



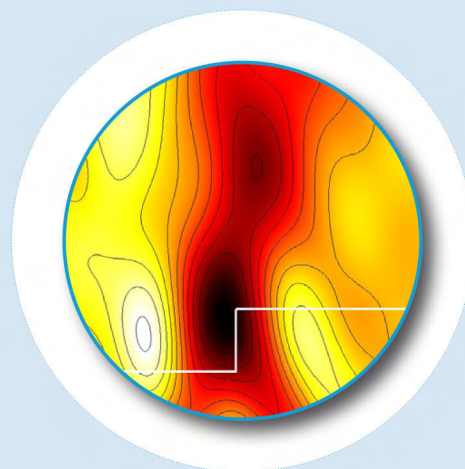
Berichte aus dem
Institut für Technische Optik

Nr. 58

INSTITUT FÜR
TECHNISCHE OPTIK
UNIVERSITÄT STUTTGART

Norbert Kerwien

Zum Einfluss von
Polarisationseffekten in der
mikroskopischen Bildentstehung



Dezember 2007



Universität Stuttgart

Zum Einfluss von Polarisationseffekten in der mikroskopischen Bildentstehung

Von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Dipl.-Phys. Norbert Kerwien

geboren in Blaubeuren

Hauptberichter: Prof. Dr. W. Osten

Mitberichter: Prof. Dr. H.P. Herzig

Tag der Einreichung: 21.02.2007

Tag der mündlichen Prüfung: 06.09.2007

Institut für Technische Optik der Universität Stuttgart

2007

ISBN 978-3-923560-57-8

D93 Stuttgart

Vorwort des Herausgebers

Die Ergebnisse der optischen Technologien erfahren inzwischen millionenfache Verbreitung und erreichen in allen gesellschaftlichen Zweigen einen Durchdringungsgrad, der nur mit der Mikroelektronik vergleichbar ist. Dem Nutzer offenbart sich dieser Wandel jedoch nicht auf den ersten Blick. In einer Vielzahl von modernen Geräten und Dienstleistungen spielen optische Prinzipien eine entscheidende Rolle, obwohl diese für den Anwender nahezu unsichtbar bleiben. Miniaturisierung ist hier eines der Schlüsselworte, dessen Konsequenzen sich insbesondere in der Evolution der Speicher- und Prozesstechnik offenbaren. Ausgeklügelte Verfahren der Fotolithografie, wie die Immersionslithografie und das Double Patterning, ermöglichen inzwischen Linienbreiten – sogenannte kritische Dimensionen, die geringer als 30 nm ausfallen. Berücksichtigt man, dass die aktuell verwendete Wellenlänge der Belichtungssysteme bei 193 nm liegt, dann wird damit die klassische Beugungsgrenze deutlich unterschritten.

Im gleichen Maße, wie sich die Strukturbreiten verringern, steigt die Bedeutung der mikroskopischen Messtechnik für die Prozesssicherung und Qualitätskontrolle. Bei der Vermessung der lateralen Dimensionen von Strukturen, die in der Größenordnung der Wellenlänge liegen, wird der Bildentstehungsprozess maßgeblich durch Beugung beeinflusst. Als zentrale Aufgabe für die hoch auflösende optische Messtechnik ergibt sich daher, die Beugungsbegrenzung der optischen Abbildung, die sich im Rayleighschen Auflösungskriterium widerspiegelt, weiter zu erkunden und neue Wege der Strukturerkennung und Identifikation mit optischen Mitteln zu finden. Neben der Wellenlänge und der numerischen Apertur liefert der sogenannte Prozessfaktor k , in dem alle Einflüsse des Messverfahrens auf das Auflösungsvermögen des Gesamtsystems zusammengefasst sind, einen wichtigen Ansatzpunkt. Optimierte Beleuchtungstechniken und Pupillenfilter finden hier ebenso Berücksichtigung wie jene Techniken, die das zu untersuchende Objekt in den eigentlichen Abbildungsprozess mit einbeziehen.

Um das Auflösungsvermögen über die klassische Grenze der linearen Abbildung zu noch kleineren Dimensionen hin zu verschieben, wurden insbesondere in den letzten zehn bis fünfzehn Jahren Messtechniken voran getrieben, die spezielle physikalisch-optische Wechselwirkungseigenschaften des Messobjekts mit dem Lichtwellenfeld nutzen. Das Verständnis dieser Wechselwirkung und die zielstrebige Verbindung von auf gesicherten physikalischen Modellen beruhenden Simulationsrechnungen mit experimentell gewonnenen Daten liefern

den entscheidenden methodischen Ansatz im Sinne einer modellbasierten Strukturrekonstruktion anstelle einer konventionellen Vermessung.

In diesem Kontext ist die vorliegende Arbeit angesiedelt, mit der Herr Kerwien durch den gezielten Einsatz ausgefeilter Simulationswerkzeuge auf Basis der Maxwell'schen Theorie in Kombination mit mikroskopischen Messtechniken einen wichtigen Beitrag zur Erhöhung der Genauigkeit optischer Messmethoden insbesondere in der Halbleitermetrologie leistet. Zentrale Bedeutung kommt dabei der Berücksichtigung elektromagnetischer Effekte in der Bildentstehung zu, die sich insbesondere in der Polarisationsabhängigkeit optischer Bilder äußert und folglich den Übergang von der skalaren zur rigorosen vektoriellen Behandlung entsprechender Phänomene nahelegt. Durch die gezielte Kombination von modellgestützter Simulation und praktischer Messung beschreitet Herr Kerwien in der vorliegenden Arbeit neue Wege, die zur Aufklärung von polarisationsabhängigen Signaturen an Objekten mit Strukturdimensionen im Wellenlängenbereich und darunter führen.

Stuttgart, im November 2007

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

Inhaltsverzeichnis

Abstract	xiii
1 Einleitung	1
1.1 Motivation und Kontext der Arbeit	1
1.2 Gliederung der Arbeit	4
2 Grundlagen der Elektrodynamik	7
2.1 Die Maxwell-Gleichungen	7
2.2 Die Wellengleichungen der Optik	10
2.2.1 Wellengleichung in inhomogenen Medien	10
2.2.2 Wellengleichung in homogenen Medien	12
2.3 Elementare Lösung der homogenen Wellengleichung	13
3 Grundlagen der Beugungstheorie	16
3.1 Lösungsansätze in der Beugungstheorie	17
3.2 Klassische Beugungstheorie	19
3.2.1 Kirchhoffsche Näherung	23
3.2.2 Debye-Näherung	24
3.2.3 Vektorielle Formulierung der klassischen Beugungstheorie	25
3.2.4 Inkonsistenzen des klassischen Randwertproblems und das Konzept der Randbeugungswelle	27
3.2.5 Anwendungsbereiche der klassischen Beugungstheorien	28
3.3 Analytische Lösungen rigoroser Beugungsprobleme	29
3.3.1 Analytische Lösungen für ideale Leiter	30
3.3.2 Analytische Lösungen mit Hilfe des Separationsansatzes	31
3.4 Numerische Lösungsverfahren der rigorosen Beugung	33
3.4.1 Überblick über die gängigen Verfahren	33
3.4.2 Rigorous Coupled Wave Analysis	35

3.5	Semi-rigorese Beugungstheorie	49
3.5.1	Die Grundidee der rigorosen Kirchhoffschen Approximation	49
3.5.2	Mathematische Formulierung des semi-rigorosen Modells	51
3.5.3	Anwendungsbeispiel	56
3.5.4	Gültigkeitsbereich der semi-rigorosen Beugungstheorie	60
4	Grundlagen der Polarisationsoptik	66
4.1	Die Beschreibung polarisierten Lichts	67
4.1.1	Polarisationseigenschaften von kohärentem Licht	67
4.1.2	Polarisationseigenschaften von partiell kohärentem Licht	68
4.2	Beschreibung des linearen Polarisationsstransfers	72
4.2.1	Jones-Matrix-Kalkül	74
4.2.2	Müller-Matrix-Kalkül	81
5	Grundlagen der physikalisch-optischen Bildsimulation	86
5.1	Eigenschaften der Freiraumpropagation	87
5.1.1	Fresnel-Näherung	88
5.1.2	Fraunhofer-Näherung	89
5.1.3	Die Debye-Näherung	93
5.1.4	Polarisationsaspekte der Freiraumpropagation	94
5.2	Die perfekte Abbildung	97
5.3	Die praktische Umsetzung der mikroskopischen Bildsimulation	101
5.3.1	Der Übergang vom Raytracing zur Beugungstheorie	102
5.3.2	Das Pupillenkonzept der optischen Abbildung	103
5.3.3	Die Abbesche Abbildungstheorie	106
5.4	Elektromagnetische Beugungstheorie in der optischen Abbildung	114
5.4.1	Kohärente Beleuchtung	116
5.4.2	Partiell kohärente Beleuchtung	118
5.5	Gültigkeitsbereich des Simulationsmodells	119
6	Messverfahren der bildgebenden Polarimetrie	124
6.1	Experimenteller Gesamtaufbau	125
6.2	Bildgebende Polarimetrie im DUV	128
6.2.1	Messverfahren	129
6.2.2	Korrekturverfahren	130

7	Bildgebende Polarimetrie an Mikrostrukturen	135
7.1	Diskussion grundlegender Polarisierungseffekte	137
7.2	Kohärenzmatrix-Mikroskopie an Silizium-Kanten	140
7.3	Physikalischer Ursprung polarisationsoptischer Signaturen	144
7.4	Rekonstruktionspotential der bildgebenden Polarimetrie	148
7.4.1	Vergleich von Messung und Simulation	148
7.4.2	Einfluss des Abbildungssystems auf polarisationsoptische Größen . .	151
7.4.3	Abhängigkeit der polarisationsoptischen Signaturen von den Struk- tureigenschaften	155
7.4.4	Dekorrelation durch Streuprozesse	162
7.5	Polarisationssignaturen an Zylinderstrukturen	169
8	Polarisationstransfer durch Mikro- und Nanostrukturen	179
8.1	Kohärenter Polarisationstransfer	180
8.1.1	Ortsaufgelöste Jones-Matrizen der Mikrostrukturen	180
8.1.2	Entwicklung nach Pauli-Spin-Matrizen	182
8.1.3	Eigenwert-Zerlegung	184
8.1.4	SVD-Zerlegung	186
8.1.5	Polare Zerlegung	191
8.2	Polarisationstransfer im partiell kohärenten Lichtwellenfeld	191
8.2.1	Ortsaufgelöste Müller-Matrizen der Mikrostrukturen	193
8.2.2	Interpretation der Müller-Matrixelemente	195
8.2.3	Objektrekonstruktion	197
8.2.4	Müller-Matrix-Bildgebung: Ein neuer Weg zur Überauflösung? . . .	200
9	Zusammenfassung und Ausblick	206
	Literaturverzeichnis	208

Abkürzungsverzeichnis

∇	Nabla-Operator
Δ, ∇^2	Laplace-Operator
rot	Rotation
div	Divergenz
∂	partielle Ableitung
\times	Kreuzprodukt
\otimes	Dyadisches Produkt
\oplus	inkohärente Summe
i	imaginäre Einheit, $i = \sqrt{-1}$
*	konjugiert komplex
$+ \equiv (*)^T$	adjungiert
m, ℓ, μ, ν, j	Laufindizes
\mathcal{F}	Fourier-Transformation
\mathcal{F}^{-1}	inverse Fourier-Transformation
$F_{(j)}$	Fourier-Koeffizienten
$ $	Absolutbetrag
$\langle \rangle$	Mittelwertbildung
I	Einheitsmatrix
0	Nullmatrix
σ_0	Einheitsmatrix (zweidimensional)
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	Pauli-Matrizen
U, V	Tranformationsmatrizen

tr	Spur einer Matrix
$\ \parallel$	Determinante einer Matrix
$\lambda_{1,2}$	Eigenwerte
$\tilde{\mathbf{e}}_{1,2}$	Eigenvektoren (zweidimensional)
σ_j	Singulärwerte
$\tilde{\mathbf{u}}_j$	links-singuläre Vektoren
$\tilde{\mathbf{v}}_j$	rechts-singuläre Vektoren
$\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$	Einheitsvektoren in x-, y- und z-Richtung
\vec{r}	Ortsvektor
\vec{r}_t	Ortsvektor in der xy-Ebene
x, y, z	Ortskoordinaten
r	Radialkomponente der Ortsvektors
θ	Polarwinkel
ϕ	Azimutwinkel
α, β, γ	Richtungskosinusse in x-, y- und z-Richtung
Ω	Raumwinkel
θ_R	Drehwinkel
R	Abstand zweier Punkte
\hat{R}	Abstand zum Koordinatenursprung
$x', y', \xi, \eta, \xi', \eta'$	weitere Ortskoordinaten
d	Dicke
D	Durchmesser
\mathcal{V}	Volumen
\mathcal{S}	Flächenstück
$d\sigma$	differentielles Flächenelement
\vec{n}	Normalenvektor eines Flächenelements
\mathcal{A}	Apertur (-fläche)
\mathcal{C}_A	Aperturrand

$d\vec{s}$	differentielles Wegstück
t	Zeit
ω	Kreisfrequenz
φ	Phase
\hat{u}	komplexe Feldamplitude eines skalaren Wellenfeldes
u	komplexe Feldamplitude einer harmonischen skalaren Welle
U_{3D}	3D-Spektrum der skalaren Planwellenzerlegung
U_{2D}	2D-Spektrum der skalaren Planwellenzerlegung
\vec{U}	komplexes Vektorfeld
G, \vec{G}	skalare bzw. vektorielle Greensche Funktion
\vec{E}	elektrische Feldstärke
\vec{D}	dielektrische Verschiebung
\vec{H}	Magnetfeld
\vec{B}	magnetische Induktion
\vec{M}	Magnetisierung
\vec{P}	elektrische Polarisation
\vec{S}	Poynting-Vektor
ε_0	elektrische Feldkonstante
μ_0	magnetische Feldkonstante
Z_0	Wellenimpedanz des Vakuums
c_0	Lichtgeschwindigkeit
ε_r	Dielektrizitätskonstante
μ_r	magnetische Permeabilität
n, \tilde{n}	reeller bzw. komplexer Brechungsindex
κ	Extinktionskoeffizient
σ	Leitfähigkeit
ρ	Ladungsdichte
$\hat{\rho}$	Oberflächenladungsdichte

\vec{j}	Stromdichte
\hat{j}	Oberflächenstromdichte
λ	Wellenlänge
\vec{k}	Wellenvektor
\vec{k}_t	Transversalkomponente des Wellenvektors in der xy-Ebene
\vec{k}_z	Normalkomponente des Wellenvektors in z-Richtung
$k, (k_0)$	Wellenzahl (im Vakuum)
M	Modenzahl
Λ	Gitterperiode
\mathbf{R}_s	Array der rigorosen Reflexionsampl. senkrecht zur Beugungsebene
\mathbf{R}_p	Array der rigorosen Reflexionsampl. parallel zur Beugungsebene
\mathbf{T}_s	Array der rigorosen Transmissionsampl. senkrecht zur Beugungsebene
\mathbf{T}_p	Array der rigorosen Transmissionsampl. parallel zur Beugungsebene
$\tilde{\mathbf{R}}_s, \tilde{\mathbf{R}}_p, \tilde{\mathbf{T}}_s, \tilde{\mathbf{T}}_p$	semi-rigore Beugungsamplituden
R_f	Reflektivität
f, f'	objekt- und bildseitige Brennweite
M_β	Abbildungsmaßstab
\mathcal{N}	Fresnel-Zahl
NA	Numerische Apertur
$\mathbf{p}, (p_x, p_y)$	Pupillenkoordinaten (in x- und y-Richtung)
W	skalare Wellenfrontaberration
A	skalare Apodisationsfunktion
P	Pupillenfunktion
\mathbf{J}_P	Jones-Matrix-Pupille
\mathcal{T}	Polarisations-Transformationsmatrix
Φ_e	Strahlungsfluss
I_e	Strahlstärke
\mathcal{L}	Beleuchtungsamplitude

\mathcal{I}	Gesamtintensität
ψ	Azimutwinkel des Polarisationsvektors
χ	Elliptizitätswinkel der Polarisationsellipse
\mathcal{E}	Exzentrizität der Polarisationsellipse
\mathcal{J}_{xy}	Korrelationsfaktor
$ \mathcal{J}_{xy} $	Kohärenzgrad
\mathcal{P}	Polarisationsgrad
$\tilde{\mathbf{E}}$	Jones-Vektor (zweidimensional)
\mathbf{E}	Kohärenzmatrix
\mathbf{s}	Stokes-Vektor
s_0, s_1, s_2, s_3	Stokes-Vektor-Komponenten
\mathbf{J}	Jones-Matrix
\mathbf{M}	Müller-Matrix
\mathcal{D}	Diattenuation
\mathcal{R}	Retardance
\mathcal{G}	Gain, Transmittance
$\mathcal{P}ol$	Polarisationsvermögen
VIS	Sichtbarer Spektralbereich ($\lambda = 400 \text{ nm} \dots 700 \text{ nm}$)
DUV	Spektralbereich im tiefen Ultraviolett ($\lambda = 193 \text{ nm} \dots 260 \text{ nm}$)

Abstract

This thesis investigates polarization effects in spatially resolved high resolution optical metrology and uses the principles of model-based object reconstruction to reveal structure features in the sub-lambda range. Because of the close interrelation between the electromagnetic light-object interaction and the vector nature of light, polarization takes up a key role for the development of new metrology strategies in optical imaging. Different structures varying in the sub-lambda range imprint characteristic features to the partially polarized light field. This can be used for object reconstruction from a microscopic image. The tight interconnection between modeling and simulation on the one hand and polarimetric measurement techniques on the other hand defines the structure of this thesis. Besides describing the theoretical basis of electromagnetic image simulation, the development of a simplified diffraction model is presented as well as polarization optical experiments and a methodical study of polarization signatures.

Motivation and objective of the thesis

Although diffraction limited in spatial resolution to the range of wavelength, optical measurement techniques compete successfully with other established high resolution metrology methods like Scanning Force Microscopy and Scanning Electron Microscopy. Those show physical resolution capabilities below 1 nm, which exceeds the optical performance by about two orders of magnitude. That optical metrology is still competitive is due to its well-known technical advantages, like high throughput, excellent in situ capabilities, and the non-invasive character. Moreover, optical measurement techniques often draw level with or even beat in some cases their competitors in accuracy and reproducibility. In wafer and mask metrology the accuracy is today 10-15 nm. However, to further exploit the potential of optical metrology, one has to use all information that light provides for metrological purposes.

Light as an electromagnetic wave is described by four fundamental quantities: intensity, wavelength, polarization and coherence. All four are influenced by the interaction with an

object and therefore the light field is imprinted with special properties characteristic for the probe. Different optical measurement methods use one or more of these four information channels in order to receive quantitative information about the main features of the investigated object.

The wavelength of light typically provides information about the object's material composition as spectral transmission and absorption depend strongly on this property. This is used for example in X-ray imaging or for remote sensing in the visible or infrared regime of light. The macroscopic shape of an object in turn causes a spatial deformation of the light-field's wave front. This can be used by interferometric or holographic techniques to reconstruct the object's topography.

Polarization is a consequence of the vector nature of light. The evaluation of the polarization information by polarimetry allows therefore insight into the electromagnetic characteristics of light-sample interaction. This becomes more and more important, when the dimensions of the object are close to the wavelength. The polarization signature of light becomes a characteristic fingerprint of the structure. Especially in high resolution metrology also the coherence properties of light can be applied gainfully in this context. Scattering by deterministic and statistic structures on the micro- and nano-scale causes a characteristic decorrelation of the optical signal. Polarization effects of a partially coherent light field therefore play a key role in developing new optical measurement techniques for nanometrology. To exploit this potential one requires a deep theoretical understanding of the light-structure interaction in the framework of electrodynamics.

When measuring in the nanometer range it becomes apparent, that the details of physical optical interaction cause a pronounced discrepancy between the measured and true values of optical measurements. The reason for this poor accuracy is a systematic misinterpretation due to following our everyday experience, that is mainly based on the principles of geometrical optics. In this simple model the light-field emerging from an object simply resembles the topography and its transmission or reflectivity, respectively. Optical interaction in the nanometer and micrometer range however is much more entangled. The optical image generation is predominantly influenced by electromagnetic diffraction. The influence of the material system, effects like field-displacements, optical resonances and excitation of plasmons come into play. Precise interpretation of the measured data must take these effects into account – far beyond the intuitive and simple picture of optical image formation. This is achieved by incorporating rigorous simulation tools based on electromagnetic theory in the measurement.

In modeling a further point gains importance. Especially when considering technical surfaces one typically knows rather well the examined structures and is only interested in deviations of single, well-defined quantities from their target values. This combination of a large amount of a-priori knowledge about the examined structures on the one hand and the availability of sophisticated simulation tools on the basis of Maxwell's theory on the other hand enables us to push the accuracy of optical metrology methods in the range of a few nanometers. In this case the high demand for resolution in a classical sense is replaced more and more by the challenging needs of precise model-based object reconstruction, which take into account geometrical data, shape and material composition of the object as well as parameters of the measurement system like polarization state and coherence properties. Geometric optical image interpretation, which is the foundation of our optical perception and leads to linear system theory, loses its importance and validity in the field of nanometrology. Beyond the classical approach the details of electromagnetic interaction build the basis of a completely new measurement concept that enables us to acquire highly precise data about the object far beyond the optical resolution limit. This is true for spatially resolving methods like microscopy but also for integrally working methods like ellipsometry and zero order scatterometry. Especially the latter two carry on the idea consequently, to acquire high precision geometrical data of nanostructures in the sub-lambda range at the expense of knowledge, where exactly the structure is located. So in the last years, ellipsometry and scatterometry have been established as important measurement techniques in process control of high-end semiconductor components, like processors and flash memory. This thesis concentrates on polarization effects in spatially resolved high resolution optical metrology. Principles of model-based object reconstruction reveal structure features in the sub-lambda range. The close relation between modeling and simulation on the one hand and polarimetric measurement techniques on the other hand outlines this thesis.

Structure and contributions of the thesis

This thesis separates into three parts: a theoretical part, an experimental part and a methodical part. Based on each other they provide the numerical and experimental tools to exploit the polarization transfer of micro- and nanostructures for metrological purposes. The first part (chapter 1-5) describes the theoretical basis of rigorous simulation of microscopic imaging and the simulation tool MicroSim. This tool is developed and used at the Institut für Technische Optik for different simulation tasks like scatterometry, diffrac-

tometry and electromagnetic image simulation. This thesis is part of this development, the main focus being the incorporation of electromagnetic interaction processes into microscopic image simulation.

With regard to the theory of optical imaging, there exists a multitude of excellent textbooks, which treat imaging on the foundation of scalar Fourier-Optics – especially in paraxial approximation. In this formalism the object is described by a scalar transfer function, and electromagnetic effects of light-sample interaction are not considered. Also, since the classical papers of Wolf and Richards plenty of publications about focusing of electromagnetic fields with high numerical aperture have been published, which take vector effects of interference and the conservation of energy explicitly into account. Nevertheless there currently remains a gap for a fundamental and comprehensive treatise of how to incorporate rigorous simulation tools into the simulation of microscopic imaging. Indeed there are some publications in the field of microscopy and lithography that apply such simulation models. In first line, however, they concentrate on applications rather than on a fundamental description of the simulation model. In these papers the fundamental assumptions and limits of the model do not become apparent. Based on the previous chapters, chapter 5 provides therefore a comprehensive description of the simulation model that is used throughout this thesis. Herefrom, further potential for development but also limitations of the model become clear.

By treating the interaction process between the object and the light-field on the basis of electrodynamics, the well-known concepts of microscopic imaging theory are extended considerably. The integration of rigorous simulation models into microscopic image simulation can push the reconstruction capabilities of model-based metrology deeply into the sub-lambda regime. Nevertheless the concepts of scalar imaging theory keep playing an important role in the extended model, too. Their basics will be discussed in chapter 3. Special attention is paid to the inherent approximations of these methods and the conclusions for their applicability in rigorous image simulation.

In this thesis Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA) is applied for electromagnetic simulations. The model is described in section 3.4. Rigorous simulations treat the complete electromagnetic diffraction problem. Their application in optical image simulation becomes especially important, when the dimensions of the investigated structures are in the range of the wavelength or polarization effects are important for image formation. As pointed out before, they play a key-role in model-based metrology which enables the reconstruction of structure features in the nanometer range. The associated calculation times

however limit the application in practice. Especially when investigating 3D structures, a completely rigorous modeling can become very laborious. In this case the simulation of rigorous diffraction spectra for imaging with high numerical aperture of illumination can take up to several hours or even days on a standard PC. Therefore sophisticated simplified simulation models become increasingly important in the near future.

When the structure dimensions are in the range of several microns and proximity effects can be neglected, a semi-rigorous simulation model is applicable without appreciable loss of accuracy. It is presented in section 3.5. As a main feature it is based on the concepts of scalar diffraction theory, but determines the boundary values of the diffraction problem by fully rigorous simulation methods of stratified medium theory. Using this method, an efficient treatment of many diffraction problems becomes possible. For typical problems the gain of computation time is in the order of three magnitudes. Moreover, the direct comparison with fully rigorous methods allows the aimed study of rigorous effects in the optical imaging process. An example is given in section 7.3.

The second part of this thesis (chapter 6-7) presents polarization optical experiments. A high-resolution imaging-polarimeter for deep UV ($\lambda = 248$ nm) was realized that allows to capture the complete polarization information in a partial coherent microscopic image. On that basis measurements were performed that represent a considerable extension of the current state of the art. The measurement of the spatially resolved coherency matrix field of a structure provides deep insight into the interaction behavior of the structure like diattenuation and retardance. Furthermore also decorrelation processes, described by the degree of polarization and the degree of coherence, could be measured quantitatively in the microscopic image for the first time. Different examples in chapter 7 proof the benefit of polarization for the reconstruction of sub-lambda features. Direct comparison of measurement and simulation reveal the potential of model-based metrology.

The thesis closes with a methodical study in chapter 8. The idea of model-based object reconstruction on the basis of polarization transfer is treated in a general mathematical context. The applied mathematical tools are developed in chapter 4. The polarization transfer is described in Jones- and Mueller-Matrix formalism. Special features of the object's structure result in characteristic features of the spatially resolved matrixes. They therefore become a polarization optical fingerprint that can be used for object identification. This is not only the basis for new metrology concepts but can also be helpful for the design of optically functional nanostructures.

1 Einleitung

1.1 Motivation und Kontext der Arbeit

Betrachtet man das räumliche Auflösungsvermögen, so unterliegt die optische Bildgebung anderen Messverfahren wie der Rasterelektronenmikroskopie oder Rasterkraftmikroskopie deutlich. Deren Auflösungsvermögen ist mit unter 1 nm um zwei Größenordnungen besser. Dass sich optische Technologien auch im Nanometerbereich gegenüber diesen Alternativen behaupten können, liegt einerseits an den Kernvorteilen der optischen Messtechnik. Zu ihnen gehören Robustheit, Zerstörungsfreiheit, hoher Durchsatz und die kostengünstige Umsetzung in fast jeder industriellen Umgebung. Andererseits erreichen optische Inspektionsmethoden metrologische Genauigkeiten im gleichen Größenordnungsbereich wie die Konkurrenzverfahren – das sind in der bildgebenden Inspektion von Lithographiemasken derzeit etwa 10-15 nm [1]. Um das Potential der optischen Messtechnik auszuschöpfen, müssen allerdings alle Informationskanäle, die das Lichtwellenfeld bietet, genutzt und gezielt für messtechnische Zwecke eingesetzt werden.

Licht ist eine elektromagnetische Welle, die durch vier grundlegende physikalische Größen beschrieben wird: die Intensität, die Wellenlänge, die Polarisation und die Kohärenz. Alle vier Grundgrößen werden durch die Wechselwirkung des Lichtwellenfeldes mit einem Objekt verändert und prägen dem Lichtwellenfeld spezielle, für das Objekt charakteristische Eigenschaften auf. Genau diese Tatsache wird in der optischen Messtechnik in vielfältiger Weise genutzt. Mit unterschiedlichen Messverfahren bedient man sich einem oder mehreren dieser vier Informationskanäle, um quantitative Kenngrößen des Objektes zu erfassen. Hierzu gehören insbesondere die Materialzusammensetzung, die Form und die Größe des Objektes. Eine strikte Trennung der vier Informationskanäle ist dabei unmöglich, da die vier Grundgrößen wechselseitig miteinander verknüpft sind. Dennoch lassen sich gewisse Grundtendenzen festhalten.

Aufgrund der starken Materialabhängigkeit des spektralen Transmissions- und Absorptionsverhaltens von Objekten gibt uns die Wellenlänge des Lichts typischerweise darüber Auskunft, aus welchen Materialien das Objekt zusammengesetzt ist. Dies macht sich die Röntgenbildgebung genauso zu Nutze wie die Fernerkundung im sichtbaren bis in den fernen infraroten Spektralbereich.

Die makroskopische Form des Objektes wiederum bewirkt eine räumliche Deformation der Phasenverteilung des Lichtwellenfeldes. Diese kann durch interferometrische oder holographische Verfahren gemessen werden, und so kann die Objektform aus der Phaseninformation des Lichtwellenfeldes rekonstruiert werden.

Die Polarisierung ist Ausdruck für die Vektornatur des elektromagnetischen Lichtwellenfeldes. Die Vermessung der Polarisationsinformation durch polarimetrische Verfahren erlaubt also einen Einblick in die elektromagnetische Natur der Licht-Objekt-Wechselwirkung. Diese gewinnt aber gerade dann an Bedeutung, wenn die Dimensionen des Objektes in den Bereich der Wellenlänge kommen. Insbesondere in der hochauflösenden Metrologie können hierbei auch die Kohärenzeigenschaften des Lichts gewinnbringend eingesetzt werden. Streuprozesse an deterministischen oder statistischen Strukturen auf Mikro- und Nanoskala bewirken eine charakteristische Dekorrelation des Signals. Polarisierungseffekte in einem partiell kohärenten Lichtwellenfeld spielen daher eine Schlüsselrolle bei der Entwicklung neuartiger optischer Messverfahren in der Nanometrologie.

Unabdingbare Voraussetzung zur Ausschöpfung dieses Potentials ist ein tiefes theoretisches Verständnis der elektromagnetischen Wechselwirkungsprozesse, die sich zwischen dem Lichtwellenfeld und dem zu untersuchenden Objekt abspielen. Die Details der physikalisch-optischen Wechselwirkung sorgen nämlich dafür, dass die gemessenen Werte drastisch von den wahren Werten abweichen. Die Ursache der geringen Genauigkeit ist die systematische Fehlinterpretation optischer Messungen im Nanometerbereich, die auf der Erfahrung unseres alltäglichen Sehens nach den Prinzipien der geometrisch-optischen Reflexion beruht. Das reflektierte Feld, das vom Objekt ausgeht, folgt danach einfach der Oberflächentopographie beziehungsweise der Oberflächenreflektivität. Die optische Wechselwirkung in der Mikro- und Nanotechnik ist jedoch viel komplizierter. Die optische Bildentstehung wird hier maßgeblich durch Beugungseffekte bestimmt. Hinzu kommt der Einfluss des Materialsystems, der sich in Feldverdrängungseffekten, optischen Resonanzen und Elementaranregungen wie Plasmonen äußert. Für die richtige Messwertinterpretation ist daher die Berücksichtigung dieser Effekte über die intuitive Vorstellung der optischen Bildentstehung hinaus unabdingbar. Dies geschieht durch die Einbindung von Simulationswerkzeugen auf

Basis der elektromagnetischen Theorie in die Bildinterpretation und quantitative Bildauswertung.

Als weiterer wesentlicher Punkt bei der Vermessung technischer Oberflächen kommt hinzu, dass man typischerweise die zu untersuchenden Strukturen sehr genau kennt und nur an Abweichungen einzelner wohl definierter Größen vom Soll interessiert ist. Diese Kombination aus einem hohen Maß an a-priori-Wissen über die Struktur einerseits und leistungsfähigen Simulationswerkzeugen auf Basis der Maxwellschen Theorie andererseits erlaubt es, die Genauigkeit optischer Messmethoden insbesondere in der Halbleitermetrologie in den Bereich weniger Nanometer voranzutreiben. In diesem Sinne wird die Notwendigkeit, Strukturdetails im herkömmlichen Sinne auflösen zu können, immer mehr durch eine hochpräzise modellbasierte Objektrekonstruktion ersetzt. Die geometrisch-optische Bildinterpretation, die die Grundlage unserer visuellen Wahrnehmung darstellt und in die lineare Systemtheorie mündet, verliert im Feld der Nanooptik ihre Bedeutung. Vielmehr bilden die Details der elektromagnetischen Wechselwirkung die Basis eines vollkommen neuen Messkonzepts, das weit jenseits des klassischen optischen Auflösungsvermögens hochgenau auf Objektdaten wie dimensionelle Größen, Form und Materialzusammensetzung schließen lässt. Dies trifft auf ortsauflösende mikroskopische Verfahren zu, aber auch auf integral arbeitende Verfahren wie die Ellipsometrie und die Scatterometrie. Die letztgenannten Messmethoden führen konsequent den Gedanken fort, auf Kosten der räumlichen Information, d.h. wo genau Strukturdetails lokalisiert sind, hochpräzise dimensionelle Daten über (periodisch angeordnete) Nanostrukturen zu bekommen. So haben sich in den letzten Jahren ellipsometrische und scatterometrische Messverfahren als Grundsäulen in der Prozesskontrolle von High-End-Halbleiterstrukturen, wie sie in Prozessoren und Speicherbausteinen vorkommen, etabliert.

Die vorliegende Arbeit setzt sich mit Polarisierungseffekten in der hochauflösenden bildgebenden Metrologie auseinander. Sie greift dabei im Kern auf Konzepte der modellbasierten Objektrekonstruktion zurück. Durch die enge Verknüpfung zwischen der elektromagnetischen Licht-Objekt-Wechselwirkung und den Vektoreigenschaften des Lichtwellenfeldes wird die Polarisation zum Schlüssel für die Entwicklung neuer Messkonzepte der bildgebenden Metrologie. Die Arbeit demonstriert anhand verschiedener Beispiele die Leistungsfähigkeit dieses Messkonzeptes. Verschiedene Strukturmerkmale, die im Sublambdabereich variieren, prägen einem partiell polarisierten Lichtwellenfeld im mikroskopischen Bild charakteristische Merkmale auf, die zur Objektrekonstruktion herangezogen werden. Diese enge Verzahnung zwischen Modellierung und Simulation einerseits und polarimetrischer

Messtechnik andererseits spiegelt sich auch in der Struktur der Arbeit wieder. Die gewonnenen Ergebnisse erlauben es nicht nur, die bildgebende Metrologie in den Sublambdabereich voranzutreiben, sondern die Visualisierung elektromagnetischer Wechselwirkungseffekte im mikroskopischen Bild hilft darüber hinaus, die Details der physikalisch-optischen Wechselwirkungseffekte von Nanostrukturen mit einem Lichtwellenfeld besser zu verstehen. Diese Erkenntnisse können auch unmittelbar für die Optimierung scatterometischer und diffraktometrischer Messverfahren verwendet werden.

1.2 Gliederung der Arbeit

Die Arbeit gliedert sich in drei Hauptteile: einen Theorieteil, einen Experimentaltel und einen methodischen Teil. Aufeinander aufbauend stellen sie die numerischen Werkzeuge und experimentellen Messverfahren vor, mit denen der Polarisationsstransfer durch Mikro- und Nanostrukturen für metrologische Zwecke genutzt werden kann.

Der erste Teil (Kapitel 1-5) beschreibt die theoretischen Grundlagen des Simulationswerkzeugs MicroSim, das am Institut für Technische Optik für verschiedene Simulationsaufgaben im Bereich der Scatterometrie, der Diffraktometrie und der elektromagnetischen Bildsimulation entwickelt und eingesetzt wird. In diese Entwicklung gliedert sich auch die vorliegende Arbeit ein. Der Fokus der Darstellung liegt dabei auf der Einbindung elektromagnetischer Wechselwirkungseffekte in die mikroskopische Bildsimulation.

Betrachtet man die Theorie der optischen Abbildung, so existiert eine Fülle ausgezeichnete Lehrbücher, die den Abbildungsprozess auf Basis der skalaren Fourier-Optik beschreiben. Sie greifen dabei insbesondere auf die paraxiale Näherung zurück. In diesen Darstellungen wird das Objekt durch eine einfache skalare Transferfunktion beschrieben, Polarisations-effekte im Wechselwirkungsprozess werden nicht berücksichtigt. Andererseits sind seit den klassischen Veröffentlichungen von Wolf und Richards zahlreiche Beiträge zur Fokussierung hochaperturiger elektromagnetischer Felder erschienen, die den Effekten der Vektorinterferenz und Energieerhaltung Rechnung tragen. Eine umfassende und grundlegende Darstellung, die die Einbindung rigoroser Rechenverfahren in die Simulation des mikroskopischen Abbildungsprozesses beschreibt, ist dem Verfasser dieser Arbeit jedoch nicht bekannt. Es existieren zwar einzelne Veröffentlichungen aus den Bereichen der Mikroskopie und der Lithographie, die ähnliche Simulationsmodelle zum Inhalt haben, diese konzentrieren sich aber mehr auf die Anwendung als auf eine grundlegende Beschreibung der Si-

mulationsmodelle. Hieraus werden die zugrunde liegenden fundamentalen Annahmen und Grenzen der Modelle nicht deutlich. Aufbauend auf den vorherigen Kapiteln soll Kapitel 5 diese Lücke schließen und eine ausführliche Darstellung des in dieser Arbeit verwendeten Simulationsmodells geben. Hieraus leiten sich auch die weiteren Entwicklungsmöglichkeiten und Grenzen des Modells ab. Eine knappe Zusammenfassung des Simulationsmodells ohne den Ballast einer ausführlichen Herleitung wird in Abschnitt 5.4 und 5.5 gegeben.

Die klassischen Konzepte der mikroskopischen Abbildungstheorie werden durch die Einbindung rigoroser Simulationsmodelle in die Beschreibung der Licht-Objekt-Wechselwirkung wesentlich erweitert. Dennoch spielen auch Konzepte der skalaren Beugungstheorie in dem erweiterten Modell der Bildsimulation eine wichtige Rolle. Die Grundlagen werden in Kapitel 3 besprochen. Hierbei wird besonderes Augenmerk auf die inhärenten Näherungen der verschiedenen Verfahren und die Folgen für die Anwendbarkeit bei der Simulation des Abbildungsprozesses gelegt.

In der vorliegenden Arbeit wurde als rigorose Simulationsmethode die Rigorous Coupled Wave Analysis verwendet. Sie wird in Abschnitt 3.4 beschrieben. Rigorose Simulationsmodelle behandeln das vollständige elektromagnetische Beugungsproblem. Ihre Anwendung in der Bildsimulation ist insbesondere dann wichtig, wenn die untersuchten Strukturgrößen im Größenordnungsbereich der Wellenlänge liegen, oder die polarisationsabhängige Kantenwechselwirkung für die Signalgenerierung im Bild wichtig wird. Insbesondere für 3D-Strukturen kann eine vollständige rigorose Rechnung sehr aufwendig werden und die Simulation der Beugungsspektren auf einem PC für ein Bild mit hoher Beleuchtungsapertur einige Stunden bis Tage in Anspruch nehmen. Abschnitt 3.5 stellt daher ein neues semi-rigoreses Berechnungsverfahren vor, das sich zwar auf die Konzepte der skalaren Beugungstheorie stützt, diese aber mit Modellen der elektromagnetischen Theorie umsetzt. Mit dieser Methode ist eine effiziente Berechnung von Beugungsproblemen an großflächigen Strukturen mit einer Geschwindigkeitssteigerung von über drei Größenordnungen möglich. Durch einen direkten Vergleich mit vollständig rigorosen Methoden ist es darüber hinaus möglich, den Einfluss rigoroser Wechselwirkungseffekte auf die Bildentstehung gezielt zu studieren. Ein Beispiel liefert Abschnitt 7.3.

Im zweiten Teil stellt Kapitel 6 den experimentellen Aufbau und die Messverfahren vor, mit denen im tiefen ultravioletten Spektralbereich orts aufgelöst die vollständige polarisationsoptische Information eines partiell polarisierten Lichtwellenfeldes in Form der Kohärenzmatrix vermessen werden kann. Kapitel 7 illustriert das Verfahren an verschiedenen Messbeispielen. Durch die Gegenüberstellung von Messung und Simulation wird das Re-

konstruktionspotential von Sublambdastrukturmerkmalen durch hochaufgelöste polarimetrische Messungen deutlich. Die Beispiele zeigen, dass die bildgebende Polarimetrie gerade in der hochauflösenden Metrologie einen tiefen Einblick in die physikalisch-optischen Effekte der mikroskopischen Bildentstehung ermöglicht.

Kapitel 8 bildet den dritten Teil. Hier wird das Konzept der Strukturrekonstruktion im Sublambdabereich auf Basis des polarisationsoptischen Transferverhaltens in einen allgemeinen mathematischen Kontext gestellt. Das mathematische Handwerkszeug hierzu wird in Kapitel 4 bereitgestellt. Zur Beschreibung des Polarisationsstransfers dienen das Jones- und das Müller-Matrix-Kalkül. Spezielle Formmerkmale der untersuchten Strukturen prägen den Matrizen charakteristische Eigenschaften auf. Sie werden damit zum polarisationsoptischen Fingerabdruck, den die Struktur als charakteristisches Merkmal bei der Wechselwirkung im Lichtwellenfeld hinterlässt. Der dabei entwickelte Formalismus ist nicht nur die Basis für neuartige metrologische Messmethoden, sondern kann auch gewinnbringend für das Design von Nanostrukturen angewendet werden.

2 Grundlagen der Elektrodynamik

Ziel dieses einführenden Kapitels ist es, die theoretischen Grundlagen der Elektrodynamik zusammenzufassen, insoweit sie für die weiterführenden Kapitel dieser Arbeit relevant sind. Es gibt in diesem Bereich eine Fülle ausgezeichneteter Literatur, so dass sich hier eine detaillierte Darstellung erübrigt. Es sei nur auf gute Einführungen zur theoretischen Physik [2–4] und zur klassischen Elektrodynamik [5] verwiesen. Darstellungen, die sich auf spezielle Fragestellungen der Elektrodynamik aus dem Blickwinkel der Optik konzentrieren, finden sich unter [6–8]. Im Folgenden werden daher die Kernaussagen der Literatur zusammengetragen und in eine konsistente Darstellung überführt. Insbesondere wird dabei den relevanten Einschränkungen und Näherungen der für diese Arbeit verwendeten Theorie im weiten Kontext der Elektrodynamik Rechnung getragen.

2.1 Die Maxwell-Gleichungen

Will man physikalisch-optische Wechselwirkungsphänomene in der Optik beschreiben, muss man auf die grundlegenden Gesetzmäßigkeiten der Elektrodynamik zurückgreifen, die in den Maxwell-Gleichungen ihre mathematische Formulierung finden. Die Lichtwelle wird hierbei als elektromagnetisches Feld beschrieben, das an einem Punkt \vec{r} zu einem Zeitpunkt t über die elektrische Feldstärke $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und die magnetische Induktion $\vec{B}(\vec{r}, t)$ definiert ist. Breitet sich das elektromagnetische Feld in Materie aus, müssen zusätzlich die elektrische Verschiebung $\vec{D}(\vec{r}, t)$ und das Magnetfeld $\vec{H}(\vec{r}, t)$ eingeführt werden. Der Einfluss des Mediums wird durch die freie Ladungsdichte $\rho(\vec{r}, t)$ sowie die elektrische Stromdichte $\vec{j}(\vec{r}, t)$ erfasst. Diese Größen werden durch die Maxwell-Gleichungen miteinander verknüpft. Sie lauten in differentieller Form:

1. Maxwell-Gleichung: (*verallgemeinertes Ampèresches Durchflutungsgesetz*)

$$\operatorname{rot} \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{j} \quad (2.1)$$

2. Maxwell-Gleichung: (*Faradays Induktionsgesetz*)

$$\operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} = 0 \quad (2.2)$$

3. Maxwell-Gleichung: (*Gaußsches Gesetz*)

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho \quad (2.3)$$

4. Maxwell-Gleichung: (*Grundgesetz des Magnetismus*)

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (2.4)$$

Die vier Maxwell-Gleichungen werden durch weitere Gleichungen ergänzt, die die elektrischen und magnetischen Eigenschaften des Mediums charakterisieren [9].

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \begin{cases} \varepsilon_r \varepsilon_0 \vec{E} & \text{linear (dielektrisch, metallisch)} \\ \vec{D}(\vec{E}) & \text{nicht-linear (ferroelektrisch)} \end{cases} \quad (2.5)$$

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) = \begin{cases} \mu_r \mu_0 \vec{H} & \text{linear (dia- oder paramagnetisch)} \\ \vec{B}(\vec{H}) & \text{nicht-linear (ferromagnetisch)} \end{cases} \quad (2.6)$$

$$\rho = \begin{cases} 0 & \text{elektrisch neutral} \\ \rho & \text{elektrisch geladen} \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\vec{j} = \begin{cases} 0 & \text{Isolator} \\ \sigma \vec{E} & \text{ohmscher elektrischer Leiter} \\ \vec{j}(\vec{E}) & \text{nicht-ohmscher elektrischer Leiter} \end{cases} \quad (2.8)$$

Hierbei werden ε_0 und μ_0 als elektrische beziehungsweise die magnetische Feldkonstante bezeichnet. Alle übrigen Größen der Gleichungen 2.5-2.8 sind im Allgemeinen Funktionen des Ortes und der Zeit: $\Gamma = \Gamma(\vec{r}, t)$. Diese Abhängigkeiten werden im Folgenden nicht mehr explizit aufgeführt. Die elektrische Polarisation \vec{P} und die Magnetisierung \vec{M} geben die Reaktion des Mediums auf die äußeren elektrischen und magnetischen Felder wieder, die in zusätzlichen, additiven Feldern resultieren (Gleichung 2.5 und 2.6). Im optischen Spektralbereich lassen sich typischerweise wesentliche Vereinfachungen treffen. Für Intensitäten, wie sie in der optischen Messtechnik vorkommen, besteht sowohl zwischen \vec{D} und \vec{E} als auch zwischen \vec{B} und \vec{H} ein linearer Zusammenhang. In diesem Fall wird der Materialeinfluss durch die Dielektrizitätskonstante ε_r und die magnetische Permeabilität μ_r des Mediums

erfasst. Darüber hinaus kann man für optische Frequenzen von nicht-magnetischen Materialien ($\mu_r = 1$) ausgehen. Liegen leitfähige Materialien vor, so besteht in guter Näherung ein linearer Zusammenhang zwischen der elektrischen Feldstärke des Lichts und der durch sie hervorgerufenen Stromdichte. Er wird durch das *Ohmsche Gesetz* $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ erfasst, wobei σ die Leitfähigkeit des Mediums bezeichnet.

Auch im linearen Fall sind die Dielektrizitätskonstante ε_r und die elektrische Leitfähigkeit σ im Allgemeinen tensorielle Größen, die sich in der doppelbrechenden Eigenschaft des Mediums äußern. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Lichtwelle hängt in diesem Fall von der Ausbreitungsrichtung und dem Polarisationszustand des Lichtwellenfeldes ab. In der gesamten Arbeit wird von isotropen Medien ausgegangen, die keine Doppelbrechung aufweisen. In diesem Fall reduzieren sich die Tensoren auf skalare Größen. Es sei hier schon bemerkt, dass die intrinsische Doppelbrechung isotroper Materialien von der strukturinduzierten Doppelbrechung an strukturierten Oberflächen oder auch Volumina zu unterscheiden ist, bei der das doppelbrechende Verhalten auf Materialübergänge an den Grenzflächen und nicht auf die intrinsischen Eigenschaften der beteiligten Medien zurückzuführen ist.

Die Maxwell-Gleichungen gelten nur in Raumbereichen, in denen sich die optischen Eigenschaften kontinuierlich ändern. An Grenzflächen unterschiedlicher Materialbereiche führt der abrupte Sprung von ε_r und μ_r auch zu Diskontinuitäten der elektromagnetischen Felder. Es treten zudem an den Oberflächen lokalisierte Ströme mit der Dichte \vec{j}_s und Oberflächenladungen mit der Dichte ρ_s auf. Für die hier betrachteten Probleme können beide vernachlässigt werden. In diesem Fall gelten folgende Randbedingungen:

- Die Normalkomponente der magnetischen Induktion \vec{B}_\perp ist stetig
- Die Normalkomponente der elektrischen Verschiebung \vec{D}_\perp ist stetig
- Die Tangentialkomponente der elektrischen Feldstärke \vec{E}_\parallel ist stetig
- Die Tangentialkomponente des Magnetfeldes \vec{H}_\parallel ist stetig

Zum Abschluss sind die wesentlichen Grundannahmen, die in dieser Arbeit Anwendung finden, nochmals zusammengefasst:

Linearität: Die verwendeten Lichtintensitäten sind so gering, dass Effekte der nicht-linearen Optik vernachlässigt werden können.

Isotropie: Die Materialien können als unabhängig von der Strahlrichtung des Lichts und dessen Polarisation angesehen werden. Es liegt keine intrinsische oder induzierte Volumendoppelbrechung vor.

Unmagnetische Materialien: Die magnetische Permeabilität μ_r kann mit guter Näherung gleich 1 gesetzt werden.

Homogenität: Die Materialien können auf der Skala der Wellenlänge als homogen angesehen werden. Die atomare und molekulare Struktur der Materialien ist ohne Einfluss. Quanten-Effekte des Materials werden nur im Rahmen der semi-klassischen Theorie integral über den wellenlängenabhängigen Brechungsindex erfasst.

Grenzflächen: Materialunstetigkeiten an Grenzflächen werden durch die Randbedingungen für elektromagnetische Felder behandelt. An den Oberflächen lokalisierte Ladungen und Ströme werden dabei vernachlässigt.

Klassische Theorie: Das elektromagnetische Feld zeigt keine Quanteneffekte.

2.2 Die Wellengleichungen der Optik

Die Maxwell-Gleichungen in Abschnitt 2.1 setzen die unterschiedlichen Feldgrößen durch einen Satz von Differentialgleichungen in Beziehung. Durch gegenseitiges Einsetzen erhält man ungekoppelte Differentialgleichungen für die einzelnen Feldvektoren, die die Struktur einer Wellengleichung aufweisen. Das Aussehen der Differentialgleichungen und damit auch deren Lösung ist maßgeblich durch die Eigenschaften des Mediums bestimmt, in dem sich die elektromagnetische Störung ausbreitet. Im Folgenden wird daher zwischen inhomogenen Medien, die eine räumliche Veränderung der optische Eigenschaften aufweisen, und homogenen Medien mit räumlich konstanten, aber sonst beliebigen optischen Eigenschaften unterschieden.

2.2.1 Wellengleichung in inhomogenen Medien

Gehen wir von einem inhomogenen, isotropen, nicht-dispersiven Medium aus, in dem keine freien Ladungen vorliegen ($\rho=0$), so ergibt sich durch Kombination der ersten Zeitableitung des 1. Maxwell'schen Gesetzes mit der Rotation des Faradayschen Induktionsgesetzes:

$$\nabla^2 \vec{E} - \epsilon_r \epsilon_0 \mu_r \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E} - \sigma \mu_r \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} + \nabla (\ln(\mu_r)) \times (\nabla \times \vec{E}) + \nabla (\vec{E} \cdot \nabla \ln(\epsilon_r)) = 0 \quad (2.9)$$

Für das Magnetfeld \vec{H} lässt sich in ganz ähnlicher Weise eine Wellengleichung mit gleicher Struktur herleiten. In diesem Fall verschwindet wegen der fehlenden magnetischen

Stromdichte $j_m = 0$ der Term um σ :

$$\nabla^2 \vec{H} - \varepsilon_r \varepsilon_0 \mu_r \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{H} + \nabla (\ln(\varepsilon_r)) \times (\nabla \times \vec{H}) + \nabla (\vec{H} \cdot \nabla \ln(\mu_r)) = 0 \quad (2.10)$$

Gehen wir im Folgenden zunächst von einem dielektrischen Medium mit verschwindender Leitfähigkeit $\sigma = 0$ aus. Wegen der Symmetrie des Problems genügt es, die elektrischen Felder \vec{E} zu betrachten. Die Differentialgleichungen für \vec{H} folgen in analoger Weise. Für unmagnetische Medien ($\mu_r = 1$) ergibt sich:

$$\nabla^2 \vec{E} - \varepsilon_r \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E} + \nabla (\vec{E} \cdot \nabla \ln(\varepsilon_r)) = 0 \quad (2.11)$$

Wie Gleichung 2.11 zeigt, wird eine Kopplung der einzelnen Komponenten E_x , E_y und E_z ausschließlich durch die räumliche Inhomogenität der optischen Eigenschaften hervorgerufen, die sich im Gradienten der dielektrischen Funktion widerspiegelt. Dieses zeigt sich schon an dem einfachen Fall der Reflexion und Transmission an einer planen Grenzfläche, wie sie durch die Fresnelschen Gleichungen beschrieben werden. Diese elektromagnetischen Wechselwirkungseffekte gewinnen insbesondere bei der Betrachtung von Beugungsproblemen zunehmend an Bedeutung, wenn die Strukturdimensionen in die Größenordnung der Wellenlänge kommen. In diesem Fall kann der Gradiententerm $\nabla(\vec{E} \cdot \nabla \ln(\varepsilon_r))$ in Gleichung 2.11 gegenüber den homogenen Anteilen nicht mehr vernachlässigt werden. Unter Umständen dominiert der Kopplungsterm gar das Differentialgleichungssystem, zum Beispiel bei einem nanostrukturierten Polarisator.

Auch wenn die in diesem Abschnitt aufgestellten Differentialgleichungen eine allgemeine Formulierung der Lichtausbreitung in beliebigen Medien darstellen, so ist deren direkte, analytische Lösung durch das komplizierte Kopplungsverhalten im Allgemeinen nicht möglich¹. Praktisch werden solche Probleme durch verschiedene Verfahren der Beugungstheorie gelöst, wie in Kapitel 3 eingehend diskutiert wird. Hierfür kommt der speziellen Lösung der Wellengleichung in homogenen Medien eine große Bedeutung zu.

¹Eine interessante Ausnahme stellen Burckhardts erste Formulierungen der heute als RCWA bekannten Methode dar [10]. Sie greifen für eine kosinusförmige Brechungsindexmodulation explizit auf Gleichung 2.11 und deren Pendant für das magnetische Feld zurück.

2.2.2 Wellengleichung in homogenen Medien

Im Falle eines homogenen Mediums sind ε_r und μ_r Konstanten im Raum und die zugehörigen Ortsgradienten in Gleichung 2.9 verschwinden. Hieraus folgt die so genannte *Telegraphengleichung*:

$$\nabla^2 \vec{E} - \varepsilon_r \varepsilon_0 \mu_r \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \sigma \mu_r \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0 \quad (2.12)$$

Betrachtet man darüber hinaus nur dielektrische Materialien, so reduziert sich Gleichung 2.9 zur homogenen Wellengleichung:

$$\nabla^2 \vec{E} - \varepsilon_r \varepsilon_0 \mu_r \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.13)$$

Auch hier gilt eine vollkommen analoge Gleichung zu 2.13 für das \vec{H} -Feld. Die Struktur der Gleichung 2.13 zeigt, dass sich bei der Propagation in einem homogenen Medium die relative Phasenlage und Amplitude der Feldstärkekomponenten und damit der Polarisationszustand einer kohärenten Lichtwelle nicht ändern können. Dies wird bei der späteren Betrachtung polarisationsoptischer Effekte von wesentlicher Bedeutung sein.

Mag in Gleichung 2.13 formal eine Vektorgleichung vorliegen, so sind doch die Vektorkomponenten von \vec{E} (und \vec{H}) vollkommen entkoppelt und gehorchen jede für sich einer skalaren Wellengleichung vom selben Typ, die separat gelöst werden können:

$$\nabla^2 \hat{u} - \varepsilon_r \varepsilon_0 \mu_r \mu_0 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.14)$$

Mit der Identifikation der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum $c_0 = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ und der Definition des Brechungsindex n über die *Maxwell-Relation*

$$n = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r} \quad (2.15)$$

erhält man die gängige Darstellung der skalaren homogenen Wellengleichung

$$\left(\nabla^2 - \frac{n^2}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \hat{u}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.16)$$

Auf die Lösung der homogenen Wellengleichung 2.13 beziehungsweise der skalaren Formulierung 2.16 wird in folgendem Abschnitt eingegangen.

2.3 Elementare Lösung der homogenen Wellengleichung

Da in homogenen Medien die Vektorkomponenten des elektrischen und magnetischen Feldes entkoppeln, beschränken wir uns zunächst auf die Lösung der skalaren Wellengleichung 2.16. Aus den Maxwell-Gleichungen resultieren jedoch auch hier wechselseitige Abhängigkeiten zwischen den Feldstärkekomponenten, die am Schluss dieses Abschnitts diskutiert werden.

Bei der homogenen Wellengleichung handelt es sich um eine lineare partielle Differentialgleichung 2. Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Eine solche Differentialgleichung elliptischen Typs besitzt exponentielle Lösungen, kann also mit der *Fourierschen Methode* gelöst werden [11, 12]. Hierbei nutzt man zwei fundamentale Prinzipien:

- die Separation der Variablen und
- das Superpositionsprinzip

Der zugehörige Produktansatz beschreibt monochromatische ebene Wellen mit der Kreisfrequenz ω und dem Wellenvektor \vec{k} .

$$\hat{u}(\vec{r}, t) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\omega t} = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (2.17)$$

Die Wellenlänge λ des Lichts ist dabei mit der Wellenzahl k über $k = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ verknüpft. Wie man durch Einsetzen leicht nachweist, genügt der Lösungsansatz 2.17 nur dann der homogenen Wellengleichung 2.16, wenn die *Dispersionsrelation*

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(n \frac{\omega}{c_0} \right)^2 \quad (2.18)$$

erfüllt ist. Gleichung 2.18 kann auch als Energieerhaltung interpretiert werden und stellt die Kugelgleichung der so genannten *Ewald-Kugel* dar. Erstmals von Ewald in der Röntgenbeugung angewandt, erlaubt sie auch sehr anschauliche Diskussionen von Beugungsproblemen und Abbildungsprozessen in der Optik [13].

Betrachtet man beim Lösungsansatz zunächst nur die harmonische Zeitabhängigkeit $\hat{u}(\vec{r}, t) = u(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t}$, so ergibt sich die *Helmholtz-Gleichung*

$$(\Delta + n^2 k_0^2) u(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.19)$$

Eine äquivalente Gleichung lässt sich für die Wellenausbreitung in leitenden Materialien aufstellen, wenn man von der skalaren Form der Telegraphengleichung 2.12 anstatt von der homogenen Wellengleichung 2.13 ausgeht. Auch in diesem Fall bleibt die formale Gestalt der Helmholtz-Gleichung erhalten

$$(\Delta + \tilde{n}^2 k_0^2) u(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.20)$$

Der reelle Brechungsindex wird hierbei durch den *komplexen Brechungsindex* $\tilde{n} = n(1 + i\kappa)$ ersetzt, wobei sowohl n als auch der *Extinktionskoeffizient* κ reelle Größen sind. Er ist über die Maxwell-Relation mit der komplexen Dielektrizitätskonstante $\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_r + i\sigma/\epsilon_0\omega$ verknüpft. Die meisten Diskussionen dieser Arbeit werden sich auf monochromatische Lichtwellenfelder konzentrieren. Die Verallgemeinerung auf polychromatisches Licht erfolgt aufgrund der angenommenen Linearität zwanglos durch Superposition der Spektralkomponenten²:

$$\hat{u}_{\omega t}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} u(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (2.21)$$

Beschränkt man sich auf monochromatische Felder und unterdrückt die harmonische Zeitabhängigkeit, so ergibt sich als stationäre Lösung der homogenen Wellengleichung:

$$u(\vec{r}, \omega) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \iiint_{-\infty}^{+\infty} U_{3D}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k} \quad (2.22)$$

Gleichung 2.22 stellt eine Superposition von Planwellen dar, die sich in unterschiedlichen Richtungen \vec{k} ausbreiten. Man spricht daher von einer *Planwellen-Zerlegung*, beziehungsweise im Englischen vom *angular spectrum of plane waves*. Der Wert der Entwicklungskoeffizienten $U_{3D}(\vec{k})$ ist dabei noch vollkommen unbestimmt. Sie werden durch die Randbedingungen festgelegt, die das Feld an den Grenzflächen zu erfüllen hat. Die Lösung dieses Problems ist Aufgabe der Beugungstheorie und wird in Kapitel 3 behandelt.

Zunächst wenden wir uns jedoch nochmals den elektromagnetischen Aspekten der Planwellen zu. Auch wenn die homogene Wellengleichung des elektromagnetischen Feldes wie oben beschrieben in sechs Teilgleichungen zerfällt, sind die Feldstärkekomponenten des elektrischen und magnetischen Feldes an sich nicht unabhängig voneinander. Vielmehr ergeben

²Für die augenblickliche Diskussion wird eine kohärente Überlagerung der Feldamplituden angenommen (Vgl. auch Abschnitt 5.4.1 und 5.4.2).

sich durch Einsetzen der elementaren Lösung 2.17 für die Felder \vec{E} , \vec{D} , \vec{B} und \vec{H} aus den vier Maxwell-Gleichungen im ladungsfreien, isotropen Medium die Zusammenhänge:

$$\vec{k} \times \vec{E} = \omega \vec{B} \quad (2.23a)$$

$$\vec{k} \times \vec{H} = -\omega \vec{D} \quad (2.23b)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{D} = 0 \quad (2.23c)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.23d)$$

Das heißt, in einem homogenen, isotropen Medium beschreiben diese Lösungen *Transversalwellen*, die folgende Eigenschaften erfüllen:

- \vec{D} , \vec{H} und \vec{k} bilden ein Rechtssystem und stehen paarweise senkrecht,
- der Poynting-Vektor $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$, \vec{E} und \vec{H} bilden ein Rechtssystem und stehen paarweise senkrecht
- \vec{E} und \vec{D} sind parallel, \vec{S} und \vec{k} zeigen in dieselbe Richtung³.
- Alle Felder sind in Phase

Die oben beschriebene Fourier-Zerlegung in transversale Planwellen stellt wohl den wichtigsten Lösungstyp der homogenen Wellengleichung dar. Die diskutierten Zusammenhänge sind auch die Basis verschiedener rigoroser Beugungsverfahren, wie der Rigorous Coupled Wave Analysis, die in Kapitel 3.4.2 eingehend beschrieben wird. Nichtsdestoweniger erlaubt der Separationsansatz die Lösung der homogenen Wellengleichung (bzw. der Helmholtz-Gleichung) auch in anderen Koordinatensystemen. Hierzu gehören insbesondere Zylinder- oder Kugelwellen. Eine eingehendere Diskussion zu diesem Thema folgt in Kapitel 3.3.2.

³In doppelbrechenden Medien sind \vec{D} und \vec{E} im Allgemeinen nicht mehr parallel, der Energiefluss \vec{S} folgt nicht mehr dem Wellenvektor \vec{k} .

3 Grundlagen der Beugungstheorie

Schon sehr früh zeigten insbesondere die Pionierarbeiten von George Airy [14], Lord Rayleigh [15] und Ernst Abbe [16, 17], dass das Grundverständnis der optischen Abbildung eng mit Fragen der Ausbreitung optischer Lichtwellen verknüpft ist. Um die Leistungsfähigkeit und die physikalischen Grenzen der optischen Abbildung zu verstehen, ist es daher unerlässlich, sich zunächst mit grundlegenden Fragen der Beugungstheorie auseinanderzusetzen. Wohl die fundamentalste Folge der Beugung ist die Beschränkung des Auflösungsvermögens eines optischen Systems. Sie stellte in den Anfängen der optischen Abbildungstheorie die Kernfrage der wissenschaftlichen Arbeiten dar und mündete in der Formulierung des Rayleighschen beziehungsweise des Abbeschen Auflösungskriteriums. In modernen optischen Abbildungssystemen kommen darüber hinaus zunehmend diffraktiv-optische Elemente (DOE) zur Strahlformung zum Einsatz, die sich explizit Beugungseffekte zu Nutze machen. Nicht zuletzt spielen Beugungsprozesse auch bei der eigentlichen Wechselwirkung des Lichtwellenfeldes mit dem Objekt eine fundamentale Rolle, sind also die Basis für die anschließende Bildentstehung in einem abbildenden optischen System. Bei der mathematischen Beschreibung und Simulation des optischen Abbildungsprozesses kommt daher der Beugungstheorie in verschiedenen Bereichen eine zentrale Bedeutung zu.

Dieses Kapitel setzt sich mit unterschiedlichen Lösungsansätzen der Beugungstheorie und ihren Anwendungsbereichen in der mikroskopischen Bildsimulation auseinander. Hierbei wird besonderes Augenmerk auf die inhärenten Näherungen der verschiedenen Verfahren und die Folgen für die Anwendbarkeit bei der Simulation des Abbildungsprozesses gelegt. Nach einem allgemeinen Überblick in Abschnitt 3.1 wird in Abschnitt 3.2 die klassische Beugungstheorie mit ihren fundamentalen Näherungen diskutiert. Den klassischen Methoden stehen rigorose Lösungsverfahren auf Basis der Maxwell-Gleichungen gegenüber. Da die strenge Lösung von Beugungsproblemen analytisch nur in wenigen Fällen möglich ist (siehe Abschnitt 3.3), geht Abschnitt 3.4 auf deren numerische Lösung ein. Hierbei steht die Rigorous Coupled Wave Analysis im Zentrum der Diskussion. Abschnitt 3.5 stellt ein semi-rigorous Berechnungsverfahren vor, das sich zwar auf die Konzepte der klassischen

Beugungstheorie stützt, diese aber mit Modellen der elektromagnetischen Theorie umsetzt. Es erlaubt damit einen unmittelbaren Vergleich klassischer Prinzipien mit vollständig rigorosen Simulationsmodellen.

3.1 Lösungsansätze in der Beugungstheorie

Die grundlegende Aufgabe der Beugungstheorie besteht darin, für ein Objekt, das durch die räumliche Verteilung der optische Eigenschaften $\varepsilon_r(\vec{r}, \omega)$, $\mu_r(\vec{r}, \omega)$ und $\sigma(\vec{r}, \omega)$ definiert ist, und für ein gegebenes einfallendes elektromagnetisches Feld $\vec{E}_i(\vec{r}, \omega)$, $\vec{H}_i(\vec{r}, \omega)$ die resultierende elektromagnetische Feldverteilung $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$, $\vec{H}(\vec{r}, \omega)$ im gesamten Raum zu bestimmen. Dieses setzt sich aus dem einfallenden und dem gestreuten Feld $\vec{E}_s(\vec{r}, \omega)$, $\vec{H}_s(\vec{r}, \omega)$ zusammen. Die Diskussion beschränkt sich auf stationäre Probleme mit harmonischer Zeitabhängigkeit.

$$\left. \begin{array}{l} \text{Anregung: } \vec{E}_i, \vec{H}_i \\ \text{Objekt: } \varepsilon_r, \mu_r, \sigma \end{array} \right\} \Rightarrow \vec{E} = \vec{E}_i + \vec{E}_s, \vec{H} = \vec{H}_i + \vec{H}_s \quad (3.1)$$

Die exakte Lösung des Beugungsproblems setzt dabei die Lösung der Maxwell-Gleichungen im Inneren und Äußeren des beugenden Körpers samt den zu erfüllenden Grenzbedingungen an dessen Oberfläche bei vorgegebener Anregung voraus. Wie in Kapitel 2.2.1 gezeigt wurde, führt dieser direkte Lösungsweg auf eine inhomogene, vektorielle Wellengleichung, die im Allgemeinen analytisch nicht gelöst werden kann.

In allen praktischen Lösungsansätzen wird daher das Gesamtproblem in Teilprobleme unterteilt. Der eigentliche Wechselwirkungsbereich ist dabei von einem homogenen Propagationsbereich umgeben und durch definierte Grenzflächen abgegrenzt. Nachdem das elektromagnetische Problem innerhalb des Wechselwirkungsbereichs analytisch oder mit Hilfe numerischer Verfahren approximativ gelöst wurde, erfolgt durch Abgleich der Randbedingungen aus Abschnitt 2.1 die Ankopplung an die bekannten Lösungen der homogenen Wellengleichung. Mit Hilfe der Wellenpropagation kann dann in einem nächsten Schritt das Feld an beliebigen Punkten außerhalb des Wechselwirkungsbereichs bestimmt werden. Diese *strenge* (auch *rigoros* genannte) Lösung der Maxwell-Gleichung im Wechselwirkungsbereich samt Randbedingungen ist analytisch nur für eine begrenzte Zahl von Fällen möglich und gestaltet sich für beliebige Strukturformen durch numerische Verfahren mitunter sehr aufwendig. Darüber hinaus ist für eine Vielzahl von Beugungsproblemen ein rigoroses

Vorgehen gar nicht nötig, um eine hinreichende Genauigkeit bei der Berechnung zu erzielen. In solchen Fällen besteht ein pragmatisches Vorgehen darin, die Randbedingungen, die sich direkt aus den Maxwell-Gleichungen ableiten, durch vernünftige Annahmen über die Randwerte der elektromagnetischen Felder und deren Ableitungen zu ersetzen. Das strenge *Randbedingungsproblem* wird damit zu einem approximativen *Randwertproblem*. Die Anwendung dieser als Kirchhoffsche Näherung bekannte Approximation auf vektorielle Felder führt auf semi-rigorese Lösungsverfahren. Vernachlässigt man darüber hinaus auch noch den vektoriellen Charakter des Lichts, mündet man in der klassischen Beugungstheorie, die historisch gesehen die ersten Lösungen optischer Beugungsprobleme lieferte.

Alle aufgeführten Lösungsverfahren unterscheiden sich drastisch bezüglich der eingeführten Vereinfachungen, aber auch bezüglich des damit verbundenen numerischen Aufwands. Für die effiziente Simulation optischer Abbildungsprozesse sind alle Verfahren von Bedeutung. Schließlich kommen im optischen Abbildungsprozess Beugungseffekte an ganz unterschiedlichen Stellen zum Tragen, die im einen Fall die rigorose Behandlung des Problems erfordern, im anderen Fall die starken Vereinfachungen der klassischen skalaren Beugungstheorie ohne nennenswerte Genauigkeitseinschränkungen erlauben. Die Wahl des geeigneten Verfahrens spielt sich dabei ab im Spannungsfeld zwischen dem Approximationsgrad, der die Simulation der zu untersuchenden Effekte noch erlaubt, und den dafür benötigten Computer- beziehungsweise Zeitressourcen. Bevor die einzelnen Lösungsverfahren in den nächsten Abschnitten genauer diskutiert werden, trägt die folgende Zusammenstellung das Auftreten von Beugungseffekten in der optische Abbildung und die dabei verwendeten Näherungen zusammen.

Beugung an strahlbegrenzenden Blenden: Das beschränkte Auflösungsvermögen eines optischen Systems wird in der Praxis durch die Vignettierung der Wellenfront an der begrenzenden Öffnung des optischen Systems hervorgerufen. Da deren Abmessungen viel größer als die Wellenlänge des Lichts sind, lassen sich klassische Beugungstheorien in sehr guter Näherung anwenden, um den resultierenden Effekten Rechnung zu tragen. Diese Überlegungen sind eng verknüpft mit dem Pupillenkonzent der optischen Abbildung, das in Kapitel 5.3 eingehend diskutiert wird.

Beugung an diffraktiv-optischen Elementen: DOEs gewinnen beim Design optischer Abbildungssysteme zunehmend an Bedeutung, da sie eine flexible Generierung asphärischer Wellenfronten erlauben. Immer größere Krümmungen der Wellenfront erfordern eine erhöhte Linienpaardichte der beugenden Strukturen im Randbereich der DOEs. Während bisher die Auslegung und das Design von DOEs auf Basis der klas-

sischen, skalaren Beugungstheorie mit hinreichender Genauigkeit erfolgte, erfordern insbesondere Anwendungen in der Hochtechnologie wie zum Beispiel der Lithographie die Berücksichtigung rigoroser Berechnungsverfahren bei der Auslegung solcher Elemente.

Beugung am abzubildenden Objekt: Insbesondere in der hochauflösenden Messtechnik liegen die dimensionellen Größen der beugenden Objekte in der Größenordnung der Wellenlänge des Lichts oder gar deutlich darunter. Das Wechselwirkungsverhalten des Lichtwellenfeldes mit dem Objekt wird maßgeblich durch elektromagnetische Effekte beeinflusst. Die rigorose Behandlung des Beugungsproblems ist unabdingbar, um die auftretenden Effekte qualitativ wie auch quantitativ zu erfassen.

3.2 Klassische Beugungstheorie

Ausgangspunkt der klassischen Beugungstheorie ist die skalare Helmholtz-Gleichung 2.19. Die ursprüngliche Lösung dieser Differentialgleichung geht auf Helmholtz und Kirchhoff zurück und erfolgt durch Integration mit Hilfe des Greenschen Satzes. Als Greensche Funktion im Freiraum dienen sphärische Elementarwellen. Dieser Ansatz mündet im Integraltheorem von Helmholtz und Kirchhoff, das auch als Kirchhoffsches Beugungsintegral bekannt ist¹. Eine umfassende Darstellung hierzu, insbesondere auch im historischen Kontext, findet sich zum Beispiel in [6, 18].

Im Folgenden soll ein anderer Lösungsweg verfolgt werden, der auf der Planwellenzerlegung in Gleichung 2.22 beruht [19]. Dieses Vorgehen ist nicht nur mathematisch eingängiger, es lässt sich vielmehr auch sehr konsistent auf rigorose Lösungsverfahren des Beugungsproblems erweitern (siehe Abschnitt 3.4.2).

Für praktische Probleme ist insbesondere das Propagationsverhalten zwischen parallelen Ebenen von Interesse. In diesem Fall ist die dreidimensionale Darstellung der Planwellenzerlegung in Gleichung 2.22 unhandlich. Unter Nutzung der Ewald-Gleichung und durch Integration in Kugelkoordinaten über die Radialkomponente r lässt sich die Planwellen-

¹In Abschnitt 3.2.3 wird dieser Lösungsweg in vektorieller Form skizziert.

Zerlegung durch ein zweidimensionales Integral darstellen² [19, 20]:

$$u(x, y, z) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \iint_{-\infty}^{+\infty} U_{2D}(\vec{k}_t, z_0) e^{i\vec{k}^\pm \cdot \vec{r}} dk_x dk_y \quad (3.2)$$

mit

$$\vec{k}_t = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y \quad \vec{k}^\pm = \vec{k}_t \pm k_z \vec{e}_z \quad (3.3)$$

und

$$k_z = \begin{cases} (k^2 - k_t^2)^{\frac{1}{2}} & \text{für } k_t^2 \leq k^2 \quad (\text{propagierende Wellen}) \\ i(k_t^2 - k^2)^{\frac{1}{2}} & \text{für } k_t^2 > k^2 \quad (\text{evaneszente Wellen}) \end{cases} \quad (3.4)$$

Die grundlegende Struktur der Planwellen-Zerlegung bleibt erhalten: Die Gesamtlösung setzt sich aus ebenen Wellen zusammen, die sich in unterschiedlichen Richtungen \vec{k}^\pm mit positiver beziehungsweise negativer z-Komponente ausbreiten. In Gleichung 3.4 lassen sich zwei Fälle unterscheiden, die von wesentlicher Bedeutung für die physikalische Interpretation der Lösung sind. Während kleine transversale Raumfrequenzen $k_t^2 \leq k^2$ zu propagierenden Lösungen führen, die im Fernfeld detektiert werden können, beschreibt die Bedingung $k_t^2 > k^2$ inhomogene, *evaneszente* Wellen, die sich zwar längs der Ebene $z = z_0$ ausbreiten, aber in $\pm z$ -Richtung exponentiell gedämpft sind. Sie entziehen sich damit einer direkten Beobachtung im Fernfeld. Hieraus ergibt sich unmittelbar das Auflösungsvermögen nach Abbe, wenn man die Interferenz zweier entgegengerichteter Wellen mit den Grenzfrequenzen $k_t = \pm|k|$ betrachtet:

$$\Delta x > \frac{\lambda}{2n} \quad (3.5)$$

Die Feldverteilung in einem beliebigen Raumpunkt \vec{r} ergibt sich aus Gleichung 3.2, wenn das Winkelspektrum $U_{2D}(\vec{k}_t, z_0)$ in der Ebene $z = z_0$ bekannt ist. Dies wiederum ist über eine zweidimensionale Fourier-Transformation mit der Feldverteilung $u(x, y, z_0)$ in der selben Ebene verknüpft. Mit $\vec{r}_t = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y$ gilt:

$$U_{2D}(\vec{k}_t, z_0) = \iint_{-\infty}^{+\infty} u(x, y, z_0) e^{-i\vec{k}_t \cdot \vec{r}_t} dx dy \quad (3.6)$$

Wird das Feld $u(x, y, z_0)$ in der Ebene $z_0 = 0$ durch Quellen im unteren Halbraum $z < 0$ erzeugt, so sind nur Wellenvektoren mit positiver Ausbreitungsrichtung \vec{k}^+ zu berücksichtigen. In diesem Fall gilt für das Feld im oberen Halbraum $z > 0$, wobei der Index + nicht

² $U_{3D}(\vec{k}) = U_{2D}(k_x, k_y, z) \cdot \cos(\theta)$

mehr explizit formuliert wird [21]:

$$u_I(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \iint_{-\infty}^{+\infty} U_{2D}(\vec{k}_t, 0) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dk_x dk_y \quad (3.7)$$

Gleichung 3.7 stellt damit die Lösung eines *Dirichletschen Randwertproblems* dar. Ist statt des Feldes $u(x, y, z_0)$ an sich dessen Ableitung $u' = \left. \frac{\partial u(\vec{r})}{\partial z} \right|_{z_0=0}$ in der Ebene $z_0 = 0$ bekannt, so liegt ein *Neumannsches Randwertproblem* vor, und für die Feldverteilung im oberen Halbraum folgt [21]:

$$u_{II}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{U'(\vec{k}_t, 0)}{ik_z} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dk_x dk_y \quad (3.8)$$

$U'(\vec{k}_t)$ bezeichnet dabei die Fourier-Transformierte von $u'(\vec{r})$ in der Ebene $z_0 = 0$. Die Lösungen in Gleichung 3.7 und 3.8 stellen das Feld als Superposition ebener Wellen dar, wobei die zugehörigen Amplituden durch die Randwerte für das Feld u beziehungsweise dessen Ableitung u' bestimmt sind. Diese Form der Planwellen-Zerlegung findet insbesondere in der rigorosen Beugungstheorie Anwendung. Beide obigen Lösungen sind exakt und beschreiben auch ein vektorielles Feld komponentenweise richtig, wenn die Randbedingungen für die Felder simultan an den Grenzflächen korrekt angewendet werden. Hierin besteht die Hauptaufgabe in der rigorosen Beugungstheorie.

Neben der Darstellung des Feldes in Planwellen ist auch eine Darstellung in sphärischen Wellen möglich. Dieser Ansatz wurde historisch zuerst verfolgt und hat seinen Ursprung im Huygensschen Prinzip. Sherman konnte die Äquivalenz dieser beiden doch recht unterschiedlichen Vorgehensweisen zeigen [22]. Eine Diskussion im streng mathematischen Rahmen wurde wenig später von Lalor geliefert [23]. Durch Anwendung des Faltungstheorems der Fourier-Theorie und unter Nutzung der Planwellenzerlegung von sphärischen Wellen nach Weyl [24] ergeben sich aus Gleichungen 3.7 beziehungsweise 3.8 die Rayleigh-Sommerfeldschen Beugungsformeln [8, 25]:

1. Beugungsintegral nach Rayleigh-Sommerfeld

$$u_I(\vec{r}) = -\frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} u(x', y', z_0) \left. \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) \right|_{z=z_0} dx' dy' \quad (3.9)$$

2. Beugungsintegral nach Rayleigh-Sommerfeld

$$u_{II}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u(x', y', z)}{\partial z} \Big|_{z=z_0} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) dx' dy' \quad (3.10)$$

Dabei bezeichnen x' und y' die kartesischen Koordinaten in der Ebene $z = z_0$ und für R gilt die Definition:

$$R = [(x - x')^2 + (y - y')^2 + z^2]^{\frac{1}{2}} \quad (3.11)$$

Das **Kirchhoffsche Beugungsintegral** stellt sich als arithmetischer Mittelwert der beiden Rayleigh-Sommerfeld-Integrale heraus:

$$U_K(\vec{r}) = \frac{1}{2} [u_I(\vec{r}) + u_{II}(\vec{r})] \quad (3.12)$$

Die drei aufgeführten Beugungsintegrale stellen den Kern der klassischen Beugungstheorie dar. Zusammengefasst lauten ihre wesentlichen Eigenschaften:

- Die Beugungsintegrale haben die Form eines Faltungsintegrals. Die Randwerte werden nach dem Huygensschen Prinzip mit der sphärischen Elementaranregung gefaltet. Aus der Faltungseigenschaft folgt die Isoplanasie des Beugungsproblems, die in der optischen Abbildungstheorie eine wesentliche Rolle spielt (siehe Kapitel 5).
- In der allgemeinen Form von Gleichung 3.9 - 3.12 stellen die Beugungsintegrale exakte Lösungen des Beugungsproblems dar, die sich aus den jeweiligen Randwerten ergeben. Werden die Randwerte korrekt spezifiziert, ergeben alle drei Integrale die exakte und gleiche Lösung.
- Welches Beugungsintegral zur Lösung herangezogen wird, hängt davon ab, welche Randwerte bekannt sind. Die Beugungsintegrale nach Rayleigh-Sommerfeld benötigen zwar nur *einen* Randwert auf der Grenzfläche (u oder u'), sind aber in ihrer Anwendung auf *ebene* Flächen beschränkt. Das Kirchhoffsche Beugungsintegral verlangt einerseits die Festlegung von u und u' , gilt jedoch andererseits für *beliebige* geschlossene Flächen. Die Randwerte u und u' sind dann allerdings nicht unabhängig voneinander [26].
- Im engeren Sinne werden die Beugungsintegrale nur im Zusammenhang mit der Kirchhoffschen Näherung (s. Abschnitt 3.2.1) verwendet. Erst hier erfolgt die eigentliche Approximation.

- Die Beugungsintegrale beschreiben in ihrer ursprünglichen Form skalare Felder. Diese Einschränkung ist eher praktischer als fundamentaler Natur. Da die Beugungsintegrale die Wellenausbreitung in homogenen Medien beschreiben, lassen sie sich komponentenweise auch auf vektorielle Felder anwenden. Sind die Randwerte der Vektorkomponenten bekannt, liefern sie wiederum die exakte Lösung des Beugungsproblems. Die entscheidende dabei auftretende Schwierigkeit besteht darin, dass jede der Komponenten nicht nur der Helmholtz-Gleichung genügen muss, sondern gleichzeitig auch die Kopplungsvorschriften in den Maxwell-Gleichungen erfüllt sein müssen. Das reale Problem reduziert sich also nicht nur auf die Lösung der skalaren Helmholtz-Gleichung 2.19, oder auch deren allgemeine vektorielle Form in 2.13, sondern erfordert die simultane Lösung eines gekoppelten Differentialgleichungssystems erster Ordnung für \vec{E} und \vec{H} , das aus den Maxwell-Gleichungen hervorgeht.

Bisher gingen wir stillschweigend davon aus, dass die benötigten Randwerte auf der gesamten Grenzfläche auch wirklich bekannt sind. In der Regel ist dies jedoch nicht der Fall, da sie messtechnisch oder theoretisch nicht zugänglich sind³. Typischerweise werden deshalb für die Randwerte vernünftige aber auch vereinfachende Annahmen getroffen. Hierzu gehören die Kirchhoffsche Approximation und die Debye-Approximation.

3.2.1 Kirchhoffsche Näherung

In der Kirchhoffschen Näherung werden die Randwerte für das Feld und dessen Normalen-Ableitung an einem beugenden Objekt nach den Prinzipien der geometrischen Optik bestimmt. Wechselwirkungseffekte, die durch Störungen an den Kanten hervorgerufen werden, gehen explizit nicht in die Bestimmung der Randwerte ein, sondern werden vernachlässigt. Das Feld $u(x, y, z)$ samt Ableitung bleibt deshalb unmittelbar vor einer beugenden Öffnung in der Ebene $z = z_0^-$ ungestört und entspricht dem einfallenden Feld $u^{(i)}(x, y, z_0)$:

$$u(x, y, z_0^-) = u^{(i)}(x, y, z_0) \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial u(x, y, z)}{\partial z} \right|_{z=z_0^-} = \left. \frac{\partial u^{(i)}(x, y, z)}{\partial z} \right|_{z=z_0} \quad (3.13)$$

Direkt nach dem beugenden Objekt $z = z_0^+$ wird innerhalb der gesamten beugenden Öffnung \mathcal{A} das Feld und dessen Ableitung so festgelegt, als ob die beugende Struktur gar nicht vorhanden wäre. Außerhalb der Öffnung, im geometrischen Schatten des Objekts,

³Ideal leitende Oberflächen stellen eine Ausnahme dar (siehe Kapitel 3.3.1).

verschwindet es hingegen samt Ableitung komplett.

$$u(x, y, z_0^+) = \begin{cases} u^{(i)}(x, y, z_0) & \text{innerhalb } \mathcal{A} \\ 0 & \text{außerhalb } \mathcal{A} \end{cases} \quad (3.14a)$$

$$\left. \frac{\partial u(x, y, z)}{\partial z} \right|_{z=z_0^+} = \begin{cases} \left. \frac{\partial u^{(i)}(x, y, z)}{\partial z} \right|_{z=z_0} & \text{innerhalb } \mathcal{A} \\ 0 & \text{außerhalb } \mathcal{A} \end{cases} \quad (3.14b)$$

3.2.2 Debye-Näherung

Sowohl bei der Berechnung fokussierter Felder als auch in der Fourier-Theorie der optischen Abbildung kommt eine andere Näherung zum Einsatz, die erstmals von Debye auf die skalare Berechnung eines fokalen Punktes angewendet wurde [27]. Nach Gleichung 2.22 setzt sich das Feld im Brennpunkt hinter einer Apertur nur aus solchen Planwellen zusammen, deren zugehörige Wellenvektoren innerhalb des Aperturkegels $\Omega_{\mathcal{A}}$ der Öffnung liegen:

$$U_{3D}(\vec{k}) = \begin{cases} U_{3D}^{(i)}(\vec{k}) & \text{innerhalb } \Omega_{\mathcal{A}} \\ 0 & \text{außerhalb } \Omega_{\mathcal{A}} \end{cases} \quad (3.15)$$

Dieser wird durch die direkte Verbindung des fokalen Punktes mit der Berandung der beugenden Apertur gebildet (siehe Abbildung 3.1). Während bei der Kirchhoffschen Näherung das Feld im Ortsraum an den Kanten der beugenden Apertur abrupt abgeschnitten wird, geschieht dasselbe bei der Debye-Näherung für das Raumwinkelspektrum des einfallenden Feldes. Die Debye-Näherung kann daher als geometrisch-optische Näherung im Fourier-Raum, das heißt in der Pupille eines optischen Systems betrachtet werden.

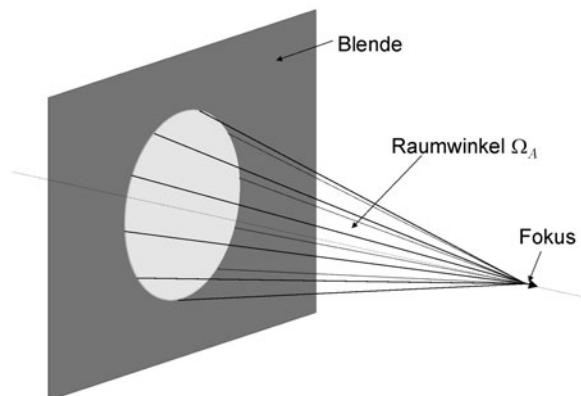


Abb. 3.1: Modell der Debye-Näherung. Für die Beugungsrechnung werden nur Wellenvektoren verwendet, die innerhalb des Öffnungskegels liegen (hier durch Strahlen repräsentiert).

3.2.3 Vektorielle Formulierung der klassischen Beugungstheorie

Die klassische Herleitung des Kirchhoffschen Beugungsintegrals beruht im Kern auf dem Greenschen Satz. Dieser lässt sich problemlos auch in vektorieller Form formulieren. Sei ein begrenztes Volumen \mathcal{V} gegeben, das durch die Fläche \mathcal{S} mit dem nach außen zeigenden lokalen Normalenvektor \vec{n} umschlossen ist, und seien die Funktionen \vec{G} und \vec{U} zweimal stetig differenzierbare, sonst jedoch beliebige komplexwertige Vektorfunktionen, so gilt:

$$\iiint_{\mathcal{V}} (\vec{G} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{U} - \vec{U} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{G}) dV = \iint_{\mathcal{S}} (\vec{U} \times \nabla \times \vec{G} - \vec{G} \times \nabla \times \vec{U}) \cdot \vec{n} d\sigma \quad (3.16)$$

Auf Basis dieses Satzes konnten Stratton und Chu eine vektorielle Formulierung des Kirchhoffschen Beugungsintegrals angeben [28]. Der prinzipielle Lösungsweg erfolgt dabei ganz analog zum skalaren Vorgehen, bezieht jedoch die aus den Maxwell-Gleichungen resultierenden Zusammenhänge zwischen den elektromagnetischen Feldern mit ein. Detaillierte Beschreibungen dieses Vorgehens finden sich auch in [29–31]. Für die Greensche Funktion wird dabei ein Ansatz gewählt, der sich aus einer der skalaren Beugungstheorie entlehnten Kugelwelle und einem *konstanten* Vektor \vec{a} zusammensetzt:

$$\vec{G} = \frac{e^{ikR}}{R} \vec{a} = G \vec{a} \quad (3.17)$$

Wenn keine freien Ladungen und Ströme im Volumen \mathcal{V} und dessen Berandung \mathcal{S} vorliegen, ergibt sich für das elektrische Feld \vec{E} :

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \iint_{\mathcal{S}} \left[i\omega\mu_0\mu_r (\vec{n} \times \vec{H}) G + (\vec{n} \times \vec{E}) \times \nabla G + (\vec{n} \cdot \vec{E}) \nabla G \right] d\sigma \quad (3.18)$$

Analog folgt für das Magnetfeld \vec{H} :

$$\vec{H}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \iint_{\mathcal{S}} \left[i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r (\vec{n} \times \vec{E}) G - (\vec{n} \times \vec{H}) \times \nabla G - (\vec{n} \cdot \vec{H}) \nabla G \right] d\sigma \quad (3.19)$$

Gleichung 3.18 und 3.19 beziehungsweise die noch folgenden verallgemeinerten Versionen in Gleichung 3.20 und 3.20 werden als *Stratton-Chu-Integral* oder auch *Kirchhoff-Kottler-Integral* bezeichnet.

Eine entscheidende Annahme in der Herleitung von Gleichung 3.18 und 3.19 ist die Konstanz des Vektors \vec{a} in Gleichung 3.17. Erst hierdurch wird eine Separation der Vektor-

gleichungen möglich. Im Kern wird mit diesem Ansatz das skalare Kirchhoffsche Integral *getrennt* auf jede Komponente des elektrischen bzw. magnetischen Feldes angewendet. Es ist daher auch nicht verwunderlich, dass ein direkter skalarer Ansatz für die Greensche Funktion zum selben Ergebnis führt [31]. Damit entzieht sich aber die Greensche Funktion einer direkten physikalischen Interpretation im Huygenschen Sinne, da sie nicht der Maxwell-Gleichung $\text{div}\vec{E} = 0$ gehorcht [32]. Dies wird auch besonders deutlich, wenn man direkt den Ansatz der vektoriellen Greenschen Funktion 3.17 betrachtet. Sie beschreibt eine Kugelwelle mit räumlich konstanter Polarisationsrichtung. Dies widerspricht jedoch der transversalen Natur der elektromagnetischen Wellenausbreitung im Freiraum. Genau so wie bei der Diskussion der skalaren Beugungsintegrale ist das Stratton-Chu-Integral in seiner Formulierung in Gleichung 3.18 und 3.19 keinen prinzipiellen Einschränkungen unterworfen. Allerdings bleibt auch in der vektoriellen Formulierung die grundlegende Unzulänglichkeit der klassischen Beugungstheorie erhalten: Die Felder \vec{E} und \vec{H} auf der Fläche \mathcal{S} unterliegen einem komplizierten Kopplungsverhalten, das aus den Maxwell-Gleichungen hervorgeht. Sie sind in der Regel per se nicht bekannt.

Durch eine vektorielle Formulierung des Huygensschen Prinzips auf Basis der symmetrisch erweiterten Maxwell-Gleichungen konnten Marathay et al. den oben beschriebenen Widerspruch beheben [33]. Die fiktiven sekundären Quellen werden dabei durch ein Paar gekreuzter elektrischer und magnetischer Dipole gebildet. In eine ähnliche Richtung zielt eine jüngste Veröffentlichung von Nesterov [34]. Das Kirchhoffsche Integral wird nicht auf die Felder selbst sondern auf den Hertzschen Vektor angewendet. Dieses Vorgehen ist insbesondere in der Antennen-Theorie gebräuchlich [5]. Die eigentlichen elektromagnetischen Felder ergeben sich dann durch Differentiation aus dem Hertzschen Vektor und erfüllen automatisch die Maxwell-Gleichungen. Im Gegensatz zu den Feldern bleibt die räumliche Orientierung des Hertzschen Vektors auch bei hochaperturigen Feldern konstant, so dass der obige Separationsansatz – angewendet auf den Hertzschen Vektor – zu einer physikalisch korrekten skalaren Formulierung des Problems führt. Die Methode ist allerdings von eingeschränkter praktischer Bedeutung, da die Aufstellung des Hertzschen Vektors für das einfallende Feld nur in wenigen Spezialfällen direkt möglich ist. Für beliebige Felder gelingt dies im Allgemeinen nicht.

Zum Schluss sei bemerkt, dass die vektoriellen Erweiterungen nicht die im Folgenden diskutierten Unzulänglichkeiten der Kirchhoffschen Theorie beheben, die sich aus der Festlegung der Randwerte ergeben. Der in Abschnitt 3.2.5 diskutierte Anwendungsbereich wird daher nicht grundsätzlich erweitert.

3.2.4 Inkonsistenzen des klassischen Randwertproblems und das Konzept der Randbeugungswelle

Die Kirchhoffsche Approximation entsprang nicht physikalischen Grundsätzen, sondern vielmehr praktischen Überlegungen, um eine zweckmäßige Lösung des Kirchhoffschen Beugungsintegrals möglich zu machen. Schon bald wurde klar, dass die gleichzeitige Festlegung der Randwerte für das Feld und dessen Ableitung zu Inkonsistenzen führt [32, 35]. Einerseits werden die Randwerte durch das Kirchhoffsche Beugungsintegral nicht reproduziert, andererseits erfordert die Potentialtheorie, dass unter den Kirchhoffschen Randbedingungen das Feld im ganzen Raum verschwindet.

In den Rayleigh-Sommerfeld-Integralen wird diese Schwierigkeit durch eine geschickte Wahl der Greenschen Funktion nach dem Spiegelverfahren und der Festlegung nur eines Randwerttyps behoben [5, 8]. Für das Kirchhoffsche Beugungsintegral gelang Marchand und Wolf [36] durch Einführung einer Randbeugungswelle⁴ eine konsistente Formulierung. Sie greifen dabei auf die Ergebnisse von Rubinowicz [44] zurück, der die Existenz einer Randbeugungswelle im Kirchhoffschen Formalismus herleiten konnte. Kottler konnte die Inkonsistenzen der Kirchhoffschen Theorie beheben, indem er sie als exakte Lösung eines *Sprungwertproblems* anstatt eines *Randwertproblems* des schwarzen Schirms auffasste [45, 46]. Auf ihn geht auch das Konzept der Randbeugungswelle in der vektoriellen Formulierung der Kirchhoffschen Theorie zurück [47, 48]. Die Kirchhoffschen Randbedingungen, die eine Integration über eine endliche Fläche erfordern, widersprechen den Maxwell-Gleichungen. Sie erzwingen nämlich einen Sprung der Tangentialkomponenten von \vec{E} und \vec{H} (siehe Kapitel 2.1). Dieser Widerspruch lässt sich durch die Einführung fiktiver elektrischer und magnetischer Ladungen entlang des Randbereiches der beugenden Öffnung lösen. Dadurch werden einerseits die Kontinuitätsbedingungen erfüllt, andererseits rufen sie das Auftreten eines zusätzlichen Randintegrals hervor, das einer Randbeugungswelle entspricht. Eine detaillierte Herleitung hierzu findet man in Stratton und Chu [28]. Für

⁴Die Vorstellung einer Randbeugungswelle geht bis in die Anfänge der Beugungstheorie zurück, entspricht sie doch unserer alltäglichen Beobachtung: Die Ränder einer beugenden Öffnung scheinen hell, auch wenn sich unser Auge im Schattenbereich befindet [37]. Ursprünglich von Young eingeführt, wurde dieses Konzept in mehreren Arbeiten aufgegriffen und fortgeführt [38–41]. Ein umfassender Überblick findet sich in [42, 43].

das elektrische Feld \vec{E} gilt hiernach:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) = & -\frac{1}{4\pi} \iint_A \left[i\omega\mu_0\mu_r (\vec{n} \times \vec{H}) G + (n \times \vec{E}) \times \nabla G + (\vec{n} \cdot \vec{E}) \nabla G \right] d\sigma \\ & - \frac{1}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{1}{4\pi} \oint_{C_A} \nabla G \vec{H} \cdot d\vec{s} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Für das magnetische Feld \vec{H} gilt:

$$\begin{aligned} \vec{H}(\vec{r}) = & \frac{1}{4\pi} \iint_S \left[i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r (\vec{n} \times \vec{E}) G - (n \times \vec{H}) \times \nabla G - (\vec{n} \cdot \vec{H}) \nabla G \right] d\sigma \\ & - \frac{1}{i\omega\mu_0\mu_r} \frac{1}{4\pi} \oint_{C_A} \nabla G \vec{E} \cdot d\vec{s} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Eine äquivalente Formulierung lässt sich auch in der Debye-Näherung angeben [49]. Es sei betont, dass das Auftreten von Randbeugungswellen in den Stratton-Chu-Integralen ausschließlich auf das physikalisch falsch gestellte Randwertproblem zurückzuführen ist. Die zu ihrer Herleitung eingeführten magnetischen Ladungen und Ströme sind rein fiktiver Natur und besitzen keine physikalische Existenz. Allerdings erlaubt dieser Hilfsgriff eine konsistente Beschreibung des Beugungsproblems im Maxwellschen Sinne unter Vorgabe der Kirchhoffschen Randbedingungen. Näheres zu diesem Punkt wird in Kapitel 3.5 beschrieben.

3.2.5 Anwendungsbereiche der klassischen Beugungstheorien

Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, können mathematische Inkonsistenzen in den klassischen Beugungsintegralen durch eine adäquate Formulierung des Randwertproblems unter Einbindung von Randbeugungswellen beseitigt werden. Als grundlegende Einschränkung der klassischen Beugungstheorie bleibt damit die Kirchhoffsche Approximation an sich. Das gleiche trifft für die Debye-Approximation als äquivalente Näherung im Fourier-Raum zu. Beide fordern eine Unstetigkeit der Wellenfelder an den Aperturrändern einer beugenden Öffnung, die den physikalischen Grundsätzen der Elektrodynamik widerspricht. Es ist daher nur dann eine gute Beschreibung des Beugungsproblems mit klassischen Ansätzen zu erwarten, wenn der Einfluss der – physikalisch falsch – gewählten Randbedingungen klein ist. Hieraus ergeben für sich die Anwendbarkeit klassischer Beugungstheorien folgende Bedingungen:

Schwach beugende Objekte: Die Wellenlänge λ muss klein gegenüber der Ausdehnung D der beugenden Öffnung sein: $kD \gg 1$. Der Einfluss der Diskontinuitäten an den Rändern der Apertur⁵ ist von untergeordneter Bedeutung.

Paraxiale Näherung: Aufgrund der skalaren Näherung wird in der klassischen Beugungstheorie die Kopplung zwischen den Feldstärkekomponenten nicht explizit berücksichtigt. Dies trifft wegen des Ansatzes 3.17 auch für die vektorielle Formulierung 3.20 bzw. 3.21 zu. Die komponentenweise Anwendung der Kirchhoffschen Randbedingungen führt daher für hochaperturige Felder im Allgemeinen zu $\text{div} \vec{E} \neq 0$. Die klassische Beugungstheorie gilt daher nur für kleine Beugungswinkel im Fernfeld $kR \gg 1$. Hier auf wird im Detail in Abschnitt 3.5 eingegangen.

Im Gültigkeitsbereich der klassischen Näherung ist auch zu erwarten, dass sowohl das erste und zweite Integral nach Rayleigh-Sommerfeld als auch das Kirchhoffsche Beugungsintegral dieselben Ergebnisse liefern. Ein entsprechender Nachweis wurde unter anderem von Wolf und Marchand [50] wie auch von Heurtley [51] erbracht.

Obwohl sich der Kern dieser Arbeit mit rigorosen Wechselwirkungseffekten in der optischen Bildentstehung jenseits der klassischen Beugungstheorie beschäftigt, greift sie insbesondere bei der optischen Bildberechnung intensiv auf Konzepte der klassischen Beugungstheorie zurück. Aufgrund der Größe der beugenden Aperturen eines realen Linsensystems im Mikroskop stellt die klassische Theorie hier nicht nur eine äußerst gute Approximation dar, eine rigorose Behandlung des gesamten Abbildungssystems mit hinreichender Genauigkeit und vertretbarem Zeitaufwand wäre auf Basis heutiger Mittel auch gar nicht möglich. Ganz anders verhält es sich bei der Untersuchung von Beugungseffekten, die an den abzubildenden Strukturen auftreten. Die zunehmenden Genauigkeitsanforderungen in der optischen Metrologie machen die Einbeziehung rigoroser Wechselwirkungseffekte für die genaue Bildinterpretation nicht nur dringend notwendig, sie sind auch für die Schaffung neuartiger Messverfahren von zentraler Bedeutung. Die nächsten Abschnitte beschäftigen sich daher mit Verfahren der rigorosen Beugungstheorie.

3.3 Analytische Lösungen rigoroser Beugungsprobleme

Die analytische Lösung von Beugungsproblemen ist nur für einzelne Spezialfälle möglich, die sich nach Epstein [52] in zwei methodische Ansätze unterteilen lassen. Sie umfassen die

⁵Diese äußern sich zum Beispiel in polarisationsabhängigen Verdrängungseffekten an den Kanten.

Lösung der Maxwell-Gleichungen für

1. ideal leitende Objekte, auf der Basis funktionentheoretischer Ansätze. Dieses Verfahren geht auf Sommerfeld zurück.
2. Objekte, deren Oberflächen durch ein angepasstes, im Allgemeinen krummliniges Koordinatensystem beschrieben werden können (Separationsansatz).

3.3.1 Analytische Lösungen für ideale Leiter

Die Unzulänglichkeiten der klassischen Kirchhoffschen Beugungstheorie beruhen auf der Annahme, dass die beugenden Objekte als ideal „schwarz“ angesehen werden. Ein solcher Körper absorbiert die einfallende Strahlung, ohne sie zu reflektieren. Dieses Verhalten steht im Widerspruch zur elektromagnetischen Theorie, wie sich anhand der Fresnelschen Formeln leicht überprüfen lässt. Ein hoher Imaginärteil im Brechungsindex ist immer mit einer maßgeblichen Reflektivität R_f verbunden [53]. Für senkrechten Einfall gilt:

$$R_f = \frac{(n - 1)^2 + (n\kappa)^2}{(n + 1)^2 + (n\kappa)^2} \quad (3.22)$$

Eine ähnliche idealisierende Annahme besteht in der Betrachtung ideal leitender ($\sigma \rightarrow \infty$) Objekte. In diesem Fall geht $n \rightarrow \infty$ beziehungsweise $\kappa \rightarrow 1$ was in einer idealen Reflektivität $R_f = 1$ resultiert. Diese Annahme ist jedoch vollkommen im Einklang mit den Gesetzen der Elektrodynamik und macht eine strenge Lösung des elektromagnetischen Problems für wichtige Fälle möglich.

Das erste und wohl bekannteste Beispiel ist die Beugung an einer unendlich dünnen, ideal leitenden Halbebene nach Sommerfeld [38, 54]. Unter Verwendung des Spiegelungsverfahrens [32] gelang es ihm mit Hilfe funktionentheoretischer Methoden, eine Lösung des Problems anzugeben. Sommerfelds Verfahren lässt sich sowohl auf einen perfekt leitenden Keil [55] als auch auf einen 3D-Konus ausdehnen [56]. Besonders breite Anwendung fand die Theorie idealer Leiter in der Antennen- und Radartechnik. Hier wurde das rigorose Beugungsproblem für vielfältige Formen wie elliptische Zylinder [57], prolate und oblate Sphäroide [58, 59] und rotationssymmetrische Paraboloiden [60, 61] gelöst. Bei den letztgenannten Lösungen wurde auf Separationsverfahren zurückgegriffen, die in Abschnitt 3.3.2 genauer erläutert werden. In der Optik fanden insbesondere die Beugung an einer kreisförmigen Apertur nach Bethe [62], die Beugung an Spalten und Stegen [63, 64] sowie Anwendungen in der Gitterbeugung [65, 66] Interesse.

Bei den bisher beschriebenen Lösungen geht man von zwei Annahmen aus [67, 68]:

1. Die beugenden Objekte sind ideal leitfähig.
2. Ihre Dicke kann gegenüber der Wellenlänge vernachlässigt werden.

Während in tieferen Frequenzbereichen – insbesondere bei Radiowellen – viele Metalle dem idealen Leiter sehr nahe kommen und die Wellenlänge groß gegenüber der Dicke des beugenden Objektes ist, treffen beide Annahmen für den optischen Spektralbereich typischerweise nicht mehr zu. Die Ergebnisse der bisher beschriebenen rigorosen Theorien sind daher für optische Fragestellungen nur beschränkt aussagekräftig.

3.3.2 Analytische Lösungen mit Hilfe des Separationsansatzes

Wie in Abschnitt 2.2.1 schon erörtert wurde, besteht die Schwierigkeit bei der Lösung der inhomogenen Wellengleichung in der Kopplung der Komponenten durch den Gradienten der Ortsinhomogenität. Liegen unstetige Materialsprünge an Grenzflächen vor, so sind die Stetigkeitsbedingungen für die elektrischen und magnetischen Feldkomponenten an jedem Ortspunkt der Oberfläche separat aufzustellen und von den Feldern zu erfüllen. Auch hier stößt man für beliebige Oberflächenberandungen auf Schwierigkeiten.

Die Idee des Separationsansatzes (*engl.: separation of variables method, SVM*) besteht nun darin, durch eine geeignete Wahl des Koordinatensystems die Kopplung in der inhomogenen Wellengleichung aufzuheben beziehungsweise der geometrischen Grenzflächenstruktur des beugenden Objektes Rechnung zu tragen. Das grundlegende Verfahren ist dabei für alle Geometrien gleich [69, 70]:

1. Darstellung der Maxwell-Gleichungen in einem dem Objekt angepassten Koordinatensystem, so dass die Oberfläche des beugenden Objektes mit den Koordinatenflächen zusammenfällt.
2. Entwicklung des einfallenden, transmittierten und des gestreuten Feldes in geeignete Fundamentalmoden des Systems. Die Entwicklungskoeffizienten sind noch Variable.
3. Anwendung der Randbedingungen für die elektrischen und magnetischen Feldkomponenten tangential und normal zu den Grenzflächen. Diese Zerlegung ist aufgrund des angepassten Koordinatensystems relativ einfach zu formulieren.
4. Aufgrund der Orthogonalität der Fundamentalmoden lassen sich aus den Stetigkeitsbedingungen an den Grenzflächen die Entwicklungskoeffizienten der gestreuten und transmittierten Felder aus den Koeffizienten des einfallenden Feldes bestimmen.

Die SVM findet insbesondere in der optischen Streutheorie breite Anwendung. Zu den klassischen Referenzen auf diesem Gebiet gehören van de Hulst [71], Kerker [72, 73] und Bohren/Huffmann [74]. Die Bücher von Mishchenko [75, 76] liefern einen aktuellen Überblick zu diesem Thema. Die SVM geht von der Lösung der vektoriellen Helmholtz-Gleichung aus. Wie von Morse [77] gezeigt wird, lässt die Helmholtz-Gleichung die Separation in elf verschiedenen Koordinatensystemen zu. Hierzu gehören neben den gängigen kartesischen, Zylinder- und Kugelkoordinaten auch konische, parabolische, elliptische und sphäroidische Abwandlungen.

Der einfachste Fall ist eine plane Grenzfläche in kartesischen Koordinaten. Die zugehörige Lösung ist durch die Fresnelschen Gleichungen gegeben. Weitere Beispiele sind die Streuung an kreisförmigen, elliptischen und parabolischen Zylindern. Wohl die größte Bedeutung hat die Streuung an Kugeln (sog. Mie-Streuung) erlangt. Die Lösung dieses Problems geht auf mehrere unabhängige Personen (Lorenz, Love, Mie und Debye) zurück [78]. Die Lösung für ein oblates beziehungsweise prolates Ellipsoid stellt zur Zeit den allgemeinsten analytisch behandelbaren Streutyp dar. Für alle bisher beschriebenen Formen ist auch das Streuproblem für konzentrische Mehrschichtsysteme gelöst.

Mit zunehmender Komplexität des Objekts steigt jedoch auch der Aufwand zur analytischen Lösung des Streuproblems und deren numerischer Umsetzung enorm. Von der Lösung des Streuproblems in weiteren Koordinatensystemen ist daher für die Praxis kein signifikanter Fortschritt zu erwarten [69]. Vielmehr ist die Lösung für ein nicht-sphärisches Teilchen schon so komplex, dass sie sich kaum vom Aufwand anderer numerischer Verfahren unterscheidet. Andererseits ist der Lösungsansatz einiger exakter numerischer Verfahren der hier diskutierten SVM sehr ähnlich. Das einfallende und gestreute Feld wird in einen Satz orthogonaler Funktionen zerlegt, der auch für die Formulierung eines Eigenwertproblems im streuenden Objekt herangezogen wird. Durch Anwendung der Randbedingungen und mit Hilfe der Orthogonalität des Funktionensatzes werden die Streukoeffizienten bestimmt. Ein Beispiel hierfür ist die RCWA, die Fourier-Moden als Funktionensystem verwendet. Sie wird in Kapitel 3.4.2 eingehend beschrieben. Im Ergebnis bleibt festzuhalten, dass für Streu- und Beugungsprobleme an komplizierten Objekten die Unterscheidung zwischen analytischen und numerischen Lösungsverfahren eher formaler als praktischer Natur ist.

3.4 Numerische Lösungsverfahren der rigorosen Beugung

Alle bisher beschriebenen Verfahren sind entweder in ihrem Gültigkeitsbereich starken Einschränkungen unterworfen oder erlauben nur die rigorose Lösung des Beugungsproblems für spezielle Geometrien. Die Notwendigkeit, rigorose Beugungseffekte an beliebigen Strukturen hinsichtlich Form und Materialzusammensetzung behandeln zu können, führte daher seit Mitte der 1960er Jahre zur Entwicklung verschiedener numerischer Lösungsverfahren. Der klassische Anwendungsbereich umfasst dabei die Auslegung verschiedenster Gittertypen für spektrale wie auch strahlformende Anwendungen vom Infrarot bis in den Röntgenbereich [79–83]. Numerische Berechnungsverfahren stellen aber auch eine wesentliche Grundlage für neuartige Anwendungsfelder dar. Insbesondere die Fortschritte in der Mikrooptik und der integrierten Optik sind ohne solche Verfahren nicht denkbar [84–86]. Auch in der Nanooptik stellen numerische Lösungsverfahren den Schlüssel für das grundlegende Verständnis und das Design neuartiger optischer Komponenten dar. Beispiele hierfür sind die außergewöhnlich hohe Transmission durch Arrays von Subwellenlängenaperturen [87–91] oder funktionale Nanostrukturen mit polarisierender Wirkung beziehungsweise breitbandigen Antireflexionseigenschaften (Mottenaugeneffekt) [92–95]. Auch das Forschungsfeld der photonischen Kristalle fällt in diesen Bereich [96–98].

Die rasante Zunahme der Packungsdichte und die damit einhergehende Reduzierung der Strukturdimensionen auf optischen Datenspeichern und elektronischen Schaltkreisen erfordert auch hier die Einbindung rigoroser numerischer Methoden in den optischen Simulationsprozess, da die charakteristischen Größen der Strukturen im Bereich der Wellenlänge und darunter liegen. Dies trifft sowohl für die Simulation des optischen Lithographieprozesses [99], die optische Datenspeicherung [100, 101] als auch die mikroskopische Bildsimulation in der hochauflösenden optischen Metrologie zu, die Gegenstand dieser Arbeit ist.

3.4.1 Überblick über die gängigen Verfahren

Die Notwendigkeit, Beugungseffekte auf Basis der Maxwell'schen Theorie für ganz unterschiedliche Problemstellungen numerisch zu berechnen, hat eine Vielzahl von Simulationsmethoden hervorgebracht. In diesem Sinne erhebt dieser Abschnitt keinen Anspruch auf Vollständigkeit, sondern soll vielmehr die gängigsten und mächtigsten Methoden zusam-

menstellen. Eine genauere Diskussion der Methoden erscheint für die Kernaussagen dieser Arbeit nicht sinnvoll. Auch für einen Vergleich der Methoden bezüglich ihrer Stärken und Schwächen sei auf die im Folgenden zitierte Literatur verwiesen. Die numerischen Simulationen in dieser Arbeit werden auf Basis der Rigorous Coupled Wave Analysis sowie semi-rigorosen Verfahren durchgeführt. Diese werden in Abschnitt 3.4.2 und 3.5 genauer beschrieben.

Zu den klassischen Referenzen der rigorosen Beugungstheorie gehören Petit [102] und Maystre [103, 104]. In Loewen und Popov [105] findet sich eine Klassifikation und ein Vergleich elektromagnetischer Beugungstheorien. In diesem Zusammenhang sind auch die Übersichtsartikel von Li [106] und Nevière [107, 108] zu nennen, die neueren Entwicklungen Rechnung tragen. Auch das Buch von Nevière und Popov [109] liefert einen aktuellen Überblick über rigorose Beugungstheorien. Im Folgenden seien die wesentlichen Methoden mit einer Auswahl von Referenzen zusammengestellt:

Integralgleichungsmethode: Diese Methode ist das älteste Verfahren zur rigorosen Behandlung von Beugungsproblemen. Sie wird heute als eines der zuverlässigsten und genauesten Verfahren der rigorosen Beugung angesehen [82, 102, 110].

Differentielle Methode: Durch eine Fourier-Darstellung des Feldes und der Dielektrizitätsfunktion in der Gitterregion wird das Problem in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen überführt, das mit Standardroutinen gelöst werden kann. Die Methode wird in [109] ausführlich beschrieben.

Rigorous Coupled Wave Analysis: Wie bei der Differentiellen Methode wird sowohl das Feld als auch die Dielektrizitätsfunktion in der Gitterregion durch eine Fourier-Entwicklung dargestellt. Durch die Beschränkung auf binäre und stufenförmige Profilformen kann jedoch das Differentialgleichungssystem in ein Eigenwertproblem überführt werden. Dies gestattet eine effiziente und stabile Lösung des Beugungsproblems. Die Methode wird im nächsten Abschnitt eingehend beschrieben.

Modale Methode: Dieses Verfahren ist der Differentiellen Methode und der RCWA sehr ähnlich, stellt jedoch das Feld im Gitterbereich nicht als Fourier-Reihe, sondern in einer Eigenmodenentwicklung der lamellenartigen Gitterstruktur dar. Dies führt auf eine transzendente Gleichung, die numerisch gelöst werden muss [111–115].

Koordinatentransformationsmethode: Durch eine geeignete Koordinatentransformation wird das gewellte Oberflächenprofil des Gitters auf eine Ebene abgebildet. Dies vereinfacht die Anpassung der Randbedingungen an den Grenzflächen. Die Maxwell-

Gleichungen in krummlinigen Koordinaten führen zu einem System partieller Differentialgleichungen, das numerisch gelöst wird [116–118].

Gruppe der Finite Elemente Methoden: Hierunter fallen die Finite Difference Time Domain Methode (FDTD) [119], die Finite Elemente Methode [120–123] und die Finite Differenzen Methode [124]. Auch die Boundary Element Methode (BEM) ist hier einzuordnen [125, 126].

Multiple Multipole Method: Auch als Methode der fiktiven Quellen bekannt, ist diese Methode insbesondere in der Nahfeldoptik beliebt [127–129].

3.4.2 Rigorous Coupled Wave Analysis

Die Ursprünge der *Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA)* gehen auf die rigorose mathematische Behandlung von dicken holographischen Emulsionsschichten zurück, die durch klassische Ansätze der Kirchhoffschen Beugungstheorie nicht mehr korrekt beschrieben werden konnten. Die ersten Arbeiten von Burckhardt [10] wurden von mehreren Autoren aufgenommen und insbesondere auf Probleme der Holographie angewandt [130–132]. In den frühen 1980er Jahren wurde die Methode durch Moharam und Gaylord unter dem Namen Rigorous Coupled Wave Analysis verbreitet [133], um sie gegenüber klassischen Berechnungsmethoden der Holographie, der *Coupled Wave Theory* [134], abzugrenzen. Diese Autoren stellten auch sehr früh die ersten Arbeiten zu Kreuzgittern vor [135, 136].

Im Gegensatz zur Modalen Methode greift die RCWA auch innerhalb der Gitterregion auf eine Fourier-Reihenentwicklung als Funktionensystem zurück. Daher spricht man auch von der *Fourier-Modalen Methode*. Da es sich bei Planwellen nicht um die Fundamentalmoden der Gitterregion handelt [137], kommt es zu einer Kopplung der Fourier-Moden, die durch die Lösung eines für die RCWA charakteristischen Eigenwertproblems beschrieben wird.

Heutzutage gehört die RCWA zu den am weitesten verbreiteten Simulationen der Beugungstheorie überhaupt. Die Anwendungsgebiete reichen von klassischen Applikationen in der Holographie [138] über das Design diffraktiver optischer Elemente [139] und Nanooptiken [140] hin zur Behandlung photonischer Kristalle [141]. Die größte Bedeutung hat die RCWA wohl in jüngster Zeit in der Scatterometrie und Diffraktometrie als integraler Bestandteil der modellbasierten Strukturrekonstruktion erlangt [142].

Die folgenden Ausführungen lehnen sich in der Darstellung und Notation an die Veröffentlichung von Moharam et al. an [143, 144]. In der hier dargestellten Form wird allerdings über

die Behandlung von 1D-Gittern hinaus die Formulierung des Algorithmus auf 2D-Gitter (Kreuzgitter) erweitert. Hierdurch wird eine Modellierung beliebiger 3D-Strukturen möglich. Die Formulierung erfolgt unter voller Berücksichtigung der Konvergenzverbesserung nach Li [145, 146]. In Abschnitt 3.4.2.6 findet sich eine genauere Diskussion der Leistungsfähigkeit der verwendeten Algorithmen und in Abschnitt 3.4.2.7 werden Referenzen auf aktuelle Entwicklungen gegeben.

3.4.2.1 Die Geometrie des Beugungsproblems und Darstellung der Felder

In Abbildung 3.2 ist die Geometrie des im Folgenden diskutierten Beugungsproblems dargestellt. Neben dem globalen kartesischen Koordinatensystem, das durch die x -, y - und z -Achse aufgespannt ist, werden auch die jeweiligen sp -Koordinatensysteme der beteiligten Planwellen zur Beschreibung des Beugungsproblems herangezogen. In Abbildung 3.2

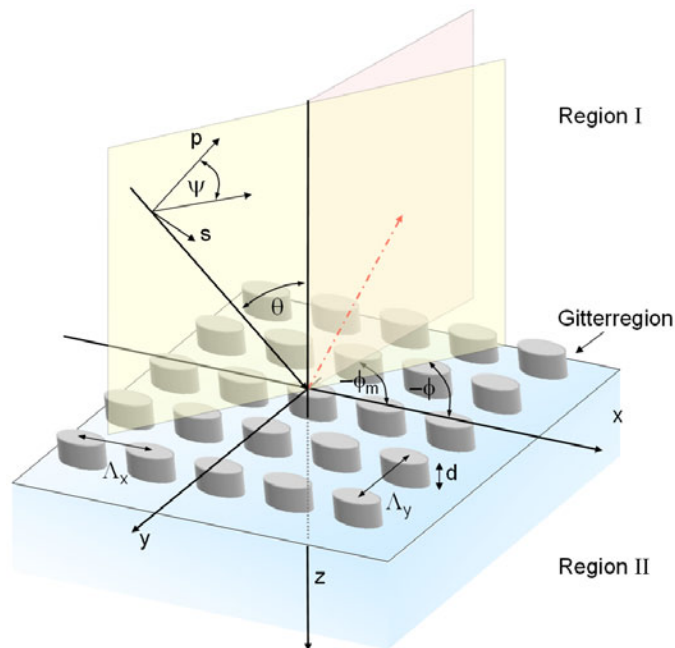


Abb. 3.2: Geometrie des Beugungsproblems

ist das sp -Koordinatensystem der einfallenden ebenen Welle exemplarisch dargestellt. Die p -Komponente liegt in der Ein- beziehungsweise Ausfallsebene der entsprechenden Planwelle, die s -Komponente ist senkrecht dazu. Beide Komponenten stehen darüber hinaus senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der jeweiligen Welle. Zunächst wird ein Binärgitter betrachtet, das zwischen zwei homogenen Regionen I und II mit den Brechungsindizes n_I und n_{II} eingebettet ist.

In der Deckschicht I falle von oben eine ebene Welle unter dem Polarwinkel θ und dem Azimutwinkel ϕ ein. Der normierte Feldstärkevektor bilde den Winkel ψ mit der Einfallsebene. Im Gegensatz zu [143] wird eine negative Zeitabhängigkeit $e^{-i\omega t}$ gewählt:

$$\vec{E}_{inc} = e^{ik_0 n_I (\sin \theta \cos \phi x + \sin \theta \sin \phi y + \cos \theta z)} \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \theta \cos \phi - \sin \psi \sin \phi \\ \cos \psi \cos \theta \sin \phi + \sin \psi \cos \phi \\ -\cos \psi \sin \theta \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

In den homogenen Halbräumen über und unterhalb des modulierten Gitterbereiches lässt sich das transmittierte beziehungsweise reflektierte Feld in Form einer Rayleigh-Entwicklung [147] darstellen:

$$\vec{E}_I = \vec{E}_{inc} + \sum_{\mu, \nu = -M_{x,y}}^{M_{x,y}} \vec{R}_{\mu\nu} e^{i(k_{x\mu\nu} x + k_{y\mu\nu} y - k_{I,z\mu\nu} z)} \quad (3.24)$$

$$\vec{E}_{II} = \sum_{\mu, \nu = -M_{x,y}}^{M_{x,y}} \vec{T}_{\mu\nu} e^{i(k_{x\mu\nu} x + k_{y\mu\nu} y + k_{II,z\mu\nu} (z-d))} \quad (3.25)$$

$\vec{R}_{\mu\nu}$ und $\vec{T}_{\mu\nu}$ bezeichnen die Reflexions- beziehungsweise Transmissionsamplituden der Beugungsordnungen, und $M_{x,y}$ geben die Modenzahl der Entwicklung in der jeweiligen Richtung an. Die Beugungsrichtungen sind durch das Floquet-Theorem festgelegt:

$$k_{x\mu\nu} = k_{xinc} + g_{x\mu\nu} = k_0 n_I \sin \theta \cos \phi - \mu \left(\frac{2\pi}{\Lambda_x} \right) \quad (3.26a)$$

$$k_{y\mu\nu} = k_{yinc} + g_{y\mu\nu} = k_0 n_I \sin \theta \sin \phi - \nu \left(\frac{2\pi}{\Lambda_y} \right) \quad (3.26b)$$

Hierbei bezeichnen $\Lambda_{x,y}$ die Gitterperiode in x- beziehungsweise y-Richtung. Die z-Komponente des Wellenvektors ergibt sich unter Berücksichtigung der analogen Fallunterscheidung von Gleichung 3.4 zu:

$$k_{\ell,z\mu\nu} = \left((k_0 n_\ell)^2 - k_{x\mu\nu}^2 - k_{y\mu\nu}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \ell = I, II \quad (3.27)$$

Die entscheidende Grundlage der RCWA bildet die Fourier-modale Zerlegung des Feldes nicht nur in den homogenen Bereichen der Deckschicht und des Substrats sondern auch in

der Gitterregion. Die Geometrie des Problems erlaubt den Separationsansatz⁶:

$$\vec{E}_g = \sum_{\mu, \nu = -M_{x,y}}^{M_{x,y}} [S_{x\mu\nu}(z)\vec{e}_x + S_{y\mu\nu}(z)\vec{e}_y + S_{z\mu\nu}(z)\vec{e}_z] e^{i(k_{x\mu\nu}x + k_{y\mu\nu}y)} \quad (3.28)$$

$$\vec{H}_g = -i\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_{\mu, \nu = -M_{x,y}}^{M_{x,y}} [U_{x\mu\nu}(z)\vec{e}_x + U_{y\mu\nu}(z)\vec{e}_y + U_{z\mu\nu}(z)\vec{e}_z] e^{i(k_{x\mu\nu}x + k_{y\mu\nu}y)} \quad (3.29)$$

Zusammen mit der Fourier-Reihenentwicklung der räumlichen Dielektrizitätsverteilung des Gitters

$$\varepsilon_r(x, y) = \sum_{\mu, \nu = -M_{x,y}}^{M_{x,y}} \varepsilon_{\mu\nu} e^{i(g_{x\mu\nu}x + g_{y\mu\nu}y)} \quad (3.30)$$

bildet dieser Ansatz die Basis für die Formulierung des zugehörigen Eigenwertproblems, das im nächsten Abschnitt genauer diskutiert wird.

3.4.2.2 Die Lösung des Eigenwertproblems in der Gitterregion

Das Einsetzen der Gleichungen 3.28, 3.29 und 3.30 in die Maxwell-Gleichungen 2.1 und 2.2 führt nach Elimination der Normalenkomponenten E_{g_z} und H_{g_z} auf einen $4M$ -dimensionalen Satz gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{S}_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \mathbf{S}_x}{\partial z} \\ \frac{\partial \mathbf{U}_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \mathbf{U}_x}{\partial z} \end{bmatrix} = k_0 \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y \\ \mathbf{K}_x \mathbf{K}_y & \mathbf{E}_{ax} - \mathbf{K}_y^2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}_{ay} & -\mathbf{K}_x \mathbf{K}_y & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{S}_y \\ \mathbf{S}_x \\ \mathbf{U}_y \\ \mathbf{U}_x \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

Hierbei werden durch eine geeignete Bijektion (siehe zum Beispiel [153])

$$\mu, \nu \in [M_x \times M_y] \rightarrow m \in [M \times 1] \quad \text{mit} \quad M = M_x M_y \quad (3.32)$$

die zweidimensionalen Fourier-Koeffizienten-Arrays in Spaltenvektoren umgeordnet. Die zugehörigen Vektoren $\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y, \mathbf{U}_x, \mathbf{U}_y$ sind im Folgenden fett gekennzeichnet. \mathbf{K}_x und \mathbf{K}_y bezeichnen mit k_{x_m} beziehungsweise k_{y_m} gebildete Diagonalmatrizen $\in [M \times M]$. \mathbf{I} stellt

⁶Im Folgenden beschränken wir uns auf ein rechtwinklig-kartesisches Koordinatensystem. Von Li wurde eine allgemeinere Formulierung der RCWA in schwiefwinkligen Koordinaten angegeben [145, 146, 148]. Eine Formulierung der RCWA für geneigte Binärgitter findet sich in [149]. Analog zur Differentiellen Methode ist auch eine Formulierung mit Hilfe des Separationsansatzes in allgemeineren Koordinatensystemen denkbar [109, 150–152].

die M -dimensionale Einheitsmatrix und $\mathbf{0}$ die M -dimensionale 0-Matrix dar. \mathbf{E} , \mathbf{E}_{ax} und \mathbf{E}_{ay} bezeichnen Toeplitz-Matrizen, die sich unter Beachtung der Li'schen Faktorisierungsregeln [154] aus den Fourier-Koeffizienten der Dielektrizitätsfunktion im Gitterbereich ergeben [146]⁷.

Durch blockweises Einsetzen in Gleichung 3.31 lässt sich das Problem auf einen $2M$ -dimensionalen Satz gekoppelter Differentialgleichungen für \mathbf{U}_x und \mathbf{U}_y reduzieren.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \mathbf{U}_y}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 \mathbf{U}_x}{\partial z^2} \end{bmatrix} = k_0^2 \begin{bmatrix} \mathbf{K}_y^2 + \mathbf{E}_{ax} [\mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{I}] & [\mathbf{K}_x - \mathbf{E}_{ax} \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1}] \mathbf{K}_y \\ [\mathbf{K}_y - \mathbf{E}_{ay} \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1}] \mathbf{K}_x & \mathbf{K}_x^2 + \mathbf{E}_{ay} [\mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y - \mathbf{I}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_y \\ \mathbf{U}_x \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

Bei Gleichung 3.33 handelt es sich um ein System linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen 2. Ordnung mit konstanten Koeffizienten, das über einen Exponentialansatz in ein Eigenwertproblem überführt werden kann. Durch die Diagonalisierung der zugehörigen Kopplungsmatrix ergibt sich die Lösung:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{U}_y \\ \mathbf{U}_x \end{bmatrix} = \sum_{m=1}^{2M} \mathbf{w}_m [-c_m^+ e^{-k_0 q_m z} + c_m^- e^{k_0 q_m (z-d)}] \quad (3.34)$$

wobei \mathbf{w}_m ($m = 1 \dots 2M$) die Eigenvektoren mit den zugehörigen Eigenwerten $\pm q_m$ bezeichnen. Die Entwicklungskoeffizienten c_m^\pm sind noch unbestimmt. Durch den linken unteren Block in Gleichung 3.31 erfolgt die Einbindung von \mathbf{S}_x und \mathbf{S}_y :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{U}_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \mathbf{U}_x}{\partial z} \end{bmatrix} = k_0 \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{K}_x \mathbf{K}_y & \mathbf{E}_{ax} - \mathbf{K}_y^2 \\ \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}_{ay} & -\mathbf{K}_x \mathbf{K}_y \end{bmatrix}}_{\Omega} \begin{bmatrix} \mathbf{S}_y \\ \mathbf{S}_x \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 3.34 in 3.35 ergibt sich der Zusammenhang zwischen den Feldstärkeamplituden des Planwellenansatzes aus Gleichung 3.28 und 3.29 sowie den Entwicklungskoeffizienten der Fundamentalmodenzerlegung aus 3.34:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{S}_y \\ \mathbf{S}_x \\ \mathbf{U}_y \\ \mathbf{U}_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{V} \Phi^-(z) & \mathbf{V} \Phi^+(z) \\ \mathbf{W} \Phi^-(z) & \mathbf{W} \Phi^+(z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

mit $\mathbf{V} = \Omega^{-1} \mathbf{W} \mathbf{Q}$. Hierbei sind \mathbf{Q} , Φ^- und Φ^+ Diagonalmatrizen, die aus den Eigenwerten

⁷Die darin verwendeten Matrizen sind mit $\mathbf{E}_{ax} = \llbracket \varepsilon \rrbracket$ und $\mathbf{E}_{ay} = \llbracket \varepsilon \rrbracket$ bezeichnet.

q_m , beziehungsweise den Exponentialfunktionen $e^{-k_0 q_m z}$ und $e^{k_0 q_m (z-d)}$ gebildet werden. \mathbf{W} bezeichnet die aus den Eigenvektoren zusammengesetzte Matrix. Alle eingeführten Matrizen sind $\in [2M \times 2M]$.

3.4.2.3 Bestimmung der Beugungskoeffizienten

Die Bestimmung der Reflexions- und Transmissionsamplituden sowie der noch freien Entwicklungskoeffizienten \mathbf{c}^\pm in Gleichung 3.34 erfolgt durch Abgleich der Randbedingungen für die Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Felder (siehe Abschnitt 2.1). Diese Feldanpassung wird unter Verwendung der Gleichungen 3.24, 3.25 sowie 3.36 an der Grenzfläche zwischen Gitterregion und umgebendem Medium durchgeführt. Hierbei kommt nicht das globale kartesische Koordinatensystem zum Einsatz, sondern die jeweiligen sp-Koordinatensysteme der gebeugten Wellen. \mathbf{R}_s und \mathbf{R}_p sind dabei M -dimensionale Spaltenvektoren, die aus den Normalenkomponenten des elektrischen beziehungsweise des magnetischen Feldes in den Beugungsebenen in Reflexion gebildet werden. Sie können als TE- und TM-Komponenten des reflektierten Feldes betrachtet werden.

$$\mathbf{R}_{s_m} = \cos \phi_m \mathbf{R}_{y_m} - \sin \phi_m \mathbf{R}_{x_m} \quad (3.37a)$$

$$\mathbf{R}_{p_m} = -\frac{i}{k_0} [\cos \phi_m (k_{I,z_m} \mathbf{R}_{x_m} + k_{x_m} \mathbf{R}_{z_m}) + \sin \phi_m (k_{y_m} \mathbf{R}_{z_m} + k_{I,z_m} \mathbf{R}_{y_m})] \quad (3.37b)$$

Für die Spaltenvektoren der Transmissionsamplituden \mathbf{T}_s und \mathbf{T}_p gilt analog:

$$\mathbf{T}_{s_m} = \cos \phi_m \mathbf{T}_{y_m} - \sin \phi_m \mathbf{T}_{x_m} \quad (3.38a)$$

$$\mathbf{T}_{p_m} = \frac{i}{k_0} [\cos \phi_m (k_{II,z_m} \mathbf{T}_{x_m} - k_{x_m} \mathbf{T}_{z_m}) - \sin \phi_m (k_{y_m} \mathbf{T}_{z_m} - k_{II,z_m} \mathbf{T}_{y_m})] \quad (3.38b)$$

Die Anpassung der Randbedingungen für die Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Felder an der oberen Grenzfläche ($z = 0$) liefert das Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\phi \mathbf{V} & \mathbf{D}_\phi \mathbf{V} \Phi \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} & -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} \Phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_I \\ \hat{\mathbf{Y}}_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{R}_s \\ \mathbf{R}_p \end{bmatrix} + \mathbf{L}_{inc} \quad (3.39)$$

Zur kompakteren Darstellung wurden folgende Matrizen eingeführt:

$$\mathbf{D}_\phi = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_c & -\mathbf{F}_s \\ \mathbf{F}_s & \mathbf{F}_c \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{D}}_\phi = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_s & \mathbf{F}_c \\ \mathbf{F}_c & -\mathbf{F}_s \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{Y}}_I = \begin{bmatrix} i\mathbf{Y}_I & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{Z}}_I = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & i\mathbf{Z}_I \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

\mathbf{F}_s und \mathbf{F}_c sind Diagonalmatrizen mit den Diagonalelementen $\sin \phi_m$ und $\cos \phi_m$, die aus den Sinus- beziehungsweise Kosinusfunktionen der Beugungswinkel ϕ_m gebildet werden. Die Diagonalmatrizen \mathbf{Y}_I und \mathbf{Z}_I enthalten auf der Diagonalen die Elemente $(k_{I,z_m}/k_0)$ beziehungsweise $(k_{I,z_m}/k_0 n_I^2)$. Φ hat die Diagonalelemente $e^{-k_0 q_m d}$. Die einfallende Welle wird durch folgenden Term repräsentiert:

$$\mathbf{L}_{inc} = \begin{bmatrix} \sin \psi \delta_{m0} \\ \cos \psi \cos \theta \delta_{m0} \\ -i n_I \sin \psi \cos \theta \delta_{m0} \\ i n_I \cos \psi \delta_{m0} \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

In gleicher Weise führt die Anpassung der Randbedingungen für die Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Felder an der unteren Grenzfläche ($z = 0$) auf das Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\phi \mathbf{V} \Phi & \mathbf{D}_\phi \mathbf{V} \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} \Phi & -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Z}}_2 \\ \hat{\mathbf{Y}}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_s \\ \mathbf{T}_p \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

mit den Hilfsmatrizen:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{II} = \begin{bmatrix} -i \mathbf{Y}_{II} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{Z}}_{II} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -i \mathbf{Z}_{II} \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

Analog zu oben sind \mathbf{Y}_{II} und \mathbf{Z}_{II} als Diagonalmatrizen mit den Elementen $(k_{II,z_m}/k_0)$ beziehungsweise $(k_{II,z_m}/k_0 n_{II}^2)$ definiert.

Mit Gleichung 3.39 und 3.42 liegt insgesamt ein System von $8M$ Gleichungen mit $8M$ Unbekannten vor, dessen Lösung die gesuchten Beugungsamplituden \mathbf{R}_s , \mathbf{R}_p , \mathbf{T}_s und \mathbf{T}_p sowie die Kopplungskoeffizienten im Gitter \mathbf{c}^\pm liefert.

3.4.2.4 Simulation von Relief- und Schichtgittern

Die bisherigen Betrachtungen waren auf Binärgitter beschränkt. Erst durch diese Einschränkung lässt sich das Problem separieren und in Form eines Eigenwertproblems einfach lösen. Um die Separabilität aufrecht zu erhalten, aber dennoch beliebige Profilformen betrachten zu können, wird auf eine Schichtstapel-Näherung (*multilayer approximation*) zurückgegriffen. Dieses Verfahren ist auch nötig, um Schichtgitter behandeln zu können, die aus unterschiedlichen Materialien zusammengesetzt sind. Diese Vorgehensweise wur-

de zum ersten Mal von Peng vorgestellt [131] und findet neben der RCWA auch für die Modale Methode [114] und die Differentielle Methode [109] breite Anwendung. Sie ist in Abbildung 3.3 schematisch skizziert.

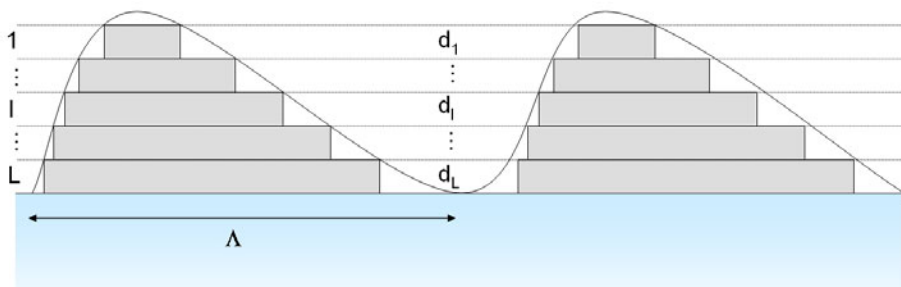


Abb. 3.3: Schichtstapelmodell für Profil- und Schichtgitter

Der Abgleich der physikalischen Randbedingungen für die elektrischen und magnetischen Felder an allen $L+1$ Grenzflächen führt analog zu den Gleichungen 3.39 und 3.42 auf ein lineares Gleichungssystem, das simultan für die Transmissions- und Reflexionsamplituden sowie alle Kopplungskoeffizienten numerisch stabil gelöst werden kann [115, 155]. Die Dimensionalität $4M(L+1)$ des Problems ist aber für hohe Schicht- und Modenzahlen so groß, dass es sich einer effizienten numerischen Berechnung entzieht. Um dieses Problem zu vermeiden, wurden unterschiedliche Verfahren zur sukzessiven Berechnung der Felder durch den Schichtstapel hindurch vorgeschlagen. Eine schrittweise Anwendung der Randbedingung von Schicht zu Schicht und das kaskadierte Einsetzen der Ergebnisse in die jeweils folgende Schicht führt zum herkömmlichen Transmissionsmatrix-Algorithmus (*Standard Transmittance Matrix Approach*). Die Kopplungskoeffizienten \mathbf{c}_ℓ^\pm in den einzelnen Schichten treten nun nicht mehr explizit auf. Es ist nur noch ein $4M$ -dimensionales Gleichungssystem mit $4M$ Unbekannten unabhängig von der Schichtenzahl L zu lösen:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{Z}}_I \\ \widehat{\mathbf{Y}}_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{R}_s \\ \mathbf{R}_p \end{bmatrix} + \mathbf{L}_{inc} \\ = \prod_{\ell=1}^L \begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\phi \mathbf{V} & \mathbf{D}_\phi \mathbf{V} \Phi \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} & -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} \Phi \end{bmatrix}_\ell \begin{bmatrix} -\mathbf{D}_\phi \mathbf{V} \Phi & \mathbf{D}_\phi \mathbf{V} \\ -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} \Phi & -\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} \end{bmatrix}_\ell^{-1} \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{Z}}_{II} \\ \widehat{\mathbf{Y}}_{II} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_s \\ \mathbf{T}_p \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Dieses direkte Vorgehen erfordert jedoch in jeder Schicht eine Matrixinversion, die insbesondere bei dicken, verlustbehafteten Medien oder beim Auftreten evaneszenter Wellen zu numerischen Instabilitäten führt [144, 156]. Dann können die zugehörigen Matrizen Φ_ℓ in

der ℓ -ten Schicht nicht mit hinreichender numerischer Genauigkeit dargestellt werden, was zur Inversion einer schlecht konditionierten Matrix führt.

Um diese numerischen Schwierigkeiten zu beheben, haben sich neben anderen Methoden [157–159] insbesondere der *R-Matrix-Algorithmus* [160, 161], der *S-Matrix-Algorithmus* [162–164] und der *Enhanced Transmittance Matrix Approach (ETMA)* [144] etabliert. Von Li wurde eine Zusammenstellung der unterschiedlichen Implementierungen des R-Matrix- und S-Matrix-Algorithmus vorgenommen und diese Verfahren verglichen [164, 165]. Tan stellte den S-Matrix-Algorithmus dem ETMA gegenüber [166]. Für die RCWA hat sich dabei der ETMA als vorteilhaft erwiesen. Mit ihm wurden auch die Rechnungen dieser Arbeit durchgeführt und daher soll er kurz skizziert werden.

Der Enhanced Transmittance Matrix Approach

Die folgenden Ausführungen stellen eine Erweiterung des *Partial Solution Approach* dar, der von Moharam et al. entwickelt wurde und sich in der ursprünglichen Form auf die Berechnung der Reflexionskoeffizienten konzentriert [144]. Durch eine geeignete Formulierung ist aber das vollständige Schichtstapelproblem unter Bestimmung von $\mathbf{R} = [\mathbf{R}_s, \mathbf{R}_p]^T$, $\mathbf{T} = [\mathbf{T}_s, \mathbf{T}_p]^T$ und \mathbf{c}_ℓ^\pm lösbar. Eine solche Erweiterung wird auch von Tan beschrieben [166]. Der entscheidende Lösungsansatz des Verfahrens besteht darin, Matrixinversionen schlecht konditionierter Matrizen, wie sie in Gleichung 3.44 auftreten, zu vermeiden. Hierzu werden die zu invertierenden Matrizen in den einzelnen Schichten aufgespalten. Unter Verwendung geeigneter Substitutionen führt dies zu einem Satz von zwei Matrixgleichungen:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_\ell \\ \mathbf{b}_\ell \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \{-\mathbf{D}_\phi \mathbf{V}\}_\ell & \mathbf{F}_{\ell+1} \\ \{\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W}\}_\ell & \mathbf{G}_{\ell+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \{\mathbf{D}_\phi \mathbf{V} \Phi\}_\ell \\ \{\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W} \Phi\}_\ell \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

mit der Definition:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_\ell \\ \mathbf{G}_\ell \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \{-\mathbf{D}_\phi \mathbf{V}\}_\ell (\mathbf{I} - \Phi_\ell \mathbf{a}_\ell) \\ \{-\tilde{\mathbf{D}}_\phi \mathbf{W}\}_\ell (\mathbf{I} + \Phi_\ell \mathbf{a}_\ell) \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

Beide Matrixgleichungen sind nun gut konditioniert. Die Matrixinversion in Gleichung 3.45 ist numerisch stabil, und in Gleichung 3.46 treten die kritischen Matrizen Φ_ℓ nur noch als Summen- oder Differenzterm zur Einheitsmatrix auf. Daher liefert auch Gleichung 3.46 numerisch stabile Ergebnisse. Mit den Startwerten $\mathbf{F}_{L+1} = \hat{\mathbf{Z}}_{II}$ und $\mathbf{G}_{L+1} = \hat{\mathbf{Y}}_{II}$ erfolgt durch wechselseitiges Einsetzen der Ergebnisse die sukzessive Berechnung der Hilfsgrößen:

$$[\mathbf{F}_{L+1}, \mathbf{G}_{L+1}] \Rightarrow [\mathbf{a}_L, \mathbf{b}_L] \Rightarrow [\mathbf{F}_L, \mathbf{G}_L] \Rightarrow \cdots \Rightarrow [\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] \Rightarrow [\mathbf{F}_1, \mathbf{G}_1] \quad (3.47)$$

Um an die eigentlichen Kopplungskoeffizienten in den Schichten und an die Beugungsamplituden zu kommen, gehen wir von Gleichung 3.39 aus. Diese lässt sich durch einfache Umformungen in folgender Form darstellen:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{R} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 & -\widehat{\mathbf{Z}}_1 \\ \mathbf{G}_1 & \widehat{\mathbf{Y}}_1 \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{L}_{inc} \quad (3.48)$$

Mit der Rekursionsformel:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^- \\ \mathbf{c}_{\ell+1}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_\ell \\ \mathbf{b}_\ell \end{bmatrix} \mathbf{c}_\ell^+ \quad (3.49)$$

ergeben sich die Kopplungskoeffizienten \mathbf{c}_ℓ^\pm der einzelnen Schichten und schließlich auch die Transmissionsamplituden mit $\mathbf{T} = \mathbf{c}_{L+1}^+$:

$$[\mathbf{c}_1^+, \mathbf{R}] \Rightarrow [\mathbf{c}_2^+, \mathbf{c}_1^-] \Rightarrow \dots \Rightarrow [\mathbf{c}_L^+, \mathbf{c}_{L-1}^-] \Rightarrow [\mathbf{T}, \mathbf{c}_L^-] \quad (3.50)$$

In der angegebenen Formulierung liefert der ETMA ein zuverlässiges Verfahren, Schichtsysteme hoher Schichtenzahl und großer Tiefe numerisch stabil zu berechnen. Die mit der Existenz von evaneszenten Wellen verknüpfte numerische Instabilität wird durch eine rekursive Formulierung des Problems behoben. In der hier dargestellten erweiterten Formulierung sind neben den Beugungsamplituden auch die Kopplungskoeffizienten in den Schichten bestimmbar und können für die Berechnung der Nahfelder in der Struktur herangezogen werden.

3.4.2.5 Anbindung der Lösung an die mikroskopische Bildsimulation

Die RCWA liefert als Fourier-Modale Methode unmittelbar das Beugungsspektrum (d.h. die Planwellenzerlegung) als Ergebnis der elektromagnetischen Beugungsrechnung. Die Ergebnisse sind also sehr leicht an messbare Größen der Diffraktometrie oder Scatterometrie anzubinden. Sie bilden auch direkt die Basis für die mikroskopische Bildsimulation. In Form der Lösung von Gleichung 3.37 und 3.38 beziehungsweise Gleichung 3.50 liegt eine gemischte Darstellung elektromagnetischer Felder vor. Die einzelnen Beugungsamplituden sind nicht als Transversalkomponenten des elektrischen Feldes für die jeweilige Beugungsordnung angegeben, sondern vielmehr als Tangentialkomponenten des elektrischen und magnetischen Feldes an der Gitteroberfläche. Als Koordinatensystem dient auch nicht das globale xy-Koordinatensystem, sondern die sp-Koordinatensysteme der jeweiligen Beugungsordnungen (siehe auch Abbildung 3.2). Um die Ergebnisse der RCWA an die mi-

kroskopische Bildsimulation anzubinden, ist jedoch eine Umrechnung in transversale elektrische Felder erforderlich, die in einem globalen xy-Koordinatensystem dargestellt sind. In diesem Fall reicht ein zwei-komponentiger Vektor $\tilde{\mathbf{E}}(k_{x_{\mu\nu}}, k_{y_{\mu\nu}})$ zur Darstellung der Beugungsordnungen⁸.

Im Fall der Transmission entsprechen die Lösungsvektoren $\mathbf{T}_{s_{\mu\nu}}$ in Gleichung 3.38 den Normalenkomponenten des elektrischen Feldes für die jeweiligen Beugungsordnungen. Sie sind gleichzeitig transversal zu den zugehörigen Ausbreitungsrichtungen und entsprechen damit auch der s-Komponente des elektrischen Feldes im Koordinatensystem der jeweiligen Planwelle der Fourier-Zerlegung. Es gilt daher $\tilde{\mathbf{E}}_s(k_{x_{\mu\nu}}, k_{y_{\mu\nu}}) = \mathbf{T}_{s_{\mu\nu}}$. Die Abhängigkeit von der einfallenden Beleuchtungswelle wird im Folgenden zur besseren Darstellung weggelassen. Der Lösungsvektor $\mathbf{T}_{p_{\mu\nu}}$ hingegen beschreibt die Normalenkomponenten des magnetischen Feldes der einzelnen Beugungsamplituden in der Gitterebene. Wie aus Gleichung 2.23 schnell ersichtlich ist, sind diese aber auf Grund der Transversalität der Planwellen unmittelbar proportional zu den p-Komponenten des elektrischen Feldes in der jeweiligen Beugungsebene. Für die Eintrittspupille gilt: $\tilde{\mathbf{E}}_p(k_{x_{\mu\nu}}, k_{y_{\mu\nu}}) = \frac{i}{n} \mathbf{T}_{p_{\mu\nu}}$, wobei n der Brechungsindex im Bildraum ist. Durch die Transformation in das globale xy-Koordinatensystem erhält man die gesuchte Feldverteilung⁹:

$$\tilde{\mathbf{E}}(k_{x_{\mu\nu}}, k_{y_{\mu\nu}}) = \frac{1}{\sqrt{k_{x_{\mu\nu}}^2 + k_{y_{\mu\nu}}^2}} \begin{pmatrix} -k_{y_{\mu\nu}} & \frac{i}{n} k_{x_{\mu\nu}} \\ k_{x_{\mu\nu}} & \frac{i}{n} k_{y_{\mu\nu}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{s_{\mu\nu}} \\ \mathbf{T}_{p_{\mu\nu}} \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

Analog folgt für die Reflexionsamplituden der Gitterbeugung aus Gleichung 3.37:

$$\tilde{\mathbf{E}}(k_{x_{\mu\nu}}, k_{y_{\mu\nu}}) = \frac{1}{\sqrt{k_{x_{\mu\nu}}^2 + k_{y_{\mu\nu}}^2}} \begin{pmatrix} -k_{y_{\mu\nu}} & -\frac{i}{n} k_{x_{\mu\nu}} \\ k_{x_{\mu\nu}} & -\frac{i}{n} k_{y_{\mu\nu}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{s_{\mu\nu}} \\ \mathbf{R}_{p_{\mu\nu}} \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

Hierbei wurde die Ausbreitung der Planwellen in die negative z-Richtung berücksichtigt.

⁸Das Beugungsspektrum eines Objektes in Form von transversalen elektrischen Feldern wird in der numerischen Bildsimulation üblicherweise in der Eintrittspupille eines abbildenden Systems angegeben. Eine detaillierte Beschreibung hierzu wird in Kapitel 5 folgen.

⁹Wie sich in Kapitel 5 herausstellen wird, entspricht dies der Feldverteilung in der Eintrittspupille des optischen Systems. Dabei muss allerdings noch der Projektionsfaktor $\gamma = \sqrt{\cos(\theta)}$ auf die Sphäre der Eintrittspupille berücksichtigt werden.

3.4.2.6 Anwendbarkeit und Gültigkeitsbereich der RCWA

Entsprechend der vorhergehenden Abschnitte 3.4.2.2 bis 3.4.2.4 lassen sich Gitter beliebiger Form und Materialzusammensetzung modellieren. Der Modellierung der Struktur sind damit im Rahmen der beschriebenen Verfahren keine Grenzen gesetzt. Diese Vielseitigkeit der RCWA und die Möglichkeit, durch vergleichsweise einfache Parametrisierungsverfahren ganze Datenbanken von Strukturtypen berechnen zu können, haben die RCWA insbesondere in der industriellen Anwendung zu einer weit verbreiteten Methode gemacht. Dies trifft insbesondere auf die modellbasierte Scatterometrie an Halbleiterstrukturen zu.

Betrachtet man die Zuverlässigkeit und Genauigkeit der RCWA, so ist die Konvergenz des Verfahrens mit zunehmender Modenzahl gesichert. Ab einer hinreichend hohen Anzahl von Entwicklungskoeffizienten ändern sich die Beugungsamplituden, die das Beugungsspektrum maßgeblich bestimmen, mit steigender Modenzahl nicht mehr signifikant. Der Energieerhaltungssatz bleibt dabei ungeachtet der Modenzahl erfüllt [167]. Werden die korrekten Faktorisierungsregeln für endliche Fourier-Reihen nach Li [154, 168] beachtet, wird das Konvergenzvermögen insbesondere bei der Untersuchung von Metallgittern in TM-Polarisation deutlich gesteigert. Entsprechende Formulierungen der RCWA wurden sowohl für Liniengitter [169, 170] als auch Kreuzgitter [145, 146, 171] aufgestellt und in vorliegender Arbeit verwendet.

Alle in dieser Arbeit durchgeführten rigorosen Beugungsrechnungen basieren auf den bisher beschriebenen Verfahren. Hierbei wurde immer durch eine hinreichend hohe Modenzahl auf die Konvergenz des Beugungsproblems geachtet, sodass von der Zuverlässigkeit der erzielten Ergebnisse ausgegangen werden kann. Als Konvergenzkriterium wurde dabei eine relative Schwankung der Beugungseffizienzen aller für die Signalgenerierung wesentlichen Beugungsordnungen von weniger als 0,1% gefordert. Um die Diskussion der RCWA abzurunden, soll mit den folgenden Ausführungen auf mögliche Probleme und Grenzen der RCWA hingewiesen und auf aktuelle Entwicklungen eingegangen werden.

3.4.2.7 Aktuelle Entwicklungen der RCWA

Ein wesentlicher Ansatzpunkt der RCWA ist die Fourier-Reihenentwicklung sowohl der Dielektrizitätsfunktion als auch der elektromagnetischen Felder im Gitterbereich. Damit sind einerseits Gibbs-Oszillationen in der Fourier-Reihen-Darstellung der binären Dielektrizitätsfunktion inhärent enthalten, andererseits werden Feldsprünge insbesondere der elektrischen Normalenkomponente schlecht repräsentiert. Der Fourier-analytische Ansatz der

RCWA im Modulationsbereich des Gitters führt daher insbesondere bei metallischen Gittern in TM-Polarisation zu Schwächen des Verfahrens [172]. Dieses Problem wird bei der Stufenapproximation von kontinuierlichen Reliefgittern besonders offenbar. Der originäre glatte Verlauf der Oberfläche des Gitters wird hierbei durch ein treppenförmiges Relief ersetzt. Die künstlich erzeugte, zickzackartige Oberflächenform impliziert eine Änderung der damit verknüpften lokalen Stetigkeitsbedingungen. Wie Popov et al. [173] anhand numerischer Untersuchungen des Nahfeldes von sinusförmigen Aluminiumgittern diskutierten, ändert sich dadurch das Feldverhalten an der Oberfläche der Struktur grundlegend. Insbesondere an den Ecken treten starke Überhöhungen des elektrischen Feldes auf, die durch eine Fourier-Reihenentwicklung nur unzureichend erfasst werden können. Hierdurch erklärt sich das schwächere Konvergenzverhalten der RCWA an Reliefgittern in TM-Polarisation, dem in Einzelfällen in der praktischen Umsetzung genauere Beachtung geschenkt werden muss.

Die vorherige Diskussion zeigt einerseits die tieferen Gründe für die Schwächen der RCWA, liefert aber gleichzeitig die Basis für weitere Optimierungsmöglichkeiten. Ein Grund der schwachen Konvergenz des Fourier-modalen Ansatzes ist im schlechten Sampling diskontinuierlicher Übergangsbereiche im Gitter zu sehen. Durch eine adaptive räumliche Abtastung, wie sie vor kurzem von Granet für Binärgitter vorgeschlagen [174] und von Vallius [175] auf Vielschichtgitter erweitert wurde, ermöglicht eine höhere lokale Abtastung un stetiger Feldsprünge, was sich positiv auf das Konvergenzverhalten der RCWA auswirkt. Weiteres Verbesserungspotential besteht in der „problemangepassten“ Aufstellung des Differentialgleichungssystems, das zur Lösung des konkreten Beugungsproblems in der RCWA herangezogen wird. In der augenblicklich gebräuchlichen Form ist die RCWA den Einschränkungen des Separationsansatzes unterworfen. In der vertikalen Modellierung führt dies einerseits inhärent zur Stufenapproximation, andererseits wird der lateralen Struktur in jeder Schicht eine Zickzackform aufprägt [146]. Durch diese *globale* Zerlegung des Problems in quaderförmiger Elementarzellen¹⁰, kann den *lokalen* Stetigkeitsbedingungen, die durch die *lokale* Orientierung des Normalenvektors der Grenzfläche bestimmt sind, somit nicht Rechnung getragen werden. Durch die Anwendung der *Fast Fourier Factorisation* (*FFF*), die von Popov und Nevière für die Differentielle Methode entwickelt wurde [109, 176, 177], ist auch für die RCWA eine zusätzliche Konvergenzverbesserung zu erwarten.

¹⁰Das hier diskutierte Problem des Separation ist nicht nur auf rechtwinklige kartesische Koordinaten beschränkt, sondern trifft in gleichem Maße auch jedes andere Koordinatensystem zu. Entsprechend ändert sich die Form des Diskretisierungsvolumens.

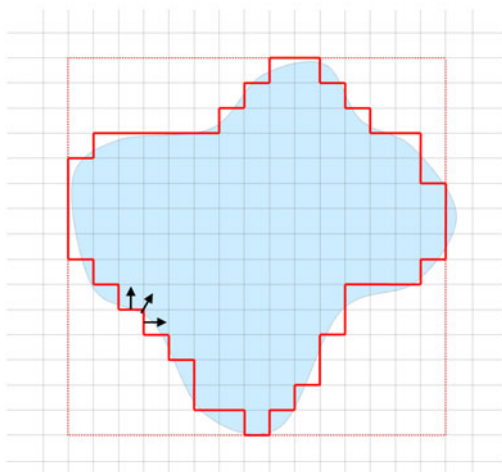


Abb. 3.4: Zickzackapproximation der kontinuierlichen Randkurve als Folge des Separationsansatzes.

föhrung auf ein Eigenwertproblem zu liefern, gegenüber der modernen Formulierung der Differentiellen Methode nicht ausspielen. Für die laterale Modellierung hingegen ist für eine erweiterte Formulierung der RCWA unter Berücksichtigung der FFF ein deutlich verbessertes Konvergenzverhalten zu erwarten [180].

Heutzutage rückt die reale Modellierung von 3D-Strukturen immer stärker in den Fokus der Forschung. Diese werden in der Beugungstheorie durch einen Stapel zweidimensionaler Kreuzgitter beschrieben. Der Übergang von eindimensionalen zu zweidimensionalen Beugungsproblemen ist aber mit einem enormen Zuwachs des Zeit- und Speicherbedarfs der Rechnungen verknüpft. Dies trifft für alle rigorosen Berechnungsverfahren – auch die rigorose Beugungstheorie – zu. Neben der Optimierung des Konvergenzverhaltens der Algorithmen kommt daher der Nutzung der Symmetrieeigenschaften des zugrunde liegenden Beugungsproblems immer größere Bedeutung zu. Gerade für die RCWA konnten in jüngster Zeit enorme Fortschritte erzielt werden, die eine Reduzierung der Rechenzeit um bis zu dem Faktor 64 erlauben [181–186]. Diese Entwicklungen werden insbesondere bei der Datenbank-gestützten, scatterometrischen Vermessung von 3D-Strukturen in der aktiven Fläche des Chips in der näheren Zukunft von Bedeutung sein.

Diese Hoffnung liegt darin begründet, dass die FFF einerseits der *Lokalität der Stetigkeitsbedingungen* durch eine kontinuierliche Fortsetzung des Normalenvektorfeldes und andererseits der gleichzeitigen Erfüllung der Li’schen Faktorisierungsregeln Rechnung trägt. Eine entsprechende Modifikation wurde bereits für die bessere vertikale Modellierung von Reliefgittern veröffentlicht [173, 178] und liefert auch die theoretische Begründung für das ungewöhnliche Konvergenzverhalten der RCWA für sehr dünne Gitter [179]. Wie in [173] genauer diskutiert wird, kann die RCWA jedoch für Reliefgitter ihre Vorzüge, eine schnelle und stabile Lösung des Differentialgleichungssystems durch die Rück-

3.5 Semi-rigore Beugungstheorie

Der letzte Teil dieses Kapitels stellt ein Verfahren vor, das im Grenzbereich zwischen der klassischen Beugungstheorie einerseits und rigorosen Simulationsverfahren andererseits angesiedelt ist. Es greift auf die Grundideen der klassischen Beugungstheorie – insbesondere die Kirchhoffsche Approximation – zurück, setzt diese aber mit rigorosen Verfahren aus der Theorie der Schichtsysteme (*stratified medium theory*) um. Daher sprechen wir im Folgenden von *semi-rigore Beugungstheorie* oder auch von der *vektoriellen Kirchhoffschen Approximation* (VKA). Durch die starke Anlehnung an die Thin Element Approximation (TEA) [18] wurde das Verfahren vor kurzem unter dem Namen Vectorial Thin Element Approximation (VTEA) veröffentlicht [187]. Beide Namen – VTEA und VKA – werden im Folgenden synonym verwendet.

3.5.1 Die Grundidee der rigorosen Kirchhoffschen Approximation

Um die wesentlichen Merkmale der semi-rigoren Beugungstheorie zu veranschaulichen, betrachten wir ein einfaches Binärgitter in Abbildung 3.5. In der Vektoriellen Kirchhoffschen Approximation wird analog zum klassischen Ansatz nicht das strenge Randbedingungsproblem der Elektrodynamik behandelt, sondern vielmehr auf die Lösung eines Randwertproblems zurückgegriffen. Sind die Randwerte für die elektromagnetischen Felder an den Grenzflächen der Gitterregion (in den Ebenen $z = 0$ und $z = D$) bekannt, kann hieraus auf Basis klassischer Propagationsverfahren das Beugungsspektrum in den homogenen Umgebungsbereichen unter voller Berücksichtigung der Vektoreigenschaften des Lichtwellenfeldes berechnet werden (siehe hierzu auch die Diskussion in Ab-

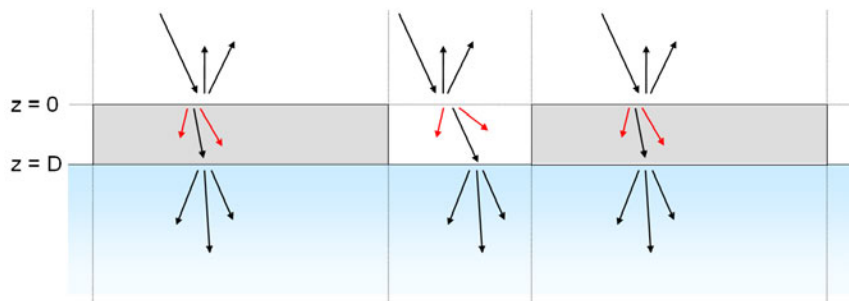


Abb. 3.5: Simulationsmodell der Vektoriellen Kirchhoffschen Approximation. Während bei rigorosen Berechnungsverfahren die lateralen Kopplungen im Gitterbereich berücksichtigt werden (rote Pfeile), werden sie bei der VKA explizit unterdrückt. Das Feld propagiert in jedem einzelnen Gitterbereich wie in einem lateral unendlich ausgedehnten Schichtstapel (schwarze Pfeile).

schnitt 3.2). Der entscheidende Schritt in der semi-rigorosen Formulierung der Kirchhoffschen Approximation bestehen nun in der Bestimmung der elektromagnetischen Felder an den Grenzflächen. Im Gegensatz zur klassischen Theorie werden die Randwerte nicht durch geometrisch-optische Überlegungen bestimmt, sondern ergeben sich als elektromagnetische Lösung eines Schichtstapelproblems. Dies geschieht im vollen Einklang mit dem Grundgedanken der Kirchhoffschen Approximation: Das Feld an jedem Punkt der Grenzflächen des beugenden Objekts wird so bestimmt, als wären in dessen Umgebung keine weiteren beugenden Strukturen vorhanden. In die Berechnung geht nur der lokale vertikale Schichtaufbau des Gitters ein. Durch die dabei implizit herbeigeführte unendliche Ausdehnung des lokal definierten Schichtstapels werden *laterale* elektromagnetische Kopplungen zwischen den einzelnen Gitterbereichen vollkommen *vernachlässigt*, während *vertikale* Kopplungen in den einzelnen Schichtsystemen voll *berücksichtigt* bleiben. Abbildung 3.6 zeigt die praktische Umsetzung dieser Vorgehensweise an einem

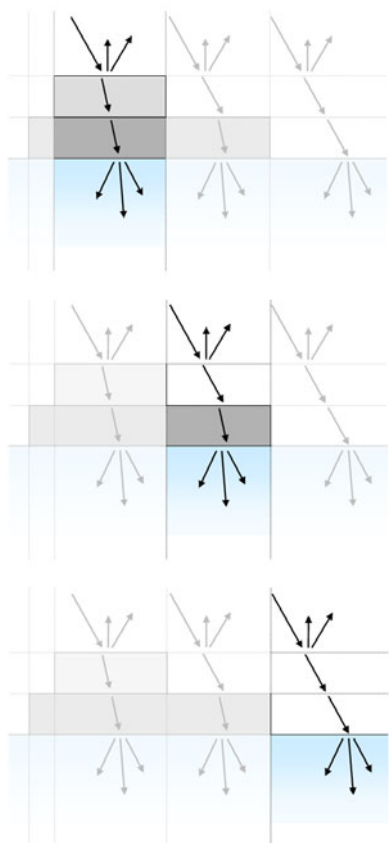


Abb. 3.6: Prinzip der VKA: Die Struktur wird in voneinander unabhängige Säulenbereiche zerlegt.

Reliefgitter, das aus unterschiedlichen Materialschichten aufgebaut ist. Zunächst wird das Gitterprofil durch einen stufenförmigen Schichtstapelansatz angenähert (siehe auch Abschnitt 3.4.2.4). Dadurch entstehen einzelne säulenartige Bereiche, die jeder für sich getrennt als unendlich ausgedehntes Schichtsystem behandelt werden. Die hieraus resultierenden Felder an der oberen und unteren Grenzfläche des Gitterbereichs dienen als Basis für die *anschließende* Beugungsrechnung. In der semi-rigorosen Beugungstheorie geht also nur das elektromagnetische Feld an den Grenzflächen der Gitterregion in die Bestimmung der Beugungsamplituden ein (*boundary diffraction*). Demgegenüber spielen bei den vollständig rigorosen Rechenmethoden wie der RCWA neben den Beugungserscheinungen an den Grenzflächen auch die Kopplungseffekte in der Gitterregion (*bulk diffraction*) eine grundlegende Bedeutung für die Bestimmung der Beugungsamplituden. Hier werden die Kopplungskoeffizienten der Fundamentalmodes in der Gitterregion und die Beugungsamplituden *simultan* bestimmt. Dieser grundsätzliche Unterschied zwischen beiden Rechenverfahren ist auch in Abbildung 3.5 veranschaulicht.

3.5.2 Mathematische Formulierung des semi-rigorens Modells

Wie im letzten Abschnitt deutlich wurde, beruht die semi-rigore Berechnung des Beugungsspektrums auf einem zweistufigen Prozess. Zunächst wird das Gitter auf einem kartesischen Raster in Säulenbereiche unterteilt. Die Zusammensetzung und Größe der Säulenbereiche ergeben sich dabei aus der Schichtstruktur und der Stufenapproximation des Gitters. Für jeden dieser Bereiche wird das Schichtstapelproblem mit bekannten Verfahren gelöst. Das Gesamtfeld an den Grenzflächen des Gitters folgt dann durch stückweises Zusammensetzen der Teillösung der einzelnen Säulenbereiche. Aus der so gewonnenen elektromagnetischen Feldverteilung wird in einem zweiten Schritt mit klassischen Methoden das Beugungsspektrum berechnet.

3.5.2.1 Das lokale Schichtstapelmodell

Für die rigore Lösung des Schichtstapelproblems stehen eine Reihe von Lösungsverfahren zur Verfügung. Zu den bekanntesten Verfahren gehört die *Thin Film Matrix Theory* [188, 189], die für verschiedenste technische Anwendungen eingesetzt wird. Mit der Modellierung von Wellenleiterstrukturen [190] und dem Design von Mehrschichtfilmen wie Antireflexionsschichten [191] seien zwei Beispiele genannt. Um jedoch den Kern des semi-rigorens Modells im Vergleich zur vollständig rigorens Lösung aufzuzeigen, wird im Folgenden das Schichtsystem mit der oben dargestellten Version des Enhanced Transmittance Matrix Approach (ETMA) behandelt. Da dieser auch in der RCWA verwendet wird, ist ein direkter Vergleich zwischen beiden Verfahren möglich. Auf rein mathematischer Basis kommen viele der im oberen Abschnitt sehr allgemein formulierten Eigenschaften auch im Formalismus zu Tage und erleichtern damit die physikalische Interpretation der Rechnungen. Um die wesentlichen Unterschiede zwischen VKA und RCWA herauszustellen, ist die folgende Diskussion auf die ebene Beugung in TM-Polarisation beschränkt. Äquivalente Vergleiche lassen sich jedoch auch zwanglos in TE-Polarisation oder konischer Beugung durchführen.

Wie schon in Abschnitt 3.5 deutlich wurde, entfällt durch die lokale Schichtapproximation eine laterale Kopplung des elektromagnetischen Feldes in den einzelnen Teilbereichen des Gitters. Das Feld an einem gewählten Ort entspricht dem eines unendlich ausgedehnten Schichtstapels, das sich aus zwei entgegelaufenden Planwellen – dem transmittierten und reflektierten Lichtwellenfeld – zusammensetzt. Aus dem Blickwinkel der Beugungstheorie werden also im semi-rigorens Modell von der Vielzahl der gekoppelten Moden in der

Gitterregion nur die ungebeugten Moden herausgegriffen. In der mathematischen Formulierung des ETMA ist also nur die nullte Ordnung jeder Schicht zu berücksichtigen. Gebeugte Wellen werden im Gitter jedoch nicht betrachtet. Aus diesem Grund reduzieren sich in der VKA die Kopplungsmatrizen, die sich bei der RCWA aus dem Eigenwertproblem in jeder Schicht ergeben, auf skalare Größen. Die Dimensionalität der Matrixgleichungen ist daher bei der RCWA um den Faktor M (Modenzahl) größer als bei der VKA. Unter Verwendung der in Abschnitt 3.4.2 eingeführten Definitionen¹¹, sind die wesentlichen Größen des ETMA in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

RCWA	→	VKA
Eigenvektormatrix $\mathbf{W}_\ell_{[M \times M]}$	→	1
Kopplungsmatrix $\mathbf{V}_\ell_{[M \times M]} = \mathbf{A}_\ell \mathbf{W}_\ell \mathbf{Q}_\ell$	→	$\gamma_\ell = i (n_\ell^2 - n_I^2 \sin^2 \theta)^{1/2}$
Diagonalmatrix $\mathbf{X}_\ell_{[M \times M]}$ mit $X_{\ell m,m} = e^{-k_0 q_\ell m d_\ell}$	→	$X = e^{-k_0 \gamma_\ell m d_\ell}$
Diagonalmatrix $\mathbf{Z}_{I,II}{}_{[M \times M]}$ mit $Z_{I,II m,m} = \frac{k_{I,II,zm}}{k_0 n_{I,II}^2}$	→	$Z_{I,II} = \frac{k_{I,II,z}}{k_0 n_{I,II}^2}$
$\mathbf{L}_{1[M \times 1]} = \delta_{m0}$, $\mathbf{L}_{2[M \times 1]} = \frac{i \cos \theta}{n_I} \delta_{m0}$	→	$L_1 = 1$, $L_2 = \frac{i \cos \theta}{n_I}$
Entwicklungskoeffizienten im Gitter $\mathbf{c}_\ell^\pm \in [M \times M]$	→	$c_\ell^\pm \in [1 \times 1]$
Beugungsamplituden in Transmission und Reflexion $\mathbf{T}, \mathbf{R} \in [M \times 1]$	→	Lokaler Transmissions- und Reflexionskoeffizient $T, R \in [1 \times 1]$

Tab. 3.1: Definitionen der im ETMA verwendeten Größen für RCWA und VKA. Durch die Schichtstapelnäherung werden in der VKA nur ungebeugte Wellen berücksichtigt. Dadurch reduziert sich die Dimensionalität des Problems im Vergleich zur RCWA um den Faktor M .

Tabelle 3.2 stellt den ETMA für ein Schichtsystem (VKA) und die vollständig rigorose Version unter Berücksichtigung der Volumenbeugung (RCWA) einander gegenüber. Sie verdeutlicht die formale Ähnlichkeit beider Algorithmen. Betrachtet man jedoch die Darstellung der Felder in der Gitterregion, so wird deutlich, dass das Wechselwirkungsverhalten zwischen den elektrischen und magnetischen Feldern vollkommen verschieden behandelt wird. In der RCWA wird die wechselseitige Kopplung der Felder durch die Rückführung auf ein Eigenwertproblem der Dimension M berücksichtigt, in der VKA reduziert sich das Kopplungsverhalten auf das einer einfachen Planwelle im homogenen Medium der Schicht ℓ .

¹¹ \mathbf{A} ist die nach den Li'schen Regeln gebildete Toeplitz-Matrix $[[1/\varepsilon_\ell]]^{-1}$

RCWA	VKA
Darstellung der Felder in der Gitterregion	
<ul style="list-style-type: none"> • Darstellung des Feldes in der Gitterregion durch eine Fourier-Reihenentwicklung: $H_{\ell,gy} = \sum_m U_{\ell,y_m}(z) e^{-ik_{x_m}x}$ $E_{\ell,gx} = i \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_m S_{\ell,x_m}(z) e^{-ik_{x_m}x}$ <ul style="list-style-type: none"> • Der Fourier-modale Ansatz führt auf ein Eigenwertproblem mit den Eigenwerten $\pm q_{\ell,m}$ und Eigenvektoren $\mathbf{w}_{\ell,m}$. Die Koeffizienten der Fourier-Entwicklung des elektrischen und magnetischen Feldes werden durch die Fundamentalmodenentwicklung der Eigenwertgleichung dargestellt. Diese repräsentiert das laterale Wechselwirkungsverhalten in einer Schicht der Gitterregion: $U_{\ell,y} = \sum_m \mathbf{w}_{\ell,m} \left[c_{\ell,m}^+ e^{-k_0 q_{\ell,m}(z-D_{\ell-1})} + c_{\ell,m}^- e^{k_0 q_{\ell,m}(z-D_{\ell})} \right] e^{-ik_{x_m}x}$ $S_{\ell,x} = \sum_m \mathbf{v}_{\ell,m} \left[-c_{\ell,m}^+ e^{-k_0 q_{\ell,m}(z-D_{\ell-1})} + c_{\ell,m}^- e^{k_0 q_{\ell,m}(z-D_{\ell})} \right] e^{-ik_{x_m}x}$	<ul style="list-style-type: none"> • Das Gesamtfeld in jeder Schicht setzt sich aus zwei gegenläufigen Planwellen zusammen: $H_{\ell,gy} = [c_{\ell}^+ e^{-k_0 \gamma_{\ell}(z-D_{\ell-1})} + c_{\ell}^- e^{k_0 \gamma_{\ell}(z-D_{\ell})}] e^{-ik_x x}$ $E_{\ell,gy} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \frac{1}{n_{\ell}} H_{\ell,gy}$ <ul style="list-style-type: none"> • Zwei Planwellen mit $k_{z_{\ell}} = \pm \gamma_{\ell} k_0$ und $k_{x_{\ell}} = k_0 \sin \theta$ bilden die Fundamentalmoden in der ℓ-ten Schicht. Aufgrund der Symmetrie bleibt $k_{x_{\ell}}$ im kompletten Schichtstapel konstant (Impulserhaltung). Elektrisches und magnetisches Feld der Planwellen sind proportional zueinander und in Phase. <p style="text-align: center;">– entfällt –</p> <p style="text-align: center;">– entfällt –</p>
Bestimmung der Hilfsgrößen durch Hinpropagation	
$[\mathbf{I}, i\mathbf{Z}_{II}] = [\mathbf{F}_{L+1}, \mathbf{G}_{L+1}] \Rightarrow [\mathbf{a}_L, \mathbf{b}_L] \Rightarrow [\mathbf{F}_L, \mathbf{G}_L] \Rightarrow \dots \Rightarrow [\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] \Rightarrow [\mathbf{F}_1, \mathbf{G}_1]$	
$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_{\ell} \\ \mathbf{b}_{\ell} \end{bmatrix}_{[2M \times M]} = \begin{bmatrix} -\mathbf{W}_{\ell} & \mathbf{f}_{\ell+1} \\ \mathbf{V}_{\ell} & \mathbf{g}_{\ell+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{\ell} \mathbf{X}_{\ell} \\ \mathbf{V}_{\ell} \mathbf{X}_{\ell} \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} \mathbf{f}_{\ell} \\ \mathbf{g}_{\ell} \end{bmatrix}_{[2M \times M]} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{\ell} (\mathbf{I} + \mathbf{X}_{\ell} \mathbf{a}_{\ell}) \\ \mathbf{V}_{\ell} (\mathbf{I} - \mathbf{X}_{\ell} \mathbf{a}_{\ell}) \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} a_{\ell} \\ b_{\ell} \end{bmatrix}_{[2 \times 1]} = \begin{bmatrix} -1 & f_{\ell+1} \\ \gamma_{\ell} & g_{\ell+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{-k_0 \gamma_{\ell} d_{\ell}} \\ \gamma_{\ell} e^{-k_0 \gamma_{\ell} d_{\ell}} \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} f_{\ell} \\ g_{\ell} \end{bmatrix}_{[2 \times 1]} = \begin{bmatrix} 1 + a_{\ell} e^{-k_0 \gamma_{\ell} d_{\ell}} \\ \gamma_{\ell} (1 - a_{\ell} e^{-k_0 \gamma_{\ell} d_{\ell}}) \end{bmatrix}$
Bestimmung der Kopplungskoeffizienten durch Rückpropagation	
$[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2] \Rightarrow [\mathbf{c}_1^+, \mathbf{R}] \Rightarrow [\mathbf{c}_2^+, \mathbf{c}_1^-] \Rightarrow \dots \Rightarrow [\mathbf{c}_L^+, \mathbf{c}_{L-1}^-] \Rightarrow [\mathbf{T}, \mathbf{c}_L^-]$	
$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{R} \end{bmatrix}_{[2M \times 1]} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 & -\mathbf{I} \\ \mathbf{g}_1 & i\mathbf{Z}_I \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_1 \\ \mathbf{L}_2 \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} \mathbf{c}_{\ell}^- \\ \mathbf{c}_{\ell+1}^+ \end{bmatrix}_{[2M \times M]} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{\ell} \\ \mathbf{b}_{\ell} \end{bmatrix} \mathbf{c}_{\ell}^+$	$\begin{bmatrix} c_1^+ \\ R \end{bmatrix}_{[2 \times 1]} = \begin{bmatrix} f_1 & -1 \\ g_1 & iZ \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} c_{\ell}^- \\ c_{\ell+1}^+ \end{bmatrix}_{[2 \times 1]} = \begin{bmatrix} a_{\ell} \\ b_{\ell} \end{bmatrix} c_{\ell}^+$

Tab. 3.2: Vergleich des ETMA für ein unendlich ausgedehntes Schichtsystem (VKA) und ein strukturiertes Medium unter Berücksichtigung der Volumenbeugung (RCWA). Die Formulierung erfolgt für ebene Beugung in TM-Polarisation.

3.5.2.2 Semi-rigore Formuierung der Kirchhoffschen Naherung

Gerade weil die lokale Schichtstapelnaherung Volumenbeugungseffekte im Gitter nicht beruicksichtigt, bildet sie die Basis fur eine konsistente Erweiterung der Kirchhoffschen Naherung auf elektromagnetische Felder. Hierbei werden die klassischen Kirchhoffschen Randbedingungen aus Gleichung 3.13 und 3.14 durch Randwerte fur die elektromagnetischen Felder ersetzt, die sich als stuckweise rigore Losungen des lokalen Schichtstapelproblems ergeben. Das Gitter wird dafur gema Abbildung 3.6 in quaderformige Saulen mit den Grenzkoodinaten x_{n_g} , $n_g \in [1..N_g]$ und y_{m_g} , $m_g \in [1..M_g]$ aufgeteilt. Die Darstellung der Felder erfolgt im sp-Koordinatensystem der Einfallsebene. Fur eine beliebige Eingangspolarisation, die durch den elektrischen Feldstarkevektor \vec{E}_{inc} aus Gleichung 3.23 reprasentiert wird, zerfallt damit das Problem in zwei Teilprobleme, die durch den TE- und den TM-Fall des Schichtstapelmodells behandelt werden konnen. Die Darstellung der Normalenkomponente des elektrischen Feldes \vec{E} wird durch den TE-Fall ($\hat{=}$ s-Polarisation) abgedeckt, die Parallelkomponente des elektrischen Feldes resultiert aus der Normalenkomponente des \vec{H} -Feldes in p-Polarisation ($\hat{=}$ TM-Fall). Anschließend wird das Gesamtfeld aus beiden Komponenten zusammengesetzt. Die raumliche Verteilung der Reflexions- und Transmissionsamplituden ergibt sich durch die stuckweise konstanten Werte der lokalen Schichtstapel, die in den Bereichen $x \in [x_{n_g}, x_{n_g+1})$ und $y \in [y_{m_g}, y_{m_g+1})$ durch $\tilde{R}_p|_{n_g, m_g}$, $\tilde{R}_s|_{n_g, m_g}$ sowie $\tilde{T}_p|_{n_g, m_g}$ und $\tilde{T}_s|_{n_g, m_g}$ gegeben sind. Fur das elektrische Feld an der oberen Grenzflache $z = 0$ des Gitters gilt damit in kartesischen Koordinaten:

$$\tilde{R}_x(x, y) = -\cos \phi \cos \psi \cos \theta_I \tilde{R}_p|_{n_g, m_g} - \sin \phi \sin \psi \tilde{R}_s|_{n_g, m_g} \quad (3.53a)$$

$$\tilde{R}_y(x, y) = -\sin \phi \cos \psi \cos \theta_I \tilde{R}_p|_{n_g, m_g} + \cos \phi \sin \psi \tilde{R}_s|_{n_g, m_g} \quad (3.53b)$$

$$\tilde{R}_z(x, y) = -\cos \psi \sin \theta_I \tilde{R}_p|_{n_g, m_g} \quad (3.53c)$$

Analog folgt fur die Unterseite $z = D$ des Gitters:

$$\tilde{T}_x(x, y) = \frac{n_I}{n_{II}} \cos \phi \cos \psi \cos \theta_{II} \tilde{T}_p|_{n_g, m_g} - \sin \phi \sin \psi \tilde{T}_s|_{n_g, m_g} \quad (3.54a)$$

$$\tilde{T}_y(x, y) = \frac{n_I}{n_{II}} \sin \phi \cos \psi \cos \theta_{II} \tilde{T}_p|_{n_g, m_g} + \cos \phi \sin \psi \tilde{T}_s|_{n_g, m_g} \quad (3.54b)$$

$$\tilde{T}_z(x, y) = -\frac{n_I}{n_{II}} \cos \psi \sin \theta_{II} \tilde{T}_p|_{n_g, m_g} \quad (3.54c)$$

Gleichung 3.53 und 3.54 definieren ein Randwertproblem für die elektromagnetischen Felder im Kirchhoffschen Sinne. Sie können als rigoroses Analogon zu den Randwertbedingungen der klassischen Kirchhoffschen Näherung aus Gleichung 3.13 und 3.14 verstanden werden. Während in der klassischen Formulierung die beugende Öffnung als unendlich dünn angesehen wird (daher ist auch der Name *Thin Element Approximation (TEA)* geläufig), geht im semi-rigore Modell der Schichtaufbau des Gitters in die Modellierung mit ein. Die TEA bekommt hier eine weiter gefasste Bedeutung: Das Gitter ist nicht im geometrischen sondern im physikalischen Sinne als unendlich dünn anzusehen. Es werden nämlich die Effekte der Volumenbeugung im Gitter vernachlässigt. Aus diesen Überlegungen leitet sich auch der Name *Vectorial Thin Element Approximation (VTEA)* ab.

Auf Basis von Gleichung 3.53 und 3.54 kann nun auch das zugehörige Beugungsproblem in einem zweiten Schritt mit klassischen Methoden aus Abschnitt 3.2 behandelt werden. Dies geschieht getrennt für jede der einzelnen Feldkomponenten. In der Wahl der Propagationmethode ist man frei, für einen direkten Vergleich mit der RCWA bietet sich jedoch die Planwellenzerlegung aus Gleichung 3.2 an. Das komponentenweise Fourier-Spektrum der elektrischen Felder an den Grenzflächen wird je nach untersuchtem Objekt analytisch oder mit der schnellen Fourier-Transformation berechnet. Hierbei ist auf ein hinreichendes Sampling im Ortsraum zu achten.

$$\tilde{R}_x, \tilde{R}_y, \tilde{R}_z \xrightarrow{\mathcal{F}} \tilde{\mathbf{R}}_x, \tilde{\mathbf{R}}_y, \tilde{\mathbf{R}}_z \quad (3.55a)$$

$$\tilde{T}_x, \tilde{T}_y, \tilde{T}_z \xrightarrow{\mathcal{F}} \tilde{\mathbf{T}}_x, \tilde{\mathbf{T}}_y, \tilde{\mathbf{T}}_z \quad (3.55b)$$

Unter Berücksichtigung der Vektoreigenschaften der gebeugten ebenen Wellen ergeben sich die Reflexions- und Transmissionsamplituden in den jeweiligen sp-Koordinatensystemen in vollkommener Analogie zu Gleichung 3.37 und 3.38. Sie sind hier nochmals zusammengefasst:

$$\tilde{\mathbf{R}}_{s_m} = \cos \phi_m \tilde{\mathbf{R}}_{y_m} - \sin \phi_m \tilde{\mathbf{R}}_{x_m} \quad (3.56a)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_{p_m} = -\frac{i}{k_0} \left[\cos \phi_m \left(k_{I,z_m} \tilde{\mathbf{R}}_{x_m} + k_{x_m} \tilde{\mathbf{R}}_{z_m} \right) + \sin \phi_m \left(k_{y_m} \tilde{\mathbf{R}}_{z_m} + k_{I,z_m} \tilde{\mathbf{R}}_{y_m} \right) \right] \quad (3.56b)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}_{s_m} = \cos \phi_m \tilde{\mathbf{T}}_{y_m} - \sin \phi_m \tilde{\mathbf{T}}_{x_m} \quad (3.56c)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}_{p_m} = \frac{i}{k_0} \left[\cos \phi_m \left(k_{II,z_m} \tilde{\mathbf{T}}_{x_m} - k_{x_m} \tilde{\mathbf{T}}_{z_m} \right) - \sin \phi_m \left(k_{y_m} \tilde{\mathbf{T}}_{z_m} - k_{II,z_m} \tilde{\mathbf{T}}_{y_m} \right) \right] \quad (3.56d)$$

Die Gleichungen 3.56 stellen die vektoriellen Lösungen des semi-rigore Beugungspro-

blems dar. Wie bei der RCWA liegen die Beugungsordnungen in einer Mischform von elektrischem und magnetischem Feld vor. Eine Umrechnung in rein elektrische Felder erfolgt analog zu Abschnitt 3.4.2.5.

3.5.3 Anwendungsbeispiel

Die wesentlichen Grundannahmen und Vereinfachungen der semi-rigorosen Beugungstheorie stecken auch ihren Anwendungsbereich ab. Die VKA ist insbesondere prädestiniert für die numerische Simulation von Gittern, die aus großflächigen Schichtsystemen zusammengesetzt sind. Die Behandlung solcher Systeme macht auch die unterschiedliche Berücksichtigung der vertikalen und lateralen Kopplungseffekte in einem Gitter durch die VKA besonders deutlich.

Das im Folgenden behandelte Gitter besteht daher in den einzelnen Gitterabschnitten aus Vielschichtsystemen, die für sich betrachtet eine optische Funktionalität aufweisen. Diese Funktionalität wiederum wird durch den Strukturierungsprozess beeinträchtigt. Solche Strukturen gewinnen in verschiedenen technischen Bereichen an Bedeutung, wie zum Beispiel für die Optimierung der Absorptionseigenschaften von Solarzellen [192] oder beim Design optischer Komponenten für die DUV- oder EUV-Lithographie. Das hier gewählte Beispiel wurde vor kurzem für ein verbessertes Design von Amplitudenmasken in der DUV-Lithographie vorgeschlagen [193].

Bei der Anwendung von Chrommasken führt die hohe Reflektivität des Chroms zu einer starken Rückstreuung, die infolge der weiteren Vielfachstreuung im optischen Projektionssystem zu einem reduzierten Kontrast bei der Belichtung des Resists führt. Dies trifft in besonderem Maße auf den DUV-Spektralbereich zu, da hier die Reflektivität eines reinen Chromfilmes mit 45% besonders hoch ist. Neben der Oxidation der Chromschicht [194] kann auch eine Antireflexionsbeschichtung das Streulichtverhalten der Chrommasken deutlich verbessern [193]. Die Beschichtung beruht auf einem Metall-Dielektikum-Metall-Schichtsystem und ist in Abbildung 3.7 dargestellt. Durch eine geeignete Wahl der Schichtdicken kann somit die Reflektivität maßgeblich reduziert werden. Unter Verwendung der Brechzahlen $n_{Cr} = 0,8396 + 1,6512i$ und $n_{SiO_2} = 1,5628$ [195] ist die berechnete Reflektivität bei einer Wellenlänge von 193 nm weniger als 10^{-5} .

Nun soll die Frage untersucht werden, inwiefern sich das Reflexionsverhalten ändert, wenn man nicht einen unendlich ausgedehnten homogenen Film wie in Abbildung 3.7 betrachtet sondern ein strukturiertes Schichtsystem, bei dem die Schichtbereiche durch

Gräben getrennt sind. In diesem Fall tritt Beugung auf und die Effizienz der Antireflexionsbeschichtung wird durch laterale Kopplungseffekte im Schichtsystem beeinflusst.

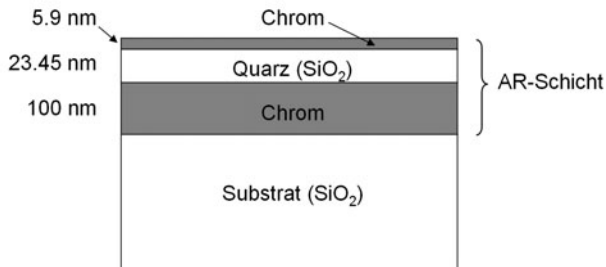


Abb. 3.7: Antireflexionsbeschichtung für Lithographiemasken.

Die Stege der untersuchten Gitterstruktur haben den Aufbau aus Abbildung 3.7, der Füllfaktor des Gitters beträgt 0,5 und die Periode variiert von 50 nm bis 5000 nm. Das Gitter wird mit einer Wellenlänge von 193 nm senkrecht zur Gittrebene in TE- und TM-Polarisation beleuchtet. Die Berechnung des Beugungsspektrums erfolgte mit der RCWA beziehungsweise mit der VKA. Die Summe der Beugungseffizienzen aller rückgestreuten Beugungsordnungen ist in Abbildung 3.8 als Funktion der Gitterperiode aufgetragen. Sie wird im Folgenden als Reflexionsrate bezeichnet. Für große Gitterperioden nähert sich die Reflexionsrate sowohl für die RCWA als auch für die VKA in beiden Polarisierungen einem Wert von 2,41%. Dies entspricht dem Mittelwert aus den Reflektivitäten des Glassubstrates und der Antireflexionsbeschichtung. Wird jedoch die Gitterperiode verkleinert, treten deutliche Unterschiede

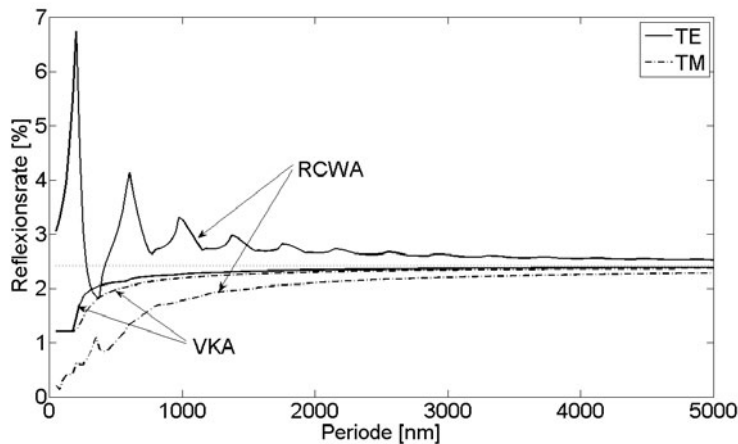


Abb. 3.8: Anteil des rückgestreuten Lichtes eines Binärgitter mit dem Schichtsystem aus Abbildung 3.7.

auf. Die rigorosen Rechnungen zeigen ausgeprägte Resonanzeffekte in TE-Polarisation und eine starke Dämpfung in TM-Polarisation. Diese polarisationsabhängigen Anomalien des Beugungsspektrums sind typisch für die rigorose Beugung an einem Chromgitter bei dieser Wellenlänge. Durch die semi-rigorosen Rechnungen werden diese Effekte nicht wiedergegeben. Sie sind damit offensichtlich auf die laterale Kopplung im Gitter zurückzuführen.

Die rigorosen Effekte des Beugungsspektrums können durch Nahfeldsimulationen besser verständlich gemacht werden. In den Nahfeldern werden nämlich die Details der elektromagnetischen Wechselwirkung sichtbar, die in der Folge das Beugungsspektrum des korrespondierenden Fernfeldes bestimmen. Abbildung 3.9 (a) und (c) zeigen die rigoros berechneten Nahfelder eines Gitters mit 600 nm Periode. Dies entspricht dem zweiten Resonanzpeak in TE-Polarisation von Abbildung 3.8. Der Vergleich beider Bilder macht

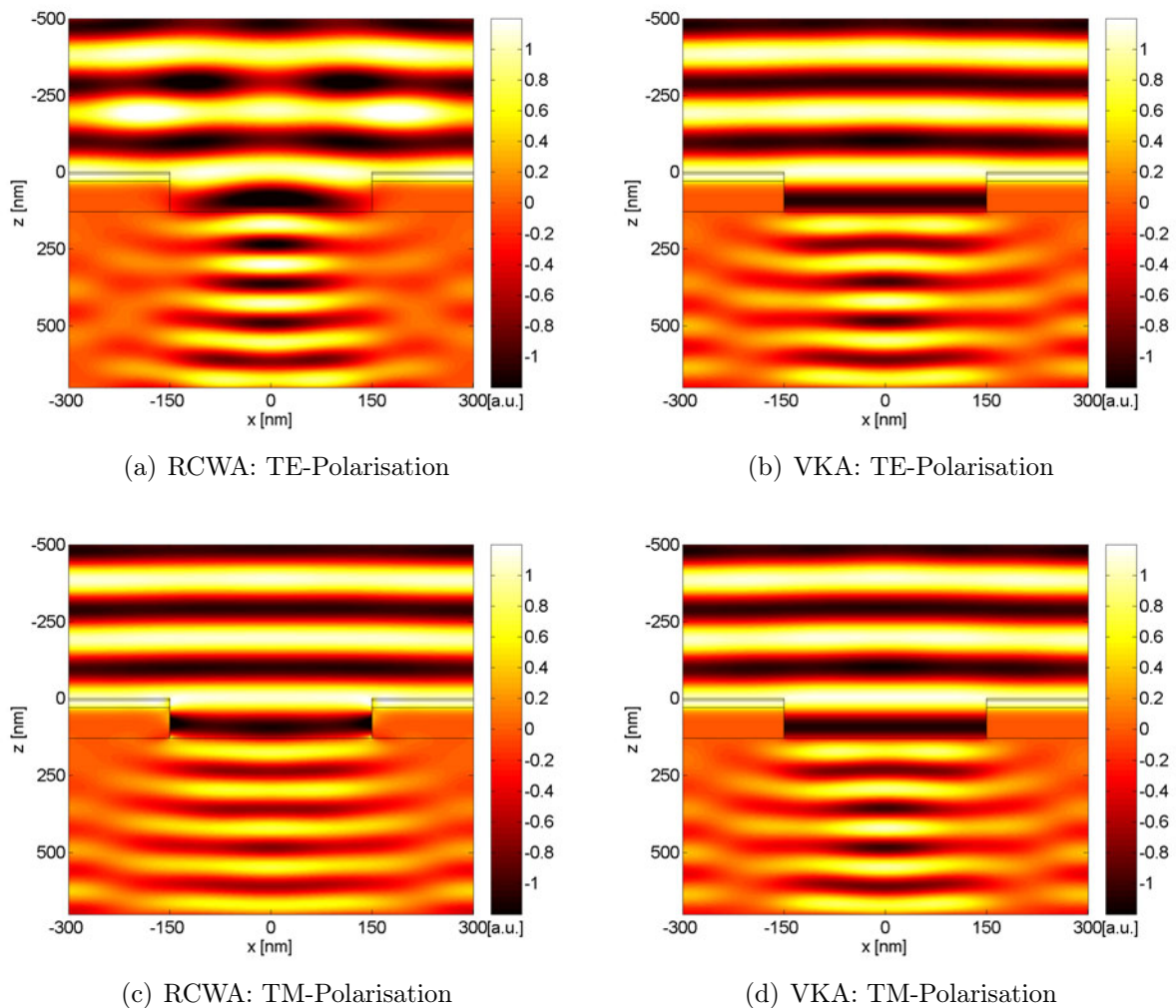


Abb. 3.9: Nahfelder des Gitterstruktur (Periode von 600 nm) berechnet mit VKA und RCWA. Dargestellt ist der Realteil des elektrischen Feldes.

deutlich, dass insbesondere für kleine Gitterperioden Licht, das senkrecht zu den Kanten polarisiert ist (d.h. TM-Polarisation), besser in die Gräben eindringt als parallel zu den Grabenkanten polarisiertes Licht (TE-Polarisation). Eine anschauliche Begründung kann darin gesehen werden, dass die TM-Polarisation dem physikalischen Bestreben des elek-

trischen Feldes entspricht, senkrecht auf metallischen Kanten zu stehen. Die Unstetigkeit des TM-polarisierten Feldes an der Grabenkante begünstigt darüber hinaus ein erhöhtes Eindringvermögen in die Chromschicht und damit eine erhöhte Absorption, was wiederum zu einer geminderten Rückstreuung für diese Polarisation führt. In TE-Polarisation hingegen ändert sich das elektrische Feld an den Grenzflächen kontinuierlich, wodurch die Eindringtiefe in die kleinen Gräben reduziert wird. In dieser Polarisation tritt daher starke Rückstreuung mit ausgeprägten Resonanzen auf.

Beide Effekte können auf Basis der VKA nicht behandelt werden. Der beobachtete reduzierte Reflexionsgrad für kleine Strukturen wird im Falle der VKA lediglich durch den wachsenden evaneszenten Anteil im Beugungsspektrum hervorgerufen. Die Nahfelder in der Gitterregion liefern auch hier einen direkten Einblick, warum die Unterschiede in den über die RCWA und VKA berechneten Beugungsspektren speziell für kleine Strukturen so deutlich ausfallen. Der oben beschriebene Unterschied der Stetigkeitsbedingungen des elektromagnetischen Feldes an den Grenzflächen des Gitters in TE- und TM-Polarisation, der für die starke Abweichung im Streuverhalten in beiden Polarisationen verantwortlich ist, fehlt in den mit VKA berechneten Nahfeldern völlig (Abb. 3.9 (b) und (d)). In diesem Fall wird das Nahfeld in jedem Teil des Gitters getrennt berechnet ohne die laterale Kopplung mit einzubeziehen. Daher erhält man einen abrupten Übergang des Feldes an den vertikalen Grenzflächen des Gitters – sowohl in TE- als auch in TM-Polarisation. Diese bewusste Vernachlässigung der elektromagnetischen Randbedingungen an den vertikalen Materialübergängen im Gitter ist das Schlüsselmerkmal der VKA, aber auch deren grundlegende Vereinfachung.

Um diese Unterschiede zwischen rigoroser und semi-rigoroser Theorie nochmals direkt sichtbar zu machen, sind in Abbildung 3.10 die Nahfelder eines Gitters mit 3000 nm Periode für VKA und RCWA dargestellt. Abbildung 3.10 (c) ist die Differenz aus Abbildung 3.10 (a) und (b) und gibt daher unmittelbar den rigorosen Anteil in der Nahfeldbeugung an. Sie zeigt in sehr guter Näherung eine kohärente Überlagerung zweier Zylinderwellen, die von den vertikalen Grenzflächen im Gitter ausgehen. Diese Zylinderwellen entsprechen exakt den Randbeugungswellen, die von Kottler zur Behebung des Unstetigkeitsproblems vorgeschlagen wurden [28, 47, 48, 196]. Sie wurden bereits in Abschnitt 3.2.4 behandelt.

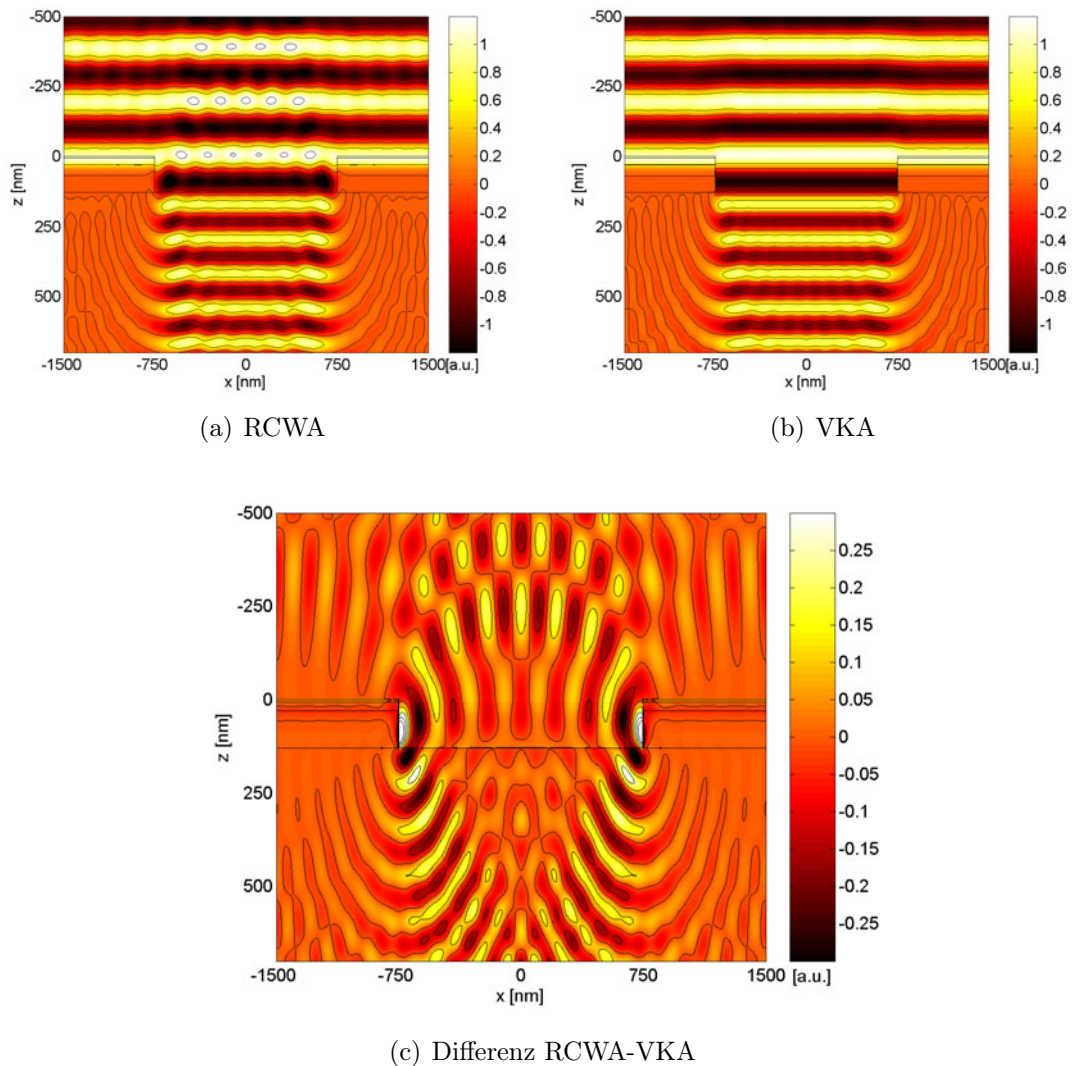


Abb. 3.10: Nahfelder in TE-Polarisation für eine Gitterperiode von 3000 nm. Der Realteil des elektrischen Feldes ist dargestellt. Die Differenz zwischen RCWA and VKA zeigt die Form einer Randbeugungswelle.

3.5.4 Gültigkeitsbereich der semi-rigorosen Beugungstheorie

Der entscheidende Vorteil der VKA besteht darin, dass die Randwerte der Kirchhoffschen Approximation aus einem physikalisch fundierten Modell abgeleitet werden und sich als rigorose Lösung des elektromagnetischen Schichtstapelproblems ergeben. Sie ist daher für eine weite Klasse von Strukturen intuitiv anwendbar und unterscheidet sich damit von den Methoden von Nesterov und Marathay (siehe Abschnitt 3.2.3), bei denen sich die Festlegung der Randwerte für die Vektorpotentiale mitunter sehr schwer gestaltet. Auch wird im Rahmen des Modells das *lokale* elektromagnetische Feld auf Basis der Maxwell-Gleichungen exakt beschrieben und die Transversalität des Lichtwellenfeldes bleibt auch für hohe Ein-

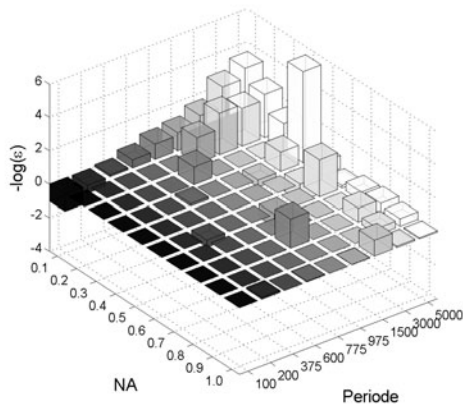
fallswinkel erhalten. Beim Beugungsprozess hingegen geht die Transversalität im Allgemeinen verloren, da die Beugung für jede Vektorkomponente getrennt berechnet wird. Um die Transversalität der gebeugten Wellen zu erhalten, werden daher die Beugungsamplituden in TM- und konischer Beugung mit höheren Beugungswinkeln zunehmend gedämpft.

Die lokale Bestimmung des Feldes geschieht unter vollkommener Vernachlässigung der lateralen Umgebung. Während diese Approximation im unstrukturierten Teil des Gitters eine gute Beschreibung des elektromagnetischen Feldes liefert, werden an lateralen Materialsprüngen die Diskrepanzen zur vollständigen rigorosen Lösung offenbar. An den seitlichen Grenzflächen kommt es zu Sprüngen aller Feldkomponenten, was den aus den Maxwell-Gleichungen abgeleiteten Randbedingungen widerspricht. Die Diskussion des Gültigkeitsbereichs der semi-rigorosen Theorie ist daher wie im klassischen Fall auf Basis der dimensionellen Größen des Gitters im Bezug auf die Wellenlänge zu führen. Sind beide Werte in der gleichen Größenordnung, so sind die elektromagnetischen Wechselwirkungseffekte in der Gitterregion nicht mehr vernachlässigbar, sondern dominieren vielmehr die Details der elektromagnetischen Beugung.

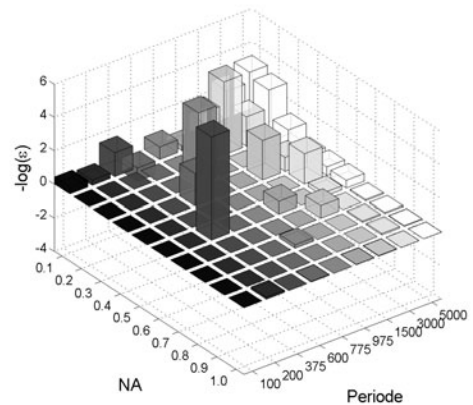
Diese allgemeinen Überlegungen sollen an dem Beispiel des letzten Abschnitts genauer illustriert werden. Der mittlere relative Fehler ϵ der Beugungseffizienzen, die in den Raumwinkelbereich der numerischen Apertur $NA < n_I \sin(\theta_i) < NA + \Delta NA$ fallen, wird hierzu definiert über

$$\epsilon(NA, \Delta NA) = \frac{\sum_{NA < n_I \sin(\theta_i) < NA + \Delta NA} |DE_i^{\text{VKA}} - DE_i^{\text{RCWA}}|}{\sum_{NA < n_I \sin(\theta_i) < NA + \Delta NA} DE_i^{\text{RCWA}}} \quad (3.57)$$

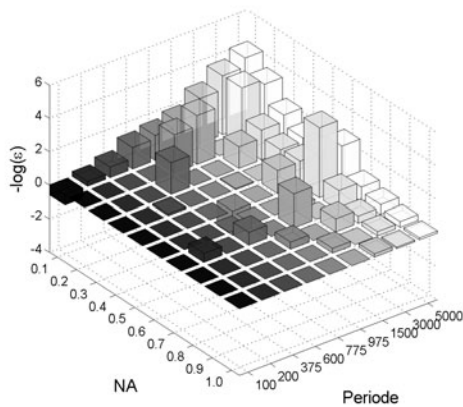
wobei $DE_i^{\text{VKA/RCWA}}$ die Beugungseffizienz der i -ten Beugungsordnung mit dem Beugungswinkel θ_i für die VKA beziehungsweise die RCWA angibt. In Abbildung 3.11 ist der negative Logarithmus von ϵ in Abhängigkeit von der Gitterperiode und dem Beugungswinkel in TE- und TM-Polarisation sowohl in Transmission als auch in Reflexion aufgetragen. In dieser Darstellung gibt ein hoher positiver Wert eine gute Übereinstimmung zwischen RCWA und VKA wieder und $-\log(\epsilon)$ ist ein quantitatives Maß für diese Übereinstimmung. Ein Restfehler von 10% entspricht dem Wert 1, ein Restfehler von 1% entspricht dem Wert 2 usw. Für Abbildung 3.11 wurden die mittleren Fehler für $\Delta NA = 0.1$ berechnet und die gewählten Gitterperioden entsprechen den Extrema in Abbildung 3.8. Wenn kein Licht in eine bestimmte Raumrichtung gebeugt wird, ist $\log(\epsilon)$ auf Null gesetzt. Es zeigt sich eine hervorragende Übereinstimmung zwischen RCWA und VKA insbesondere für kleine Beugungswinkel (d.h. den paraxialen Bereich) und für große Gitterperioden.



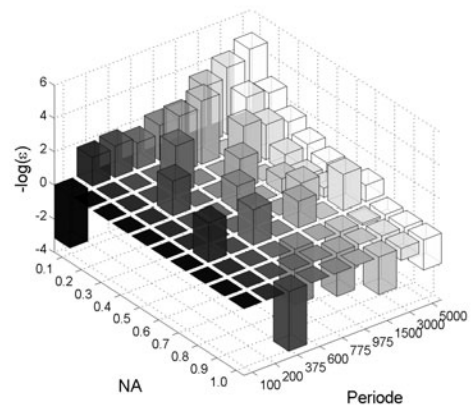
(a) Rel. Übereinstimmung, Reflexion in TM



(b) Rel. Übereinstimmung, Reflexion in TE



(c) Rel. Übereinstimmung, Transmission in TM



(d) Rel. Übereinstimmung, Transmission in TE

Abb. 3.11: Relative Übereinstimmung zwischen VKA und RCWA in Abhängigkeit von Gitterperiode und Beugungswinkel.

Deutliche Fehler hingegen treten für hohe Beugungswinkel auf. Für große Gitterperioden sind diese Abweichungen in der Praxis bedeutungslos, da in diesem Fall die Beugungseffizienzen der hohen Beugungsordnungen viel kleiner sind als die der paraxialen Ordnungen. Bei kleinen Gitterperioden hingegen tragen auch die Ordnungen unter hohem Beugungswinkel einen beträchtlichen Energieanteil und die Fehler in der VKA sind nicht mehr vernachlässigbar. Dies trifft insbesondere dann zu, wenn die Gitterperioden in die Größenordnung der Wellenlänge kommen. Als Daumenregel kann die VKA für Strukturen mit charakteristischer Ausdehnung ab ca. $10\text{-}15 \lambda$ angewendet werden. Diese Ergebnisse entsprechen früheren Vergleichen zwischen der RCWA und skalarer Beugungstheorie [197, 198].

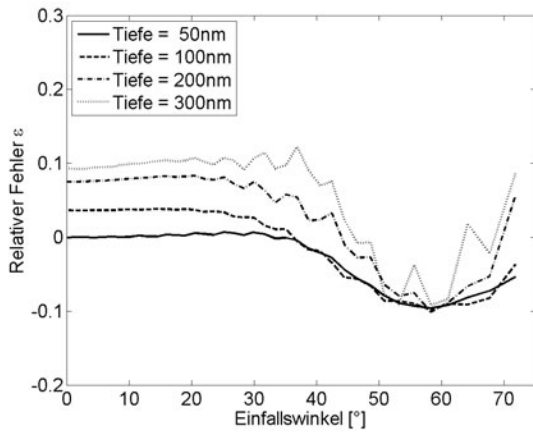
Als weitere wesentliche Ursache für die Abweichung zwischen RCWA und VKA kommt insbesondere für kleine Strukturbreiten hinzu, dass die vertikale und die laterale Kopp-

lung im Gitterbereich nicht mehr separierbar sind, sondern gemeinsam in das komplexe Wechselwirkungsverhalten mit eingehen. Rigorose Methoden tragen dieser wechselseitigen Kopplung Rechnung. Im Falle der RCWA werden zum Beispiel die Beugungsamplituden und die Entwicklungskoeffizienten der Eigenmoden im Gitter durch eine Anpassung der vertikalen Randbedingungen gleichzeitig bestimmt. Die vertikale Kopplung geht in die Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten im Gitter und damit in die laterale Kopplung ein. Bei semi-rigoren Methoden hingegen wird auch dieser Effekt vernachlässigt. Es ist daher zu erwarten, dass für Gitter mit hohem Aspektverhältnis, bei denen Abschattungseffekte in der Gitterregion einen wachsenden Einfluss auf das Beugungsspektrum haben, die semi-rigore Theorie Schwächen zeigen wird.

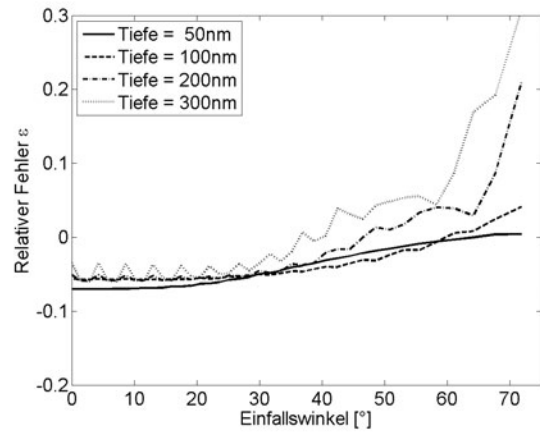
Im Folgenden wird daher untersucht, wie die Dicke des Gitters und die Größe des Einfallswinkels auf die Genauigkeit der VKA Einfluss nehmen. Hierbei erwartet man, dass laterale Kopplungseffekte im Gitter mit wachsender Strukturtiefe zunehmen und somit größere Abweichungen zu vollständig rigorosen Rechnungen auftreten. Darüber hinaus sind auch größere Abweichungen zwischen RCWA und VKA für schrägen Einfallswinkel zu erwarten, da die VKA Abschattungseffekten im Gitter überhaupt keine Rechnung trägt. Um diese Annahmen zu belegen, zeigt Abbildung 3.12 die Simulation eines Gitters mit 5000 nm Periode wobei die Dicke der unteren Chromschicht in Abbildung 3.7 zwischen 50 nm und 300 nm variiert. Der Einfallswinkel nimmt von 0° auf 72° zu. In Transmission nimmt wie erwartet der relative Fehler¹² mit zunehmender Tiefe und größer werdendem Einfallswinkel sowohl in TE- als auch in TM-Polarisation zu. Bis zu Einfallswinkeln von 20° ändert sich hier der relative Fehler ϵ kaum, aber für größere Einfallswinkel nimmt dann die Genauigkeit der VKA deutlich ab. In Reflexion hingegen ist ein komplizierteres Verhalten zu beobachten. Hier liegt nicht wie in Transmission ein reines Amplituden-Objekt vor, sondern vielmehr bestimmt das Verhalten der Antireflexionsschicht das Beugungsspektrum stark. Während in TE-Polarisation ein ähnlich glattes Verhalten wie in Transmission vorliegt, zeigt die TM-Polarisation einen deutlich anderen Verlauf. Die Position der Eindellung im Kurvenverlauf stimmt sehr gut mit dem Brewster-Winkel für Glas überein. Dies lässt darauf schließen, dass die verschwindende Reflektivität in den Glasbereichen für dieses Verhalten verantwortlich ist.

Zusammenfassend zeigt die semi-rigore Theorie gerade dort Schwächen, wo sie durch die Anwendung der Prinzipien der klassischen Beugungstheorie auch erwartet werden. Für

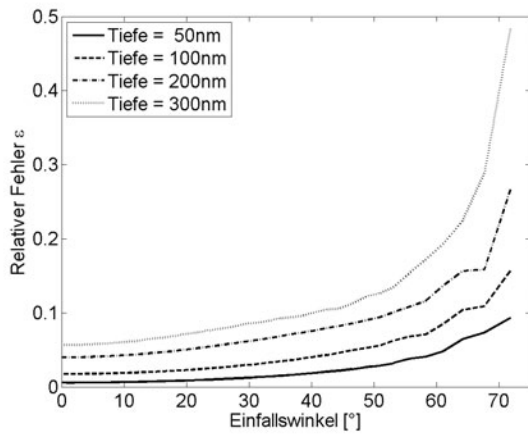
¹²Der relative Fehler wurde für $NA = 1$, $\Delta NA = 1$ berechnet. Die Betragsbildung wurde nicht vorgenommen.



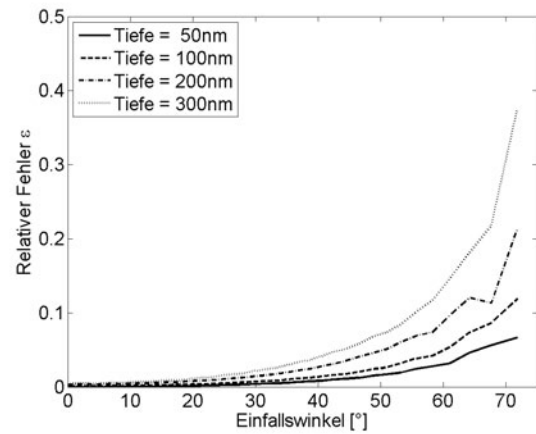
(a) Relativer Fehler, Reflexion in TM



(b) Relativer Fehler, Reflection in TE



(c) Relativer Fehler, Transmission in TM



(d) Relativer Fehler, Transmission in TE

Abb. 3.12: Relativer Fehler der VKA im Vergleich zur RCWA in Abhängigkeit von der Gittertiefe und dem Einfallswinkel.

stark beugende Strukturen mit kleinen Abmessungen und hohem Aspektverhältnis versagt die semi-rigore Theorie zunehmend. Der Maßstab, vor dem sich diese Diskussion abspielt, ist die Wellenlänge des Lichts.

Andererseits kann die semi-rigore Theorie gerade dort ihre Stärken ausspielen, wo große unstrukturierte Bereiche vorliegen. Hier spielen laterale Kopplungseffekte im Gitter eine untergeordnete Rolle und die Polarisations-eigenschaften des gebeugten Feldes werden stärker durch das lokale Reflexions- und Transmissionsverhalten des Materialsystems geprägt. Dies ist jedoch durch den vertikalen Schichtaufbau bestimmt, der explizit in die VKA eingeht. Hinzu kommt, dass gerade für Gitter mit sehr großer Periode rigore Berechnungsverfahren an ihre Grenzen stoßen. Eine hinreichende Konvergenz der Berechnung

wird erst für eine sehr hohe Modenzahl erreicht. Der tiefere Grund ist genau in den gleichen Punkten zu sehen, die in diesem Fall für die Gültigkeit des semi-rigorosen Modells sprechen. Die lateralen Kopplungseffekte werden einerseits immer kleiner, andererseits nehmen die Übergangsbereiche im Gitter einen immer kleineren relativen Raum ein. Gerade dieser Umstand macht die Genauigkeit der VKA immer besser, während rigorose Methoden eine immer höhere Modenzahl benötigen, um den Übergangsbereich überhaupt abzutasten. Betrachtet man vor diesem Hintergrund auch die Rechenzeit, die für eine hohe Modenzahl in Verbindung mit vielen Schichten nötig ist, so ist in solchen Fällen die VKA rigorosen Methoden vorzuziehen. Bei den diskutierten Beispielen liegt die Zeitersparnis bei ca. drei Größenordnungen.

Neben der effizienten Berechnung von Beugungsproblemen an großflächigen Strukturen gestattet der direkte Vergleich von semi-rigorosen und vollständig rigorosen Methoden einen tieferen Einblick in das Wechselwirkungsverhalten im Innern von beugenden Objekten und der damit verknüpften optischen Wirksamkeit im Fernfeld. Dies trifft gerade für stark beugende Strukturen zu, für die die VKA ihre Gültigkeit verliert. Da in der VKA explizit die lateralen Wechselwirkungseffekte unterdrückt werden, ohne dabei weder das Materialsystem noch den vektoriellen Charakter der Beugung außer Acht zu lassen, kann der Einfluss lateraler rigoroser Wechselwirkungseffekte gezielt studiert werden. Anwendungsbeispiele hierfür sind die physikalisch-optische Bildinterpretation in der hochauflösenden Metrologie (siehe Kapitel 7) sowie die Untersuchung der optischen Wirksamkeit von Nanostrukturen.

4 Grundlagen der Polarisationsoptik

In der bisherigen Diskussion wurde das Licht als elektromagnetisches Vektorfeld betrachtet ohne den Bezug zu seiner Beobachtbarkeit herzustellen. Der Vektorcharakter des Lichtwellenfeldes äußert sich experimentell in seinen Polarisations-eigenschaften. Wie von Otto Wiener 1890 in einem klassischen Experiment nachgewiesen werden konnte [199], wird bei optischen Frequenzen die Wechselwirkung zwischen Materie und elektromagnetischem Feld durch die elektrische Feldstärke \vec{E} bestimmt. Der experimentell erfassbare Polarisationszustand des Lichtwellenfeldes beschreibt daher das Verhalten des elektrischen Feldvektors in einem bestimmten Raumpunkt. Wie in den folgenden Kapiteln noch eingehend diskutiert wird, ist der Einfluss der Polarisations-eigenschaften des Lichts auf die optische Bildgebung insbesondere unter zwei Aspekten wichtig:

- Der Interferenzkontrast unterschiedlicher Wellenzüge hängt vom wechselseitigen Polarisationszustand ab. Die optische Bildentstehung, die im Kern auf Interferenzeffekten beruht, ist daher polarisationsabhängig.
- Die Licht-Objekt-Wechselwirkung ist aufgrund der elektromagnetischen Randbedingungen (siehe Abschnitt 2.1) polarisationsabhängig. Auch dies äußert sich in Polarisations-effekten in der Bildentstehung.

Dieses Kapitel unterteilt sich in zwei Abschnitte. Der erste umfasst die Beschreibung polarisierten Lichts. Der zweite Abschnitt beschreibt Formalismen, mit denen das Transferverhalten von Polarisationszuständen durch optische Wechselwirkungsprozesse beschrieben werden kann. Hierbei beschränkt sich die Diskussion auf lineare Transferprozesse. Beide Abschnitte konzentrieren sich dabei auf die wesentlichen Aspekte, die für das Verständnis der folgenden Kapitel unabdingbar sind. Für ausführlichere Darstellungen zu polarisiertem Licht sei auf mehrere klassische Referenzen verwiesen [200–203].

4.1 Die Beschreibung polarisierten Lichts

Der Polarisationszustand eines Lichtwellenfeldes ist sehr eng mit seinen Kohärenzeigenschaften verknüpft [204]. Im Folgenden wird zwischen einem räumlich und zeitlich kohärenten sowie einem partiell kohärenten Lichtwellenfeld unterschieden. Dies führt auf unterschiedliche Darstellungsmöglichkeiten des Polarisationszustandes.

Die Darstellung beschränkt sich auf die Betrachtung von Planwellen, die sich in positiver z -Richtung eines kartesischen (xyz) -Koordinatensystems ausbreiten. Die Einschränkung auf Planwellen ist in dieser Arbeit ohne praktische Bedeutung, da einerseits alle Beugungsprozesse durch eine Planwellenzerlegung beschrieben werden und andererseits in hoch vergrößernden Abbildungsprozessen die auftretenden Divergenzwinkel sehr klein sind. Man kann also von einem quasi-kollimierten Lichtwellenfeld ausgehen. Es wird im Folgenden eine harmonische Zeitabhängigkeit $e^{-i\omega t}$ angenommen.

4.1.1 Polarisations-eigenschaften von kohärentem Licht

Monochromatisches, räumlich kohärentes Licht ist immer polarisiert. Auch wenn der Polarisationszustand einer beliebigen räumlichen Verteilung des Lichtwellenfeldes von Ort zu Ort variiert, beschreibt der Endpunkt des elektrischen Feldstärkevektors in jedem Raumpunkt im Allgemeinen eine Ellipsenbahn (elliptisch polarisiertes Licht) [201]. Diese kann zu einer Linie (linear polarisiertes Licht) oder einem Kreis (zirkular polarisiertes Licht) degenerieren. Im Fall einer Planwelle genügt aufgrund der Transversalität des Lichtwellenfeldes in homogenen Medien ein zwei-komponentiger Vektor für die Beschreibung des Polarisationszustandes. Dieser wird Jones-Vektor genannt:

$$\tilde{\mathbf{E}} = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

Der Jones-Vektor enthält die Information über den Polarisationszustand, die Amplitude und die Phase der Welle. Ist nur der Polarisationszustand des Feldes von Interesse, kann der Jones-Vektor normiert und die globale Phase extrahiert werden (Phasen-reduzierter Jones-Vektor) [201, 205].

4.1.2 Polarisations-eigenschaften von partiell kohärentem Licht

Bei partieller räumlicher und zeitlicher Kohärenz reicht für die Darstellung des Lichtwellenfeldes der Jones-Vektor nicht mehr aus. Der Endpunkt des Feldstärkevektors beschreibt keine deterministische Bahn mehr, sondern ist statistischen Fluktuationen unterworfen. Der Jones-Vektor wird zeitabhängig. Man spricht von einem partiell polarisierten Lichtwellenfeld. Für eine eingehendere Diskussion insbesondere im Hinblick auf die Relevanz der verschiedenen Zeitskalen sei auf die Literatur [201, 203, 206] verwiesen.

4.1.2.1 Kohärenzmatrix-Formalismus

Für ein quasi-kollimiertes, partiell polarisiertes Lichtwellenfeld mit kleinem Divergenzwinkel wird der Polarisationszustand durch die zweidimensionale *Kohärenzmatrix* (*Polarisations-Matrix*) beschrieben. Diese ergibt sich aus dem statistischen Mittelwert über das Dyadische Produkt des Jones-Vektors mit seinem adjungierten Vektor:

$$\mathbf{E} = \langle \tilde{\mathbf{E}} \otimes \tilde{\mathbf{E}}^+ \rangle = \begin{bmatrix} \langle E_x E_x^* \rangle & \langle E_x E_y^* \rangle \\ \langle E_y E_x^* \rangle & \langle E_y E_y^* \rangle \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Die Fluktuation der Feldstärkekomponenten werden durch die endliche Spektralbreite oder die partielle räumliche Kohärenz des Lichtwellenfeldes hervorgerufen. Die Mittelwertbildung $\langle \rangle$ kann damit als zeitlicher Mittelwert oder aber auch als Ensemblemittelwert über verschiedene partiell kohärente Planwellenbeiträge zum Gesamtfeld aufgefasst werden.

Die Kohärenzmatrix beschreibt das partiell polarisierte Lichtwellenfeld vollständig. Die Diagonalelemente E_{xx} und E_{yy} geben die Intensitäten der in x- und y-Richtung linear polarisierten Anteile an. Die Gesamtintensität \mathcal{I} entspricht der Spur tr der Kohärenzmatrix:

$$\mathcal{I} = \langle E_x E_x^* \rangle + \langle E_y E_y^* \rangle = tr(\mathbf{E}) \quad (4.3)$$

Die Nebendiagonalelemente E_{xy} und E_{yx} beschreiben das Korrelationsverhalten zwischen beiden Polarisationsrichtungen. Da beide konjugiert komplex zueinander sind, ist \mathbf{E} hermitesch. Die normierte Kreuzkorrelation

$$\mathcal{J}_{xy} = \frac{E_{xy}}{\sqrt{E_{xx}}\sqrt{E_{yy}}} \quad (4.4)$$

bezeichnet man als Korrelationsfaktor. Er kann analog zum komplexen Kohärenzgrad

der skalaren Kohärenztheorie verstanden werden [207]. Den Betrag $|\mathcal{J}_{xy}|$ nennt man den *Kohärenzgrad* (*degree of coherence*), die Phase ist ein Maß für die relative Phasendifferenz beider Polarisationszustände. Aufgrund der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung gilt für den Kohärenzgrad

$$0 \leq |\mathcal{J}_{xy}| \leq 1 \quad (4.5)$$

und die Determinante der Kohärenzmatrix ist $\|\mathbf{E}\| \geq 0$. Der Fall $|\mathcal{J}_{xy}| = 1$ wird für vollständig polarisiertes Licht erfüllt. Für unpolarisiertes Licht hingegen gilt $|\mathcal{J}_{xy}| = 0$. Der Korrelationsfaktor hängt von der Wahl des Koordinatensystems ab und ist daher für eine allgemeine polarisationsoptische Charakterisierung des Lichtwellenfeldes nur bedingt geeignet. Der Polarisationsgrad [206]

$$\mathcal{P} = \frac{\mathcal{I}_{\text{pol}}}{\mathcal{I}_{\text{tot}}} = \frac{\text{tr}(\mathbf{E}_{\text{pol}})}{\text{tr}(\mathbf{E})} = \sqrt{1 - \frac{4\|\mathbf{E}\|}{\text{tr}(\mathbf{E})^2}} \quad (4.6)$$

beschreibt das Verhältnis von unpolarisiertem und polarisiertem Intensitätsanteil. Da nur die Determinante $\|\mathbf{E}\|$ und die Spur tr von \mathbf{E} auftreten, ist der Polarisationsgrad unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems. Er ist daher ein fundamentales Charakteristikum eines partiell kohärenten Lichtwellenfeldes. Auch für ihn gilt:

$$0 \leq \mathcal{P} \leq 1, \quad (4.7)$$

wobei $\mathcal{P} = 1$ vollständig polarisiertem Licht und $\mathcal{P} = 0$ unpolarisiertem Licht entspricht. Wie sich durch einfache Umformungen nachweisen lässt, ist der Polarisationsgrad nie kleiner als der Kohärenzgrad $|\mathcal{J}_{xy}| \leq \mathcal{P}$. Die Gleichheit beider Größen wird für den Fall $E_{xx} = E_{yy}$ erreicht.

Die Einführung des Polarisationsgrades beruht auf dem *Prinzip der optischen Äquivalenz*, das auf Stokes zurückgeht [208]. Es besagt, dass sich die Kohärenzmatrix einer Welle, die sich aus mehreren, unabhängigen, sich in einer Richtung ausbreitenden Wellenzügen zusammensetzt, als Summe der Kohärenzmatrizen der einzelnen Wellenzüge ergibt:

$$\mathbf{E} = \sum_{k=1}^N \mathbf{E}_k \quad (4.8)$$

Umgekehrt kann jedes partiell polarisierte Lichtwellenfeld als inkohärente Summe von einzelnen Teilwellen verstanden werden, die frei gewählt werden können. Insbesondere erlaubt

sie die eindeutige Zerlegung eines partiell polarisierten Lichtwellenfeldes in einen vollständig polarisierten und einen vollständig unpolarisierten Anteil der Form¹:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{unpol}} + \mathbf{E}_{\text{pol}} = \frac{1}{2}\mathcal{I}(1 - \mathcal{P})\mathbf{I} + \mathcal{I}\mathcal{P}\mathbf{E}_{\text{pol}}^{\text{Pr}} \quad (4.10)$$

Hierbei bezeichnet \mathbf{I} die Einheitsmatrix und $\mathbf{E}_{\text{pol}}^{\text{Pr}}$ eine idempotente Projektionsmatrix auf den vollständig polarisierten Zustand \mathbf{E}_{pol} [208]. Der polarisierte Anteil \mathbf{E}_{pol} beschreibt einen elliptischen Polarisationszustand, der durch den Azimutwinkel ψ zwischen großer Halbachse der Polarisationsellipse und der x-Achse

$$\psi = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{E_{xy} + E_{yx}}{E_{xx} - E_{yy}} \right), \quad (4.11)$$

sowie den Elliptizitätswinkel χ

$$\chi = \frac{1}{2} \arcsin \left(\frac{i(E_{yx} - E_{xy})}{\mathcal{P}(E_{xx} + E_{yy})} \right) \quad (4.12)$$

erfasst wird. χ hängt mit der Exzentrizität \mathcal{E} der Polarisationsellipse über $\mathcal{E} = \tan(\chi)$ zusammen. Die Gesamtintensität \mathcal{I} , der Polarisationsgrad \mathcal{P} sowie die Winkel ψ und χ der Polarisationsellipse definieren ein partiell polarisiertes Lichtwellenfeld vollständig. Diese vier physikalisch interpretierbaren Größen entsprechen den vier Freiheitsgraden der hermiteschen Kohärenzmatrix \mathbf{E} .

Zum Schluss dieses Abschnitts sei noch auf eine Verallgemeinerung der 2D-Kohärenzmatrix auf Felder mit beliebigen Öffnungswinkeln verwiesen. Diese ist insbesondere bei der Darstellung von Nahfeldern wichtig, wird uns aber auch in der mikroskopischen Bildsimulation begegnen. Der Jones-Vektor wird in diesem Fall zu einem 3-komponentigen Vektor, der dem Feldstärkevektor \vec{E} entspricht. Die 3D-Kohärenzmatrix ergibt sich analog zu Gleichung 4.2 als Mittelwert des Dyadischen Produkts der Jones-Vektoren:

$$\mathbf{E} = \left\langle \vec{E} \otimes \vec{E}^* \right\rangle = \begin{bmatrix} \langle E_x E_x^* \rangle & \langle E_x E_y^* \rangle & \langle E_x E_z^* \rangle \\ \langle E_y E_x^* \rangle & \langle E_y E_y^* \rangle & \langle E_y E_z^* \rangle \\ \langle E_z E_x^* \rangle & \langle E_z E_y^* \rangle & \langle E_z E_z^* \rangle \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

¹Die Herleitung dieser Beziehung beruht auf einer spektralen Zerlegung der Kohärenzmatrix \mathbf{E} mit den Eigenwerten

$$e_{1,2} = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{E}) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(\text{tr}(\mathbf{E}))^2 - 4|\mathbf{E}|} = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{E}) \mp \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{E}_{\text{pol}}). \quad (4.9)$$

Die Entwicklungskoeffizienten hängen mit den Eigenwerten über $\frac{1}{2}\mathcal{I}(1 - \mathcal{P}) = e_1$ und $\mathcal{I}\mathcal{P} = e_2 - e_1$ zusammen [208].

Auch hier entspricht die Spur der Matrix der Gesamtintensität. Für Strahl-ähnliche Felder mit kleinem Öffnungswinkel ist die z-Komponente des Feldstärke-Vektors sehr klein, so dass nur der linke obere 2×2 -Block der Matrix Elemente nennenswerte Größe enthält. Dieser Block entspricht genau der 2D-Kohärenzmatrix.

4.1.2.2 Stokes-Vektor-Formalismus

Neben dem Kohärenzmatrix-Formalismus können die vier Freiheitsgrade eines partiell kohärenten Lichtwellenfeldes auch durch einen Stokes-Vektor dargestellt werden [209]. Dieser ist insbesondere im Zusammenhang mit dem Müller-Matrix-Formalismus von Bedeutung. Der Stokes-Vektor ist wie folgt definiert:

$$\mathbf{s} = \begin{bmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle E_x E_x^* \rangle + \langle E_y E_y^* \rangle \\ \langle E_x E_x^* \rangle - \langle E_y E_y^* \rangle \\ \langle E_x E_y^* \rangle + \langle E_y E_x^* \rangle \\ i(\langle E_y E_x^* \rangle - \langle E_x E_y^* \rangle) \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

Durch einen Vergleich von Gleichung 4.2 und 4.14 wird deutlich, dass die Stokes-Vektor-Darstellung und die Kohärenzmatrix-Darstellung ineinander überführt werden können. Dieser Zusammenhang wird insbesondere in der Entwicklung der Kohärenzmatrix nach Pauli-Spin-Matrizen σ_j (siehe Abschnitt 4.2.1.1) deutlich [210]:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^3 s_j \sigma_j \quad (4.15)$$

Die Stokes-Parameter treten dabei als Entwicklungskoeffizienten auf. Der Stokes-Vektor enthält nur Intensitätsgrößen und ist daher messtechnisch sehr einfach zugänglich. Die Komponenten haben dabei eine klare physikalische Bedeutung:

- s_0 entspricht der (unpolarisierten) Gesamtintensität \mathcal{I} .
- s_1 gibt die Intensitätsdifferenz zwischen x- und y-polarisiertem Licht an.
- s_2 gibt die Intensitätsdifferenz zwischen $+45^\circ$ und -45° -polarisiertem Licht an.
- s_3 entspricht der Differenz zwischen rechts und links zirkular polarisiertem Licht.

Alle Eigenschaften, die für die Kohärenzmatrizen im letzten Abschnitt zusammengestellt wurden, lassen sich in analoger Form auch für Stokes-Vektoren formulieren. Aus $\|\mathbf{E}\| \geq 0$

folgt:

$$s_0^2 \geq s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 \quad (4.16)$$

wobei das Gleichheitszeichen für vollständig polarisiertes Licht gilt. Für den Polarisationsgrad folgt analog zu Gleichung 4.6:

$$\mathcal{P} = \frac{\mathcal{I}_{\text{pol}}}{\mathcal{I}_{\text{tot}}} = \frac{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2}}{s_0} \quad (4.17)$$

Um den Polarisationsgehalt im Polarisationsgrad mit zu berücksichtigen, ist die folgende Aufspaltung gebräuchlich [202, 211]:

$$\text{Linearer Polarisationsgrad: } \mathcal{P}_{\text{linear}} = \frac{\sqrt{s_1^2 + s_2^2}}{s_0} \quad (4.18a)$$

$$\text{Zirkularer Polarisationsgrad: } \mathcal{P}_{\text{zirkular}} = \left| \frac{s_3}{s_0} \right| \quad (4.18b)$$

Die Aufspaltung des partiell polarisierten Lichtwellenfeldes in einen vollständig polarisierten und unpolarisierten Anteil

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_{\text{unpol}} + \mathbf{s}_{\text{pol}} \quad (4.19)$$

mit

$$\mathbf{s}_{\text{unpol}} = ((1 - \mathcal{P})s_0, 0, 0, 0)^T \quad \text{und} \quad \mathbf{s}_{\text{pol}} = (\mathcal{P}s_0, s_1, s_2, s_3)^T \quad (4.20)$$

entspricht Gleichung 4.10 in der Stokes-Vektor-Darstellung. Für die Winkel der Polarisationsellipse gilt analog zu Gleichung 4.11 und 4.12:

$$\psi = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{s_2}{s_1} \right), \quad \chi = \frac{1}{2} \arcsin \left(\frac{s_3}{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2}} \right) \quad (4.21)$$

4.2 Beschreibung des linearen Polarisationsstransfers

Der Polarisationszustand eines Lichtwellenfeldes wird im Allgemeinen durch Wechselwirkungsprozesse geändert. Hierzu zählen die Propagation durch anisotrope Medien, die Reflexion und Brechung an Grenzflächen sowie Beugungs- und Streuprozesse. Die Änderungen können dabei entweder gezielt durch polarisationsoptische Elemente herbeigeführt werden, oder sie sind eine inhärente Begleiterscheinung der Wechselwirkung zwischen Objekt und Lichtwellenfeld. Die Polarisationsänderung zeigt in vielen Bereichen ein lineares Transferverhalten, so dass sie durch Transformationsmatrizen beschrieben werden

kann. Hier haben sich insbesondere zwei Theorien etabliert: der *Jones-Matrix-Formalismus* [212] und der *Müller-Matrix-Formalismus* [213–215]. Während das Jones-Matrix-Kalkül im kohärenten Fall direkt aus den Maxwell-Gleichungen hervorgeht und die Manipulation von Jones-Vektoren beschreibt², postuliert das Müller-Matrix-Kalkül einen linearen Zusammenhang zwischen Eingangs-Stokes-Vektor \mathbf{s}_{in} und Ausgangs-Stokes-Vektor \mathbf{s}_{out} . Dem Müller-Matrix-Formalismus fehlt daher der physikalisch-mathematische Ursprung des Jones-Matrix-Formalismus, er baut dagegen auf heuristischen Grundsätzen auf. Gegenüber dem Jones-Matrix-Formalismus hat er allerdings den Vorteil, mit messbaren Intensitätsgrößen anstatt direkt mit Feldstärkevektoren zu operieren. Darüber hinaus sind Depolarisationsprozesse im Jones-Matrix-Kalkül nicht erfassbar, wohl aber durch das Müller-Matrix-Kalkül abgedeckt. In Abbildung 4.1 ist der Transferprozess schematisch dargestellt. Um

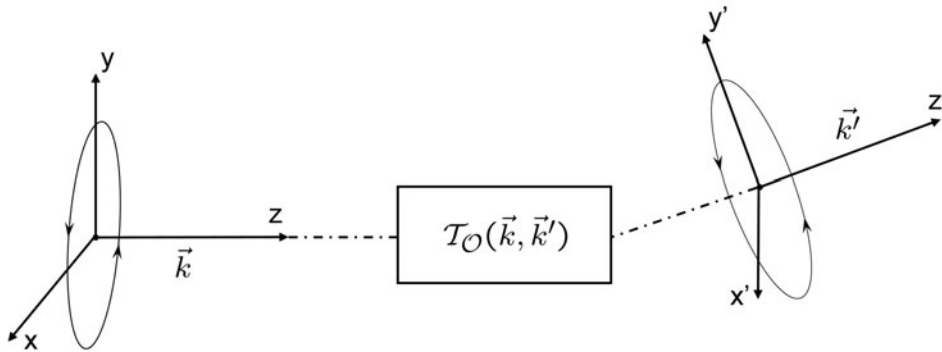


Abb. 4.1: Schematische Darstellung des Polarisationsstransfers durch ein Objekt. Für das einfallende und ausfallende Lichtwellenfeld dienen unterschiedliche Referenz-Koordinatensysteme.

die grundlegenden Eigenschaften des Modells nicht durch die Details des mathematischen Formalismus zu verwässern, seien zunächst die wesentlichen Grundannahmen vorangestellt:

- Das einfallende wie auch das ausfallende Lichtwellenfeld kann durch eine homogene (im Allgemeinen partiell) polarisierte Planwelle beschrieben werden. Der Polarisationszustand des einfallenden Feldes wird im lokalen Koordinatensystem (x,y,z) beschrieben, dessen z -Richtung mit dem Wellenvektor \vec{k} übereinstimmt. Das Gleiche trifft für das ausfallende Lichtwellenfeld mit dem Wellenvektor \vec{k}' und dem Koordinatensystem (x',y',z') zu.
- Der Wechselwirkungsprozess wird durch eine einfache Transformationsmatrix \mathcal{T}_O erfasst. Die Details der Wechselwirkung spielen im Formalismus keine Rolle.

²Wie der nächste Abschnitt zeigen wird, ist die Anwendung von Jones-Matrizen auch für ein partiell kohärentes Lichtwellenfeld möglich.

- Der Wechselwirkungsprozess ist *linear* und *frequenzerhaltend*. Nicht-lineare Prozesse wie Frequenzmischung, unelastische Streuung (Raman-, Brillouin-Streuung) oder Multiphotonenstreuung sind ausgenommen.
- Es werden nur *passive Elemente* behandelt, die im Gegensatz zu aktiven Elementen kein Licht im Inneren des Mediums generieren.
- *Lineare Beugungs-* und *Streu*prozesse sind im Formalismus enthalten. In diesem Fall stimmen die räumlichen Orientierungen der verwendeten Koordinatensysteme im Allgemeinen nicht mehr überein. Die Transformationsmatrix $\mathcal{T}_O(\vec{k}, \vec{k}')$ ist eine Funktion der Ein- und Ausfallsrichtung der beteiligten Wellenzüge.
- Die Wahl der transversalen Koordinaten (x, y) und (x', y') ist vollkommen frei, bestimmt aber maßgeblich das Aussehen der Transformationsmatrix $\mathcal{T}_O(\vec{k}, \vec{k}')$. Durch eine geeignete Wahl können daher spezielle Wechselwirkungsdetails besonders hervorgehoben werden. Auf die Bestimmung der Basissysteme wird daher besonderes Augenmerk gelegt.

Der im Folgenden dargestellte Formalismus bildet die Basis für die Beschreibung des polarisationsoptischen Transferverhaltens von optischen Systemen in Kapitel 5 genauso wie für das polarisationsoptische Wechselwirkungsverhalten von beugenden Mikro- und Nanostrukturen in Kapitel 8. In diesen Kapiteln wird der gewinnbringende Nutzen des Formalismus für die physikalische Interpretation polarisationsoptischer Wechselwirkungsprozesse deutlich.

4.2.1 Jones-Matrix-Kalkül

Der lineare Polarisationstransfer zwischen zwei kohärenten Polarisationszuständen, die durch Jones-Vektoren gegeben sind, lässt sich durch ein Gleichungssystem der Form

$$\begin{bmatrix} E_{x'}^{\text{out}} \\ E_{y'}^{\text{out}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_{x'x} & J_{x'y} \\ J_{y'x} & J_{y'y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x^{\text{in}} \\ E_y^{\text{in}} \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

beziehungsweise in der zugehörigen Matrix-Notation durch

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\text{out}} = \mathbf{J} \tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}} \quad (4.23)$$

beschreiben [212]. Die komplexwertige 2×2 -Matrix \mathbf{J} heißt *Jones-Matrix*. Da die globale Phase der Jones-Matrix für das polarisationsoptische Verhalten ohne Belang ist,

wird sie in der Regel vor die Jones-Matrix gezogen. Man spricht in diesem Fall von einer *Phasen-reduzierten Jones-Matrix*. Während die Hauptdiagonalelemente der Jones-Matrix ($x \rightarrow x'$, $y \rightarrow y'$) die Amplitudenschwächung und die Phasenretardierung der x-beziehungsweise y-polarisierten Zustände beschreiben, bestimmen die Nebendiagonalelemente den Transfer für die gekreuzten Polarisationszustände ($x \rightarrow y'$, $y \rightarrow x'$).

Wie Gleichung 4.22 deutlich macht, erfolgt durch die Jones-Matrix eine eindeutige Zuordnung der Amplituden und Phasen zwischen Eingangs- und Ausgangszustand. Dekorrelationen oder statistische Schwankungen des Transferprozesses, die sich in Depolarisationseffekten äußern, können durch die Jones-Matrix nicht beschrieben werden. Allerdings ist der Jones-Matrix-Formalismus auch auf partiell polarisiertes Licht anwendbar. Unter Verwendung von Gleichung 4.23 und Anwendung des Dyadischen Produktes

$$\langle \tilde{\mathbf{E}}_{\text{out}} \otimes \tilde{\mathbf{E}}_{\text{out}}^+ \rangle = \langle (\mathbf{J}\tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}}) \otimes (\mathbf{J}\tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}})^+ \rangle = \mathbf{J} \langle \tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}} \otimes \tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}}^+ \rangle \mathbf{J}^+ \quad (4.24)$$

folgt für die Transformation einer Kohärenzmatrix durch ein nicht depolarisierendes System:

$$\mathbf{E}_{\text{out}} = \mathbf{J}\mathbf{E}_{\text{in}}\mathbf{J}^+ \quad (4.25)$$

Gleichung 4.25 entspricht in ihrer Form einer Ähnlichkeitstransformation, die in Abschnitt 4.2.1.2 genauer beschrieben wird.

4.2.1.1 Entwicklung von Jones-Matrizen nach Paulischen Spin-Matrizen

Die komplexwertige Jones-Matrix wird durch acht reelle Parameter bestimmt. Diese acht Parameter entsprechen acht unabhängigen, grundlegenden Eigenschaften eines polarisationsoptischen Systems, die in vier Klassen eingeteilt werden können:

- isotrope (d.h. polarisationsunabhängige) Absorption und Retardierung
- lineare Doppelbrechung und linearer Dichroismus mit der x- und y- Achse als Eigenachsen
- lineare Doppelbrechung und linearer Dichroismus mit der 1. und 2. Winkelhalbierenden als Eigenachsen.
- zirkulare Doppelbrechung und zirkularer Dichroismus

Diese Unterteilung wird unter anderem zur Polarisationsanalyse von optischen Systemen angewandt [216, 217]. Sie erlaubt aber auch eine klar interpretierbare Untersuchung der

polarisationsoptischen Wirkung von Mikro- und Nanostrukturen (Siehe Kapitel 8).

Eine Basis, die diese Zerlegung widerspiegelt, ist die Exponentialentwicklung der Jones-Matrix nach *Paulischen Spin-Matrizen* [218]:

$$\mathbf{J} = \exp \left(\sum_{j=0}^3 c_j \boldsymbol{\sigma}_j \right) \quad (4.26)$$

Durch die exponentielle Form der Entwicklung wird eine simultane (d.h. nicht-sequentielle) Wirksamkeit aller vier Matrix-Beiträge gewährleistet [217, 218]. In erster Näherung geht Gleichung 4.26 in eine lineare Entwicklung über:

$$\mathbf{J} = \sum_{j=0}^3 c_j \boldsymbol{\sigma}_j \quad (4.27)$$

$\boldsymbol{\sigma}_0$ ist die Einheitsmatrix und die Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma}_{1,2,3}$ sind gegeben durch:

$$\boldsymbol{\sigma}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

Die Pauli-Matrizen finden insbesondere in der Quantenmechanik und der Quantenoptik Anwendung. Ihre Bedeutung als Basiszustände in der Jones-Matrix-Entwicklung wird durch ihre Eigenwertzerlegung deutlich (siehe auch Abschnitt 4.2.1.3). Damit werden auch die Entwicklungskoeffizienten c_j in Gleichung 4.27 interpretierbar³:

$\boldsymbol{\sigma}_0$ ist die Einheitsmatrix und beschreibt das polarisationsoptisch neutrale Element. Die Eigenzustände sind daher nicht eindeutig festgelegt. Der Realteil $\text{Re}(c_0)$ gibt die Amplitudenschwächung und der Imaginärteil $\text{Im}(c_0)$ die Phasenretardierung an.

$\boldsymbol{\sigma}_1$ besitzt horizontal und vertikal linear polarisierte Eigenzustände entlang der x- und y-Achse. $\text{Re}(c_1)$ beschreibt die lineare Diattenuation und $\text{Im}(c_1)$ die lineare Retardierung entlang dieser Achsen⁴.

$\boldsymbol{\sigma}_2$ besitzt linear polarisierte Eigenzustände entlang der 1. und 2. Winkelhalbierenden. $\text{Re}(c_2)$ beschreibt die lineare Diattenuation und $\text{Im}(c_2)$ die lineare Retardierung unter 45° beziehungsweise 135° zur x-Achse.

$\boldsymbol{\sigma}_3$ hat als Eigenzustände rechts und links zirkular polarisierte Wellen. $\text{Re}(c_3)$ gibt die zirkulare Diattenuation und $\text{Im}(c_3)$ die zirkulare Retardierung an.

³In strenger Weise gilt diese Interpretation nur für schwach polarisierende Elemente, so dass die lineare Approximation 4.27 gültig ist. Ansonsten muss auf Gleichung 4.26 zurückgegriffen werden.

⁴Eine genaue Erläuterung der Begriffe Diattenuation und Retardance erfolgt in Abschnitt 4.2.1.3

4.2.1.2 Darstellung von Jones-Matrizen in verschiedenen Basissystemen

Wie die Diskussion der Jones-Matrix-Elemente im letzten Abschnitt deutlich machte, hängt die Darstellung der Jones-Matrix stark von der Wahl der zugrunde liegenden Koordinatensysteme ab. Eine Basistransformation $(x, y) \rightarrow (u, v)$ führt zu einer Änderung der Komponentendarstellung der Jones-Vektoren, die durch eine nicht-singuläre Matrix \mathbf{U} beschrieben wird: $\tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}}^{(uv)} = \mathbf{U}\tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}}$. Für den Ausgangs-Jones-Vektor gilt analog: $\tilde{\mathbf{E}}_{\text{out}}^{(u'v')} = \mathbf{U}'\tilde{\mathbf{E}}_{\text{out}}$. Durch Einsetzen der Matrix-Identität $\mathbf{U}'^{-1}\mathbf{U}' = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{U} = \mathbf{I}$ in Gleichung 4.23, folgt die Jones-Matrix $\mathbf{J}^{(uv)(u'v')}$ in den neuen Basen (u, v) und (u', v') :

$$\mathbf{J}^{(uv)(u'v')} = \mathbf{U}'\mathbf{J}\mathbf{U}^{-1} \quad (4.29)$$

Liegen in beiden Räumen die gleichen Koordinatensysteme und die gleiche Transformationsmatrix $\mathbf{U} = \mathbf{U}'$ vor, so hat Gleichung 4.29 die Form einer Ähnlichkeitstransformation. Die hier allgemein diskutierten Eigenschaften der Basistransformation spielen eine grundlegende Rolle bei der folgenden Diskussion der Jones-Matrix-Zerlegungen. Der grundlegende Gedanke hinter diesen Zerlegungen ist es, eine möglichst einfache Darstellungsform der Jones-Matrix zu finden, die sich als Schlüssel für eine tiefere Interpretationsmöglichkeit der durch die Jones-Matrix beschriebenen Wechselwirkungsprozesse herausstellt.

4.2.1.3 Eigenwert-Zerlegung von Jones-Matrizen

Eine sehr einfache und bedeutsame Darstellung der Jones-Matrix \mathbf{J} wird durch die so genannte *Eigenwert-Zerlegung* oder *Diagonalisierung* erreicht:

$$\begin{bmatrix} J_{xx} & J_{xy} \\ J_{yx} & J_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{x1} & E_{x2} \\ E_{y1} & E_{y2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{x1} & E_{x2} \\ E_{y1} & E_{y2} \end{bmatrix}^{-1} \quad (4.30)$$

beziehungsweise in kompakter Form

$$\mathbf{J} = \mathbf{U}\mathbf{J}^{(uv)}\mathbf{U}^{-1} \quad (4.31)$$

Die Diagonalelemente von $\mathbf{J}^{(uv)}$ werden Eigenwerte $\lambda_{1,2} = |\lambda_{1,2}|e^{i\delta_{1,2}}$ zu den Eigenvektoren $\tilde{\mathbf{e}}_{1,2}$ genannt, die die Spalten der Transformationsmatrix \mathbf{U} bilden. Als zentrale Eigenschaft werden die Eigenvektoren durch das optische System nicht geändert, sondern nur

mit den Eigenwerten skaliert:

$$\mathbf{J}\tilde{\mathbf{e}}_1 = \lambda_1\tilde{\mathbf{e}}_1 \quad (4.32a)$$

$$\mathbf{J}\tilde{\mathbf{e}}_2 = \lambda_2\tilde{\mathbf{e}}_2 \quad (4.32b)$$

Das System wirkt auf jeden der Eigenvektoren unabhängig voneinander. Sie bieten sich daher als Basisvektoren an. Diese unterschiedliche Wirkung des optischen Systems auf die Eigenvektoren wird durch den Kontrast der polarisationsabhängigen Schwächung (*Diatte-nuation*)

$$\mathcal{D} = \frac{||\lambda_1|^2 - |\lambda_2|^2|}{|\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2} \quad 0 \leq \mathcal{D} \leq 1 \quad (4.33)$$

und die relative Phasenverzögerung (*Retardance*)

$$\mathcal{R} = |\delta_1 - \delta_2| \quad 0 \leq \mathcal{R} \leq \pi \quad (4.34)$$

erfasst [216]. Im allgemeinen Fall sind die Eigenvektoren nicht orthogonal und man spricht von *inhomogenen* Jones-Matrizen. Bilden die Eigenvektoren hingegen ein Orthonormal-system, werden die Jones-Matrizen als *homogen* bezeichnet. Dieser wichtige Spezialfall der Eigenwert-Zerlegung entspricht der *Spektralen Zerlegung*, die auf *normale*⁵ Matrizen angewendet werden kann. In diesem Fall ist die Transformationsmatrix \mathbf{U} unitär.

4.2.1.4 Singulärwert-Zerlegung von Jones-Matrizen

Neben der Eigenwert-Zerlegung erlaubt auch die *Singulärwert-Zerlegung* (*SVD-Zerlegung*, *singular value decomposition*) einen tieferen Einblick in das polarisationsoptische Verhalten eines Systems. Zu dessen Charakterisierung ist insbesondere das polarisationsabhängige Transmissions- beziehungsweise Reflexionsverhalten wichtig. Dies wird durch den sogenannten *Gain* (auch *Transmittance*⁶) beschrieben, der das Intensitätsverhältnis des Ausgangszustandes zum Eingangszustand beschreibt:

$$\mathcal{G} = \frac{\mathcal{I}_{\text{out}}}{\mathcal{I}_{\text{in}}} = \frac{\text{tr}(\mathbf{J}\mathbf{E}_{\text{in}}\mathbf{J}^+)}{\text{tr}(\mathbf{E}_{\text{in}})} \quad (4.35)$$

⁵Für eine normale Matrix \mathbf{M} gilt: $\mathbf{M}\mathbf{M}^+ = \mathbf{M}^+\mathbf{M}$. Wichtige Spezialfälle sind hermitesche Matrizen mit $\mathbf{M} = \mathbf{M}^+$ und unitäre Matrizen $\mathbf{M}\mathbf{M}^+ = \mathbf{M}^+\mathbf{M} = \mathbf{I}$.

⁶Bei den meisten polarisationsoptischen Systemen wie Retardern, Polarisatoren etc. sind nur die Transmissionseigenschaften wichtig; daher auch der Name Transmittance. Das Konzept ist keineswegs auf die Transmissionseigenschaften eines polarisationsoptischen Systems beschränkt sondern auch für seine Reflexionseigenschaften anwendbar. Daher wird in dieser Arbeit die Bezeichnung Gain bevorzugt.

In dieser Form ist für die Jones-Matrix eines Systems nicht unmittelbar erkennbar, wie die polarisationssensitiven Transmissions- oder Reflexionseigenschaften aussehen, geschweige denn charakterisiert werden können. Hierzu dient die SVD-Zerlegung.

Das SVD-Theorem kann auf beliebige komplexwertige Jones-Matrizen angewendet werden und besagt [203, 219]: Jede komplexwertige Matrix $\in N \times N$ kann als Matrixprodukt einer unitären Matrix \mathbf{U} einer Diagonalmatrix \mathbf{D} und der Adjungierten einer ebenfalls unitären Matrix \mathbf{V} dargestellt werden, die jeweils $\in N \times N$ sind:

$$\mathbf{J} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^+ \quad (4.36)$$

Die Spalten $\tilde{\mathbf{u}}_j$ ($j = 1 \dots N$) von \mathbf{U} sind dabei die Eigenvektoren von $\mathbf{J}\mathbf{J}^+$ und werden *links-singuläre* Vektoren genannt, während sich \mathbf{V} aus den Eigenvektoren $\tilde{\mathbf{v}}_j$ von $\mathbf{J}^+\mathbf{J}$ zusammensetzt und *rechts-singuläre* Vektoren genannt werden. Sie bilden jeweils eine orthonormale Basis des Ausgangsraumes beziehungsweise Zielraumes. Die Singulärwerte $\sigma_j \geq 0$ sind die positiven Wurzeln der Eigenwerte von $\mathbf{J}^+\mathbf{J}$, die mit absteigender Größe die Hauptdiagonale von \mathbf{D} besetzen. Für eine hermitesche Matrix \mathbf{J} mit den Eigenwerten λ_j ist SVD-Zerlegung äquivalent zur spektralen Zerlegung mit $\sigma_j = |\lambda_j|$. Im Falle von Jones-Matrizen ist $N = 2$. Die SVD-Zerlegung findet in unterschiedlichsten Bereichen der Physik, Statistik und Bildverarbeitung Anwendung [220, 221]. Im Zusammenhang mit Jones-Matrizen gewinnt die SVD-Zerlegung insbesondere durch die speziellen Eigenschaften des durch sie beschriebenen Transferverhaltens von Polarisationszuständen und deren geometrische Interpretation an Bedeutung. Wie die komponentenweise Darstellung von Gleichung 4.36 nach einfacher Umformung zeigt

$$\mathbf{J}\tilde{\mathbf{v}}_j = \sigma_j\tilde{\mathbf{u}}_j \quad (j = 1 \dots N) \quad (4.37)$$

wird ein Eingangs-Jones-Vektor, der dem j -ten rechts-singulären Basisvektor $\tilde{\mathbf{u}}_j$ entspricht, in den j -ten links-singulären Basisvektor $\tilde{\mathbf{v}}_j$ mit einem positiven Verstärkungsfaktor $\sigma_j \geq 0$ überführt. Wie Barakat zeigen konnte, entsprechen die Singulärwerte dabei dem maximalen und minimalen Gain [222]:

$$\sigma_1 = \mathcal{G}_{\min} = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{J}^+\mathbf{J}) - \frac{1}{2} \sqrt{(\operatorname{tr}(\mathbf{J}^+\mathbf{J}))^2 - 4|\mathbf{J}^+\mathbf{J}|} \quad (4.38a)$$

$$\sigma_2 = \mathcal{G}_{\max} = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{J}^+\mathbf{J}) + \frac{1}{2} \sqrt{(\operatorname{tr}(\mathbf{J}^+\mathbf{J}))^2 - 4|\mathbf{J}^+\mathbf{J}|} \quad (4.38b)$$

Diese Interpretation wird sich bei der Untersuchung von Nanostrukturen in Kapitel 8 als sehr hilfreich erweisen.

4.2.1.5 Polare Zerlegung von Jones-Matrizen

Eine weitere Zerlegung, die eine klare Interpretation der polarisationsoptischen Wirkung eines Objektes ermöglicht, ist die *Polare Zerlegung*⁷ von Jones-Matrizen [220, 223, 224]. Jede Jones-Matrix kann hiernach in einen *Diattenuator* (*partiellen Polarisator*) und einen *Retarder* zerlegt werden:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{\mathcal{R}}\mathbf{J}_{\mathcal{D}} = \mathbf{J}_{\mathcal{D}'}\mathbf{J}_{\mathcal{R}} \quad (4.39)$$

Hierbei ist der Retarder $\mathbf{J}_{\mathcal{R}}$ eine unitäre Matrix und die partiellen Polarisatoren $\mathbf{J}_{\mathcal{D}'}$ beziehungsweise $\mathbf{J}_{\mathcal{D}}$ positiv definite hermitesche Jones-Matrizen [219]. Ist \mathbf{J} nicht singulär⁸, so ist $\mathbf{J}_{\mathcal{R}}$ durch

$$\mathbf{J}_{\mathcal{R}} = \mathbf{J}\mathbf{J}_{\mathcal{D}}^{-1} = \mathbf{J}_{\mathcal{D}'^{-1}}\mathbf{J} \quad (4.40)$$

eindeutig bestimmt. Mit den Beziehungen

$$\mathbf{J}_{\mathcal{D}}^2 = \mathbf{J}^+\mathbf{J}, \quad \mathbf{J}_{\mathcal{D}'^2} = \mathbf{J}\mathbf{J}^+ \quad (4.41)$$

wird deutlich, dass für homogene Jones-Matrizen auch der partielle Polarisator eindeutig definiert ist. Im Falle homogener Jones-Matrizen werden die Diattenuation (Gl. 4.34) und die Retardance (Gl. 4.34), die aus der Lösung des Eigenwertproblems hervorgehen, vollständig durch den partiellen Polarisator $\mathbf{J}_{\mathcal{D}}$ und den Retarder $\mathbf{J}_{\mathcal{R}}$ beschrieben. Es gilt:

$$\mathcal{D}(\mathbf{J}) = \mathcal{D}(\mathbf{J}_{\mathcal{D}}) = \mathcal{D}(\mathbf{J}_{\mathcal{D}'}) \quad (4.42a)$$

$$\mathcal{R}(\mathbf{J}) = \mathcal{R}(\mathbf{J}_{\mathcal{R}}) \quad (4.42b)$$

Bei inhomogenen Jones-Matrizen gilt dieser direkte Zusammenhang nicht mehr. Für die vollständige Charakterisierung muss zusätzlich ein Inhomogenitätsparameter eingeführt werden [224].

In der praktischen Umsetzung wird die polare Zerlegung üblicherweise durch eine SVD-

⁷Die Polare Zerlegung von Matrizen kann ganz analog zur Polardarstellung einer komplexen Zahl $z = re^{i\phi}$ betrachtet werden. Während r den Betrag von z beschreibt, bestimmt das komplexe Vorzeichen $e^{i\phi}$ die Position auf dem Einheitskreis, also die Phase von z . Beide Eigenschaften tauchen in der positiven Hermitizität und der Unitarität der korrespondierenden Matrizen wieder auf.

⁸Ist \mathbf{J} singulär, so beschreibt die Jones-Matrix einen reinen Polaristator mit $\mathcal{D} = 1$ [225]. In diesem Fall ist die Retardierung ohne Bedeutung.

Zerlegung berechnet:

$$\mathbf{J}_{\mathcal{D}'} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^+, \quad \mathbf{J}_{\mathcal{D}} = \mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{V}^+, \quad \mathbf{J}_{\mathcal{R}} = \mathbf{U}\mathbf{V}^+ \quad (4.43)$$

Die Definitionen der Matrizen wurden Gleichung 4.36 entnommen.

4.2.2 Müller-Matrix-Kalkül

Wie bereits im letzten Abschnitt deutlich wurde, können Depolarisationsprozesse nicht durch das Jones-Matrix-Kalkül beschrieben werden. Um auch Dekorrelationen mit in die Beschreibung polarisationsoptischer Transferprozesse einbeziehen zu können, bietet sich das Müller-Matrix-Kalkül an. Die Müller-Matrix \mathbf{M} beschreibt eine lineare Transformation eines Eingangs-Stokes-Vektors \mathbf{s}_{in} in einen Ausgangs-Stokes-Vektor \mathbf{s}_{out} [202]:

$$\mathbf{s}_{\text{out}} = \mathbf{M}\mathbf{s}_{\text{in}} \quad (4.44)$$

Die Müller-Matrix ist also eine 4×4 -Matrix mit rein reellen Elementen, wobei jedes Element m_{ij} die Kopplung zwischen den entsprechenden Elementen $\mathbf{s}_{\text{out}_i}$ und \mathbf{s}_{in_j} der Stokes-Vektoren beschreibt:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} m_{00} & m_{01} & m_{02} & m_{03} \\ m_{10} & m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{20} & m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{30} & m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

Das Müller-Matrix-Kalkül ist die allgemeinste Form, lineare Transferprozesse von Polarisationszuständen zu beschreiben. Da die durch \mathbf{M} transformierten Stokes-Vektoren reine Intensitätsgrößen beinhalten, ist die Müller-Matrix auch unmittelbar einer polarimetrischen Messung zugänglich. Anders als bei der Jones-Matrix sind jedoch die durch die Müller-Matrix repräsentierten polarisationsoptischen Eigenschaften nicht unmittelbar erkennbar. Dies hat zwei Gründe [211]:

- Zum einen ist der Stokes-Vektor in einem ungewöhnlichen Koordinatensystem definiert. In diesem beschreiben die einzelnen Elemente des Stokes-Vektors nicht orthogonale Polarisationskomponenten. Statt dessen ist das negative beziehungsweise positive Vorzeichen jeder einzelnen Komponente Ausdruck orthogonaler Polarisationszustände. Damit ist auch die Eigenwertzerlegung nicht unmittelbar physikalisch interpretierbar [226].

- Zum anderen macht die Einbindung von Depolarisationseffekten die Matrixeigenschaften erheblich komplizierter. Sie bewirkt insbesondere Asymmetrien in der Müller-Matrix durch den Bruch der Reziprozität [227].

Für die Analyse von Müller-Matrizen sind daher drei Eigenschaften von wesentlicher Bedeutung: die physikalische Relevanz, die Depolarisations- und die (In-)Homogenitätseigenschaften der Matrix. Diese werden in den folgenden Unterabschnitten genauer beschrieben. Nichtsdestoweniger lassen sich einzelnen Müller-Matrix-Elementen klare Bedeutungen zuordnen [211]. Dies trifft insbesondere für die erste Spalte und erste Zeile der Müller-Matrix zu. Für den Gain einer Struktur gilt (siehe auch Gleichung 4.35):

$$\mathcal{G}(\mathbf{M}\mathbf{s}_{\text{in}}) = \frac{\mathcal{I}_{\text{out}}}{\mathcal{I}_{\text{in}}} = \frac{s_{\text{out}0}}{s_{\text{in}0}} = \frac{m_{00}s_{\text{in}0} + m_{01}s_{\text{in}1} + m_{02}s_{\text{in}2} + m_{03}s_{\text{in}3}}{s_{\text{in}0}} \quad (4.46)$$

woraus sich das Müller-Matrix-Element m_{00} durch Mittelung über alle Eingangszustände ergibt:

$$\langle \mathcal{G}(\mathbf{M}\mathbf{s}_{\text{in}}) \rangle = \mathcal{G}(\mathbf{M}\mathbf{s}_{\text{in}_{\text{unpol}}}) = m_{00} \quad (4.47)$$

Das linke obere Element m_{00} der Müller-Matrix gibt also den unpolarisierten Intensitätstransfer der Struktur an. Mit dem maximalen und minimalen Gain

$$\mathcal{G}_{\text{max}} = m_{00} + \sqrt{m_{01}^2 + m_{02}^2 + m_{03}^2} \quad \mathcal{G}_{\text{min}} = m_{00} - \sqrt{m_{01}^2 + m_{02}^2 + m_{03}^2} \quad (4.48)$$

folgt nach [224] die Diattenuation als Kontrast dieser beiden Größen:

$$\mathcal{D}(\mathbf{M}) = \frac{\mathcal{G}_{\text{max}} - \mathcal{G}_{\text{min}}}{\mathcal{G}_{\text{max}} + \mathcal{G}_{\text{min}}} = \frac{\sqrt{m_{01}^2 + m_{02}^2 + m_{03}^2}}{m_{00}} \quad (4.49)$$

Aus Gleichung 4.49 folgt unmittelbar, dass die normierten Matrix-Elemente $\frac{m_{0j}}{m_{00}}$, $j = 1 \dots 3$ der ersten Zeile die Diattenuation für den jeweiligen Eingangspolarisationszustand wiedergeben.

Andererseits spiegelt die erste Spalte der Müller-Matrix die Wechselwirkung auf einen unpolarisierten Eingangszustand wider. Die normierten Elemente $\frac{m_{j0}}{m_{00}}$, $j = 1 \dots 3$ beschreiben daher unmittelbar das *Polarisationsvermögen* der Struktur für den jeweiligen Ausgangspolarisationszustand. Das Polarisationsvermögen ist in vollkommener Analogie zur Diattenuation zu sehen. Das integrale Polarisationsvermögen (*Polarizance*) ist:

$$\mathcal{P}ol(\mathbf{M}) = \frac{\sqrt{m_{10}^2 + m_{20}^2 + m_{30}^2}}{m_{00}} \quad (4.50)$$

Durch einen Analogieschluss zu Müller-Matrizen verschiedener polarisationsoptischer Komponenten mit definierten Eigenschaften (Retarder, Polarisatoren, etc. [211, 228]), lässt sich auch den übrigen Paaren von Müller-Matrix-Elementen

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_0 & \mathcal{D}_{xy} & \mathcal{D}_{diag} & \mathcal{D}_{circ} \\ \mathcal{P}ol_{xy} & \mathcal{A}_1 & \mathcal{R}_{circ} & -\mathcal{R}_{diag} \\ \mathcal{P}ol_{diag} & -\mathcal{R}_{circ} & \mathcal{A}_2 & \mathcal{R}_{xy} \\ \mathcal{P}ol_{circ} & \mathcal{R}_{diag} & -\mathcal{R}_{xy} & \mathcal{A}_3 \end{bmatrix} \quad (4.51)$$

die Repräsentation grundlegender Transfereigenschaften zuordnen. Die Diattenuation \mathcal{D} und das Polarisationsvermögen \mathcal{P} treten dabei als vollkommen äquivalente Größen auf:

- \mathcal{D}_{xy} Lineare Diattenuation entlang der x- und y-Achse ($0^\circ, 90^\circ$)
- $\mathcal{P}ol_{xy}$ Lineares Polarisationsvermögen entlang der x- und y-Achse
- \mathcal{D}_{diag} Lineare Diattenuation entlang der 1. und 2. Winkelhalbierenden ($45^\circ, 135^\circ$)
- $\mathcal{P}ol_{diag}$ Lineares Polarisationsvermögen entlang der 1. und 2. Winkelhalbierenden
- \mathcal{D}_{circ} Zirkulare Diattenuation
- $\mathcal{P}ol_{circ}$ Zirkulares Polarisationsvermögen
- \mathcal{R}_{xy} Lineare Retardierung entlang der x- und y-Achse ($0^\circ, 90^\circ$)
- \mathcal{R}_{diag} Lineare Retardierung entlang der 1. und 2. Winkelhalbierenden ($45^\circ, 135^\circ$)
- \mathcal{R}_{circ} Zirkulare Retardierung
- \mathcal{A}_{0-3} Insbesondere Absorption und Depolarisation.

Kleine Beträge der Elemente \mathcal{D}_* und \mathcal{R}_* sind linear zur entsprechenden Diattenuation oder Retardance.

Kehren wir zur Betrachtung der gesamten Müller-Matrix zurück, so weisen Abweichungen vom Symmetrieverhalten der Elemente in Matrix 4.51 auf Inhomogenitäten oder Depolarisation hin. Die Hauptdiagonalelemente \mathcal{A}_* treten als ergänzende Elemente zu den Nebendiagonalelementen bei der Beschreibung von Diattenuation und Retardance auf. Darüber hinaus beschreiben sie insbesondere Absorption und Depolarisationsprozesse. Sind die Nichtdiagonalelemente alle 0, so wird ein polarisationsneutraler Absorber durch $\mathcal{A}_{0,1,2,3} = a$ mit $0 \leq a < 1$ beschrieben, und für die neutrale Müller-Matrix gilt $\mathcal{A}_{0,1,2,3} = 1$. Die Depolarisationseigenschaften von Müller-Matrizen werden im nächsten Abschnitt genauer behandelt.

4.2.2.1 Polarisation und Depolarisation durch Müller-Matrizen

Ein wesentlicher Vorteil des Müller-Matrix-Kalküls besteht in der Beschreibung von Depolarisationsprozessen. Dieser Abschnitt soll die Frage klären, wie sich Polarisations- und Depolarisationsprozesse in der Struktur der Müller-Matrix manifestieren.

Müller-Jones-Matrizen

Betrachtet man zunächst nicht-depolarisierende Systeme, so können diese sowohl durch eine Jones- als auch durch eine Müller-Matrix beschrieben werden. Die entsprechende Müller-Matrix heißt dann *Müller-Jones-Matrix* \mathbf{M}_J . Die Schwierigkeit bei der Umrechnung zwischen beiden Matrix-Typen besteht darin, dass eine Müller-Matrix keine Information über die absolute Phase enthalten kann und die Jones-Matrix keine Depolarisation erfasst. Jede Phasen-reduzierte Jones-Matrix lässt sich jedoch in Müller-Matrix-Form darstellen. Für die Umrechnung sei auf [225, 229, 230] verwiesen. Umgekehrt kann eine Müller-Matrix in eine Phasen-reduzierte Jones-Matrix umgerechnet werden, wenn sich die 16 Freiheitsgrade der Müller-Matrix auf die 7 der Jones-Matrix reduzieren. Eine notwendige und hinreichende Bedingung hierfür wurde durch Anderson und Barakat formuliert [231]. Aus dem Satz der 9 notwendigen Randbedingungen lassen sich dann die Jones-Matrix-Elemente aus den Müller-Matrix-Elementen bestimmen [232].

Müller-Matrizen von Depolarisatoren

Depolarisationseigenschaften werden insbesondere bei der Betrachtung folgender Matrizen deutlich:

$$\mathbf{ID} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{PD} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{P} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{P} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{P} \end{bmatrix} \quad \mathbf{VD} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{P}_{xy} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{P}_{diag} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{P}_{circ} \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

Die Matrix \mathbf{ID} beschreibt einen idealen Depolarisator, da der Ausgangszustand unabhängig vom einfallenden Licht vollständig unpolarisiert ist. Beim partiellen Depolarisator \mathbf{PD} ändert sich die Polarisationsellipse eines Eingangszustands nicht, allerdings nimmt der Polarisationsgrad um \mathcal{P} ab. Im Falle von \mathbf{VD} ändern sich sowohl die Polarisationsellipse als auch der Polarisationsgrad. Eine allgemeine Charakterisierung des Depolarisationscharakters einer Müller-Matrix erfolgt in Gleichung 4.54.

Depolarisationsgehalt von Müller-Matrizen

Wie die bisherige Diskussion gezeigt hat, äußern sich Depolarisationseigenschaften sowohl als Asymmetrien in der Müller-Matrix als auch in einer Schwächung der Amplituden der Hauptdiagonalelemente. Die einzelnen Elemente der Matrix ergeben dabei ein differenziertes Bild der Dekorrelationsprozesse in Abhängigkeit vom Eingangs- und Ausgangspolarisationszustand. Um jedoch ein integrales Maß für die depolarisierende Wirkung eines Elements zu bekommen, ist es sinnvoll, die Abweichung von einem idealen Depolarisator zu betrachten. Diese wird quantitativ durch die euklidische Distanz (Frobenius-Norm) zwischen der normierten Müller-Matrix und dem idealen Depolarisator angegeben:

$$\left\| \frac{\mathbf{M}}{m_{00}} - \mathbf{ID} \right\| = \frac{\sqrt{\left(\sum_{ij} m_{ij}^2\right) - m_{00}^2}}{m_{00}} \quad (4.53)$$

Sie variiert zwischen 0 für $\mathbf{M} = \mathbf{ID}$ und $\sqrt{3}$ für ein nicht-depolarisierendes Element. Damit lässt sich die *Depolarisation* \mathcal{P}_D der Müller-Matrix sinnvoll definieren:

$$\mathcal{P}_D(\mathbf{M}) = 1 - \frac{\sqrt{\left(\sum_{ij} m_{ij}^2\right) - m_{00}^2}}{\sqrt{3}m_{00}} \quad (4.54)$$

\mathcal{P}_D gibt den gemittelten Depolarisationsgrad des vom System ausgehenden Lichts an. Ist $\mathcal{P}_D = 0$ so ist das Austrittslicht immer polarisiert, ist $\mathcal{P}_D = 1$ so ist es vollständig unpolarisiert – unabhängig vom Eingangspolarisationszustand (siehe auch [233, 234]).

4.2.2.2 Physikalisch realisierbare Müller-Matrizen

Nicht jede reelle 4×4 -Matrix repräsentiert eine physikalisch aussagekräftige Müller-Matrix. Während eine Reihe von notwendigen Bedingungen für die Existenz einer Müller-Matrix formuliert werden können, sind hinreichende Bedingungen zum heutigen Zeitpunkt nicht bekannt. Für ein passives System mit der Müller-Matrix \mathbf{M} muss gelten:

$$0 \leq \mathcal{G}_{\mathbf{M}} \leq 1 \quad (\text{overgain condition}) \quad (4.55a)$$

$$0 \leq \mathcal{P}_{\mathbf{M}} \leq 1 \quad (\text{overpolarization condition}) \quad (4.55b)$$

Für eine genaue Diskussion unterschiedlicher notwendiger Kriterien sei auf die Literatur [222, 225, 226, 235–241] verwiesen.

5 Grundlagen der physikalisch-optischen Bildsimulation

Die Grundprinzipien der optischen Abbildung sind sehr eng mit den Gesetzmäßigkeiten der Lichtausbreitung verknüpft. Will man eine ideale Abbildung durch ein optisches System erreichen, muss man zunächst verstehen, wie sich ein Lichtwellenfeld im Freiraum ausbreitet und wie diese Propagation durch die Grundelemente eines abbildenden Systems manipuliert wird. Dabei wird sich herausstellen, was unter einer idealen Abbildung zu verstehen ist.

Im ersten Teil dieses Kapitels werden daher nochmals genauer die Eigenschaften der Lichtausbreitung im Freiraum diskutiert. Das Lichtwellenfeld ist dabei durch das in Kapitel 3 gelöste Beugungsproblem gegeben. Es wird sich zeigen, dass die ursprünglich zur leichteren Berechnung der Beugungsintegrale eingeführten Näherungen auch für die Abbildungstheorie grundlegende Bedeutung haben. Die Fresnel-Näherung wird auf das Konzept der paraxialen Abbildung führen, wohingegen die Fraunhofer-Näherung in das Konzept der aplanatischen Abbildung mündet. Auf Basis dieser Diskussionen werden die Anforderungen an ein abbildendes optisches System sowie die Möglichkeiten und Grenzen der hieraus resultierenden Simulationsmethoden verdeutlicht.

Aufbauend auf den im ersten Teil und in Kapitel 3 diskutierten Methoden werden im zweiten Teil dieses Kapitels die Grundsätze der in dieser Arbeit verwendeten Simulationsmethoden systematisch diskutiert. Der historischen Entwicklung folgend wird die Abbesche Abbildungstheorie Startpunkt der Überlegungen sein. Das Abbesche Modell der optischen Bildentstehung im Mikroskop führt unmittelbar auf den Begriff der Pupille eines optischen Systems. Das Pupillenkonzept wird sich dabei als fundamentaler Ansatz der optischen Bildsimulation im hochauflösenden Anwendungsbereich herausstellen. Ziel dabei ist, eine Abbildungstheorie unter voller Berücksichtigung der Polarisation des Lichts für hohe numerische Aperturen zu entwickeln. Nichtsdestoweniger lassen sich in weiten Teilen die grundlegenden Zusammenhänge und Konzepte mit einem skalaren Lichtwellenfeld de-

monstrieren. Wo möglich, wird daher auf die Komplexität verzichtet, die eine vektorielle Beschreibung mit sich bringt. Der Übergang zu hochaperturigen Lichtfeldern führt aber zu neuartigen Effekten, die in der skalaren Theorie der paraxialen Näherung vernachlässigt werden können. Hierzu gehören radiometrische Effekte, die der Energieerhaltung bei der optischen Abbildung Rechnung tragen, sowie Vektoreffekte, die sich in polarisationsabhängigen Interferenzeffekten bei der optischen Bildentstehung äußern. Die Bedeutung der Polarisation in der hochaperturigen Abbildung und der Pupillenansatz der mikroskopischen Bildsimulation führen auf das Konzept der Jones-Matrix-Pupille, das insbesondere für die Simulation der später diskutierten Messverfahren von wesentlicher Bedeutung ist.

5.1 Eigenschaften der Freiraumpropagation

Sieht man von wenigen Spezialanwendungen ab, so besteht die Aufgabe abbildender optischer Systeme darin, die Feldverteilung eines Objektes in einer Ebene (der Objektebene) in eine zweite, hierzu planparallele Ebene (die Bildebene) abzubilden. Ausgangspunkt der Überlegungen ist daher das 1. Rayleigh-Sommerfeld-Integral in Gleichung 3.9, um zunächst das Transferverhalten freier Lichtpropagation zwischen zwei solchen Ebenen genauer zu analysieren. Betrachten wir die Feldverteilung u in großer Entfernung vom beugenden Objekt mit der Apertur \mathcal{A} , das sich in der Ebene $z' = 0$ befindet, so gilt mit $R \gg \lambda$:

$$u(x, y, z) = \frac{z}{i\lambda} \iint_{\mathcal{A}} u(x', y', 0) \frac{e^{ikR}}{R^2} dx' dy' \quad (5.1)$$

R bezeichnet den Abstand zwischen Punkt \vec{r} in der Bildebene und Punkt \vec{r}' in der Objektebene:

$$R = [z^2 + (x - x')^2 + (y - y')^2]^{\frac{1}{2}} \quad (5.2)$$

Die Wellenpropagation, die mit Gleichung 5.1 beschrieben wird, zeigt schon die wesentlichen Grundeigenschaften, die wir später auch der Abbildung durch ein optisches System abverlangen müssen:

Linearität: Das Feld im Bildraum setzt sich als lineares Superpositionsintegral aus der Feldstärkeverteilung im Objektraum zusammen. Im Falle eines punktförmigen Objektes entspricht die resultierende Huygenssche Elementarwelle der Impulsantwort der Freiraumpropagation. Die Impulsantwort charakterisiert das optische System vollständig.

Isoplanasie: In der Impulsantwort der Huygensschen Elementarwellen treten nur Differenzen der Ortskoordinaten der Objekt- und Bildebene auf. Damit wird das Integral invariant bezüglich einer beliebigen Verschiebung in der Ebene. Das Integral 5.1 hat die Form einer Faltung. Die Fourier-Transformierte der Impulsantwort wird als *Transferfunktion* bezeichnet. Genauso wie die Impulsantwort im Ortsraum, charakterisiert die Transferfunktion im Fourier-Raum ein optisches System vollständig. Durch das Faltungstheorem wird die optische Abbildung durch eine einfache Multiplikation mit der Transferfunktion beschrieben.

Die Form des Rayleigh-Sommerfeld-Integrals macht dessen Berechnung etwas unhandlich. Es wurden daher zahlreiche Verfahren entwickelt, um die auftretenden Integrationen auszuführen. Hier sei auf die einschlägige Literatur verwiesen [6, 18, 19, 63]. Für die Abbildungstheorie sind insbesondere die Fresnel- und die Fraunhofer-Näherung von Interesse. Bei der folgenden Diskussion dieser Näherungen geht es im Kern nicht um deren eigentliche Berechnung. Vielmehr steht die anschauliche Bedeutung und der praktische Nutzen dieser formalen Näherungen für die Abbildungstheorie im Mittelpunkt.

5.1.1 Fresnel-Näherung

Wir beginnen unsere Diskussion mit schwach beugenden Objekten, die groß gegenüber der Wellenlänge sind. Gesucht ist die Feldverteilung in großer Entfernung vom Objekt. Darüber hinaus sei die Objektausdehnung beschränkt ($z^3 \gg \frac{\pi}{4\lambda} [(x - x')^2 + (y - y')^2]_{max}^2$). Unter solchen Umständen sind die auftretenden Beugungswinkel klein. Man spricht daher neben der *Fresnel-Näherung* auch von *paraxialer Näherung*. Eine Taylor-Entwicklung von R im Exponenten des 1. Rayleigh-Sommerfeld-Integrals bis zum quadratischen Term

$$R = z \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{x - x'}{z} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{y - y'}{z} \right)^2 \right] + \dots \quad (5.3)$$

führt nach elementaren Umformungen auf das **Fresnelsche Beugungsintegral**:

$$u(x, y, z) e^{-i \frac{k}{2z} (x^2 + y^2)} = \frac{e^{ikz}}{i\lambda z} \iint_{-\infty}^{+\infty} \left\{ u(x', y', 0) e^{i \frac{k}{2z} (x'^2 + y'^2)} \right\} e^{-i \frac{k}{z} (xx' + yy')} dx' dy' \quad (5.4)$$

Bei der Betrachtung von Gleichung 5.4 fällt auf, dass die Felder in Objekt- und Bildebene um parabolische Phasenfaktoren gegensätzlicher Krümmung ergänzt sind. Diese stammen

ursprünglich von der paraxialen Näherung der sphärischen Elementarwellen, gewinnen aber bei einer abbildungstheoretischen Diskussion von Gleichung 5.4 eine vollkommen neue Bedeutung. Betrachtet man die Feldverteilungen u nicht wie bisher auf *ebenen* Referenzflächen, sondern auf *parabolisch gekrümmten* Flächen, die durch den jeweiligen Phasenfaktor definiert sind, so ergibt sich für die Propagation zwischen diesen neuen Bezugsflächen ein einfacher Zusammenhang in Form einer Fourier-Transformation:

$$u(\xi, \eta) = \frac{e^{ikz}}{i\lambda z} \iint_{-\infty}^{+\infty} u(\xi', \eta') e^{-i\frac{k}{z}(\xi\xi' + \eta\eta')} d\xi' d\eta' \quad (5.5)$$

Der Vorfaktor vor dem Integral beschreibt die globale Dämpfung und Phasenretardierung des Lichtwellenfeldes bei der Propagation von einer Bezugsfläche zur anderen. Die ursprünglich planen Objekt- und Bildflächen liegen nun tangential an den neu eingeführten Referenzparaboloiden mit dem gemeinsamen Durchstoßpunkt der optischen Achse als Berührungspunkt. Eine ähnliche Diskussion der Propagationseigenschaften zwischen konzentrisch sphärischen Flächen wurde von Bonnet vorgestellt [242, 243] und führt unter Verwendung paraxialer Näherungen auf das gleiche Ergebnis. Die Einführung gekrümmter Objekt- und Bildfelder mag zunächst als mathematische Finesse erscheinen, sie wird aber im Zusammenhang mit der Fraunhofer-Näherung konzeptionelle Bedeutung für die Auslegung optischer Systeme bekommen. Zum Abschluss kehren wir nochmals zur Propagation zwischen einem ebenen Objekt- und Bildfeld in Fresnelscher Näherung zurück. Durch einfache Umformungen lässt sich Gleichung 5.4 in ein Faltungsintegral mit dem parabolischen Propagationskernel

$$h(x, y) = \frac{e^{ikz}}{i\lambda z} \exp \left\{ \frac{ik}{2z} (x^2 + y^2) \right\} \quad (5.6)$$

überführen. Die Isoplanasie der Wellenpropagation bleibt also in Fresnelscher Näherung erhalten.

5.1.2 Fraunhofer-Näherung

Betrachtet man wieder die Propagation zwischen planen Ebenen und geht von der noch schärferen Forderung

$$z \gg \frac{k [x'^2 + y'^2]_{max}}{2} \quad (5.7)$$

aus, so kann auch der quadratische Phasenfaktor im Integral vernachlässigt werden und man erhält das **Fraunhofersche Beugungsintegral**:

$$u(x, y, z)e^{-i\frac{k}{2z}(x^2+y^2)} = \frac{e^{ikz}}{i\lambda z} \iint_{-\infty}^{+\infty} u(x', y', 0)e^{-i\frac{k}{z}(xx'+yy')} dx' dy' \quad (5.8)$$

Untersucht man die Beugung einer in der Brennweite f konvergierenden Kugelwelle an einer kreisrunden Apertur (mit Radius a) in Fraunhoferscher Näherung, so ist Gleichung 5.7 äquivalent mit der Forderung einer sehr großen Fresnel-Zahl:

$$\mathcal{N} = \frac{a^2}{\lambda f} \gg 1 \quad (5.9)$$

Dieser Bedingung wird uns später in der Abbildungstheorie wieder begegnen.

Beschränken wir uns im Bildfeld auf den Bereich der optischen Achse, so können wir auch den quadratischen Phasenterm in der Bildebene vernachlässigen.

$$u(x, y, z) = \frac{e^{ikz}}{i\lambda z} \iint_{-\infty}^{+\infty} u(x', y', 0)e^{-i\frac{k}{z}(xx'+yy')} dx' dy' \quad (5.10)$$

Mit Gleichung 5.10 wird die Wellenpropagation zwischen zwei *Ebenen* durch eine einfache Fourier-Transformation beschrieben. Der Preis für diese Vereinfachung ist jedoch hoch. Wir befinden uns einerseits im Näherungsbereich strenger Paraxialität, die mit sehr kleinen Öffnungswinkeln (siehe Gleichung 5.7) korreliert, andererseits müssen wir auch das Bildfeld in strenger Auslegung auf die optische Achse reduzieren, um den parabolischen Phasenterm auf der linken Seite in Gleichung 5.8 vernachlässigen zu können. Die hieraus resultierende Fourier-Transformation ist nicht mehr invariant bezüglich räumlichen Verschiebungen in der Ebene. Die Isoplanasie geht verloren. Da die Isoplanasie aber eine Grundeigenschaft der Freiraumpropagation darstellt, ist dieser Verlust einzig und allein auf die Eigenschaften der Fraunhofer-Näherung zurückzuführen.

Im Folgenden sei die Feldverteilung nicht in einer Ebene mit dem Abstand z vom Objekt sondern auf einer *Sphäre* mit dem Radius $\hat{R} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ um den Ursprung des Koordinatensystems von Interesse. Die ursprüngliche Bildebene liegt also tangential an der neu eingeführten Referenzsphäre. In diesem Fall wird das Feld in einfachster Weise durch

die Einführung von Richtungs-Kosinussen beschrieben:

$$\alpha = \frac{x}{\hat{R}}, \quad \beta = \frac{y}{\hat{R}} \quad \text{und} \quad \gamma = \frac{z}{\hat{R}} \quad (5.11)$$

Gehen wir wieder von Gleichung 5.1 aus und substituieren den Abstand R zwischen den jeweiligen Punkten in Objekt- und Bildebene durch

$$R = \hat{R}(1 + \epsilon), \quad \epsilon = \frac{R - \hat{R}}{\hat{R}} \quad (5.12)$$

so erhält man für die Feldverteilung auf der Sphäre nach einer Binominalentwicklung von R im Exponenten:

$$u(\alpha, \beta, \hat{R}) = \gamma \frac{e^{ik\hat{R}}}{i\lambda\hat{R}} \iint_{-\infty}^{+\infty} \hat{u}(x', y', 0, \alpha, \beta) e^{-ik(\alpha x' + \beta y')} dx' dy' \quad (5.13)$$

Die eigentliche Feldverteilung in der Objektebene $u(x', y', 0)$ wird dabei durch zusätzliche Apodisations- und Aberrationsterme ergänzt:

$$\hat{u}(x', y', 0, \alpha, \beta) = \frac{1}{(1 + \epsilon)^2} e^{2\pi i \hat{W}(x', y', \alpha, \beta)} u(x', y', 0) \quad (5.14)$$

Mit der Einführung der Apodisations- und Aberrationsterme wird der Propagationsprozess zwischen der Objektebene und der Beobachtungssphäre in Form eines Fourier-Integrals beschrieben, das im Fernfeld ($R \gg \lambda$) allgemeine Gültigkeit hat. Die Aberrationen lassen sich dabei im Rahmen der klassischen Aberrationstheorie optischer Systeme als Seidel-Aberrationen darstellen [244]. Sie sind allerdings unmittelbarer Ausdruck der unzureichenden Beschreibung des Beugungsprozesses durch eine Fourier-Transformation. Dabei hängen sie von den geometrischen Parametern wie Durchmesser der beugenden Öffnung, Beobachtungsentfernung und Beobachtungswinkel ab. Für eine detaillierte Diskussion dieser Aberrationen sei auf Harvey und Mahajan verwiesen [245–248]. Für praktische Anwendungen stellen sich insbesondere der beugungsinduzierte Defokus (Seidel-Koeffizient \hat{W}_{020}) und der Astigmatismus (Seidel-Koeffizient \hat{W}_{222}) als limitierende Faktoren heraus. Beide können vernachlässigt werden, wenn für die Ausdehnung des Objektfeldes gilt:

$$[x'^2 + y'^2]_{max} \ll 2\lambda\hat{R} \quad (5.15)$$

Dies entspricht aber dem Fraunhoferschen Approximationsbereich von Gleichung 5.7.

Schränken wir uns gemäß Gleichung 5.15 auf hinreichend kleine Felder ein, so können die beugungsinduzierten Wellenfrontaberrationen \hat{W} in Gleichung 5.14 vernachlässigt werden. Wegen $\epsilon \rightarrow 0$ verschwindet in diesem Fall auch die Apodisation des Feldes. Damit gilt:

$$\hat{u}(x', y', 0, \alpha, \beta) \rightarrow u(x', y', 0) \quad (5.16)$$

und Gleichung 5.13 geht in Gleichung 5.10 über. Der Anteil $e^{ik\hat{R}}/\hat{R}$ im Vorfaktor des Doppelintegrals aus Gleichung 5.13 beschreibt die globale Dämpfung und Phasenverzögerung, die das Lichtwellenfeld bei der Propagation von der Objektebene bis hin zur Beobachtungssphäre erfährt. Er ist auf der gesamten Bildsphäre konstant und wird daher im Folgenden vernachlässigt. Unter Nutzung des Zusammenhangs zwischen den Richtungs-Kosinussen und den jeweiligen Komponenten des Wellenvektors

$$k_x = k\alpha, \quad k_y = k\beta \quad \text{und} \quad k_z = k\gamma \quad (5.17)$$

wird die Struktur von Gleichung 5.13 als Planwellenzerlegung deutlich:

$$u(k_x, k_y) = \frac{k_z}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int u(x', y', 0) e^{-i(k_x x' + k_y y')} dx' dy' \quad (5.18)$$

Gleichung 5.18 stellt zwischen der Feldverteilung in der Objektebene und der Feldverteilung auf der Referenzsphäre einen einfachen Zusammenhang in Form einer Fourier-Transformation her. Allerdings sind die dabei verwendeten Koordinatensysteme vollkommen unterschiedlich. Während das Objekt im Ortsraum dargestellt wird, erfolgt die Darstellung des Bildes im Impuls- beziehungsweise Winkelraum. Beide Räume sind kanonisch konjugiert zueinander.

Kehren wir zur Frage der Isoplanasie zurück und betrachten eine differentielle Verschiebung des Objektes um ein Wegstück $[\delta x', \delta y']$. Für die zugehörige Feldstärke auf der Bildsphäre folgt aus Gleichung 5.18:

$$u_{[\delta x', \delta y']}(k_x, k_y) = \mathcal{F} \{u(x' + \delta x', y' + \delta y', 0)\} = u(k_x, k_y, z) e^{i(k_x \delta x' + k_y \delta y')} \quad (5.19)$$

Wie Gleichung 5.19 zeigt, wird die Eigenschaft der Isoplanasie auf der Beobachtungssphäre durch das Shifttheorem der Fourier-Theorie ersetzt. Der aus der Verschiebung des Objektes resultierende Phasenkeil bewirkt eine Verkippung der neuen Beobachtungssphäre (siehe Abb. 5.1).

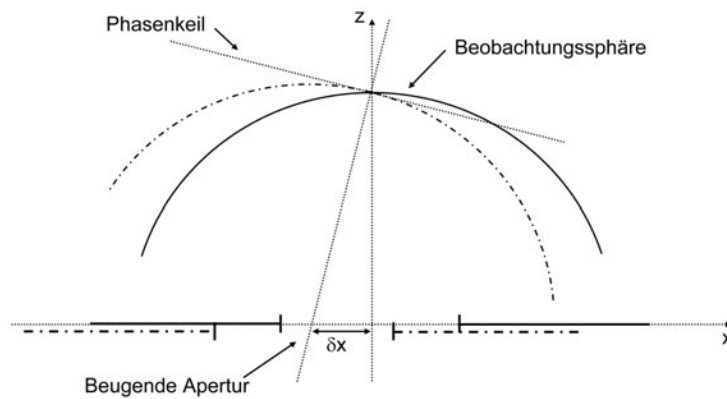


Abb. 5.1: Beobachtung des gebeugten Lichtwellenfeldes auf einer Sphäre in Fraunhofer-Näherung. Eine Verschiebung des Objekts hat eine Verkipfung der Beobachtungssphäre zur Folge.

5.1.3 Die Debye-Näherung

Im letzten Abschnitt wurde mit Gleichung 5.18 das Abbildungsverhalten zwischen der Feldverteilung in einer gegebenen Objektebene und der gesuchten Feldverteilung auf einer Beobachtungssphäre hergestellt. Nun wird das Problem umgekehrt und die Abbildung von einer Referenzsphäre in eine Bildebene betrachtet. Startpunkt ist Gleichung 5.18. Nach Gleichung 3.2 erhält man durch eine Fourier-Transformation nach den kanonisch konjugierten Variablen k_x und k_y für die Feldverteilung in einer Ebene z' :

$$u(x', y', z') = \frac{i}{2\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{u(k_x, k_y)}{k_z} e^{i(k_x x' + k_y y' + k_z z')} dk_x dk_y \quad (5.20)$$

Gleichung 5.20 unterliegt in ihrem Gültigkeitsbereich exakt den gleichen Einschränkungen wie die ursprüngliche Gleichung 5.18. Insbesondere erhält man im Sinne von Gleichung 5.15 nur für ein beschränktes Bildfeld eine annähernd aberrationsfreie Abbildung. Des weiteren ist Gleichung 5.20 nur im Fernfeld ($\hat{R} \gg \lambda$) gültig. Auch wenn sich das Doppelintegral formal über das gesamte Spektrum im Ortsfrequenzraum erstreckt, sind die Beiträge evaneszenter Felder praktisch auf 0 abgefallen und nur propagierende Wellen tragen zur Bildentstehung bei. Der Integrationsbereich entspricht also dem kompletten Halbraum, der sich aus der Bedingung

$$k_x^2 + k_y^2 < (nk_0)^2 \quad (5.21)$$

ergibt. Wird durch das abbildende System der Raumwinkel Ω , aus dem Planwellen zur Bildentstehung beitragen können, weiter eingeschränkt und folgt für die zugehörigen Raum-

frequenzen

$$k_x^2 + k_y^2 < NA^2 \quad (5.22)$$

so gilt:

$$u(x', y', z') = \frac{i}{2\pi} \iint_{k_x^2 + k_y^2 < NA^2} \frac{u(k_x, k_y)}{k_z} e^{i(k_x x' + k_y y' + k_z z')} dk_x dk_y \quad (5.23)$$

Gleichung 5.18 und Gleichung 5.23 spielen eine grundlegende Rolle bei der Simulation des mikroskopischen Abbildungsprozesses. In ihrer bisherigen Darstellung sind sie auf skalare Felder beschränkt. Für die Einbindung rigoroser Beugung müssen sie allerdings noch auf ihre vektorielle Form erweitert werden, um Polarisationsaspekte der mikroskopischen Abbildung berücksichtigen zu können.

5.1.4 Polarisationsaspekte der Freiraumpropagation

Die bisherige Diskussion der Freiraumpropagation wurde im Rahmen der skalaren Beschreibung durchgeführt. Mit dieser Vereinfachung sind keinerlei Einschränkungen verknüpft. Durch die Entkopplung der Vektorkomponenten der elektrischen und magnetischen Felder in homogenen Medien sind alle hergeleiteten Zusammenhänge auch komponentenweise anwendbar. Dies gilt in besonderer Weise für die Planwellen-Darstellung der letzten Abschnitte und die dabei diskutierten Näherungen. So führt die vektorielle Erweiterung der Debye-Formulierung aus Gleichung 5.23 auf das bekannte *Debye-Wolf-Integral* [249]:

$$\vec{E}(x', y', z') = \frac{i}{2\pi} \iint_{\Omega} \frac{\vec{E}(k_x, k_y)}{k_z} e^{i(k_x x' + k_y y' + k_z z')} dk_x dk_y \quad (5.24)$$

Wolf leitete das Integral im Gegensatz zu der hier vorgestellten Herangehensweise in vollkommener Analogie zum Debyeschen Vorgehen [27] über das Prinzip der stationären Phase ab. Gleichung 5.24 ist also eine approximative Lösung. Sie ist in ihrer Form jedoch äquivalent zu Luneburgs Integralgleichung, die eine exakte Lösung der Maxwell-Gleichung für ein idealisiertes Randwertproblem darstellt: Im Unendlichen stimmen die Randwerte der Planwellenzerlegung mit denen der geometrisch-optischen Lösung überein [250].

Eine separierte, komponentenweise Darstellung in einem globalen xyz-Koordinatensystem ist in vielen Fällen unpraktikabel. Die Maxwell-Gleichungen erfordern für die einzelnen Planwellen die Transversalität des elektromagnetischen Feldes wie in Abschnitt 2.3 diskutiert wurde. Insbesondere bei der Diskussion der Abbildungseigenschaften zwischen sphä-

risch gekrümmten Flächen und Ebenen in Abschnitt 5.1.2 und 5.1.3 kann man sich diese Tatsache zur einfacheren Darstellung der elektromagnetischen Felder zu Nutze machen. So werden in rigorosen Beugungstheorien die transversalen elektrischen und magnetischen Felder der einzelnen Beugungsordnungen, die $u(k_x, k_y)$ in Gleichung 5.18 entsprechen, durch einen 2-komponentigen Vektor $\tilde{\mathbf{E}}(k_x, k_y)$ im jeweiligen sp-Koordinatensystem der Beugungsordnung beschrieben (siehe auch Kapitel 3). Der elektrische Feldstärkevektor ist dabei transversal zur Ausbreitungsrichtung und liegt damit immer tangential zur Beobachtungssphäre. Umgekehrt kann die Darstellung des elektrischen Feldes auf der Integrations-sphäre des Debye-Wolf-Integrals ebenfalls sehr einfach erfolgen, wenn der Feldstärkevektor immer in der Tangentialebene der Integrations-sphäre in kanonischen Koordinaten (k_x, k_y) angegeben wird. Auch hier ist aufgrund der Transversalität ein 2-komponentiger Vektor $\tilde{\mathbf{E}}(k_x, k_y)$ ausreichend. Für die Berechnung von Gleichung 5.24 ist jedoch eine Transformation des 2-komponentigen Vektors $\tilde{\mathbf{E}}$ in einen dreidimensionalen Vektor $\vec{E}(x, y, z)$ im Bildraum zu bewerkstelligen:

$$\tilde{\mathbf{E}}(k_x, k_y) = \begin{bmatrix} \tilde{E}_x \\ \tilde{E}_y \end{bmatrix} \rightarrow \vec{E}(x, y, z) = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

Diese Transformation wird im Folgenden hergeleitet.

Im Sinne der bisher ausgeführten Näherungen ist das Bildfeld des Debye-Wolf-Integrals hinreichend klein zu wählen. Die durch das endliche Bildfeld auftretenden windschiefen Strahlen können daher in sehr guter Näherung als Meridionalstrahlen approximiert werden. Unter dieser Voraussetzung bleibt der Winkel, den der Polarisationsvektor mit der Meridionalebene bildet, konstant und hängt nur vom jeweiligen Ort (k_x, k_y) der Integrations-sphäre ab [251–254]. Die Berechnung der Transformationsmatrix $\mathcal{T}(k_x, k_y)$ ergibt sich dann in 3 Schritten, die in Abbildung 5.2 visualisiert sind:

1. Darstellung des Polarisationszustandes im lokalen sp-Koordinatensystem der Meridionalebene. Hierbei liegt \vec{p} entlang der Schnittlinie (roter Pfeil) von kanonisch konjugierter Ebene und Meridionalebene. \vec{s} steht senkrecht dazu (grüner Pfeil).
2. Kippung des Polarisationszustandes um den Einfallswinkel θ in der Meridionalebene. \vec{s} bleibt unverändert. \vec{p} wird geneigt. \vec{s} und \vec{p} liegen nun tangential an der Integrations-sphäre.
3. Transformation in das globale Koordinatensystem der Raumes. Dies geschieht durch

eine Rückdrehung aus dem Meridionalsystem in das xyz-Koordinatensystem des Raumes. Die kanonisch konjugierten Variablen k_x, k_y, k_z und x, y, z sind dabei paarweise parallel zueinander.

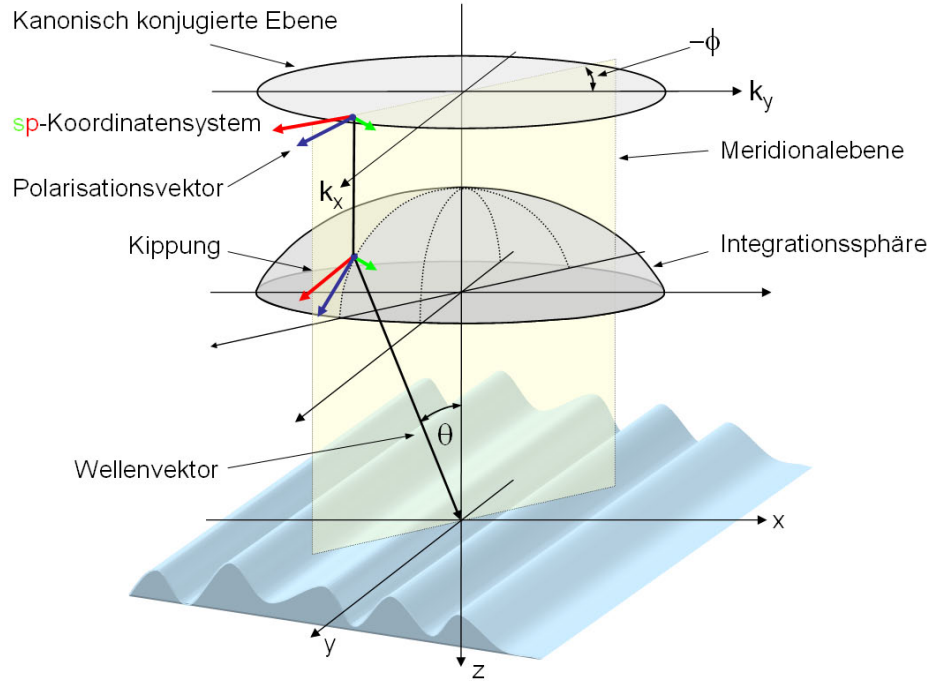


Abb. 5.2: Transformationsverhalten eines Polarisationsvektors beim Übergang von kanonisch konjugierten 2D-Koordinaten der Integrations-sphäre in 3D-Raumkoordinaten.

Diese Transformationen lassen sich durch eine Folge von Drehmatrizen beschreiben [255]:

$$\vec{E} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\text{Drehung aus der Meridionalebene}} \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}}_{\text{Kippung des Polarisationsvektors}} \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\text{Drehung in die Meridionalebene}} \begin{pmatrix} \tilde{E}_x \\ \tilde{E}_y \\ 0 \end{pmatrix}$$

Hierbei hängen die Drehwinkel mit den Pupillenkoordinaten wie folgt zusammen:

$$\sin \theta = \frac{1}{n} \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad \sin \phi = \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}, \quad \cos \phi = \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \quad (5.26)$$

Wobei n der Brechungsindex des Mediums ist, in dem sich die Planwelle mit dem Wellenvektor \vec{k} ausbreitet. Betrachtet man nur die ersten zwei Spalten der resultierenden Matrix, die das Pupillenfild $\tilde{\mathbf{E}} = [\tilde{E}_x(k_x, k_y), \tilde{E}_y(k_x, k_y)]^T$ mit dem Feld \vec{E} im Fokalraum verbindet,

so erhält man für die Polarisations-Transformationsmatrix folgende Gestalt:

$$\mathcal{T}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{k_x^2}{k(k + \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2})} & -\frac{k_x k_y}{k(k + \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2})} \\ -\frac{k_x k_y}{k(k + \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2})} & 1 - \frac{k_x^2}{k(k + \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2})} \\ \frac{k_x}{k} & \frac{k_y}{k} \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

Mit Gleichung 5.27 wird allgemein der Bezug zwischen den Beugungstheorien aus Abschnitt 3.4 und 3.5 und Methoden der hochaperturigen Bildberechnung hergestellt. Setzt man für den Vektor $\tilde{\mathbf{E}} = [\cos(\psi + \phi), \sin(\psi + \phi)]^T$, so ergibt sich zum Beispiel in der Winkelarstellung unmittelbar das einfallende Feld der RCWA aus Gleichung 3.23. Auch für die gebeugten Ordnungen des Lichts, die zur Bildentstehung beitragen, kann die Transformationsmatrix \mathcal{T} angewendet werden. Hierzu muss aber noch genauer die Bedeutung der abstrakt eingeführten Integrationsosphäre für die Modellierung der optischen Abbildung geklärt werden. Wir kommen hierauf in Abschnitt 5.3 zurück.

5.2 Die perfekte Abbildung

Vor der praktischen Umsetzung der mikroskopischen Bildsimulation in Abschnitt 5.3 und 5.4 sollen in diesem Abschnitt die wesentliche Merkmale eines perfekten abbildenden Systems vorangestellt werden. Dabei werden sich wesentliche Eigenschaften und auch Limitierungen des Abbildungsprozesses herausstellen, die auch in den später verwendeten Simulationsmodellen von zentraler Bedeutung sind. Wir gehen dabei auch von einem polarisationsoptisch idealen System aus. Das bedeutet, der Polarisationszustand wird durch das abbildende System nur dahingehend modifiziert, dass die Transversalität des elektromagnetischen Feldes auch für hohe Konvergenz- oder Divergenzwinkel erhalten bleibt. Die damit zusammenhängenden Vektoreffekte wurden in Abschnitt 5.1.4 diskutiert und spielen für die folgenden Betrachtungen keine grundlegende Rolle. Zur Vereinfachung der Darstellung beschränken wir uns daher wieder auf skalare Felder.

Die ersten Untersuchungen zur perfekten Abbildung wurden im Rahmen der geometrischen Optik von Maxwell [256] durchgeführt und von einer Reihe von Autoren aufgegriffen [257]. Carathéodory [258] kategorisierte in allgemeiner Form für heterogene anisotrope Medien die Abbildungseigenschaften eines so genannten *absoluten Instrumentes*. Ein solches bildet jeden Punkt in einem vorgegebenen dreidimensionalen Objektraum scharf auf einen jeweiligen Punkt im Bildraum ab. Danach ist die Abbildung durch ein absolutes System eine

Kollineation, Inversion oder eine Kombination aus beiden. Diese Transformationen bilden das Rückgrat der geometrisch-optischen Abbildungstheorie [259]. Um eine perfekte Abbildung zu erreichen, muss neben einer scharfen Abbildung die geometrische Ähnlichkeit zwischen beliebigen Kurvenstücken im Objektraum und den korrespondierenden Bildkurven gegeben sein. Diese Forderung führt nach dem *Maxwellschen Theorem für absolute Instrumente* unmittelbar auf eine feste Vergrößerung, die durch das Brechungsindexverhältnis der einbettenden Medien gegeben ist.

Die klassischen Theoreme zur perfekten Abbildung sollen nun von einem alternativen Blickwinkel betrachtet werden, der sich unmittelbar in die bisherige Diskussion der Freiraumpropagation eines Lichtwellenfeldes einbettet. In der Tat werden weite Teile des optischen Abbildungsprozesses durch eine freie Ausbreitung des Lichts bestimmt. Dies gilt insbesondere für die Propagation vom Objekt bis zur Eintrittsöffnung des optischen Systems sowie von dessen Austrittsöffnung zur Bildebene.

Grundlage unserer Betrachtungen ist ein zunächst unbestimmtes abbildendes System, das den Objektraum mit den Koordinaten $[x, y, z]$ in den Bildraum mit hierzu paarweise parallelen Koordinaten $[x', y', z']$ abbildet (Abb 5.3). Für eine beliebige Lichtverteilung $u(x, y, 0)$

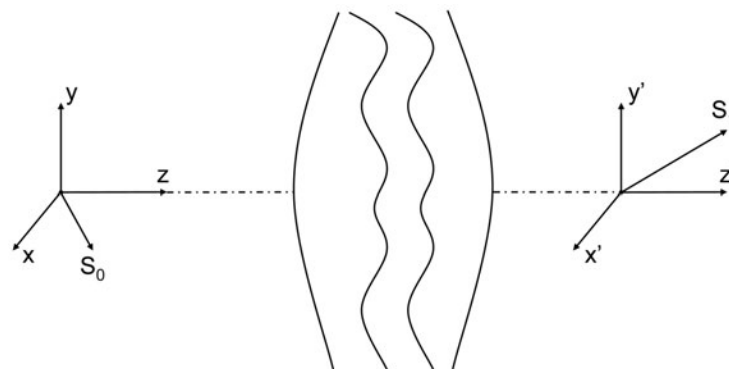


Abb. 5.3: Die perfekte Abbildung

in der Ebene $z = 0$ erzeuge das abbildende System ein Bild dieser Lichtverteilung in der Ebene $z' = 0$. Idealerweise sollte die Bildverteilung eine Kopie der ursprünglichen, beliebig komplexen Feldverteilung des Objektes sein, wobei ein geometrischer Skalierungsfaktor M_β und ein Amplitudenfaktor C zur Energieerhaltung noch frei gehalten werden [260]:

$$u'(x', y', 0) = C u\left(\frac{x'}{M_\beta}, \frac{y'}{M_\beta}, 0\right) \quad (5.28)$$

Durch Darstellung der Felder als Planwellenzerlegung nach Gleichung 3.2 und 3.6 folgt mit

den dort eingeführten Bezeichnungen:

$$U'_{2D}(\vec{k}'_t, 0) = M_\beta^2 C U_{2D}(M_\beta \vec{k}'_t, 0) \quad (5.29)$$

Bei der idealen Abbildung zwischen zwei Ebenen wird also jede vom Objekt ausgehende Planwelle durch das abbildende System in eine wiederum plane Welle im Bildraum transformiert, wobei zwischen den transversalen Komponenten der Wellenvektoren, d.h. den Richtungs-Kosinussen, ein linearer Zusammenhang besteht:

$$\vec{k}'_t = \frac{\vec{k}_t}{M_\beta} \quad (5.30)$$

Mit dem Polarwinkel θ zur z-Achse und dem Azimutwinkel ϕ zur x-Achse folgt:

$$k_x = nk_0 \sin(\theta) \cos(\phi) \quad k_y = nk_0 \sin(\theta) \sin(\phi) \quad (5.31)$$

Vollkommen analoge Beziehungen gelten auch für den Bildraum:

$$k'_x = n'k_0 \sin(\theta') \cos(\phi') \quad k'_y = n'k_0 \sin(\theta') \sin(\phi') \quad (5.32)$$

Gehen wir von einem um die gemeinsame z- und z'-Achse rotationssymmetrischen System aus, so folgt mit Gleichung 5.30

$$\frac{n \sin(\theta)}{n' \sin(\theta')} = M_\beta \quad (5.33)$$

Gleichung 5.33 ist als *Abbesche Sinusbedingung* bekannt.

Die grundlegende Bedeutung der Abbeschen Sinusbedingung für die Ähnlichkeitstreue Abbildung im Sinne von Gleichung 5.28 wird bei der Betrachtung eines kosinusförmigen Phasengitters der Periode Λ deutlich. Dies erzeugt ein Beugungsspektrum mit zwei diskreten Beugungswinkeln $\theta_{1/2}$ gleicher Beugungsamplitude¹. Für die Beugungswinkel im Objekt-raum gilt:

$$n \sin(\theta_{1/2}) = \pm \frac{2\pi}{\Lambda} \quad (5.34)$$

Im Sinne einer perfekten Abbildung muss im Bild wieder eine kosinusförmige Modulation mit der Periode

$$\Lambda' = M_\beta \Lambda \quad (5.35)$$

entstehen. Diese setzt sich aber aus zwei Planwellen mit gleicher Amplitude und den

¹Von rigorosen Effekten der Objektbeugung wird in dieser Diskussion abgesehen.

Beugungswinkeln

$$n' \sin(\theta'_{1/2}) = \pm \frac{2\pi}{\Lambda'} \quad (5.36)$$

zusammen. Die Quotienten von Gleichung 5.34 und 5.36 führen unter Nutzung von Gleichung 5.35 unmittelbar auf die Sinusbedingung, wobei die Vergrößerung für eine ideale Abbildung des Phasengitters noch eine Funktion der Periode Λ und damit des Beugungswinkels $\theta_{1/2}$ sein kann:

$$\frac{n \sin(\theta_{1/2})}{n' \sin(\theta'_{1/2})} = M_\beta(\theta_{1/2}) \quad (5.37)$$

Betrachten wir nun aber eine beliebige Feldverteilung und zerlegen sie in ein Planwellenspektrum, wird unmittelbar klar, dass eine fehlerfreie Abbildung eines beliebigen Objektes nur dann möglich ist, wenn der Vergrößerungsfaktor für die einzelnen Winkelbereiche konstant ist:

$$M_\beta = M_\beta(\theta) = \text{const} \quad (5.38)$$

Das Transferverhalten in Gleichung 5.38 wird sich später (in Abschnitt 5.3.3.1) als zentrale Designforderung für ein optisches Abbildungssystem mit hohem Öffnungswinkel, d.h. hoher numerischer Apertur, herausstellen und in den Begriff der aplanatischen Abbildung münden.

Bildet ein optisches System zwei Ebenen wie oben beschrieben ideal ab, stellt sich die Frage, ob es auch weitere Objektebenen perfekt abbilden kann. Die Antwort gibt das 1. Rayleigh-Sommerfeld-Integral in Form von Gleichung 3.2. Während im Objektraum die Propagation in z-Richtung durch den dispersiven Term im Exponenten

$$\varphi = z \sqrt{n^2 k_0^2 - k_x^2 - k_y^2} \quad (5.39)$$

beschrieben wird, folgt für den Bildraum:

$$\varphi' = z' \sqrt{n'^2 k_0^2 - k_x'^2 - k_y'^2} = z' \sqrt{n'^2 k_0^2 - \left(\frac{k_x}{M_\beta}\right)^2 - \left(\frac{k_y}{M_\beta}\right)^2} \quad (5.40)$$

Für eine ideale Abbildung zwischen zwei Ebenen in z und z' müssen nach Gleichung 5.29 die Fourier-Transformierten abgesehen von der Skalierung und einen konstanten Vorfaktor gleich sein. Mit anderen Worten, die Differenz von φ und φ' muss unabhängig von den

transversalen Raumfrequenzen sein:

$$\Delta\varphi(k_x, k_y) = z' \sqrt{n'^2 k_0^2 - \left(\frac{k_x}{M_\beta}\right)^2 - \left(\frac{k_y}{M_\beta}\right)^2} - z \sqrt{n^2 k_0^2 - k_x^2 - k_y^2} = \text{const} \quad (5.41)$$

Dies ist allerdings nur möglich, wenn

$$z = z' \quad \text{und} \quad M_\beta = \pm \frac{n}{n'} \quad (5.42)$$

gilt. Eine ideale Abbildung eines Volumens ist also nur für ein afokales System möglich, wobei die Vergrößerung durch das Brechungsindexverhältnis der umgebenden Medien in Objekt- und Bildraum gegeben ist².

Kehren wir am Schluss dieses Abschnitts zur geometrisch-optischen Abbildungstheorie zurück. Sowohl die *Sinusbedingung*, die die scharfe Abbildung eines kleinen Flächenstücks um den Gaußschen Fokuspunkt gewährleistet, als auch die *Herschel-Bedingung*, die für die scharfe Abbildung eines kleinen Segments entlang der optische Achse um den Fokuspunkt erfüllt sein muss, folgen in der geometrisch-optischen Theorie aus der *Punkt-Charakteristik* des optischen Systems [261]. Wegen der verschiedenen Abhängigkeit vom Öffnungswinkel können aber beide Bedingungen im Allgemeinen nicht gleichzeitig erfüllt sein. Eine Ausnahme besteht in dem schon vorher diskutierten Fall, bei dem sowohl die longitudinale als auch die laterale Vergrößerung dem Brechungsindexverhältnis der einbettenden Medien in Objekt- und Bildraum $M_\beta = \pm \frac{n}{n'}$ entspricht.

5.3 Die praktische Umsetzung der mikroskopischen Bildsimulation

Im den vorherigen Abschnitten wurden die Eigenschaften eines Abbildungsprozesses auf der Grundlage allgemeiner Betrachtungen zur Wellenausbreitung diskutiert. Bevor wir in Abschnitt 5.4 zu dieser Betrachtungsweise zurückkehren, um eine elektromagnetische Theorie der physikalisch optischen Abbildung zu formulieren, sollen zunächst grundlegende Aspekte und Modelle diskutiert werden, die in der praktischen Umsetzung der mikroskopischen Bildsimulation eine zentrale Rolle spielen. Hierfür ist zunächst die Brücke zwischen

²Wie eine Taylor-Entwicklung zeigt, ist die Bedingung $\Delta\varphi(k_x, k_y) = \text{const}$ für kleine Raumfrequenzen auch dann erfüllt, wenn $z' = \frac{n'}{n} M_\beta^2 z$ gilt. Dies entspricht genau der axialen Vergrößerung in der paraxialen Abbildungstheorie.

beugungstheoretischen Ansätzen der mikroskopischen Bildsimulation und den gängigen geometrisch-optischen Designverfahren für optische Systeme zu schlagen. Daran anschließend wird das Pupillenkonzept für die Beschreibung optischer Systeme diskutiert, das die Basis für die elektromagnetische Beugungstheorie der optischen Abbildung in Abschnitt 5.4 darstellt.

5.3.1 Der Übergang vom Raytracing zur Beugungstheorie

Bei der täglichen Arbeit eines Optik-Designers ist sowohl die Konzeption und Auslegung optischer Systeme hinsichtlich ihres Einsatzgebietes als auch deren Toleranzierung und Optimierung ohne Raytracing-Methoden nicht denkbar. Dies trifft für die Auslegung eines Fotoobjektives, bei dem Beugungserscheinungen eine untergeordnete Rolle spielen, genauso zu, wie für ein Mikroskopobjektiv oder ein lithographisches Projektionssystem, bei denen die Leistungsfähigkeit explizit durch die Wellennatur des Lichts limitiert wird. Raytracing-Methoden beruhen auf den Prinzipien der geometrischen Optik. Die damit verbundenen Unzulänglichkeiten für die Beschreibung eines Abbildungsprozesses werden schon bei der einfachen Betrachtung hoch fokussierter Felder offenbar. Im Rahmen der geometrisch-optischen Theorie führt die perfekte Abbildung eines Punktobjekts zu einer Singularität im Fokus des Bildraumes, da sich hier unendlich viele Strahlen schneiden. Die damit verbundene divergierende Energieverteilung ist als *optische Katastrophe* bekannt und tritt auch bei Kaustiken aberrationsbehafteter Abbildungen auf [262]. Die geometrisch-optische Theorie bricht also genau dort zusammen, wo das Zentrum des Interesses liegt: in der Fokalregion einer optischen Abbildung. Andererseits ist seit den grundlegenden Arbeiten von Airy [14] bekannt, dass das Punktbild eines Sterns aufgrund der Begrenzung der Objektwelle durch die Apertur eines Teleskops verwaschen wird. Das Feld in der Fokalregion einer auflösungsbegrenzten Abbildung wird also maßgeblich durch Beugungserscheinungen am optischen System selbst bestimmt [15, 16]. Darüber hinaus lassen sich zahlreiche Erscheinungen im Bildentstehungsprozess ohne eine Berücksichtigung der rigorosen Beugungstheorie gar nicht erfassen – insbesondere die im Mittelpunkt dieser Arbeit stehenden Polarisierungseffekte. Der Schluss liegt nahe, dass für die hochgenaue Simulation von Abbildungsprozessen eine beugungstheoretische Behandlung des Gesamtsystems – vom beugenden Objekt über das optische System bis hin zur Bildebene – mit den in Kapitel 3 beschriebenen Methoden unumgänglich ist.

In der Tat lassen sich Beugungsprobleme an kaskadierten Aperturen mit approximativen

Verfahren der Randbeugungswellentheorie behandeln [263–265]. Die Untersuchungen sind aber auf vereinfachte, nicht-abbildende Systeme mit wenigen Aperturen beschränkt. Ein hochwertiges Mikroskop oder gar ein Lithographieobjektiv enthält jedoch mitunter über 20 Linsen. Daher wird schnell deutlich, dass deren rein beugungstheoretische Behandlung sehr ineffizient und gar eine Optimierung auf dieser Basis vollkommen unpraktikabel ist. Darüber hinaus steht der zu erwartende Genauigkeitsgewinn in keinem Verhältnis zum damit verbundenen Aufwand.

Will man den hochauflösenden Abbildungsprozess eines realen optischen Systems in seiner Gesamtheit simulieren, so treffen offensichtlich zwei gänzlich verschiedene Vorgehensweisen aufeinander. Einerseits ist das Raytracing für das Design, die Konzeption und die Optimierung optischer Systeme unverzichtbar, andererseits wird die Feldverteilung in der Fokalregion maßgeblich durch Beugungseffekte bestimmt. Die Frage ist, wie und wo genau der Übergang zwischen beiden Techniken stattfindet.

Die Antwort führt auf den Begriff der Pupille eines optischen Systems. Unter bestimmten Voraussetzungen lassen sich *alle Beugungerscheinungen*, die in einem abbildenden System auftreten, *einem Ort* zuschreiben: *der Pupille*. Sie wird damit zur Schnittstelle zwischen den beiden fundamental verschiedenen Methoden des Raytracing einerseits und der rigorosen Beugungstheorie andererseits. Durch deren Verknüpfung wird erst die Einbindung rigoroser Wechselwirkungseffekte in den mikroskopischen Simulationsprozess möglich.

5.3.2 Das Pupillenkonzept der optischen Abbildung

Im vorigen Abschnitt wurde bereits auf die Wichtigkeit der Pupille für die mikroskopische Bildsimulation hingewiesen. Die Definition der Pupille hat ihre Wurzeln in der geometrisch-optischen Theorie. Unter der *Pupille* (auch *Aperturblende*) versteht man diejenige körperliche Blende in einem optischen System, die den Öffnungswinkel 2α des von einem axialen Objektpunkt ausgehenden, abbildenden Strahlenbündels begrenzt [266–268]³. Wie sich zeigen wird, ist für die Bildsimulation nicht die physikalische Blende selbst von Bedeutung, sondern vielmehr ihre objekt- bzw. bildseitigen Bilder. Sie heißen *Eintrittspupille* beziehungsweise *Austrittspupille*. In Abbildung 5.4 sind die Pupillenlagen für ein einfaches optisches System illustriert. Wie an diesem Beispiel deutlich wird, ist die Lage der Pupillen

³Für Punkte, die nicht auf der optischen Achse liegen, wirken gegebenenfalls unterschiedliche Blenden strahlbegrenzend. Abschnitt 5.5 wird zeigen, dass dies für große Fresnel-Zahlen das Pupillenkonzept nicht in Frage stellt.

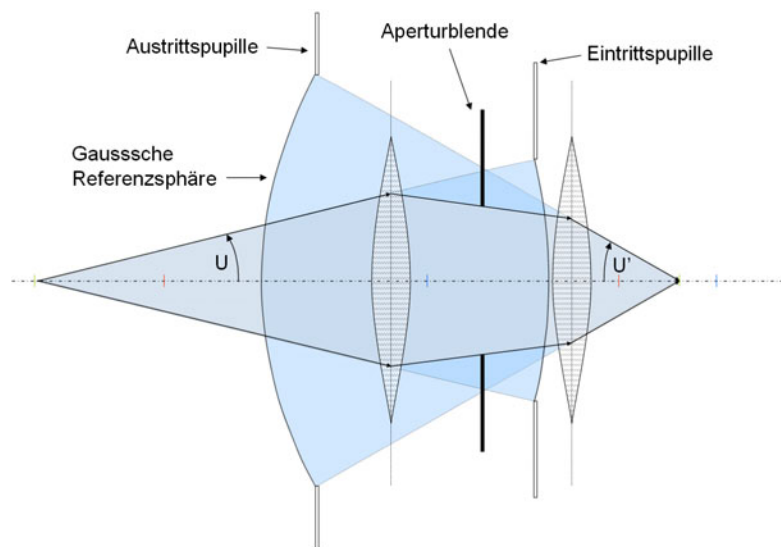


Abb. 5.4: Illustration der Pupillenlage für ein optisches System.

stark von den Parametern des Systems abhängig und auch in ihrer Reihenfolge nicht festgelegt. Vielmehr liegt in diesem Fall die Austrittspupille räumlich vor der Eintrittspupille und sogar vor dem gesamten abbildenden System. Um die Bedeutung der Eintritts- und Austrittspupille zu verstehen, gehen wir zunächst von einem aberrationsfreien, beugungsbegrenzten optischen System aus. Eine von einem Punktobjekt ausgehende, divergente sphärische Welle wird in diesem Fall durch das System in eine konvergierende sphärische Welle umgewandelt, die sich im Bildraum auf den geometrisch-optischen Bildpunkt fokussiert. Betrachtet man dieses Lichtwellenfeld vom Bildpunkt aus, so scheint eine ideal sphärische Welle vom Ort der Austrittspupille des optischen Systems zu kommen. Dies gilt ungeachtet dessen, wie viele optische Elemente – seien es Linsen oder Blenden – im realen Strahlengang zwischen dem Bildpunkt und der Ebene der Austrittspupille vorliegen. Vom Bildpunkt aus gesehen wird also die einlaufende sphärische Welle einzig und allein durch die Berandung der Austrittspupille begrenzt. Sie ist deshalb vom Bildraum aus als Ursache für die auftretenden Beugungseffekte zu sehen. Dies ist die Grundlage für die Rayleighsche Abbildungstheorie [15]. Die Abbesche Abbildungstheorie [16, 17] basiert dagegen auf einer vollkommen analogen Diskussion für die Eintrittspupille: Eine Punktlichtquelle erzeugt eine ideale sphärische Wellenfront, deren Ausdehnung durch die Berandung der Eintrittspupille begrenzt ist. Die Beugung wird in diesem Fall durch die Eintrittspupille verursacht.

Eintritts- und Austrittspupille sind aber Bild ein und derselben strahlbegrenzenden Blende und damit auch im Sinne der geometrischen Optik konjugiert zueinander. Welcher Pupille

konkret die Beugungseigenschaft des Abbildungsprozesses zugeschrieben wird – sei es der realen physikalischen Blende oder deren Bildern, ist daher vollkommen gleichgültig. Die verschiedenen Sichtweisen sind vollkommen gleichwertig.

Damit ist aber auch die Grundlage für das Pupillen-Modell eines beliebigen optischen Systems – vom Einlinser bis hin zu einem aufwendigen Objektiv – gegeben [18]. Die gesamte Funktionalität eines optischen Systems wird durch die Eintritts- und Austrittspupille charakterisiert, wobei der Übergang zwischen beiden Pupillen geometrisch-optisch beschrieben werden kann. Die Wirkungsweise und das Zusammenspiel einzelner Systemkomponenten wird dabei im Rahmen klassischer Design-Strategien optimiert⁴. Diese Details bleiben im Rahmen des Pupillen-Modells aber vollkommen verborgen und äußern sich lediglich in (später auch polarisationsabhängigen) Aberrations- oder Apodisationseigenschaften der Pupille.

Zum Schluss dieses Abschnitts sei nochmals deutlich auf die Voraussetzung des Pupillen-Modells hingewiesen, die bei dessen Herleitung implizit gemacht wurden:

1. Die Abbildung zwischen Eintritts- und Austrittspupille erfolgt nach geometrisch-optischen Grundsätzen. Beugungseffekte im System können vernachlässigt werden, wenn sie nicht explizit zur Strahlformung eingesetzt werden.
2. Auf dem *realen* Weg eines Strahlenbündels zwischen Objektpunkt und Eintrittspupille beziehungsweise Austrittspupille und Bildpunkt müssen Beugungseffekte vernachlässigt werden können.

Beide Forderungen haben unmittelbar zur Folge, dass die geometrischen Abmessungen aller an der Abbildung beteiligten Elemente groß gegenüber der Wellenlänge sein müssen. Darüber hinaus müssen kaskadierte Beugungseffekte an einer Serie von Pupillen vernachlässigbar sein. Unter welcher Voraussetzung diese keineswegs triviale Annahme gemacht werden kann, wird in Abschnitt 5.5 beschrieben.

⁴Die Einbindung diffraktiv-optischer Elemente mit hohen Linienpaardichten erfordert in zunehmendem Maße die Einbindung rigoroser Simulationsmodelle auch in das Optik-Design. Dies erhöht natürlich die Komplexität des Design- und Optimierungsprozesses, stellt aber nicht den Pupillenansatz an sich in Frage.

5.3.3 Die Abbesche Abbildungstheorie

Die bisherige Diskussion des Pupillenkonzepts beschränkt sich auf die Abbildung eines einzigen Objektpunktes, der sich auf der optischen Achse befindet. Die Anforderungen an das abbildende System reduzieren sich dabei auf die Bedingung, eine vom Objekt ausgehende Kugelwelle nach der Propagation durch das System als konzentrisch zulaufende Kugelwelle im Gaußschen Fokalfunkt zu vereinigen. Alle weiteren Abbildungseigenschaften des optischen Systems müssen jedoch nicht genauer spezifiziert werden. Wie sich im Laufe dieses Abschnitts herausstellen wird, muss jedoch ein optisches System zusätzliche grundlegende Eigenschaften erfüllen, um auch für *hohe Öffnungswinkel* ein *flächenhaftes* Stück der Objektebene fehlerfrei in die Bildebene abzubilden. Diese fundamentalen Anforderungen wurden zum ersten Mal von Abbe systematisch untersucht und führten auf die *Abbesche Theorie der mikroskopischen Bildentstehung* [16, 17, 269]. Die hierbei eingeführten Modelle und Designforderungen bewirken eine grundlegende Erweiterung des Pupillenkonzepts, die für das Grundverständnis der mikroskopischen Abbildung einerseits und für die hieraus resultierenden Simulationswerkzeuge andererseits von zentraler Bedeutung ist. Die Diskussion greift dabei im Kern auf Gesetzmäßigkeiten zurück, die schon im Zusammenhang mit der perfekten Abbildung in Abschnitt 5.2 erörtert wurden.

5.3.3.1 Die aplanatische Abbildung

Die Forderung, eine divergierende Welle eines axialen Punktobjektes durch das abbildende System in eine auf einen Bildpunkt konvergierende Kugelwelle zu überführen, entspricht der Elimination der sphärischen Aberration. Wohl zu den bedeutendsten Beiträgen Abbes gehört die Erkenntnis, dass diese Forderung für die Abbildung zwischen diesen beiden so genannten aplanatischen Punkten keineswegs hinreichend ist, um auch eine fehlerfreie Abbildung eines (wenn auch infinitesimal kleinen) Flächenstücks um diese Punkte herum zu erreichen [270]. Für eine *aplanatische Abbildung* muss neben der Aufhebung der sphärischen Aberration vielmehr auch jeder Winkelbereich des Aperturkegels, der zur Abbildung beiträgt, eine übereinstimmende Vergrößerung zeigen. Wie in Kapitel 5.2 dargestellt wurde, führt dies unmittelbar auf die *Sinusbedingung* in Gleichung 5.33, die als erstes von Abbe als grundlegende Beziehung für die hochaperturige Abbildung formuliert und auf Basis geometrisch-optischer Überlegungen begründet wurde (siehe auch Abbildung 5.5). Ist die Sinusbedingung nicht erfüllt, tritt schon in unmittelbarer Nähe zum sphärisch korrigierten Achspunkt Koma auf. Die Sinusbedingung geht bei korrigierter sphärischer Längsaberra-

tion als Spezialfall aus der allgemeineren Isoplanasiebedingung der optischen Abbildung hervor [271].

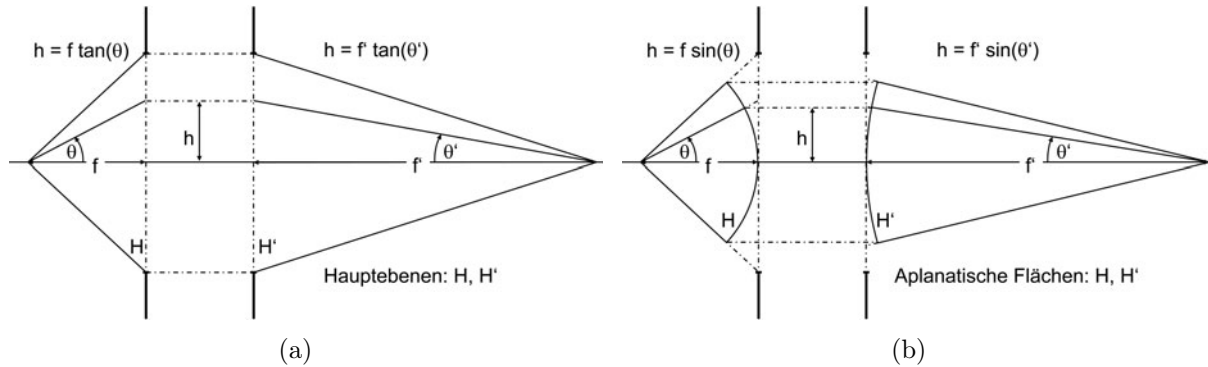


Abb. 5.5: Sinusbedingung in der geometrischen Optik. Der Abbildungsmaßstab wird durch die Strahlhöhe h festgelegt. Damit der Abbildungsmaßstab für beliebige Öffnungswinkel gleich ist, werden die Strahlhöhen nicht mehr wie in der paraxialen Optik in den Hauptebenen H und H' (a) sondern auf kugelförmigen Referenzflächen (b) bestimmt. Die äquivalenten Orte der Brechung (*equivalent refracting locus*) liegen für die hochaperturige Abbildung also auf sphärischen Flächen (aplanatische Flächen) mit den Brennpunkten als Mittelpunkte. Die Hauptebenen der paraxialen Abbildung liegen tangential an den neu eingeführten Referenzsphären [259, 272].

5.3.3.2 Die Fourier-Theorie der mikroskopischen Abbildung

Das eigentliche Fundament der Abbeschen Abbildungstheorie ist folgende Beobachtung, die Abbe als wesentlichen Aspekt des mikroskopischen Abbildungsprozesses erkannte: Befindet sich das Objekt in der Fokusebene des Objektivs, so entsteht in der rückwärtigen Brennebene des Objektivs das Fourier-Spektrum des vom Objekt ausgehenden Lichtwellenfeldes. Abbes Modell der mikroskopischen Bildentstehung ist damit untrennbar mit den Grundsätzen der Fourier-Optik verknüpft. Die einzelnen Planwellen, die im Sinne der Fourier-Zerlegung vom Objekt ausgehen, werden als (beugungsbegrenzte) Punkte in der hinteren Brennebene sichtbar. Auch wenn die Fourier-Transformationeigenschaft von Linsensystemen in der paraxialen Optik strikt im Rahmen der Fresnelschen Näherung hergeleitet werden kann [18], ist sie keineswegs auf diesen Näherungsbereich beschränkt. Vielmehr ist sie nach Abbe auch für hochaperturige optische Systeme anwendbar, solange diese nur gewissen Designforderungen genügen. Der Abbeschen Sinusbedingung kommt hier die zentrale Bedeutung zu. Ist ein optisches System für beliebige Öffnungswinkel aplanatisch korrigiert, so folgt aus der Abbeschen Sinusbedingung unmittelbar, dass die laterale Position $[x_P, y_P]$ einer Beugungsordnung in der Brennebene linear vom Sinus des Beugungswinkels abhängt.

Beschränken wir uns hierbei wieder auf ein rotationssymmetrisches System, so genügt es, die x-Komponente zu betrachten:

$$x_P = f n \sin \theta \sim k_x \quad (5.43)$$

Damit ist aber die geforderte Fourier-Transformationseigenschaft in der hinteren Brennebene für beliebig hohe Beugungswinkel erfüllt.

Die Fourier-Transformationseigenschaft bildet die Basis für das Abbesche Modell der mikroskopischen Abbildung. Diese lässt sich als zweistufiger Prozess verstehen und setzt sich aus zwei konsekutiven Fourier-Transformationen zusammen. Das Schema dieses Konzeptes ist in Abbildung 5.6 in Form eines $4f$ -Aufbaus dargestellt⁵. Durch das Objektiv (1. Linse)

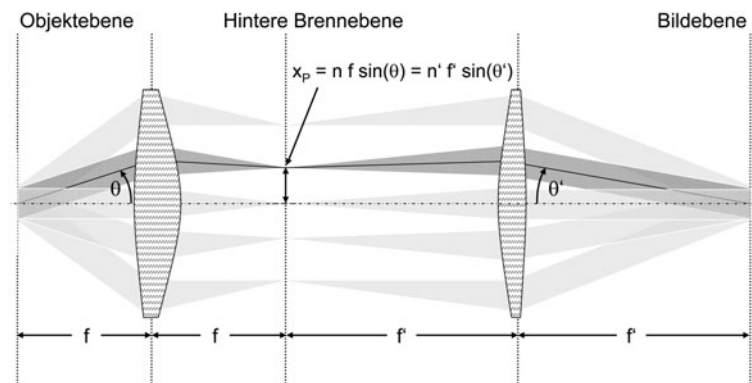


Abb. 5.6: Abbesches Modell der optischen Abbildung als $4f$ -Aufbau.

wird zunächst in der hinteren Brennebene das Fourier-Spektrum des vom Objekt ausgehenden Lichtwellenfeldes erzeugt. Das Objekt befindet sich dabei in der vorderen Fokusebene des Objektivs (erstes $2f$ -System). Das entstehende Beugungsspektrum liegt gleichzeitig in der vorderen Brennebene der zweiten Linse (Tubuslinse) und wirkt als Quelle für sekundäre Wellenzüge, die in der hinteren Brennebene der zweiten Linse durch Interferenz das Bild des Objektes erzeugen (zweites $2f$ -System). Im Abbeschen Modell der mikroskopischen Abbildung wird also eine Planwellenerlegung im Objektraum in eine Planwellensynthese im Bildraum überführt. Dies entspricht aber vollkommen unserer Diskussion zur perfekten Abbildung in Abschnitt 5.2. Es ist daher nicht verwunderlich, dass die dort hergeleiteten Beziehungen vollkommen mit dem Abbeschen Abbildungsmodell äquivalent sind. Der in Abbildung 5.6 skizzierte $4f$ -Aufbau bildet die grundlegende Anordnung der

⁵Praktisch alle modernen Mikroskopobjektive besitzen heutzutage eine Tubuslänge ∞ . Die Korrektion auf Unendlich stört zwar etwas die Anschauung, stellt aber in keiner Weise das Modell an sich in Frage.

Fourier-optischen Bildverarbeitung und erfasst auch alle Kernprozesse der mikroskopischen Abbildung. Im Vergleich zu realen optischen Systemen stellt Abbildung 5.6 eine starke Vereinfachung dar. Um insbesondere für hohe numerische Aperturen der Aplanasiebedingung für ein hinreichend großes Bildfeld nahe zu kommen, sind in realen Systemen eine Vielzahl von Linsen nötig. In einem modernen Mikroskop oder einem Lithographieobjektiv können es deutlich über 20 Linsen sein [273].

5.3.3.3 Das Pupillenmodell der aplanatischen Abbildung

Wie im Abschnitt 5.3.2 deutlich wurde, wird das optische System im Pupillenmodell der optischen Abbildung vollständig durch das Transferverhalten zwischen Eintritts- und Austrittspupille charakterisiert. Beide Pupillen sind optisch konjugierte Ebenen, deren wechselseitige Abbildung vollständig im Rahmen der geometrischen Optik beschrieben werden kann. Insbesondere Beugungseffekte können bei dieser Abbildung vernachlässigt werden. Liegt ein aplanatisches Abbildungssystem vor, werden die grundlegenden Abbildungseigenschaften durch die Sinusbedingung vorgegeben. Die Eintritts- und die Austrittspupille liegen in diesem Fall auf Sphären mit dem Objektpunkt beziehungsweise dem Gaußschen Fokalfunkt als Mittelpunkten. Die Ausbreitung des Lichtwellenfeldes vom Objekt zur Eintrittspupille und von der Austrittspupille in den Bildraum kann durch eine Planwellenzerlegung beschrieben werden, wie sie in Abschnitt 5.1.3 und 5.1.2 behandelt wurde. Die Pupillenkoordinaten können damit in kanonisch konjugierten Koordinaten $\mathbf{p} = [p_x, p_y]^T$ angegeben werden und hängen mit den Wellenvektoren der jeweiligen Planwellen wie folgt zusammen:

$$\vec{k} = k_0 \begin{pmatrix} -p_x \\ -p_y \\ \sqrt{n^2 - p_x^2 - p_y^2} \end{pmatrix} = k_0 \begin{pmatrix} -p_x \\ -p_y \\ p_z \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

Aufgrund der Transversalität der elektromagnetischen Felder werden nach Abschnitt 5.1.4 die elektrischen Felder $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{p})$ und $\tilde{\mathbf{E}}'(\mathbf{p}')$ in der Eintrittspupille beziehungsweise der Austrittspupille durch 2D-Vektoren beschrieben. Im Falle eines aplanatischen Systems gilt für die Abbildung $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{p}) \rightarrow \tilde{\mathbf{E}}'(\mathbf{p}')$ zwischen beiden Pupillen ein einfacher linearer Zusammenhang in den Pupillenkoordinaten:

$$p'_x = \frac{p_x}{M_\beta}, \quad p'_y = \frac{p_y}{M_\beta} \quad (5.45)$$

Damit gilt die Relation

$$\tilde{\mathbf{E}}'_{\text{apl}}(\mathbf{p}') = M_\beta^2 C \tilde{\mathbf{E}}(M_\beta \mathbf{p}') \quad (5.46)$$

wobei der reelle Vorfaktor C der Energieerhaltung im optischen System Rechnung trägt. Wie Gleichung 5.46 deutlich macht, wird für ein ideales aplanatisches System bei der Abbildung des Lichtwellenfeldes von der Eintrittspupille zur Austrittspupille weder die Wellenfront noch der Polarisationszustand geändert. Es kommt lediglich zu einer Änderung des Ausbreitungswinkels im Bezug zur optischen Achse, die durch die Sinusbedingung beschrieben wird. Die Wellenfront, die von einem punktförmigen Objekt ausgeht, läuft im Bildraum als ideal kugelförmige Welle auf den Gaußschen Bildpunkt zu und definiert die Gaußsche Referenzsphäre (siehe Abb. 5.7). Durch die endliche Öffnung realer Systeme

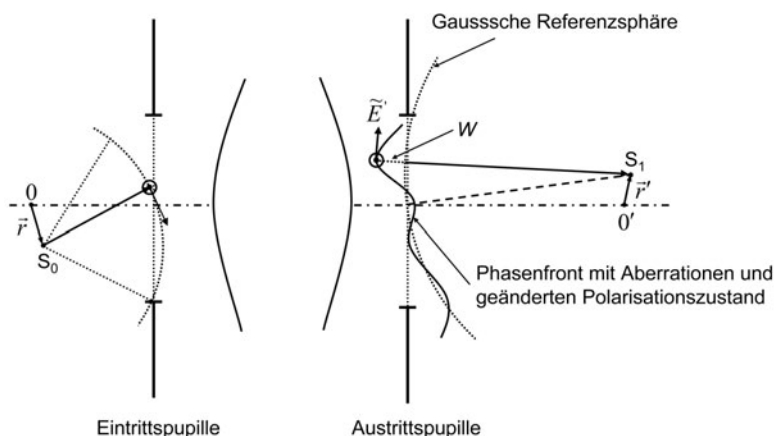


Abb. 5.7: Aberrationsbehaftete Abbildung

werden jedoch hohe Raumfrequenzen vignettiert. Dies wird durch die Pupillenfunktion P beschrieben:

$$P(\mathbf{p}') = \begin{cases} 1 & \text{für } p_x'^2 + p_y'^2 < NA'^2 \\ 0 & \text{für } p_x'^2 + p_y'^2 > NA'^2 \end{cases} \quad (5.47)$$

Die numerische Apertur im Bildraum NA' hängt nach Gleichung 5.33 mit der im Objekt- raum NA über den Vergrößerungsfaktor M_β zusammen: $NA' = \frac{NA}{M_\beta}$.

Neben der inhärenten Tiefpassfilterung treten in einem realen optischen System beim Übergang von Eintritts- zu Austrittspupille typischerweise weitere Abweichungen vom idealen Verhalten auf (siehe Abb. 5.7). Hierzu gehören:

- Gangunterschiede zwischen Strahlen, die unterschiedliche Pfade durch das optische System laufen. Sie äußern sich in (zunächst) skalaren Wellenfrontaberrationen $W(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda)$.

- Änderung des Polarisationszustandes eines Strahls durch polarisationsabhängige Transmissions- und Reflexionseigenschaften an (beschichteten) Grenzflächen von Linsen und Strahlteilern. Sie äußern sich in einer winkelabhängigen Apodisation und Retardierung der lokalen (Eigen-) Polarisationszustände.
- Änderung des Polarisationszustandes eines Strahls bei der Propagation in doppelbrechenden Materialien. Diese kann durch Spannungen hervorgerufen werden oder intrinsisch sein. Insbesondere im tief ultravioletten Spektrum (DUV) gewinnen diese Effekte an technischer Bedeutung, da hier verstärkt doppelbrechende Materialien wie z.B. CaF₂ verwendet werden.
- Polarisationsabhängigkeit der Beugungseigenschaften von diffraktiv-optischen Elementen im System. Da vermehrt DOEs mit hohen Linienpaardichten zur Strahlformung eingesetzt werden, werden auch diese Einflüsse immer wichtiger.

Die aufgeführten Effekte führen zu Aberrationen, die sich in Abbildungsfehlern des Systems äußern. In vielen Fällen spielen Polarisationsänderungen bei der Propagation durch das System eine untergeordnete Rolle und eine Optimierung auf Basis des skalaren Raytracings ist vollkommen ausreichend [250, 274]. In der hochaperturigen Polarisationsmikroskopie [275], der hochaperturigen Datenspeicherung [276–278] sowie insbesondere in Lithographiesystemen [279–282] spielt die Polarisationsabhängigkeit des Propagationsverhaltens durch das System eine mitunter maßgebliche Rolle für dessen Leistungsfähigkeit. Das Abbildungsverhalten wird dann durch so genannte Polarisationsaberrationen in der Pupille des Systems beschrieben, die erstmals von Chipman systematisch diskutiert wurden [216, 283–285]. Die Optimierung des Systems wird in diesem Fall unter Verwendung von Polarisations-Raytracing durchgeführt [286, 287].

Die polarisationsoptischen Transfereigenschaften des Systems können integral einem Jones-Matrix-Feld $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda)$ der Austrittspupille zugeordnet werden:

$$\mathbf{J}_{\mathbf{P}}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) = \begin{bmatrix} J_{xx}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) & J_{xy}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) \\ J_{yx}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) & J_{yy}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) \end{bmatrix} \quad (5.48)$$

Das Konzept der *Jones-Matrix-Pupille* wurde erstmals eingeführt, um die paraxiale Abbildungstheorie um polarisationsoptische Aspekte zu erweitern [288–292]. Der Polarisationszustand in der Austrittspupille ergibt sich damit zu:

$$\tilde{\mathbf{E}}'(\vec{r}', \mathbf{p}') = \mathbf{J}_{\mathbf{P}}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) \tilde{\mathbf{E}}'_{\text{apl}}(\vec{r}', \mathbf{p}') \quad (5.49)$$

Bei diesem Ansatz müssen Depolarisationseffekte vernachlässigt werden können. In hochwertigen optischen Systemen ist dies typischerweise der Fall, da Streuung als wichtigste Ursache für die Depolarisation keine Rolle spielt. Tritt aufgrund fehlender oder mangelhafter Vergütungen der Linsenflächen oder durch andere Streuzentren im System maßgebliche Streuung auf, so kann das Jones-Matrix-Konzept der Pupillendarstellung durch die allgemeinere Müller-Matrix-Darstellung erweitert werden [292].

Die Jones-Matrix-Pupille ist ganz im Sinne ihrer ursprünglichen Einführung auch ein grundlegendes Werkzeug, um bei einer gezielten Manipulation des polarisationsoptischen Transferverhaltens die Abbildungseigenschaften des optischen Systems zu simulieren. Beispiele sind:

- Einführung von Aberrationen zur Optimierung spezieller Abbildungseigenschaften. Hierzu zählen der Zernike-Phasenkontrast oder die Einbringung kubischer Phasensmasken zur Erhöhung der Fokustiefe.
- Polarisationsmikroskopie oder die bildgebende Polarimetrie unter Einsatz von Retardern, LCDs und Polarisatoren.
- Polarisationskodierte Messverfahren wie der differentielle Interferenzkontrast (DIC) oder der quantitative Phasenkontrast [293].

Sieht man von polarisationsoptischen Messsystemen ab, so dominieren meist die skalare Apodisation und skalare Aberrationen in der Pupille. In diesen Fällen ist eine Separation der skalaren Anteile aus der Jones-Matrix-Pupille sinnvoll. Betrachten wir ein rein skalares optisches System, das den Polarisationszustand nicht ändert, reduziert sich die Jones-Matrix-Pupille auf:

$$\mathbf{J}_{\mathbf{P}}(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) = A(\vec{r}', \mathbf{p}') e^{ikW(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda)} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.50)$$

Hierbei ist A eine beliebige skalare Apodisationsfunktion und W die schon eingeführten skalaren Wellenfrontaberrationen. Die Abspaltung des skalaren Vorfaktors aus der Jones-Matrix ist keineswegs eindeutig. Vielmehr ist man frei in der Wahl des Polarisationszustandes, auf den man sich bezieht. Dies kann entweder der Design-Polarisationszustand des Systems oder der über die Pupille gemittelte Polarisationszustand sein [294]. Auch der Bezug auf unterschiedliche Mittelwerte der Jones-Matrix ist üblich [286].

5.3.3.4 Apodisationseffekte der aplanatischen Abbildung

Die bisherige Diskussion der Sinusbedingung wurde unter abbildungstheoretischen Aspekten geführt und stark durch Abbes Arbeiten geprägt. Neben diesen Ansätzen führten fast zeitgleich Überlegungen von Helmholtz auf Basis des Energieerhaltungssatzes ebenfalls auf die Sinusbedingung [295, 296]. Hiernach muss ein optisches System, das unter Erhaltung der Energie und frei von Abbildungsfehlern eine Objektebene in eine Bildebene abbildet, unmittelbar die Sinusbedingung erfüllen. Die Forderung an ein optisches System, eine aberrationsfreie Abbildung unter Erfüllung der Energieerhaltung zwischen zwei Ebenen zu bewerkstelligen, ist also vollkommen äquivalent damit, die Sinusbedingung als Designkriterium für das abbildende System zu fordern [270]. Umgekehrt erfüllt ein optisches System, das der Abbeschen Sinusbedingung genügt, unmittelbar die Grundsätze der Energieerhaltung. Hieraus resultiert eine Schwächung des elektrischen Feldes im Sinne der Lambertschen Projektion, die sich insbesondere bei hohen Öffnungswinkeln bemerkbar macht. Der Einfluss der Apodisation in hochaperturigen Feldern wurde schon von Hopkins in skalarer Näherung diskutiert [297] und später von Richards [251] in der vektoriellen Theorie der Abbildung einer unendlich entfernten Punktlichtquelle aufgegriffen. Im folgenden werden die Apodisationsfaktoren, die sich aus der Energieerhaltung ableiten und daher bisweilen auch als *natürliche Apodisation* (*natural apodisation*) bezeichnet werden, kurz diskutiert. Die folgende Herleitung gilt für ein optisches System, das der Sinusbedingung gehorcht. Erfüllt das System andere Projektionseigenschaften wie die Herschel-, Lagrange-, oder Helmholtz-Bedingung, so resultieren hieraus andere Apodisationsfaktoren [298, 299]. Gehen wir von einem rotationssymmetrischen System aus und sehen im System von Absorptions-, Reflexions- und Streuverlusten ab, so ist der Strahlungsfluss $\Phi_e(\theta)$, der in das System unter dem Raumwinkel $d\Omega = 2\pi \sin(\theta)d\theta$ eintritt, aufgrund des aplanatischen Abbildungsverhaltens nach Gleichung 5.45 gleich dem Strahlungsfluss $\Phi'_e(\theta')$,

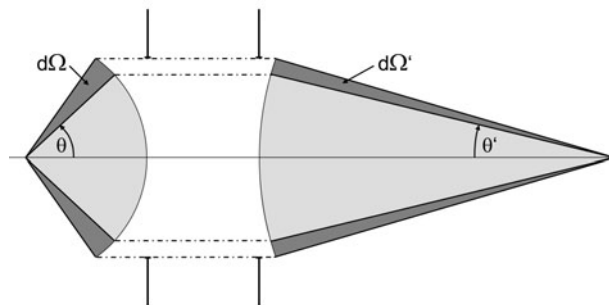


Abb. 5.8: Energieerhaltung der aplanatischen optischen Abbildung. Der Energiefluss durch die einzelnen Raumwinkelemente bleibt konstant.

der das System unter dem Raumwinkel $d\Omega' = 2\pi \sin(\theta')d\theta'$ verlässt. Mit den zugehörigen Strahlstärken $I_e(\theta) \sim |\tilde{\mathbf{E}}(\theta)|^2$ und $I'_e(\theta') \sim |\tilde{\mathbf{E}}'(\theta')|^2$ gilt:

$$I_e(\theta) \sin(\theta)d\theta = I'_e(\theta') \sin(\theta')d\theta' \quad (5.51)$$

Für den Apodisationsfaktor \mathcal{AP} der Feldstärkevektoren folgt unter Nutzung der Sinusbedingung (Gleichung 5.33):

$$\mathcal{AP}(\theta') = \frac{|\tilde{\mathbf{E}}'(\theta')|}{|\tilde{\mathbf{E}}(\theta)|} = \sqrt{\frac{I'_e(\theta')}{I_e(\theta)}} = M_\beta \frac{n'}{n} \sqrt{\frac{\cos(\theta')}{\cos(\theta)}} \quad (5.52)$$

Betrachten wir das Bild einer im Unendlichen liegenden Punktlichtquelle (d.h. $\theta = 0$), wird das ungleichförmige Transferverhalten einer hochaperturigen optischen Abbildung deutlich. Die elektrische Feldamplitude mit dem Einfallswinkel θ' wird um den Faktor $\sqrt{\cos(\theta')}$ gedämpft. Obwohl also alle Anteile der Pupille bis zum Grenzwinkel α der Numerischen Apertur $NA = n \sin(\alpha)$ das System bis zur Bildebene passieren und zur Bildentstehung beitragen, werden die peripheren Anteile der Pupille im Vergleich zum zentralen Teil stark gedämpft. Der Zentralbereich, der dem paraxialen Bereich entspricht, wird hingegen annähernd konstant durch das System geführt. Dies verdeutlicht die ungleichmäßigen Beiträge der Pupille zur mikroskopischen Bildentstehung.

5.4 Elektromagnetische Beugungstheorie in der optischen Abbildung

Ziel dieses Abschnitts ist es, ein Simulationsmodell für den hochaperturigen mikroskopischen Abbildungsprozess zu formulieren. Hierbei sollen rigorose Wechselwirkungseffekte am Objekt und das im Allgemeinen polarisationsabhängige Transferverhalten des optischen Systems mit in das Modell einbezogen werden. Die vorangegangenen Abschnitte dieses Kapitels und die Ergebnisse von Kapitel 3 sind dabei die Ausgangsbasis. Die wesentlichen Kernelemente des im Folgenden vorgestellten Simulationsmodells beruhen auf der Fourier-Theorie der linearen optischen Abbildung, die im Rahmen der paraxialen Näherung in mehreren Lehrbüchern ausführlich beschrieben wird [18, 300, 301]. Wie jedoch bei der Diskussion der Abbeschen Abbildungstheorie in Abschnitt 5.3.3 deutlich wurde, behält die Fourier-optische Beschreibung auch für die hochaperturige Abbildung ihre Gül-

tigkeit, wenn das System aplanatisch korrigiert ist. Im Gültigkeitsbereich der Debyeschen Näherung lässt sich dann die Feldverteilung im Fokalbereich als Planwellenzerlegung interpretieren, was vollkommen dem Abbeschen Modell der mikroskopischen Bildentstehung entspricht. Hierbei kommt der rückwärtigen Brennebene des Objektivs zentrale Bedeutung zu. In dieser Ebene liegt das Fourier-Spektrum des vom Objekt ausgehenden Lichtwellenfeldes vor, das unmittelbarer mathematischer Ausdruck der Planwellenzerlegung ist.

Die Aperturblende des Systems befinde sich ebenfalls in der rückwärtigen Brennebene des Objektivs. Damit wird das Abbildungssystem objekt- und bildseitig *telezentrisch* und die Eintritts- und Austrittspupille wandern als sphärisch gekrümmte Flächen ins Unendliche. Die Pupillen befinden sich also im Fraunhoferschen Approximationsbereich der Objekt- beziehungsweise Bildebene [302]. Dies garantiert einerseits die strenge Isoplanasie des Abbildungsprozesses [300], erlegt aber andererseits dem Abbildungssystem strenge Einschränkungen auf. Die Abbildungseigenschaften des Systems zwischen Eintritts- und Austrittspupille werden nur durch Aberrationen erfasst, die für das gesamte Bildfeld konstant sind [303].

Beim Übergang zu hohen Aperturen sind darüber hinaus zwei Effekte zu berücksichtigen, denen im Grenzfall der paraxialen Näherung keine Bedeutung zukommt [298, 299]. Dies sind einerseits *Apodisationseffekte*, die sich aus der Energieerhaltung ableiten, andererseits *Polarisationseffekte*, die durch den Vektorcharakter der dreidimensionalen Interferenzerscheinungen bei hohen Öffnungswinkeln an Einfluss gewinnen.

Eine wesentliche Erweiterung erfährt die Modellierung der mikroskopischen Abbildung durch die Einbindung rigoroser Beugungstheorien in die Berechnung des vom Objekt ausgehenden Beugungsspektrums. Während bei klassischen skalaren Modellen das Objekt durch eine einfache Transmissions- oder Reflexionsfunktion approximiert wird [18, 301], resultiert bei der elektromagnetischen Bildsimulation das Beugungsspektrum aus rigorosen Berechnungsverfahren.

Im Folgenden werden die einzelnen Schritte des Abbildungsprozesses formuliert. Zur Illustration dient Abbildung 5.9. Das abbildende System, das beim Mikroskop üblicherweise aus Objektiv und Tubuslinse besteht, wird durch die Ein- und Austrittspupille beschrieben. Das Beleuchtungssystem (z.B. ein Kollektor gefolgt von einem Kondensator) wird durch seine Austrittspupille (Beleuchtungspupille) erfasst. Diese befinde sich analog zur Diskussion der Abbildungspupillen im Fraunhoferschen Approximationsbereich. Sie liegt damit auf einer Sphäre im Unendlichen. Um die einzelnen Stufen des Abbildungsprozesses klar zu trennen, wird zwischen kohärenter und partiell kohärenter Beleuchtung unterschieden.

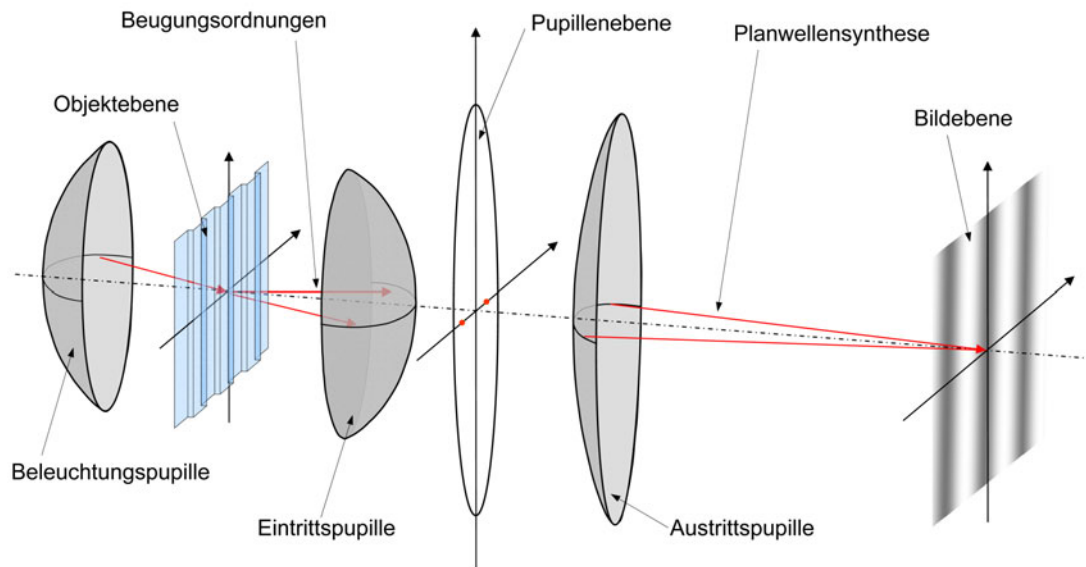


Abb. 5.9: Schema der mikroskopischen Bildsimulation

5.4.1 Kohärente Beleuchtung

Die Grundzüge des Simulationsmodells werden bei der Betrachtung des einfachsten Falls deutlich, bei dem das Objekt durch eine monochromatische Planwelle mit definierter Wellenlänge λ und definiertem Polarisationszustand beleuchtet wird. Der Abbildungsprozess setzt sich dann aus folgenden Schritten zusammen:

1. Beleuchtung des Objektes mit einer Planwelle aus der Einfallsrichtung \mathbf{p}_i . Die Darstellung erfolgt in der Beleuchtungspupille. Die komplexe Amplitude der Planwelle ist durch $\mathcal{L}(\lambda, \mathbf{p}_i)$ und der Polarisationszustand durch den normierten Jones-Vektor $\tilde{\mathbf{E}}_i$ gegeben.
2. Berechnung des Beugungsspektrums des Objektes $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{p}_{\mu\nu}, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_i)$ mit Methoden der rigorosen Beugungstheorie nach Kapitel 3. Darstellung in der Eintrittspupille des optischen Systems. Berücksichtigung eines Projektionsfaktors γ auf die Sphäre der Eintrittspupille analog zu Gleichung 5.18.
3. Transformation des Feldes von der Eintritts- zur Austrittspupille nach Gleichung 5.46. Anwendung der Vignettierungsfunktion $P(\mathbf{p}')$ (Gl. 5.47), der natürlichen Apodisation \mathcal{AP} (Gl. 5.52), der skalaren Aberrationen $W(r', \mathbf{p}', \lambda)$ und gegebenenfalls zusätzlichen, im Allgemeinen polarisationsabhängigen Pupillenfiltern $\mathbf{J}_P(r', \mathbf{p}', \lambda)$ (Gl. 5.49).

4. Planwellensynthese im Bildraum durch Anwendung des vektoriellen Debye-Wolf-Integrals 5.24 unter Berücksichtigung von 3D-Vektoreffekten durch die Polarisations-Transformationsmatrix \mathcal{T} (Gl. 5.27).

Durch eine sukzessive Anwendung dieser Schritte ergibt sich damit für den Feldstärkevektor \vec{E} im Bildraum⁶:

$$\vec{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_i\}} = \mathcal{L}(\lambda, \mathbf{p}_i) \sum_{|\mathbf{p}'_{\mu\nu}| \leq NA'} \sqrt{\frac{\gamma}{\gamma'}} \mathcal{T}(\mathbf{p}') \mathbf{J}_P(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda) \tilde{\mathbf{E}}(M_\beta \mathbf{p}'_{\mu\nu}, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_i) e^{ik_0(\mathbf{p}'_{\mu\nu} \mathbf{r}' + \gamma z' + W(\vec{r}', \mathbf{p}', \lambda))} \quad (5.53)$$

Gleichung 5.53 kann als Grundgleichung der rigorosen Abbildungstheorie betrachtet werden. Auf dieser bauen nun kompliziertere Abbildungsprozesse mit unterschiedlichen Beleuchtungsszenarien auf. Bleiben wir zunächst beim kohärenten Fall, so kann im Sinne der Planwellenzerlegung nach Gleichung 5.24 jede beliebige Fernfeldverteilung der Beleuchtung im Objektraum durch Integration über eine passende Feldverteilung in der Beleuchtungspupille beschrieben werden. Für die praktische Umsetzung muss dabei die Integration durch eine diskrete Summation von Pupillenpunkten \mathbf{p}_i mit geeignet gewählter Amplitude $\mathcal{L}(\lambda, \mathbf{p}_i)$ und Polarisationszustand $\tilde{\mathbf{E}}_i$ ersetzt werden. Geht man von einem kartesischen Raster aus, so ergibt sich unter Berücksichtigung der Energieerhaltung (siehe Abschnitt 5.3.3.4):

$$\vec{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda\}} = \sum_{\mathbf{p}_i} \frac{1}{\sqrt{\gamma_i}} \vec{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_i(\mathbf{p}_i)\}} \Delta\sigma_{\mathbf{p}_i} \quad (5.54)$$

Das Flächenelement $\Delta\sigma_{\mathbf{p}_i} = \Delta\mathbf{p}_{ix} \Delta\mathbf{p}_{iy}$ resultiert aus der Diskretisierung des Integrals der Beleuchtungspupille. Es kann wie die übrigen Konstanten in die Beleuchtungsamplitude $\mathcal{L}(\lambda, \mathbf{p}_i)$ aufgenommen werden.

Gleichung 5.54 kommt zum Beispiel bei der Simulation der konfokalen Mikroskopie oder artverwandten Messverfahren zum Einsatz [304]. In der Hellfeldmikroskopie jedoch wird eine kohärente Ausleuchtung der Pupille wegen Speckleeffekten und Störinterferenzen vermieden. Hier wird eine partiell kohärente Beleuchtung bevorzugt.

⁶Alle konstanten Vorfaktoren, die bei strenger Ausführung auftauchen, seien in $\mathcal{L}(\lambda, \mathbf{p}_i)$ berücksichtigt.

5.4.2 Partiiell kohärente Beleuchtung

Bei der bisherigen Betrachtung bestand zwischen den Beleuchtungsfeldstärken an verschiedenen Punkten der Objektebene eine feste Phasenbeziehung. Dies ist implizit eine wesentliche Voraussetzung für die Anwendung numerischer Methoden zur rigorosen Berechnung des Beugungsspektrums. Typischerweise liegt aber in der Beleuchtung ein räumlich und zeitlich nur partiell kohärentes Lichtwellenfeld vor. Für ein skalares Lichtwellenfeld wird in diesem Fall der wechselseitige Zusammenhang zwischen zwei Feldpunkten durch den komplexen *Kohärenzgrad* γ_{12} beschrieben [207]. Für Felder mit kleinem Divergenzwinkel lässt sich dieses Konzept auch auf polarisierte Lichtwellenfelder mit Einführung der *Cross Spectral Density* erweitern [204]. Da aber in der Mikroskopie typischerweise polarisierte Felder mit hoher Apertur vorliegen, sind beide Konzepte für die rigorose Bildsimulation ungeeignet. Wie Hopkins in der skalaren Kohärenztheorie zeigte, lässt sich ein beliebiger (aber beugungsbegrenzter) räumlicher Kohärenzgrad γ_{12} in der Objektebene durch die Fourier-Transformierte einer Intensitätsfunktion darstellen [305, 306]. Da die Intensitätsfunktion rein reell ist, definiert sie also die vollständig inkohärente Feldverteilung in der Austrittspupille einer fiktiv gedachten Quelle (*Hopkinssche effektive Lichtquelle*). Die Feldverteilung in der Objektebene setzt sich damit aus einer inkohärenten Überlagerung von Planwellen aus verschiedenen Richtungen zusammen. Dies entspricht aber exakt dem Prinzip der Köhlerschen Beleuchtung, die in den meisten abbildenden Systemen Anwendung findet⁷. Ursprünglich in paraxialer Näherung hergeleitet, kann das Konzept der effektiven Quelle unter Berücksichtigung der Energieerhaltung auch auf hochaperturige Felder angewendet werden [302]. Da das partiell kohärente Lichtwellenfeld durch eine Synthese von Planwellen beschrieben wird, steht auch der Einbindung von Polarisationsaspekten in das Modell nichts im Wege.

Für die Beschreibung des partiell kohärenten Lichtwellenfeldes in der Bildebene wird die Kohärenzmatrix $\mathbf{E} = \langle \vec{E} \otimes \vec{E}^+ \rangle$ herangezogen (siehe Gleichung 4.13). Da jeder einzelne Pupillenpunkt in der Beleuchtung für sich einer kohärenten Planwelle entspricht, werden zunächst nach Gleichung 5.53 die Teilbilder für jeden Punkt der Beleuchtungspupille getrennt berechnet und die (kohärente) Kohärenzmatrix $\mathbf{E} = \langle \vec{E} \otimes \vec{E}^+ \rangle|_{\{\lambda, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_i(\mathbf{p}_i)\}}$ gebildet. Nach dem Prinzip der effektiven Quelle berechnet sich das partiell kohärente Gesamtbild

⁷Die Hopkinssche Quelle ist damit nicht nur auf die Beschreibung des Köhlerschen Beleuchtungstyps beschränkt. Sie ist auch für kritische Beleuchtung anwendbar [207, 305, 306].

dann als inkohärente Summe der Teilbilder:

$$\mathbf{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda\}} = \sum_{\mathbf{p}_i} \frac{1}{\sqrt{\gamma_i}} \mathbf{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_i(\mathbf{p}_i)\}} \quad (5.55)$$

Für polychromatische Beleuchtung bekommt $\mathcal{L}(\lambda, \mathbf{p}_i)$ die Bedeutung einer spektralen Dichte und die Kohärenzmatrix im Bildraum folgt aus Gleichung 5.55 durch zusätzliche inkohärente Summation über die Wellenlänge:

$$\mathbf{E}(x', y', z') = \sum_{\lambda_s} \sum_{\mathbf{p}_i} \frac{1}{\sqrt{\gamma_i}} \mathbf{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda_s, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_i(\mathbf{p}_i)\}} \Delta\lambda \quad (5.56)$$

Bisher war jeder Punkt der Beleuchtungspupille beliebig aber vollständig polarisiert. Nach dem Prinzip der optische Äquivalenz aus Abschnitt 4.1.2 lässt sich ein partiell polarisierter Beleuchtungszustand eines Pupillenpunktes der effektiven Quelle, der einem Stokes-Vektor \mathbf{s} entspricht, durch eine inkohärente Summe \oplus von orthogonalen Jones-Vektoren (d.h. $\tilde{\mathbf{E}}_{i1} \tilde{\mathbf{E}}_{i2}^+ = 0$) beschreiben [287]:

$$\mathbf{s} \leftrightarrow \sqrt{\frac{1+\mathcal{P}}{2}} \tilde{\mathbf{E}}_1 \oplus \sqrt{\frac{1-\mathcal{P}}{2}} \tilde{\mathbf{E}}_2 \quad (5.57)$$

Aufgrund dieser Zerlegung können für partiell polarisiertes Licht zunächst zwei getrennte Bilder für die Jones-Vektoren $\tilde{\mathbf{E}}_{i1}$ und $\tilde{\mathbf{E}}_{i2}$ berechnet werden. Das partiell polarisierte Gesamtbild ergibt sich dann durch inkohärente Summation:

$$\mathbf{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda\}} = \sum_{\mathbf{p}_i} \frac{1}{\sqrt{\gamma_i}} \left(\mathbf{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_{i1}(\mathbf{p}_i)\}} + \mathbf{E}(x', y', z') \Big|_{\{\lambda, \mathbf{p}_i, \tilde{\mathbf{E}}_{i2}(\mathbf{p}_i)\}} \right) \quad (5.58)$$

Damit sind alle wesentlichen Fälle für die mikroskopische Bildsimulation abgedeckt. Der nächste Abschnitt beleuchtet den Gültigkeitsbereich und die Grenzen des Simulationsmodells.

5.5 Gültigkeitsbereich des Simulationsmodells

Kern des Simulationsmodells aus Abschnitt 5.4 ist die Planwellendarstellung der Debye'schen Näherung. Die Planwellen, die zur Bildsynthese herangezogen werden, sind unendlich ausgedehnt. Beugungseffekten und der damit einhergehenden Auflösungsbegrenzung

der mikroskopischen Abbildung wird durch eine Vignettierung des Ortsfrequenzspektrums im Fourier-Raum Rechnung getragen. Die Vignettierung der Planwellen im Ortsraum, die an den realen Aperturrändern des optischen Systems auftritt und ebenfalls zu Beugungseffekten führt, ist im Simulationsmodell nicht enthalten.

Bei der praktischen Auslegung mikroskopischer Abbildungssysteme wird die Aperturblinde in die unmittelbare Nähe der rückwärtigen Brennebene des Objektivs und auch der Tubuslinse gesetzt. Damit wandern aber ihre Bilder im Objekt- und im Bildraum (d.h. Ein- und Austrittspupille) ins Unendliche. Das reale mikroskopische Abbildungssystem ist objekt- und bildseitig telezentrisch. Es ist daher zu erwarten, dass die reale mikroskopische Abbildung durch das Simulationsmodell aus Abschnitt 5.4 sehr gut wiedergegeben wird. Das Problem der Vignettierung des elektromagnetischen Feldes im Ortsraum durch das Abbildungssystem bleibt aber grundsätzlich erhalten. Dieser Abschnitt soll die Frage klären, unter welchen Bedingungen die daraus resultierenden Beugungseffekte auf den mikroskopischen Abbildungsprozess überhaupt Einfluss nehmen und wann sie vernachlässigt werden können. Damit reduziert sich das Problem im Kern auf die Frage, wann die Debye-Näherung zur Simulation des mikroskopischen Bildes herangezogen werden kann.

Um diese Frage zu beantworten, erscheint ein direkter Vergleich mit der Kirchhoffschen Theorie sinnvoll. Sowohl die Kirchhoffsche als auch die Debyesche Theorie sollten im Geltungsbereich der skalaren Beugungstheorie die gleichen Ergebnisse liefern. Eine ausführliche Diskussion hierzu findet sich im Buch von Stamnes [307]. Auch ein direkter Vergleich mit analytischen Lösungen ist möglich [64, 308, 309]. Zum ersten Mal wurde von Diskrepanzen zwischen beiden Theorien im Zusammenhang mit der Simulation der Fokuseigenschaften von Laserstrahlung berichtet [310–314]. Insbesondere eine in der Laserphysik bekannte Fokusverschiebung [315] kann nicht durch die Debyesche, wohl aber in der Kirchhoffschen Theorie wiedergegeben werden. Im Fall der Debyeschen Theorie erzwingt nämlich die Struktur des Beugungsintegrals eine Symmetrie der Intensitätsverteilung um den Gaußschen Fokuspunkt [316]. Die physikalische Ursache für diese Unterschiede wird durch eine Lösung des Kirchhoffschen Integrals mit der Methode der stationären Phase offenbar [317]. Während die stationären Punkte in der Apertur den gleichen Beitrag wie die Debyesche Näherung liefern, wird der Beitrag der stationären Punkte am Rand der Apertur in der Debyeschen Approximation nicht berücksichtigt. Dieser Betrag entspricht aber genau dem vorher diskutierten Beugungsanteil, der durch die Vignettierung der Planwellen hervorgerufen wird. Wolf und Li untersuchten, wann der Beugungsanteil der Randbeugungswelle vernachlässigt werden kann und damit die Debye-Näherung Gültigkeit besitzt [318]. Dafür

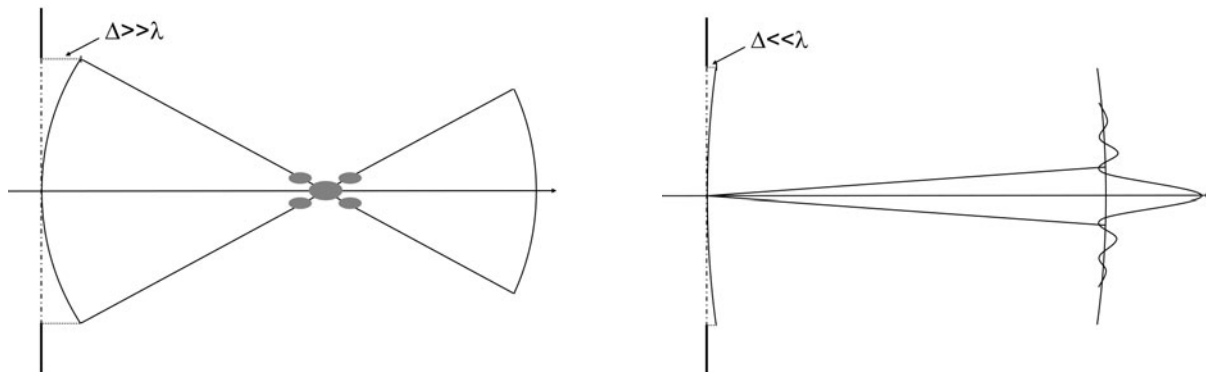
muss gelten:

$$kf \gg \frac{\pi}{\sin^2(\theta/2)} \quad (5.59)$$

In paraxialer Näherung ist Gleichung 5.59 äquivalent mit der Forderung, dass das abbildende System eine sehr hohe Fresnel-Zahl aufweist:

$$\mathcal{N} \gg 1 \quad (5.60)$$

Eine anschauliche Interpretation dieser Forderung wurde von Y. Li für das Fokussierungsproblem geliefert. Er greift dabei auf die ursprüngliche Bedeutung der Fresnel-Zahl zurück [319]. Diese gibt die Anzahl der Halbperioden (Fresnelsche Zonen) an, die die Apertur des optischen Systems ausfüllen [320]. Bei einer hohen Fresnel-Zahl liegt eine starke Krümmung der Wellenfront vor und diese läuft im Sinne der Debyeschen Theorie [27] als Ausschnitt einer Kugelwelle kegelförmig auf den geometrischen Fokus zu (Abb. 5.10 (a)). Die Debye-Approximation ist gültig. Für eine kleine Fresnel-Zahl hingegen liegt eine quasi-planare Wellenfront in der Apertur vor. Das Beugungsbild im Fernfeld entspricht einem Airy-Scheibchen und wird durch Fraunhofer-Beugung bestimmt. Die Debye-Approximation versagt in diesem Fall (Abb. 5.10 (b)). Im Übergangsbereich moderater Fresnel-Zahlen kommt es zu einer Überlagerung beider Effekte, die durch eine Fresnel-Zahl-abhängige Koordinatentransformation beschrieben werden kann [319].



(a) Große Fresnel-Zahl $\mathcal{N} \gg 1$: Die Welle läuft als Kugelausschnitt kegelförmig auf den Fokus zu.

(b) Kleine Fresnel-Zahl $\mathcal{N} \ll 1$: Das Beugungsbild entspricht dem eines Airy-Scheibchens.

Abb. 5.10: Bedeutung der Fresnel-Zahl für den Gültigkeitsbereich der Debye-Näherung.

Für Anwendungen der Debyeschen Näherung in der Praxis wird eine Fresnel-Zahl im zweistelligen Bereich $\mathcal{N} > 10$ als hinreichend angesehen [321]. Hochaperturige Objektive haben typischerweise eine Fresnel-Zahl im 4- bis 5-stelligen Zahlenbereich. Das in dieser Arbeit

verwendete DUV-Objektiv hat eine Fresnel-Zahl von $\mathcal{N} = 4500$. Hochaperturige Beleuchtungsprobleme, wie sie zum Beispiel in der konfokalen Mikroskopie auftreten, lassen sich demnach mit hoher Genauigkeit simulieren. Auf der Bildseite des mikroskopischen Systems liegen die Fresnel-Zahlen der Tubuslinse deutlich niedriger. In der Standardkonfiguration des verwendeten DUV-Mikroskops beträgt sie jedoch immer noch $\mathcal{N} = 28$. Die Debye-Näherung und damit das Simulationsmodell aus Abschnitt 5.4 kann in diesem Fall also mit hinreichender Genauigkeit angewendet werden.

Damit schließt sich auch der Kreis zu dem in Abschnitt 5.3.2 eingeführten Pupillenkonzent der optischen Abbildung. Eine wesentliche Voraussetzung hierfür war, dass alle Beugungseffekte der kaskadierten Aperturen im optischen System einer einzigen Blende, der Pupille des Systems, zugeordnet werden können. Betrachtet man die Fresnel-Zahlen aller Aperturen des Systems für alle Feldpunkte, die durch das System abgebildet werden sollen, und sind diese gemäß Gleichung 5.60 hinreichend groß, so hat die konkrete Lage der beugungsbegrenzenden Öffnung für die jeweiligen Feldpunkte keinen maßgeblichen Einfluss auf das Simulationsergebnis. Im mathematischen Modell der aplanatischen Abbildung können daher die Ein- und Austrittspupille für alle Feldpunkte gemeinsam als Sphären im Unendlichen mit dem Gaußschen Fokalfunkt als Mittelpunkt herangezogen werden.

In der hochauflösenden Mikroskopie werden überwiegend telezentrische Systeme mit hoher Apertur eingesetzt (d.h. $\mathcal{N} \rightarrow \infty$). Die Debye-Näherung ist daher in den meisten Fällen sehr gut anwendbar und das Fourier-Modell der optischen Abbildung aus Abschnitt 5.4 erlaubt eine einfache und genaue Simulation des mikroskopischen Abbildungsprozesses. Dennoch ist auch hier von Fall zu Fall zu überprüfen, ob der Gültigkeitsbereich der Debye-Approximation nicht doch verlassen wird. So ist die Fresnel-Zahl stark von der relativen Lage der Pupille und der rückwärtigen Brennebene des Systems abhängig. Stimmen beide Lagen nicht hinreichend genau überein, kommt es zu einer starken Änderung des Abbildungsverhaltens des optischen Systems [322, 323]. Darüber hinaus kann auch für Abbildungsprozesse mit großen Fresnel-Zahlen der Gültigkeitsbereich der Debye-Approximation verlassen werden. Dieser Fall tritt insbesondere dann auf, wenn die Abbildung durch starke Aberrationen behaftet ist. Hierzu zählen nicht nur systeminhärente Abbildungsfehler, sondern auch solche, die durch den Abbildungsprozess an sich hervorgerufen werden. Beispiele sind die konfokale Abbildung durch dicke Schichten [324] oder eine starke Defokussierung des Bildes [325]. Die stärkste Einschränkung bei einer hoch vergrößernden Abbildung liegt aber in der Fresnel-Zahl der bildseitigen Tubuslinse. Insbesondere bei sehr hohen Vergrößerungsfaktoren M_β kann der Gültigkeitsbereich der Debye-Theorie verlassen werden. In

solchen Fällen wäre eine Erweiterung des Simulationsmodells auf Basis einer modifizierten Debye-Theorie denkbar [317].

Kommen wir am Schluss auf die implizite Voraussetzung der Debye-Approximation zurück, dass alle beugenden Öffnungen viel größer als die Wellenlänge sind. Bei konventionellen mikroskopischen Systemen liegen die Durchmesser von Linsen und Blenden in der Größenordnung von Millimetern, so dass diese Annahme ohne weiteres gemacht werden kann. Mit einer zunehmenden Miniaturisierung können jedoch Fälle auftreten, bei denen diese Näherung an ihre Grenzen stößt. Beispiele sind aus der Fokussierung von Mikrowellen bekannt [326]. Doch auch im optischen Spektralbereich kann die Debye-Näherung zum Beispiel bei der Modellierung von Mikrooptiken wie Mikrolinsenarrays an ihre Grenzen stoßen. In diesem Fall muss auf die Kirchhoffsche Näherung oder gegebenenfalls auf die vektorielle Erweiterung nach Stratton-Chu zurückgegriffen werden.

6 Messverfahren der bildgebenden Polarimetrie

Während sich die vorangegangenen Kapitel mit den theoretischen Grundlagen und der Simulation hochauflösender Mikroskopie beschäftigt haben, geht dieses Kapitel auf die experimentelle Umsetzung von polarisationsoptischen Messverfahren ein. Neben der Modellierung und Simulation bilden die hier beschriebenen Verfahren das Rüstzeug für die messtechnische Realisierung der mikroskopischen Polarimetrie, die in den folgenden Kapiteln diskutiert wird.

Das Anwendungsspektrum der bildgebenden Polarimetrie ist vielfältig. Es reicht von der polarisationsoptischen Charakterisierung optischer Komponenten und Systeme [327–332] über Anwendungen in der Rheometrie [333, 334] und der Photoelastizitätstheorie [335] bis hin zu verschiedensten Applikationen der Lidar-Fernerkundung (light detection and ranging) [336–338] in der Meteorologie [339–341] oder der Astronomie [342].

Für die bildgebende Polarimetrie steht eine Reihe von Messverfahren zur Verfügung. Man unterscheidet hierbei zwischen passiven Stokes-Vektor-Polarimetern und aktiven Müller-Matrix-Polarimetern. Während bei aktiven Polarimetern der Polarisationszustand vorgegeben und typischerweise auch im Messzyklus variiert wird, beschränkt sich die passive Polarimetrie im engeren Sinne auf die Vermessung des Stokes-Vektorfeldes (oder äquivalent der Kohärenzmatrix) von selbstleuchtenden oder unpolarisiert beleuchteten Objekten.

Einen sehr guten Überblick über die gängigen Messverfahren der Polarimetrie liefern sowohl der Übersichtsartikel von Hauge [343] als auch klassische Referenzen auf diesem Gebiet [201, 202, 211]. Speziellen Fragen der bildgebenden Polarimetrie widmet sich der Übersichtsartikel von Tyo [344].

Den mit Abstand am weitesten verbreiteten Polarimetertyp stellen *Dual-Rotating-Retarder-Polarimeter* dar [329, 345]. Ein entsprechender Aufbau kommt auch in dieser Arbeit zum Einsatz und wird in den folgenden Abschnitten genauer beschrieben. Als zeitlich sequentiell

arbeitendes Verfahren fällt es in die Klasse der *Division of Time Polarimeter*. Hierzu zählen auch bildgebende Polarimeter, die auf LCDs [346, 347], photoelastische Modulatoren [348, 349], Pockelszellen [350] oder Faraday-Modulatoren [351] zurückgreifen.

Mit parallel arbeitenden Messverfahren können kürzere Messzeiten realisiert werden. Zu dieser Kategorie gehören *Division of Amplitude Photopolarimeter* [352–355], denen auch die so genannten *Carrier-Fringe-Techniken* [356–359] zuzuordnen sind, sowie *Division of Aperture Photopolarimeter*. Insbesondere der letzte Typ bietet durch die Integration eines Mikroretarder-Arrays direkt auf dem Chip ein breites Anwendungspotential [360–362].

Abschnitt 6.1 gibt zunächst einen Gesamtüberblick über den modularen Mikroskopaufbau, der in dieser Arbeit zum Einsatz kam. Abschnitt 6.2 beschreibt das polarimetrische Messverfahren, das zur bildhaften Vermessung der Kohärenzmatrix herangezogen wurde. Neben der Darstellung des grundlegenden Algorithmus wird hierbei besonderes Augenmerk auf Korrektur- und Kalibrierverfahren gelegt, die für die praktische Umsetzung relevant sind.

6.1 Experimenteller Gesamtaufbau

Basis des verwendeten Messsystems ist ein Leica DMR XE Mikroskopstativ, das in einer Reihe von Arbeiten für unterschiedliche Messaufgaben umgerüstet und erweitert wurde [1, 363–366]. Bei der Konzeption des Gesamtsystems wurde besonderes Augenmerk auf die Modularität des Gerätes gelegt, sodass sich mit geringem Umrüstungsaufwand unterschiedliche Messverfahren durchführen und frei kombinieren lassen. In seiner derzeitigen Ausbaustufe lassen sich mit dem Aufbau polarisationsoptische und Linnik-interferometrische Experimente im Auflicht sowohl im sichtbaren Spektralbereich (VIS) als auch im tiefen ultravioletten Spektralbereich (DUV, $\lambda = 248$ nm) durchführen. Im VIS sind zusätzlich Messungen in Transmission möglich. Die einzelnen Module wurden an die mechanischen Anschlüsse des Stativs angepasst, sodass nach einmaliger Grundjustage ein einfacher Ein- und Ausbau der einzelnen Einheiten möglich ist. Das Design und die Anpassung der Strahlengänge wurde in enger Abstimmung von Leica Microsystems in Wetzlar durchgeführt. Zur Temperatur-Stabilisierung, zur Vermeidung von Turbulenzen sowie zum Schutz vor der DUV-Strahlung wurde das Mikroskop in einer Flowbox-Kabine errichtet. Eine Prinzipskizze des modularen Aufbaus ist in Abbildung 6.1 dargestellt. In Abbildung 6.2 sind Detailaufnahmen des Mikroskops zu sehen. Alle zentralen Komponenten des Mikroskops wie Monochromator, Probentisch, Piezoverschieber, Drehtische, Kamera

etc. sind per Computer ansteuerbar. Die Probe lässt sich über einen kapazitiv geregelten xyz-Nanopositioniertisch (Physik Instrumente, P-517.3CL) in drei Raumrichtungen mit einem Stellweg von $100\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$ nanometergenau positionieren. Über die institutseigene Messsoftware (M-Programm) können unterschiedliche Messroutinen automatisch ausgeführt und die Messergebnisse anschließend weiterverarbeitet werden.

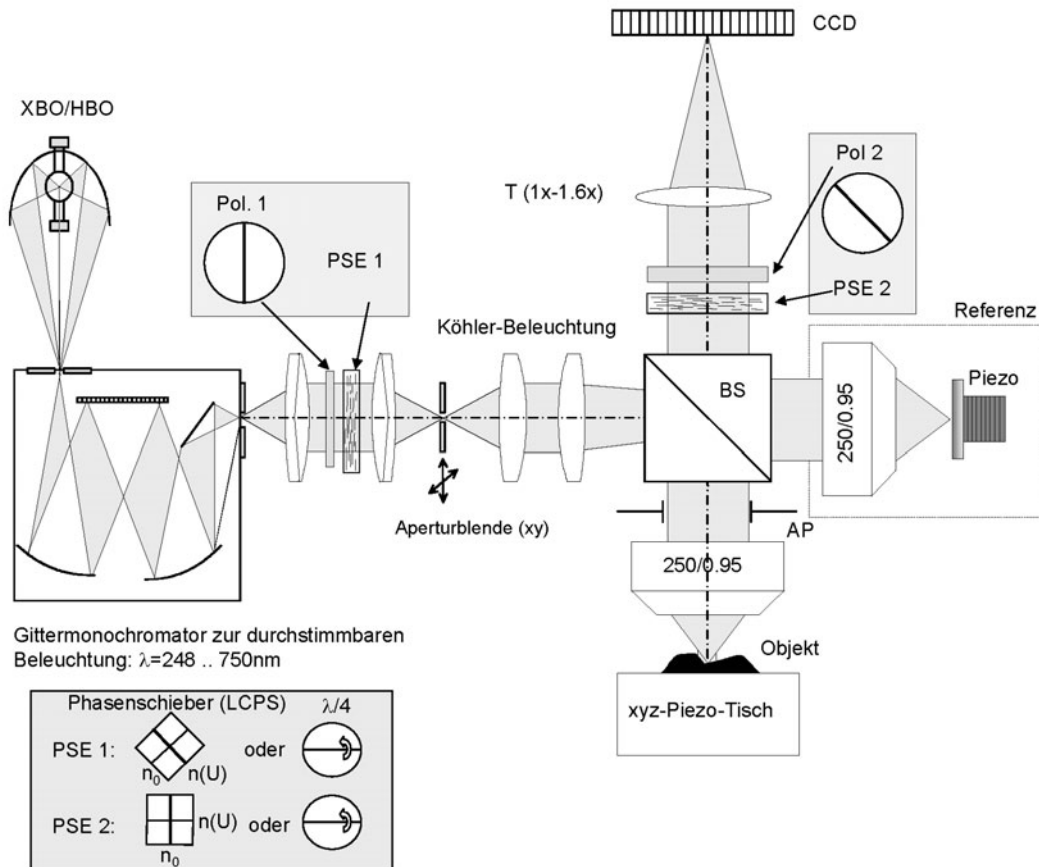


Abb. 6.1: Prinzipskizze des Gesamtaufbaus mit den einzelnen Messmodulen.

Die Mikroskopbeleuchtung erfolgt über eine Xenon-Quecksilber-Mischgaslampe (Hamamatsu, L2422) und einen nachgeschalteten Monochromator (Amko, 03-MLS150-C). Hiermit ist der Spektralbereich von 250 nm bis 700 nm wählbar. Allerdings muss der Beleuchtungsstrahlengang beim Übergang vom DUV zum VIS gewechselt werden. Eine schwach streuende Mattscheibe aus Quarz in der Nähe der Aperturblende sorgt für eine möglichst homogene Ausleuchtung der Eintrittspupille des Objektivs. Die numerische Apertur der Beleuchtung ist bis zur Maximalapertur des Objektivs über eine extern zugängliche Blende frei wählbar. Sowohl die Erzeugung des Eingangspolarisationszustandes (polarization

state generator, PSG) als auch die Analyse des vom Messobjekt ausgehenden Polarisationszustandes (polarization state analyser, PSA) erfolgt über die Kombination eines linearen Polarisationsfilters mit einem phasenschiebenden Element (PSE). Im sichtbaren Spektralbereich werden hierzu ein planar-nematischer Flüssigkristall-Phasenschieber (Jenoptik) und Polaroid-Polarisatoren verwendet. Im DUV kommen rotierende $\frac{\lambda}{4}$ -Plättchen und Glan-Thompson-Polarisatoren für die polarimetrischen Messungen zum Einsatz, da die Flüssigkristalle und Folienpolarisatoren durch DUV-Licht zerstört würden. Um die nötige Genauigkeit und Reproduzierbarkeit der Messung zu erreichen, werden computergesteuerte Präzisionsdrehtische der Firma Physik Instrumente (M-038.DG) verwendet. Mit diesen polarisationsoptischen Modulen steht ein aktives Imaging-Polarimeter zur Verfügung, das die Basis für die in Kapitel 7 beschriebenen Experimente darstellt.

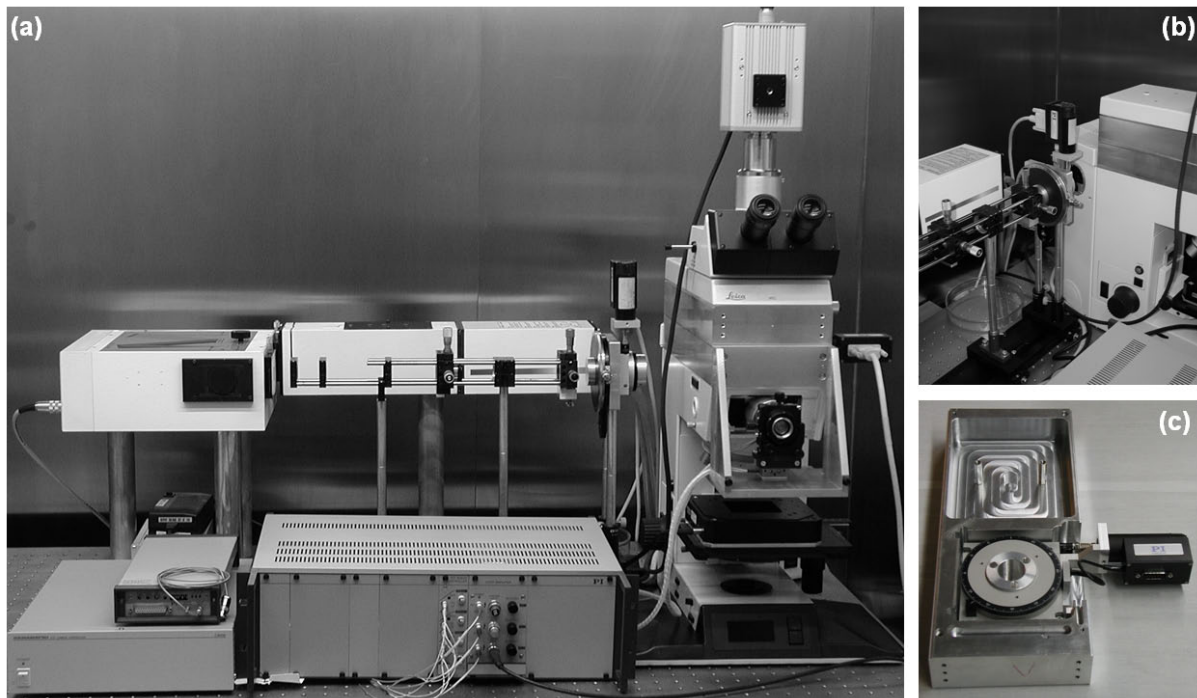


Abb. 6.2: Gesamtaufbau der Mikroskops mit Detailaufnahmen. An der Vorderseite des Mikroskops sieht man das Linnik-Interferometrie-Modul für polarisationsinterferometrische Experimente (a). Die klassischen polarimetrischen Messungen werden im DUV durch einen PSG (b) und einen PSA durchgeführt, die aus einer Kombination von rotierendem Retarder und Polarisator bestehen. Die Ansteuerung der Elemente erfolgt über Präzisionsdrehtische (c).

Der Vollständigkeit halber sei auf ein weiteres Modul, eine Linnik-Interferometrie-Einheit verwiesen. Hiermit lassen sich neben herkömmlichen interferometrischen Verfahren auch polarisationsinterferometrische Messkonzepte durch eine polarisationskodierte Strahlteilung realisieren. Die Einheit wurde als Aufsatz konzipiert und kann durch Passstifte ge-

führt am Rahmengehäuse befestigt werden. Nach Aus- und wieder erfolgtem Einbau ist daher nur noch eine geringfügige Nachjustage nötig. Das Referenzobjektiv sitzt auf einem Fünffachsversteller, der einen Abgleich von Objekt und Referenzstrahlengang in Position und Richtung möglich macht. Sowohl die Fokusposition des Referenzspiegels als auch die komplette Referenzeinheit sind über den Computer durch kapazitiv geregelte Piezostellenelemente ansteuerbar.

Im DUV erfolgt die Abbildung über Kittobjektive $150\times/0,9$. Wahlweise stehen eine $1\times$, $2\times$ oder $6\times$ Nachvergrößerung zur Verfügung. Eine Frame Transfer CCD-Kamera (Hamamatsu, C8000-10) mit hoher DUV-Empfindlichkeit von ca. 70% bei $\lambda = 248$ nm dient zur Bildaufnahme. Mit einer Pixelgröße von $14\ \mu\text{m} \times 14\ \mu\text{m}$ ergibt sich je nach verwendeter Nachvergrößerung eine digitale Auflösung im Objektraum zwischen 93 nm und 16 nm. Im VIS stehen eine Reihe von Objektiven zu Verfügung. Für die Linnik-Interferometrie wird ein abgestimmtes Objektivpaar (PL APO 250x/0,95) verwendet. Durch eine aufsetzbare Nachvergrößerung aus niedervergrößerndem Objektiv (PL FL 1,6x/0,05) und Tubuslinse ist eine Gesamtvergrößerung bis $1000\times$ und gleichzeitig ein externer Eingriff in die Pupille des Abbildungsstrahlengangs möglich.

6.2 Bildgebende Polarimetrie im DUV

Im DUV ist die Auswahl polarisationsoptischer Komponenten stark eingeschränkt. Organische Materialien werden in diesem Spektralbereich zerstört oder sind polarisationsoptisch nicht wirksam. Weder Polaroidpolarisatoren noch LCDs können für polarimetrische Experimente im DUV eingesetzt werden. Das in dieser Arbeit aufgebaute Imaging-Polarimeter greift im DUV daher auf Kristalloptiken wie Glan-Thompson-Polarisatoren und Retarder aus Quarz zurück.

Die im folgenden Kapitel beschriebenen Experimente konzentrieren sich auf die Vermessung der Polarisations-eigenschaften, die dem Lichtwellenfeld durch Mikrostrukturen in der mikroskopischen Bildentstehung aufgeprägt werden. Diese werden durch das ortsaufgelöste Stokes-Vektorfeld oder vollkommen äquivalent dazu durch das Kohärenzmatrixfeld erfasst. Um die grundlegenden Wechselwirkungseigenschaften zu untersuchen, wurde die Polarisation der Beleuchtung zwar zur Kontrastverstärkung definiert vorgegeben, aber in den Experimenten nicht variiert. Das Messverfahren ist daher der passiven Imaging-Polarimetrie zuzuordnen.

6.2.1 Messverfahren

Das Messverfahren beruht auf dem Prinzip der *Rotating-Compensator-Ellipsometry* und bedient sich Fourier-analytischer Auswertalgorithmen. Es wurde erstmals von Hauge [367] vorgestellt und greift im Kern des Auswerteverfahrens auf Arbeiten von Budde [368] und Aspnes [369] zurück. Die Erweiterung dieses Messprinzips auf ein aktives Müller-Matrix-Polarimeter ist ohne weiteres möglich und wurde in [345] zum ersten Mal beschrieben.

Die Vermessung der Kohärenzmatrix beruht auf einer schrittweisen Rotation eines Retarders mit nachfolgenden Analysator. Wählt man den Retarder als $\frac{\lambda}{4}$ -Platte und die Orientierung der Durchlassrichtung des Analysators wie auch die der schnellen Achse des Retarders unter 45° zum xy-Koordinatensystem, so ergibt sich bei Rotation des Retarders folgendes Intensitätssignal:

$$\begin{aligned}
I(\theta_R) &= \left(+\frac{1}{8}iE_{xx} - \frac{1}{8}iE_{yy} + \frac{1}{8}E_{xy} + \frac{1}{8}E_{yx} \right) \exp(+4i\theta_R) \\
&+ \left(-\frac{1}{8}iE_{xx} + \frac{1}{8}iE_{yy} + \frac{1}{8}E_{xy} + \frac{1}{8}E_{yx} \right) \exp(-4i\theta_R) \\
&+ \left(-\frac{1}{4}E_{xy} + \frac{1}{4}E_{yx} \right) \exp(+2i\theta_R) + \left(\frac{1}{4}E_{xy} - \frac{1}{4}E_{yx} \right) \exp(-2i\theta_R) \\
&+ \frac{1}{2}E_{xx} + \frac{1}{2}E_{yy} + \frac{1}{4}E_{xy} + \frac{1}{4}E_{yx}
\end{aligned} \tag{6.1}$$

Hierbei bezeichnet θ_R den Drehwinkel des Retarders im Bezug auf die Durchlassrichtung der Analysators. Gleichung 6.1 lässt sich am einfachsten im Müller-Matrix-Kalkül ableiten. Entspricht die Kohärenzmatrix dem Stokes-Vektor \mathbf{s} und verwendet man die Müller-Matrizen für den Polarisator \mathbf{M}_{Pol} und den Retarder $\mathbf{M}_{\mathcal{R}}$ aus [228], so lässt sich der Messprozess des PSA mit $\mathbf{s}_{PSA} = \mathbf{M}_{Pol}\mathbf{M}_{\mathcal{R}}\mathbf{s}$ beschreiben. Das Intensitätssignal $I(\theta_R)$ ist dann die erste Komponente des Stokes-Vektors \mathbf{s}_{PSA} . Gleichung 6.1 zeigt eine harmonische Modulation des Intensitätssignals mit den Winkelfrequenzen $0, \pm 2$ und ± 4 . Durch eine Fouriertransformation bekommt man einen linearen Zusammenhang zwischen den zugehörigen Fourier-Koeffizienten $F_{0,\pm 2,\pm 4}$ einerseits und den Elementen der Kohärenzmatrix andererseits. Eine Auflösung des Gleichungssystems nach den Kohärenzmatrixelementen ergibt für die Hauptdiagonalelemente:

$$E_{xx} = F_{(0)} - F_{(+2)} - F_{(-2)} - 2iF_{(+2)} + 2iF_{(-2)} \tag{6.2a}$$

$$E_{yy} = F_{(0)} - F_{(+2)} - F_{(-2)} + 2iF_{(+2)} - 2iF_{(-2)} \tag{6.2b}$$

und für die Nebendiagonalelemente:

$$E_{xy} = 2F_{(+2)} + 2F_{(-2)} - F_{(+1)} + F_{(-1)} \quad (6.3a)$$

$$E_{yx} = 2F_{(+2)} + 2F_{(-2)} + F_{(+1)} - F_{(-1)} \quad (6.3b)$$

Neben der Fourier-analytischen Bestimmung der Kohärenzmatrix in Gleichung 6.2 und 6.3, die im Allgemeinen durch eine schnelle Fouriertransformation erfolgt, ist auch eine analytische Auswertung möglich und insbesondere bei der Aufnahme einer Sequenz von wenigen Bildern interessant [202]. Nach Gleichung 6.1 ist eine Aufnahme von mindestens 3 Bildern mit den Drehwinkeln $\theta_R = [0, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}]$ über eine Halbperiode $[0 \dots \pi)$ für die vollständige Rekonstruktion der Kohärenzmatrix nötig. Hierbei wird schon der Tatsache Rechnung getragen, dass aufgrund des reellen Eingangssignals in Form der Intensität die Fourier-Amplituden positiver und negativer Winkelfrequenzen konjugiert komplex zueinander sind. Durch eine Aufnahme einer dichteren Bilderfolge mit den Drehwinkeln $\theta_R = \frac{\pi}{N}n$ ($n = 0 \dots N - 1$) verbessert sich das Signal-zu-Rausch-Verhältnisses um den Faktor \sqrt{N} , da die Messpunkte durch die Fourier-analytische Auswertung im Sinne der kleinsten mittleren quadratischen Abweichung (Least-Square-Fit) approximiert werden. Darüber hinaus können die durch die Überabtastung gewonnenen zusätzlichen Freiheitsgrade zur Kalibrierung des Messsystems herangezogen werden.

Zu den wesentlichen Vorteilen des vorgestellten Messverfahrens gehören die einfache und schnelle Datenreduktion aus dem gewonnenen Bilderstapel.

6.2.2 Korrekturverfahren

In diesem Abschnitt sollen die Fehlerquellen des in Abschnitt 6.2.1 vorgestellten Messverfahrens erörtert sowie Kalibrier- und Optimierungsstrategien vorgestellt werden, die sich insbesondere aus der Fourier-analytischen Auswertung ergeben. Während sich die folgenden beiden Abschnitte der Grundjustage der polarisationsoptischen Komponenten und des Kamerasystems widmen, geht der dritte Abschnitt auf Probleme ein, die sich durch zeitliche Schwankungen wie Intensitätsfluktuationen und räumliche Drift ergeben. Abschnitt 6.2.2.4 beschreibt verschiedene Quellen für Polarisationsaberrationen im System.

6.2.2.1 Justage des Polarisationszustandsanalysators

Der PSA, bestehend aus einem Retarder und folgendem Analysator, ist die Kernkomponente des Polarimeters. Der Analysator ist dabei die letzte polarisationsoptisch wirksame Komponente im Strahlengang des Messsystems. Seine Durchlassrichtung definiert daher die Bezugsachse für alle übrigen Komponenten. Da einerseits das gemessene Signal I eine reelle Größe und damit $F_{(+1)} = F_{(-1)}^*$ ist, andererseits aber aus Gleichung 6.1 unmittelbar die Beziehung $F_{(+1)} = -F_{(-1)}$ folgt, sind $F_{(\pm 1)}$ rein imaginäre Größen. Ein reeller Restanteil der Fourier-Komponenten $F_{(\pm 1)}$ ist unmittelbar auf eine Verdrehung der Hauptachse des Retarders im Bezug auf die Durchlassrichtung des Polarisators zurückzuführen. Die Forderung rein imaginärer Größen

$$\operatorname{Re}(F_{(\pm 1)}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.4)$$

kann als Kalibriervorschrift für den PSA herangezogen werden. Die Kalibrierung erfolgt entweder durch mechanische Drehung des Retarders, oder sie wird durch eine Software-Korrektur der Fourier-transformierten Daten mit einem Phasenkeil durchgeführt.

6.2.2.2 Rotation des Kamerasystems

Die zweite wesentliche Aufgabe in der Grundkalibrierung des Messsystems besteht in der Ausrichtung der Kamera im Bezug auf die Hauptachsen des PSA. Das Koordinatensystem der Kamera wird so gewählt, dass es unter 45° zur Durchlassrichtung des Analysators steht. Wählt man die Eingangspolarisation ebenfalls unter 45° und energetisch eine radialsymmetrische Ausleuchtung, so muss für einen Spiegel als Messobjekt aus Symmetriegründen gelten:

$$E_{xx} \stackrel{!}{=} E_{yy} \quad (6.5)$$

Aus dieser Forderung ergibt sich mit der (im dejustierten Kamera-Koordinatensystem) gemessenen Kohärenzmatrix der Korrekturwinkel für das Kamerasystem θ_K durch [206]:

$$\tan 2\theta_K = \frac{E_{yy} - E_{xx}}{E_{xy} + E_{yx}} \quad (6.6)$$

Auch hier kann die Drehung anhand von Gleichung 6.6 mechanisch oder in der Auswertesoftware durch eine Drehtransformation der Kohärenzmatrix durchgeführt werden.

6.2.2.3 Fehlerquellen durch zeitliche und räumliche Instabilitäten

Bei allen polarimetrischen Messverfahren beruht die Bestimmung der Kohärenzmatrix im Kern auf dem Vergleich unterschiedlicher photometrischer Messungen. Deshalb äußert sich jede Intensitätsänderung, die nicht unmittelbar auf die Variation des Polarisationszustandes durch den PSA zurückzuführen ist, als Fehler in der polarimetrischen Auswertung. Diese Fehler werden insbesondere durch zeitliche und räumliche Instabilitäten hervorgerufen, aber auch durch ein nicht-lineares Verhalten des Messsystems.

Insbesondere die höheren Winkelfrequenzen bei überabgetasteten Signalen in Gleichung 6.1 liefern weitere Diagnosemöglichkeiten für diese systematischen Fehler im Messsystem. So äußern sich Nichtlinearitäten der Kamerakennlinie oder auch zeitliche Schwankungen der Beleuchtungsintensität in höheren Harmonischen des Fourier-Signals. Durch den Betrieb der Kamera im Linearitätsbereich und durch eine gemittelte Datenaufnahme über mehrere Bilder im Messzyklus konnten bei dem hier vorgestellten System solche Fehler vollkommen vermieden werden.

Neben den zeitlichen Fluktuationen stellen vor allem räumliche Variationen eine wesentliche Fehlerquelle für hoch aufgelöste polarimetrische Messungen dar. Dies gilt insbesondere für kontrastreiche Bereiche im Bild. Bei der Untersuchung von Mikrostrukturen ist dies gerade an messtechnisch interessanten Strukturgrenzen oder Materialübergängen der Fall. Eine räumliche Verschiebung der Bilder innerhalb eines Messzyklus führt in diesen Bereichen zu besonders hohen Fehlern des polarimetrischen Messsignals. Ursachen sind thermische Drift und durch die Drehtische hervorgerufene mechanische Schwingungen. Auch die Bildverschiebung durch den rotierenden Retarder im Abbildungsstrahlengang stellt eine wesentliche Fehlerquelle dar. Um polarimetrische Artefakte aufgrund von Bildverschiebungen auszuschließen, gilt in der bildgebenden Polarimetrie makroskopischer Szenen die Regel, dass die laterale Verschiebung der Einzelbilder nicht wesentlich mehr als $\frac{1}{20}$ der Pixelgröße ist [370]. Bezogen auf die beugungsbegrenzte Abbildung in der hochauflösenden Metrologie sollte die laterale Verschiebung also weniger als $\frac{\lambda}{20}$ betragen. Dies entspricht im DUV etwa 10 – 15 nm. Da allerdings aufgrund der beschriebenen Fehlerquellen eine mechanische Stabilität in diesem Größenordnungsbereich über den gesamten Messzyklus nur mit sehr hohem technischen Aufwand zu gewährleisten ist, wird eine Korrelation der Einzelbilder des Stapels mit Methoden der Bildverarbeitung unerlässlich. In [371] sind unterschiedliche Methoden hierzu zusammengestellt. Für die vorliegende Arbeit wurde die Nachbearbeitung des Bilderstapels mit Matlab-basierten Routinen der normierten

2D-Kreuzkorrelation durchgeführt [372]. Neben der lateralen Drift stellt auch eine Defokussierung während des Messzyklus eine weitere Fehlerquelle dar. Eine numerische Korrektur von Defokusfehlern ist mit Hilfe von Propagationmethoden zwar prinzipiell denkbar, aber aufgrund des Polarisationsgehalts der optischen Bilder nur approximativ und mit hohem Aufwand zu realisieren. Bei der Umsetzung der Messungen wurde daher auf eine genaue Konstanz der Fokusslage geachtet.

6.2.2.4 Polarisationsaberrationen des Systems

Durch das in Abschnitt 6.2.1 beschriebene Messverfahren wird die Kohärenzmatrix unmittelbar vor dem Eintritt in den PSA bestimmt. Jede Änderung des Polarisationszustandes, die bei der Propagation durch das abbildende System bis zum PSA auftritt, stört damit die Vermessung der eigentlichen Polarisationsseigenschaften des Lichtwellenfeldes, das vom untersuchten Objekt ausgeht. Polarisationsaberrationen können vor allem durch das Objektiv und den Strahlteiler verursacht werden.

Im Objektiv werden polarisationsabhängige Aberrationen insbesondere durch die Spannungsdoppelbrechung der gefassten Linsen oder durch intrinsische Doppelbrechung der verwendeten Gläser hervorgerufen. Auch die polarisationsabhängige Transmission an den zahlreichen Grenzflächen im Objektiv führt für hohe Inzidenzwinkel zu Polarisationsaberrationen. Für eine quantitative polarisationsoptische Charakterisierung des verwendeten Objektivs standen weder Designdaten noch messtechnische Möglichkeiten zur Verfügung. Allerdings konnte mit gekreuzten Polarisatoren in Beleuchtung und Abbildung die bekannte vierblättrige Kleeblattstruktur [373] mit hohem Kontrast reproduziert werden. Danach lassen sich zumindest nicht-radialsymmetrische Polarisationsaberrationen vernachlässigen. Das als Analysator verwendete Glan-Thompson-Prisma erzeugt in einem divergenten Strahlbündel neben sphärischer Aberration auch Astigmatismus [373]. Der leichte Divergenzwinkel ($< 1^\circ$) im quasi-parallelen Strahlengang des Mikroskops bewirkt Aberrationen in der Größenordnung von $\frac{\lambda}{100}$ und wird daher vernachlässigt.

Die mit Abstand größte Änderung des Polarisationszustandes wird durch den Strahlteiler (BS in Abb. 6.1) hervorgerufen. Aus den Daten des Schichtdesigns ergibt sich in Transmission eine lineare Diattenuation von $\mathcal{D}_{ps}^{trans} = \frac{T_p}{T_s} = 1,19$ und eine lineare Retardance von $\mathcal{R}_{ps}^{trans} = 5^\circ$. In der verwendeten Messkonfiguration standen die Eigenachsen unter $\pm 45^\circ$ zum Kamerasystem. Der Einfluss des Strahlteilers muss bei einem Abgleich von Mess- und Simulationsdaten berücksichtigt werden.

Im Beleuchtungsstrahlengang wird neben dem Strahlteiler ($\mathcal{D}_{ps}^{refl} = \frac{R_p}{R_s} = 0,79$ und $\mathcal{R}_{ps}^{refl} = 6^\circ$) ein weiterer Umlenkspiegel (Linos, DLHS-248) verwendet. Dieser hat zwar eine schwache Diattenuation ($\mathcal{D}_{ps}^{refl} = 0,97$) aber eine starke Retardance von $\mathcal{R}_{ps}^{refl} = 28^\circ$. Um den Einfluss beider Elemente auf den Beleuchtungszustand zu minimieren, wurde in den Experimenten linear polarisiertes Licht entlang den (gleichorientierten) Eigenpolarisationen beider Elemente verwendet.

7 Bildgebende Polarimetrie an Mikrostrukturen

Die gewinnbringende Anwendung der Polarisierung ist aus klassischen Gebieten der Mikroskopie und Konoskopie gut bekannt. Während in der Kristallographie quantitative Aussagen über die Kristallstruktur möglich werden, dienen polarisationssensitive Messungen in biologischen Anwendungen insbesondere zur Kontrastverstärkung. In der optischen Kohärenztomographie zum Beispiel werden durch die Kombination mit polarimetrischen Verfahren erheblich höhere Kontraste bei der tiefenaufgelösten Darstellung von biologischem Gewebe erzielt als mit herkömmlichen Methoden [374–376].

Auch bei der Charakterisierung und Vermessung technischer Oberflächen wird die polarisationssensitive Information des Reflexions- und Streuprozesses an Oberflächen in zunehmendem Maße messtechnisch genutzt. So lässt der Polarisationszustand der spekularen Reflexion an glatten Oberflächen Aussagen über deren Form und Orientierung zu [377, 378]. Mikroellipsometrische Messungen [349, 379, 380] erlauben die orts aufgelöste Bestimmung der Brechungsindexverteilung und damit die Korrektur materialinduzierter Phasenänderungen in der Oberflächenprofilometrie [381–384].

Darüber hinaus lassen sich die diffusen Streueigenschaften unterschiedlicher Materialien eines Objektes und die damit einhergehende Depolarisation zur Objektcharakterisierung und zur kontrastreicheren Darstellung nutzen [385, 386]. Polarisationsgefilterte Messungen sind auch für die Bildgebung durch trübe Medien interessant. Durch die polarisationsoptische Filterung des vielfach gestreuten und damit stark depolarisierten Untergrunds wird der Kontrast im Bild signifikant verstärkt [387, 388]. Die kombinierte Messung der Depolarisation und der Wellenfront eines optischen Systems liefert die Möglichkeit, den kohärenten Transfer einer Wellenfront durch das System von einem diffusen Streuuntergrund zu trennen [389].

In Abgrenzung zu anderen Verfahren macht die Polarimetrie unmittelbar die Vektornatur

des Lichts sichtbar. Diese wird durch die Messung der Polarisationsinformation im Bild erfasst. Die Änderung des Vektorzustands ist Ausdruck der elektromagnetischen Wechselwirkung zwischen dem Lichtwellenfeld und dem untersuchten Objekt. Sie hat großen Einfluss auf die Bildgebung, wenn die Strukturgrößen des Objekts im Bereich der Wellenlänge oder gar darunter sind. Die bildgebende Polarimetrie ermöglicht also gerade in der hochauflösenden Metrologie einen tiefen Einblick in die physikalisch-optischen Effekte der mikroskopischen Bildentstehung.

Insbesondere in der hochauflösenden Metrologie spielen strukturinduzierte Doppelbrechungseffekte eine bedeutende Rolle in der Bildentstehung [390]. So kann die polarisationsensitive Kantenwechselwirkung zur kontrastreichen Darstellung von Linienstrukturen genutzt werden [391–393]. In der Sublambdametrologie wird die starke Polarisationsabhängigkeit der Licht-Struktur-Wechselwirkung an Linienstrukturen gar zum Schlüssel neuartiger Messverfahren: Die polarisationsinterferometrische, beziehungsweise ellipsometrische Vermessung der Strukturen erlaubt, das modellbasierte Rekonstruktionspotential tief in den Sublambdabereich auszudehnen [394–398].

In diesem Kapitel werden polarimetrische Messungen an Mikrostrukturen vorgestellt, die die Kohärenzmatrix im mikroskopischen Bild vollständig erfassen. Die Information über die elektromagnetische Wechselwirkung, die im polarimetrischen Bild steckt, wird gezielt für metrologische Zwecke eingesetzt. Im Gegensatz zu den bisher bekannten Verfahren der Sublambdametrologie können dabei auch die Kohärenzeigenschaften in der Bildgebung erfasst werden. Diesen kommt im partiell kohärenten Lichtwellenfeld des mikroskopischen Bildes eine wesentliche Bedeutung zu. So sorgen Beugungs- und Streuprozesse an deterministischen wie auch statistisch verteilten Strukturformen für charakteristische Signaturen, die ein erweitertes Potential für die Objektrekonstruktion im Sublambdabereich liefern.

Speziell in der optischen Maskenmetrologie und Wafer-Inspektion führt der Drang zu immer höherer Auflösung genauso wie in der Lithographie zum Einsatz immer kürzerer Wellenlängen. Die folgenden numerischen und experimentellen Untersuchungen konzentrieren sich daher auf den DUV-Spektralbereich bei einer Wellenlänge von $\lambda = 248$ nm. Auch wenn die detaillierte Diskussion insbesondere den speziellen Materialeigenschaften der verwendeten Siliziumproben im DUV Rechnung trägt, lassen sich die hier erarbeiteten Konzepte auf andere Spektralbereiche und andere Materialsysteme ausdehnen.

7.1 Diskussion grundlegender Polarisierungseffekte

Bevor die folgenden Abschnitte auf die Details der Wechselwirkungsphänomene von partiell polarisiertem Licht mit Mikrostrukturen eingehen, sollen einleitend numerische Simulationen die wesentlichen Grundeigenschaften der elektromagnetischen Licht-Struktur-Wechselwirkung demonstrieren. Grundlage ist das in Kapitel 5 beschriebene Simulationsmodell. Wir beschränken uns dabei auf eine lineare, in einer Dimension unendlich ausgehende Strukturkante. An ihr können die fundamentalen physikalisch-optischen Effekte studiert werden, die später auch die Erklärungsgrundlage für weiterführende Untersuchungen liefern. Um eine enge Verknüpfung zu den nachfolgenden Experimenten zu gewährleisten, betrachten wir eine 160 nm hohe Siliziumstufe bei einer Wellenlänge von $\lambda = 248$ nm. Die Beleuchtung erfolgt mit linear polarisiertem, partiell kohärentem Licht. Die numerische Apertur der Beleuchtung ist $NA_{Bel} = 0,9$.

Aufgrund der Symmetrie des zugrunde liegenden Problems zerfällt das Lichtwellenfeld in zwei linear polarisierte Eigenzustände: Der eine steht senkrecht auf der Strukturkante und

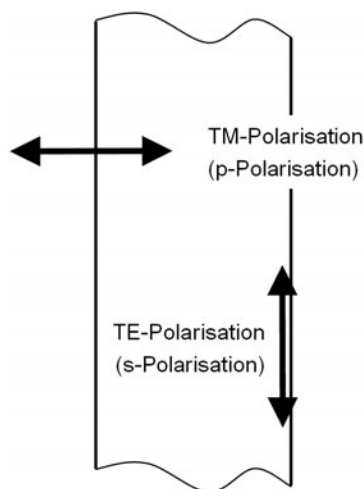


Abb. 7.1: Eigenpolarisationen einer Grabenstruktur (Aufsicht)

korrespondiert zum TM-Fall der Gitterbeugung, während der zweite Eigenpolarisationszustand parallel zur Kante ist und dem TE-Fall entspricht. Die wesentliche Eigenschaft der Eigenpolarisationen der Struktur besteht nun darin, dass beide Zustände durch die Strukturwechselwirkung nicht ineinander überführt werden können. Sie können also als vollkommen unabhängig voneinander betrachtet werden. Das Übersprechen der Polarisationszustände aufgrund der geöffneten Beleuchtungsapertur wird hierbei außer Acht gelassen [373, 399, 400]. Dieser Transfer beruht auf den Gesetzen der dreidimensionalen Vektor-Interferenz und liegt typischerweise deutlich unter einem Prozent [401]. Im vorliegenden Fall kann er gegenüber dem strukturinduzierten Polarisationstransfer vernachlässigt werden. Eine ausführliche Diskussion des strukturinduzierten

Polarisationstrfers sowie der mathematischen Formalismen, in denen diese Effekte effizient beschrieben und interpretiert werden können, erfolgt in Kapitel 8.

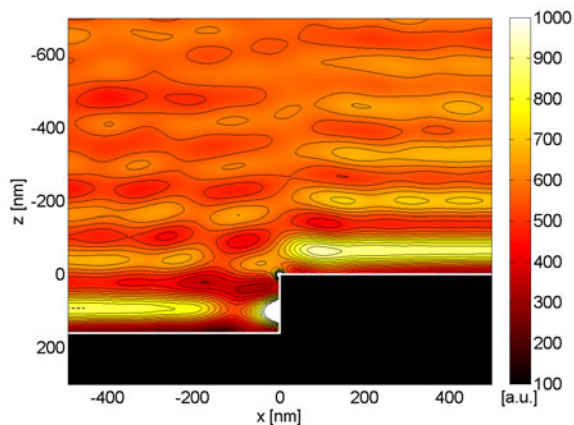
Abbildung 7.2 (a) und (b) zeigen Nahfeld-Simulationen der Siliziumstufe in den beiden Eigenpolarisationszuständen. Im Gegensatz zu seinem dielektrischen Charakter im infraroten oder sichtbaren Spektralbereich verhält sich Silizium bei $\lambda = 248$ nm optisch wie ein

Metall. Dies ist auf eine starke Absorptionsbande im DUV zurückzuführen [195], die auch die geringe Eindringtiefe des Lichts in das Material in diesem Spektralbereich erklärt.

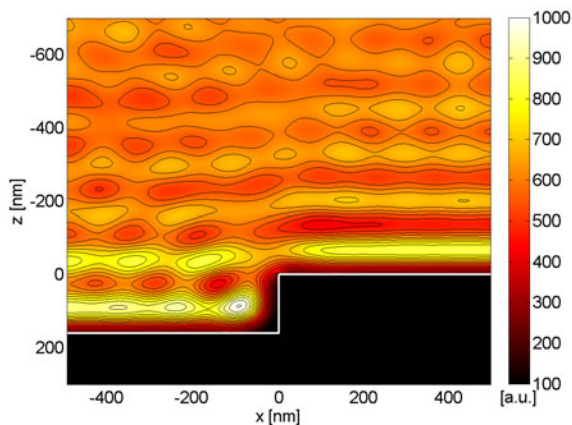
Beide Bilder zeigen die grundsätzlich unterschiedliche Wechselwirkung der beiden Eigenpolarisationszustände mit der Strukturkante. Während die Randbedingungen der elektromagnetischen Felder (siehe Kapitel 2.1) die Stetigkeit des TE-polarisierten elektrischen Feldes am Materialübergang erzwingen, erfährt das TM-polarisierte E-Feld einen Sprung. Dies führt im Nahfeld der Strukturkante einerseits zur Verdrängung des elektrischen Feldes in TE-Polarisation, während in TM-Polarisation andererseits eine ausgeprägte Feldüberhöhung direkt am Materialübergang resultiert. Diese Feldkonzentration verursacht im Falle der TM-Polarisation ein ausgeprägtes Absorptionsverhalten über die komplette Randzone der Kante (Abb. 7.2 (c)). In TE-Polarisation hingegen konzentriert sich die Absorption auf die unmittelbare Eckregion (Abb. 7.2 (d)). Betrachtet man den gesamten Kantenbereich, so wird im TE-Fall nur 51% soviel Energie im Silizium dissipiert wie im TM-Fall.

Dieses völlig unterschiedliche Wechselwirkungsverhalten der Eigenpolarisationszustände im Nahfeld äußert sich auch in einer deutlichen Polarisationsabhängigkeit der korrespondierenden Kantenbilder im Fernfeld. Abbildung 7.2 (e) und (f) stellen TM- und TE-polarisierte Fokussereien einer mikroskopischen Abbildung mit 300-facher Vergrößerung und einer numerischen Abbildungsapertur von $NA_{Abb} = 0,9$ gegenüber. Der Vergleich beider Bilder zeigt zunächst für TM-Polarisation einen mit 58% erheblich höheren Kontrast als für TE-Polarisation (43%). Dies hat zwei Gründe. Zum einem ist die Energieabsorption in TM-Polarisation höher, zum anderen ist in TM-Polarisation das Streuverhalten effizienter, da in diesem Fall das einfallende Licht dem physikalischen Streben des elektrischen Feldes entspricht, bevorzugt senkrecht auf einer metallischen Kante zu stehen.

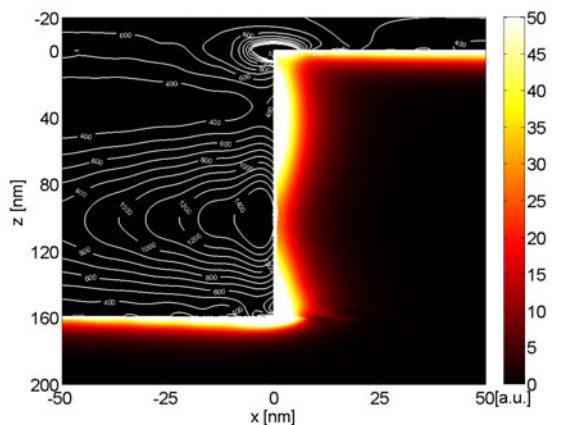
Neben dem Kontrastunterschied sind auch deutliche Differenzen in den Positionen der Intensitätsminima zu beobachten. Bei der Abbildung reiner Phasenobjekte werden Intensitätsminima typischerweise zur Lokalisierung der Kantenposition und zur Linienbreitenmessung herangezogen [1, 402]. Während in TE-Polarisation die Position des Intensitätsminimums sehr gut mit der Kantenposition übereinstimmt ($\Delta x_{TE} = -10$ nm), kommt es in TM-Polarisation zu einer deutlichen lateralen Verschiebung des Minimums um $\Delta x_{TM} = -82$ nm. Ähnliche Unterschiede weist auch die optimale Fokusposition auf, die durch die maximale Flankensteilheit im Intensitätssignal bestimmt wird. Im Bezug auf die Oberkante der Siliziumstruktur liegt sie in TE-Polarisation bei $\Delta z_{TE} = 47$ nm, in TM-Polarisation hingegen bei $\Delta z_{TM} = 115$ nm.



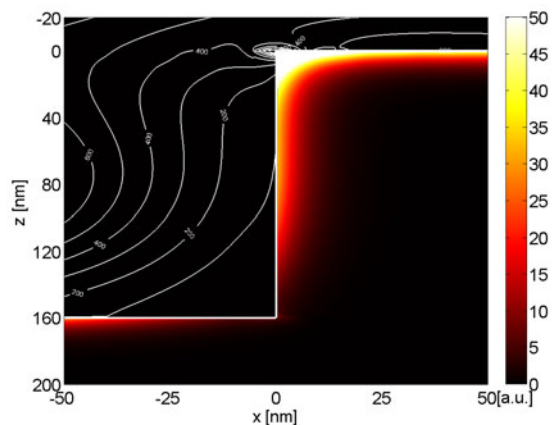
(a) Nahfeld: $|\vec{E}|^2$ für TM-Polarisation



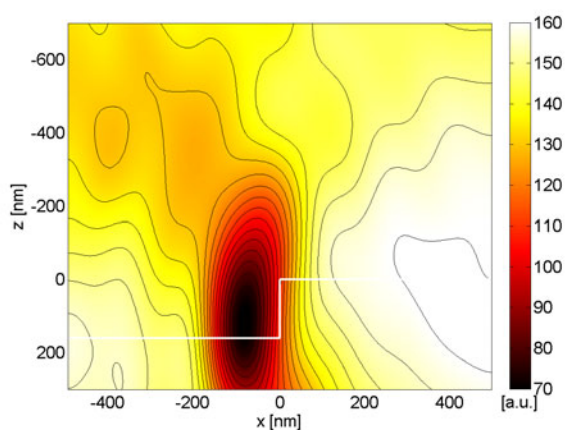
(b) Nahfeld: $|\vec{E}|^2$ für TE-Polarisation



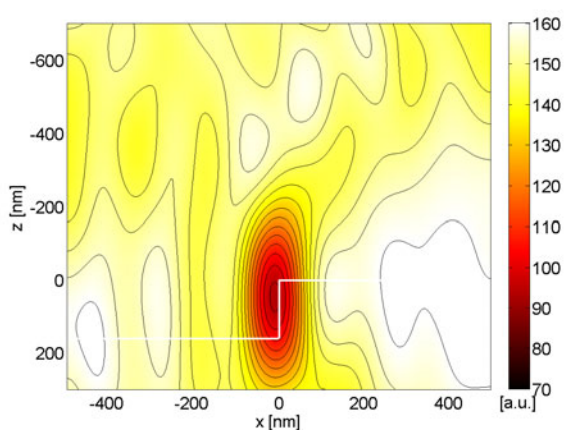
(c) Energiedissipation: TM



(d) Energiedissipation: TE



(e) Fokussierung: $|\vec{E}|^2$ für TM-Polarisation



(f) Fokussierung: $|\vec{E}|^2$ für TE-Polarisation

Abb. 7.2: Vergleich der polarisierten Nah- und Fernfelder einer Siliziumkante mit 160 nm Höhe. Die Beleuchtung erfolgt mit den Eigenpolarisationszuständen der Strukturkante in TE- und TM-Polarisation.

Dieses unterschiedliche Wechselwirkungsverhalten äußert sich nicht nur in drastischen Abweichungen bei der optischen Linienbreitenmessung, sondern bildet auch die physikalische Grundlage für die Evaluation und messtechnische Nutzung dieser Effekte in der Kohärenzmatrix-Mikroskopie.

7.2 Kohärenzmatrix-Mikroskopie an Silizium-Kanten

Durch die Kohärenzmatrix-Mikroskopie können Einflüsse der elektromagnetischen Wechselwirkung auf das mikroskopische Bild sichtbar gemacht werden. Der folgende Abschnitt konzentriert sich auf experimentelle Untersuchungen an linienartigen Strukturen. Abbildung 7.3 zeigt die mit einem Rasterkraftmikroskop (AFM) vermessene Topographie

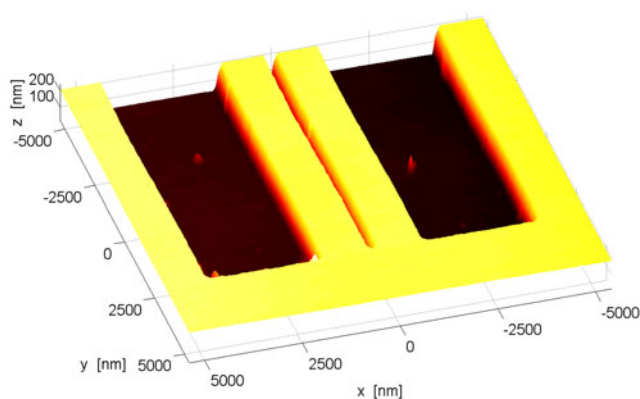


Abb. 7.3: Topographie der Struktur in Silizium.

der Struktur. Alle angegebenen geometrischen Daten wurden der AFM-Messung entnommen. Der zentrale Graben ist ca. 360 nm breit und verjüngt sich zum Ende der Struktur auf 330 nm Breite. Die zwei balkenförmigen Erhebungen haben eine Breite von jeweils 1020 nm. Die Tiefe der Struktur beträgt 160 nm. Durch den Spitzenradius der AFM-Sonde von ca. 10-15 nm¹ sind die lateralen Topographiedaten mit einer entsprechenden

Unsicherheit behaftet. Die AFM-Spitze hat typischerweise einen halben Öffnungswinkel von 20-30°. Dies entspricht auch der gemessenen Flankensteilheit von über 60°. Die realen Strukturflanken müssen also steiler als 60° sein.

Die mikroskopischen Messungen wurden mit dem in Kapitel 6 beschriebenen Messsystem durchgeführt. Die Wellenlänge betrug $\lambda = 248$ nm mit einer spektralen Breite von $\Delta\lambda \leq 4$ nm. Die Struktur wurde linear polarisiert unter 45° relativ zur Grabenkante mit voller Apertur ($NA_{Bel} = 0,9$) beleuchtet. Die Abbildung ($NA_{Abb} = 0,9$) erfolgte mit 900-facher Vergrößerung. Aufgrund dieser hohen Vergrößerung liegt im Bildraum ein quasi-kollimiertes Lichtwellenfeld mit einem Öffnungswinkel von weniger als 0,2° vor. Daher kann

¹Die Daten der AFM-Sonde wurden den Datenblättern des Herstellers (Nanosensors, Typ NCL) entnommen.

im hoch vergrößerten mikroskopischen Bild die z-Komponente des Lichtwellenfeldes längs der optischen Achse vernachlässigt und die Polarisations-eigenschaften des vom Objekt gestreuten Lichtwellenfeldes in sehr guter Näherung durch die zweidimensionale Kohärenzmatrix beschrieben werden.

Für die polarimetrische Messung wurde ein Stapel von 16 Bildern aufgenommen. Die Auswertung auf Basis des in Kapitel 6 beschriebenen Verfahrens liefert die ortsauflöste Kohärenzmatrix. Sie ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Um die komplexwertige Größe $E_{xy} = \langle E_x E_y^* \rangle$ darstellen zu können, zeigt das (1,2)-Element in Abbildung 7.4 (b) den Realteil und das (2,1)-Element in Abbildung 7.4 (c) den Imaginärteil von E_{xy} .

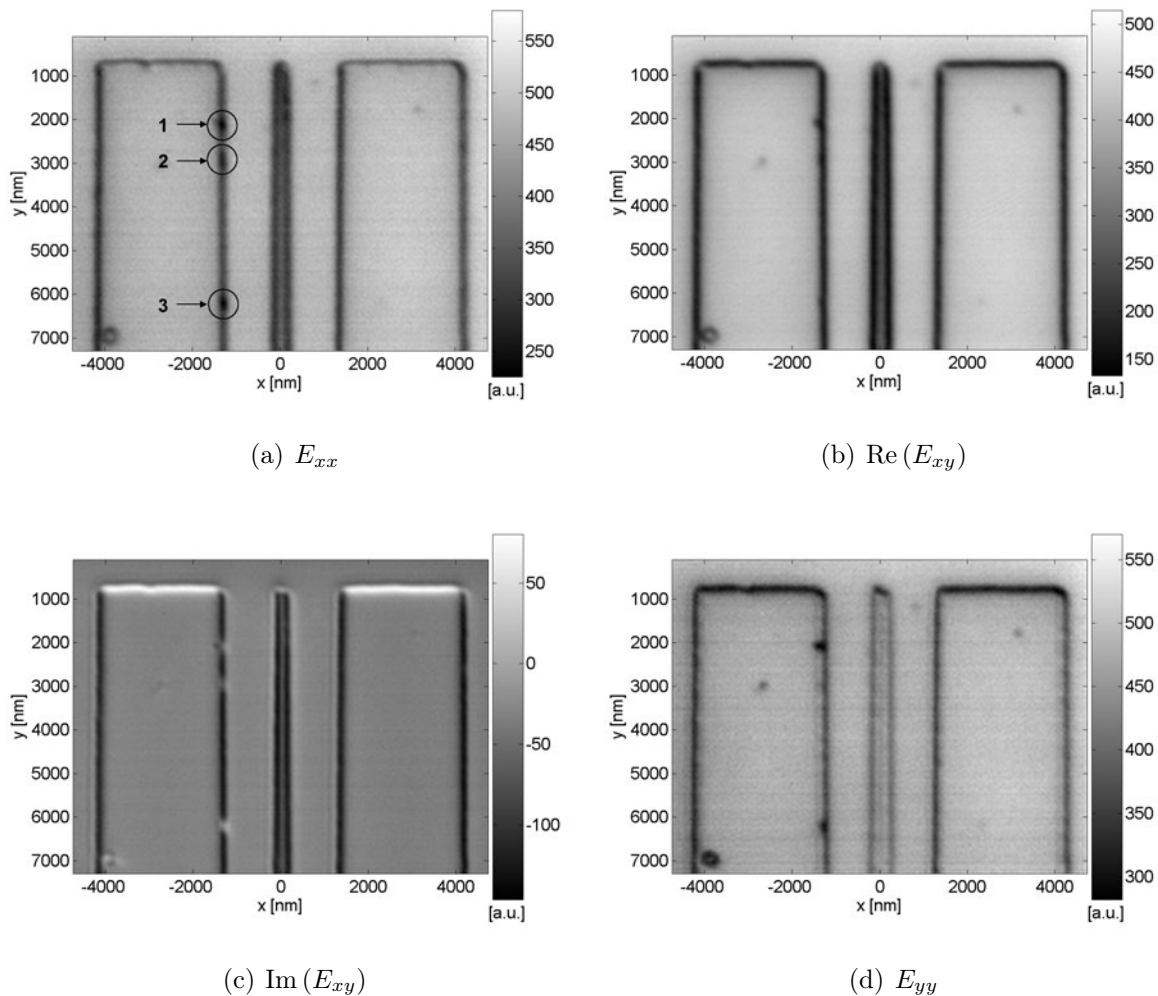


Abb. 7.4: Mit bildgebender Polarimetrie gemessene Kohärenzmatrix der Struktur aus Abbildung 7.3. Da E_{xy} und E_{yx} konjugiert komplex zueinander sind, sind im (1,2)-Element und im (2,1)-Element der Realteil bzw. der Imaginärteil von E_{xy} dargestellt.

Die Hauptdiagonalelemente $E_{xx} = \langle E_x E_x^* \rangle$ und $E_{yy} = \langle E_y E_y^* \rangle$ der ortsaufgelösten Kohärenzmatrix beschreiben den x- beziehungsweise den y-polarisierten Intensitätsanteil im mikroskopischen Bild.

Wie insbesondere an der zentralen Grabenstruktur zu sehen ist, verläuft der Kontrast für den x-polarisierten Feldanteil (senkrecht zum Graben) vollkommen anders als der y-polarisierte Anteil (parallel zum Graben). Dies betrifft die Position und Ausdehnung der Minima sowie auch deren Kontraststärke. Auch an Defekten im Kantenbereich ist das polarisationsabhängige Streuverhalten deutlich zu erkennen. Im x-polarisierten Intensitätsanteil sind drei Defekte mit schwachem Kontrast sichtbar (Abb. 7.4 (a)). Im y-polarisierten Licht hingegen treten der Defekt 1 und 3 stark hervor. Defekt 2 ist kaum zu erkennen (Abb. 7.4 (d)).

Untersucht man die wechselseitige Korrelation $E_{xy} = \langle E_x E_y^* \rangle$ der Polarisationszustände in x- und y-Richtung so werden alle drei Defekte sichtbar. Diese Korrelation wird durch die Nebendiagonalelemente der Kohärenzmatrix in Abbildung 7.4 (b) und (c) repräsentiert und spiegelt direkt die Unterschiede im Wechselwirkungsverhalten des in x- und y-polarisierten Lichts mit der Struktur wider. So zeigen alle drei Defekte insbesondere im Imaginärteil von E_{xy} eine deutliche Signatur.

Die polarisationsoptische Information des vom Objekt gestreuten Feldes kann also gezielt genutzt werden, um Kontraste im Bild zu verstärken, oder gar Unterschiede sichtbar zu machen, die im reinen Intensitätsbild verborgen bleiben. Obwohl zum Beispiel alle drei diskutierten Defekte im reinen Intensitätssignal nicht unterschieden werden können (vgl. Abb. 7.5 (a)), sind sie offensichtlich unterschiedlichen Kategorien zuzuordnen. Diese können von unterschiedlichen Defektformen oder Materialzusammensetzungen herrühren.

Da die Kohärenzmatrix ein partiell polarisiertes Lichtwellenfeld vollständig beschreibt, bildet sie den Ausgangspunkt zur Bestimmung weiterer polarisationsoptischer Größen, die einen genaueren Einblick in die Details der elektromagnetischen Licht-Struktur-Wechselwirkung gewähren. Dies trifft in besonderem Maße auf die hochauflösende optische Abbildung zu, bei der die mikroskopische Bildentstehung stark durch elektromagnetische Effekte bestimmt wird. Die genaue Auswertung dieser Signale bietet das Potential, zusätzliche Strukturinformation im Sublambdabereich zu bekommen. Hierzu gehören die unpolarisierte Gesamtintensität \mathcal{I} genauso wie der Kohärenzgrad $|\mathcal{J}_{xy}|$, die Phase von \mathcal{J}_{xy} und der Polarisationsgrad \mathcal{P} . Diese Größen wurden in Kapitel 4 eingeführt. Abbildung 7.5 zeigt eine räumlich aufgelöste Verteilung dieser Größen im mikroskopischen Bild. Sie wurden aus

der Kohärenzmatrix (siehe Abbildung 7.4) berechnet. Die einfachste Größe, die sich aus der Kohärenzmatrix ableiten lässt, ist die unpolarisierte Gesamtintensität. Sie ergibt sich aus der Spur der Kohärenzmatrix $\mathcal{I} = E_{xx} + E_{yy}$ und entspricht dem Intensitätsbild auf der Kamera, wenn keine polarisationsoptischen Komponenten im Abbildungsstrahlengang enthalten sind. Sie ist in Abbildung 7.5 (a) dargestellt. Wie der Vergleich mit Abbildung 7.4 (a) und (d) zeigt, ist der Informationsgehalt gegenüber den polarisierten Einzelintensitäten E_{xx} und E_{yy} deutlich reduziert.

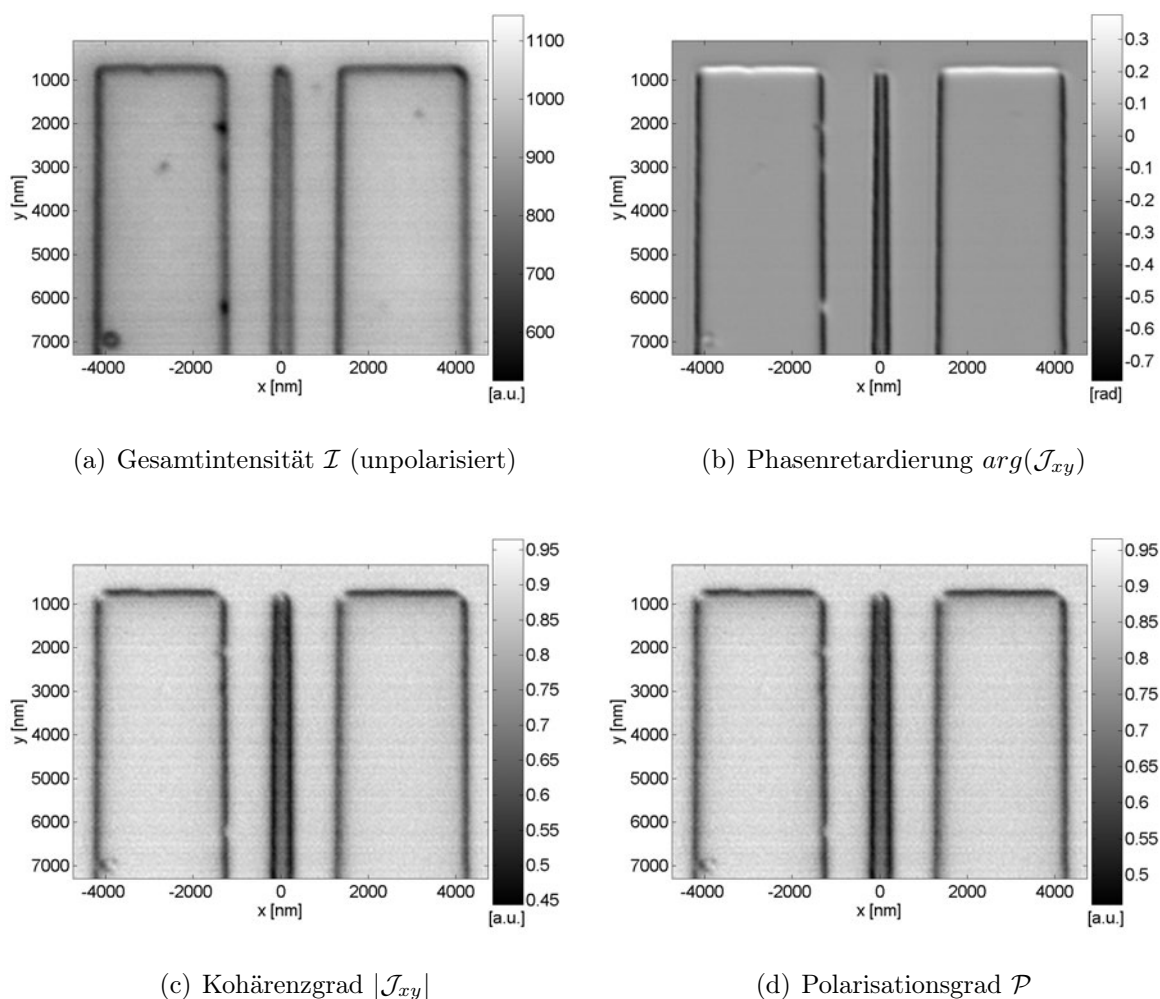


Abb. 7.5: Aus der Kohärenzmatrix in Abbildung 7.4 abgeleitete polarisationsoptische Größen.

Da sich die Eigenpolarisationszustände linienartiger Strukturen in ihrem Wechselwirkungsverhalten fundamental unterscheiden, bildet die wechselseitige Korrelation der Polarisationszustände in x- und y-Richtung \mathcal{J}_{xy} eine weitere Möglichkeit, Strukturinformation über die Kante zu erhalten. Durch die Beugungseffekte an den Strukturkanten geht deren Wech-

selbeziehung bei partiell kohärenter Beleuchtung verloren, sodass ein starker Einbruch des Kohärenzgrades $|\mathcal{J}_{xy}|$ direkt an den Strukturkanten zu beobachten ist (Abb. 7.5 (c)). Die Phase $\arg(\mathcal{J}_{xy})$ von \mathcal{J}_{xy} gibt die relative Phasenretardierung des kohärenten Anteils beider Polarisationszustände an. Sie wird durch die strukturinduzierte Doppelbrechung hervorgerufen und ist daher ebenfalls an der Siliziumkante lokalisiert. Der Rollentausch von TE- und TM-Polarisation an den horizontalen und den vertikalen Kanten führt zu einem Vorzeichenwechsel der jeweiligen Phasenretardierung (Abb. 7.5 (b)).

Ein allgemeines Maß für die depolarisierende Wirkung der Beugung an den Strukturkanten ist der Polarisationsgrad \mathcal{P} . Im Gegensatz zum Kohärenzgrad ist er unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems und daher bei beliebigen Strukturformen dem Kohärenzgrad vorzuziehen. Im vorliegenden Fall wurde der Eingangspolarisationszustand unter 45° zu den Strukturkanten gewählt. Dadurch stimmt der Polarisationsgrad mit dem Kohärenzgrad überein – abgesehen von kleinen Abweichungen im Kantenbereich, die durch die Diattenuation hervorgerufen werden.

7.3 Physikalischer Ursprung polarisationsoptischer Signaturen

Der vorangegangene Abschnitt lieferte den experimentellen Nachweis, dass die mikroskopische Abbildung von Mikrostrukturen im partiell kohärenten Lichtwellenfeld mit einem starken Verlust des Kohärenzgrades und des Polarisationsgrades an den Strukturflanken einhergeht. Darüber hinaus ist das unterschiedliche Wechselwirkungsverhalten der Eigenpolarisationszustände mit der Strukturkante die Ursache für die relative Phasenretardierung zwischen beiden Zuständen. Alle diese polarisationsoptischen Signale, die sich aus der flächenhaft gemessenen Kohärenzmatrix ableiten lassen, sind unmittelbar auf die Streuprozesse an den Strukturkanten zurückführen. Sie bieten daher inhärent das Potential, über eine detaillierte Auswertung der polarisationsoptischen Signale zusätzliche Strukturinformation über die Kanten im Sublambdabereich zu bekommen, ohne sie im eigentlichen Sinne auflösen zu müssen. Hierzu gehören deterministische Größen wie Kantensteilheit und Form genauso wie statistische Größen wie die Kantenrauheit.

Um den tieferen physikalischen Ursprung der polarisationsoptischen Signaturen zu verstehen, ist zunächst die Frage zu klären, welchen Einfluss die Details der elektromagnetischen Wechselwirkung an den Strukturkanten auf die polarisationssensitive Bildentstehung

ung im Mikroskop haben. Im Hinblick auf die Trennung dieses Einflusses von den reinen Beugungseffekten im mikroskopischen Bildentstehungsprozess wird im Folgenden ein Vergleich von vollständig rigorosen Rechnungen unter Nutzung der RCWA und semi-rigorosen Rechnungen unter Nutzung der VKA durchgeführt. Abbildung 7.6 zeigt eine Gegenüberstellung der Nahfelder sowie der zugehörigen Fokussereien an der schon im Abschnitt 7.1 untersuchten Siliziumkante in TE-Polarisation. Die Nahfelder wurden für eine Beleuchtung mit einer senkrecht einfallenden Planwelle berechnet. Während in der RCWA die elektro-

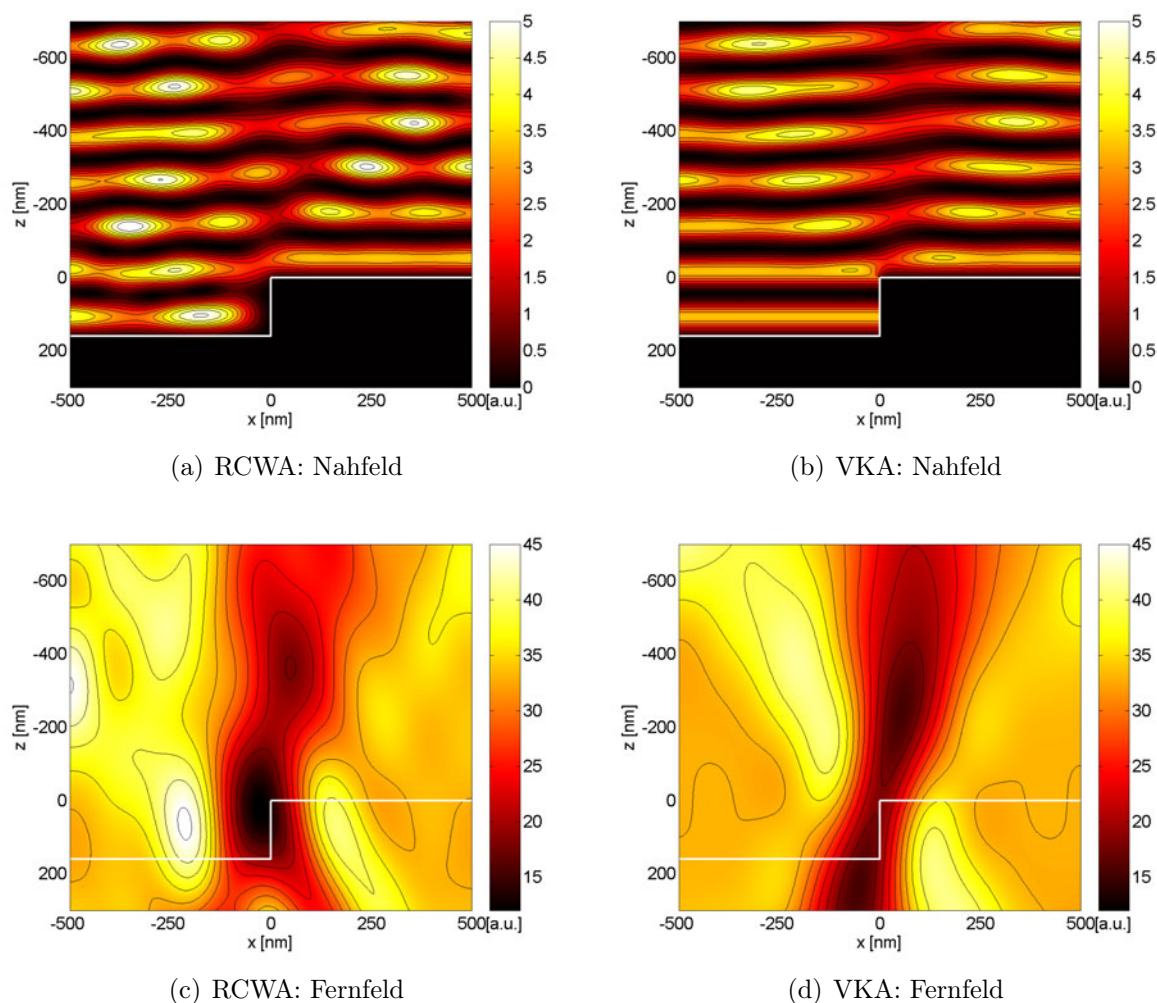


Abb. 7.6: Vergleich der Nah- und Fernfelder der Siliziumkante in TE-Polarisation. Die Bilder (a) und (c) wurden mit der RCWA berechnet, die Bilder (b) und (d) wurden mit der VKA berechnet.

magnetischen Wechselwirkungseffekte an der Siliziumkante durch die vollständig rigorose Rechnung berücksichtigt sind und sich in der Verdrängung des TE-polarisierten Feldes an der Kante äußern (Abb. 7.6 (a)), werden diese Effekte in der semi-rigorosen Theorie vollständig unterdrückt (Abb. 7.6 (b)). In diesem Fall werden durch die lokale Bestimmung

des Feldes im Sinne der Kirchhoffschen Approximation laterale Wechselwirkungseffekte vernachlässigt und das gebeugte Lichtwellenfeld aus der lokalen Reflektivität bestimmt [187]. Im Nahfeld reicht daher das elektrische Feld unmittelbar an die Siliziumkante heran. Durch diesen Ansatz wird einerseits dem Beugungsprozess unter vollständiger Berücksichtigung der Polarisation Rechnung getragen und andererseits die lateralen Kopplungseffekte, die sich aus der elektromagnetischen Wechselwirkung des Feldes mit der Kante ergeben, gezielt ausgeschaltet. Durch die Paraxialität des Lichtwellenfeldes im Bildraum ist dessen Transversalität auch im Falle der VKA für hoch beugende Strukturen gewährleistet (siehe Abschnitt 3.5) und der Vergleich der Berechnungen basierend auf RCWA und VKA liefert unmittelbar den Beitrag der elektromagnetischen Wechselwirkungseffekte zur optischen Bildentstehung.

Die zu den Nahfeldern korrespondierenden Fokussereien im mikroskopischen Fernfeld sind in Abbildung 7.6 (c) und (d) für $NA_{Bel} = 0,4$ dargestellt. Man sieht, dass sich durch die gezielte Ausschaltung der lateralen Wechselwirkungseffekte auch im Fernfeld deutliche Unterschiede ergeben. Während in Abbildung 7.6 (c) das Intensitätsminimum sowohl in der Fokusposition als auch lateral an der Siliziumkante positioniert ist und einen hohen Kontrast aufweist, fehlt ein vergleichbares Intensitätsminimum in dem mit der VKA berechneten Bild (Abb. 7.6 (d)). Hier kommt es zu einer Aufspaltung in zwei Nebenminima, die eine vertikale Verschiebung von etwa 200 nm zeigen und im Kontrast deutlich reduziert sind.

Noch drastischer fallen jedoch die Unterschiede in den polarisationsoptischen Größen aus. Sie sind in Abbildung 7.7 als Schnittprofile über die Siliziumkante in Abhängigkeit von der numerischen Apertur der Beleuchtung aufgetragen. Die Fokusposition $z = 0$ befindet sich an der Oberkante der Siliziumstufe. Die grau gefärbten Profile wurden mit der RCWA berechnet, die roten Profile ergeben sich aus der VKA-Rechnung. Während es mit wachsender Beleuchtungsapertur, d.h. sinkendem räumlichem Kohärenzgrad, in den mit der RCWA berechneten Profilen zu einem starken Einbruch im Polarisations- und Kohärenzgrad kommt, zeigen die in der VKA berechneten Bilder kaum eine Signaländerung. Diese Größen sind also fast vollständig auf die laterale elektromagnetische Wechselwirkung an der Kante zurückzuführen. Auch die Phasenretardierung zwischen beiden Polarisationszuständen unterstützt diese These. Als Folge des kohärenten Korrelationsverhaltens zwischen x- und y-Polarisation zeigt die Phase nur eine geringe Abhängigkeit vom räumliche Kohärenzgrad der Beleuchtung. Während es jedoch in den RCWA-Bildern zu einer starken Retardierung an der Kante kommt, fehlt sie in den VKA-Bildern völlig. Die Kohärenzmatrix

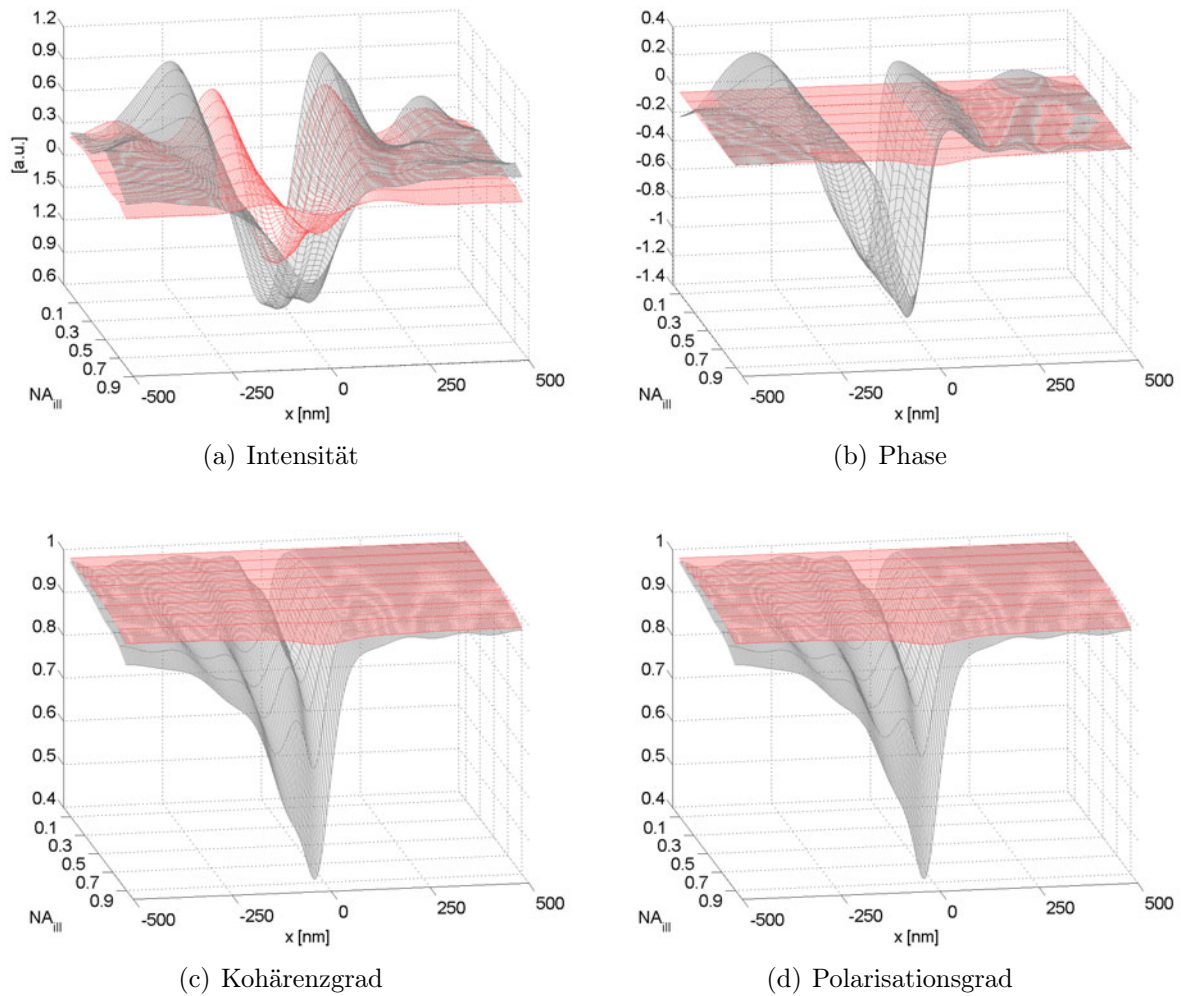


Abb. 7.7: Vergleich der polarisationsoptischen Größen für eine Siliziumkante aus Abbildung 7.6 in RCWA (grau) und VKA (rot).

und die aus ihr abgeleiteten Größen sind also unmittelbarer Ausdruck der elektromagnetischen Wechselwirkung des Lichts mit der Struktur, die im mikroskopischen Bild durch polarimetrische Verfahren sichtbar gemacht werden können. Elektromagnetische Wechselwirkungseffekte wiederum zeigen insbesondere im Mikro- und Nanometerbereich eine hohe Sensitivität auf Materialzusammensetzung, Größe und Form der untersuchten Struktur. Diese Größen stehen im Zentrum des Interesses bei der Vermessung technischer Oberflächen. Die Kohärenzmatrix-Mikroskopie liefert also die Möglichkeit, durch gezielte Nutzung der Polarisationssignaturen im optischen Bild Strukturdetails im Sublambdabereich zu visualisieren.

7.4 Rekonstruktionspotential der bildgebenden Polarimetrie

Die vorangegangenen Abschnitte zeigten, wie die Kohärenzmatrix-Mikroskopie gewinnbringend zur Visualisierung von Strukturdetails eingesetzt werden kann und legten den Kontrastmechanismus für die polarisationsoptischen Signale offen. Die bisher qualitativ geführte Diskussion wird im folgenden Abschnitt durch einen quantitativen Vergleich zwischen Messung und Simulation ergänzt. Daran anschließend stellt Abschnitt 7.4.2 den Einfluss verschiedener Fehlerquellen in einem realen Messsystem auf die polarisationsoptischen Signale dar. In Abschnitt 7.4.3 wird dann die Abhängigkeit der polarisationsoptischen Signale von verschiedenen Struktureigenschaften durch systematische numerische Simulationen diskutiert.

7.4.1 Vergleich von Messung und Simulation

Abbildung 7.8 stellt für die zwei Balkenstrukturen aus Abbildung 7.3 Messung und Simulation einander gegenüber. Die Messung wurde bereits in Abbildung 7.4 und 7.5 dargestellt und zeigt Linienschnitte entlang $y = 4000$ nm. Für ein besseres Signal-zu-Rausch-Verhältnis wurden die Schnitte über $\Delta y = 500$ nm gemittelt. Als Grundlage der Simulation dienten die Topographiedaten aus Abbildung 7.3 und die Abbildungsparameter des Messsystems, wie sie für die Messung der Kohärenzmatrix in Abbildung 7.4 gewählt wurden. Für den ersten Vergleich wurden in der Simulation senkrechte Flankenwinkel, eine Breite des zentralen Grabens von 350 nm und eine Strukturtiefe von 160 nm angesetzt. Die Polarisationsaberrationen des abbildenden Systems, die durch den Strahlteiler dominiert sind, wurden in die Simulationen einbezogen.

Abbildung 7.8 (a) und (b) zeigen die polarisationsabhängigen Intensitätsverläufe. Die Gesamtintensität $\mathcal{I} = E_{xx} + E_{yy}$ wurde zur besseren Vergleichbarkeit um den Faktor $\frac{1}{2}$ skaliert. Bei der Messung wurden alle Kurven aus ein und demselben Messzyklus rekonstruiert. So ist ein direkter Vergleich möglich, ohne die Abbildungseigenschaften für jedes Bild getrennt zu ändern. Das schon im einleitenden Abschnitt 7.1 diskutierte Wechselwirkungsverhalten der Eigenpolarisationen der Struktur (senkrecht zur Grabenkante $\hat{=}$ TM-Polarisation, parallel dazu $\hat{=}$ TE-Polarisation) führt zu deutlichen Abweichungen in den jeweiligen Intensitätsverläufen. So ergibt sich für TE-Polarisation ein geringerer Kontrast des Intensitätsprofils im Vergleich zur TM-Polarisation, was auf die Verdrängung und eine schwächere

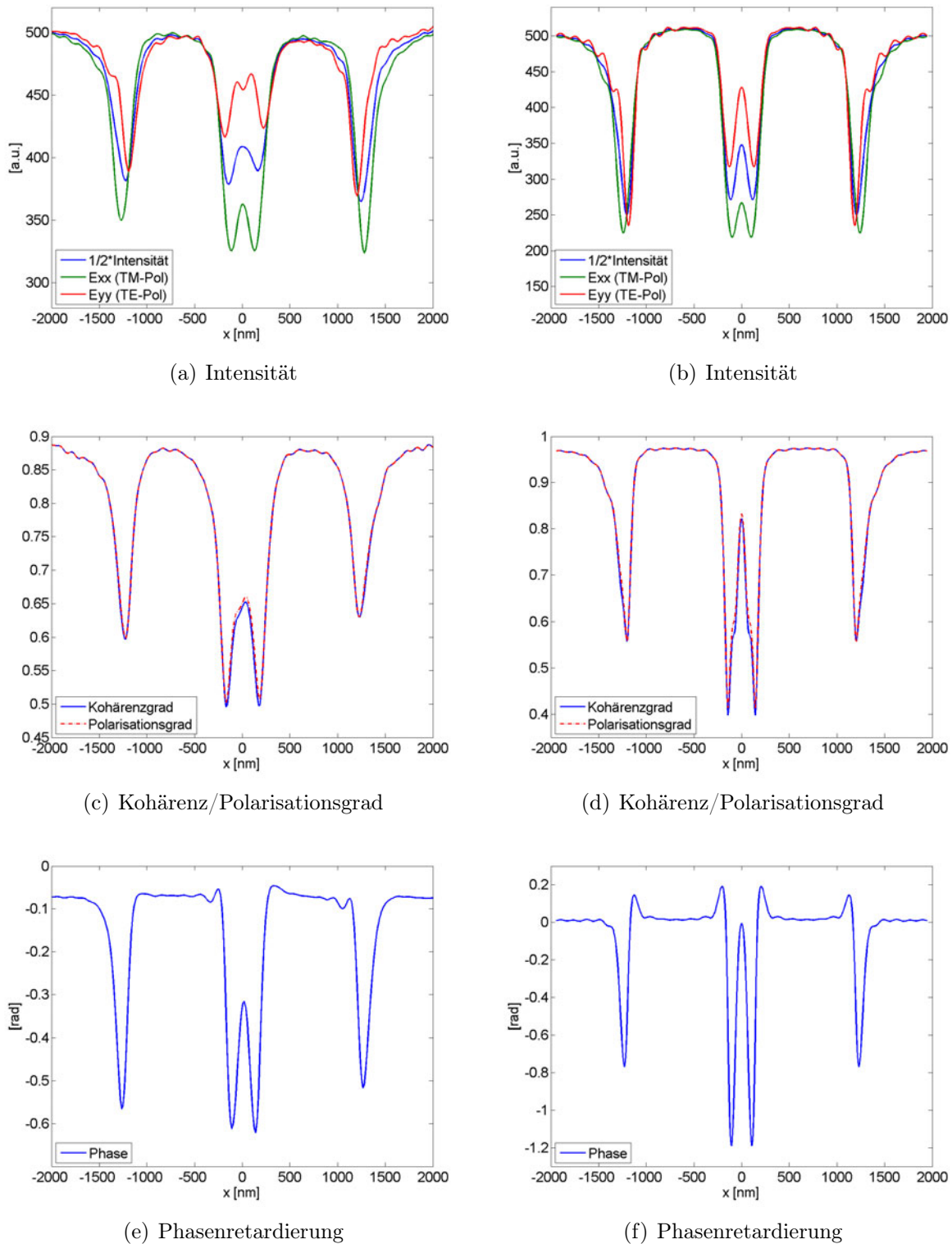


Abb. 7.8: Vergleich von Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) für die Balkenstruktur aus Abbildung 7.3.

Absorption TE-polarisierten Lichts an den Strukturkanten zurückzuführen ist. Diese Annahme wird durch die Tatsache untermauert, dass in TE-Polarisation aufgrund von Vielfachstreuung im Graben (Proximityeffekt) der Kontrast im Grabenbereich im Vergleich zu den singulären Kanten weiter reduziert ist. In TM-Polarisation hingegen ist dieser Effekt deutlich weniger ausgeprägt. Dies zeigen übereinstimmend Simulation und Experiment.

Durch das polarisationsabhängige Wechselwirkungsverhalten variieren auch die Positionen der Intensitätsminima. Diese werden aber üblicherweise bei reinen Phasenobjekten zur Kantendetektion verwendet. Betrachtet man die Einzelkanten und nimmt die x-Position des Minimums der Gesamtintensität als Referenzposition, so zeigt das Minimum des TE-polarisierten Intensitätsverlaufs eine Abweichung von $\Delta x_{TE} = -25$ nm und das TM-polarisierte Minimum eine Abweichung von $\Delta x_{TM} = +38$ nm. Ein negatives Vorzeichen bedeutet dabei „zur Kante hin“, ein positives Vorzeichen „von der Kante weg“. Die gemessenen Intensitätsverläufe reproduzieren dieses Verhalten. Mit $\Delta x_{TE} = -30$ nm, $\Delta x_{TM} = +50$ nm für die linke Kante und $\Delta x_{TE} = -28$ nm, $\Delta x_{TM} = +45$ nm für die rechte Kante liegen die gemessenen Werte allerdings etwas höher als bei der Simulation. In Abhängigkeit des Polarisationszustandes variiert die Kantenposition in der Größenordnung von 60 – 70 nm. Das entspricht einem Viertel der Wellenlänge.

Schon die Betrachtung der reinen Intensitätsprofile macht deutlich, dass die mikroskopische Bildentstehung maßgeblich durch elektromagnetische Wechselwirkungseffekte bestimmt wird. Dies trifft in noch stärkerem Maße für den Polarisationsgrad und den Kohärenzgrad zu. Sie sind in Abbildung 7.8 (c) und (d) aufgetragen. Für die gegebene Eingangspolarisation unter 45° zur Grabenkante wird der Kohärenzgrad $|\mathcal{J}_{xy}|$ maximal und stimmt mit dem Polarisationsgrad bis auf kleine Abweichungen überein. In den unstrukturierten Bereichen erreichen die gemessenen Werte ($|\mathcal{J}_{xy}| \approx \mathcal{P} \approx 0,89$) nicht die Werte der Simulation ($|\mathcal{J}_{xy}| \approx \mathcal{P} \approx 0,97$). Eine Ursache ist ein diffuser Streulichtuntergrund (Flare) im Abbildungssystem beziehungsweise auch der Dunkelstromoffset der Kamera. Der Hauptgrund liegt allerdings in einem leichten Retardierungsfehler im PSA in der Größenordnung von ca. $\frac{6}{1000}\lambda$ (siehe auch folgenden Abschnitt). An den Kanten der Struktur kommt es durch Beugungseffekte zu einer starken Dekorrelation der Polarisationszustände, so dass der Kohärenz- und der Polarisationsgrad starke Einbrüche zeigen. Durch Vielfachstreuung ist der Kontrast im Graben stärker ausgeprägt als bei den isolierten Kanten. Auch hier wird der gemessene Verlauf sehr gut durch die Simulation widerspiegelt. Allerdings sind die simulierten Minima etwa um 0,1 kleiner als die gemessenen. Dies kann durch Retardierungsfehler nicht erklärt werden und ist ein erster Hinweis darauf, dass das idealisierte

Modell perfekter, senkrechter Flanken nicht adäquat die Profilform der realen Struktur beschreibt.

Noch deutlicher fallen die Unterschiede für die Phasenretardierung aus. Sie sind in Abbildung 7.8 (e) und (f) dargestellt. Der Offset in der gemessenen Phase ist auf eine leichte Kippung des Spiegels im Beleuchtungsstrahlengang zurückzuführen. Er hat sonst keinen Einfluss auf das gemessene Phasenprofil. Die Phasenretardierung ist ein empfindliches Maß für die doppelbrechende Wirkung der Kante. Sie wird stark durch deterministische Kenngrößen der Struktur wie Tiefe, Breite und Kantensteilheit bestimmt, aber auch durch statistische Merkmale wie die Kantenrauheit beeinflusst. Die starke Sensitivität auf die Strukturdimensionen zeigt die simulierte Retardierung in Abbildung 7.8 (f) beim Vergleich der singulären Kanten mit dem Grabenbereich. An den Grabenkanten ist die Retardierung um ca. 50% höher als bei der isolierten Kante. Im Gegensatz zur Simulation zeigt das gemessene Phasenprofil diese Unterschiede kaum. Die gemessene Retardierung ist auch deutlich kleiner als die simulierte. Im Grabenbereich ist sie nur etwa halb so groß.

Diese Diskrepanzen zwischen Messung und bisherigem Simulationsmodell lassen den Schluss zu, dass neben dem Kohärenz- und Polarisationsgrad insbesondere auch die Phasenretardierung ein empfindlicher Indikator für reale Strukturmerkmale ist. Hierzu gehören neben den Abmessungen der Struktur Eigenschaften wie Flankensteilheit, Profiltrundungen und Kantenrauheit. Bevor die Abhängigkeit der polarisationsoptischen Signale von verschiedenen Strukturmerkmalen in Abschnitt 7.4.3 genauer untersucht wird, gibt der folgende Abschnitt einen kurzen Überblick über den Einfluss des abbildenden Systems auf die Form der gemessenen Größen.

7.4.2 Einfluss des Abbildungssystems auf die polarisationsoptischen Größen

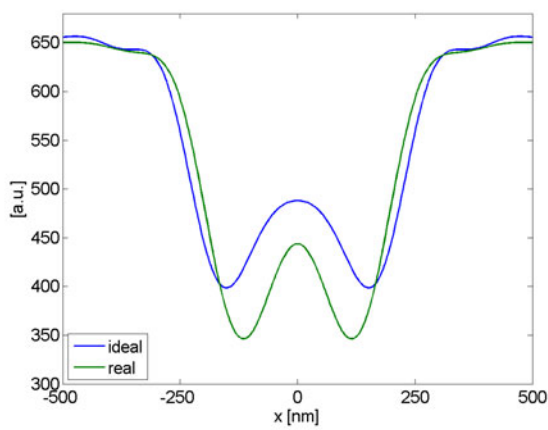
Ganz analog zur klassischen Theorie der mikroskopischen Bildentstehung nach Abbe sind die polarisationsoptischen Größen die Folge von vektoriellen Interferenzeffekten in der Bildebene. Dort entsteht die Vektoramplitude durch eine vektorielle Überlagerung der verschiedenen elektromagnetischen Beugungsordnungen des Objektes, die zur Bildentstehung beitragen. Bei partiell kohärenter Beleuchtung treten zusätzlich Dekorrelationen auf. Es ist daher klar, dass – genauso wie in der klassischen Abbildungstheorie – jede Abweichung des Systems vom idealen Abbildungsverhalten zu einer Änderung der polarisationsoptischen Signale führen muss. Neben den klassischen (skalaren) Aberrationen geht dabei auch das

polarisationsoptische Transferverhalten des Abbildungssystems ein. Eine detaillierte Untersuchung der Abhängigkeit polarisationsoptischer Größen von verschiedenen skalaren Aberrationstypen ist in diesem Rahmen nicht zielführend. Das verwendete Abbildungssystem war mit Restaberrationen von wenigen $\frac{\lambda}{100}$ sehr gut korrigiert. Der Einfluss dieser Fehler auf die polarisationsoptischen Größen ist daher gering.

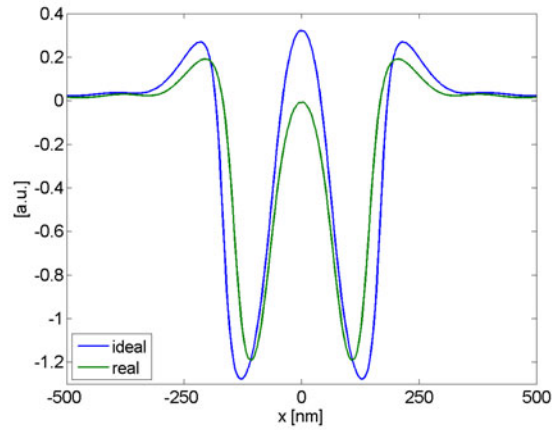
Um einen Eindruck zu gewinnen, wie sich Polarisationsaberrationen des Systems auf die Empfindlichkeit der gemessenen Signale auswirken, sind in Abbildung 7.9 die simulierten polarisationsoptischen Größen des zentralen Grabens der bisher untersuchten Struktur für ein ideales Abbildungssystem und das verwendete Messsystem gegenübergestellt. Im realen Messsystem wurde der Einfluss des Strahlteilers berücksichtigt. Alle dargestellten Größen zeigen eine signifikante Änderung nach Einbringung des Strahlteilers in die Simulation. Will man also die polarisationsoptischen Signale für die optische Metrologie nutzen, ist eine genaue (skalare und polarisationsoptische) Korrektur des Systems nötig. Ist dies nicht möglich, so muss das Messsystem charakterisiert werden, um den Einfluss des abbildenden Systems in die Simulation einbinden zu können. Dies ist eine unabdingbare Voraussetzung für die modellgestützte Rekonstruktion von Strukturdetails aus den polarisationsoptischen Größen.

Ein weiteres Beispiel für die hohen Genauigkeitsanforderungen an die verwendeten Komponenten sind Abweichungen von der vorgeschriebenen Phasenverzögerung des Retarders, der im PSA zum Einsatz kommt. Diese Verzögerungsfehler werden zum Beispiel durch den endlichen Öffnungswinkel des Strahlbündels und durch Temperaturdrift hervorgerufen. Im verwendeten Mikroskopaufbau ist jedoch die Spektralbreite der Beleuchtung Hauptursache des Phasenfehlers. Die Wellenlängenabhängigkeit des Zero-Order-Retarders (Bernhard-Halle, RQZ 4.10) beträgt etwa $-\frac{06^\circ}{\text{nm}}$, woraus sich ein maximaler Fehler von ca. 0,04 rad ($\hat{=} \frac{6}{1000}\lambda$) für eine Spektralbreite von $\Delta\lambda = 4$ nm ergibt.

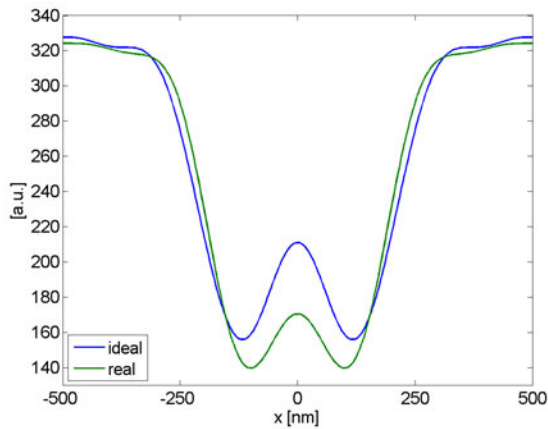
In Abbildung 7.10 sind die polarisationsoptischen Größen eines 330 nm breiten und 160 nm tiefen Grabens in Abhängigkeit vom Verzögerungsfehler aufgetragen. Die Verzögerung des Retarders nimmt dabei ausgehend von einem $\frac{\lambda}{4}$ -Plättchen ab. Um die Kurven zu gewinnen, wurde eine Serie von acht Bildern mit den verschiedenen Stellungen des Retarders simuliert (siehe Gleichung 6.1) und anschließend, wie bei den Messungen mit Gleichung 6.2 und 6.3 ausgewertet. Auch hier wird deutlich, dass die Retardierung genau an die verwendete Wellenlänge angepasst werden muss. Der dargestellte Maximalfehler von 0,08 rad entspricht einem relativen Verzögerungsfehler des Retarders von 1,25%. Der Fehler durch die Spektralbreite von $\Delta\lambda = 4$ nm wird durch die rote Kurve repräsentiert. Alle Graphen



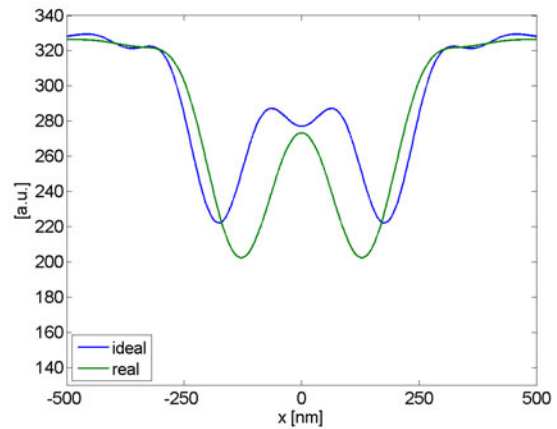
(a) Intensität



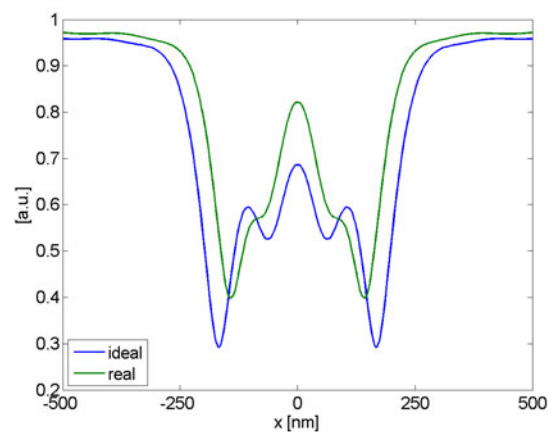
(b) Phasenretardierung



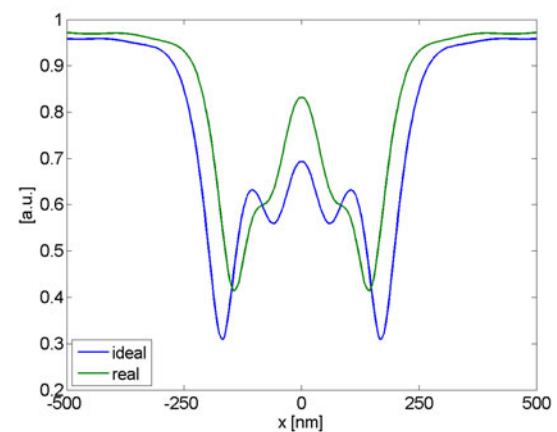
(c) E_{xx}



(d) E_{yy}



(e) Kohärenzgrad



(f) Polarisationsgrad

Abb. 7.9: Unterschied der polarisationsoptischen Signaturen für das verwendete (reale) Messsystem und für ein ideales vollständig aberrationsfreies Abbildungssystem.

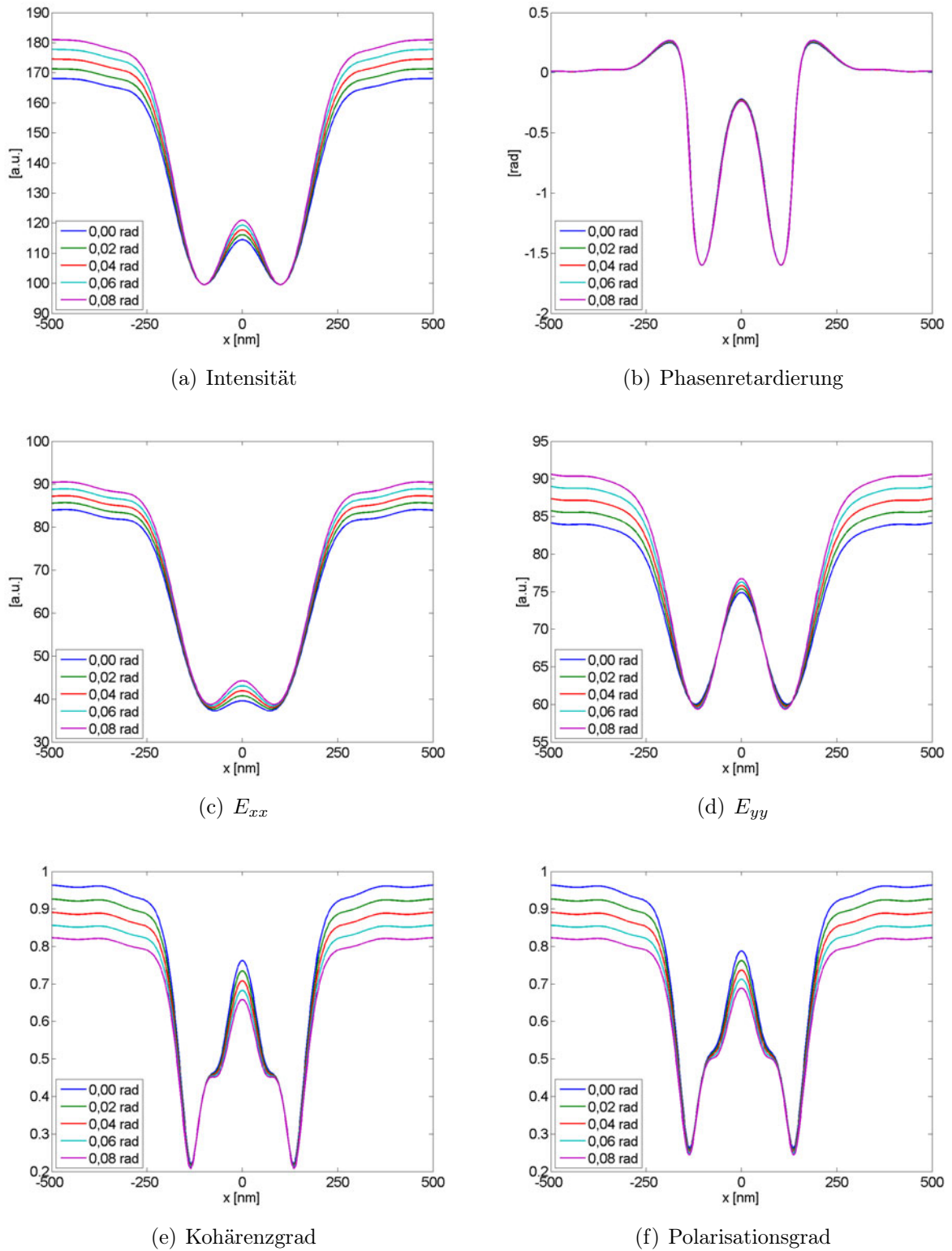


Abb. 7.10: Abhängigkeit der polarisationsoptischen Größen vom Retardierungsfehler des PSA.

zeigen deutlich, dass sich der Retardierungsfehler insbesondere in einem Offset im unstrukturierten Bereich auswirkt. Die Minima an den Kanten bleiben weitgehend unbeeinflusst. Die Phasenmessung zeigt praktisch keine Abhängigkeit vom Retardierungsfehler. Die Reduzierung des Kohärenz- und Polarisationsgrades in der Messung in Abschnitt 7.4.1 kann auch quantitativ sehr gut durch die endliche Spektralbreite der verwendeten Beleuchtung erklärt werden. Die Minima des Kohärenz- und Polarisationsgrades werden dadurch nicht geändert.

Durch eine sorgfältige Auswahl und Justage der polarisationsoptischen Komponenten sowie durch die Einbindung der Restfehler in die Simulation wurden beim Vergleich zwischen Messung und Simulation im letzten Abschnitt die Einflüsse des Abbildungssystems berücksichtigt. Retardierungsfehler erklären den erniedrigten Kohärenz- und Polarisationsgrad in den unstrukturierten Bereichen. Die Abweichung in der Phase und der reduzierte Kontrast im Kohärenz- und Polarisationsgrad können damit allerdings nicht erklärt werden. Die Restabweichungen zwischen den Messergebnissen und der Simulation weisen deutlich auf Diskrepanzen zwischen der realen Struktur und einem idealen Rechteckgraben hin, der Grundlage des Simulationsmodells in Abschnitt 7.4.1 ist.

7.4.3 Abhängigkeit der polarisationsoptischen Signaturen von den Struktureigenschaften

Ausgangspunkt des bisherigen Simulationsmodells sind die Topographiedaten der AFM-Messung aus Abbildung 7.3. Aus den gemessenen Dimensionen wurde ein idealisiertes Modell der Struktur abgeleitet, das aus rechteckförmigen Gräben und Balken in Silizium besteht. Aufgrund des Spitzenradius des AFM-Cantilevers von über 10-15 nm und einem Öffnungswinkel von 20-30° sind die Topographiedaten in ihrer lateralen Ausdehnung mit einer Restunsicherheit von 20-30 nm behaftet. Auch der Kantenwinkel und die Kantenform der Struktur lassen sich durch die Faltung mit der Spitzengeometrie der AFM-Sonde nur auf eine Flankensteilheit von über 60° abschätzen. Andererseits zeigen die AFM-Messungen insbesondere im zentralen Graben eine deutliche Kantenrauheit und eine deutliche Variation der Grabentiefe. Um die Abhängigkeit der polarisationsoptischen Größen von der Strukturform aufzudecken, stellt dieser Abschnitt systematische Simulationen für verschiedene Strukturparameter vor. Der erste Teil konzentriert sich auf deterministische Größen wie Tiefe, Breite und Flankenwinkel der Struktur, der zweite Teil untersucht die Abhängigkeit von der statistischen Kantenrauheit.

Abbildung 7.11 zeigt systematische Simulationen der polarisationsoptischen Größen eines singulären Grabens in Silizium in Abhängigkeit von Grabenbreite und Grabentiefe. Um einen Bezug zu den Messungen herzustellen, wurde für die Simulation eine linear polarisierte, monochromatische Beleuchtung mit $NA_{Bel} = 0,9$ und $\lambda = 248$ nm verwendet. Die Abbildungsapertur betrug $NA_{Abb} = 0,9$ bei 300-facher Vergrößerung. Die Werte der polarisationsoptischen Größen für den bisher diskutierten Graben (Breite 350 nm, Tiefe 160 nm) sind durch Pfeile markiert. Abbildung 7.11 (a) zeigt die polarisationsabhängige

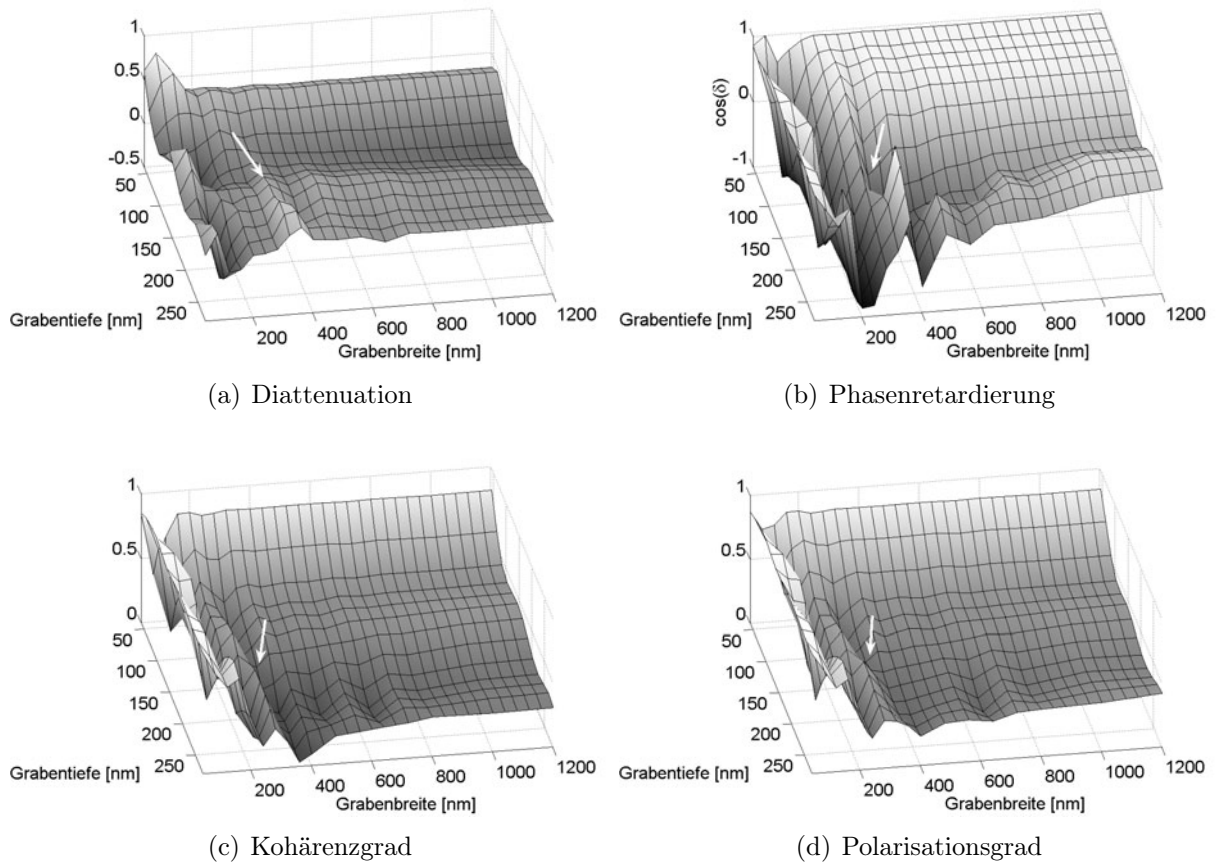


Abb. 7.11: Abhängigkeit der polarisationsoptischen Größen eines Siliziumgrabens von Tiefe und Breite der Struktur. Die Pfeile markieren die nominellen Geometriedaten der Struktur.

Kantenwechselwirkung im Intensitätsbild in Form der Diattenuation. Da TE- und TM-polarisiertes Licht Eigenzustände der Grabenstruktur sind, ist sie im vorliegenden Fall über

$$\mathcal{D} = \frac{\min(\mathcal{I}_{TE}) - \min(\mathcal{I}_{TM})}{\min(\mathcal{I}_{TE}) + \min(\mathcal{I}_{TM})} \quad (7.1)$$

definiert. Für Strukturbreiten, die kleiner als etwa das 1,5-Fache der Wellenlänge sind (Proximitybereich), kommt es durch Vielfachstreuung im Graben zu einer starken Variation der

Diattenuation. Sowohl die Strukturbreite als auch die Strukturtiefe gehen in komplizierter Form in die Diattenuation ein. Nach einem Übergangsbereich (ca. $1,5-2\lambda$) spielen die lateralen Kopplungseffekte eine untergeordnete Rolle und die Diattenuation wird primär durch die Strukturhöhe bestimmt. Für Grabenbreiten $> 2\lambda$ korreliert die wellenförmige Abhängigkeit der Diattenuation von der Grabentiefe auch mit dem oszillatorischen Verhalten der relativen Phasenretardierung in Abbildung 7.11 (b). In diesem Bild ist nicht die Retardance selbst, sondern der Kosinus dieser Größe aufgetragen, um einen glatteren Kurvenverlauf zu erhalten. Sowohl die Diattenuation als auch die Retardance werden in diesem Bereich durch das unterschiedliche Wechselwirkungsverhalten der Eigenpolarisationszustände an der singulären Kante bestimmt. Neben der unterschiedlichen Absorption an der Kante sorgt deren doppelbrechende Wirkung für eine höhenabhängige Phasenverzögerung beider Polarisationszustände, so dass das oszillatorische Verhalten in Abhängigkeit von der Grabentiefe entsteht. Wenn die lateralen Dimensionen im Bereich der Wellenlänge oder darunter liegen, zeigt auch die Phasenretardierung eine komplizierte gekoppelte Abhängigkeit sowohl von der Strukturtiefe als auch von deren Breite.

In Abbildung 7.11 (c) und (d) ist der Kohärenzgrad beziehungsweise der Polarisationsgrad über den Strukturdaten aufgetragen. Als generelle Tendenz lässt sich feststellen, dass beide Größen mit zunehmender Grabenbreite und Grabentiefe deutlich abnehmen. Im Proximitybereich liegt wieder eine stark variierende Abhängigkeit dieser Größen von den Strukturparametern vor.

Die Pfeile in Abbildung 7.11 machen deutlich, dass die optischen Messungen in Abschnitt 7.4.1 stark durch Proximityeffekte dominiert werden und schon kleine Variationen der Strukturparameter zu signifikanten Änderungen in den polarisationsoptischen Signalen führen. Dies trifft aber nicht nur für die dimensionellen Parameter zu, sondern auch für die Kantensteilheit und Kantenrauheit des Grabens. In Abbildung 7.12 ist der Einfluss der Kantensteilheit für einen 330 nm breiten und 160 nm tiefen Graben dargestellt. Die schrägen Flanken wurden durch eine achtstufige Treppenform mit einer Stufenhöhe von jeweils 20 nm angenähert². Bei der Variation des Flankenwinkels bleibt die nominelle Strukturbreite von 330 nm auf halber Höhe (80 nm) konstant. Der Vergleich der Intensitätsbilder (Abb. 7.12 (a), (c) und (d)) zeigt, dass das Intensitätssignal in erster Linie im x-polarisierten Anteil – das heißt senkrecht zur Grabenkante – durch den Kantenwinkel beeinflusst wird. Nicht nur der Kontrast im x-polarisierten Anteil ändert sich signifikant, sondern auch

²Wie exemplarische Vergleichsrechnungen mit einer kleineren Stufenhöhe zeigen, führt auch eine feinere Schichteinteilung zu den gleichen Aussagen.

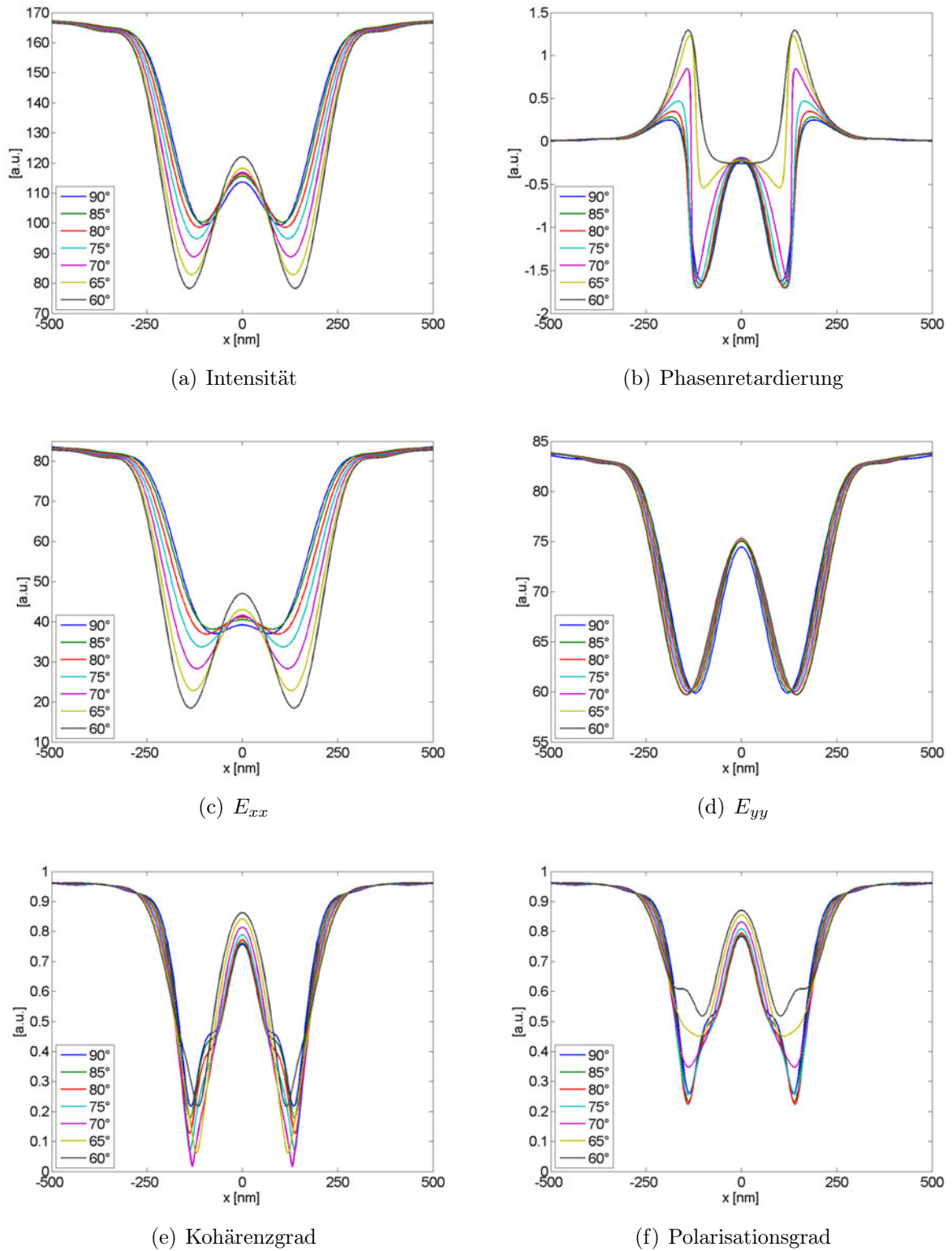


Abb. 7.12: Abhängigkeit der polarisationsoptischen Größen von der Kantensteilheit.

die Position der Intensitätsminima wandert bis zu 60 nm für einen Kantenwinkel von 60° . Dies entspricht fast dem Zweifachen der Positionsverschiebung der Oberkante der Struktur (35 nm bei 60° Flankensteilheit). Der y-polarisierte Anteil hingegen ändert kaum seine Signalstärke. Die laterale Positionsverschiebung der Minima folgt in diesem Fall sehr gut der Strukturoberkante (24 nm bei 60° Flankensteilheit). Dieses Verhalten kann schlüssig durch den Verdrängungseffekt für parallel zum Graben polarisiertes Licht erklärt werden, wie es im y-polarisierten Anteil der Fall ist. Die Wechselwirkung wird dann offensichtlich primär durch die Strukturoberkante bestimmt. Die darunter liegende Kantenform ist zweitrangig für die Signalgenerierung. Der x-polarisierte Anteil hingegen ist an der Strukturkante lokalisiert. Er wird daher stark durch die Flankenform geprägt.

Dieses unterschiedliche Wechselwirkungsverhalten schlägt sich auch in der Abhängigkeit der relativen Phasenverschiebung beider Polarisationszustände nieder (Abb. 7.12 (b)). Insbesondere für niedrige Flankenwinkel zeigt die Retardance eine starke Änderung.

Eine weitere klare Indikation für einen reduzierten Kantenwinkel liefert der Vergleich des Kohärenz- und Polarisationsgrades in Abbildung 7.12 (e) und (f). Für einen senkrechte Strukturkante stimmen beide sehr gut überein. Nimmt der Flankenwinkel ab, so bleibt der Kohärenzgrad deutlich hinter dem Polarisationsgrad zurück. Darüber hinaus ändert insbesondere der Polarisationsgrad seine Profilform an der Kante.

Keht man zum Vergleich von Messung und Simulation in Abbildung 7.8 zurück, so wird deutlich, dass eine sehr hohe Flankensteilheit an den realen Strukturkanten vorliegen muss. Diese Aussage wird durch den übereinstimmenden Kohärenz- und Polarisationsgrad sowie durch das Phasensignal unterstützt. Die relative Phase ist zwar in ihrem Hub reduziert ändert aber nicht ihre Form wie in Abbildung 7.12 (b). Diese Aussage über die Flankensteilheit kann durch eine einfache AFM-Messung aufgrund der Faltungsproblematik nicht gewonnen werden³. Durch die Interpretation der polarisationsoptischen Signale hingegen kann sie schlüssig begründet werden.

Die Empfindlichkeit der polarisationsoptischen Signale auf Strukturdetails im Sublambdabereich führt zur Untersuchung einer weiteren Größe, die technisch von großer Bedeutung ist: die Kantenrauheit. Um deren Einfluss zu simulieren, wurde die Rauheit durch einen

³Um in der Praxis aus AFM-Messungen Aussagen über die Kantenform treffen zu können, wird typischerweise die Strukturform mit sehr spitzwinkligen AFM-Sonden unter einem hohen Neigungswinkel der Probe vermessen. Daher kann innerhalb einer Messung auch nur der Flankenwinkel in einer Orientierung genau bestimmt werden. Für tiefe oder enge Gräben stößt auch diese Möglichkeit an ihre Grenzen. Darüber hinaus sind die so genannten superscharfen Spitzen mit einem Stückpreis von mehreren hundert Euro sehr teuer und in der Handhabung sehr empfindlich.

Polygonzug angenähert. Die Kantenform ist neben dem Intensitätssignal als Hintergrund in Abbildung 7.13 dargestellt. Die Strukturwände stehen senkrecht zum Grabenboden. Die Grabentiefe ist wieder 160 nm. Die einzelnen Punkte des Polygonzugs haben 30 nm Abstand in y-Richtung. Dieser Abstand hat nur untergeordneten Einfluss auf das folgende Ergebnis wie Vergleichsrechnungen mit einer Abtastrate von 50 nm und 100 nm Punktabstand zeigen. Die Abweichung der Polygonpunkte von der nominellen Grabenbreite (330 nm) in x-Richtung wurde durch einen Zufallsgenerator bestimmt. Der Mittelwert

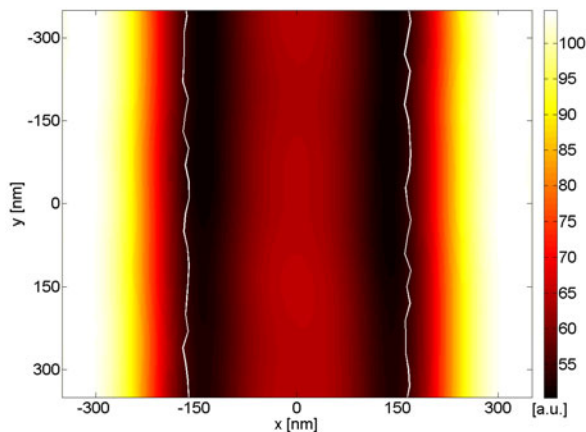


Abb. 7.13: Simulation der Kantenrauheit.

der Grabenbreite blieb dabei konstant. Abbildung 7.14 zeigt die Abhängigkeit der polarisationsoptischen Größen vom RMS-Wert σ_{RMS} der Kantenrauheit. In den Intensitätskurven (Abb. 7.14 (a), (c) und (d)) ist nun ein ganz anderes Verhalten zu beobachten als bei der Reduzierung des Flankenwinkels für eine ideal glatte Kante. Während sich der x-polarisierte Anteil nur geringfügig ändert, steigt der Kontrast im y-polarisierten Anteil mit zunehmender Kantenrauheit stark an. Der Kantenverdrängungseffekt wird offensichtlich durch die anwachsende Rauheit der Kante stark gestört. Daher nimmt auch die Phasenretardierung an den Kanten für $\sigma_{RMS} = 15$ nm um ca. 60% gegenüber einer glatten Kante ab (Abb. 7.14 (b)).

Der Kohärenzgrad und der Polarisationsgrad (Abb. 7.14 (e) und (f)) verhalten sich im Gegensatz zu geneigten Flanken vollkommen äquivalent. Der Kontrast für beide Signale nimmt mit zunehmender Kantenrauheit ab. Dieses Ergebnis verblüfft zunächst, da man eigentlich mit zunehmender Rauheit eine Verstärkung des Kontrastes an den Kanten erwartet. Betrachtet man aber die Ursachen der Dekorrelation genauer, wird dieses Verhalten verständlich: Im partiell kohärenten Lichtwellenfeld wird die Dekorrelation der Polarisationszustände insbesondere durch eine starke selektive Absorption und eine starke Phasenretardierung der verschiedenen Polarisationszustände bewirkt. Dies ist jedoch genau dann am effizientesten der Fall, wenn sich klare Eigenpolarisationszustände an den Kanten ausbilden können. Durch Kantenrauheiten wird jedoch diese Ausbildung gestört. Damit nimmt mit abnehmender Phasenretardierung und Diattenuation⁴ der Kohärenz- und Po-

⁴Diese ergibt sich nach Gleichung 7.1 aus einem Vergleich vom Abbildung 7.14 (c) und (d).

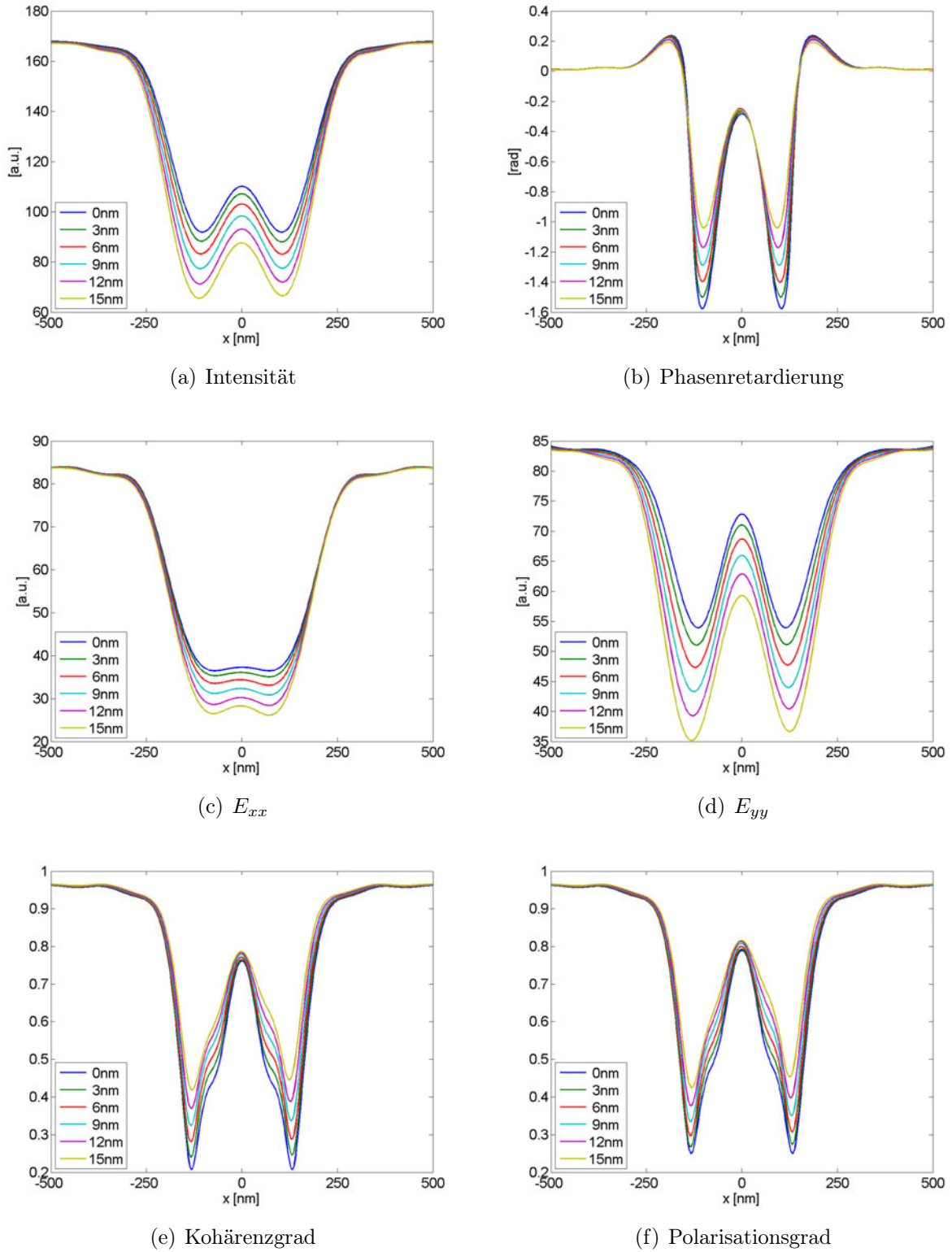


Abb. 7.14: Abhängigkeit der polarisationsoptischen Größen von der Kantenrauheit. Die RMS-Werte σ_{RMS} sind farblich kodiert und variieren zwischen 0 nm und 15 nm.

larisationsgrad an der Strukturkanten zu (siehe Abbildung 7.15). Eine genauere Diskussion dieser Effekte erfolgt in Kapitel 8.



Abb. 7.15: Anschauliche Illustration der gewonnenen Simulationsergebnisse. Die Dekorrelation der gestreuten Polarisationszustände im partiell kohärenten Lichtwellenfeld hängt von der Strukturform ab. Die Dekorrelation nimmt von links nach rechts zu. Grenzfälle: Für eine ideal ebene Oberfläche wird die Phasenretardierung und Diattenuation durch die Fresnelschen Gleichungen bestimmt (links), eine ideale Kante bewirkt eine ausgeprägte Diattenuation und Retardance (rechts).

Die bisherigen Simulationsergebnisse machen deutlich, dass die Restabweichungen zwischen Messung und Simulation in Abbildung 7.8 auf eine nicht zu vernachlässigende Restrauheit der Strukturkanten zurückzuführen ist. Sie lässt sich auf ca. $\sigma_{RMS} = 10$ nm abschätzen. Dieses Ergebnis ist in vollkommenem Einklang mit den AFM-Messungen.

Ein genauer Vergleich der zuletzt vorgestellten Simulationen mit denen einer einfachen Grabenstruktur macht leichte Abweichung in den Simulationsergebnissen deutlich. Die Ursache liegt in den Restungenauigkeiten der Rauheitsrechnungen. Während bei allen vorangegangenen Simulationen ein eindimensionales Gitter Grundlage der Strukturmodellierung war, liegt bei der Rauheitssimulation ein zweidimensionales Gitterproblem vor. Das Beugungsspektrum eines 1D-Gitters lässt sich mit vertretbarem Rechenaufwand sehr genau (Restabweichungen typ. $<0,1\%$) bestimmen. Für das behandelte 2D-Problem wächst der Rechenaufwand enorm an, sodass auch auf dem zur Verfügung stehenden Rechencluster diese Genauigkeit nur mit einem unverträglich hohen Zeitaufwand erreicht werden konnte⁵. Auch wenn sich daher aus den Rauheitssimulationen keine hochgenauen quantitativen Aussagen ziehen lassen, werden die grundlegenden Effekte klar wiedergegeben.

7.4.4 Dekorrelation durch Streuprozesse

Insbesondere durch Beugungs- und Streuprozesse im partiell kohärenten Lichtwellenfeld kommt es zu einer starken Dekorrelation der Polarisationszustände. Hierbei ist zwischen Streuprozessen an deterministischen Strukturen wie Kanten und statistisch verteilten Rauheiten zu unterscheiden. Beide Struktureigenschaften sind von fundamenta-

⁵Für die Rechnungen wurden $[61 \times 21]$ Moden verwendet. Das entspricht im 2D-Fall einer Gesamtmodenzahl von 1281 Moden. Für die 1D-Rechnung genügten 301 Moden für eine hinreichende Konvergenz.

lem Interesse in der Metrologie an technischen Strukturen. Um die Dekorrelationen aufgrund dieser verschiedenen Streuprozesse zu untersuchen, wurden tiefe Gräben vermessen. Sie sind im AFM-Bild 7.16 dargestellt. Die Gräben sind 750 nm tief und haben

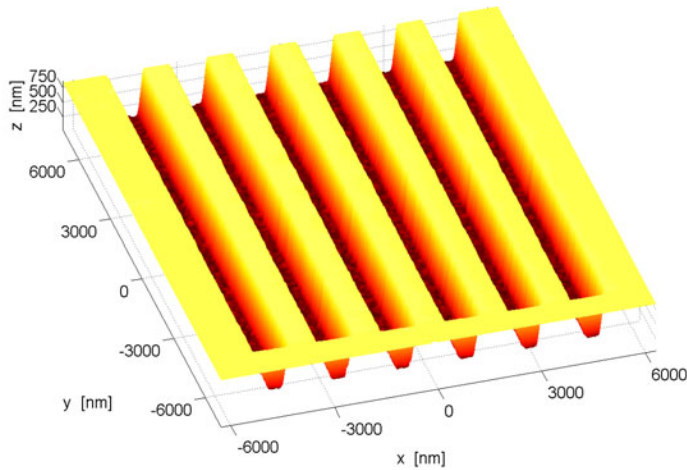


Abb. 7.16: Grabenstruktur in Silizium. Durch den Ätzprozess werden einerseits sehr steile Flanken erzeugt, andererseits wird hierdurch auch die Rauheit am Boden der Struktur verursacht (siehe auch Abb. 7.17).

eine hohe Flankensteilheit von annähernd 90° . Die Stege der Strukturen sind 700 nm breit und durch 1120 nm breite Gäben getrennt. Der Boden der Gräben weist eine hohe Rauheit auf, die in Abbildung 7.17 (a) gezeigt ist. Die Körnung besitzt eine mittlere Höhe von ca. 45 nm. Die einzelnen Körner sind im Mittel ca. 130 nm voneinander entfernt und haben eine durchschnittliche Flankensteilheit von lediglich 6° . Die statistischen Verteilungen sind in Abbildung 7.17 (b) und (c) dargestellt.

Die mikroskopische Abbildung dieser Struktur erfolgt mit denselben Parametern wie in Abschnitt 7.2, die Gesamtvergrößerung ist jedoch $300\times$. Es wird wieder mit voller Apertur ($NA_{Bel} = 0,9$) und linearer Polarisation unter 45° zur Grabenkante beleuchtet.

Abbildung 7.18 zeigt simulierte Fokussereien der Struktur. Das Grabenprofil ist zur besseren Orientierung eingezeichnet. Die Simulationen basieren auf den topographischen AFM-Daten der Struktur und den Abbildungsparametern des Mikroskops im Experiment. Zur

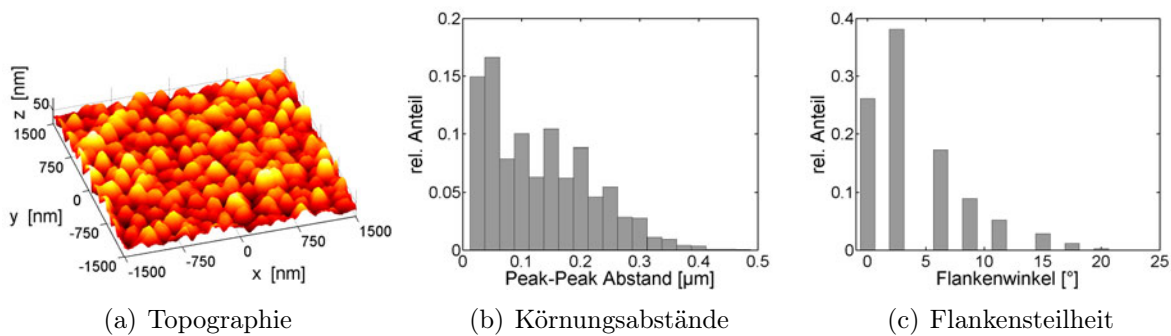


Abb. 7.17: Rauer Untergrund der Siliziumprobe. Die Bilder (b) und (c) geben die statistische Verteilungen wider, die aus dem AFM-Bild (a) gewonnen wurden.

Vereinfachung der Rechnung wurde eine monochromatische Beleuchtung bei $\lambda = 248$ nm und ein rechteckförmiger Graben mit senkrechten glatten Wänden sowie ebenem Boden angenommen.

Wie in den vorangegangenen Beispielen ist auch hier eine starke Abhängigkeit des Kantensignals (Abb. 7.18 (a)) vom Polarisationszustand zu erkennen: Das TM-polarisierte Intensitätssignal (Abb. 7.18 (c)) zeigt einen stärkeren Kontrast und eine ausgeprägtere Lateralverschiebung als die TE-Polarisation (Abb. 7.18 (d)). In beiden Fällen ist das Intensitätsminimum an der Oberkante der Struktur lokalisiert. Das gleiche gilt auch für das Minimum der Retardance (Abb. 7.18 (b)). Durch die Tiefe des Grabens ist sie mit einem Hub von fast -2 rad stark ausgeprägt. Die Minima bleiben aber an den Oberkanten der Struktur konzentriert. Im Graben geht die Phase in ein Plateau über. Dieses stark variierende Verhalten der Phase wird durch Vielfachstreuung im Graben hervorgerufen. Es ist daher auch stark von den Dimensionen und der Güte der Grabenstruktur (wie Form und Oberflächenrauheiten) abhängig.

Abbildung 7.18 (e) und (f) zeigen den Kohärenzgrad und den Polarisationsgrad in der Grabenstruktur. Der Kohärenzverlust und die Depolarisation sind nicht nur an den Kanten lokalisiert. Diese stellen aber die eigentlichen Streuzentren dar. Vielmehr kommt es zu starken Oszillationen im gesamten Grabenbereich. Beide Signale weichen dabei deutlich voneinander ab. Vor allem im Bereich der Strukturkanten bleibt der Kohärenzgrad hinter dem Polarisationsgrad zurück. Die Kohärenzeigenschaften der Eigenpolarisationen variieren also von Ort zu Ort. Bereiche hoher Kohärenz, in denen der Polarisationszustand in guter Näherung eine deterministische (im Allgemeinen elliptische) Bahn beschreibt, wechseln sich mit Bereichen ab, in dem der Polarisationsvektor in erster Linie statistisch fluktuiert. Diese oszillatorischen Korrelationen sind ein klarer Hinweis dafür, dass die Signale stark durch Vielfachstreuung im Graben beeinflusst werden. Es prägen sich Stehwellenfelder aus, die aufgrund der partiell kohärenten Beleuchtungsbedingungen auch eine Modulation in der Korrelation der Eigenpolarisationszustände hervorrufen.

Abbildung 7.19 zeigt die polarisationsoptischen Messungen der Struktur. Die Linienschnitte wurden für $y = 0$ nm gezogen und wieder über $\Delta y = 500$ nm gemittelt. Die grundlegenden Effekte der Simulation werden durch die Messung sehr gut wiedergegeben. Das Intensitätsprofil (Abb. 7.19 (a)) zeigt wieder die erwarteten Unterschiede in TE- und TM-Polarisation auf. Sehr gut zu erkennen ist auch die oszillatorische Modulation des Polarisationsgrades im Graben (Abb. 7.19 (d)). Der zugehörige Kohärenzgrad im Linienschnitt (Abb. 7.19 (c)) weist auch diese Oszillationen auf. Das Experiment bestätigt also, dass sich

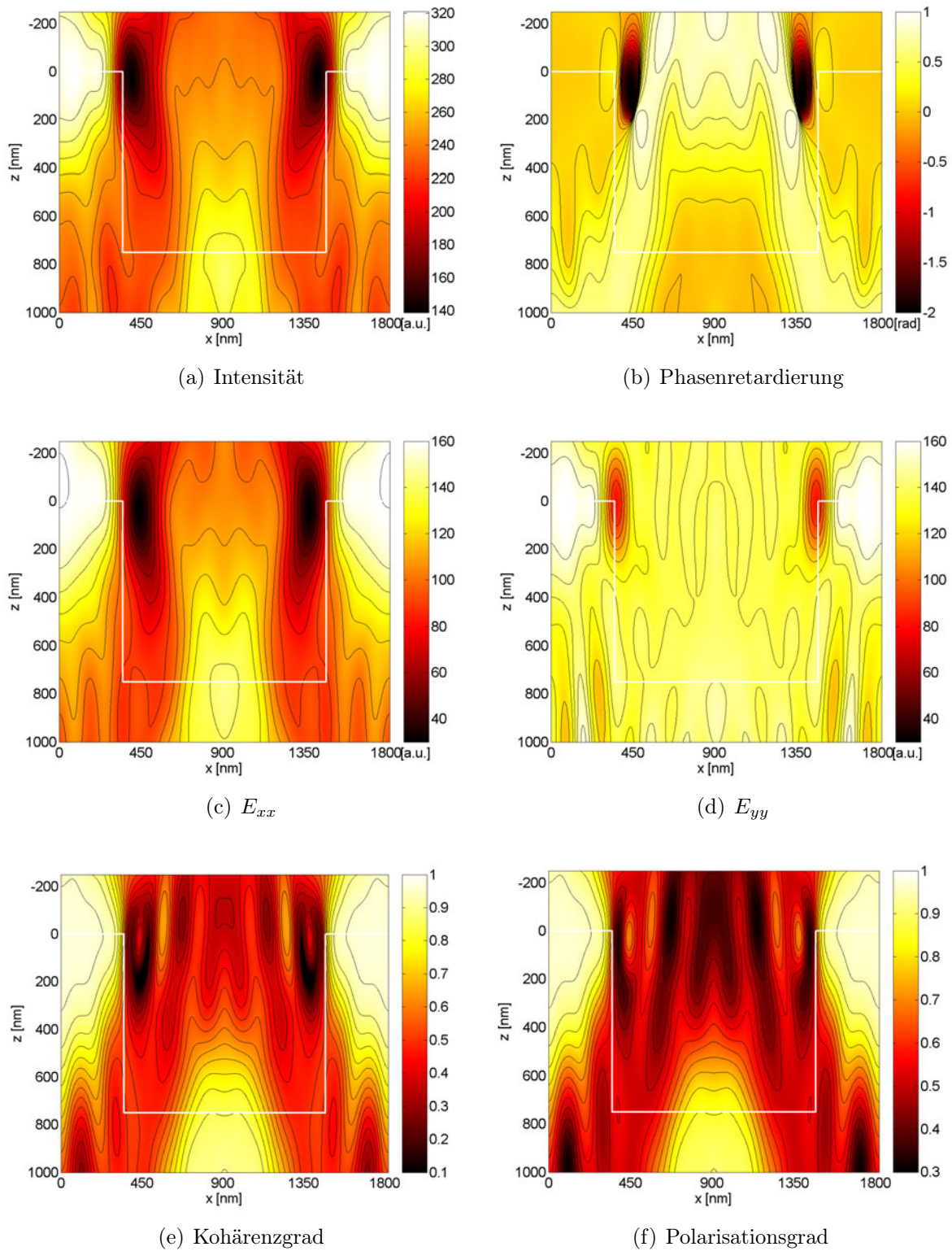
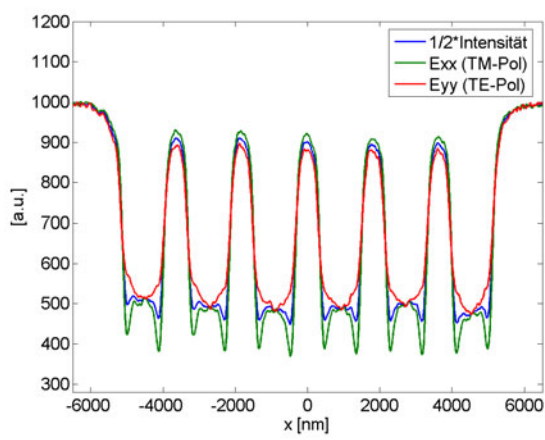


Abb. 7.18: Fokusabhängigkeit der polarisationsoptischen Größen für einen idealisierten Siliziumgraben mit Topographiedaten entsprechend Abbildung 7.16.

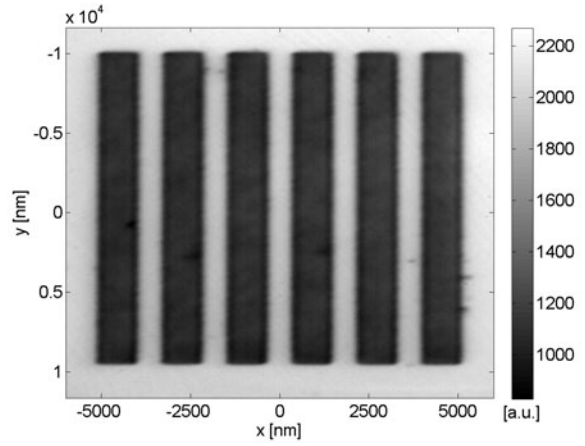
im Graben Stehwellenfelder ausbilden, die auch einen räumlich oszillierenden Kohärenz- und Polarisationsgrad der Eigenpolarisationszustände zur Folge haben. Die Phasenbilder (Abb. 7.19 (e) und (f)) zeigen die erwarteten Retardierungseffekte an den Kanten. Diese sind allerdings nur schwach ausgeprägt. Auch im Graben ist das Phasenbild diffus. Dies ist auf die statistischen Rauheiten des Grabens (vgl. Abb. 7.17 (a)) zurückzuführen wie auch die Gegenüberstellung von Messung in Simulation eines Grabens in Abbildung 7.20 bestätigt. Die simulierten Schnittprofile entsprechen denen eines idealen Rechteckgrabens mit glatten Wänden. Sie sind für eine Fokusposition an der Oberkante der Struktur berechnet worden. Abbild 7.20 (a) und (b) stellen die Intensitätsprofile einander gegenüber. Die unterschiedliche Profilform und die Kontrastreduzierung in TE-Polarisation im Vergleich zur TM-Polarisation werden zwar in der Messung grundsätzlich wiedergegeben, dennoch weist sie deutliche Unterschiede zu den simulierten Profilen auf. In TE-Polarisation fehlen die lokalen Minima an den Kanten und auch die Kontrastdifferenz zwischen TE- und TM-Polarisation ist deutlich schwächer ausgeprägt. Durch die Tiefe der Gräben ist die Fokusposition in der Messung mit einer gewissen Unsicherheit behaftet. Ein Vergleich mit den Fokusserien in Abbildung 7.18 deutet darauf hin, dass die Fokusposition der Messung ca. 200 nm unter der Grabenoberkante liegt. Dies allein kann allerdings die Diskrepanzen zwischen Messung und Simulation nicht erklären. Die Hauptursache liegt wohl in der Grundrauheit der Struktur, die die ausgeprägten Interferenzeffekte im tiefen Strukturgraben stört. Diese werden von einem diffusen Streuuntergrund überlagert. Auch die Unterschiede zwischen Messung und Simulation im Kohärenz- und Polarisationsgrad kann durch die Streuprozesse an statistischen Rauheiten erklärt werden. Zwar sind die oszillatorischen Resonanzeffekte eines idealen Grabens in der Messung noch klar sichtbar, dennoch ist die Modulationsamplitude reduziert und auch die absolute Stärke der Dekorrelationen an den Kanten ist schwächer. Die Unterschiede zwischen Kohärenz- und Polarisationsgrad sind weniger ausgeprägt.

Das relative Phasensignal der Polarisationszustände reagiert besonders empfindlich auf die statistischen Strukturmerkmale. Zwar ist die Kantendoppelbrechung in der Messung noch klar sichtbar, dennoch ist das Phasensignal deutlich verbreitert und im Hub um mehr als den Faktor Drei geschwächt.

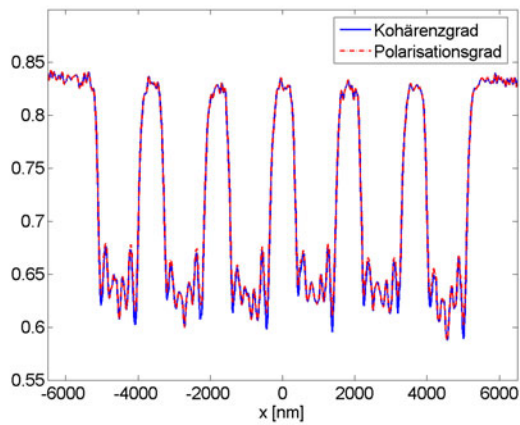
Das Beispiel dieses Abschnitts macht nochmals die Ursachen der polarisationsoptischen Signale im mikroskopischen Bild deutlich. Sie entstehen durch vektorielle Interferenzeffekte im partiell kohärenten Lichtwellenfeld. Dies zeigt sich nicht nur in der Modulation der Intensitäts- und Phasensignale. Auch die Kohärenzeigenschaften der Polarisationszustände



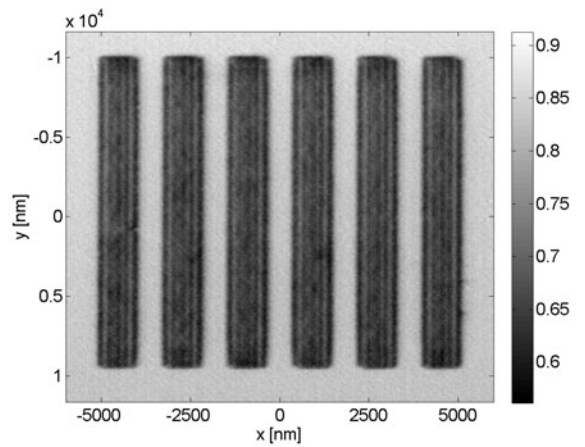
(a) Intensität



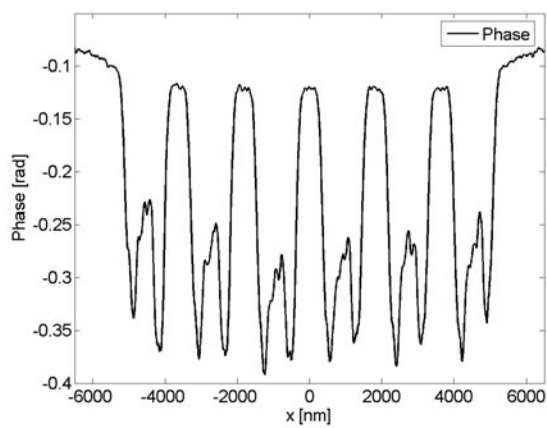
(b) Intensität



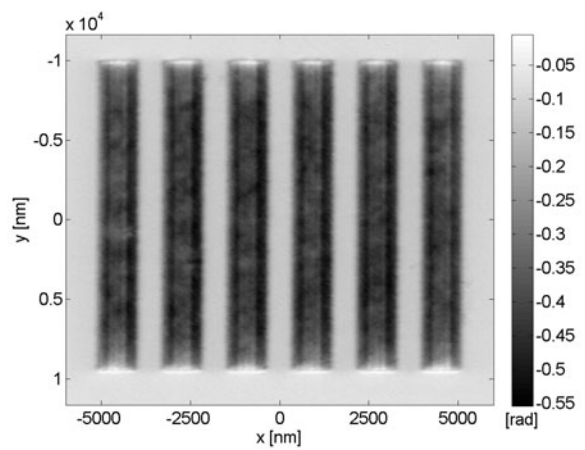
(c) Kohärenz/Polarisationsgrad



(d) Polarisationsgrad

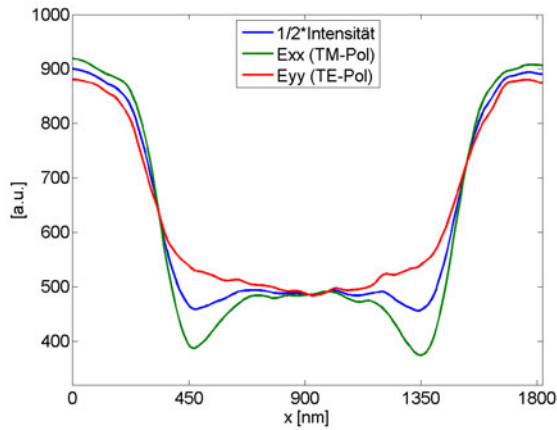


(e) Phasenretardierung

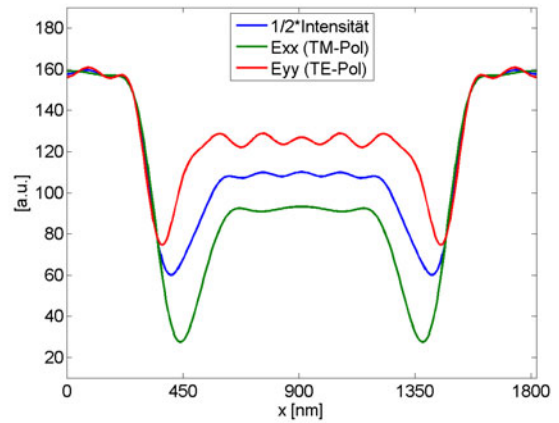


(f) Phasenretardierung

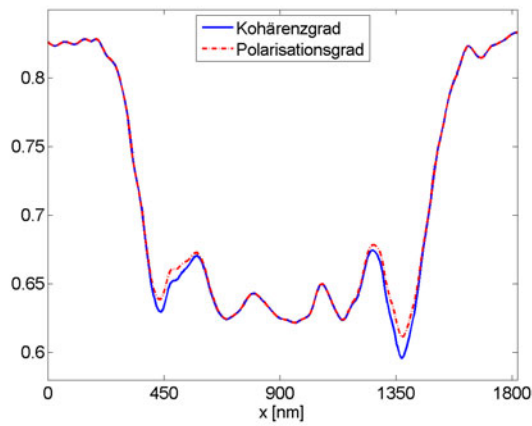
Abb. 7.19: Polarisationsoptische Größen für den Siliziumgraben aus Abbildung 7.16.



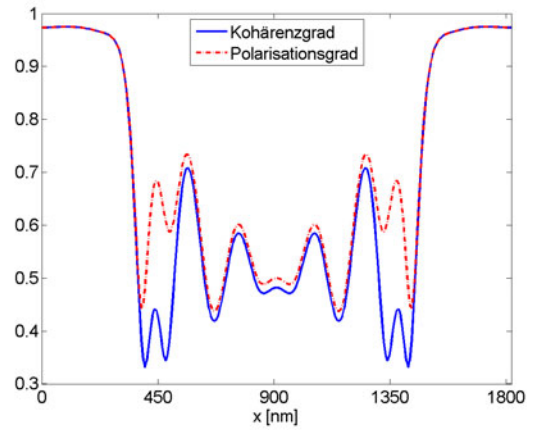
(a) Intensität



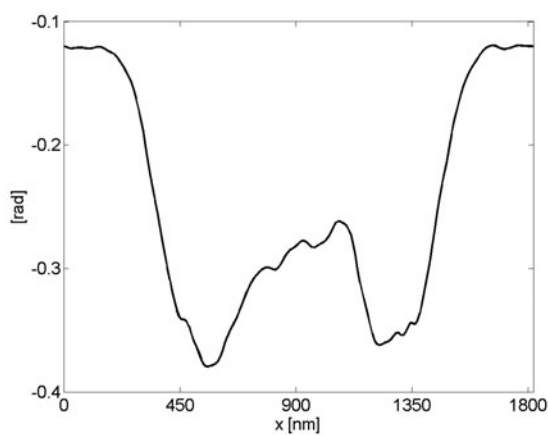
(b) Intensität



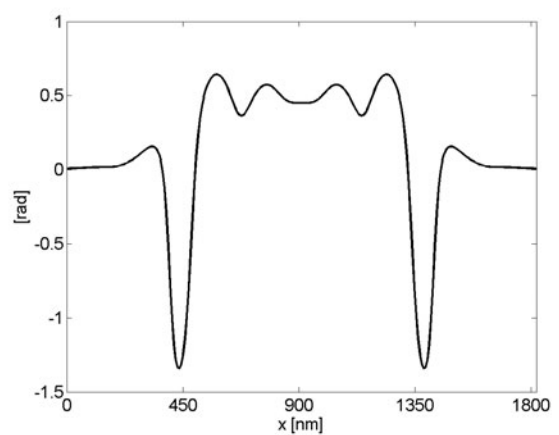
(c) Kohärenz/Polarisationsgrad



(d) Kohärenz/Polarisationsgrad



(e) Phasenretardierung



(f) Phasenretardierung

Abb. 7.20: Vergleich von Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) für einen Siliziumgraben aus Abbildung 7.16.

zeigen die fundamentalen Effekte von Beugung und Interferenz in der physikalisch optischen Bildentstehung.

7.5 Polarisationssignaturen an Zylinderstrukturen

Die bisherigen Untersuchungen bezogen sich auf grabenähnliche Strukturen, die in einer Richtung eine große Ausdehnung gegenüber der Wellenlänge haben und daher im Kern als zweidimensionales Problem aufgefasst werden können. Unter diesen Bedingungen zerfällt das polarisierte Lichtwellenfeld gemäß der globalen Vorzugsrichtung in zwei linear polarisierte Eigenzustände, die die Grundlage für die Diskussion der letzten Abschnitte darstellten. Treten jedoch an der Struktur Krümmungsradien in der Größenordnung der Wellenlänge auf, ist diese globale Zerlegung in Eigenzustände nicht mehr zulässig und die Polarisationssignaturen im optischen Bild hängen sehr stark von den lokalen

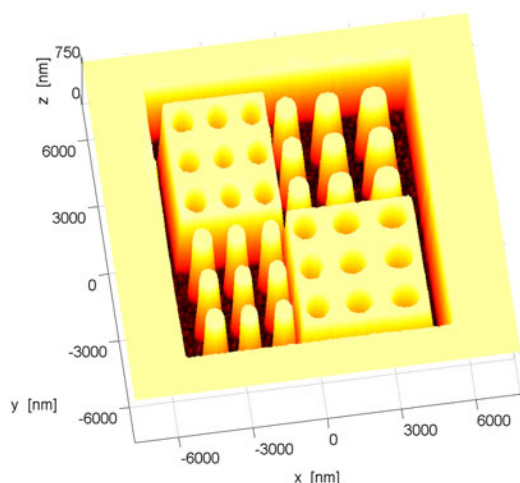


Abb. 7.21: Zylinderförmige Säulen und Kavitäten in Silizium. Die reduzierte gemessene Flankensteilheit wird durch die AFM-Sonde verursacht.

Mittelpunkt) voneinander entfernt. Die Strukturhöhe ist 750 nm. Die Abbildungsparameter entsprechen denen aus Abschnitt 7.4.4.

Abbildung 7.22 (a) zeigt das gemessene unpolarisierte Intensitätsbild der Struktur. Der starke Einbruch des Signals in den geätzten Bereichen ist nicht nur auf die starke Defokussierung infolge der hohen Strukturhöhe zurückzuführen, sondern wird in hohem Maße durch die diffuse Streuung am rauen Strukturboden verursacht. Dies wird auch durch

Eigenschaften der Struktur und dem gewählten Koordinatensystem ab. Im Folgenden werden daher die experimentellen Untersuchungen auf zylinderförmige Strukturen ausgedehnt. In Abbildung 7.21 ist eine AFM-Aufnahme der Gesamtstruktur dargestellt. Es handelt sich um zylindrische Säulen und Vertiefungen in Silizium. Genauso wie bei den Gräben in Abbildung 7.16 weisen die Flanken eine hohe Steilheit von annähernd 90° und der Boden der Struktur eine deutliche Rauheit auf. Der Durchmesser der Säulen beträgt 800 nm, die Kavitäten haben einen Durchmesser von 1200 nm. Die Einzelstrukturen in den vier Quadranten sind 1800 nm (Mittelpunkt-

den niedrigen Polarisationsgrad in diesen Bereichen bestätigt (Abb. 7.22 (b)). Auch dieser wird durch die diffuse Streuung an der Bodenrauheit hervorgerufen. In den grabenartigen Bereichen der linken oberen und rechten unteren Ecke der Gesamtstruktur sind wieder Resonanzen des Polarisationsgrades zu erkennen.

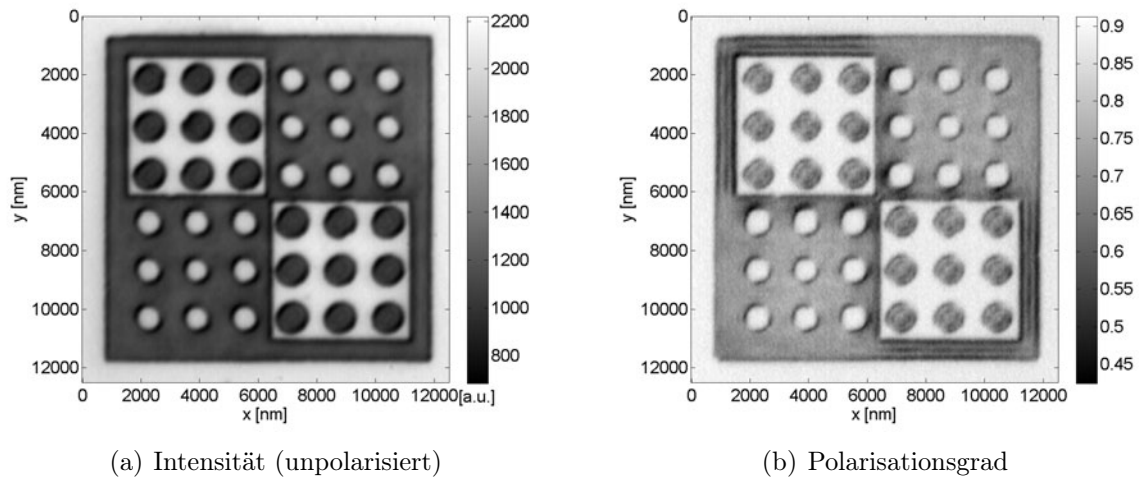


Abb. 7.22: Gemessenes mikroskopisches Bild der Struktur aus Abbildung 7.21.

Bei der folgenden Diskussion sind diese Streueffekte an den Nano-Rauheiten nicht von primären Interesse. Sie sorgen bei den Messungen lediglich für einen deutlich erniedrigten Intensitätshintergrund der Umgebung im Vergleich zur Simulation. Wichtig ist vielmehr die Frage, welche Polarisationssignaturen dem Lichtwellenfeld durch deterministische Strukturformen aufgeprägt werden. Dies wird im Folgenden anhand des mittleren Zylinders im linken unteren Quadranten von Abbildung 7.22 untersucht.

Abbildung 7.23 zeigt die Polarisationsabhängigkeit der Intensitätsbilder und liefert den Vergleich von Messung und zugehöriger Simulation. Das unpolarisierte Intensitätsbild (Gesamtintensität) weist deutliche Minima für Orientierungen auf, in denen die Eingangspolarisation senkrecht zur lokalen Kante steht (Abb 7.23 (a) und (b)). Dies ist im vollkommenen Einklang mit dem Bestreben des elektromagnetischen Feldes, senkrecht auf der (metallisch wirkenden) Siliziumkante zu stehen. Wie bereits im einleitenden Abschnitt dieses Kapitels erörtert, sind in diesem Fall die Energiedissipation in der Struktur einerseits und die Streuung an der Kante andererseits maximal. Es bildet sich also für die entsprechende Kantenorientierung des Zylinders ein ausgeprägtes Intensitätsminimum aus. Die bevorzugt senkrechte Orientierung des Feldes zu metallischen Grenzflächen wird durch den Polarisationsgehalt der Intensitätsbilder bestätigt. Während der x-polarisierte Intensitätsanteil

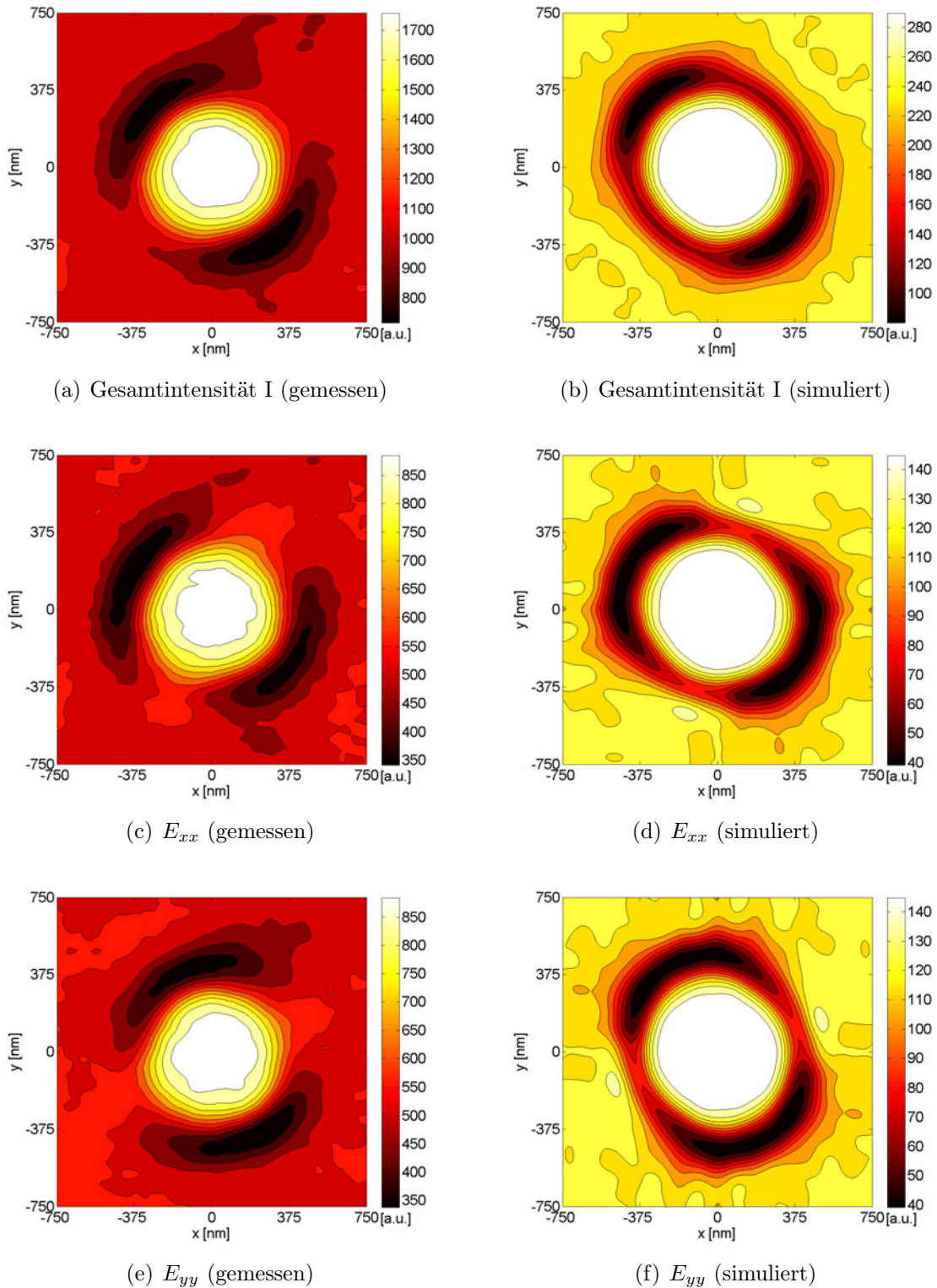


Abb. 7.23: Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) im Vergleich für einen Zylinder aus Abbildung 7.21. (a) und (b) Gesamtintensität, (c) und (d) in x -Richtung polarisierter Intensitätsanteil E_{xx} , (e) und (f) in y -Richtung polarisierter Intensitätsanteil E_{yy} . Der reduzierte Intensitätsuntergrund der Messung im Vergleich zur Simulation wird durch diffuse Streuung am rauen Strukturboden verursacht.

seinen Schwerpunkt zum waagrechten Kantenabschnitt des Zylinders hin verschiebt (Abb 7.23 (c) und (d)), trifft das gleiche für die y-polarisierte Komponente und den senkrechten Kantenbereich zu (Abb 7.23 (e) und (f)). Der Polarisationsgehalt der Intensitätsbilder kann also zur Bestimmung der lokalen Kantenorientierung herangezogen werden.

Abbildung 7.24 zeigt die weiteren polarisationsoptischen Größen. Die Form des Kohärenzgrades und des Polarisationsgrades, die in den Simulationen von Abbildung 7.24 (b) und (d) deutlich werden, sind auch in den Messungen sehr schön zu erkennen (Abb. 7.24 (a) und (c)). Wie in den vorherigen Abschnitten beschrieben, kommt es bei den Messungen zu einer leichten Reduzierung des Kohärenz- und Polarisationsgrades aufgrund des Phasenfehlers im PSA. Dies erklärt den erniedrigten Wert beider Größen an der glatten Oberfläche des Zylinders. Am rauen Boden in der Umgebung des Zylinders tritt Streuung auf, die den Untergrund des Kohärenz- und Polarisationsgrades in der Messung im Vergleich zum glatten Boden in der Simulation erniedrigt. Gegensätzlich sieht die Situation an den Strukturkanten aus. Die geometrisch perfekten Kanten bewirken in der Simulation ein etwas tieferes Minimum als reale Strukturkanten im Experiment. Statistische Rauheiten der realen Kanten sorgen für eine schwächere Dekorrelation der Polarisationsignale.

Abbildung 7.24 (e) und (f) geben die Phasenretardierung des vollständig polarisierten Anteils wieder. Die Amplitude der gemessenen Phasenverzögerung ist deutlich kleiner und über einen weiteren Bereich ausgedehnt als in der Simulation. Die simulierten Signale sind direkt an die Strukturkanten gebunden. Auch diese Abweichungen beruhen auf Rauheiten der Strukturkanten und insbesondere auch des Untergrundes. Die kleeblattartige Form des Phasenbildes ist aufgrund der zylindrischen Grundform der Struktur und des gewählten Koordinatensystems vollkommen verständlich. Während es längs der Koordinatenachsen zu einer starken Phasenverschiebung zwischen x- und y-polarisiertem Licht kommt, verschwindet sie längs der beiden Bilddiagonalen vollständig. Im ersten Fall entsprechen sie den lokalen Eigenzuständen der Struktur und unterliegen damit den fundamental unterschiedlichen Wechselwirkungsmechanismen, die bereits diskutiert wurden. Je nach Kantenorientierung tauschen x- und y-Polarisation ihren TE- und TM-Charakter, sodass sich ein Vorzeichenwechsel zwischen waagrecht und senkrecht orientierten Strukturbereichen ergibt. Im zweiten Fall stehen sowohl x- als auch y-polarisiertes Licht unter 45° zu lokalen Strukturkante, sodass aufgrund der Symmetrie des Problems kein Phasenshift erfolgen kann.

Trotz der starken Dekorrelation der Polarisationszustände durch die Strukturkanten und den rauen Untergrund ist das Licht mit $\mathcal{P} > 0,6$ noch deutlich polarisiert. Abbildung

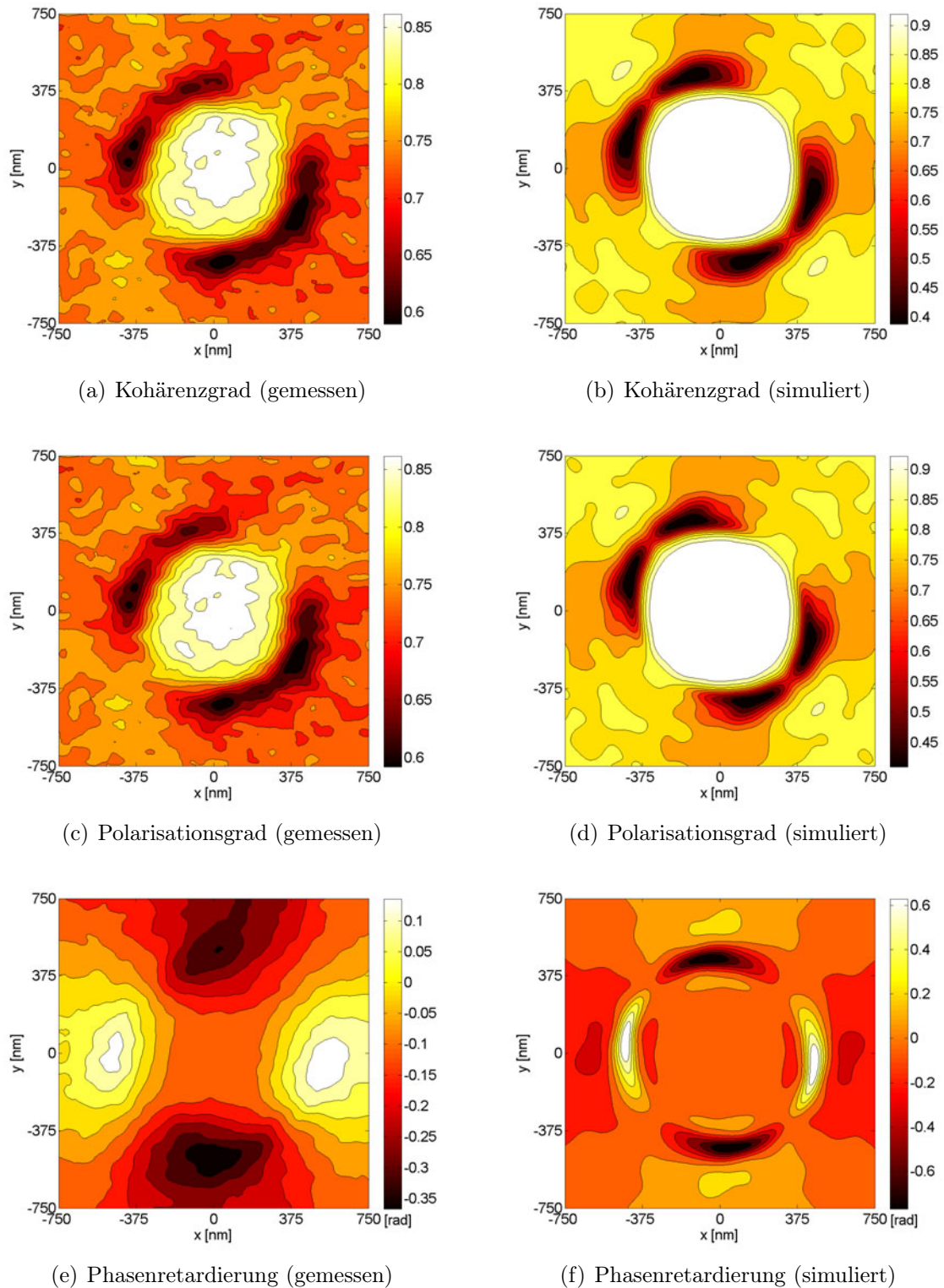


Abb. 7.24: Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) im Vergleich für einen Zylinder aus Abbildung 7.21. (a) und (b) Kohärenzgrad, (c) und (d) Polarisationsgrad, (e) und (f) Phasenretardierung.

7.25 (a) und (b) zeigen ortsaufgelöst die Polarisationsellipsen des vollständig polarisierten Anteils des Lichtwellenfeldes im mikroskopischen Bild der Struktur. Zur besseren Lokalisierung der Polarisationszustände im Bild ist im Hintergrund das Intensitätsbild zu sehen.

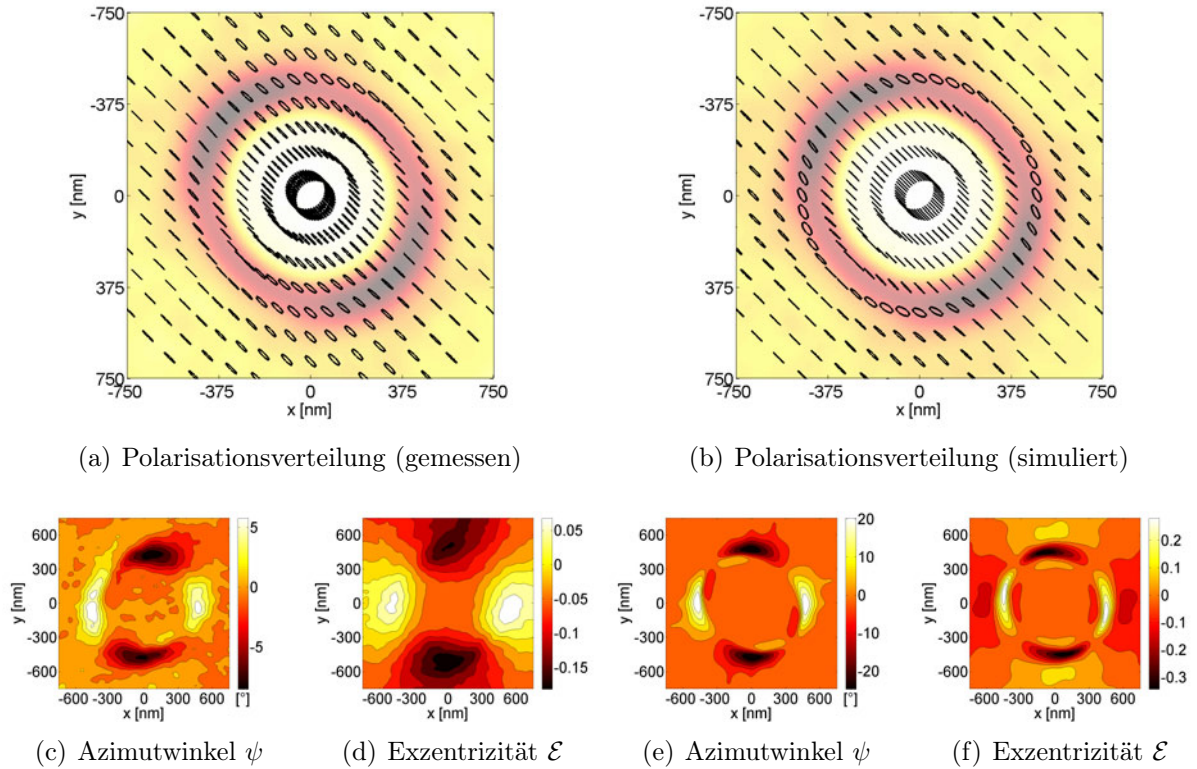


Abb. 7.25: Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) im Vergleich für einen Zylinder aus Abbildung 7.21. Bild (a) und (b): Polarisationsverteilung in der Bildebene mit dem Intensitätsbild als Hintergrund, Bild (c) und (e): Orientierung der großen Halbachse der Polarisationsellipse (Abweichung von 45°), Bild (d) und (f): Exzentrizität der Polarisationsellipse.

Um die Polarisationsellipsen besser zu visualisieren, sind sie mit der doppelten Exzentrizität dargestellt. Die zugehörigen Kenngrößen der Polarisationsellipsen im Feld zeigen Abbildung 7.25 (c)-(f). Wie bisher geben die linken Bilder (Abb. 7.25 (a), (c) und (d)) die gemessenen Werte wieder, die rechten Abbildungen (Abb. 7.25 (b), (e) und (f)) stellen die Simulationen gegenüber. Die Messung zeigt sehr gut die simulierten Effekte.

An der Oberfläche der Zylinderstruktur entspricht der Polarisationszustand im Bild dem der Beleuchtung. Er bleibt linear diagonal polarisiert. Das Gleiche gilt für den polarisierten Anteil im rauen Untergrund der Umgebung, obwohl durch Streuung eine starke Dekorrelation des Polarisationssignals stattfindet. Der polarisierte Anteil selbst bleibt jedoch davon unbeeinflusst. Dies deutet auf eine isotrope und isogonale Rauheitsverteilung am Boden hin. Auch an den Strukturkanten bleibt der Polarisationszustand durch die Wechselwirkung

unberührt, wenn die Eingangspolarisation parallel oder senkrecht zur lokalen Strukturkante steht. In den Übergangsbereichen der Kanten bilden sich durch die strukturinduzierte Doppelbrechung und durch die Diattenuation elliptische Polarisationszustände aus. Die gemessenen Azimutwinkel (Abb. 7.25 (c)) und Exzentrizitäten (Abb. 7.25 (d)) sind allerdings deutlich kleiner als die simulierten Werte (Abb. 7.25 (e) bzw. (f)). Da die Exzentrizität hauptsächlich durch die relative Phasenretardierung bestimmt wird, ist ihre gemessene Verteilung wie bei der Phase über einen weiteren Bereich ausgedehnt als in der Simulation. Die Abweichung in den elliptischen Kenngrößen ist auf eine kleinere Diattenuation und Retardance an den realen Strukturkanten im Vergleich zu ideal scharfen Kanten zurückzuführen. Die Auswertung des vollständig polarisierten Anteils führt damit auf dasselbe Ergebnis, das auch aus den statistischen Eigenschaften des Lichtwellenfeldes in Form des Kohärenz- und Polarisationsgrades gewonnen wurde: Die polarisationsoptischen Signale sind sehr empfindliche Indikatoren für Strukturrauhigkeiten im Sublambdabereich.

Die bisherigen Untersuchungen bezogen sich auf Zylindersäulen, die zwar periodisch vorgelegt aber dennoch weitgehend isoliert standen. Laterale Wechselwirkungseffekte zwischen den Säulen spielen eine untergeordnete Rolle. Die polarisationsoptischen Signale werden durch die Kantenwechselwirkung an den Zylinderrenzflächen bestimmt. Der raue Boden der Umgebung äußert sich als statistischer Untergrund hat aber keinen dominierenden Einfluss auf die Signale.

Die Abbildungen 7.26-7.28 zeigen äquivalente Untersuchungen für eine zylindrische Kavität. Hierfür wurde die zentrale Vertiefung im rechten unteren Quadranten der Gesamtstruktur aus Abbildung 7.21 gewählt. Alle grundlegenden Wechselwirkungsmerkmale, die für die Säulenstruktur diskutiert wurden, zeigen sich auch für die Kavität. Dies gilt insbesondere für die Polarisationsabhängigkeit der Intensitätssignale in Abbildung 7.26. Auch der gemessene Kohärenz- und Polarisationsgrad sowie die Phase der Kavität in Abbildung 7.27 spiegeln das simulierte Wechselwirkungsverhalten wieder. Die starken Kontraste in der Simulation können aber durch die Messung nicht wiedergegeben werden. Diese sind im Falle des Kohärenz- und Polarisationsgrades um den Faktor Zwei, bei der Phase gar fast um eine Größenordnung zu klein. Stellt man die Simulation der zylindrischen Säulen denen der Kavitäten gegenüber, so wird deutlich dass die hohen Kontraste in der Simulation der Kavität stark durch Interferenzeffekte hervorgerufen sein müssen. Diese entstehen durch Vielfachstreuung im Hohlraum. Im Experiment werden diese Effekte durch die Rauheit der Struktur stark gestört. Wie bei der Untersuchung der tiefen Grabenstruktur im letzten Abschnitt weichen daher die gemessenen polarisationsoptischen Größen deutlich

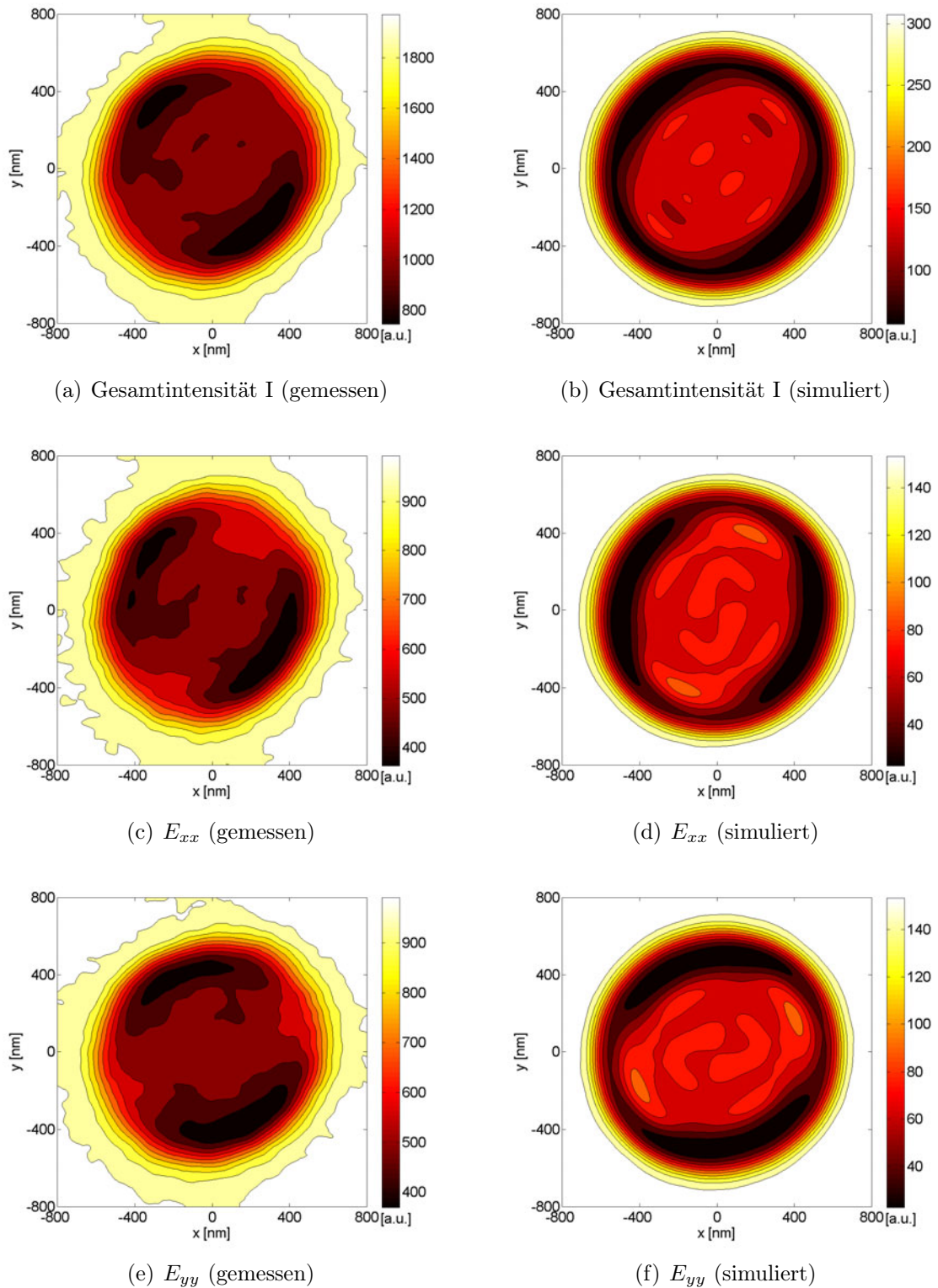


Abb. 7.26: Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) im Vergleich für eine zylinderförmige Vertiefung aus Abbildung 7.21. (a) und (b) Gesamtintensität, (c) und (d) in x-Richtung polarisierter Intensitätsanteil E_{xx} , (e) und (f) in y-Richtung polarisierter Intensitätsanteil E_{yy} .

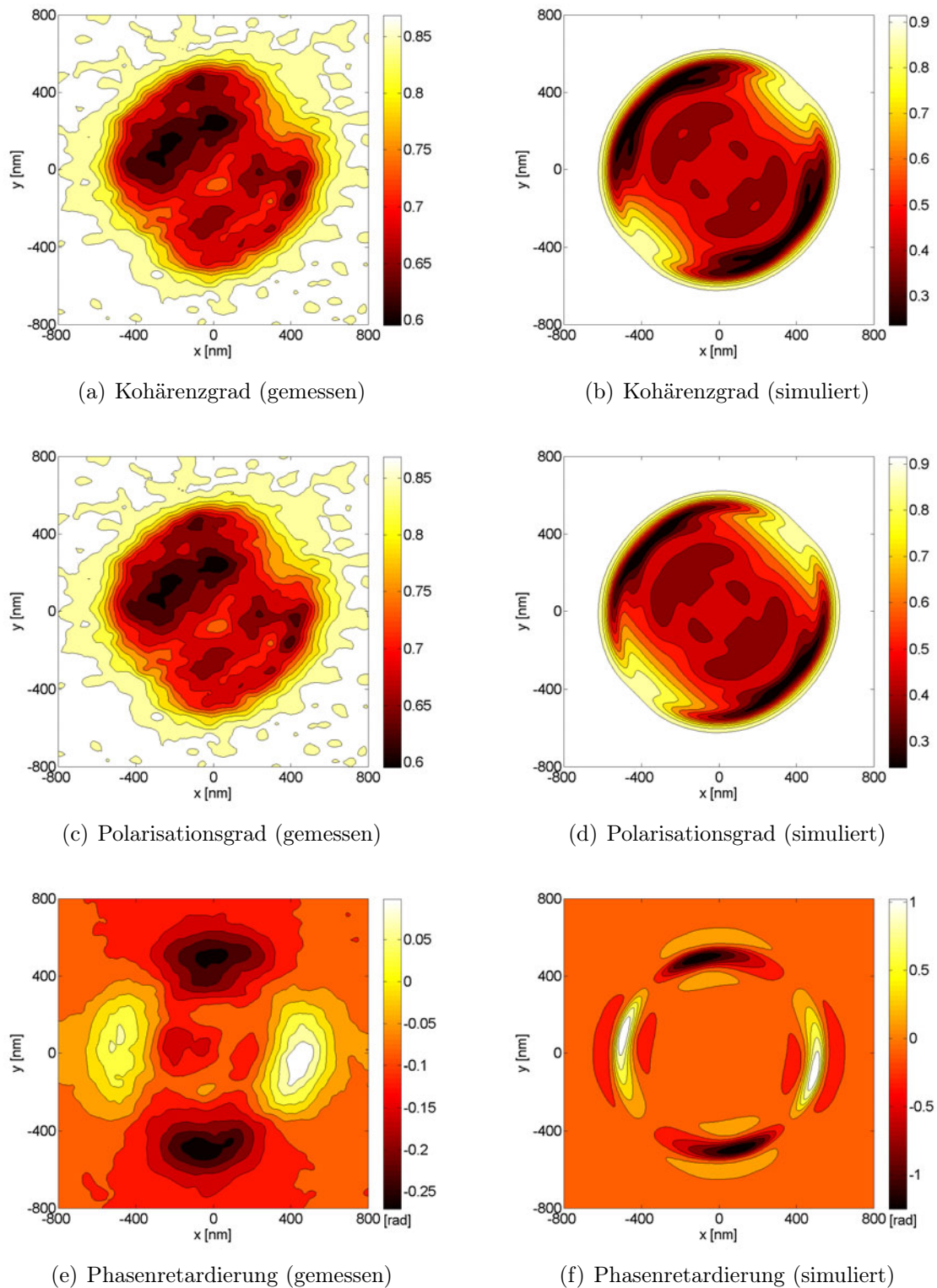


Abb. 7.27: Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) im Vergleich für eine zylinderförmige Vertiefung aus Abbildung 7.21. (a) und (b) Kohärenzgrad, (c) und (d) Polarisationsgrad, (e) und (f) Phasenretardierung.

von der Simulation einer idealen Kavität ab. In Abbildung 7.28 sind die gemessene und die simulierte Polarisationsverteilung im mikroskopischen Bild einander gegenübergestellt. Grundlage ist wieder der vollständig polarisierte Anteil des Lichtwellenfeldes. Die lineare Eingangspolarisation bleibt weitgehend erhalten. Wie bei der Zylinderstruktur fällt die Polarisationsänderung durch die Kantenwechselwirkung im Experiment deutlich schwächer aus als in der Simulation. Die Ursache ist auch hier die Rauheit der Struktur.

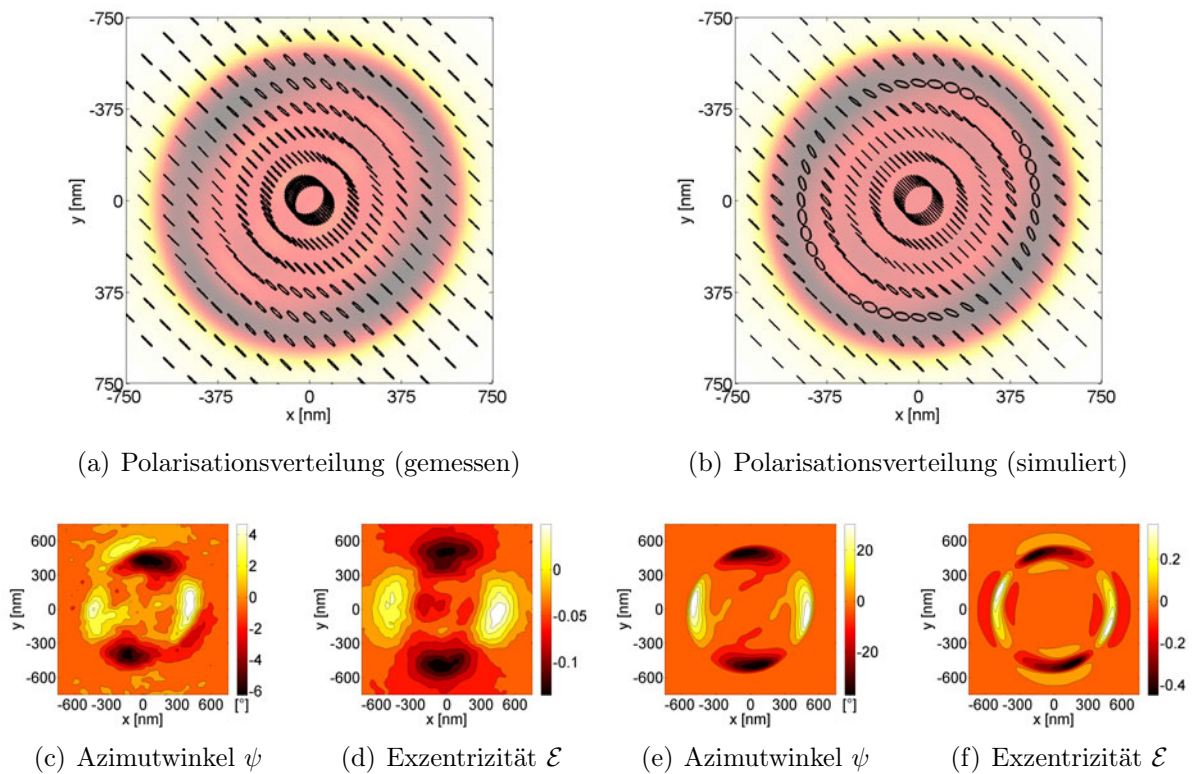


Abb. 7.28: Messung (linke Spalte) und Simulation (rechte Spalte) im Vergleich für eine zylinderförmige Vertiefung aus Abbildung 7.21. Bild (a) und (b): Polarisationsverteilung in der Bildebene mit dem Intensitätsbild als Hintergrund, Bild (c) und (e): Orientierung der großen Halbachse (Abweichung von 45°), Bild (d) und (f): Exzentrizität der Polarisationsellipse.

8 Polarisationsstransfer durch Mikro- und Nanostrukturen

Das optische Transferverhalten von Mikro- und Nanostrukturen wird maßgeblich durch elektromagnetische Wechselwirkungseffekte bestimmt. Diese Tatsache macht man sich zum Beispiel in der Nanooptik gezielt zu Nutze, um optische Bauelemente mit maßgeschneiderten Eigenschaften zu entwerfen. Wie die Untersuchungen in Kapitel 7 demonstrieren, haben Polarisationseffekte auch in der hochauflösenden Metrologie einen starken Einfluss auf die mikroskopische Bildentstehung. Dieses Kapitel konzentriert sich auf die Frage, wie Polarisationseffekte in der mikroskopischen Bildgebung zur Rekonstruktion von Strukturformen mit dimensionellen Größen im Sublambdabereich genutzt werden können. Die Ausführungen beschränken sich auf numerische Untersuchungen. Für die experimentelle Umsetzung sei auf [365, 403, 404] verwiesen. Die gewonnenen Ergebnisse sind keineswegs nur auf die bildgebende optische Metrologie beschränkt, sondern erlauben vielmehr auch eine visuelle Darstellung derjenigen Wechselwirkungsdetails, die in der Scatterometrie, der Diffraktometrie sowie auch für das Design von funktionalen Mikro- und Nanostrukturen gezielt genutzt werden.

Bei den experimentellen Untersuchungen in Kapitel 7 wurde der Polarisationszustand der Beleuchtung so gewählt, dass ein maximaler Polarisationskontrast erzielt wird. Diese Wahl wurde durch die klare Geometrie der untersuchten Strukturen unterstützt. Bei komplizierten Formen gewinnt man zusätzliche Strukturinformationen, indem der Polarisationszustand der Beleuchtung variiert wird. Das vollständige polarisationsoptische Transferverhalten der Struktur wird dann durch die orts aufgelöste Jones- oder Müller-Matrix erfasst. Für die Untersuchung der grundlegenden Transfereigenschaften von Mikro- und Nanostrukturen ist das Jones-Matrix-Kalkül am Besten geeignet. Durch die Darstellung in strukturangepassten Koordinatensystemen lassen sich strukturinduzierte Polarisations-eigenschaften, wie Diattenuation und Retardance in Abhängigkeit spezieller Strukturformen untersuchen. Dies ist Gegenstand von Abschnitt 8.1. Die Anwendbarkeit des Jones-Matrix-

Formalismus bleibt allerdings auf eine kohärente Beleuchtung beschränkt, wie sie in der Hellfeldmikroskopie mit kleiner Beleuchtungsapertur oder in der konfokalen Mikroskopie vorliegt. Wie schon in Kapitel 7 experimentell verifiziert werden konnte, kommt es nämlich durch die Dominanz der elektromagnetischen Beugungseffekte bei der mikroskopischen Bildentstehung in einem partiell kohärenten Lichtwellenfeld zu starken Depolarisationseffekten, die nur im Müller-Matrix-Formalismus berücksichtigt werden können. Hierauf geht Abschnitt 8.2 ein.

Aufgrund der Tiefpass-Charakteristik der optischen Abbildung können im mikroskopischen Fernfeld Strukturdetails im Sublambdabereich nicht wiedergegeben werden. So erscheinen die Ecken einer quadratischen Struktur im mikroskopischen Bild immer abgerundet. Andererseits hängen gerade im Sublambdabereich die Details der elektromagnetischen Wechselwirkung sehr stark von der konkreten Strukturform ab. Es ist daher zu erwarten, dass sich entsprechende polarisationsabhängige Signaturen auch im mikroskopischen Fernfeld niederschlagen. Um die Effekte der Kantenrundung systematisch zu untersuchen, wird daher im Folgenden die Abbildung einer zylindrischen Vertiefung mit kreisförmigem Querschnitt mit der einer quaderförmigen Vertiefung mit quadratischem Querschnitt verglichen. Die Strukturen befinden sich in Silizium und haben eine Tiefe von 100 nm. Der Durchmesser beziehungsweise die Kantenlänge der Struktur beträgt 800 nm. Die Einzelstrukturen befinden sich in einem Gitter, das sich in einem kartesischen xy -Raster mit einer Periode von 7000 nm vorsetzt. Die Kanten der quaderförmigen Vertiefung sind entlang der x - und y -Achse orientiert. Die Abbildung erfolgt mit einer numerischen Apertur von $NA = 0,9$ und 100-facher Vergrößerung bei einer Wellenlänge von 550 nm.

8.1 Kohärenter Polarisationstransfer

8.1.1 Ortsaufgelöste Jones-Matrizen der Mikrostrukturen

Um die grundlegenden polarisationsoptischen Transfereigenschaften durch die Strukturwechselwirkung zu verstehen, wird die Struktur zunächst kohärent mit einer Planwelle beleuchtet. Die ortsaufgelöste Jones-Matrix $\mathbf{J}(x, y)$ der Struktur ergibt sich dann direkt über die Berechnung zweier Bilder in x - und y -Polarisation, da die Beleuchtung durch die

Einheitsmatrix repräsentiert wird¹:

$$\begin{bmatrix} E_{x[1,0]}(x, y) & E_{x[0,1]}(x, y) \\ E_{y[1,0]}(x, y) & E_{y[0,1]}(x, y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_{xx}(x, y) & J_{xy}(x, y) \\ J_{yx}(x, y) & J_{yy}(x, y) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (8.1)$$

Abbildung 8.1 zeigt die simulierten Jones-Matrizen der kreisförmigen und quadratischen Vertiefung in Silizium. Für beide Strukturtypen spiegeln die Absolutwerte der Diagonalelemente der Jones-Matrix deutlich den verstärkten Kontrast für eine Polarisation senkrecht zur Strukturkante und die polarisationsabhängige Deformation des Intensitätsbildes

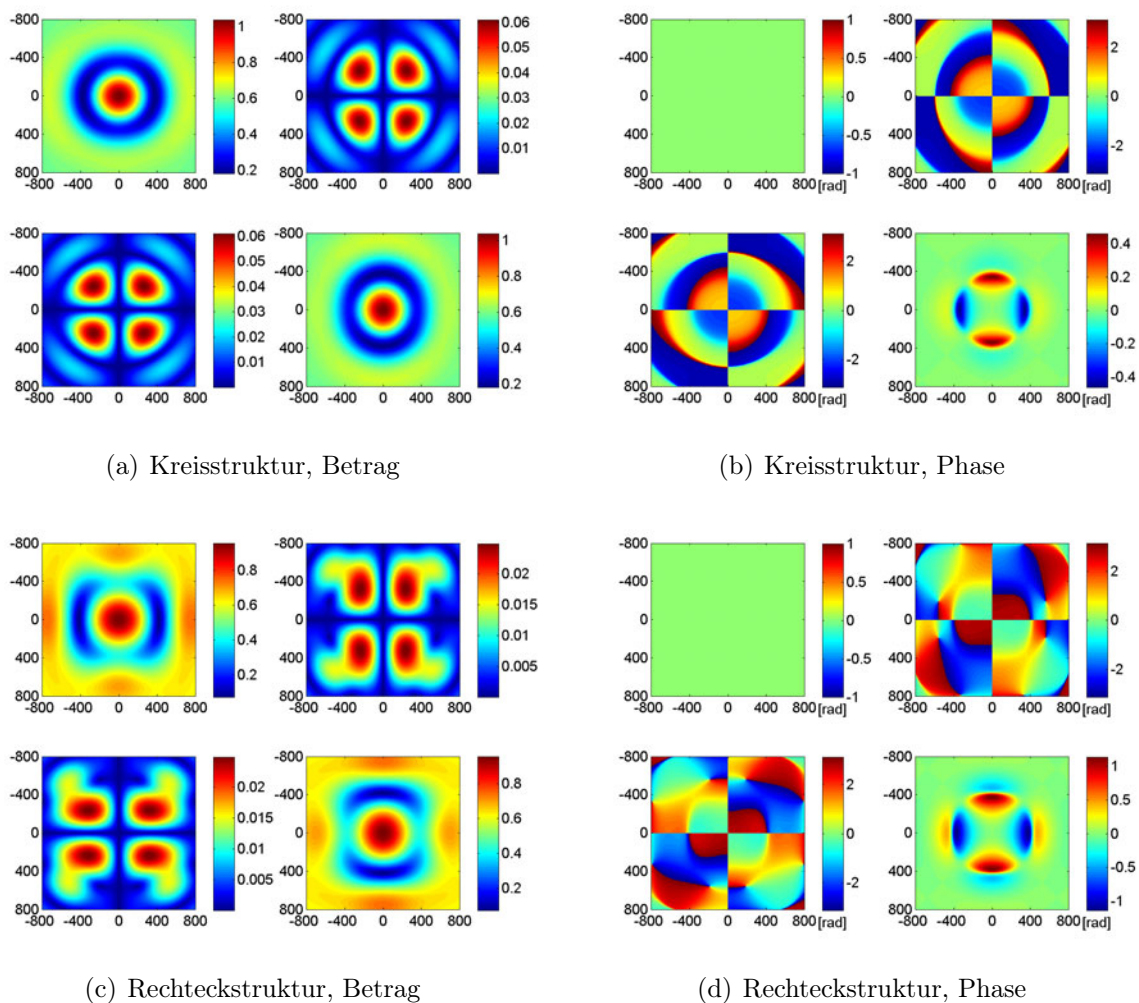


Abb. 8.1: Phasen-reduzierte Jones-Matrizen im kartesischen xy-Koordinatensystem.

¹Bei der Messung von Jones-Matrizen ist Gleichung 8.1 in dieser einfachen Form nicht anwendbar, da die absolute Phasenlage zwischen x- und y-Polarisation nicht bekannt ist. Diese muss durch mindestens eine weitere Messung gewonnen werden. Die Vermessung von Jones-Matrizen wurde von Raab eingehend beschrieben [405].

wider. Die Phase des (2,2)-Elements gibt die kanteninduzierte Doppelbrechung an. Der Polarisationstransfer zwischen x- und y-Polarisation wird durch die Nebendiagonalelemente beschrieben. Er ist im Fall der Kreisstruktur auf Kreissegmenten lokalisiert, die unter $\pm 45^\circ$ zur x- beziehungsweise y-Achse orientiert sind. Bei der Rechteckstruktur fällt der Polarisationstransfer deutlich schwächer aus und wird durch die Ecken der Vertiefung hervorgerufen.

Das konkrete Aussehen der orts aufgelösten Jones-Matrix hängt stark von der Wahl des Koordinatensystems ab, in dem die Eingangs- und Ausgangs-Polarisationszustände dargestellt werden. Die Wahl eines kartesischen Koordinatensystems in xy-Richtung, wie es in Abbildung 8.1 verwendet wurde, ist daher nur bedingt geeignet, um die für die einzelnen Strukturtypen charakteristischen Transfereigenschaften darzustellen. Im Folgenden werden unterschiedliche Darstellungsformen diskutiert, die eine tiefgreifendere Interpretation der Strukturabhängigkeit des polarisationsoptischen Wechselwirkungsprozesses erlauben. Dabei wird auf die in Kapitel 4 eingehend beschriebenen Verfahren zurückgegriffen.

8.1.2 Entwicklung nach Pauli-Spin-Matrizen

Wie Abschnitt 4.2.1.1 genau darstellt, erlaubt die Entwicklung des Jones-Matrix-Feldes nach Paulischen Spin-Matrizen, die polarisationsunabhängige Absorption und Phasenverzögerung der Struktur sowie die polarisationssensitiven Eigenschaften durch die Diattenuation und Retardance für verschiedene Vorzugspolarisationen zu beschreiben. In der orts aufgelösten Darstellung der Entwicklungskoeffizienten der Spin-Matrix-Entwicklung wird unmittelbar die optische Funktionalität der verschiedenen Strukturbereiche deutlich. Abbildung 8.2 und 8.3 stellen die entsprechenden Zerlegungen für die Kreis- beziehungsweise Rechteckstruktur dar. Teilbild (a) zeigt jeweils das unpolarisierte Intensitätsbild der Strukturen, Teilbild (e) gibt die absolute Phasenverzögerung an. Die Teilbilder (b) und (c) beschreiben das unterschiedliche Schwächungsverhalten an den Strukturkanten für lineare Polarisationszustände unter $0^\circ/90^\circ$ beziehungsweise $\pm 45^\circ$. Im Vergleich zur Kreisstruktur ist die Diattenuation der Rechteckstruktur im Bereich der ausgedehnten Kanten dreimal höher, in den Eckbereichen hingegen beträgt sie nur etwa ein Drittel. Das Wechselwirkungsverhalten mit zirkular polarisiertem Licht (Teilbild (d)) ist für beide Strukturtypen ähnlich. Die Phasenbilder (f)-(h) geben die Phasenverzögerung für die jeweiligen Polarisationszustände an. Die Bilder machen das Problem der bisherigen Darstellungen deutlich, dass globale Koordinatensysteme zur Beschreibung der polarisationsoptischen Transferei-

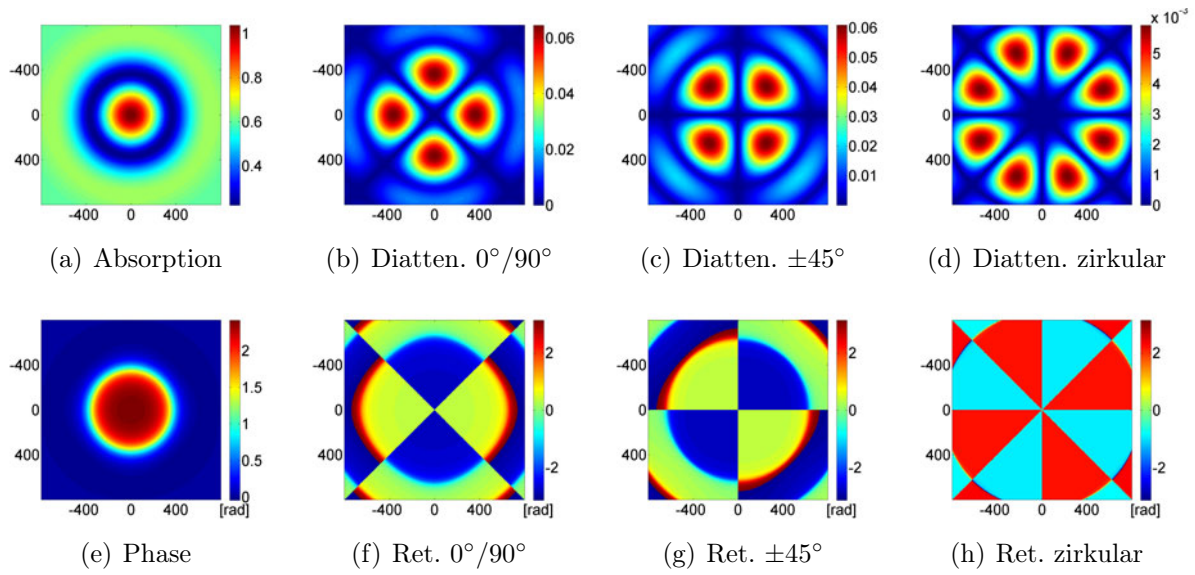


Abb. 8.2: Zerlegung der Jones-Matrix nach Pauli-Spin-Matrizen für einen Kreiszyylinder.

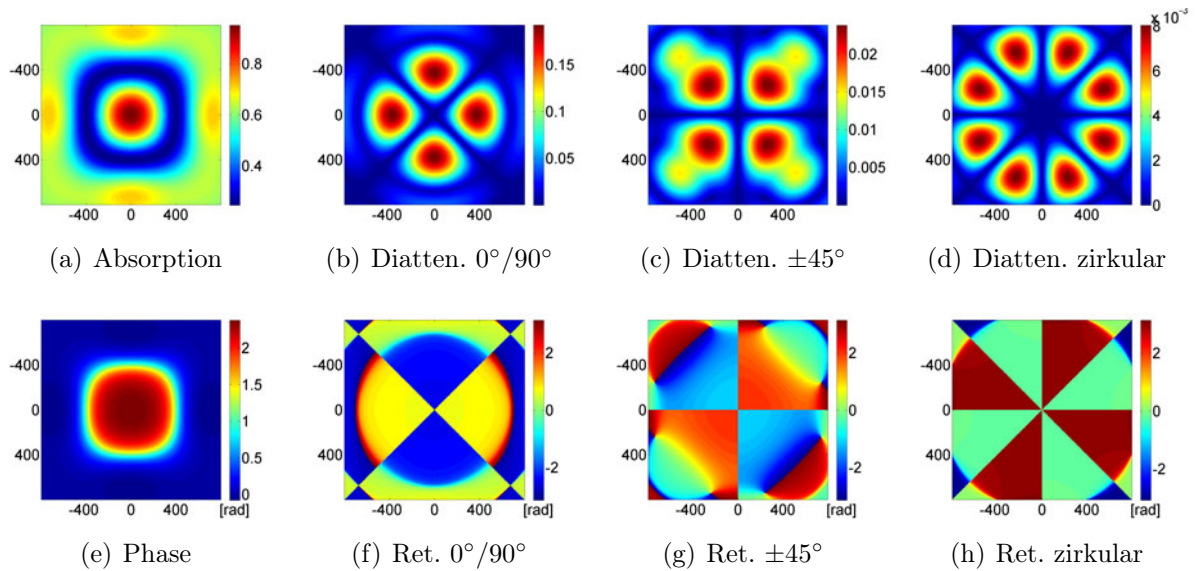


Abb. 8.3: Zerlegung der Jones-Matrix nach Pauli-Spin-Matrizen für eine quadratische Struktur.

genschaften zum Einsatz kommen. Diese Darstellungen werden aber den lokal stark variierenden Transfereigenschaften von Mikro- und Nanostrukturen nicht gerecht. Um in diesen Fällen die wesentlichen Kernelemente des Polarisationstransfers herauszustellen, ist die Beschreibung in lokalen, strukturangepassten Koordinatensystemen sinnvoll. Diese werden in den nächsten Abschnitten beschrieben.

8.1.3 Eigenwert-Zerlegung

Für die grundlegende Charakterisierung des lokalen Transferverhaltens einer Struktur ist die Eigenwert-Zerlegung ein nützliches Werkzeug. Das zugehörige Eigenvektor-Feld beschreibt nämlich orts aufgelöst diejenigen Polarisationszustände, die durch den Wechselwirkungsprozess nicht geändert werden. Ein Übersprechen in andere Polarisationszustände tritt nicht auf. Die entsprechenden Eigenwerte geben die Amplitudenänderung und Phasenretardierung der Eigenvektoren bei der Wechselwirkung an (siehe Abschnitt 4.2.1.3). Dies macht das Eigenvektor-Feld mit den zugehörigen Eigenwerten zu einem charakteristischen Merkmal der Struktur, das Rückschlüsse auf die Form der Struktur zulässt. Die Eigenwert-Zerlegung der Jones-Matrizen aus Abbildung 8.1 ist in Abbildung 8.4 für beide Strukturtypen dargestellt. Die beiden Eigenzustände sind als Polarisationsellipsen orts aufgelöst aufgetragen. Zur besseren Lokalisierung im Feld dienen die unpolarisierten Intensitätsverteilungen als Hintergrundbild (Abb. 8.4 (a) und 8.4 (b)). Betrachtet man zunächst die Kreisstruktur, so zeigt sich im Bereich der Strukturkanten eine klare Ausbildung von linearen Eigenpolarisationszuständen tangential und normal zur Strukturkante. Diattenuation und Retardance beider Eigenpolarisationen (Abb. 8.4 (c) und 8.4 (d)) geben genau das Wechselwirkungsverhalten wieder, das als TE- und TM-Fall bei den Untersuchungen der Kantenwechselwirkung in Kapitel 7 diskutiert wurde. Die Kreissymmetrie der Struktur spiegelt sich sowohl in der Diattenuation, der Retardance als auch dem Eigenvektor-Feld wider. Restabweichungen, die insbesondere am Randbereich der Struktur durch elliptische Eigenzustände deutlich werden, sind auf Wechselwirkungseffekte benachbarter Strukturen in der Gitter-Matrix zurückzuführen.

Auch die Rechteckstruktur zeigt im Bereich der Strukturkanten eine Aufspaltung in lineare Eigenzustände mit tangentialer und normaler Richtung. Durch die größere Ausdehnung der Strukturkante auf das Eineinhalbfache der Wellenlänge ist die Diattenuation und Retardance um den Faktor Zwei größer als bei der Kreisstruktur. In den Eckbereichen hingegen sorgt die Richtungssingularität der Strukturkante für eine starke Variation des

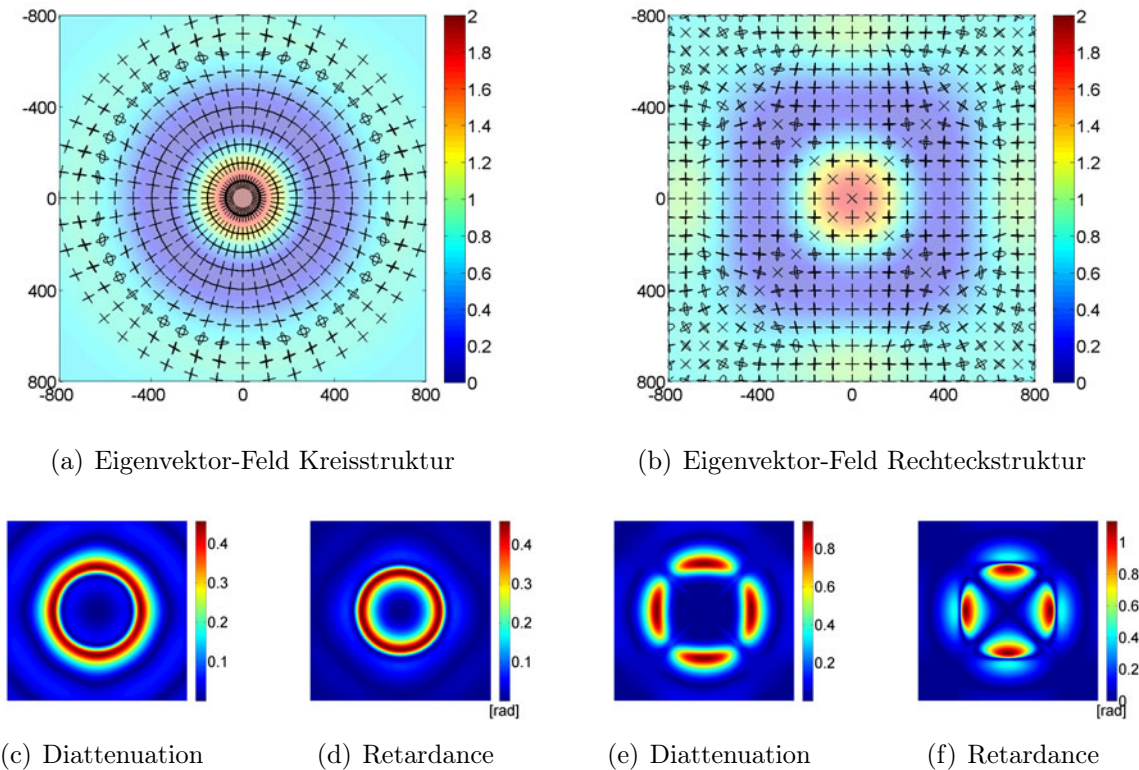


Abb. 8.4: Eigenvektor-Feld der kreisrunden (a) und der rechteckigen Struktur (b). Der Hintergrund entspricht dem unpolarisierten Intensitätsbild. Bild (c) und (d): Diattenuation und Retardance der Kreisstruktur, Bild (e) und (f): Diattenuation und Retardance der Rechteckstruktur.

Eigenvektor-Feldes. Es tritt eine breite Streuung der Orientierungen und Exzentrizitäten der elliptischen Eigenzustände auf. Die Diattenuation und Retardance verschwinden völlig. Dies spiegelt die anschauliche Vorstellung wider, dass sich an einer singulären Struktur, wie einer Ecke, kein definierter Eigenzustand ausbilden kann.

Der Vorteil der Eigenwert-Zerlegung des Jones-Matrix-Feldes ist ihre mathematisch sehr effiziente und physikalisch klar interpretierbare Beschreibung der Wechselwirkungsprozesse. Jeder beliebige Polarisationszustand der Beleuchtung lässt sich orts aufgelöst in die Eigenzustände der Struktur zerlegen und der Gesamtwechselwirkungsprozess als Überlagerung der fundamentalen Wechselwirkungen der Eigenzustände mit der Struktur verstehen.

Der messtechnische Nachteil bei der Bestimmung der Eigenwerte und Eigenvektoren besteht darin, dass genauso wie für die Bestimmung der Jones-Matrix ein Satz von mindestens drei polarimetrischen Messungen notwendig ist. Dies wird schon dadurch deutlich, dass die Eigenwerte im Allgemeinen komplexwertige Größen sind. Auf Basis der SVD-Zerlegung der Struktur lassen sich Messkonfigurationen entwickeln, die mit nur einer Intensitätsmessung auskommen. Hierauf geht der nächste Abschnitt ein.

8.1.4 SVD-Zerlegung

Im Gegensatz zur Eigenwert-Zerlegung liefert die SVD-Zerlegung des Jones-Matrix-Feldes rein reelle Singulärwerte als charakteristische Größen des Wechselwirkungsprozesses. Wie in Abschnitt 4.2.1.4 beschrieben wurde, bilden die rechts-singulären Vektoren $(\tilde{\mathbf{v}}_1, \tilde{\mathbf{v}}_2)$ eine Basis für die Beleuchtungspolarisation und sind mit einem maximalen beziehungsweise minimalen Intensitätstransfer (Gain) durch die Struktur verbunden. Die korrespondierenden Ausgangs-Jones-Vektoren sind die links-singulären Vektoren $(\tilde{\mathbf{u}}_1, \tilde{\mathbf{u}}_2)$. Beide Basissysteme sind orthonormal, das heißt insbesondere

$$\tilde{\mathbf{v}}_1 \cdot \tilde{\mathbf{v}}_2^+ = \tilde{\mathbf{v}}_{\max} \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{\min}^+ = 0 \quad (8.2)$$

und

$$\tilde{\mathbf{u}}_1 \cdot \tilde{\mathbf{u}}_2^+ = \tilde{\mathbf{u}}_{\max} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_{\min}^+ = (\mathbf{J}\tilde{\mathbf{v}}_{\max}) \cdot (\mathbf{J}\tilde{\mathbf{v}}_{\min})^+ = 0 \quad (8.3)$$

Die Gesamtintensitätstransfer nach dem Wechselwirkungsprozess ergibt sich für einen beliebigen Eingangspolarisationszustand $\tilde{\mathbf{E}}$ zu:

$$\mathcal{G}(\tilde{\mathbf{E}}) = \mathcal{G}_{\max} |\tilde{\mathbf{v}}_{\max} \tilde{\mathbf{E}}|^2 + \mathcal{G}_{\min} |\tilde{\mathbf{v}}_{\min} \tilde{\mathbf{E}}|^2 \quad (8.4)$$

Abbildung 8.5 zeigt die SVD-Zerlegung für die Kreisstruktur. Die Vektorfelder in der linken Spalte beschreiben die Eingangspolarisationszustände, für die ein maximaler beziehungsweise minimaler Gain erzielt wird. Die korrespondierenden Ausgangsvektorfelder sind in der rechten Spalte dargestellt. Die Intensitätsbilder im Hintergrund sind die zugehörigen Singulärwerte. Wie der Vergleich der rechten mit der linken Spalte zeigt, stimmen die Vektorfelder auf der Beleuchtungs- und Detektionsseite praktisch überein. Es sind primär lineare Polarisationszustände in tangentialer oder radialer Richtung. Die elliptischen Polarisationszustände im Randbereich sind wieder auf Artefakte der gitterperiodischen Fortsetzung zurückzuführen. Die Orientierungen der Vektoren sind auf Basis der Diskussion des letzten Abschnitts und der experimentellen Untersuchungen aus Kapitel 7 leicht verständlich. Sie entsprechen der lokalen TE- beziehungsweise TM-Polarisation der Strukturkante. Der zugehörige Gain hat in beiden Fällen an der Strukturkante ein Minimum, wobei der Tangentialzustand (d.h. der lokale TE-Zustand) mit einem höheren Wert verbunden ist.

Die SVD-Zerlegung für die Rechteckstruktur in Abbildung 8.6 zeigt ein ähnliches Verhalten. Auch hier stimmen die Vektorfelder der Beleuchtung und Detektion praktisch überein und sind im Bereich der Flanken tangential beziehungsweise normal zur Strukturkante ori-

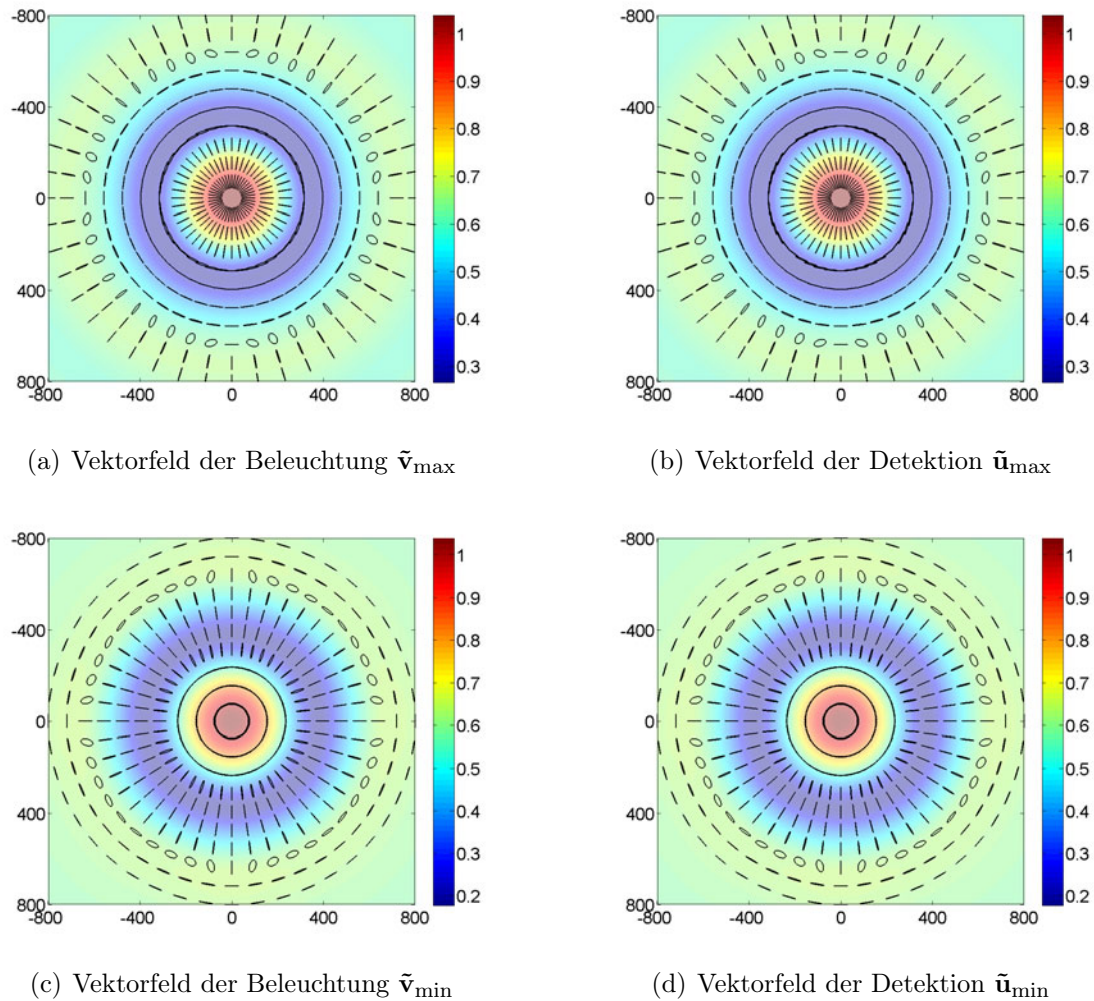


Abb. 8.5: SVD-Zerlegung der kreisrunden Struktur. Der Hintergrund der Bilder gibt die Singulärwerte des Transfers an. Sie entsprechen dem maximalen ((a) und (b)) beziehungsweise dem minimalen Gain ((c) und (d)) der Struktur.

entiert. Wie im Fall der Eigenwert-Zerlegung sorgt die Singularität der Kantenorientierung in den Eckbereichen der Struktur für eine starke Variation des Vektorfeldes. Darüber hinaus zeigt die Rechteckstruktur im Gegensatz zur Kreisstruktur einen deutlich unterschiedlichen Intensitätstransfer für maximalen beziehungsweise minimalen Gain. Während das Transferverhalten für minimalen Gain annähernd kreisförmig ist, weist der maximale Gain einen hohen Kontrast an den Ecken der Struktur auf.

Wie die bisherige Diskussion gezeigt hat, hängt die Polarisationsverteilung des beleuchtenden Lichtwellenfeldes, für das ein maximaler oder auch minimaler Gain erzielt wird, stark von der Form der untersuchten Struktur ab. Ein Beispiel liefert der Vergleich von Abbildung 8.5 (a) und 8.6 (a) für maximalen Gain $\tilde{\mathbf{v}}_{\max}(x, y)$. Andererseits ist damit auch die Polarisations-

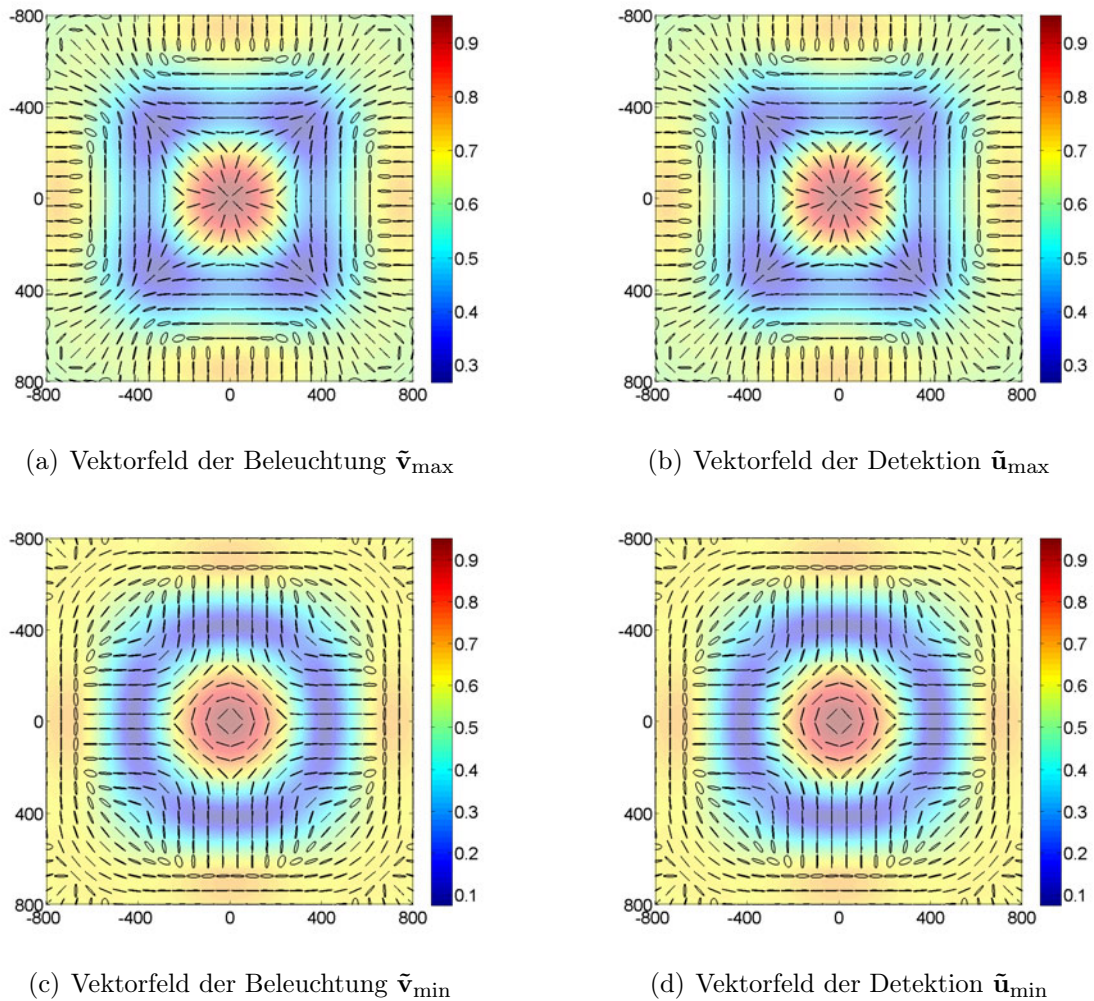


Abb. 8.6: SVD-Zerlegung der rechteckigen Struktur. Der Hintergrund der Bilder gibt die Singulärwerte des Transfers an. Sie entsprechen dem maximalen ((a) und (b)) beziehungsweise dem minimalen Gain ((c) und (d)) der Struktur.

tionsverteilung im Bildraum $\tilde{\mathbf{u}}_{\max}(x, y)$ (Abbildung 8.5 (b)) und 8.6 (b)) festgelegt. Diese starke Verknüpfung zwischen Strukturform einerseits, und der Polarisationsverteilung in Beleuchtung und Bild andererseits, lässt sich zur Strukturerkennung nützen. Verschiedene Anwendungen zur Optimierung der Beleuchtung im Bereich der Defektdetektion und konfokalen Mikroskopie sind denkbar. Um den wesentlichen Grundgedanken dieser Idee zu illustrieren, wird im Folgenden eine Messkonfiguration diskutiert, deren Messprinzip sich stark an die vergleichende Holographie oder den Nulltest in der Interferometrie anlehnt. Anstatt jedoch die Wellenfront eines Masters zu verwenden, wird das polarisationsoptische Transferverhalten der SVD-Zerlegung, das charakteristisch für die spezielle Strukturform des Masters ist, für eine vergleichende Messung herangezogen. Die Kodierung erfolgt also

über die Polarisations-eigenschaften des Lichtwellenfeldes und nicht wie in konventionellen Verfahren über die Phasenfront.

Für die folgende Betrachtung diene die kreisrunde Struktur mit der zugehörigen SVD-Zerlegung in Abbildung 8.5 als Referenzstruktur. Im Vergleich zu dieser Struktur wird nun der Gain von Strukturen bestimmt, die mit schrittweise kleiner werdendem Kantenradius in die rechteckige Strukturform aus Abbildung 8.6 übergehen. Die Brandung ist durch die implizite Bedingung

$$\left(\frac{x}{D}\right)^{2p} + \left(\frac{y}{D}\right)^{2p} = 1 \quad (8.5)$$

gegeben. D bezeichnet den Radius beziehungsweise die halbe Kantenlänge der Struktur. Für $p = 1$ liegt eine Kreisstruktur vor, für $p \rightarrow \infty$ wird ein Rechteck beschrieben. Die Beleuchtung erfolgt immer mit dem Vektorfeld $\tilde{\mathbf{v}}_{\max}^{\circ}(x, y)$ und der Intensitätsverteilung $I_{\text{Bel}}^{\circ}(x, y) = \frac{1}{\sigma_{\max}^{\circ}(x, y)}$ der kreisförmigen Struktur. Da $(\tilde{\mathbf{v}}_1(x, y), \tilde{\mathbf{v}}_2(x, y))$ für jede beliebige Strukturform eine Basis darstellt, lässt sich der Transferprozess durch folgende Aufspaltung beschreiben:

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\text{in}} = \tilde{\mathbf{v}}_{\max}^{\circ} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} a_1 \tilde{\mathbf{v}}_1 \rightarrow \sigma_1 a_1 \tilde{\mathbf{u}}_1 \\ a_2 \tilde{\mathbf{v}}_2 \rightarrow \sigma_2 a_2 \tilde{\mathbf{u}}_2 \end{array} \right\} \rightarrow \tilde{\mathbf{E}}_{\text{out}} = a_1 \sigma_1 \tilde{\mathbf{u}}_1(x, y) + a_2 \sigma_2 \tilde{\mathbf{u}}_2(x, y) \quad (8.6)$$

wobei $a_1 = (\tilde{\mathbf{v}}_1^+ \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{\max}^{\circ})$ und $a_2 = (\tilde{\mathbf{v}}_2^+ \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{\max}^{\circ})$ die Entwicklungskoeffizienten von $\tilde{\mathbf{v}}_{\max}^{\circ}(x, y)$ in der Basis $(\tilde{\mathbf{v}}_1(x, y), \tilde{\mathbf{v}}_2(x, y))$ der untersuchten Struktur sind. Wählt man auf der Bildseite einen ortsabhängigen Polarisationsfilter mit der Verteilung $\tilde{\mathbf{u}}_{\max}^{\circ}(x, y)$, so gilt für die Intensitätsverteilung $\mathcal{G}(x, y)$ nach dem Wechselwirkungsprozess:

$$\mathcal{G}(x, y) = |\tilde{\mathbf{u}}_{\max}^{\circ}(x, y)^+ \cdot \tilde{\mathbf{E}}_{\text{out}}(x, y)|^2 \quad (8.7)$$

Die Funktionsweise des Verfahrens wird in Abbildung 8.7 beim Übergang von der Kreis- zur Rechteckstruktur deutlich. Die erste Zeile zeigt die unpolarisierten Intensitätsbilder für die verschiedenen Strukturen. Die zweite Zeile gibt den konventionellen Kontrast

$$\Gamma = \frac{I(x, y) - I^{\circ}(x, y)}{I(x, y) + I^{\circ}(x, y)} \quad (8.8)$$

der Intensitätsbilder der ersten Zeile an. Die dritte Zeile entspricht dem Intensitätssignal, das durch die polarisationsoptisch strukturierte Beleuchtung und Detektion gewonnen wird. Es entspricht sozusagen einem polarisationsoptischen Nulltest der Struktur. Wie der Vergleich mit den klassischen Kontrastbildern zeigt, kann durch die Einführung von

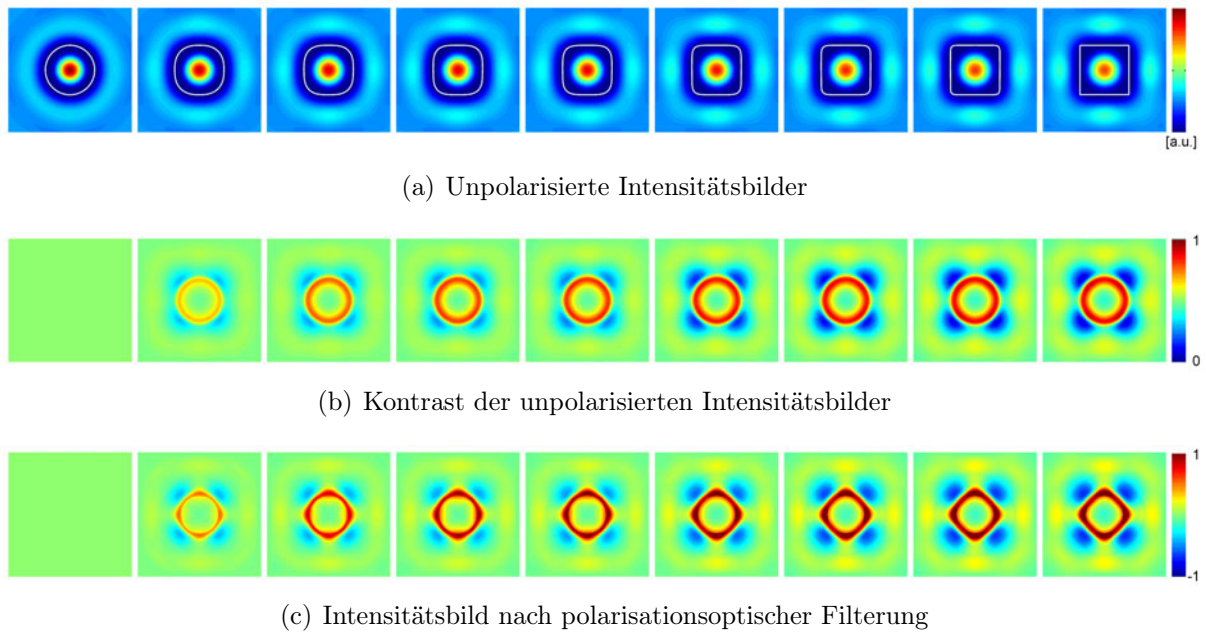


Abb. 8.7: Demonstration des polarisationsoptischen Nulltests auf Basis der SVD-Zerlegung. Die Farbdynamik ist in der zweiten und dritten Zeile gleich gewählt.

polarisationsoptischen Masken in der Beleuchtung und der Detektion ein differentielles Signal eines Messobjekts zu einer virtuellen Masterstruktur gewonnen werden. Der Master ist dabei in den für die Struktur spezifischen Transfereigenschaften der Polarisationszustände kodiert. Der entscheidende Vorteil besteht in der Flexibilität des Verfahrens. Die Masterstruktur muss nicht physikalisch vorliegen, sondern kann zum Beispiel durch den Einsatz räumlicher Lichtmodulatoren im Rahmen der Beugungsbegrenzung frei vorgegeben werden.

Zum Schluss sei bemerkt, dass der Beschreibung des Abbildungsprozesses auf Basis von Gleichung 8.6 und Gleichung 8.7 die lineare Abbildungstheorie zugrunde liegt. In der vorgestellten Form gilt sie nur für eine kohärente, aberrationsfreie Abbildung. Darüber hinaus ist für die Generierung der Beleuchtung mit dem Vektorfeld $\tilde{\mathbf{v}}_{\max}^{\circ}(x, y)$ und der Intensitätsverteilung $I_{\text{Bel}}^{\circ}(x, y)$ aufgrund der Beugungsbegrenzung eine numerische Apertur von ca. $NA = 0,65$ nötig. In diesem Grenzbereich beginnen 3D-Vektoreffekte bei der Beleuchtung und der Strukturwechselwirkung eine Rolle zu spielen. Sie sind in diesem einfachen Modell nicht berücksichtigt. Nichtsdestoweniger bietet die SVD-Zerlegung ein wertvolles Werkzeug, optimierte polarisationsoptische Beleuchtungs- und Detektionskonfigurationen für spezielle Messaufgaben zu designen.

8.1.5 Polare Zerlegung

Die polare Zerlegung erlaubt eine weitere physikalisch klar interpretierbare Zerlegung der Jones-Matrizen: Die Wechselwirkung jedes polarisationsoptischen Elements lässt sich als Kombination eines partiellen Polarisators (Diattenuators) und einem reinen Retarder darstellen (siehe Abschnitt 4.2.1.5). Diese Zerlegung erlaubt daher eine technisch relevante Beschreibung des optischen Elements und spielt im Design von funktionalen Nanostrukturen bei der Optimierung von phasenschiebenden oder polarisierenden Eigenschaften eine wichtige Rolle. Da die Jones-Matrizen der diskutierten Kreis- und Rechteckstruktur überwiegend homogen sind, ist die Reihenfolge von Diattenuator und Retarder unerheblich. Die Darstellung beschränkt sich daher auf die Zerlegung $\mathbf{J} = \mathbf{J}_D' \mathbf{J}_R$. Abbildung 8.8 zeigt die polare Zerlegung der Kreis- und Rechteckstruktur. Die Abweichung der Eigenvektor-Felder für den Diattenuator und den Retarder ist auf schwache lokale Inhomogenitäten des Jones-Matrix-Feldes zurückzuführen. Nichtsdestoweniger ähneln sie sehr stark der Eigenwert-Zerlegung aus Abbildung 8.4. Sowohl für die Kreis- als auch die Rechteckstruktur ist eine starke lokale Abweichung zwischen maximaler Phasenschiebung und Diattenuation zu erkennen. Während die Retardance im Innenbereich der Strukturkanten lokalisiert ist, kommt es im Außenbereich der Kanten zu den stärksten Unterschieden in der polarisationsabhängigen Schwächung.

Über Retardance und Diattenuation drückt die polare Zerlegung die grundlegenden Eigenschaften der rigorosen Kantenwechselwirkung aus. Es kommt über die reinen Beugungseffekte hinaus zu strukturinduzierter Doppelbrechung. Die Wechselwirkungseigenschaften, die für Abbildung 8.8 rigoros berechnet wurden, können daher die Grundlage eines erweiterten semi-rigorosen Modells sein, wie es in Abschnitt 3.5 beschrieben wurde. Über das einfache semi-rigore Modell hinaus werden laterale Wechselwirkungseffekte im Kantenbereich durch eine empirische Doppelbrechungsindexverteilung beschrieben, deren Stärke und räumliche Verteilung aus der polaren Zerlegung von rigorosen Rechnungen bestimmt wird. Ein Beispiel zeigt Abbildung 8.8.

8.2 Polarisationstransfer durch Nanostrukturen im partiell kohärenten Lichtwellenfeld

Das Jones-Matrix-Kalkül bietet insbesondere durch seine verschiedenen, physikalisch klar interpretierbaren Zerlegungen ein mächtiges Werkzeug, um fundamentale polarisationsop-

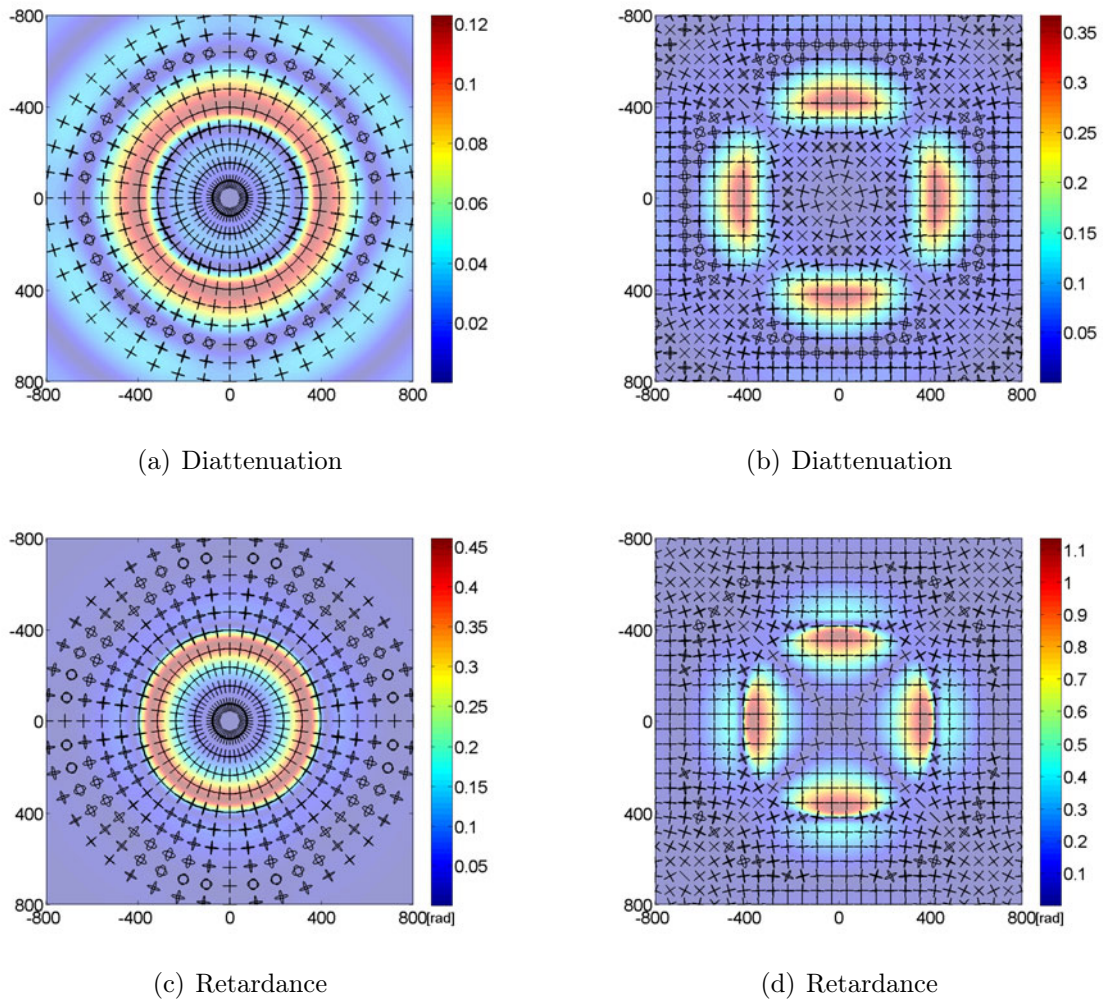


Abb. 8.8: Polare Zerlegung der kreisrunden (links) und der quadratischen Struktur (rechts). Die Polarisationsellipsen beschreiben die jeweiligen Eigenzustände. Die Hintergrundbilder geben Diattenuation und Retardance an.

tische Wechselwirkungsprozesse an Mikro- und Nanostrukturen zu visualisieren und zu quantifizieren. Dies ermöglicht einerseits, die Ursachen polarisationsoptischer Signaturen im Bild zu verstehen, und andererseits hieraus neue Messverfahren und Designstrategien für Mikro- und Nanostrukturen zu entwickeln. Allerdings ist das Jones-Matrix-Kalkül dadurch beschränkt, dass die Jones-Matrix Depolarisationsprozesse nicht erfassen kann. Erweitert man jedoch die Untersuchungen an beugenden Strukturen von einem kohärenten auf ein partiell kohärentes Lichtwellenfeld, so tritt Depolarisation auf. Abbildung 8.9 zeigt den Depolarisationsgrad (siehe Gleichung 4.54) der bisher diskutierten Kreis- und Rechteckstrukturen für eine numerische Apertur $NA_{Bel} = 0$ (d.h. kohärente Beleuchtung) bis zu einer numerischen Apertur von $NA_{Bel} = 0,6$. Für eine inkohärente Quelle nimmt der Kohärenz-

grad der Beleuchtung mit Vergrößerung der numerischen Beleuchtungsapertur ab und die Depolarisationseffekte deutlich zu.

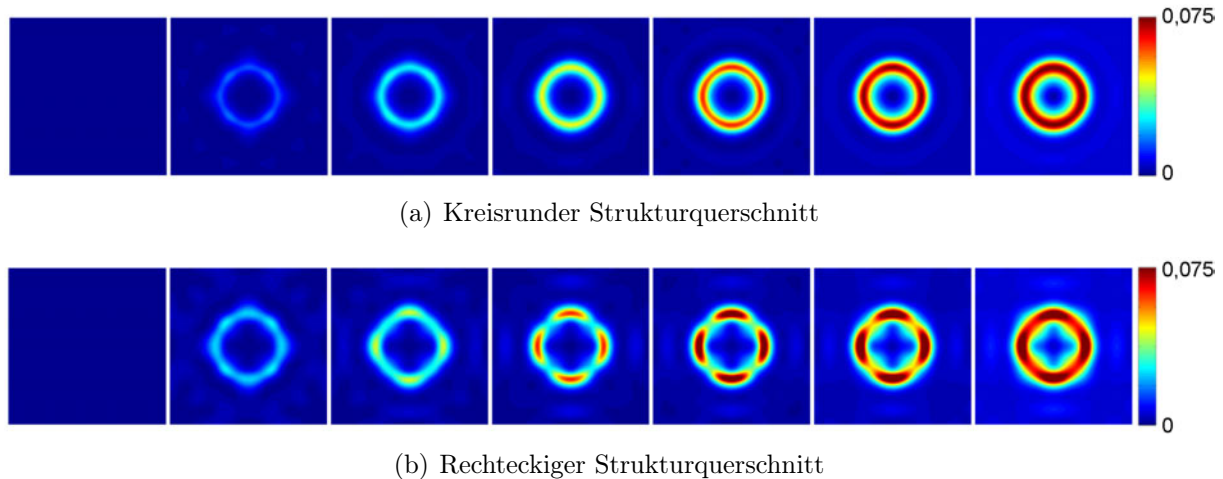


Abb. 8.9: Depolarisation der Mikrostrukturen in Abhängigkeit vom Kohärenzgrad der Beleuchtung. Die numerische Apertur der Beleuchtung nimmt von links nach rechts zu ($NA_{Bel} = 0$ bis $NA_{Bel} = 0,6$).

Die Depolarisation in einem partiell kohärenten Lichtwellenfeld hat insbesondere zwei Gründe:

1. Selektive Absorption und Phasenretardierung von Polarisationszuständen an Strukturkanten.
2. Dekorrelation der Amplituden und Phasen des gebeugten Lichts im partiell kohärenten Licht.

Dies macht die Anwendung des Müller-Matrix-Kalküls für die polarisationsoptische Bildinterpretation im partiell kohärenten Lichtwellenfeld unumgänglich.

8.2.1 Ortsaufgelöste Müller-Matrizen der Mikrostrukturen

Die ortsaufgelöste Müller-Matrix wird durch einen Satz von vier Bildern bestimmt, die sich für vier verschiedene Eingangspolarisationen – horizontal, vertikal, diagonal und zirkular – ergeben. Die vollständige polarisationsoptische Information der Ausgangsbilder wird durch

das berechnete Stokes-Vektorfeld erfasst. In Matrix-Notation ergibt sich

$$\begin{bmatrix} s_{01} & | & s_{02} & | & s_{03} & | & s_{04} \\ s_{11} & | & s_{12} & | & s_{13} & | & s_{14} \\ s_{21} & | & s_{22} & | & s_{23} & | & s_{24} \\ s_{31} & | & s_{32} & | & s_{33} & | & s_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{00} & m_{01} & m_{02} & m_{03} \\ m_{10} & m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{20} & m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{30} & m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & | & 1 & | & 1 & | & 1 \\ 1 & | & -1 & | & 0 & | & 0 \\ 0 & | & 0 & | & 1 & | & 0 \\ 0 & | & 0 & | & 0 & | & 1 \end{bmatrix} \quad (8.9)$$

wobei die Ortsabhängigkeit der Ausgangs-Stokes-Vektoren $\mathbf{s}_i = \mathbf{s}_i(x, y)$ und der Müller-Matrix $\mathbf{M} = \mathbf{M}(x, y)$ in Gleichung 8.9 nicht explizit formuliert wurde. Durch Multiplikation mit der inversen Beleuchtungsmatrix von rechts ergibt sich die ortsaufgelöste Müller-Matrix.

Abbildung 8.10 und Abbildung 8.11 zeigen die Müller-Matrix einer Kreis- und einer Rechteckstruktur für eine Beleuchtungsapertur von $NA_{Bel} = 0,6$. Sowohl die Strukturen als auch die Abbildungsparameter sind identisch mit denen der bisherigen Diskussion. Die

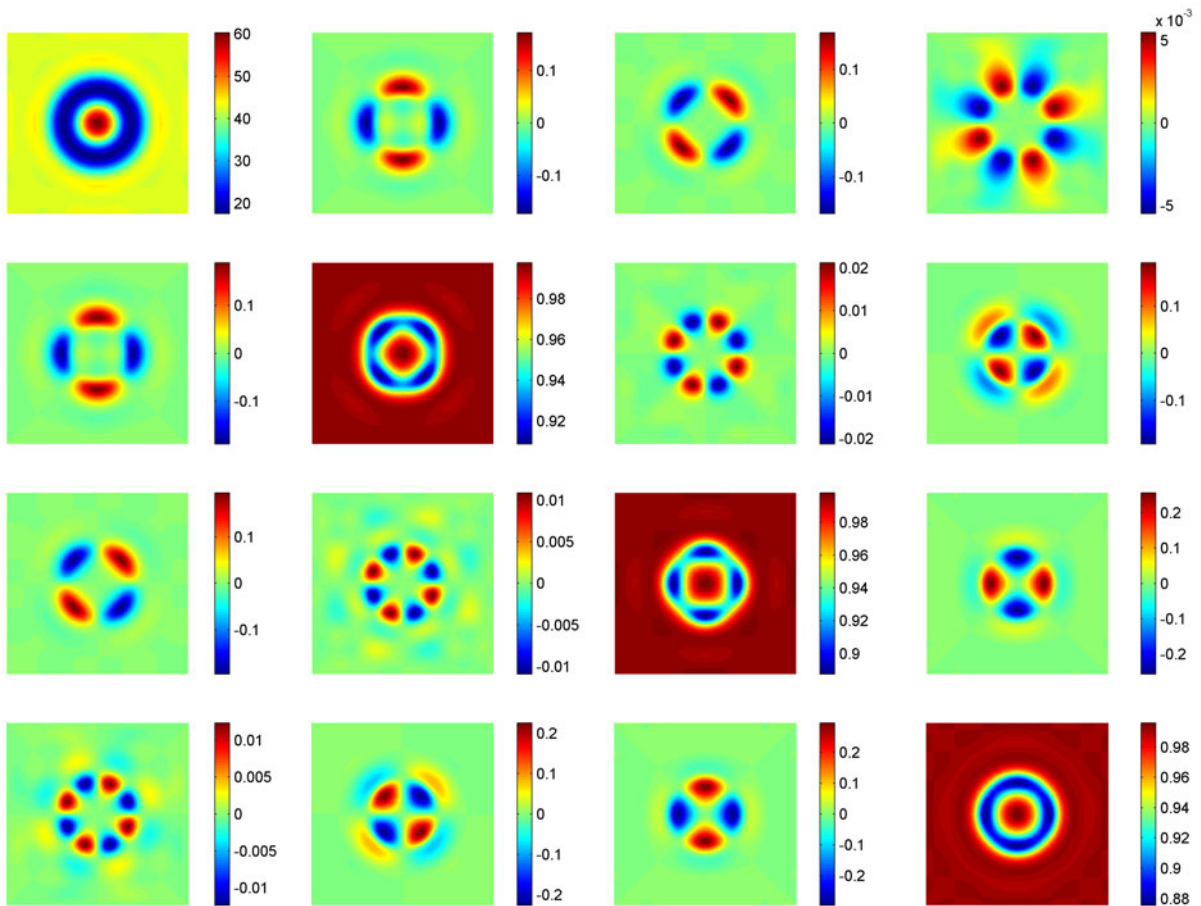


Abb. 8.10: Müller-Matrix der kreisförmigen Vertiefung in Silizium

Gitterperiode beträgt nun 2000 nm. Das Matrixelement m_{00} entspricht der unpolarisierten Gesamtintensität der Struktur. Um den Einfluss der Intensitätsverteilung auf die Müller-Matrix zu eliminieren, sind alle anderen Matrixelemente punktweise auf das m_{00} -Element normiert. Die Müller-Matrizen beider Strukturen zeigen deutlich, dass der Polarisations-transfer an den Grenzlinien der Struktur lokalisiert ist und klar durch die Strukturform beeinflusst wird.

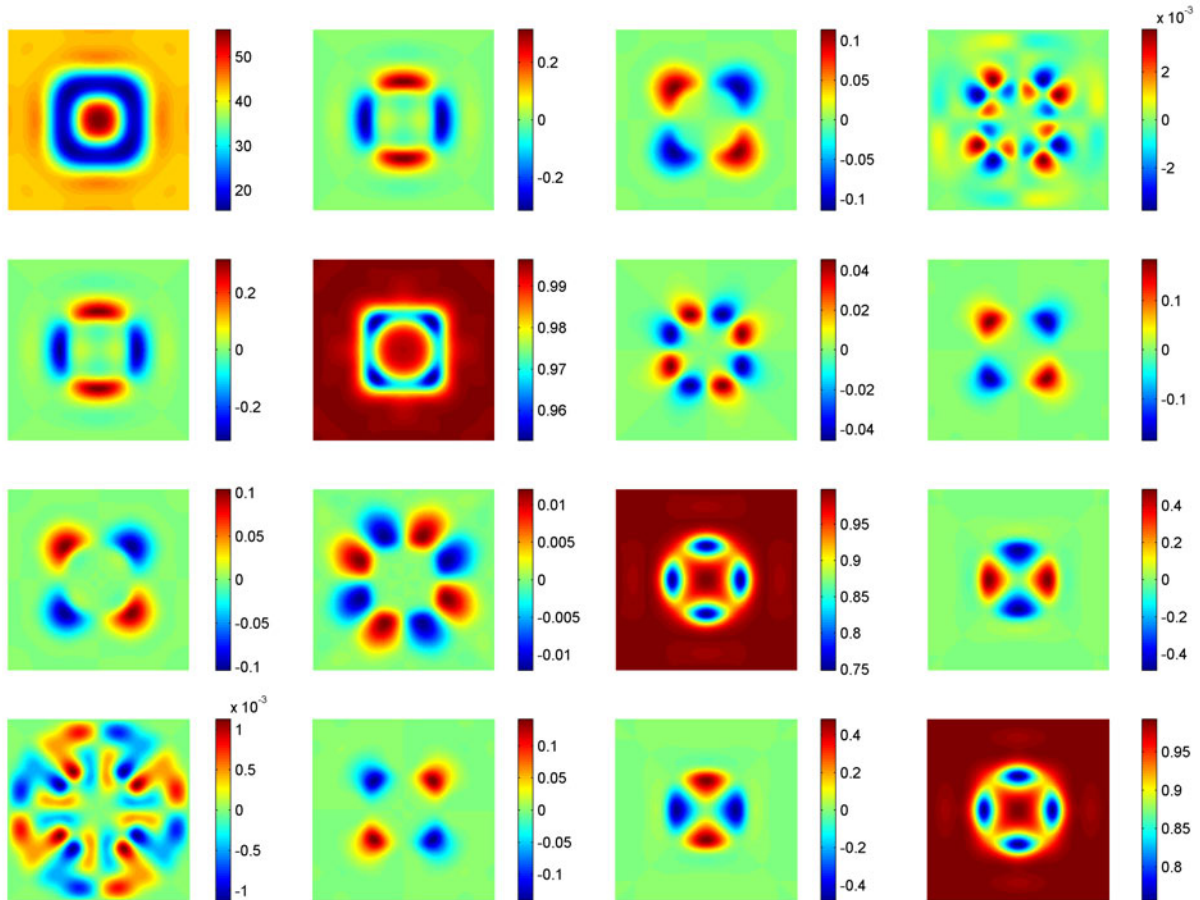


Abb. 8.11: Müller-Matrix der quadratischen Vertiefung in Silizium

8.2.2 Interpretation der Müller-Matrixelemente

Auch wenn die Müller-Matrix keine so unmittelbare Interpretation wie die Jones-Matrix erlaubt, lassen sich entsprechend Abschnitt 4.2.2 den einzelnen Müller-Matrix-Elementen bestimmte polarisationsoptische Effekte zuordnen. Dies war in Gleichung 4.51 zusammen-

gefasst als:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_0 & \mathcal{D}_{xy} & \mathcal{D}_{diag} & \mathcal{D}_{circ} \\ \mathcal{P}ol_{xy} & \mathcal{A}_1 & \mathcal{R}_{circ} & -\mathcal{R}_{diag} \\ \mathcal{P}ol_{diag} & -\mathcal{R}_{circ} & \mathcal{A}_2 & \mathcal{R}_{xy} \\ \mathcal{P}ol_{circ} & \mathcal{R}_{diag} & -\mathcal{R}_{xy} & \mathcal{A}_3 \end{bmatrix}$$

Beginnen wir die Betrachtungen mit der ersten Zeile der Müller-Matrix. Das m_{01} -Element gibt die lineare Diattenuation \mathcal{D}_{xy} entlang der Koordinatenachsen an und das m_{02} -Element die Diattenuation \mathcal{D}_{diag} entlang der Winkelhalbierenden. Im Falle der Kreisstruktur spiegelt sich die Radialsymmetrie der Struktur in der Müller-Matrix wider. So geht das Matrixelement m_{02} durch eine 45° -Drehung aus dem Element m_{01} hervor. Im Vergleich zur Kreisstruktur hat die Rechteckstruktur hingegen einerseits eine doppelt so hohe Diattenuation \mathcal{D}_{xy} entlang der Strukturkanten, andererseits kommt es an den Ecken der Struktur sogar zu einer Kontrastumkehr (m_{02} -Element). Wie schon die Untersuchungen im Jones-Matrix-Formalismus zeigen, variieren die Polarisationszustände aufgrund der Richtungssingularität im Bereich der Ecke sehr stark. Am stetigen Kantenausschnitt der

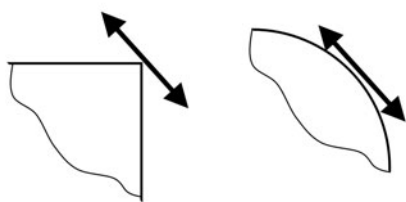


Abb. 8.12: Unterschiede in der lokalen Orientierung des Polarisationszustandes für eine Kreis- und Rechteckstruktur.

Kreisstruktur hingegen liegt in diagonalen Richtung ein lokaler Eigenzustand vor (siehe Abbildung 8.12). Dies prägt diagonal polarisiertem Licht eine vollkommen unterschiedliche Signatur für beide Strukturtypen auf. Auch das unterschiedliche Polarisationsvermögen der Strukturen, das durch m_{10} in xy -Richtung und durch m_{20} in Diagonalrichtung repräsentiert wird, lässt sich durch diese Effekte erklären. Die lineare Retardierung \mathcal{R}_{xy} kommt in den Elementen m_{23} und m_{32} zum Ausdruck. Die lineare Retardierung \mathcal{R}_{diag} entlang der Winkelhalbierenden

steckt in den Elementen m_{31} und m_{13} . Auch hier zeigt ein Vergleich der Elemente ein vollkommen analoges Verhalten zur Diattenuation. Insbesondere kehrt sich in diesen Elementen bei der Gegenüberstellung beider Strukturtypen wieder der Kontrast um. Das lokale Vorzeichen in den orts aufgelösten Müller-Matrix-Elementen ist also ein klarer Indikator für die Strukturform. Diese Abhängigkeit ist auch aus der Effektiven Medium Theorie (EMT) von Sublambda-Strukturen gut bekannt. Während ein Stapel rechteckförmiger Platten (mit Dicke und Abstand deutlich kleiner als die Wellenlänge) wie ein negativ einachsiger Kristall wirkt, verhalten sich zylindrische Sublambda-Strukturen wie ein positiv einachsiger Kristall [406, 407].

Das Wechselwirkungsverhalten der Strukturen mit zirkular polarisiertem Licht wird durch die Nebendiagonalelemente der Müller-Matrix beschrieben. Die zirkulare Diattenuation in m_{03} und das zirkulare Polarisationsvermögen in m_{30} spiegeln die runde beziehungsweise rechteckige Grundform der jeweiligen Struktur wider. Die zirkulare Retardierung \mathcal{R}_{circ} in den Elementen m_{12} und m_{21} zeigt sowohl für die Rechteckstruktur als auch für die Kreisstruktur Abweichungen vom anti-symmetrischen Zusammenhang beider Elemente. Für die Kreisstruktur liegt sogar vielmehr eine symmetrische Relation vor. Diese Abweichungen vom geforderten anti-symmetrischen Verhalten in der Müller-Matrix nach Gleichung 4.51 weisen auf Inhomogenitäten der Eigenzustände und insbesondere auf einen starken Einfluss von Depolarisationseffekten hin. Auf diese Effekte lässt auch der Bruch der Symmetrie zwischen dem m_{03} -Element und dem m_{30} -Element in den Müller-Matrizen beider Strukturtypen schließen.

Den Hauptdiagonalelementen der Müller-Matrizen kann keine eindeutige polarisationsoptische Funktion zugeordnet werden, da Absorptions-, Retardierungs- und Depolarisationseffekte in die Bestimmung dieser Größen eingehen. Doch auch hier prägt die Symmetrie der Strukturen das Aussehen der Elemente. Im Falle des m_{33} -Elements bleibt beim Kreis die Radialsymmetrie erhalten, während sie durch die Rechteckstruktur gebrochen wird.

8.2.3 Objektrekonstruktion

Spezielle Formmerkmale der Struktur prägen der Müller-Matrix charakteristische Eigenschaften auf. Die deutlichste Auswirkung zeigt sich sogar in der Kontrastumkehr einiger Matrixelemente beim Übergang von einer eckigen zu einer runden Strukturform. Die Müller-Matrix wird damit zum polarisationsoptischen Fingerabdruck, den die Struktur als charakteristisches Merkmal bei der Wechselwirkung in einem partiell kohärenten Lichtwellenfeld hinterlässt. Die Müller-Matrix kann also zur Strukturrekonstruktion von Formmerkmalen herangezogen werden, deren Ausdehnung und Kenngrößen im Sublamdabereich angesiedelt sind. Um die Sensitivität der Müller-Matrix auf die Strukturform deutlich zu machen, ist in Abbildung 8.13 die Änderung einiger ausgewählter Elemente der Müller-Matrizen aus Abbildung 8.10 und Abbildung 8.11 in Abhängigkeit vom Krümmungsradius der Ecken aufgetragen. Diese Änderungen werden besonders deutlich, wenn diagonale oder zirkulare Polarisationszustände im Transferprozess beteiligt sind. Die Strukturform ändert sich im Bild in 9 Schritten von einer kreisrunden zu einer rechteckigen Struktur. Die Farbdynamik bleibt beim Übergang konstant, um die absoluten Änderungen deutlich

zu machen. Die Diattenuation entlang der Winkelhalbierenden (Abb. 8.13 (b)) wird im Fall der Kreisstruktur durch die Wechselwirkung eines ausgedehnten Kantenstückes dominiert. Es wird durch den Kantenausschnitt des entsprechenden Kreissegmentes gebildet. Nimmt nun der Krümmungsradius ab, können sich die parallel und normal orientierten Eigenzustände an der Struktur immer schlechter ausprägen. Die Diattenuation nimmt ab. Beim Übergang vom fünften zum sechsten Bild der Serie kommt es zu einer graduellen Kontrastumkehr. In diesem Übergangsbereich hat der Krümmungsradius eine Länge von $\frac{\lambda}{2}$ bis $\frac{\lambda}{4}$. Für noch kleinere Krümmungsradien wird die nun negative Diattenuation wieder stärker bis sie ihren Maximalwert für die quadratische Struktur erreicht. Äquivalent verhält sich das Polarisationsvermögen in Abb. 8.13 (c). Auch die Retardierung in Abb. 8.13 (d) wird bei der Kreisstruktur durch die Kantendoppelbrechung wie an einem ausgedehnten geradlinigen Strukturübergang bestimmt. Die charakteristische Verteilung einer positiven und negativen Retardierung im Innen- und Außenbereich der Kante verschwindet bei Verkleinerung des Krümmungsradius völlig. Für die rechteckige Struktur ist die Retardierung unmittelbar an den Ecken lokalisiert. Auch hier findet der Übergang zwischen beiden Wechselwirkungstypen für Krümmungsradien im Bereich von $\frac{\lambda}{2}$ bis $\frac{\lambda}{4}$ statt.

Das Transferverhalten für zirkular polarisiertes Licht ist im Vergleich zu den übrigen Elementen der Müller-Matrix deutlich schwächer ausgeprägt. Der Kontrast ist etwa um den Faktor Zehn kleiner, was eine Messung dieser Effekte erschwert. Die zirkulare Diattenuation (Abb. 8.13 (e)) beschreibt für die kreisförmige Vertiefung eine oszillatorische Ringstruktur, während sich für die rechteckige Vertiefung Kleeblatt-artige Retardierungsmuster an den Ecken entwickeln. Beide Muster sind stark durch die jeweilige Grundsymmetrie der Struktur geprägt. Der Übergang zwischen beiden Typen ist fließend. Ein interessantes Verhalten zeigt auch das zirkulare Polarisationsvermögen (Abb. 8.13 (f)). Beim Übergang von der Kreis- zur Rechteckstruktur nimmt es zunächst leicht zu bevor es für die quaderförmige Vertiefung vollkommen verschwindet.

Die zirkulare Retardierung \mathcal{R}_{circ} wird durch die Matrix-Elemente m_{12} und m_{21} repräsentiert. Beide Elemente sind in Abb. 8.13 (g) und Abb. 8.13 (h) mit gleicher Farbdynamik dargestellt. Das anti-symmetrische Verhalten beider Elemente in der Müller-Matrix ist für beide Strukturformen stark gestört. Im Falle der Kreisstruktur sind m_{12} und m_{21} sogar symmetrisch zueinander. Die gegensätzlichen Tendenzen im Kontrast des m_{12} -Elements und des m_{21} -Elements in Abhängigkeit von der Strukturform sind klare Indikatoren dafür, dass Depolarisationseffekte einen starken Einfluss auf diese Art der Wechselwirkung haben und dass die Eigenvektoren des Polarisationstransfers nicht mehr orthogonal sind.

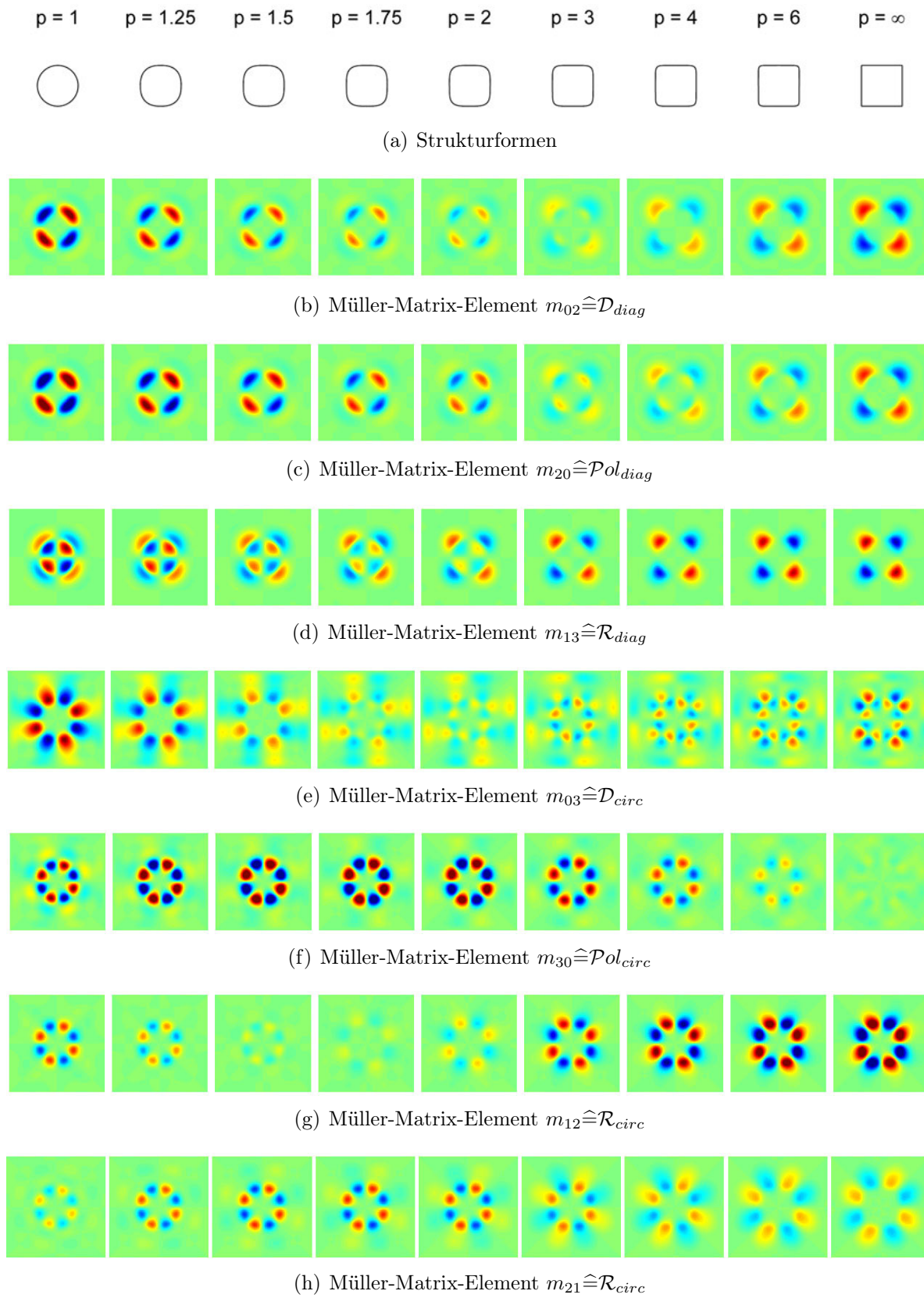


Abb. 8.13: Abhängigkeit einiger Müller-Matrix-Elemente von der Strukturform. In den Bilderserien wird der Krümmungsradius nach Gleichung 8.5 graduell von einer Struktur mit kreisrundem Querschnitt zu einer Struktur mit quadratischem Querschnitt verkleinert.

8.2.4 Müller-Matrix-Bildgebung: Ein neuer Weg zur Überauflösung?

Das entscheidende Kennzeichen der bisherigen Beispiele ist, dass die charakteristischen Dimensionen der Strukturmerkmale, die zu einer signifikanten Änderung der Müller-Matrix-Elemente führen, deutlich kleiner als die Wellenlänge sind. So können zum Beispiel Rundungen mit einem Krümmungsradius von $\frac{\lambda}{4}$ im klassischen Sinne nicht mehr aufgelöst werden². Dies wird auch in der Bilderserie 8.7 (a) deutlich. Ab dem fünften Bild der Serie sind kaum noch Änderungen im Intensitätsbild des Eckbereichs sichtbar. In der Müller-Matrix-Bildgebung hingegen sorgen Änderungen des Krümmungsradius auch dann noch für deutliche Kontrastvariationen, wenn sie kleiner als ein Viertel der Wellenlänge sind (siehe Abbildung 8.13). Die Ursache für diesen zunächst verblüffenden Unterschied liegt darin, dass in der orts aufgelösten Müller-Matrix nicht nur die reine Phasen- und Amplitudeninformation der Beugungsordnungen zur Bildgenerierung genutzt werden, sondern dass auch der polarisationsoptische Gehalt der Beugungsamplituden zum Kontrast beiträgt. Der Polarisationszustand der Beugungsordnungen wird aber primär durch elektromagnetische Wechselwirkungseffekte beeinflusst, die wiederum stark von der Strukturform insbesondere im Sublamdabereich abhängen. Das Intensitätsbild entspricht damit nur einem kleinen Teil der Information, die im partiell polarisierten Lichtwellenfeld des Objekts steckt. Die unpolarisierte Intensitätsinformation wird durch das Müller-Matrix-Element m_{00} beschrieben. Die anderen Elemente der Müller-Matrix hingegen visualisieren die Details der elektromagnetischen Wechselwirkung, die an spezielle Strukturformen gekoppelt sind.

Nach dem bisher Gesagten sind die orts aufgelösten Müller-Matrix-Elemente nichts weiter als der Ausdruck polarisationsoptischer Interferenzerscheinungen in der Bildebene. Dies entspricht ganz der Kernaussage der Abbeschen Abbildungstheorie. Damit ist aber auch klar, dass durch die Müller-Matrix-Bildgebung keine Überauflösung erwartet werden kann. Es müssen zumindest zwei homologe Beugungsordnungen in den Aperturkegel des Objektivs fallen, um die Gesamtstruktur abbilden zu können. Die einzelnen Müller-Matrix-Elemente liefern daher auch keine überaufgelöste Darstellung von Strukturmerkmalen, sondern lediglich charakteristische Signaturen, die beugungsbegrenzt im Bereich der Strukturmerkmale lokalisiert sind. Das klassische Auflösungsvermögen wird also durch eine allgemeinere Form der Objektrekonstruktion ergänzt. Dimensionelle Merkmale wie Form oder Rauheit der Struktur, die eine kleinere Ausdehnung als das Auflösungsvermögen des

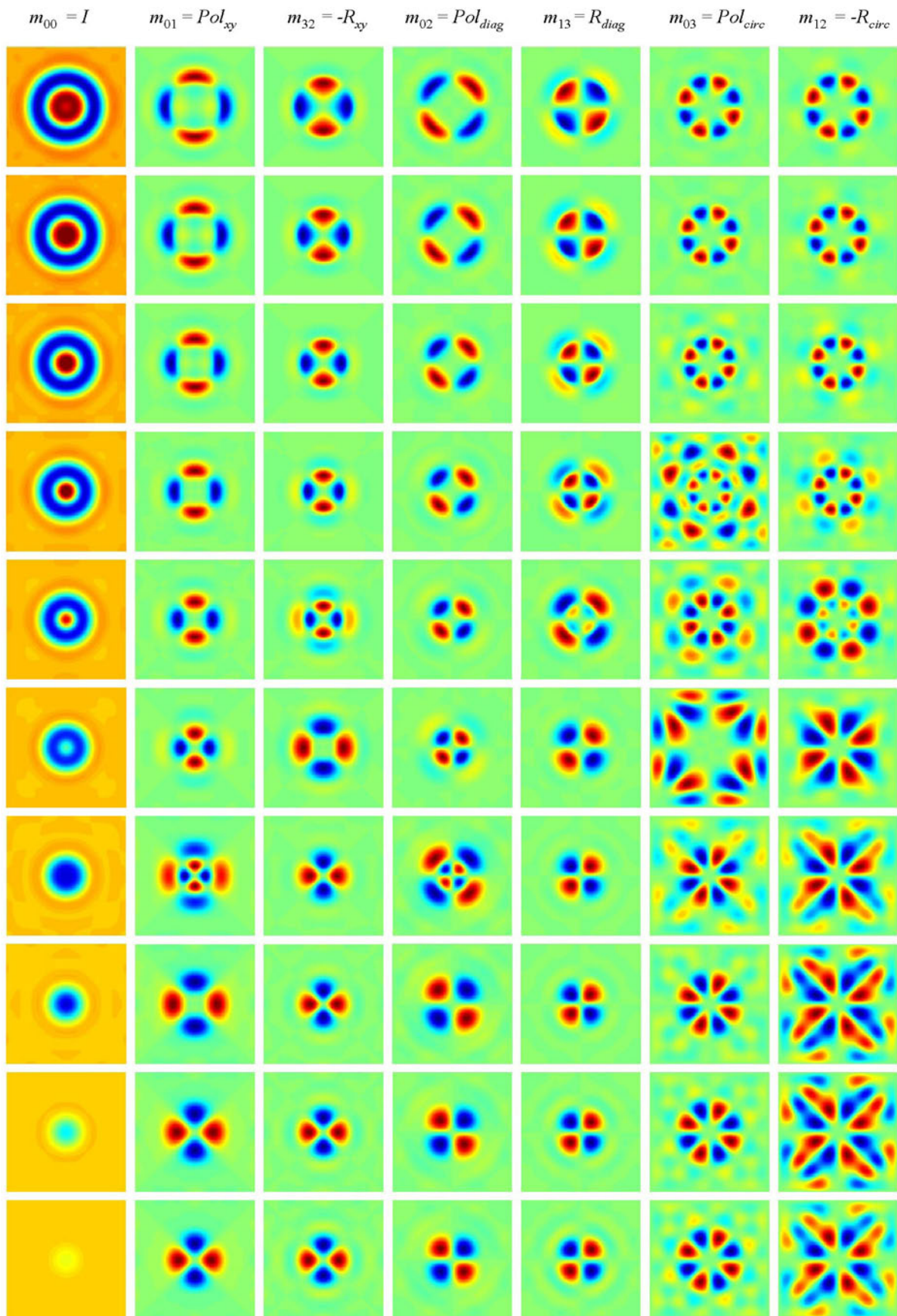
²Das klassische Auflösungsvermögen ist im vorliegenden Fall $\Delta x = 0,61 \frac{\lambda}{0,9} = 370 \text{ nm}$.

abbildenden Systems haben, werden durch den polarisationsoptischen Fingerabdruck identifiziert.

Damit stellt sich aber unmittelbar die Frage, ob diese polarisationsoptische Identifikation prinzipiellen Limitierungen unterworfen oder für beliebig kleine Strukturen anwendbar ist. Um diese Frage zu beantworten zeigt Abbildung 8.14 ausgewählte Müller-Matrix-Elemente für eine kreisförmige Struktur und Abbildung 8.15 für eine rechteckige Struktur. Der Durchmesser beziehungsweise die Kantenlänge der Strukturen nimmt in 100nm-Schritten von 1000 nm auf 100 nm ab. Alle übrigen Parameter entsprechen denen der bisherigen Rechnungen. In den Intensitätsbildern m_{00} wird die Farbdynamik innerhalb der Bilderserie festgehalten. Bei den übrigen Elementen ist die Skalierung zur besseren Darstellung an den Maximal- und Minimalwert des jeweiligen Bildes angepasst.

In den ersten drei Zeilen von Abbildung 8.14 und Abbildung 8.15 haben die Strukturen eine Ausdehnung von ca. $2\lambda - 1,5\lambda$. Die Müller-Matrix-Elemente zeigen die klaren formabhängigen Signaturen, die in den letzten Abschnitten diskutiert wurden. Eine Unterscheidung lokaler Details der Strukturform ist in den Müller-Matrix-Elementen mit hohem Kontrast möglich. Dem steht das Verhalten von Strukturen gegenüber, die in ihrer Gesamtausdehnung kleiner als $0,5\lambda$ sind. Dies illustrieren die Müller-Matrix-Elemente in den letzten beiden Zeilen von Abbildung 8.14 beziehungsweise 8.15. Die polarisationsoptischen Signaturen sind vollkommen identisch, unabhängig davon, ob eine kreisrunde oder rechteckige Struktur vorliegt. Im Größenbereich von $1,5\lambda - 0,5\lambda$ kommt es zu einem graduellen Übergang beider Extremformen, wobei sowohl die Größe als auch die Form der Strukturen das Aussehen der Müller-Matrix-Elemente bestimmen.

Dieses Verhalten wird verständlich, wenn man die Vertiefung in Silizium als Streuzentrum betrachtet. Ist die Ausdehnung des Streuers viel kleiner als die Wellenlänge, so hat die konkrete Form und Größe des Streuers keinen Einfluss auf die Streucharakteristik. Es liegt Rayleigh-Streuung wie an einem Punkt-förmigen Teilchen vor [74]. Zur Illustration ist in Abbildung 8.16 die vollständige Müller-Matrix für eine kreisrunde Vertiefung in Silizium mit einem Durchmesser von 100 nm dargestellt. Trotz der inkohärenten Beleuchtungsbedingungen ist aufgrund der kleinen Ausdehnung der Struktur ($< \frac{\lambda}{2}$) der Kohärenzgrad des Lichtwellenfeldes innerhalb des Strukturbereiches sehr hoch. Depolarisationseffekte spielen daher kaum eine Rolle. Mit wachsenden Strukturdimensionen (Bereich $0,5\lambda - 2\lambda$) bestimmen die Vielfachstreuung innerhalb der Struktur und gegebenenfalls Resonanzeffekte in der Struktur das elektromagnetische Beugungsspektrum. Diese Effekte hängen stark von der Form und der Größe der Struktur ab. Die Müller-Matrix-Elemente zeigen daher eine



202 **Abb. 8.14:** Müller-Matrix-Elemente der Kreisstruktur, Durchmesser 1000 nm bis 100 nm.



Abb. 8.15: Müller-Matrix-Elemente der Rechteckstruktur, Kantenlänge 1000 nm bis 100 nm.

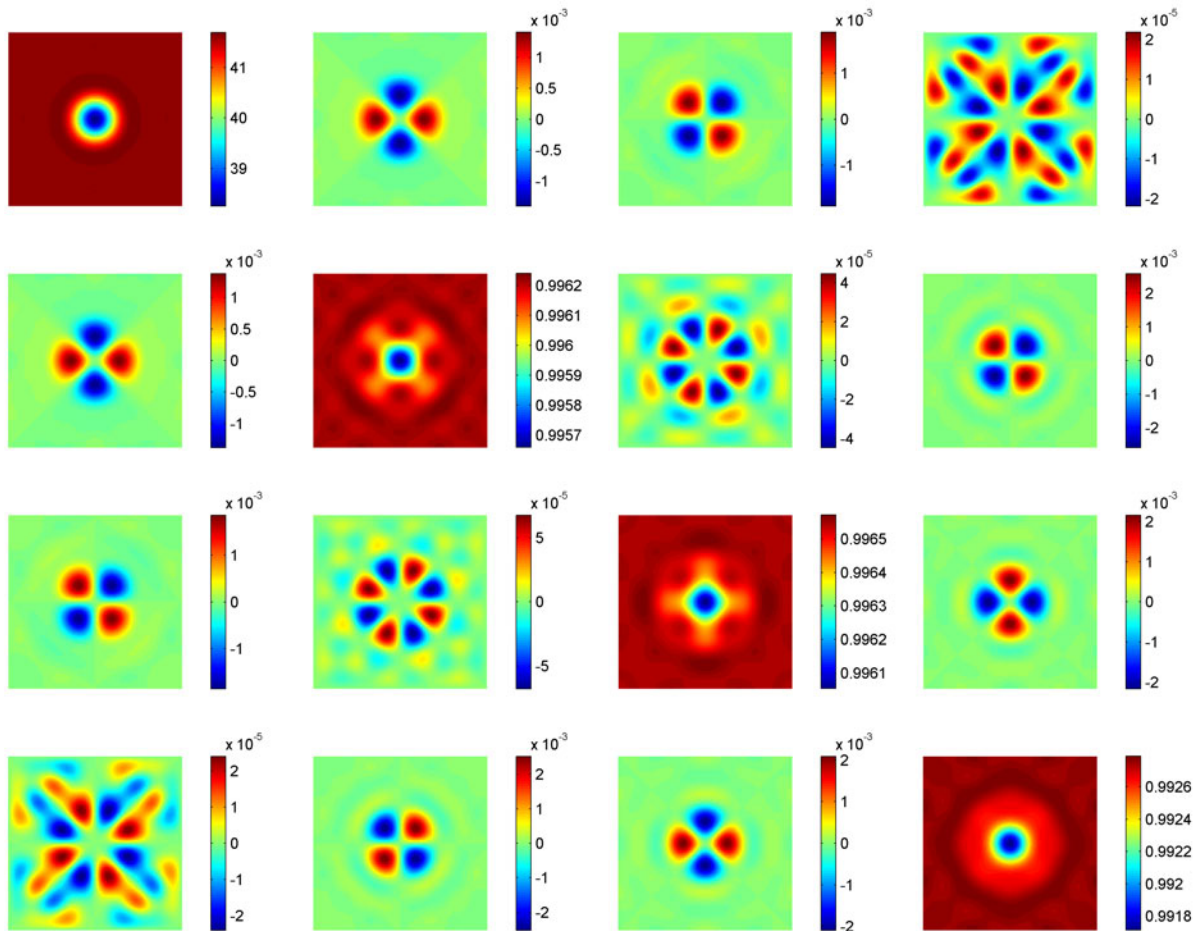


Abb. 8.16: Müller-Matrix der quadratischen Vertiefung in Silizium

starke Variation in diesem Übergangsbereich. Dieser Fall entspricht der Mie-Streuung in der rigorosen Streutheorie [74]. Der Kohärenzgrad zwischen unterschiedlichen Strukturbereichen nimmt aufgrund der partiellen räumlichen Kohärenz ab. Depolarisationseffekte gewinnen an Bedeutung.

Sind die Abmessungen der Strukturen deutlich größer als die Wellenlänge, so spielt die Wechselwirkung zwischen entfernten Strukturbereichen eine untergeordnete Rolle für die Entstehung des Gesamtbildes. Das Verhältnis zwischen Strukturdimension und Kohärenzlänge der partiell kohärenten Beleuchtung nimmt zu. Daher sind auch Depolarisationseffekte bei der Bildentstehung wichtig. Entfernte Strukturbereiche können aufgrund der Inkohärenz der Beleuchtung unabhängig voneinander betrachtet werden. In diesem Fall liefert die orts aufgelöste Müller-Matrix klare Indikatoren für Strukturformen, auch wenn diese im klassischen Sinne nicht aufgelöst werden können.

Die letzten beiden Abschnitte machten die Möglichkeiten und Grenzen der Müller-Matrix-

Bildgebung deutlich. Im Sinne der Abbesche Abbildungstheorie wird das Auflösungsvermögen durch die Nutzung von Polarisierungseffekten nicht erhöht. Allerdings kann durch den gezielten Einsatz polarisationsoptischer Transferprozesse der Kontrast im optischen Bild deutlich gesteigert werden. Bei geeigneter Wahl der Polarisationszustände wird sogar eine Form-abhängige Kontrastumkehr erzielt. Dies gilt nach Abschnitt 8.2.3 für Krümmungsradien bis $\frac{\lambda}{4}$ und liegt damit deutlich unterhalb des klassischen Auflösungsvermögens. Doch auch für noch kleinere Krümmungsradien wird mit Hilfe der polarisationsoptischen Bildgebung der Kontrast im Bild deutlich verstärkt.

Der Müller-Matrix-Formalismus bietet die allgemeinste Form, lineare polarisationsoptische Transferprozesse durch Mikro- und Nanostrukturen in einem partiell kohärenten Lichtwellenfeld darzustellen. Für eine messtechnische Umsetzung ist die Informationsfülle, die in der Müller-Matrix steckt, in der Regel gar nicht nötig. Auf Basis dieses allgemeinen Formalismus lassen sich aber sehr effizient charakteristische Wechselwirkungseigenschaften identifizieren und so maßgeschneiderte Messkonfigurationen für ein spezielles Problem vorschlagen, die einfacher in der technischen Umsetzung sind.

Die Messbeispiele aus Kapitel 7 machen sich diesen Ansatz zu Nutze. Die Eingangspolarisationen in der Beleuchtung wurden so gewählt, dass der zu erwartende Polarisationskontrast durch die untersuchte Struktur maximal wird. Diese Wahl wurde durch die Symmetrieeigenschaften der Struktur unterstützt. Bei Strukturen, die eine komplizierte dreidimensionale Form aufweisen und darüber hinaus aus unterschiedlichen Materialien zusammengesetzt sind, ist diese einfache und klar interpretierbare Wahl der Messkonfiguration nicht mehr möglich. Solche Messprobleme treten insbesondere in der Chipindustrie bei der Defektinspektion auf Wafern auf. Sie sind Gegenstand aktueller Forschungsprojekte [408]. Hier liefert der vorgestellte Formalismus eine wertvolle Hilfe, die Messsysteme für eine spezielle Messaufgabe zu optimieren. Durch eine geeignete Wahl der Beleuchtungsbedingungen, des Eingangspolarisationszustands und des detektierten Polarisationszustands kann der Kontrast im Bild deutlich verstärkt werden. Dies erhöht nicht nur die Detektionsrate, sondern erleichtert zusätzlich die Diskriminierung verschiedener Defekttypen.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Dass bereits in den reinen Intensitätssignalen die elektromagnetischen Wechselwirkungseffekte starken Einfluss auf die Bildentstehung und damit auch auf die bildgebende optische Metrologie haben, zeigte die Untersuchung von Liniengraben in Silizium: Die gemessenen Kantenpositionen variieren in Abhängigkeit von der Polarisation um 60 – 70 nm. Diese Werte lassen sich durch Simulationen mit einer Abweichung von wenigen Nanometern reproduzieren, so dass die wahre Strukturbreite auf Basis der modellbasierten Messtechnik rekonstruiert werden kann. Hat man die Genauigkeitsanforderungen in der optischen Metrologie von derzeit < 5 nm vor Augen, so wird schnell deutlich, dass in die Auslegung und Spezifikation der Messsysteme neben den klassischen Kenngrößen auch Polarisationsaspekte einbezogen werden müssen.

Die vorliegende Arbeit untersuchte Polarisationseffekte in der mikroskopischen Bildentstehung und ihren Nutzen für die hochauflösende Metrologie. Die Polarisationsverteilung im Bild des Mikroskops gibt die Vektoreigenschaften des Lichtwellenfeldes an, die wiederum stark durch die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen dem Lichtwellenfeld und dem untersuchten Objekt bestimmt werden. Die mikroskopische Bildentstehung wurde rigoros simuliert und der Einfluss von Mikro- und Nanostrukturen auf die Polarisation des Lichtwellenfeldes in der mikroskopischen Abbildung untersucht. Darauf aufbauend wurden Rekonstruktionsmöglichkeiten für verschiedene Strukturen aus der Polarisationsnatur ihres Bildes aufgezeigt. Damit wird die Polarisation zum Schlüssel für die Entwicklung neuer Messkonzepte in der bildgebenden Metrologie.

Im Zuge dieser Arbeit wurde ein hochauflösendes Imaging-Polarimeter im DUV aufgebaut, das die Erfassung der vollständigen polarisationsoptischen Information für ein partiell kohärentes Lichtwellenfeld im mikroskopischen Bild erlaubt. Hiermit wurden die vorgestellten Messverfahren umgesetzt, die deutlich über den bisherigen Stand der Technik hinausgehen. Insbesondere durch die orts aufgelöste Vermessung der Kohärenzmatrix können nicht nur Wechselwirkungseigenschaften der Struktur (wie Diattenuation und Retardance) untersucht werden. Zum ersten Mal wurden auch Dekorrelationsprozesse, beschrieben durch den

Kohärenz- und Polarisationsgrad, im mikroskopischen Bild quantitativ studiert. Verschiedene Messbeispiele stellen den Nutzen dieser zusätzlichen polarisationsoptischen Information für die Rekonstruktion von Strukturmerkmalen im Sublambdabereich unter Beweis.

Durch die Einbindung rigoroser Rechenverfahren in die mikroskopische Bildsimulation kann das Rekonstruktionspotential der modellbasierten optischen Messtechnik bis in den Nanometerbereich vorangetrieben werden. Die damit einhergehenden Rechenzeiten setzen jedoch der praktischen Anwendung Grenzen. Dies gilt insbesondere für komplizierte Strukturen in Kombination mit simulationsintensiven Mikroskopieverfahren wie der Weißlichtinterferometrie. In Zukunft kommt daher vereinfachten Simulationsverfahren wieder eine wachsende Bedeutung zu. Wenn die Strukturdimensionen einige Mikrometer oder mehr betragen und Proximityeffekte vernachlässigt werden können, ist die in dieser Arbeit vorgestellte semi-rigore Rechenmethode ohne nennenswerte Genauigkeitseinbußen anwendbar. Die Rechengeschwindigkeit steigt dabei um mehr als drei Größenordnungen. Darüber hinaus ist eine Erweiterung des semi-rigore Modells möglich, indem die strukturinduzierte Doppelbrechung durch eine empirische (Doppel-)Brechungsindexverteilung im Kantenbereich berücksichtigt wird. Struktureigenschaften werden damit den optischen Eigenschaften eines Metamaterials zugeordnet. Zur Festlegung dieser Eigenschaften können die Methoden zur Beschreibung des Polarisationsstransfers aus dem letzten Kapitel dieser Arbeit angewendet werden.

Für die hochgenaue modellbasierte Vermessung von Strukturen ist die möglichst genaue Kenntnis des Strukturaufbaus einschließlich der optischen Kenndaten der verwendeten Materialien von zentraler Bedeutung. Der Einfluss des Materialsystems auf die Güte der Strukturrekonstruktion wurde bei der modellbasierten Linienbreitenmessung an Lithographiemasken im BMBF-Projekt „NanoEdge“ [1] deutlich. In systematischen Untersuchungen von Amplitudenmasken und phasenschiebenden Halbtonmasken konnte eine Restabweichung zwischen taktilen und optischen Messungen im Bereich von 10-15 nm demonstriert werden. Für die optische Rekonstruktion mit den in dieser Arbeit vorgestellten Simulationswerkzeugen stellte sich dabei die Unkenntnis des genauen Schichtaufbaus einschließlich der genauen optischen Eigenschaften der eingesetzten Materialien als limitierender Faktor heraus. Für eine quantitative optische Rekonstruktion dimensioneller Strukturparameter mit einer Genauigkeitsanforderung im einstelligen Nanometerbereich ist daher neben der hochgenauen Auslegung der optischen Messsysteme unter Berücksichtigung des polarisationsoptischen Transferverhaltens auch ein hohes Maß an a-priori-Wissen über die untersuchte Struktur nötig.

Literaturverzeichnis

- [1] N. Kerwien, M. Totzeck, A. Tavrov, B. Bodermann und W. Mirandé. Nutzung physikalisch optischer Effekte in der mikroskopischen Oberflächen-Charakterisierung. BMBF-Abschlussbericht „NanoEdge“ (FKZ 13N7794), 2004.
- [2] L.D. Landau und E.M. Lifschitz. *Klassische Feldtheorie*, Band 2 der Reihe *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Akademie Verlag, Berlin, 4. Auflage, 1967.
- [3] A. Sommerfeld. *Elektrodynamik*, Band 3 der Reihe *Vorlesungen über theoretische Physik*. Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 4. Auflage, 1964.
- [4] W. Nolting. *Elektrodynamik*, Band 3 der Reihe *Grundkurs: Theoretische Physik*. Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1990.
- [5] J.D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 3rd edition, 1999.
- [6] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [7] E. Hecht. *Optik*. Oldenbourg Verlag, München, 3. Auflage, 2001.
- [8] A. Sommerfeld. *Optik*, Band 4 der Reihe *Vorlesungen über theoretische Physik*. Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 3. Auflage, 1964.
- [9] F.K. Kneubühl. *Repetitorium der Physik*. Teubner Studienbücher, Stuttgart, 1994.
- [10] C.B. Burckhardt. Diffraction of a plane wave at a sinusoidally stratified dielectric grating. *J. Opt. Soc. Am.*, 56(11):1502-1509, 1966.
- [11] I.N. Bronstein and K.A. Semendjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt (Main), 21. Auflage, 1981.
- [12] J. Rauch. *Partial Differential Equations*, volume 128 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1991.

- [13] W. Singer, M. Totzeck, and H. Gross. *Physical Image Formation*, volume 2 of *Handbook of Optical Systems*. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005.
- [14] G.B. Airy. On the diffraction of an object glass with circular aperture. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 5:283-291, 1835.
- [15] Lord Rayleigh. On the theory of optical images, with special reference to the microscope. *The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 5:167-195, 1896.
- [16] E. Abbe. *Beiträge zur Theorie des Mikroskops und der mikroskopischen Wahrnehmung*, Band 9 der Reihe *Archiv für Mikroskopische Anatomie*, Seiten 413-468. Verlag von Max Cohen & Sohn, Bonn, 1873.
- [17] E. Abbe. *Gesammelte Abhandlungen*, Band 1. Verlag von Gustav Fischer, Jena, 1904.
- [18] J.W. Goodman. *Introduction to Fourier Optics*. McGraw-Hill International Editions, New York, 1996.
- [19] J.J. Stamnes. *Waves in Focal Regions – Propagation, Diffraction and Focusing of Light, Sound and Water Waves*. IOP Publishing Limited, Bristol, England, 1986.
- [20] W. Singer, M. Totzeck, and H. Gross. *Physical Image Formation*, volume 2 of *Handbook of Optical Systems*, chapter 17, pages 17-20. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005.
- [21] J.J. Stamnes. *Waves in Focal Regions – Propagation, Diffraction and Focusing of Light, Sound and Water Waves*, chapter 4, pages 17-40. IOP Publishing Limited, Bristol, England, 1986.
- [22] G.C. Sherman. Integral-transform formulation of diffraction theory. *J. Opt. Soc. Am.*, 57(12):1490-1498, 1967.
- [23] É. Lalor. Conditions for the validity of the angular spectrum of plane waves. *J. Opt. Soc. Am.*, 58(9):1235-1237, 1968.
- [24] H. Weyl. Ausbreitung elektromagnetischer Wellen über einem ebenen Leiter. *Annalen der Physik*, 60:481-500, 1919.
- [25] Lord Rayleigh. On the passage of waves through apertures in plane screens and allied problems. *The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 43:259, 1897.

- [26] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 8.3. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [27] P. Debye. Das Verhalten von Lichtwellen in der Nähe eines Brennpunktes oder einer Brennlinie. *Annalen der Physik*, 30(5):755-776, 1909.
- [28] J.A. Stratton and L.J. Chu. Diffraction theory of electromagnetic waves. *Physical Review*, 56(1):99-107, 1939.
- [29] J.A. Stratton. *Electromagnetic Theory*, chapter 8.14, pages 464-470. International Series in Pure and Applied Science. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1st edition, 1941.
- [30] S. Silver. *Microwave Antenna Theory and Design*, volume 12 of *MIT Radiation Laboratory Series*, chapter 3.8 and 4.1, pages 80-84 and 107-110. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1st edition, 1949.
- [31] J.D. Jackson. *Classical Electrodynamics*, chapter 10.6. John Wiley & Sons, Inc., New York, 3rd edition, 1999.
- [32] B.B. Baker and E.T. Copson. *The Mathematical Theory of Huygens' Principle*. Clarendon Press, Oxford, 2nd edition, 1950.
- [33] A.S. Marathay and J.F. McCalmont. Vector diffraction theory for electromagnetic waves. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18(10):2585-2593, 2001.
- [34] A.V. Nesterov and V.G. Niziev. Vector solution of the diffraction task using the Hertz vector. *Physical Review E*, 71:046608, 2005.
- [35] H. Poincaré. *Théorie Mathématique de la Lumière*, tome 2, pages 187-188. Georges Carré, Paris, 1892.
- [36] E.W. Marchand and E. Wolf. Consistent formulation of Kirchhoff's diffraction theory. *J. Opt. Soc. Am.*, 56(12):1712-1722, 1966.
- [37] E. Hecht. *Optik*, 3. Auflage, Kapitel 10.5, Seiten 754-756. Oldenbourg Verlag, München, 2001.
- [38] A. Sommerfeld. Mathematische Theorie der Diffraktion. *Mathematische Annalen*, 47:317-374, 1896.
- [39] K. Miyamoto and E. Wolf. Generalization of the Maggi-Rubinowicz theory of the boundary diffraction wave – Part I. *J. Opt. Soc. Am.*, 52(6):615-625, 1962.
- [40] K. Miyamoto and E. Wolf. Generalization of the Maggi-Rubinowicz theory of the boundary diffraction wave – Part II. *J. Opt. Soc. Am.*, 52(6):626-637, 1962.

- [41] J.B. Keller. Geometrical theory of diffraction. *J. Opt. Soc. Am. A*, 52(2):116-130, 1962.
- [42] A. Rubinowicz. The Miyamoto-Wolf diffraction wave. *Progress in Optics*, 4:199-240, 1965.
- [43] A. Rubinowicz. *Die Beugungswelle in der Kirchhoffschen Theorie der Beugung*. Springer-Verlag, Berlin, 2. Auflage, 1966.
- [44] A. Rubinowicz. Die Beugungswelle in der Kirchhoffschen Theorie der Beugungsercheinungen. *Annalen der Physik*, 53(12):257-278, 1917.
- [45] F. Kottler. Zur Theorie der Beugung an schwarzen Schirmen. *Annalen der Physik*, 70:405, 1923.
- [46] B.B. Baker and E.T. Copson. *The Mathematical Theory of Huygens' Principle*, chapter II.4, pages 98-101. Clarendon Press, Oxford, 2nd edition, 1950.
- [47] F. Kottler. Elektromagnetische Theorie der Beugung an einem schwarzen Schirm. *Annalen der Physik*, 71:457-508, 1923.
- [48] F. Kottler. Diffraction at a black screen, Part 1: Kirchhoff's theory. *Progress in Optics*, IV:283-313, 1965.
- [49] S. Solimeno, B. Crosignani, and P. Di Porto. *Guiding, Diffraction and Confinement of Optical Radiation*, chapter IV.13.3, page 277. Academic Press, Inc., Orlando, 1986.
- [50] E. Wolf and M.W. Marchand. Comparison of the Kirchhoff and the Rayleigh-Sommerfeld theories of diffraction at an aperture. *J. Opt. Soc. Am.*, 54(5):587-594, 1964.
- [51] J.C. Heurtley. Scalar Rayleigh-Sommerfeld and Kirchhoff diffraction integrals: A comparison of exact evaluations for axial points. *J. Opt. Soc. Am. A*, 63(8):1003-1008, 1973.
- [52] P.S. Epstein. *Spezielle Beugungsprobleme*, Bande 5 der Reihe *Encyklopädie der mathematischen Wissenschaften*, Kapitel 24.IV, Seiten 488-525. B.G. Teubner, Leipzig, 1919.
- [53] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 14. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [54] R.J. Nagem, M. Zampolli, and G. Sari (Translators). *Arnold Sommerfeld – Mathematical Theory of Diffraction*, volume 35 of *Progress in Mathematical Physics*. Birkhäuser, 2004.

- [55] H.S. Carslaw. *Proc. Lond. Math. Soc.*, 18:291, 1919.
- [56] K.M. Siegel, H.A. Alperin, J.W. Crispin, H.E. Hunter, R.E. Kleinman, W.C. Orthwein, and C.E. Schensted. *Studies in Radar Crosssections -IV*. University of Michigan Press, 1953.
- [57] J.J. Stamnes. Exact two-dimensional scattering by perfectly reflecting elliptical cylinders, strips and slits. *Pure & Applied Optics*, 4(6):841-855, 1995.
- [58] F.V. Schultz. *Studies in Radar Crosssections -I*. University of Michigan Press, 1950.
- [59] L.M. Rauch. *Studies in Radar Crosssections -IX*. University of Michigan Press, 1953.
- [60] H. Buchholz. Die axialsymmetrische elektromagnetische Strahlung zwischen konfokalen Drehparabolen bei verschiedenen Anregungsarten. *Annalen der Physik*, 2:185, 1948.
- [61] C.W. Horton and F.C. Karal. Diffraction of a plane electromagnetic wave by a paraboloid of revolution. *Journal of applied Physics*, 22:575, 1951.
- [62] H.A. Bethe. Theory of diffraction by small holes. *Physical Review*, 66(7-8):163-182, 1944.
- [63] C.J. Bouwkamp. Diffraction theory. *Reports on Progress in Physics*, 17:35-100, 1954.
- [64] J.J. Stamnes and H.A. Eide. Exact and approximate solutions for focusing of two-dimensional waves. I. Theory. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(5):1285-1291, 1998.
- [65] R.C. McPhedran, G.H. Derrick, and L.C. Botten. *Electromagnetic Theory of Gratings*, volume 22 of *Topics in Current Physics*, chapter 7, page 227. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [66] P. Cornet, J. Chandezon, and C. Faure. Conical diffraction of a plane wave by an inclined parallel-plate grating. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(2):437-449, 1997.
- [67] J. Meixner. Strenge Theorie der Beugung elektromagnetischer Wellen an der vollkommen leitenden Kreisscheibe. *Zeitschrift für Naturforschung*, 3a:506-518, 1948.
- [68] J. Meixner. Die Kantenbedingung in der Theorie der Beugung elektromagnetischer Wellen an vollkommen leitenden ebenen Schirmen. *Annalen der Physik*, (6) 6:1-9, 1950.
- [69] M.I. Mishchenko, J.W. Hovenier, and L.D. Travis. *Light Scattering by Nonspherical Particles: Theory, Measurements and Applications*, chapter 2, page 31. Academic Press, San Diego, 2000.

-
- [70] W. Singer, M. Totzeck, and H. Gross. *Physical Image Formation*, volume 2 of *Handbook of Optical Syems*, chapter 27. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005.
- [71] H.C. van de Hulst. *Light Scattering By Small Particles*. Structure of Matter Series. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1957.
- [72] M. Kerker. *Electromagnetic Scattering*, volume 5 of *International Series of Monographs on Electromagnetic Waves*. Pergamon Press, Oxford, 1963.
- [73] M. Kerker. *The Scattering of Light and other Electromagnetic Radiation*. Academic Press, New York and London, 1969.
- [74] C.F. Bohren and D.R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley Science, 1983.
- [75] M.I. Mishchenko, J.W. Hovenier, and L.D. Travis. *Light Scattering by Nonspherical Particles: Theory, Measurements and Applications*. Academic Press, San Diego, 2000.
- [76] M.I. Mishchenko, L.D. Travis, and A.A. Lacis. *Scattering, Absorption and Emission of Light by Small Particles*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [77] P.M. Morse and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics – Part I*. International Series in Pure and Applied Physics. McGraw-Hill Book Co., New York, 1953.
- [78] M. Kerker. *The Scattering of Light and other Electromagnetic Radiation*, chapter 3.4. Academic Press, New York and London, 1969.
- [79] B. Kleemann and R. Güther. Metal gratings with dielectric coating of variable thickness within a period. *Journal of Modern Optics*, 38(5):897-910, 1991.
- [80] R.D. Boyd, J.A. Britten, D.E. Decker, B.W. Shore, B.C. Stuart, M.D. Perry, and L. Li. High-efficiency metallic diffraction gratings for laser applications. *Applied Optics*, 34(10):1697-1706, 1995.
- [81] D.W. Prather, S. Shi, and J.S. Bergey. Field stitching algorithm for the analysis of electrically large diffractive optical elements. *Optics Letters*, 24(5):273-275, 1999.
- [82] B.H. Kleemann. *Elektromagnetische Analyse von Oberflächengittern von IR bis XUV mittels einer parametrisierten Randintegralmethode: Theorie, Vergleich und Anwendungen*. PhD thesis, Fakultät für Maschinenbau der Technischen Universität Ilmenau, 19. April 2002.
- [83] F. Di, Y. Yingbai, J. Guofan, and W. Minxian. Rigorous concept for the analysis of

- diffractive lenses with different axial resolution and high lateral resolution. *Optics Express*, 11(17):1987-1994, 2003.
- [84] J.C. Brazas and L. Li. Analysis of input-grating couplers having finite lengths. *Applied Optics*, 34(19):3786-3792, 1995.
- [85] S.B. Mendes, L. Li., J. Burke, and S.S. Saavedra. Achromatic prism-coupler for planar waveguide. *Optics Communications*, 136(3-4):320-326, 1997.
- [86] B.H. Kleemann and R. Güther. Zonal diffraction efficiencies and imaging of micro-Fresnel lenses. *Journal of Modern Optics*, 45(7):1405-1420, 1998.
- [87] S. Enoch, E. Popov, M. Nevière, and R. Reinisch. Enhanced light transmission by hole arrays. *Journal of Optics A: Pure & Applied Optics*, 4(5):83-87, 2002.
- [88] S.C. Hohng, Y.C. Yoon, D.S. Kima, V. Malyarchuk, R. Müller, Ch. Lienau, J.W. Park, K.H. Yoo, J. Kim, H.Y. Ryu, and Q.H. Park. Light emission from the shadows: Surface plasmon nano-optics at near and far fields. *Applied Physics Letters*, 81(17):3239-3241, 2002.
- [89] E. Popov, S. Enoch, G. Tayeb, M. Nevière, B. Gralak, and N. Bonod. Enhanced transmission due to nonplasmon resonances in one- and two-dimensional gratings. *Applied Optics*, 43(5):999-1008, 2004.
- [90] N. Bonod, S. Enoch, Li Lifeng, Popov Evgeny, and M. Neviere. Resonant optical transmission through thin metallic films with and without holes. *Optics Express*, 11(5):482-490, 2003.
- [91] J.A. Matteo, D.P. Fromm, Y. Yuen, P.J. Schuck, W.E. Moerner, and L. Hesselink. Spectral analysis of strongly enhanced visible light transmission through single c-shaped nanoapertures. *Applied Physics Letters*, 85(4):648-650, 2004.
- [92] E.B. Grann, M.G. Moharam, and D.A. Pommet. Artificial uniaxial and biaxial dielectrics with use of two-dimensional subwavelength binary gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(10):2695-2703, 1994.
- [93] E.B. Grann, M.G. Moharam, and D.A. Pommet. Optimal design for antireflective tapered two-dimensional subwavelength grating structures. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12(2):333-339, 1995.
- [94] L. Pajewski, R. Borghi, G. Schettini, F. Frezza, and M. Santarsiero. Design of a binary grating with subwavelength features that acts as a polarizing beam splitter. *Applied Optics*, 40(32):5898-5905, 2001.

- [95] T. Glaser, S. Schroter, H. Bartelt, H.J. Fuchs, and E.B. Kley. Diffractive optical isolator made of high-efficiency dielectric gratings only. *Applied Optics*, 41(18):3558-3566, 2002.
- [96] K. Sakoda. *Optical Properties of Photonic Crystals*. Springer Series in Optical Science. Springer, Berlin, 2nd edition, 2005.
- [97] E. Popov, B. Bozhkov, and M. Nevière. Almost perfect blazing by photonic crystal rod gratings. *Applied Optics*, 40(15):2417-2422, 2001.
- [98] Z.-Y. Li and K.M. Ho. Application of structural symmetries in the plane-wave-based transfer-matrix method for three-dimensional photonic crystal waveguides. *Physical Review B*, 68:245117-1-20, 2003.
- [99] A. Erdmann, P. Evanschitzky, and P. De Bisschop. Mask and wafer topography effects in immersion lithography. *Proc. of the SPIE*, 5754(1):383-394, 2004.
- [100] W.-C. Liu and M.W. Kowarz. Vector diffraction from subwavelength optical disk structures: Two-dimensional modeling of near-field profiles, far-field intensities, and detector signals from a DVD. *Applied Optics*, 38(17):3787-3797, 1999.
- [101] J. Braat. *Optical Imaging and Microcopy - Techniques and Advanced Systems*, chapter 3, pages 45-85. Springer Verlag, 2003.
- [102] R. Petit (ed.). *Electromagnetic Theory of Gratings*. Topics of Current Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [103] D. Maystre. Rigorous vector theories of diffraction gratings. *Progress in Optics*, 21:1-67, 1984.
- [104] D. Maystre (ed.). *Selected Papers on Diffraction Gratings*, volume 83 of *Milestone Series*. SPIE Press, Bellingham, Washington USA, 1993.
- [105] E.G. Loewen and E. Popov. *Diffraction Gratings and Applications*. Marcel Dekker, Inc., New York, 1997.
- [106] L. Li. Recent advances and present limitations of the electromagnetic theory of diffraction gratings. *Trends in Optics and Photonics*, 41:2-4, 2000.
- [107] M. Nevière and E. Popov. Grating electromagnetic theory user guide. *Journal of Imaging Science & Technology*, 41(4):315-323, 1997.
- [108] M. Nevière and E. Popov. Electromagnetic theory of gratings: review and potential applications. *Proc. of the SPIE*, 3450:2-10, 1998.

- [109] M. Nevière and E. Popov. *Light Propagation in Periodic Media – Differential Theory and Design*. Marcel Dekker, Inc., New York, 2003.
- [110] B.H. Kleemann, A. Mitreiter, and F. Wyrowski. Integral equation method with parametrization of grating profile – Theory and experiments. *Journal of Modern Optics*, 43(7):1323-1349, 1996.
- [111] L.C. Botten, M.S. Craig, R.C. McPhedran, J.L. Adams, and J.R. Andrewartha. The dielectric lamellar diffraction grating. *Optica Acta*, 28(8):413-428, 1981.
- [112] L.C. Botten, M.S. Craig, R.C. McPhedran, J.L. Adams, and J.R. Andrewartha. The finitely conducting lamellar diffraction grating. *Optica Acta*, 28(8):1087-1102, 1981.
- [113] L. Li. A modal analysis of lamellar diffraction gratings in conical mountings. *Journal of Modern Optics*, 40(4):553-573, 1993.
- [114] L. Li. Multilayer modal method for diffraction gratings of arbitrary profile, depth, and permittivity. *J. Opt. Soc. Am. A*, 10(12):2581-2591, 1993.
- [115] R.H. Morf. Exponentially convergent and numerically efficient solution of Maxwell's equations for lamellar gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12(5):1043-1056, 1995.
- [116] J. Chandezon, D. Maystre, and G. Raoult. A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application. *J. Optics. (Paris)*, 11(4):235–241, 1980.
- [117] L. Li, J. Chandezon, G. Granet, and J.P. Plumey. Rigorous and efficient grating-analysis method made easy for optical engineers. *Applied Optics*, 38(2):304-313, 1999.
- [118] L. Li. Oblique-coordinate-system-based Chandezon method for modeling one-dimensionally periodic, multilayer, inhomogeneous, anisotropic gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 16(10):2521-2531, 1999.
- [119] A. Taflové and S.C. Hagness. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House Publishers, Inc., Boston, 3rd edition, 2005.
- [120] T. Delort and D. Maystre. Finite-element method for gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 10(12):2592-2601, 1993.
- [121] G. Bao, D.C. Dobson, and J.A. Cox. Mathematical studies in rigorous grating theory. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12:1029-1042, 1995.
- [122] J. Elschner and G. Schmidt. Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings, Part I: Direct problems and gradient formulas. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 21:1297-1342, 1998.

- [123] P. Monk. *Finite Element Methods for Maxwell's Equations*. Clarendon Press, Oxford, 2003.
- [124] P. Lalanne and J.P. Hugonin. Numerical performance of finite-difference modal methods for the electromagnetic analysis of one-dimensional lamellar gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17(6):1033-1042, 2000.
- [125] K. Yashiro and S. Ohkawa. Boundary element method for electromagnetic scattering from cylinders. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, A-33(4):383-389, 1985.
- [126] D.W. Prather, M.S. Mirotznik, and J.N. Mait. Boundary integral methods applied to the analysis of diffractive optical elements. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(1):34-43, 1997.
- [127] C. Hafner. Die MMP-Methode. *Archiv für Elektrotechnik*, 69(5):321-325, 1986.
- [128] C. Hafner. *The generalized multipole technique for computational electromagnetics*. Artech House, Boston, 1990.
- [129] G. Tayeb. The method of fictitious sources applied to diffraction gratings. *ACES online*, 9(3):90-100, 1994.
- [130] F.G. Kaspar. Diffraction by thick, periodically stratified gratings with complex dielectric constant. *J. Opt. Soc. Am.*, 63(1):37-45, 1973.
- [131] S.T. Peng, T. Tamir, and H.L. Bertoni. Theory of periodic dielectric waveguides. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, MTT-23(1):123-133, 1975.
- [132] K. Knop. Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves. *J. Opt. Soc. Am.*, 68(9):1206-1210, 1978.
- [133] M.G. Moharam and T.K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 71(7):811-818, 1981.
- [134] H. Kogelnik. Coupled wave theory for thick hologram gratings. *Bell Syst. Tech. J.*, 48:2909-2947, 1969.
- [135] M.G. Moharam and T.K. Gaylord. Three-dimensional vector coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 73(9):1105-1112, 1983.
- [136] M.G. Moharam. Coupled-wave analysis of two-dimensional dielectric gratings. *Proc. of the SPIE*, 883:8-11, 1988.
- [137] M. Cadilhac. *Electromagnetic Theory of Gratings*, chapter 2, pages 53-62. Topics of Current Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1980.

- [138] N. Kamiya. Rigorous coupled-wave analysis for practical planar dielectric gratings: 1. Thickness-changed holograms and some characteristics of diffraction efficiency. *Applied Optics*, 37(25):5843-5853, 1998.
- [139] N.Y. Chang and C.J. Ku. Algorithm based on rigorous coupled-wave analysis for diffractive optical element design. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18(10):2491-2501, 2001.
- [140] S. Ahn, K. Lee, J. Kim, S.H. Kim, J. Park, S. Lee, and P. Yoon. Fabrication of a 50 nm half-pitch wire grid polarizer using nanoimprint lithography. *Nanotechnology*, 16:1874-1877, 2005.
- [141] P. Dansas and N. Paraire. Fast modeling of photonic bandgap structures by use of a diffraction-grating approach. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(6):1586-1598, 1998.
- [142] C. Raymond. Overview of scatterometry applications in high volume silicon manufacturing. *AIP Conference Proceedings*, 788:394-402, 2005.
- [143] M.G. Moharam, E.B. Grann, D.A. Pommet, and T.K. Gaylord. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12(5):1068-1076, 1995.
- [144] 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(5):1077-1086, 1995.
- [145] L. Li. Modal method by Fourier expansion for modeling crossed gratings. *Proc. of the SPIE*, 3010:18-29, 1997.
- [146] L. Li. New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(10):2758-2767, 1997.
- [147] Lord Rayleigh. On the dynamical theory of gratings. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 79(532):399-416, 1907.
- [148] L. Li. Fourier modal method for crossed anisotropic gratings with arbitrary permittivity and permeability tensors. *Journal of Optics A: Pure & Applied Optics*, 5(4):345-355, 2003.
- [149] B. Chernov, M. Nevière, and E. Popov. Fast Fourier factorization method applied to modal analysis of slanted lamellar diffraction gratings in conical mountings. *Optics Communications*, 194(4-6):289-297, 2001.
- [150] E. Popov, M. Nevière, and N. Bonod. Factorization of products of discontinuous functions applied to Fourier-Bessel basis. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21(1):46-52, 2004.

- [151] P. Boyer, E. Popov, M. Nevière, and G. Tayeb. Diffraction theory in TM polarization: application of the fast Fourier factorization method to cylindrical devices with arbitrary cross section. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21(11):2146-2153, 2004.
- [152] N. Bonod, E. Popov, and M. Nevière. Differential theory of diffraction by finite cylindrical objects. *J. Opt. Soc. Am. A*, 22(3):481-490, 2005.
- [153] M. Nevière and E. Popov. *Light Propagation in Periodic Media - Differential Theory and Design*, chapter IX, page 189. Marcel Dekker, Inc., New York, 2003.
- [154] L. Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(9):1870-1876, 1996.
- [155] M.G. Moharam and T.K. Gaylord. Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 72(10):1385-1392, 1982.
- [156] L.M. Brekhovskikh. *Waves in Layered Media*. Applied Mathematics and Mechanics. Academic Press, New York, 2nd edition, 1980.
- [157] D.M. Pai and K.A. Awada. Analysis of dielectric gratings of arbitrary profiles and thicknesses. *J. Opt. Soc. Am. A*, 8:755-762, 1991.
- [158] S.T. Han, Y.L. Tsao, R.M. Walser, and M.F. Becker. Electromagnetic scattering of two-dimensional surface-relief dielectric gratings. *Applied Optics*, 31:2343-2352, 1992.
- [159] N. Chateau and J.P. Hugonin. Algorithm for rigorous coupled wave analysis of grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11:1321-1331, 1994.
- [160] L.F. DeSandre and J.M. Elson. Extinction-theorem analysis of diffraction anomalies in overcoated gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 8:763-777, 1991.
- [161] L. Li. Multilayer-coated diffraction gratings: differential method of Chandezon et al. revisited. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(11):2816-2828, 1994.
- [162] D.Y.K. Ko and J.R. Sambles. Scattering matrix method for propagation of radiation in stratified media: attenuated total reflection studies of liquid crystals. *J. Opt. Soc. Am. A*, 5(11):1863-1866, 1988.
- [163] N.P.K. Cotter, T.W. Preist, and J.R. Sambles. Scattering-matrix approach to multilayer diffraction. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12(5):1097-1103, 1995.
- [164] L. Li. Note on the S-matrix propagation algorithm. *J. Opt. Soc. Am. A*, 20(4):655-660, 2003.

- [165] L. Li. Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(5):1024-1035, 1996.
- [166] E.L. Tan. Note on formulation of the enhanced scattering- (transmittance-) matrix approach. *J. Opt. Soc. Am. A*, 19(6):1157-1161, 2002.
- [167] L.C. Botten, J.L. Adams, R.C. McPhedran, and G.H. Derrick. Symmetry properties of lossless diffraction gratings. *Journal of Optics (Paris)*, 11(1):43-52, 1980.
- [168] L. Li. *Mathematical Modeling in Optical Science*, chapter 4, pages 111-139. SIAM Frontiers in Applied Mathematics Series. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2001. Mathematical reflections on the Fourier modal method in grating theory.
- [169] G. Granet and B. Guizal. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(5):1019-1023, 1996.
- [170] P. Lalanne and G.M. Morris. Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(4):779-784, 1996.
- [171] P. Lalanne. Improved formulation of the coupled-wave method for two-dimensional gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(7):1592-1598, 1997.
- [172] L. Li and C.W. Haggans. Convergence of the coupled-wave method for metallic lamellar diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 10(6):1184-1189, 1993.
- [173] E. Popov, M. Nevière, B. Gralak, and G. Tayeb. Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 19(1):33-42, 2002.
- [174] G. Granet. Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution. *J. Opt. Soc. Am. A*, 16(10):2510-2516, 1999.
- [175] T. Vallius and M. Honkanen. Reformulation of the Fourier modal method with adaptive spatial resolution: application to multilevel profiles. *Optics Express*, 10(1):24-34, 2002.
- [176] E. Popov and M. Nevière. Grating theory: new equations in Fourier space leading to fast converging results for TM polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17(10):1773-1784, 2000.
- [177] E. Popov and M. Nevière. Maxwell equations in Fourier space: fast-converging formulation for diffraction by arbitrary shaped, periodic, anisotropic media. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18(11):2886-2894, 2001.

- [178] L. Li. Improvement of convergence of the Fourier modal method for gratings of non-rectangular, non-staircase-like profiles in TM polarization. *Trends in Optics and Photonics*, 41:353-355, 2000.
- [179] P. Lalanne. Convergence performance of the coupled-wave and the differential methods for thin gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(7):1583-1591, 1997.
- [180] T. Schuster, N. Kerwien, S. Rafler, W. Osten, and J. Ruoff. The normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings. *J. Opt. Soc. Am. A.*, 24(4):2880-2890, 2007.
- [181] C. Zhou and L. Li. Formulation of the Fourier modal method for symmetric crossed gratings in symmetric mountings. *Journal of Optics A: Pure & Applied Optics*, 6(1):43-50, 2004.
- [182] B. Bai and L. Li. Reduction of computation time for crossed-grating problems: a group-theoretic approach. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21(10):1886-1894, 2004.
- [183] B. Bai and L. Li. Group-theoretic approach to the enhancement of the Fourier modal method for crossed gratings: C2 symmetry case. *J. Opt. Soc. Am. A*, 22(4):654-661, 2005.
- [184] B. Bai and L. Li. Group-theoretic approach to enhancing the Fourier modal method for crossed gratings of plane group p3. *Journal of Modern Optics*, 52:1619-1634, 2005.
- [185] B. Bai and L. Li. Group-theoretic approach to enhancing the Fourier modal method for crossed gratings with one or two reflection symmetries. *Journal of Optics A: Pure & Applied Optics*, 7(7):271-278, 2005.
- [186] B. Bai and L. Li. Group-theoretic approach to enhancing the Fourier modal method for crossed gratings with square symmetry. *J. Opt. Soc. Am. A*, 23(3):572-580, 2006.
- [187] N. Kerwien, T. Schuster, S. Rafler, W. Osten, and M. Totzeck. Vectorial thin element approximation (VTEA): a semi-rigorous determination of Kirchhoff's boundary conditions. *J. Opt. Soc. Am. A*, 24(4):1074-1084, 2007.
- [188] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 1.6, pages 54-74. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [189] E. Hecht. *Optik*, Kapitel 9.7, Seiten 625-635. Oldenbourg Verlag, München, 3. Auflage, 2001.
- [190] J. Chilwell and I. Hodgkinson. Thin-films field-transfer matrix theory of planar

- multilayer waveguides and reflection from prism-loaded waveguides. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1(7):742-753, 1984.
- [191] N. Kaiser and H.K. Pulker (eds.). *Optical Interference Coatings*. Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [192] C. Chen, C. Ross, N.J. Podraza, C.R. Wronski, and R.W. Collins. Multichannel Mueller matrix analysis of the evolution of the microscopic roughness and texture during ZnO:Al chemical etching. In *Conference Record of the Thirty-First IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, pages 1524-27, Lake Buena Vista, Florida, 2005.
- [193] H.-L. Chen, T.-C. Chu, C.-K. Hsu, F.-H. Ko, and T.-Y. Huang. Fabry-Perot-type antireflective coating for deep-ultraviolet binary photomask applications. *Applied Optics*, 41(19):3961-3965, 2002.
- [194] K. Suzuki, S. Matsui, and Y. Ochiai. *Sub-Half-Micron Lithography for ULSIs*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [195] E.D. Palik. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press Handbook Series. Academic Press, New York, USA, 1997.
- [196] F. Kottler. Diffraction at a black screen, Part 2: Electromagnetic theory. *Progress in Optics*, VI:331-377, 1967.
- [197] E.N. Glytsis. Two-dimensionally-periodic diffractive optical elements: limitations of scalar analysis. *J. Opt. Soc. Am. A*, 19(4):702-715, 2002.
- [198] D.A. Pommet, M.G. Moharam, and E.B. Grann. Limits of scalar diffraction theory for diffractive phase elements. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(6):1827-1834, 1994.
- [199] O. Wiener. Stehende Lichtwellen und die Schwingungsrichtung polarisierten Lichtes. *Annalen der Physik*, 40:203, 1890.
- [200] W.A. Shurcliff. *Polarized Light – Production and Use*. Harvard University Press, 1962.
- [201] R.M.A. Azzam and N.M. Bashara. *Ellipsometry and Polarized Light*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1977.
- [202] E. Collett. *Polarized Light – Fundamentals and Applications*. Marcel Dekker, Inc., New York, 1993.
- [203] C. Brosseau. *Fundamentals of Polarized Light – A Statistical Optics Approach*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.

- [204] L. Mandel and E. Wolf. *Optical Coherence and Quantum Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [205] W. Singer, M. Totzeck, and H. Gross. *Physical Image Formation*, volume 2 of *Handbook of Optical Systems*, chapter 26. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005.
- [206] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 10.9, pages 619-632. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [207] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 10, pages 554-632. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [208] C. Brosseau. *Fundamentals of Polarized Light – A Statistical Optics Approach*, chapter 3.1. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.
- [209] G.G. Stokes. On the composition and resolution of streams of polarized light from different sources. *Trans. Cambridge Phil. Soc.*, 9:399-416, 1852.
- [210] U. Fano. Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. *Reviews of Modern Physics*, 29:74-93, 1957.
- [211] R.A. Chipman. *Handbook of Optics*, chapter 22: Polarimetry. McGraw-Hill, New York, 1995.
- [212] R.C. Jones. A new calculus for the treatment of optical systems. I. Description and discussion of the calculus. *J. Opt. Soc. Am.*, 31(7):488-493, 1941.
- [213] H. Müller. *J. Opt. Soc. Am.*, 38:661, 1948.
- [214] P. Soleillet. Sur les paramètres caractérisant la polarisation partielle de la lumière dans les phénomènes de fluorescence. *Annales de Physique*, 12:23-97, 1929.
- [215] F. Perrin. Polarization of light scattered by isotropic opalescent media. *Journal of Chemical Physics*, 10:415-427, 1942.
- [216] R.A. Chipman. Polarization analysis of optical systems. *Optical Engineering*, 28(2):90-99, 1989.
- [217] J.P. Jr. McGuire and R.A. Chipman. Diffraction image formation in optical systems with polarization aberrations. II. Amplitude response matrices for rotationally symmetric systems. *J. Opt. Soc. Am. A*, 8(6):833-840, 1991.
- [218] R.C. Jones. A new calculus for the treatment of optical systems. VII. Properties of the N-matrices. *J. Opt. Soc. Am.*, 38(8):671-685, 1948.

- [219] P. Lancaster and M. Tismenetsky. *The Theory of Matrices*. Academic Press, Orlando, Florida, USA, 1985.
- [220] C. Whitney. Pauli-algebraic operators in polarization optics. *J. Opt. Soc. Am.*, 61(9):1207-1213, 1971.
- [221] H.C. Andrews and C.L. Patterson. Singular value decompositions and digital image processing. *IEEE Transactions on acoustics, speech and signal processing*, ASSP-24(1):26-53, 1976.
- [222] R. Barakat. Conditions for the physical realizability of polarization matrices characterizing passive systems. *Journal of Modern Optics*, 34:1535-1544, 1987.
- [223] J.J. Gil and E. Bernabeu. Obtainment of the polarizing and retardation parameters of a non-depolarizing optical system from the polar decomposition of its Mueller matrix. *Optik*, 76(2):67-71, 1987.
- [224] S.-Y. Lu and R.A. Chipman. Homogeneous and inhomogeneous Jones matrices. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(2):766-773, 1994.
- [225] C. Brosseau. *Fundamentals of Polarized Light – A Statistical Optics Approach*, chapter 4.1. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.
- [226] C.V.M. van der Mee. An eigenvalue criterion for matrices transforming Stokes parameters. *Journal of Mathematical Physics*, 34(11):5072-5088, 1993.
- [227] C. Brosseau. *Fundamentals of Polarized Light – A Statistical Optics Approach*, chapter 4.3. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.
- [228] A. Gerrard and J.M. Burch. *Introduction to Matrix Methods in Optics*. Wiley Series in Pure and Applied Optics. John Wiley & Sons, London, 1975.
- [229] K. Kim, L. Mandel, and E. Wolf. Relationship between Jones and Mueller matrices for random media. *J. Opt. Soc. Am. A*, 4(3):433-437, 1987.
- [230] R. Simon. The connection between Mueller and Jones matrices of polarization optics. *Optics Communications*, 42(5):293-297, 1982.
- [231] D.G.M. Anderson and R. Barakat. Necessary and sufficient conditions for a Mueller matrix to be derivable from a Jones matrix. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(8):2305-2319, 1994.
- [232] R. Barakat. Bilinear constraints between elements of the 4*4 Mueller-Jones transfer matrix of polarization theory. *Optics Communications*, 38(3):159-161, 1981.

- [233] J.J. Gil and E. Bernabeu. A depolarization criterion in Mueller matrices. *Optica Acta*, 32(3):259-261, 1985.
- [234] J.J. Gil and E. Bernabeu. Depolarization and polarization indices of an optical system. *Optica Acta*, 33(2):185-189, 1986.
- [235] J.J. Gil. Characteristic properties of Mueller matrices. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17(2):328-334, 2000.
- [236] C.V.M. van der Mee and J.W. Hovenier. Structure of matrices transforming Stokes parameters. *Journal of Mathematical Physics*, 33(10):3574-3584, 1992.
- [237] M.S. Kumar and R. Simon. Characterization of Mueller matrices in polarization optics. *Optics Communications*, 88(4-6):464-470, 1992.
- [238] A.B. Kostinski, C.R. Givens, and J.M. Kwiatkowski. Constraints on Mueller matrices of polarization optics. *Applied Optics*, 32(9):1646-1651, 1993.
- [239] C.R. Givens and A.B. Kostinski. A simple necessary and sufficient condition on physically realizable Mueller matrices. *Journal of Modern Optics*, 40(3):471-481, 1993.
- [240] J.W. Hovenier, H.C. van de Hulst, and C.V.M van der Mee. Conditions for the elements of the scattering matrix. *Astronomy and Astrophysics*, 157:301-310, 1986.
- [241] S.R. Cloude. Conditions for the physical realisability of matrix operators in polarimetry. *Proc. of the SPIE*, 1166:177-185, 1989.
- [242] G. Bonnet. Introduction to metaxial optics. I. *Annales des Telecommunications*, 33:143-165, 1978.
- [243] G. Bonnet. Introduction to metaxial optics. II. *Annales des Telecommunications*, 33:225-243, 1978.
- [244] H.H. Hopkins. *Wave Theory of Aberrations*. Clarendon Press, Oxford, 1950.
- [245] J.E. Harvey and R.V. Shack. Aberrations of diffracted wave fields. *Applied Optics*, 17(18):3003-3009, 1978.
- [246] J.E. Harvey. Fourier treatment of near-field scalar diffraction theory. *American Journal of Physics*, 47(11):974-980, 1979.
- [247] V.N. Mahajan. Aberrations of diffracted wave fields. I. Optical imaging. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17(12):2216-2222, 2000.

- [248] V.N. Mahajan. Aberrations of diffracted wave fields. II. Diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17(12):2223-2228, 2000.
- [249] E. Wolf. Electromagnetic diffraction in optical systems. I. An integral representation of the image field. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 253(1274):349-357, 1959.
- [250] R.K. Luneburg. *Mathematical Theory of Optics*. University of California Press, Berkley and Los Angeles, 1964.
- [251] B. Richards and E. Wolf. Electromagnetic diffraction in optical systems. II. Structure of the image field in an aplanatic system. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 253(1274):358-379, 1959.
- [252] M. Mansuripur. Distribution of light at and near the focus of high-numerical-aperture objectives. *J. Opt. Soc. Am. A*, 3(12):2086-2093, 1986.
- [253] M. Mansuripur. Certain computational aspects of vector diffraction problems. *J. Opt. Soc. Am. A*, 6(6):786-805, 1989.
- [254] C.J.R. Sheppard and K.G. Larkin. Vectorial pupil functions and vectorial transfer functions. *Optik*, 107(2):79-87, 1997.
- [255] P. Török, P. Varga, Z. Laczik, and G.R. Booker. Electromagnetic diffraction of light focused through a planar interface between materials of mismatched refractive indices: an integral representation. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12(2):325-332, 1995.
- [256] J.C. Maxwell. On the general laws of optical instruments. *Scientific Papers*, 1:271-285, 1890.
- [257] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 4.2. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [258] C. Carathéodory. Über den Zusammenhang der Theorie der absoluten optischen Instrumente mit einem Satz der Variationsrechnung. *Sitzungsbericht der bayrischen akademischen Wissenschaften, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Abteilung*, 56:1-18, 1926.
- [259] C. Hofmann. *Die optische Abbildung*, Band 38 der Reihe *Technisch-Physikalische Monographien*. Akademische Verlagsgesellschaft Geest&Portig K.-G., Leipzig, 1980.
- [260] A. Walther. *The Ray and Wave Theory of Lenses*, chapter 1, pages 3-10. Cambridge Studies in Modern Optics. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

-
- [261] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 4.5, pages 178-180. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [262] M.V. Berry and C. Upstill. Catastrophe optics: Morphologies of caustics and their diffraction patterns. *Progress in Optics*, 18:257-346, 1980.
- [263] J.J. Stamnes. *Waves in Focal Regions – Propagation, Diffraction and Focusing of Light, Sound and Water Waves*, chapter 6.3, pages 49-59. IOP Publishing Limited, Bristol, England, 1986.
- [264] A.G. Fox and T. Li. Resonant modes in a maser interferometer. *The Bell System Technical Journal*, 40:453-488, 1961.
- [265] J.W.Y. Lit and R. Tremblay. Boundary-diffraction-wave theory of cascaded-apertures diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 59(5):559-567, 1969.
- [266] F. Pedrotti, L. Pedrotti, W. Bausch, and H. Schmidt. *Optik für Ingenieure*, Kapitel 6.1.1, Seiten 164-166. Springer Verlag, 2002.
- [267] H. Paul. *Lexikon der Optik - A bis L*, Seite 101. Spektrum Akademischer Verlag, 2003.
- [268] J.W. Goodman. *Introduction to Fourier Optics*, Appendix B5, pages 401-413. McGraw-Hill International Editions, New York, 1996.
- [269] H. Volkmann. Ernst Abbe and his work. *Applied Optics*, 5(11):1720-1731, 1966.
- [270] E. Abbe. *Über die Bedingung des Aplanatismus der Linsensysteme*, Band 1 der Reihe *Gesammelte Abhandlungen*, Kapitel XI, Seiten 213-227. Verlag von Gustav Fischer, Jena, 1904.
- [271] W.T. Welford. *Aberrations of Optical Systems*. The Adam Hilger Series on optics and optoelectronics. Adam Hilger, Bristol, 2nd edition, 1991.
- [272] R. Kingslake. *Lens Design Fundamentals*. Academic Press, New York, 1978.
- [273] W. Singer, M. Totzeck, and H. Gross. *Physical Image Formation*, volume 2 of *Handbook of Optical Syems*, chapter 21. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005.
- [274] O.N. Stavroudis. *The Optics of Rays, Wavefronts and Caustics*, volume 38. Academic Press, New York and London, 1972.
- [275] M. Shribak, S. Inoue, and R. Oldenbourg. Polarization aberrations caused by differential transmission and phase shift in high-numerical-aperture lenses: theory, measurement, and rectification. *Optical Engineering*, 41(5):943-954, 2002.

- [276] S. Stallinga. Axial birefringence in high-numerical-aperture optical systems and the light distribution close to focus. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18(11):2846-2859, 2001.
- [277] S. Stallinga. Light distribution close to focus in biaxially birefringent media. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21(9):1785-1798, 2004.
- [278] S. Stallinga. Strehl ratio for focusing into biaxially birefringent media. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21(12):2406-2413, 2004.
- [279] Y. Unno. Point-spread function for a rotationally symmetric birefringent lens. *J. Opt. Soc. Am. A*, 19(4):781-791, 2002.
- [280] Y. Unno. Influence of birefringence on the image formation of high-resolution projection optics. *Applied Optics*, 39(19):3243-3252, 2000.
- [281] Y. Unno. Distorted wave front produced by a high-resolution projection optical system having rotationally symmetric birefringence. *Applied Optics*, 37(31):7241-7247, 1998.
- [282] A. Serebriakov, E. Maksimov, F. Bociort, and J. Braat. The effect of intrinsic birefringence in deep UV-lithography. *Proc. of the SPIE*, 5249(1):353-363, 2004.
- [283] R.A. Chipman and L.J. Chipman. Polarization aberration diagrams. *Optical Engineering*, 28(2):100-106, 1989.
- [284] J.P. Jr. McGuire and R.A. Chipman. Polarization aberrations. 1. Rotationally symmetric optical systems. *Applied Optics*, 33(22):5080-5100, 1994.
- [285] J.P. Jr. McGuire and R.A. Chipman. Polarization aberrations. 2. Tilted and decentered optical systems. *Applied Optics*, 33(22):5101-5107, 1994.
- [286] W. Singer, M. Totzeck, and H. Gross. *Physical Image Formation*, volume 2 of *Handbook of Optical Systems*, chapter 28. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005.
- [287] R.A. Chipman. Mechanics of polarization ray tracing. *Optical Engineering*, 34(6):1636-1645, 1995.
- [288] M.J. van Weert. A vectorial treatment of optical systems. *J. Opt. Soc. Am.*, 68(9):1275-1281, 1978.
- [289] W. Urbanczyk. Optical imaging in polarized light. *Optik*, 63(1):25-35, 1982.
- [290] W. Urbanczyk. Optical imaging systems changing the state of light polarization. *Optik*, 66(4):301-309, 1984.

- [291] W. Urbanczyk. Optical transfer function for imaging systems which change the state of light polarization. *Optica Acta*, 33(1):53-62, 1984.
- [292] J.P. Jr. McGuire and R.A. Chipman. Diffraction image formation in optical systems with polarization aberrations. I. Formulation and example. *J. Opt. Soc. Am. A*, 7(9):1614-1626, 1990.
- [293] M. Totzeck, N. Kerwien, A. Tavrov, E. Rosenthal, and H.J. Tiziani. Quantitative zernike phase-contrast microscopy by use of structured birefringent pupil-filters and phase-shift evaluation. *Proc. of the SPIE*, 4777:1-11, 2002.
- [294] M. Totzeck, P. Gräupner, T. Heil, A. Göhnermeier, O. Dittmann, D. Krähmer, V. Kamenov, J. Ruoff, and D. Flagello. How to describe polarization influence on imaging. *Proc. of the SPIE*, 5754:23-37, 2005.
- [295] H. Helmholtz. *Die theoretische Grenze für die Leistungsfähigkeit der Mikroskope*. Annalen der Physik und Chemie, Jubelband. Verlag von Johann Ambrosius Barth, Leipzig, 1874.
- [296] H. Haferkorn. *Optik*. Johann Ambrosius Barth, Leipzig, 3. Auflage, 1994.
- [297] H.H. Hopkins. The Airy disc formula for systems of high relative aperture. *Proceedings of the Physical Society*, 55(2):116-128, 1943.
- [298] C.J.R. Sheppard and M. Gu. Imaging by a high aperture optical system. *Journal of Modern Optics*, 40(8):1631-1651, 1993.
- [299] M. Gu. *Advanced Optical Imaging Theory*. Springer Series in Optical Sciences. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1999.
- [300] J.D. Gaskill. *Linear Systems, Fourier Transformations and Applications in Optics*. Wiley Series in pure and applied optics. John Wiley & Sons, New York, 1978.
- [301] A. Kwok-Kit Wong. *Resolution Enhancement Techniques in Optical Lithography*, volume TT47 of *Tutorial Texts in optical Engineering*. SPIE-Press, Bellingham, Washington USA, 2001.
- [302] H.H. Hopkins. Image formation with coherent and partially coherent light. *Photographic Science & Engineering*, 21(3):114-123, 1977.
- [303] D.G. Flagello, T. Milster, and A.E. Rosenbluth. Theory of high-NA imaging in homogeneous thin films. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(1):53-64, 1996.
- [304] A. Tavrov, N. Kerwien, R. Berger, H.J. Tiziani, M. Totzeck, B. Spektor, J. Shamir,

- G. Toker, and A. Brunfeld. Vector simulations of dark beam interaction with nano-scale surface features. *Proc. of the SPIE*, 5144:26-36, 2003.
- [305] H.H. Hopkins. The concept of partial coherence in optics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 208(1093):263-277, 1951.
- [306] H.H. Hopkins. On the diffraction theory of optical images. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 217(1130):408-432, 1953.
- [307] J.J. Stamnes. *Waves in Focal Regions – Propagation, Diffraction and Focusing of Light, Sound and Water Waves*, chapter 12.2, pages 49-59. IOP Publishing Limited, Bristol, England, 1986.
- [308] H.A. Eide and J.J. Stamnes. Exact and approximate solutions for focusing of two-dimensional waves. II. Numerical comparisons among exact, Debye, and Kirchhoff theories. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(5):1292-1307, 1998.
- [309] H. A. Eide and J.J. Stamnes. Exact and approximate solutions for focusing of two-dimensional waves. III. Numerical comparisons between exact and Rayleigh-Sommerfeld theories. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(5):1308-1319, 1998.
- [310] Y. Li and E. Wolf. Focal shifts in diffracted converging spherical waves. *Optics Communications*, 39(4):211-215, 1981.
- [311] J.J. Stamnes and B. Spjelkavik. Focusing at small angular apertures in the Debye and Kirchhoff approximations. *Optics Communications*, 40(2):81-85, 1981.
- [312] Y. Li. Dependence of the focal shift on Fresnel number and f number. *J. Opt. Soc. Am.*, 72(6):770-774, 1982.
- [313] C.J.R. Sheppard and P. Török. Dependence of focal shift on Fresnel number and angular aperture. *Optics Letters*, 23(23):1803-1804, 1998.
- [314] Y. Li. Focal shift in small-Fresnel-number focusing systems of different relative aperture. *J. Opt. Soc. Am.*, 20(2):234-239, 2003.
- [315] H. Kogelnik and T. Li. Laser beams and resonators. *Applied Optics*, 5(10):1550-1567, 1966.
- [316] E. Collett and E. Wolf. Symmetry properties of focussed fields. *Optics Letters*, 5(6):264-266, 1980.
- [317] J.J. Stamnes. *Waves in Focal Regions – Propagation, Diffraction and Focusing of*

- Light, Sound and Water Waves*, chapter 12, pages 243-376. IOP Publishing Limited, Bristol, England, 1986.
- [318] E. Wolf and Y. Li. Conditions for the validity of the Debye integral representation of focused fields. *Optics Communications*, 39(4):205-210, 1981.
- [319] Y. Li and E. Wolf. Three-dimensional intensity distribution near the focus in systems of different Fresnel numbers. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1(8):801-808, 1984.
- [320] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, chapter 8.2. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [321] J.J. Stamnes. *Waves in Focal Regions – Propagation, Diffraction and Focusing of Light, Sound and Water Waves*, chapter 14.1, pages 398-399. IOP Publishing Limited, Bristol, England, 1986.
- [322] C.J.R. Sheppard and P. Török. Dependence of Fresnel number on aperture stop position. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(12):3016-3019, 1998.
- [323] C.J.R. Sheppard and P. Török. Effects of Fresnel number in focusing and imaging. *Proc. of the SPIE*, 3729:458-472, 1999.
- [324] C.J.R. Sheppard. Validity of the Debye approximation. *Optics Letters*, 25(22):1660-1662, 2000.
- [325] P. Török. Focusing of electromagnetic waves through a dielectric interface by lenses of finite Fresnel number. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(12):3009-3015, 1998.
- [326] W. Hsu and R. Barakat. Stratton-Chu vectorial diffraction of electromagnetic fields by apertures with application to small-fresnel-number systems. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(2):623-629, 1994.
- [327] J.L. Pezzaniti, R.A. Chipman, and D.A. Gregory. Polarization characterization of a LCTV with a Mueller Matrix imaging polarimeter. *Proc. of the SPIE*, 1959:235-247, 1993.
- [328] J.L. Pezzaniti, S.C. McClain, R.A. Chipman, and S.-Y. Lu. Depolarization in liquid-crystal televisions. *Optics Letters*, 18(23):2071-2073, 1993.
- [329] J.L. Pezzaniti and R.A. Chipman. Mueller matrix imaging polarimetry. *Optical Engineering*, 34(6):1558-1568, 1995.
- [330] J.L. Pezzaniti and R.A. Chipman. Angular dependence of polarizing beam-splitter cubes. *Applied Optics*, 33(10):1916-1929, 1994.

- [331] R.A. Chipman, E.A. Sornsin, and J.L. Pezzaniti. Mueller matrix imaging polarimetry: an overview. *Proc. of the SPIE*, 2873:5-12, 1996.
- [332] J.L. Pezzaniti and R.A. Chipman. Mueller matrix scatter polarimetry of a diamond-turned mirror. *Optical Engineering*, 34(6):1593-1598, 1995.
- [333] L. Jin, T. Hamada, Y. Otani, and N. Umeda. Measurement of characteristics of magnetic fluid by the Mueller matrix imaging polarimeter. *Optical Engineering*, 43(1):181-185, 2004.
- [334] G.G. Fuller. *Optical Rheometry of Complex Fluids*. Oxford University Press, 1995.
- [335] T.Y.-F. Chen. *Selected papers on photoelasticity*. SPIE Press, 1999.
- [336] J.H. Chumside and J.J. Wilson and V.V. Tatarskii. Airborne lidar for fisheries applications. *Optical Engineering*, 40:406-414, 2001.
- [337] S. Tan and R.M. Narayanan. Design and performance of a multiwavelength airborne polarimetric lidar for vegetation remote sensing. *Applied Optics*, 43(11):2360-2368, 2004.
- [338] J.S. Harchanko, D.B. Chenault, C.F. Farlow, and K. Spradley. Detecting a surface swimmer using long wave infrared imaging polarimetry. *Proc. of the SPIE*, 5780, 2005.
- [339] A. Barta, G. Horvath, B. Bernath, and V.B. Meyer-Rochow. Imaging polarimetry of the rainbow. *Applied Optics*, 42(3):399-405, 2003.
- [340] N.J. Pust and J.A. Shaw. Dual-field imaging polarimeter using liquid crystal variable retarders. *Applied Optics*, 45(22):5470-5478, 2006.
- [341] T. Sakai, T. Nagai, M. Nakazato, Y. Mano, and T. Matsumura. Ice clouds and Asian dust studied with lidar measurements of particle extinction-to-backscatter ratio, particle depolarization, and water-vapor mixing ratio over Tsukuba. *Applied Optics*, 42(36):7103-7116, 2003.
- [342] L.J. November and L.M. Wilkins. Liquid crystal polarimeter: a solid state imager for solar vector magnetic fields. *Optical Engineering*, 34(6):1659-1668, 1995.
- [343] P.S. Hauge. Recent developments in instrumentation in ellipsometry. *Surface Science*, 96(1-3):108-140, 1980.
- [344] J.S. Tyo, D.L. Goldstein, D.B. Chenault, and J.A. Shaw. Review of passive imaging polarimetry for remote sensing applications. *Applied Optics*, 45(22):5453-5469, 2006.

- [345] R.M.A. Azzam. Photopolarimetric measurement of the Mueller matrix by Fourier analysis of a single detected signal. *Optics Letters*, 2(6):148-150, 1978.
- [346] A. De Martino, Kim Yong-Ki, E. Garcia-Caurel, B. Laude, and B. Drevillon. Optimized Mueller polarimeter with liquid crystals. *Optics Letters*, 28(8):616-618, 2003.
- [347] B. Laude-Boulesteix, A. De Martino, B. Drevillon, and L. Schwartz. Mueller polarimetric imaging system with liquid crystals. *Applied Optics*, 43(14):2824-2832, 2004.
- [348] B.B. Wang, J. List, and R.R. Rockwell. A Stokes polarimeter using two photoelastic modulators. *Proc. of the SPIE*, 4819(2002):1-8, 2002.
- [349] G.E. Jellison, J.D. Hunn, and C.M. Rouleau. Normal-incidence generalized ellipsometry using the two-modulator generalized ellipsometry microscope. *Applied Optics*, 45(22):5479-5488, 2006.
- [350] R.C. Thompson, J.R. Bottiger, and E.S. Fry. Measurement of polarized light interactions via the Mueller matrix. *Applied Optics*, 19(8):1323-1332, 1980.
- [351] R.M.A. Azzam. Photopolarimeter using two modulated optical rotators. *Optics Letters*, 1(5):181-183, 1977.
- [352] G.F.J. Garlick, G.A. Steigmann, and W.E. Lamb. Differential optical polarization detectors. U.S. patent 3.992.571, 1976.
- [353] R.M.A. Azzam. Division-of-amplitude photopolarimeter (doap) for the simultaneous measurement of all four Stokes parameters of light. *Optica Acta*, 29(5):685-689, 1982.
- [354] R.M.A. Azzam. Mueller matrix measurement using the four-detector photopolarimeter. *Optics Letters*, 11(5):270-272, 1986.
- [355] C.A. Farlow, D.B. Chenault, J.L. Pezzaniti, K.D. Spradley, and M.G. Gulley. Imaging polarimeter development and applications. *Proc. of the SPIE*, 4481:118-125, 2002.
- [356] C. Quan, P.J. Bryanston-Cross, and T.R. Judge. Photoelasticity stress analysis using carrier fringe and FFT techniques. *Optics and Lasers in Engineering*, 18:79-108, 1993.
- [357] K. Oka and T. Kaneko. Compact complete imaging polarimeter using birefringent wedge prisms. *Optics Express*, 11(13):1510-1519, 2003.
- [358] S. Drobczynski and H. Kasprzak. Application of space periodic variation of light polarization in imaging polarimetry. *Applied Optics*, 44(16):3160-3166, 2005.
- [359] S. Drobczynski, J.M. Bueno, P. Artal, and H. Kasprzak. Transmission imaging

- polarimetry for a linear birefringent medium using a carrier fringe method. *Applied Optics*, 45(22):5489-5496, 2006.
- [360] D.M. Rust. Integrated dual imaging detector. U.S. patent 5.438.414, 1995.
- [361] A.G. Andreou and Z.K. Kalayjian. Polarization imaging: Principles and integrated polarimeters. *IEEE Sensors Journal*, 2(6):566-576, 2002.
- [362] S. Yoneyama, H. Kikuta, and K. Moriwaki. Instantaneous phase-stepping interferometry using polarization imaging with a micro-retarder array. *Experimental Mechanics*, 45(5):451-456, 2005.
- [363] R. Bohr. Umbau eines Leica DMR Mikroskops zur Verwendung als Interferenzmikroskop vom Linniktyp. Studienarbeit, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, 2001.
- [364] E.M. Rosenthal. Eignung verschiedener polarisationsoptischer Filter für die quantitative Phasenkontrastmikroskopie. Studienarbeit, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, 2001.
- [365] E.M. Rosenthal. Müllermatrix-Mikroskopie zur hochauflösenden Strukturerkennung. Diplomarbeit, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, 2002.
- [366] S. Meining. Hochauflösende Phasenfrontmessung mittels Phaseretrieval. Diplomarbeit, Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart, 2003.
- [367] P.S. Hauge and F.H. Dill. A rotating-compensator Fourier ellipsometer. *Optics Communications*, 14(4):431-437, 1975.
- [368] W. Budde. Photoelectric analysis of polarized light. *Applied Optics*, 1(3):201-205, May 1962.
- [369] D.E. Aspnes. Fourier transform detection system for rotating-analyzer ellipsometers. *Optics Communications*, 8(3):222-225, 1973.
- [370] M.H. Smith, J.B. Woodruff, and J.D. Howe. Beam wander considerations in imaging polarimetry. *Proc. of the SPIE*, 3754:50-54, 1999.
- [371] C.M. Persons, D.B. Chenault, M.W. Jones, K.D. Süradley, M.G. Gulley, and C.A. Farlow. Automated registration of polarimetric imagery using Fourier transform techniques. *Proc. of the SPIE*, 4819:107-117, 2002.
- [372] J.P. Lewis. Fast normalized cross-correlation, original paper: "Fast template matching". *Vision Interface*, pages 120-123, 1995.

- [373] S. Inoué and K.R. Spring. *Video Microscopy. The Fundamentals.*, chapter 2.6.5, pages 76-86. Plenum Press, New York, 2nd edition, 1997.
- [374] M.R. Hee, D. Huang, E.A. Swanson, and J.G. Fujimoto. Polarization-sensitive low-coherence reflectometer for birefringence characterization and ranging. *J. Opt. Soc. Am. B* 9, 9(6):903-908, 1992.
- [375] J.F. De Boer, T.E. Milner, and J.S. Nelson. Determination of the depth-resolved Stokes parameters of light backscattered from turbid media by use of polarization-sensitive optical coherence tomography. *Optics Letters*, 24(5):300-302, 1999.
- [376] S. Jiao, G. Yao, and L.V. Wang. Depth-resolved two-dimensional Stokes vectors of backscattered light and Mueller matrices of biological tissue measured with optical coherence tomography. *Applied Optics*, 39(34):6318-6324, 2000.
- [377] P.-Y. Gerligand, M.H. Smith, and R.A. Chipman. Polarimetric images of a cone. *Optics Express*, 4(10):420-430, 1999.
- [378] U. Neuschaefer-Rube and W. Holzapfel. Simultaneous measurement of surface geometry and material distribution by focusing ellipsotopometry. *Applied Optics*, 41(22):4526-4535, 2002.
- [379] Q. Zhan and J.R. Leger. Microellipsometer with radial symmetry. *Applied Optics*, 41(22):4630-4637, 2002.
- [380] Q. Zhan and J.R. Leger. High-resolution imaging ellipsometer. *Applied Optics*, 41(22):4443-4450, 2002.
- [381] K. Leonhardt, H.-J. Jordan, and H.J. Tiziani. Micro-ellipso-height-profilometry. *Optics Communications*, 80(3,4):205-209, 1991.
- [382] C. W. See, M.G. Somekh, and R.D. Holmes. Scanning optical microellipsometer for pure surface profiling. *Applied Optics*, 35(34):6663-6668, 1996.
- [383] G.D. Feke, D.P. Snow, R.D. Grober, P.J. de Groot, and L. Deck. Interferometric back focal plane microellipsometry. *Applied Optics*, 37(10):1796-1802, 1998.
- [384] K. Leonhardt. Ellipso-height topometry, EHT: extended topometry of surfaces with locally changing materials. *Optik*, 112(9):413-420, 2001.
- [385] M. Alouini and D. Dolfi. Detection enhancement of low contrast targets through active multispectral polarimetric imaging. *Proceedings of EOS topical meeting on advance imaging techniques*, pages 10-12, 2003.

- [386] B.J. DeBoo, J.M. Sasian, and R.A. Chipman. Depolarization of diffusely reflecting man-made objects. *Applied Optics*, 44(26):5434-5445, 2005.
- [387] H. Horinaka, K. Hashimoto, K. Wada, Y. Cho, and M. Osawa. Extraction of quasi-straightforward-propagating photons from diffused light transmitting through a scattering medium by polarization modulation. *Optics Letters*, 20(13):1501-1503, 1995.
- [388] S.P. Schilders, X.S. Gan, and M. Gu. Resolution improvement in microscopic imaging through turbid media based on differential polarization gating. *Applied Optics*, 37(19):4300-4302, 1998.
- [389] J.M. Bueno, E. Berrio, M. Ozolinsh, and P. Artal. Degree of polarization as an objective method of estimating scattering. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21(7):1316-1321, 2004.
- [390] R. Oldenbourg. Analysis of edge birefringence. *Biophysical Journal*, 60(3):629-641, 1991.
- [391] R. Barakat. Incoherent diffraction imagery by a polarizing microscope with crossed polarizers. *Optica Acta*, 27(6):847-862, 1980.
- [392] R. Barakat. Optical linewidth measurements using a polarizing microscope with crossed polarizers. *Applied Optics*, 29(34):5038-5039, 1990.
- [393] S. Kimura and T. Wilson. Confocal scanning dark-field polarization microscopy. *Applied Optics*, 33(7):1274-1278, 1994.
- [394] D.S. Marx and D. Psaltis. Polarization quadrature measurement of subwavelength diffracting structures. *Applied Optics*, 36(25):6434-6440, 1997.
- [395] M. Totzeck and H.J. Tiziani. Phase-shifting polarization interferometry for microstructure linewidth measurement. *Optics Letters*, 24(5):294-296, 1999.
- [396] M. Totzeck, H. Jacobsen, and H.J. Tiziani. Edge localization of subwavelength structures by use of polarization interferometry and extreme-value criteria. *Applied Optics*, 39(34):6295-6305, 2000.
- [397] Q. Zhan and J.R. Leger. Imaging ellipsometry for high-spatial-resolution metrology. *Proc. of the SPIE*, 4435:65-76, 2001.
- [398] Q. Zhan and J.R. Leger. Measurement of surface features beyond the diffraction limit with an imaging ellipsometer. *Optics Letters*, 27(10):821-823, 2002.
- [399] H. Kubota and S. Inoué. Diffraction images in the polarizing microscope. *J. Opt. Soc. Am.*, 49(2):191-198, 1959.

- [400] H. Kubota and S. Inoué. Diffraction anomaly in polarizing microscopes. *Nature*, 182:1725-1726, 1959.
- [401] T. Wilson and R. Juskaitis. On the extinction coefficient in confocal polarization microscopy. *Journal of Microscopy*, 179:238–240, 1995.
- [402] N. Kerwien, M. Totzeck, and A. Tavrov. Large aperture subwavelength surface analysis and reconstruction. Final Report of EU-Project „Lassar“ (CRAF1999-70400), 2004.
- [403] N. Kerwien, E. Rosenthal, M. Totzeck, W. Osten, and H.J. Tiziani. Mueller matrix microscopy for high-resolution inspection of 2D-microstructures. *Proceedings of EOS Topical Meeting on Advanced Imaging Techniques, Delft*, 2003.
- [404] M. Totzeck, H. Jacobsen, and H.J. Tiziani. High-resolution measurement of 2D-microstructures by means of Jones matrix microscopy. *Proceedings of the 2nd Conference on Design and Fabrication, Japan*, 2000.
- [405] R.E. Raab. A new method for determining the optical properties of a dielectric. *Optica Acta*, 29(9):1243-1253, 1982.
- [406] O. Wiener. *Die Theorie des Mischkörpers für das Feld der stationären Strömung – Erste Abhandlung: Die Mittelwertsätze für Kraft, Polarisation und Energie*, Band 32 der Reihe *Abhandlungen der Mathematisch-Physikalischen Klasse der Königlich Sächsischen Gesellschaft der Wissenschaften*. Teubner-Verlag, Leipzig, 1912.
- [407] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*, page 837ff. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [408] Simulation scatterometrischer und mikroskopischer Messsignale von komplexen 3D-Nanostrukturen. Teilvorhaben des BMBF-Verbundprojektes „Abbild“ (FKZ 01M3131540), 2006.

Lebenslauf

Norbert Ingo Kerwien, geboren am 15. Januar 1974 in Blaubeuren

1980 bis 1984	Grundschule Gerhausen
1984 bis 1993	Gymnasium Blaubeuren, Allgemeine Hochschulreife
Juli 1993 bis Sep. 1994	Zivildienst
Okt. 1994 bis Sep. 2000	Studium der Mathematik und Physik, Abschluss: Diplom in Physik
Feb. 2001 bis Juni 2001	Wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Abteilung Halbleiterphysik der Universität Ulm
Juni. 2001 bis Okt. 2006	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Optik der Universität Stuttgart
Aug. 2002 bis Okt. 2006	Leiter der Arbeitsgruppe „Hochauflösende Messtechnik und Simulation“ am Institut für Technische Optik
seit Nov. 2006	Optik-Designer bei der Carl-Zeiss SMT AG, Oberkochen

Danksagung

Meine Promotionszeit am Institut für Technische Optik in Stuttgart bot mir in vielfältiger Weise die Gelegenheit, mich fachlich und persönlich weiterzuentwickeln. Ich möchte mich bei allen herzlich bedanken, die mir diese Möglichkeiten eröffnet und mich auf meinem Weg begleitet und unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. W. Osten für seine wohlwollende Förderung, die weit über die Unterstützung dieser Arbeit hinausging. Er brachte mir schon sehr früh großes Vertrauen entgegen, indem er mir die Leitung der Arbeitsgruppe „Hochauflösende Messtechnik und Simulation“ seines Instituts übertrug. Die entsprechenden Aufgaben und damit verbundene Verantwortung eröffneten mir wichtige und positive Entwicklungsmöglichkeiten.

Herrn Prof. Dr. H.P. Herzig danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit sowie für seine offene und freundliche Bereitschaft, den Mitbericht zu übernehmen.

Herzlich bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. H.J. Tiziani. Er hatte mich ursprünglich am Institut für Technische Optik als Doktorand angestellt und meine Arbeiten auch nach seiner Emeritierung mit großem Interesse weiter verfolgt und unterstützt. Viele anregende Diskussionen und sein Rat waren für mich immer eine wichtige Orientierungshilfe.

Weiterer Dank gilt Dr. Michael Totzeck. Seine Arbeiten am Institut für Technische Optik bildeten eine wichtige Grundlage der Arbeitsgruppe „Hochauflösende Messtechnik und Simulation“ und meiner, hier vorgestellten Arbeit. Ganz herzlich möchte ich ihm für viele hilfreiche Diskussionen und Hinweise zu meiner Arbeit danken.

Auch sei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern am Institut für Technische Optik und insbesondere meiner Arbeitsgruppe für die positive Zusammenarbeit und freundliche Arbeitsatmosphäre gedankt. Die vielfältige Hilfsbereitschaft in kleinen und großen Fragen ließen mich manche Hürde leichter nehmen. Dieser Dank gilt im besonderen Maße Thomas Schuster, nicht zuletzt für das Korrekturlesen meiner Arbeit, und Andreas Lorenz für die feinwerktechnische Unterstützung.

Ganz lieber Dank geht an meine Familie für ihren Rückhalt und Unterstützung während meiner Arbeit und insbesondere an Eva. Sie hat mir bei der Korrektur der Arbeit bis

hin zum Druck mit ihrem redaktionell geschärften Blick viel geholfen und förderte immer wieder meine Motivation, die Arbeit fertig zu stellen.

Der wesentliche Teil der Arbeit entstand im Rahmen öffentlich geförderter Forschungsprojekte. Allen Projektpartnern danke ich für die konstruktive Zusammenarbeit. Besonders erwähnt seien Herr Mirandé von der Physikalisch Technischen Bundesanstalt für die Bereitstellung verschiedener Proben sowie Herr Dr. Vollrath und seine Mitarbeiter Herr Heiden und Herr Danner, Leica Microsystems, für die offene und freundliche Unterstützung insbesondere bei der Umrüstung der Laboraufbauten. Den Geldgebern der Forschungsprojekte – der Landesstiftung Baden-Württemberg (RISOM), dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (NanoEdge) sowie der Europäischen Union (LASSAR) – danke ich für die finanzielle Unterstützung der Arbeiten.

Mögglingen, im November 2007

Norbert Kerwien

ISBN 978-3-923560-57-8