2007] B.D. Bunday, J.A. Allgair. M. Caldwell, E.P. Solecky, C.N. Archie, B.J. Rice, B. Singh, J.P. Cain, I. Emami,
Value-added metrology,
IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing **20** (2007) 3 266-277

[Bur1966] C.B. Burckhardt,
Diffraction of a Plane Wave at a Sinusoidally Stratified Dielectric Grating,
J. Opt. Soc. Am. **56** (1966) 11 1502-1509

[Bur2005] S. Burger, R. Köhle, L. Zschiedrich, W. Gao, F. Schmidt, R. März, C. Nölscher,
Benchmark of FEM, Waveguide and FDTD Algorithms for Rigorous Mask Simulation,
Proc. SPIE **5992** (2005) 378-389

[Che2004] C. Chen, I. An, G.M. Ferreira, N.J. Podzara, J.A. Zapien, R.W. Collins,
Multichannel Mueller matrix ellipsometer based on the dual rotating compensator principle,
Thin Solid Films **455-456** (2004) 14-23

[Col1990] R.W. Collins,
Automatic rotating element ellipsometers: Calibration, operation, and real-time applications,
Rev. Sci. Instrum. **61** (1990) 8 2029-2062

[Del1993] T. Delort, D. Maystre,
Finite-element method for gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **10** (1993) 12 2592-2601

[Dep1989] R.A. Depine,
Conformal mapping method for finitely conducting diffraction gratings in conical mountings,
Optik **81** (1989) 3 95-102

[Die2001a] A. Diebold,
Handbook of Silicon Semiconductor Metrology,
Marcel Dekker, New York, 2001

[Die2008] A. Diebold,
In-Line Metrology,
in: R. Doering, Y. Nishi (Hrsg.), Handbook of Semiconductor Manufactoring Technology, CRC Press, Boca Raton, 2008[2]

[Dol2007] G. Dolling, M. Wegener, C.M. Soukoulis, S. Linden,
Negative-index metamaterial at 780 nm wavelength,
Opt. Lett. **32** (2007) 1 53-55

[Dru1887] P. Drude,
Ueber die Gesetze der Reflexion und Brechung des Lichtes an der Grenze absorbirender Krystalle,
Ann. Phys. Chem. **32** (1887) 584-625

[Dru1888] P. Drude,
Beobachtungen über die Reflexion des Lichtes am Antimonglanz,
Ann. Phys. Chem. **34** (1888) 489-531

[Dru1889a] P. Drude,
Ueber Oberflächenschichten: I. Theil,
Ann. Phys. Chem. **36** (1889) 532-560

[Dru1889b] P. Drude,
Ueber Oberflächenschichten: II. Theil,
Ann. Phys. Chem. **36** (1889) 865-897

[Els1998] J. Elschner, G. Schmidt,
Numerical Solution of Optimal Design Problems for Binary Gratings,
J. Comput. Phys. **146** (1998) 603-626

[Fay2002] B. Fay,
Advanced optical lithography development, from UV to EUV,
Microelectronic Engineering **61-62** (2002) 11-24

[Fer2009] V. Ferreras Paz, L. Szikszai, M. Mört, T. Schuster, K. Frenner, W. Osten,
Sensitivity analysis and simulation based results of extendability of scatterometry towards smaller technology nodes,
245th PTB Seminar on Scatterometry and Ellipsometry on Structured Surfaces, Braunschweig 18 - 19 March, 2009

[Gei2005] T. Geiler,
Phi-Scatterometrie und optische Nahfeld Mikroskopie für Industrielle CMOS Strukturen,
Diplomarbeit, TU Dresden, 2005

[Ger2007a] T.A. Germer,
Modeling the effect of line profile variation on optical critical dimension metrology,
Proc. SPIE **6518** (2007) 65180Z

[Ger2007b] T.A. Germer,
Effect of line and trench profile variation on specular and diffuse reflectance from a periodic structure,
J. Opt. Soc. Am A **24** (2007) 3 696-701

[Goe2008a] P. Götz,
Simulation von Gitterbeugung mit der Normalenvektormethode,
Diplomarbeit, Uni Stuttgart, 2008

[Goe2008b] P. Götz, T. Schuster, S. Rafler, K. Frenner, W. Osten,
Simulation von Gitterbeugung mit der Normalenvektormethode,
Proc. DGaO, Poster P5, 13.-17.05.2008, Esslingen

[Goe2008c] P. Götz, T. Schuster, K. Frenner, S. Rafler, W. Osten,
Normal Vector Method for the RCWA with Automated Vector Field Generation,
Opt. Expr. **16** (2008) 17295-17301

[Gog2006] E. Gogolides, V. Constantoudis, G. P. Patsis, A. Tserepi,
A review of line edge roughness and surface nanotexture resulting from patterning processes,
Microelectronic Engineering **83** (2005) 4-91067-1072

[Goo1968] J.W. Goodman,
Introduction to Fourier Optics,
McGraw-Hill, New York, 1968

[Gor2004] D.V. Gorelikov, J. Remillard, N.T. Sullivan,
CD-SEM-based Critical Shape Metrology of integrated circuits,
Proc. SPIE **5375** (2004) 605-613

[Gra1994] E.B. Grann, M.G. Moharam, D.A. Pommet,
Artificial uniaxial and biaxial dielectrics with use of two-dimensional subwavelength binary gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **11** (1994) 10 2695-2703

[Gra1996] G. Granet, B. Guizal,
Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization,
J. Opt. Soc. Am A **13** (1996) 5 1019-1023

[Haf1999] C. Hafner,
Post-modern Electromagnetics – using intelligent Maxwell solvers,

John Wiley & sons, Chichester, 1999

[Hat1994] Z.R. Hatab, S.L. Prins, J.R. McNeil, S.S.H. Naqvi,
16 MB DRAM trench depth characterization using dome scatterometry,
Proc. SPIE **2196** (1994) 2-13

[Hat1995] Z.R. Hatab, J.R. McNeil, S.S.H. Naqvi,
Sixteen-megabit dynamic random access memory trench depth characterization using two-dimensional diffraction analysis,
J. Vac. Sci. Technol. B **13** (1995) 2 174-182

[Hau1980] P.S. Hauge,
Recent developments in instrumentation in ellipsometry,
Surf. Sci. **96** (1980) 108-140

[Het2002] A. Hettwer, N. Benesch, C. Schneider, L. Pfitzner, H. Ryssel,
Phi-Scatterometry for Integrated Linewidth and Process Control in DRAM Manufacturing,
IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing **15** (2002) 4 470-477

[Hic1992] K.H. Hickman, S.M. Gaspar, K.P. Bishop, S.S.H. Naqvi, J.R. McNeil, G.D. Tipton, B.R. Stallard, B.L. Draper,
Use of diffracted light from latent images to improve lithography control,
J. Vac. Sci. Technol. B **10** (1992) 5 2259-2266

[Hin2004] T. Hingst, M. Mört, P. Reinig, E. Backen, R. Dost, P. Weidner, J. Hopkins, T. Dziura, A. Elazami, R. Freed,
Spectroscopic ellipsometry-based scatterometry for depth and line width measurements of polysilicon-filled deep trenches,
Proc. SPIE **5375** (2004) 587-596

[Hua2005] J. Huang, K. Berry, C.M. Ke, B. Lin, A. Li,
Application of 3D scatterometry to contacts and vias at 90nm and beyond,
Proc. SPIE **5752** (2005) 1266-1270

[Hum2005] J. Humlíček,
Polarized Light and Ellipsometry,
in: H. G. Tompkins, E.A. Irene (Hrsg.), Handbook of Ellipsometry, William Andrew Publishing, Norwich, 2005

[Jas1969] S.N. Jasperson, S.E. Schnatterly,
An Improved Method for High Reflectivity Ellipsometry Based on a New Polarization Modulation Technique,
Rev. Sci. Instrum. **40** (1969) 6 761-767

[Jel1990] G.E. Jellison Jr., F.A. Modine,

Two-channel polarization modulation ellipsometer,
Applied Optics **29** (1990) 7 959-974

[Jel1997a] G.E. Jellison Jr., F.A. Modine,
Two-modulator generalized ellipsometry: theory,
Appl. Opt. **36** (1997) 31 8190-8197

[Jel1997b] G.E. Jellison Jr., F.A. Modine,
Two-modulator generalized ellipsometry: experiment and calibration,
Appl. Opt. **36** (1997) 31 8184-8189

[Jel2005] G.E. Jellison Jr., F.A. Modine,
Polarization Modulation Ellipsometry,
in: H. G. Tompkins, E.A. Irene (Hrsg.), Handbook of Ellipsometry, William Andrew Publishing, Norwich, 2005

[Jon1941] R.C. Jones,
A New Calculus for the Treatment of Optical Systems,
J. Opt. Soc. Am. **31** (1941) 488-503

[Kas1973] F.G. Kaspar,
Diffraction by thick, periodically stratified gratings with complex dielectric constant,
J. Opt. Soc. Am. **63** (1973) 1 37-45

[Kas1976] H.L. Kasdan, N. George,
Linewidth measurement by diffraction pattern analysis,
Proc. SPIE **80** (1976) 54-63

[Kau2005] J. Kauffmann, J. Bader, N. Kerwien, W. Osten, H.J. Tiziani,
Polarisation Measurements on Diffractometry for optical Nanostructures,
Nanofair 2005 New Ideas for Industry, VDI Bericht 1920

[Kau2008] Jochen Kauffmann,
RigoroseRekonstruktionsmethoden der optischen Messtechnik zur tomographischenund diffraktometrischen Bestimmung von Struktur-Stoff-Systemen,
Dissertation, Uni Stuttgart, 2008

[Ker2007a] N. Kerwien, T. Schuster, S. Rafler, W. Osten, M. Totzeck,
Vectorial thin-element approximation: a semirigorous determination of Kirchhoff's boundary conditions,
J. Opt. Soc. Am. A **24** (2007) 4 1074-1084

[Ker2007b] N. Kerwien,
Zum Einfluss von Polarisationseffekten in der mikroskopischen Bildentstehung,

Dissertation, Universität Stuttgart, 2007

[Kim2008] H. Kim, B. Lee,
Pseudo-Fourier modal analysis of two-dimensional arbitrarily shaped grating structures,
J. Opt. Soc. Am. A **25** (2008) 1 40-54

[Kle1978] H.P. Kleinknecht, H. Meier,
Optical Monitoring of the Etching of SiO2 and Si3N4 on Si by the Use of Grating Test Patterns,
J. Electrochem. Soc. **125** (1978) 5 798-803

[Kle1980] H.P. Kleinknecht, H. Meier,
Linewidth measurements on IC masks and wafers by grating test patterns,
Appl. Opt. **19** (1980) 4 525-533

[Kle2001] B.H. Kleemann,
Elektromagnetische Analyse von Oberflächengittern von IR bis XUV mittels einer parametrisierten Randintegralmethode: Theorie, Vergleich und Anwendungen,
Dissertation, Universität Ilmenau, 2001

[Kno1978] K. Knop,
Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves,
J. Opt. Soc. Am. **68** (1978) 9 1206-1210

[Kop1992] K. Kopitzki,
Einführung in die Festkörperphysik,
B.G. Teubner, Stuttgart, 1992

[Kub1959] H. Kubota, S. Ĭnoué,
Diffraction Images in the Polarizing Microscope,
J. Opt. Soc. Am. **49** (1959) 2 191-198

[Lal1996a] P. Lalanne und G. M. Morris,
Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization,
J. Opt. Soc. Am. A **13** (1996) 4 779-784

[Lal1996b] P. Lalanne, D. Lemercier-Lalanne,
On the effective medium theory of subwavelength periodic structures,
J. Mod. Opt. **43** (1996) 10 2063-2085

[Lal1997] P. Lalanne,
Improved formulation of the coupled-wave method for two-dimensional gratings,

J. Opt. Soc. Am. A **14** (1997) 7 1592-1598

[Leh1990] G. Lehner,
Elektromagnetische Feldtheorie,
Springer, Berlin, New York, Heidelberg, 1990

[Li1993a] L. Li,
A Modal Analysis of Lamellar Diffraction Gratings in Conical Mountings,
Journal of Modern Optics **40** (1993) 4 553-573

[Li1993b] L. Li,
Multilayer modal method for diffraction gratings of arbitrary depth, profile and permittitvity,
J. Opt. Soc. Am. A **10** (1993) 12 2581-2591

[Li1996a] L. Li,
Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures,
J. Opt. Soc. Am. A **13** (1996) 9 1870-1876

[Li1996b] L. Li,
Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings,
J. Opt. Soc. Am A **13** (1996) 5 1024-1035

[Li1997] L. Li,
New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **14** (1997) 10 2758-67

[Li1999] L. Li, J. Chandezon, G. Granet, J.P. Plumey,
Rigorous and efficient grating-analysis method made easy for optical engineers,
Applied Optics **38** (1999) 304-313

[Li2000] L. Li,
Improvement of convergence of the Fourier modal method for gratings of non-rectangular, non-staircase-like profiles in TM polarization,
Diffractive Optics and Microoptics (DOMO) **PD3** (2000) 353-355

[Li2001] L. Li,
Mathematical Reflections on the Fourier Modal Method in Grating Theory,
in: G. Bao (Hrsg.), Mathematical Modeling in Optical Science, SIAM, Philadelphia, 2001

[Li2003] L. Li,

Fourier modal method for crossed anisotropic gratings with arbitrary permittivity and permeability tensors,
J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **5** (2003) 345-355

[Loe1997] E.G. Loewen, E. Popov,
Diffraction Gratings and Applications,
Marcel Dekker, New York, Basel, 1997

[Lyn2007] N.M. Lyndin, O. Parriaux, A.V. Tishchenko,
Modal analysis and suppression of the Fourier modal method instabilities in highly conductive gratings,
J. Opt. Soc. Am.A **24** (2007) 3781-3788

[May1980] D. Maystre,
Integral Methods,
in: R. Petit (Hrsg.), Electromagnetic Theory of Gratings, Springer, Berlin, Heidelberg, 1980

[May1984] D. Maystre,
Rigorous Vector Theories of Diffraction Gratings,
Progress in Optics **21** (1984) 1-67

[Mil1992] L.M. Milner, K.H. Hickman, S.M. Gaspar, K.P. Bishop, S.S.H. Naqvi, J.R. McNeil,
Latent image exposure monitor using scatterometry,
Proc. SPIE **1673** (1992) 274-283

[Mil1993] L.M. Milner, K.P. Bishop, S.S.H. Naqvi, J.R.Mc Neil,
Stepper focus characterization using diffraction from latent images,
J. Vac. Sci. Technol. B **11** (1993) 4 1258-1266

[Min1998] B.K. Minhas, S.A. Coulombe, S.S.H. Naqvi, J.R. McNeil,
Ellipsometric scatterometry for the memtrology of sub-0.1-µm-linewidth structures,
Appl. Opt. **37** (1998) 22 5112-5115

[Moh1981] M.G. Moharam, T.K. Gaylord,
Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction,
J. Opt. Soc. Am. **71** (1981) 7 811-818

[Moh1982] M.G. Moharam, T.K. Gaylord,
Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings,
J. Opt. Soc. Am. **72** (1982) 10 1385-1392

[Moh1983] M.G. Moharam, T.K. Gaylord,
Three-dimensional vector coupled wave analysis of planar-grating diffraction,
J. Opt. Soc. Am. **73** (1983) 9 1105-1112

[Moh1984] M.G. Moharam, T.K. Gaylord, G.T. Sincerbox, H. Werlich, B. Yung,
Diffraction characteristics of photoresist surface-relief gratings,
Appl. Opt. **23** (1984) 18 3214-3220

[Moh1988] M.G. Moharam,
Coupled-Wave Analysis of Two-Dimensional Dielectric Gratings,
Proc. SPIE **883** (1988)

[Moh1995a] M. G. Moharam, E. B. Grann, D. A. Pommet und T. K. Gaylord,
Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **12** (1995) 5 1068-1076

[Moh1995b] M. G. Moharam, D. A. Pommet, E. B. Grann and T. K. Gaylord,
Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach,
J. Opt. Soc. Am. A **12** (1995) 5 1077-1086

[Mue1948] H. Mueller,
The Foundation of Optics,
J. Opt. Soc. Am. **38** (1948) 7 661

[Naq1990a] S.S.H. Naqvi, S. Gaspar, K. Hickman, J.R. McNeil,
A Simple Technique for Linewidth Measurement of Gratings on Photomasks,
Proc. SPIE **1261** (1990) 495-505

[Naq1990b] S.S.H. Naqvi, N.C. Gallagher,
A general solution to the scattering of electromagnetic waves from a strip grating,
J. Mod. Opt. **37** (1990) 10 1629-1643

[Naq1992] S.S.H. Naqvi, S. Gaspar, K. Hickman, K. Bishop, J.R. McNeil,
Linewidth measurement of gratings on photomasks: a simple technique,
Appl. Opt. **31** (1992) 10 1377-1384

[Naq1994a] S.S.H. Naqvi, S.H. Zaidi, S.R.J. Brueck, J.R. McNeil,
Diffractive techniques for lithographic process monotoring and control,
J. Vac. Sci. Technol. B **12** (1994) 6 3600-3606

[Naq1994b] S.S.H. Naqvi, R.H. Krukar, J.R. McNeil, J.E. Franke, T.M. Niemczyk, D.M. Haaland, R.A. Gottscho, A. Kornblit,
Etch depth estimation of large-period silicon gratings with multivariate calibration of rigorously simulated diffraction profiles,
J. Opt. Soc. Am. A **11** (1994) 9 2485-2493

[Nei1992] J.R. McNeil, S.S.H. Naqvi, S.M. Gaspar, K.C. Hickman, K.P. Bishop, L.M. Milner, R.H. Krukar, G.A. Petersen,

Scatterometry Applied to Microelectronic Processing,
Microlithography World **Nov/Dec** (1992) 16-22

[Nev1974] M. Nevière, P. Vincent, R. Petit,
Sur la théorie du réseau conducteur et ses applications à l'optique,
Nouv. Rev. Optique **5** (1974) 65-77

[Niu1999] X. Niu, N. Jakatdar, J. Bao, C. Spanos, S. Yedur,
Specular spectroscopic scatterometry in DUV lithography,
Proc. SPIE **3677** (1999) 159-168

[Niu2001] X. Niu, N. Jakatdar, J. Bao, C. Spanos,
Specular Spectroscopic DUV Scatterometry,
IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing **14** (2001) 2 97-111

[Nop1994] E. Noponen, J. Turunen,
Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three-dimensional profiles,
J. Opt. Soc. Am A **11** (1994) 2494-2502

[Nov2005] T. Novikova, A. De Martino, R. Ossikovski, B. Drévillon,
Metrological applications of Mueller polarimetry in conical diffraction for overlay characterization in microelectronics,
Eur. Phys. J. Appl. Phys. **31** (2005) 63-69

[Nov2006] T. Novikova, A. De Martino, S.B. Hatit, B. Drévillon,
Application of Mueller polarimetry in conical diffraction for critical dimension measurements in microelectronics,
Appl. Optics **45** (2006) 16 3688-3697

[Nov2007] T. Novikova, A. De Martino, P. Bulkin, Q. Nguyen, B. Drévillon, V. Popov, A. Chumakov,
Metrology of replicated diffractive optics with Mueller polarimetry in conical diffraction,
Opt. Expr. **15** (2007) 5 2033-2046

[Pen1975] S.T. Peng, T. .Tamir, H.I. Bertoni,
Theory of Periodic Dielectric Waveguides,
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques **23** (1975) 123-133

[Pet1980] R. Petit (Hrsg.),
Electromagnetic Theory of Gratings,
Springer, Berlin, Heidelberg, 1980

[Pet2004] J. Petit, P. Barritault, J. Hazart, P. Chaton, P. Boher, M. Luet, T. Leroux,
A new analysis strategy for CD metrology using rapid photo goniometry method,

Proc. SPIE **5375** (2004) 210-221

[Pet2005] J. Petit, P. Boher, T. Leroux, P. Barritault, J. Hazart, P. Chaton,
Improved CD and overlay metrology using an Optical Fourier Transform instrument,
Proc. SPIE **5752** (2005) 420-428

[Pet2006] M. Petschow,
Implementierung der vektoriell Kirchhoffschen Näherung (VKA) zur Nahfeldberechnung in Microsim,
Diplomarbeit, Uni Stittgart, 2006

[Pet2008] Matthias Petschow,
Berechnung anisotroper periodischer Strukturen mittels Differentieller Methode,
Diplomarbeit, Uni Stuttgart, 2008

[Pop2001] E. Popov, M. Nevière,
Maxwell equations in Fourier space: fast-converging formulation for diffraction by arbitrary shaped, periodic, anisotropic media,
J. Opt. Soc. Am. A **18** (2001) 11 2886-2894

[Pop2002] E. Popov, M. Nevière, B. Gralak and G. Tayeb,
Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **19** (2002) 1 33-42

[Pop2003] E. Popov, M. Nevière,
Light propagation in periodic media,
Marcel Dekker, New York, 2003

[Pop2004] E. Popov, B. Chernov, M. Nevière und N. Bonod,
Differential theory: application to highly conducting gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **21** (2004) 2 199-206

[Pra1997] D.W. Prather, M.S. Mirotznik, J.N. Mait,
Boundary integral methods applied to the analysis of diffractive optical elements,
J. Opt. Soc. Am. A **14** (1997) 1 34-43

[Qiu2000] M. Qiu, S. He,
A nonorthogonal finite-difference time-doomain method for computing the band structure of a two-dimensional photonic crystal with dielectric and metallic inclusions,
J. Appl. Phys. **87** (2000) 12 8268-8275

[Qui2004] R. Quintanilha, P. Thony, D. Henry, J. Hazart,
3D-Feature Analysis Using Spectroscopic Scatterometry,
Proc. SPIE **5375** (2004) 456-467

[Qui2005a] R. Quintanilha, J. Hazart, P. Thony, D. Henry,
Application of spectroscopic scatterometry method in hole matrices analysis,
Proc. SPIE **5752** (2005) 204-216

[Qui2005b] R. Quintanilha, J. Hazart, P. Thony, D. Henry,
Influence of real-life structures in optical metrology using spectroscopic scatteromtry analysis,
Proc. SPIE **5858** (2005) 58580C

[Raf2007] S. Rafler,
Persönliche Mitteilung,
2007

[Raf2008b] S. Rafler, P. Götz, M. Petschow, T. Schuster, K. Frenner, W. Osten,
Investigation of methods to set up the normal vector field for the differential method,
Proc. SPIE **6995** (2008) 69950Y

[Ray2001] C.J. Raymond,
Scatterometry for Semiconductor Metrology,
in: A. Diebold (Hrsg.), Handbook of Silicon Semiconductor Metrology, Marcel Dekker, New York, 2001

[Ray2003] C.J. Raymond, M. Littau, B. Youn, C.J. Sohn, J.A. Kim, Y.S. Kang,
Applications of angular scatterometry for the measurement of multiply periodic features,
Proc. SPIE **5038** (2003) 577-584

[Ray2004] C.J. Raymond,
Comparison of solutions to the scatterometry inverse problem,
Proc. SPIE **5375** (2004) 5375-61

[Ray2005] C.J. Raymond,
Overview over scatterometry applications in high volume silicon manufacturing,
AIP Conference Proceedings **788** (2005) 394-402

[Ray2006] C.J. Raymond, M. Littau, D. Forman, S.G. Hummel,
Dome scatterometry for the measurement of advanced geometry semiconductor devices,
Proc. SPIE **6152** (2006) 61521I

[Rei2005] P. Reinig, R. Dost, M. Mört, T. Hingst, U. Mantz, J. Moffit, S. Shakya, C. Raymond, M. Littau,
Metrology of deep trech etched memory structures using 3D scatterometry,

Proc. SPIE **5725** (2005) 559-569

[Rei2007] P. Reinig, T. Geiler, M. Moert, T. Hingst, H. Bloeß, J. Renger, L.M. Eng,
Extending Conventional Scatterometry Using Generalized Scatterometry,
AIP Conf. Proc. **931** (2007) 89-93

[Rib2007] C. Ribot, P. Lalanne, M.S.L. Li, B. Loiseaux, J.P. Huignard,
Analysis of blazed diffractive optical elements formed with artificial dielectrics,
J. Opt. Soc. Am. A **24** (2007) 3819-3826

[Ryt1956] R. Rytov,
Electromagnetic Properties of Finely Stratified Medium,
Soviet Phys. **2** (1956) 3 466-475

[Sav1998] S.N. Savenkov, K.E. Yushtin, B.M. Kolisnychenko, Y.A. Skoblya,
On the one-to-one correspondence of Mueller and Jones Matrix formalisms under natural Conditions,

[Sch1996] M. Schubert, B. Rheinländer, J.A. Woollam, B. Jobs, C.M. Herziger,
Extension of rotating-analyzer ellipsometry to generalized ellipsometry: determination of the dielectric function tensor from uniaxial TiO2,
J. Opt. Soc. Am. A **13** (1996) 4 875-883

[Sch1998] M. Schubert,
Generalized ellipsometry and complex optical systems,
Thin Solid Films **313-314** (1998) 323-332

[Sch2005a] M. Schubert,
Theory and Application of Generalzed Ellipsometry,
in: H. G. Tompkins, E.A. Irene (Hrsg.), Handbook of Ellipsometry, William Andrew Publishing, Norwich, 2005

[Sch2005b] T. Schuster, N. Kerwien, W. Osten, P. Reinig, M. Mört, T. Hingst, U. Mantz,
Effect of linewidth fluctuations and sidewall roughness in scatterometry,
CLEO Europe, 12.-17.06.2005, München

[Sch2006] T. Schuster, J. Kauffmann, N. Kerwien, H. Tiziani, W. Osten, P. Reinig,
Scatterometrie an Kreuzgitterstrukturen,
Proc. DGaO, Paper B5, 6.-10.06.2006, Weingarten

[Sch2007a] T. Schuster, J. Ruoff, N. Kerwien, S. Rafler, W. Osten,
Normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings,
J. Opt. Soc. Am. A **24** (2007) 9 2880-2890

[Sch2007b] T. Schuster, S. Rafler, W. Osten, P. Reinig, T. Hingst,

Scatterometry from crossed grating structures in different configurations,
Proc. SPIE **6617** (2007) 661715

[Sch2007c] F. Scholze, C. Laubis, U. Dersch, J. Pomplun, S. Burger, F. Schmidt,
The influence of line edge roughness and CD uniformity on EUV scatterometry for CD characterization of EUV masks,
Proc. SPIE **6617** (2007) 66171A

[Sch2008a] T. Schuster, S. Rafler, K. Frenner, W. Osten ,
Influence of line edge roughness (LER) on angular and on spectroscopic scatterometry,
Proc. SPIE **7155** (2008) 71550W

[Sch2008b] T. Schuster, S. Rafler, V. Ferreras Paz, K. Frenner, W. Osten,
Fieldstitching with Kirchhoff-boundaries as a model based description for line edge roughness (LER) in scatterometry,
Microel. Engin. **86** (2009) 1029-1032

[Sch2008c] T. Schuster, S. Rafler, V. Ferreras Paz, K. Frenner, W. Osten,
Fieldstitching method comprising Kirchhoff's approximation for description of small perturbations of perfectly periodic structures,
6th IISB Lithography Simulation Workshop, 18.-20.09.2008, Athen, Griechenland

[Sen2003] M. Sendelbach, C. Archie,
Scatterometry measurement precision and accuracy below 70 nm,
Proc. SPIE **5038** (2003) 224-238

[Sil2007a] R.M. Silver, B.M. Barnes, R. Attota, J. Jun, M. Stocker, E. Marx, H.J. Patrick,
Scatterfield Microscopy for extending the limits of image-based optical metrology,
Appl. Opt. **46** (2007) 20 4248-4257

[Sil2007b] R.M. Silver, R. Attota, E. Marx,
Model-based Analysis of the Limits of Optical Metrology with Experimental Comparisons,
Proc. SPIE **6617** (2007) 66170W

[Sne1976] I. Sneddon,
Encylopaedic dictionary of mathematics for engineers and Applied Scientists,
A. Wheaton & Co., Exeter, 1976

[Taf2000] A. Taflove, S.C. Hagness,
Computational Electrodynamics – the finite difference time domain

method,
Artech House Publishers, Norwood, 2000[2]

[Tak1997] S. Takeuchi, M. Yoshii, M. Yamamoto,
New Ellipsometric Approach to Critical Dimension Metrology Utilizing Form Birefringence Inherent in a Submicrom Line-and-Space Pattern,
Jpn. J. Appl. Phys. **36** (1997) 12B 7720-7725

[Tho2003] P. Thony, D. Herisson, D. Henry, E. Severgnini, M. Vasconi,
Review Of CD Measurement and Scatterometry,
AIP Conf. Proc. **683** (2003) 381-388

[Tom1993] H.G. Tompkins,
A users's guide to ellipsometry,
Academic Press, San Diego, 1993

[Tom2005] H. G. Tompkins, E.A. Irene (Hrsg.),
Handbook of ellipsometry,
William Andrew Publishing, Norwich, 2005

[Tot2001] M. Totzeck,
Numerical simulation of high-NA quantitative polarization microscopy and corresponding near-fields,
Optik **112** (2001) 9 399-406

[Totz_oJ] Michael Totzeck,
Handschriftliche Aufzeichnungen,
Universität Stuttgart, o.J.

[Tur2000] J. Turunen, M. Kuittinen, F. Wyrowski,
Diffractive Optics: Electromagnetic Approach,
Progress in Optics **40** (2000) 341-387

[Ved1998] K. Vedam,
Spectroscopic ellipsometry: a historical overview,
Thin Solid Films **313-314** (1998) 1-9

[Vin1980] P. Vincent,
Differential Methods,
in: R. Petit (Hrsg.), Electromagnetic Theory of Gratings, Springer, Berlin, Heidelberg, 1980

[Wal1954] M.J. Walker,
Matrix Calculus and the Stokes Parameters of Polarized Radiation,
Am. J. Phys. **22** (1954) 170-174

[Wei2005] A. Weidner,
Strukturbreitenbestimmung für die sub 100nm - Lithographie mittels spektralellipsometrischer Beugungsmessung,

Dissertation, Universität Erlange- Nürnberg,

[Wur2007] M. Wurm, B. Bodermann, R. Model, H. Groß,
Numerical analysis of DUV scatterometry on EUV masks,
Proc. SPIE **6617** (2007) 661716

[WWW01] versch. Autoren,
International Technology Roadmap for Semiconductors,
http://www.itrs.net, gelesen am 07.04.2008

[WWW02] T. Driscoll,
Schwarz-Christoffel toolbox for Matlab,
http://www.math.udel.edu/~driscoll/software/, gelesen am 03.04.2007

[WWW03] versch. Autoren,
Horiba Jobin Yvon,
http://www.horiba.com/, gelesen am 12.05.2009

[Yaa2007] B. Yaakobovitz, Y. Cohen, Y. Tsur,
Line edge roughness detection using deep UV light scatterometry,
Microelectronic Engineering **84** (2007) 619-625

[Yeh1980] P. Yeh,
Optics of Anisotropic Layered Media: A new 4x4 Matrix Algebra,
Surf. Sci. **96** (1980) 41-53

[Zai1994] S.H. Zaidi, S.L. Prins, J.R. McNeil, S.S.H. Naqvi,
Metrology sensors for advanced resists,
Proc. SPIE **2196** (1994) 341-351

[Zan2007] S. Zangooie, P. Herrera, A. Mesfin, C. Archie, M. Sendelbach,
Characterization of Capacitive 3D Deep Trench Mask Open Structures Using Scatterometry,
Proc. SPIE **6518** (2007) 651827

[Zig1997] D.H. Ziger, T.E. Adams, J.G. Garofalo,
Linesize effects on ultraviolet spectra,
Optical Engineering **36** (1997) 1 243-250

Liste der Veröffentlichungen

Im Rahmen dieser Arbeit sind folgende Veröffentlichungen und Tagungsbeiträge entstanden:

- P. Reinig, R. Dost, M. Mört, T. Hingst, U. Mantz, T. Schuster, N. Kerwien, J. Kauffmann, W. Osten,
  Potential and limits of scatterometry: A study on bowed profiles and high aspect ratios,
  2nd European Scatterometry Workshop 2004, 3.-5. Mai 2004, Porquerolles, Frankreich
- J.M. Nivet, T. Schuster, K. Körner, U. Droste, H.J. Tiziani, W. Osten,
  A new calibration scheme for three-dimensional depth-scanning fringe projection measurement method,
  Proc. SPIE **5457** (2004) 334-343
- K. Körner, U. Droste, T. Schuster, W. Osten,
  Depth-scanning Techniques in Optical 3-D Metrology,
  VDI-Berichte Nr. 1844 (2004) 339-348
- T. Schuster, N. Kerwien, W. Osten, P. Reinig, M. Mört, T. Hingst, U. Mantz,
  Effect of linewidth fluctuations and sidewall roughness in scatterometry,
  Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO Europe), 12.-17. Juni 2005, München
- T. Schuster, J. Kauffmann, N. Kerwien, H.J. Tiziani, W. Osten, P. Reinig,
  Scatterometrie an Kreuzgitterstrukturen,
  Proceedings der DGaO Jahrestagung 2006, Weingarten
- T. Schuster, N. Kerwien, S. Rafler, W. Osten, J. Ruoff,
  Convergence improvement for the RCWA considering crossed gratings using normal vector fields,
  4th IISB Lithography Simulation Workshop 2006 (Hersbruck)
- N. Kerwien, T. Schuster, S. Rafler, W. Osten, M. Totzeck,
  Semi-rigorous Diffraction Theory: Realization of Classical Concepts in the Framework of Electrodynamics,
  J. Opt. Soc. Am. A **24** (2007) 4 1074-1084
- T. Schuster, J. Ruoff, N. Kerwien, S. Rafler, W. Osten,
  Normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings,
  J. Opt. Soc. Am. A **24** (2007) 9, 2880-2890

- T. Schuster, S. Rafler, W. Osten, P. Reinig, T. Hingst,
  Scatterometry from crossed grating structures in different configurations,
  Proc. SPIE **6617** (2007) 661715
- T. Schuster, K. Frenner, S. Rafler, W. Osten,
  Optische Messtechniken im Nanobereich,
  in B. Michel (ed.): NanoScience 2007
- T. Schuster,
  Scatterometrie an Kreuzgitterstrukturen in verschiedenen Messkonfigurationen,
  23. Kolloquium Optik, ITO Universität Stuttgart, 2008
- K. Frenner, T. Schuster, S. Rafler, W. Osten,
  Modellgestützte hochauflösende optische Messtechnik für Mikro- und Nanostrukturen,
  in B. Michel (ed.): Microcar 2008
- S. Rafler, T. Schuster, K. Frenner, W. Osten, U. Seifert,
  Improvements on the simulation of microscopic images for the defect detection of nanostructures,
  Proc. SPIE **6922** (2008) 692215
- S. Rafler, P. Götz, M. Petschow, T. Schuster, K. Frenner, W. Osten,
  Investigation of methods to set up the normal vector field for the differential method,
  Proc. SPIE **6995** (2008) 69950Y
- P. Götz, T. Schuster, K. Frenner, S. Rafler, W. Osten,
  Simulation von Gitterbeugung mit der Normalenvektormethode,
  Proceedings der DGaO Jahrestagung 2008, Esslingen
- T. Schuster, S. Rafler, K. Frenner, W. Osten,
  Influence of line edge roughness (LER) on angular resolved and on spectroscopic scatterometry,
  Proc. SPIE **7155** (2008) 71550W
- P. Götz, T. Schuster, K. Frenner, W. Osten,
  Normal Vector Method for the RCWA with Automated Vector Field Generation,
  Optics Express 16 (2008) 22 17295-17301
- T. Schuster, S. Rafler, V. Ferreras Paz, K. Frenner, W. Osten:
  Fieldstitching method comprising Kirchhoff's approximation for description of small perturbations of perfectly periodic structures,
  6th IISB Lithography Simulation Workshop 2008 (Athen)

- T. Schuster, S Rafler, V. Ferreras Paz, K. Frenner, W. Osten,
  Fieldstitching with Kirchhoff-boundaries as a model based description for line edge roughness (LER) in scatterometry,
  Microel. Engin. **86** (2009) 1029-1032

Lebenslauf

07.08.1976	geboren in Illertissen
1983 – 1987	Grundschule Illertissen / Au
1987 – 1996	Gymnasium Kolleg der Schulbrüder Illertissen, Abitur
09 / 1996 – 09 / 1997	Zivildienst
10 / 1997 – 09 / 1999	Grundstudium der Physik an der Universität Ulm, Vordiplom
10 / 1999 – 06 / 2003	Hauptstudium der Physik an der Universität Ulm, Diplom Diplomarbeit in der Abteilung Halbleiterphysik
09 / 2003 - 10 / 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Optik der Universität Stuttgart
seit 11 / 2008	Entwicklungsingenieur bei der EADS Deutschland GmbH

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen sehr herzlich bedanken, die mich auf vielfältige Art und Weise bei der Fertigstellung dieser Dissertation unterstützt haben. Herrn Prof. Wolfgang Osten danke ich für die freundliche Aufnahme an seinem Lehrstuhl, sein fortwährendes Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Hauptberichts. Herrn Prof. Karl-Heinz Brenner danke ich für sein Interesse und das Abfassen des Mitberichts.

Großer Dank gebührt auch allen Kollegen am ITO. An erster Stelle ist hier Norbert Kerwien zu nennen, der mich in meiner Anfangszeit fachlich betreut und immer von neuem motiviert hat. Ebenso danke ich allen weiteren Kollegen der Arbeitsgruppe, insbesondere Karsten Frenner, Stephan Rafler und Valeriano Ferreras Paz für viele Diskussionen und das Korrekturlesen der Arbeit. Peter Götz danke ich für das Fortführen meiner Arbeiten zu Normalenvektorfeldern. Den Betreibern des ITO-Reinraums Thomas Schoder und Christof Pruß sowie Klaus Matthies vom IHT danke ich für ihre Mühe, ohne die ich nicht unter optimalen Laborbedingungen hätte messen können. Nchewah Angwafo danke ich für die Korrektur der englischen Zusammenfassung.

Weiterhin möchte ich mich bei allen Kooperationspartnern aus verschiedenen Unternehmen für den fachlichen Austausch und für die finanzielle Unterstützung bedanken. Ein Teil der vorgestellten Arbeiten wurden im Unterauftrag von Infineon, später Qimonda innerhalb der BMBF Projekte "Abbild" (FKZ 01M3154D) und "Abbild-Anschlussvorhaben" (FKZ 01M313154U) durchgeführt. Peter Reinig und seinen Kollegen von Infineon / Qimonda danke ich ganz herzlich für die stets gute und offene Zusammenarbeit. Ebenso danke ich Johannes Ruoff von Carl Zeiss für seinen Einsatz bei unseren gemeinsamen Arbeiten zu Normalenvektorfeldern in der RCWA und seinen schier grenzenlosen Perfektionismus beim Verfassen unserer gemeinsamen Publikation. Schließlich danke ich sehr herzlich Arie den Boef und seinen Kollegen von ASML für die offene und konstruktive Kooperation im letzten Jahr meiner Zeit am ITO.

Rückblickend danke ich auch allen Menschen, die mein Interesse und meine Begeisterung an der Physik und deren Anwendung in Ingenieursdisziplinen geweckt und gestärkt haben. Stellvertretend für viele sei hier mein Physiklehrer Hans-Wolfgang Valet genannt.

Meiner Frau Daniela danke ich für ihre Geduld und Unterstützung in der letzten Zeit der Fertigstellung. Meinen Eltern gebührt großer Dank für vielerlei Unterstützung auf meinem Weg bis zur Promotion.

Ulm, im Dezember 2009 Thomas Schuster

ISBN 978-3-923560-63-9