

# 在入射平面内小角度入射一维光栅零级衍射场的简便计算方法

陈树强

(电子科技大学物理电子学院,四川成都 610054)

**摘要:** 耦合波分析法(RCWA)方法是目前研究光栅衍射最普遍的方法.垂直入射到光栅表面的光使衍射光的正负  $N$  级衍射波处于对称状态,使得在 RCWA 法中原先需要计算  $2N + 1$  级衍射的  $2N + 1$  阶矩阵问题降低到计算  $N + 1$  级衍射的  $N + 1$  阶矩阵问题.本文将这种对称结构的简化方法推广到非垂直入射、光栅条纹在入射平面内的情况,使得在这种耦合情况下的  $2(2N + 1)$  阶矩阵问题简化为  $2(N + 1)$  阶矩阵问题.同时针对小角度入射的情况提出了进一步简化计算方法将其简化为  $(N + 1)$  阶矩阵问题.实验表明在较大的范围内,其误差均可接受,在工程应用具有重要的意义.

**关键词:** 光栅; RCWA; 衍射; 对称性

**中图分类号:** O438.2      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0372-2112 (2011) 08-1878-05

## A Simplified Approach for Calculation Zero-Order Diffraction of the 1-D Grating with the Incident Plane Parallel to the Grating Line

CHEN Shu-qiang

(University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu, Sichuan 610054, China)

**Abstract:** The rigorous couple wave analysis(RCWA) is one of the most common methods for the study of grating diffraction. For the incident beam normal to the surface of the grating, the positive and negative  $N$  diffraction orders are same due to the symmetry, which lead to the great simplified in by decreasing matrix size from  $2N + 1$  to  $N + 1$ . In this paper, the simplified method is extended to the case that the incident plane parallel to the grating line. In this case, the problem of matrix size  $2(2N + 1)$  (due to the coupling of different polarization states) can be reduced to the problem of matrix size  $2(N + 1)$ . Furthermore, some more simple approach for the small incident angle is discussed, in which the problem of matrix size  $2(N + 1)$  can be reduced to  $(N + 1)$ . The typical simulation shows that the error is acceptable in quite a large range, which is important in practical use.

**Key words:** grating; RCWA(rigorous couple wave analysis); diffraction; symmetry

### 1 引言

光栅衍射场的模拟对于分析设计光栅、光子晶体等结构都具有重要的意义.同时实现各种周期性微观结构分析/测试的基础,在集成电路结构的分析/测试中有着广泛的应用<sup>[1]</sup>.在工程实际中,模拟计算效率是十分重要的.光栅结构的模拟算法有近似的标量分析算法和严格的矢量分析算法两大类.前者运算速度很快,但应用条件有限.随着计算机技术和算法的发展,以及工程实际中对模拟算法精度要求的不断提高,矢量分析算法正越来越多地被采用.其中 RCWA 法是目前应用最广泛的高效、稳定的方法.该方法最初于 1978 年由 K. Knop

等人提出<sup>[2]</sup>,并经 Moharam 等于 1995 年进一步推广为较稳定的算法<sup>[3]</sup>.其主要思想是将光栅及其它空间中的场以及周期性的折射率都表示成空间衍射谐波的线性组合.虽然要实现场的严格解需要考虑无穷多级谐波,但在绝大多数情况下,只要考虑一定级别的谐波数,就能给出很好的近似结果.保留的谐波数越大,结果越精确,但计算时间也越长.谐波数直接对应衍射级别.保留的衍射级别为  $-N, \dots, -1, 0, 1, \dots, N$ , 则谐波总数为  $M = 2N + 1$ .在 RCWA 法中则需要处理  $M$  阶矩阵问题,其计算时间及所需内存几乎与  $M$  的 3 次方成正比.当入射光垂直于光栅平面时<sup>[4]</sup>,正、负衍射级次的强度及空间位置都处于对称状态,因此可以只考虑正(或负)级加

零级衍射,使谐波总数降低为  $M_r = N + 1$ ,大大简化了计算,但垂直入射的条件使其在工程实际中受到许多限制.在非垂直入射光情况的研究中,光栅线条垂直于入射平面(以下简称垂直入射面)的情况下,不同偏振态(TE、TM 模)的入射光可以解耦,场的结构及计算都相对简单,也是各种文献讨论及应用较多的情况.当入射光偏离垂直入射时,不同模式间场的耦合使问题变得十分复杂,计算量也大大增加.在实际研究及工程应用都相对较少.但在光栅线条平行于入射平面(以下简称平行入射面)的情况下,可以通过结构的对称性而简化场的计算.本文考虑这种平行入射的情况.

## 2 基本原理

一般情况下,任意角度入射光投射到光栅平面的情况如图 1 所示.

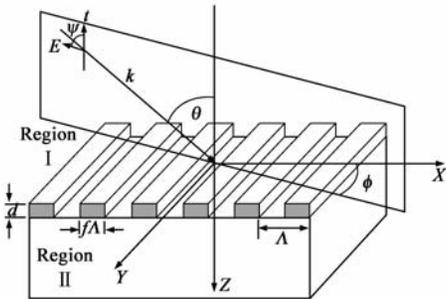


图1

入射平面由图中角度  $\phi$  决定.当  $\phi = 0, \phi = 90^\circ$  分别对应垂直及平行入射面的情况.根据 RCWA 法<sup>[2,3]</sup>,光栅以上空间(区域 I)及基底(区域 II)的平面电磁波可表示为富里叶级数形式为

$$\mathbf{E}_I = \mathbf{E}_{\text{inc}} + \sum_i \mathbf{R}_i \exp[-j(k_{xi}x + k_y y - k_{l,zi}z)], \quad (1)$$

$$\mathbf{E}_{II} = \sum_i \mathbf{T}_i \exp\{-j[k_{xi}x + k_y y + k_{l,zi}(z - d)]\}$$

其中  $\mathbf{R}_i, \mathbf{T}_i$  为不同衍射级次的归一化电场波反射率和透射率.

$$k_{xi} = k_0 n_l \cos\phi \sin\theta - i \frac{2\pi}{\Lambda} \quad (2)$$

$$k_y = k_0 n_l \sin\phi \sin\theta$$

$\Lambda$  为光栅的周期,  $k_0 (= 2\pi/\lambda)$  为自由空间的波矢量.

$$k_{l,zi} = \begin{cases} + [(k_0 n_l)^2 - k_{xi}^2 - k_y^2]^{1/2}, & (k_{xi}^2 + k_y^2) < k_0^2 n_l^2 \\ -j [k_{xi}^2 + k_y^2 - (k_0 n_l)^2]^{1/2}, & (k_{xi}^2 + k_y^2)^{1/2} > k_0 n_l, \end{cases} \quad l = \text{I, II} \quad (3)$$

$n_l (l = \text{I, II})$  为区域 I, II 的折射率.对于 TE、TM 波,入射光的电场波可分别表示为

$$\mathbf{E}_{\text{inc}} = (-\sin\phi \mathbf{e}_x + \cos\phi \mathbf{e}_y) \exp[-jk_0 n_l (y \sin\theta + z \cos\theta)] \quad (4a)$$

$$\mathbf{E}_{\text{inc}} = (-\cos\theta \cos\phi \mathbf{e}_x - \cos\theta \sin\phi \mathbf{e}_y + \sin\theta \mathbf{e}_z)$$

$$\cdot \exp[-jk_0 n_l (y \sin\theta + z \cos\theta)] \quad (4b)$$

在光栅区域 ( $0 < z < d$ ), 电磁场可分别表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_g &= \sum_i [S_{xi}(z) \mathbf{e}_x + S_{yi}(z) \mathbf{e}_y + S_{zi}(z) \mathbf{e}_z] \\ &\cdot \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)] \\ \mathbf{H}_g &= -j \left( \frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_i [U_{xi}(z) \mathbf{e}_x + U_{yi}(z) \mathbf{e}_y + U_{zi}(z) \mathbf{e}_z] \\ &\times \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)] \end{aligned} \quad (5)$$

光栅材料的介电常数(折射率的平方)呈周期性分布,也可表示为相同周期的富里叶级数为<sup>[4]</sup>

$$\epsilon(x) = \sum_h \epsilon_h \exp\left(j \frac{2\pi h}{\Lambda} x\right) \quad (6)$$

其中  $\epsilon_h$  是第  $h$  级富里叶系数.以含两种介质材料的光栅为例,  $n_{\text{nl}}, n_{\text{gr}}$  分别为两种介质的折射率,富里叶系数可表示为

$$\epsilon_0 = n_{\text{nl}}^2 f + n_{\text{gr}}^2 (1 - f) \quad (7)$$

$$\epsilon_h = (n_{\text{nl}}^2 - n_{\text{gr}}^2) \frac{\sin(\pi h f)}{\pi h}$$

其中  $f (0 < f < 1)$  称为材料  $n_{\text{nl}}$  的填充因子.由麦克斯韦方程及式(5)可求得场分量满足的本征方程为

$$[\partial^2 \mathbf{U}_x / \partial (z')^2] = [\mathbf{K}_y^2 \mathbf{I} + \mathbf{A}] [\mathbf{U}_x] \quad (8)$$

$$[\partial^2 \mathbf{S}_x / \partial (z')^2] = [\mathbf{K}_y^2 \mathbf{I} + \mathbf{B} \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1}] [\mathbf{S}_x]$$

其中:  $z' = k_0 z$ ,  $\mathbf{K}_y = k_y / k_0$ ,  $\mathbf{I}$  为单位方阵,  $\mathbf{U}_x, \mathbf{S}_x$  为式(5)中谐波分量  $U_{xi}, S_{xi}$  组成的矢量

$$\mathbf{A} = \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E}, \quad (9)$$

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

$\mathbf{K}_x$  为  $k_{xi}/k_0$  组成的对角方阵,  $\mathbf{E}$  为折射率函数的平面波展开的富里叶系数 ( $\mathbf{E}_{mn} = (\epsilon_m - n)$ ).方程(8)与文献[3]中的方程(60)稍有不同,以  $\mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1}$  取代  $\mathbf{E}$ , 而  $\mathbf{E}_{\text{inv}}$  为介电常数函数倒数 ( $1/\epsilon(x)$ ) 的平面波展开富里叶系数矩阵<sup>[5]</sup>, 它取代  $\mathbf{E}^{-1}$  对 TM 波衍射场计算的有很大的帮助(提高收敛速度)<sup>[5,6]</sup>. 这里我们根据文献[6]中的原则用  $\mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1}$  取代  $\mathbf{E}$ , 同样取得提高收敛速度的效果.

对于垂直入射面的情况(图 1 中  $\phi = 0$ ),  $k_y = 0$ , 式(8)中两方程只有一个不为零, 电场和磁场垂直或平行于  $y$  方向的分量, 分别对应与 TE、TM 波. 由  $z = 0$  及  $z = d$  的边界条件就求解出系统的透射  $\mathbf{T}_i$  及反射率  $\mathbf{R}_i$ <sup>[3]</sup>. 此时  $\mathbf{A}$  及  $\mathbf{B} \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1}$  为  $M = 2N + 1 (-N, \dots, -1, 0, 1, \dots, N)$  阶方阵, 需要处理的是  $2N + 1$  阶矩阵问题.

再看一般入射波的情况, 式(5)中, 场的系数函数只有  $x, y$  分量是独立的, 可进一步表示为

$$\begin{aligned} U_{xi}(z) &= \sum_{m=1}^n w_{1,i,m} \{ -c_{1,m}^+ \exp(-k_0 w q_{1,m} z) \\ &+ c_{1,m}^- \exp[k_0 q_{1,m} (z - d)] \} \end{aligned} \quad (10a)$$

$$S_{xi}(z) = \sum_{m=1}^n w_{2,i,m} \{ c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m} z) \}$$

$$+ c_{2,m}^- \exp[k_0 q_{2,m}(z-d)] \} \quad (10b)$$

$$S_{yi}(z) = \sum_{m=1}^n v_{11,i,m} \{ c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m}z) + c_{1,m}^- \exp[k_0 q_{1,m}(z-d)] \} + \sum_{m=1}^n v_{12,i,m} \{ c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m}z) + c_{2,m}^- \exp[k_0 q_{2,m}(z-d)] \} \quad (10c)$$

$$U_{yi}(z) = \sum_{m=1}^n v_{21,i,m} \{ -c_{1,m}^+ \exp(-k_0 q_{1,m}z) + c_{1,m}^- \exp[k_0 q_{1,m}(z-d)] \} + \sum_{m=1}^n v_{22,i,m} \{ -c_{2,m}^+ \exp(-k_0 q_{2,m}z) + c_{2,m}^- \exp[k_0 q_{2,m}(z-d)] \} \quad (10d)$$

这里  $w_{1,i,m}$  和  $q_{1,m}$  分别是矩阵  $[K_y^2 \mathbf{I} + \mathbf{A}]$  的本征矢量  $\mathbf{W}_1$  和本征值  $Q_1$  的算术平方根;  $w_{2,i,m}$  和  $q_{2,m}$  是矩阵  $[K_y^2 \mathbf{I} + \mathbf{B} \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1}]$  的本征矢量  $\mathbf{W}_2$  和本征值  $Q_2$  的算术平方根.

$v_{11,i,m}, v_{12,i,m}, v_{21,i,m}$  和  $v_{22,i,m}$  是矩阵

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{11} &= \mathbf{A}^{-1} \mathbf{W}_1 \mathbf{Q}_1 \\ \mathbf{V}_{12} &= \mathbf{K}_y \mathbf{A}^{-1} \mathbf{K}_x \mathbf{W}_2 \\ \mathbf{V}_{21} &= \mathbf{K}_y \mathbf{B}^{-1} \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{W}_1 \\ \mathbf{V}_{22} &= \mathbf{B}^{-1} \mathbf{W}_2 \mathbf{Q}_2 \end{aligned} \quad (11)$$

的元素.

同样由  $z=0$  及  $z=d$  的边界条件就能解出式(10)中的系数  $c_{1,m}^+, c_{1,m}^-, c_{2,m}^+$  和  $c_{2,m}^-$  并求出系统的透射  $T_i$  及反射率  $R_i^{[3]}$ . 此时式(11)中个矩阵也是  $M(=2N+1)$  阶方阵. 但由于不同偏振态场模式间的耦合电磁场同时具有  $x, y$  分量, 各有  $M=2N+1$  衍射级别. 因此在解反射/透射率时, 需要解的时  $2M$  阶方阵问题.

在垂直入射面的情况下(如图 1 中  $\phi=0$ ),  $k_y=0$ , 式(11)中只有  $\mathbf{V}_{11}$  和  $\mathbf{V}_{22}$  不为零. 对于垂直入射光栅表面的情况( $\theta=0$ )<sup>[2]</sup>, 光栅处于对称结构, 正、负衍射级次的场分量相同  $S_{yi} = S_{y(-i)}, U_{xi} = U_{x(-i)}, R_i = R_{-i}, T_i = T_{-i}$ . 方程式(8)中的  $2N+1$  阶矩阵  $\mathbf{A}$  可简化为仅含正(或负)衍射加零级衍射的  $N+1$  阶矩阵  $\mathbf{A}'$ , 其矩阵元为

$$A'_{i,j} = \begin{cases} A_{i,0}, & j=0 \\ A_{i,j} + A_{i,-j}, & j \neq 0, 0 \leq i \leq N+1 \end{cases} \quad (12)$$

对矩阵  $\mathbf{B} \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1}$  也可做类似简化. 相应地  $S_{yi}, U_{xi}, R_i, T_i$  也由  $2N+1$  阶矢量简化为  $N+1$  阶矢量.

### 3 平行入射面非垂直入射波的对称简化算法

对于一般情况, 图 1 中  $\phi, \theta$  都不为零, 此时的场有四个独立的分量  $S_x, S_y, U_x, U_y$ , 且相互耦合, 算法得不到简化. 但在入射光平面与光栅线条平行( $\phi=\pi/2$ )时, 仍可得到一定的简化.

一般情况下相互耦合的场方程可表示为<sup>[3]</sup>

$$\frac{\partial}{\partial z'} \begin{pmatrix} S_y \\ S_x \\ U_y \\ U_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x & \mathbf{I} - \mathbf{K}_y^2 \mathbf{E}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_y - \mathbf{I} & -\mathbf{K}_y \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \\ \mathbf{K}_y \mathbf{K}_x & \mathbf{E}_{\text{inv}}^{-1} - \mathbf{K}_y^2 \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_x^2 - \mathbf{E} & -\mathbf{K}_y \mathbf{K}_x & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_y \\ S_x \\ U_y \\ U_x \end{pmatrix} \quad (13)$$

与垂直入射光的情况类似, 此时衍射场的分量以及波矢量也都存在对称性, 但其对称的情况与垂直入射有所不同, 且与入射光的偏振态有关. 一下我们就各种情况分别讨论

#### 3.1 TE 波 ( $\Psi=90^\circ$ , 或称 s 偏振态)

场分量  $R_x, R_z, T_x, T_z, S_x, U_y, k_{1z}$  对正负衍射级别为对称的,  $R_y, T_y, S_y, U_x, k_x$  对正负衍射级别为反对称的.

$$S_{x,-n} = S_{x,n}, U_{y,-n} = U_{y,n}, R_{x,-n} = R_{x,n} \quad (14)$$

$$R_{z,-n} = R_{z,n}, T_{x,-n} = T_{x,n}, T_{z,-n} = T_{z,n}$$

$$S_{y,-n} = -S_{y,n}, U_{x,-n} = -U_{x,n}$$

$$R_{y,-n} = -R_{y,n}, T_{y,-n} = -T_{y,n} \quad (15)$$

方程式(13)可写为简化形式

$$\frac{\partial S_y}{\partial z'} = \mathbf{K}_y \mathbf{E}_r^{-1} \mathbf{K}_{xr} U_y + (\mathbf{I}_r - \mathbf{K}_y^2 \mathbf{E}_{-r}^{-1}) U_x \quad (16a)$$

$$\frac{\partial S_x}{\partial z'} = (\mathbf{K}_{xr} \mathbf{E}_r^{-1} \mathbf{K}_x - \mathbf{I}_r) U_y - \mathbf{K}_y \mathbf{K}_x \mathbf{E}_{-r}^{-1} U_x \quad (16b)$$

$$\frac{\partial U_y}{\partial z'} = \mathbf{K}_y \mathbf{K}_r S_y + (\mathbf{E}_{\text{inv},r}^{-1} - \mathbf{K}_y^2 \mathbf{I}_r) S_x \quad (16c)$$

$$\frac{\partial U_x}{\partial z'} = (\mathbf{K}_{xr}^2 - \mathbf{E}_{-r}) S_y - \mathbf{K}_y \mathbf{K}_r S_x \quad (16d)$$

其中  $\mathbf{I}_r$  为  $N+1$  阶单位方阵;  $\mathbf{K}_{xr}$  为  $N+1$  阶对角方阵(忽略  $-N$  级衍射). 下标  $r, -r$  分别表示由对称、反对称分量简化的矩阵;  $N+1$  阶矩阵  $\mathbf{E}_r, \mathbf{E}_{-r}$  的元素可由以下规律获得

$$\mathbf{E}_r^{mn} = \begin{cases} E_{m,n} + E_{m,(-n)}, & m \neq N_0 \\ E_{N_0,n}, & m = N_0 \end{cases} \quad (17a)$$

$$\mathbf{E}_{-r}^{mn} = \begin{cases} E_{m,n} - E_{m,(-n)}, & m \neq N_0 \\ E_{N_0,n}, & m = N_0 \end{cases} \quad (17b)$$

矩阵  $\mathbf{E}_{\text{inv},r}$  和  $\mathbf{E}_{\text{inv},-r}$  的简化方式也完全相同. 本征方程式(8)可改写为:

$$[\partial^2 \mathbf{U}_x / \partial (z')^2] = [\mathbf{K}_y^2 \mathbf{I}_r + \mathbf{A}_{-r}] [\mathbf{U}_x] \quad (18)$$

$$[\partial^2 \mathbf{S}_x / \partial (z')^2] = [\mathbf{K}_y^2 \mathbf{I}_r + \mathbf{B}_r \mathbf{E}_{\text{inv},r}^{-1}] [\mathbf{S}_x]$$

其中

$$\mathbf{A}_{-r} = \mathbf{K}_{xr}^2 - \mathbf{E}_{-r} \quad (19)$$

$$\mathbf{B}_r = \mathbf{K}_{xr} \mathbf{E}_r^{-1} \mathbf{K}_{xr} - \mathbf{I}_r$$

式(11)则改写为

$$\begin{aligned} V_{11} &= A_r^{-1} W_1 Q_1 \\ V_{12} &= K_y A_r^{-1} K_{xr} W_2 \\ V_{21} &= K_y B_r^{-1} K_{xr} E_r^{-1} W_1 \\ V_{22} &= B_r^{-1} W_2 Q_2 \end{aligned} \quad (20)$$

### 3.2 TM波( $\Psi = 0^0$ ,或称 $p$ 偏振态)

场分量  $R_y, R_z, T_y, T_z, S_y, U_x, k_{1z}$  对正负衍射级别为对称的,  $R_x, T_x, S_x, U_y, k_x$  对正负衍射级别为反对称的.

$$S_{y,-n} = S_{y,n}, U_{x,-n} = U_{x,n}, R_{y,-n} = R_{y,n} \quad (21)$$

$$R_{z,-n} = R_{z,n}, T_{y,-n} = T_{y,n}, T_{z,-n} = T_{z,n}$$

$$S_{x,-n} = -S_{x,n}, U_{y,-n} = -U_{y,n} \quad (22)$$

$$R_{x,-n} = -R_{x,n}, T_{x,-n} = -T_{x,n}$$

方程式(13)可写为简化形式  $N+1$  阶方阵形式

$$\frac{\partial S_y}{\partial z'} = K_y E_r^{-1} K_{xr} U_y + (I_r - K_y^2 E_r^{-1}) U_x \quad (23a)$$

$$\frac{\partial S_x}{\partial z'} = (K_{xr} E_r^{-1} K_{xr} - I_r) U_y - K_y K_{xr} E_r^{-1} U_x \quad (23b)$$

$$\frac{\partial U_y}{\partial z'} = K_y K_{xr} S_y + [E_{inv-r}^{-1} - K_y^2 I_r] S_x \quad (23c)$$

$$\frac{\partial U_x}{\partial z'} = [K_{xr}^2 - E_r] S_y - K_y K_{xr} S_x \quad (23d)$$

相应于方程式(8),式(18)的本征方程可改写为:

$$[\partial^2 U_x / \partial (z')^2] = [K_y^2 I_r + A_r] [U_x] \quad (24)$$

$$[\partial^2 S_x / \partial (z')^2] = [K_y^2 I_r + B_r^{-1} E_{inv-r}^{-1}] [S_x]$$

相应的方程式(11),式(20)则改写为

$$\begin{aligned} V_{11} &= A_r^{-1} W_1 Q_1 \\ V_{12} &= K_y A_r^{-1} K_{xr} W_2 \\ V_{21} &= K_y B_r^{-1} K_{xr} E_r^{-1} W_1 \\ V_{22} &= B_r^{-1} W_2 Q_2 \end{aligned} \quad (25)$$

与TE波的区别在于简化方阵  $E_r$  和  $E_{-r}$ ,  $E_{inv,r}$  之间的位置不同. 经实验验证,由方程式(16)、(23)分别对TE、TM的计算与方程式(13)的计算结果完全相同. 但方程式(16)、(23)处理  $(N+1)$  阶矩阵问题,方程式(13)处理  $(2N+1)$  阶矩阵问题. 当  $N$  较大时,矩阵阶数降低一半,计算时间( $\sim N^3$ )约为原来的八分之一.

## 4 小角度近似方法

与垂直入射光栅表面( $\phi = \theta = 0$ )的情况不同,平行光栅线条入射( $\phi = \pi/2$ )的情况由于TE、TM波耦合的存在,利用对称性简化后仍需要进行  $2(N+1)$  阶方阵的运算,较垂直入射光情况下的  $(N+1)$  阶方阵问题还需要大很多(约8倍)的计算量. 是否可能在实际系统中采用小角度入射取代垂直入射光呢? 反过来说,是否可能以垂直入射光作为小角度入射光的近似呢? 在工程

实际中,接收零级衍射是一种最常用的手段,使得这种近似在很多情况下成为可能. 下面我们分别研究这种可能性.

### 4.1 垂直入射光( $\phi = \theta = 0$ )和小角度( $\theta$ )入射的比较

我们根据RCWA法计算一个如图1所示结构的光栅:基底为硅的硅/空气结构,周期、厚度均为  $0.5\mu\text{m}$ . 图2(a),2(b)分别是垂直/平行入射面两种情况下  $0^\circ$  角和  $10^\circ$  角在波长  $0.19\text{--}1.0\mu\text{m}$  范围内零级反射的频谱差别. 图中可以看出垂直入射面( $\phi = 0$ )情况的反射光频谱对入射角度的敏感性明显较平行入射面( $\phi = \pi/2$ )情况要大. 因此,只有考虑平行入射面的情况才有可能实现这种近似.

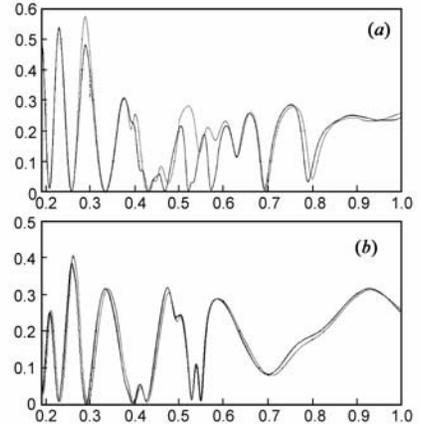


图2 (a) 垂直入射光( $\phi = \theta = 0$ )和垂直入射面情况下小角度( $\theta = 10^\circ$ )入射的比较;(b) 垂直入射光( $\phi = \theta = 0$ )和平行入射面情况下小角度( $\theta = 10^\circ$ )入射的比较

垂直入射光( $\phi = \theta = 0$ )与平行入射面情况下小角度入射光入射光栅的区别在两方面:首先,前者没有不同偏振态光之间的模式耦合而后者存在导致衍射波的区别;二是有了斜角以后,在零级衍射中光栅中沿垂直方向(图1中的  $z$  方向)的光传播常数  $k_z$  在光线入射到光栅底部时的光程也产生了变化. 考虑到小角度入射时不同偏振态模式间的耦合很小,因此我们简单地忽略这种耦合,并通过修正光栅的光学厚度的方法来补偿光程的误差.

### 4.2 垂直入射光近似(修正光栅厚度)

以修正后的光栅厚度  $d' = d \cdot \cos\theta$  取代原光栅厚度  $d$ ,这样就补偿了垂直入射光( $\phi = \theta = 0$ )和平行入射面( $\phi = 90^\circ$ )情况下小角度入射光之间  $k_z$  不同导致的相位差异. 图3显示了经修正后垂直入射光近似与平行入射面情况下小角度( $\theta = 10^\circ$ )入射的零级反射谱的比较. 图中细、粗线分别表示严格和近似的结果. 图中可明显看出,修正后的频谱(粗线)比未修正的图2(b)的结果要好得多. 由  $z$  方向传播常数变化引起的相位已经被修正.

### 4.3 垂直入射光近似(修正光栅折射率)

除了可以考虑修正光栅厚度外,还可以考虑修正

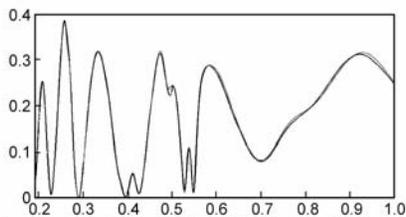


图3 垂直入射光近似(修正光栅厚度)与平行入射面情况下小角度( $\theta=10^\circ$ )入射的比较

光栅中所有材料的折射率.以修正后的光栅折射率  $n'_i = n_i \cos \theta$  取代原来的光栅折射率  $n_i$ ,与修正厚度相同,它同样补偿了垂直入射光( $\phi = \theta = 0$ )和平行入射面( $\phi = 90^\circ$ )情况下小角度入射光之间  $k_z$  不同导致的相位差异.图4显示了经修正后垂直入射光近似与平行入射面情况下小角度( $\theta = 10^\circ$ )入射的零级反射谱的比较.

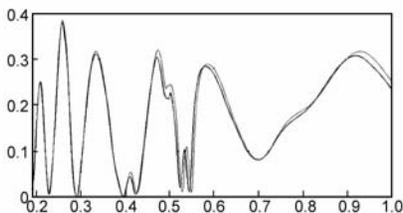


图4 垂直入射光近似(修正光栅折射率)与平行入射面情况下小角度( $\theta=10^\circ$ )入射的比较

由此我们可以看出这种修正是十分有效的.以上我们考虑  $10^\circ$ 角入射的情况.在工程实际中,我们完全可以选择更小的角度,图5是与图3情况相同但入射角为  $5^\circ$ 的情况,两曲线(与严格情况比较)几乎重合,计算精度大大提高.

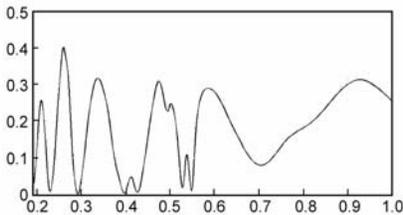


图5 垂直入射光近似(修正光栅厚度)与平行入射面情况下小角度( $\theta=5^\circ$ )入射的比较

## 5 结论

以上我们利用对称性将平行入射面的情况进行了简化,使得在计算光带光源入射产生的零级反射谱中原来处理  $2(2N+1)$ 阶矩阵的问题化为  $2(N+1)$ 矩阵问题,在小角度的情况下在进一步简化为处理  $(N+1)$ 矩

阵问题.由于计算宽带频谱时需要每一个波长分别计算,因此效率的提高就十分可观.我们在例子中考虑反射谱的情况,透射的情况也完全类似.此外,我们的例子考虑的是折射率反差很大(硅和空气),如果这种反差减小,计算精度还会更高,这意味着还可以允许更大一些的入射角.但即便是  $5^\circ$ 角,在工程实际中也很容易实现.因此,以上近似方法在工程实际中是非常适用的.

## 参考文献

- [1] Roman Chalykh, Irina Pundaleva, SeongSue Kim, Han-Ku Cho, Joo-Tae Moon. Simulation of critical dimension and profile metrology based on scatterometry method[A]. Photomask Technology 2006 [C]. Monterey, CA, USA: SPIE, 2006. 63491K1-9.
- [2] K Knop. Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves[J]. Journal of the Optical Society of America, 1978, 68(9): 1206-1210.
- [3] M G Moharam, E B Grann, D A Pommet, T K Gaylord. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings[J]. Journal of the Optical Society of America, 1995, 12(5): 1068-1076.
- [4] McGahan, William A. Measurement of Diffracting Structures Using One-half of the Non-zero Diffracted Orders [P]. US patents: 6,898,537, 2005-05.
- [5] Philippe Lalanne, G Michael Morris. Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization[J]. Journal of the Optical Society of America, 1996, 13(4): 779-784.
- [6] Lifeng Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures[J]. Journal of the Optical Society of America, 1996, 13(9): 1870-1876.

## 作者简介

陈树强 男,1992年底在电子科技大学获博士学位;1993年初到1995年初北京邮电大学博士后;1995年初到2000年底在北京邮电大学分别任光纤通信中心副教授、副主任、教授、主任.2000年底应邀赴美国,先后任位于加州 SpectraSwitch公司和加州硅谷的N & K技术公司任唯一的高级研究科学家(Senior Research Scientist),并于2008年秋引进回电子科技大学任教授、博士生导师.研究方向在微电子结构光学测试技术及光纤通信技术方面.曾在国内外学术刊物及会议发表50多篇论文,7项美国发明专利. E-mail: chensq@uestc.edu.cn