Rekonstruktion der Gitterparameter zweidimensionaler Gitter mit Hilfe der RCWA und analytischer Gradientenberechnung

Bastian Trauter * **, Jochen Hetzler*

**Carl Zeiss SMT AG, Oberkochen*
***Lehrstuhl für Optoelektronik, Universität Heidelberg*

mailto:b.trauter@smt.zeiss.com

Betrachtet man das inverse Gitterbeugungsproblem, so nutzt man oft Optimierungsalgorithmen zur Berechnung der Gitterparameter. Hierfür benötigt man dann die Ableitung der Beugungseffizienz nach den Gitterparametern. Wir stellen ein Verfahren vor, mit dem man diese Ableitungen für zweidimensionale Gitter direkt im RCWA-Algorithmus - und damit schneller - berechnen kann.

1 Motivation, Anwendung

Beim inversen Gitterbeugungsproblem möchte man ausgehend von der Beugungseffizienz der einzelnen Ordnungen die passende Gittergeometrie bestimmen. Dies braucht man einerseits beim Design und der Optimierung eines Beugungsgitters, wo bestimmte Kriterien (z.B. dass alle Beugungsordnungen gleich stark sein sollen) gefordert werden und das passende Gitter gesucht wird. Andererseits betrachtet man das inverse Gitterbeugungsproblem auch bei der Charakterisierung von Gittern, wenn aus gemessenen Beugungseffizienzen eines unbekannten Gitters die Parameter des Gitters ermittelt werden sollen (Vgl. z.B. [1]).

2 Charakterisierung zweidimemsionaler Gitter

Wir betrachten hier als Anwendung die Charakterisierung zweidimensionaler Beugungsgitter (z.B. Lithographiemasken), d.h. wir möchten zu gemessenen Beugungseffizienzen bestimmte Gitterparameter, wie beispielsweise die Gitterhöhe, bestimmen.

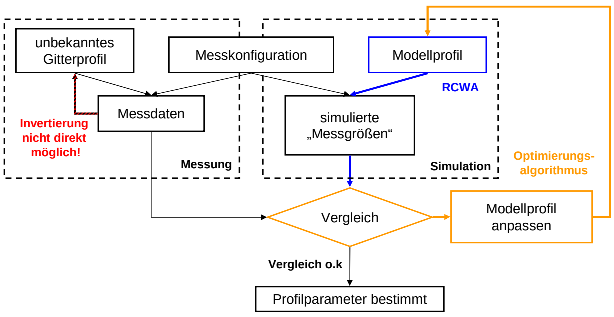

Abbildung 1 *Ablauf der Parameterbestimmung*

Dazu vergleichen wir die gemessenen Beugungseffizienzen mit einer elektromagnetischen Simulation. Wir versuchen nun die Gitterparameter mit Hilfe eines Optimierungsalgorithmus so zu variieren, dass wir eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen den simulierten und den gemessenen Effizienzen bekommen.

Damit das Problem für eine bestimmte Zahl an Gitterparametern eindeutig wird, bestimmen wir die Beugungseffizienz η bei verschiedenen Messkonfigurationen. Für die elektromagnetische Simulation verwenden wir die Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA) [2, 3]. Diese liefert uns zu gegebenen Gitterparametern $\vec{p} = (p_1, ..., p_N)$ und einer gegebenen Konfiguration $\vec{C}_l = (\lambda_l, \pi_l, \vartheta_l, m_l)$ die entsprechende Beugungseffizienz $\vec{\eta}_{calc}(\vec{p})$. Dabei ist λ_l die Wellenlänge, π_l die Polarisationsrichtung, ϑ_l der Einfallswinkel und m die betrachtete Beugungsordnung der Konfiguration l. Wir möchten dann die Differenz zwischen den gemessenen und den berechneten Effizienzen minimieren, also:

$$\|\vec{\eta}_{meas} - \vec{\eta}_{calc}(\vec{p})\| \rightarrow min$$

Dazu linearisieren wir die Beugungseffizienzfunktion in einem Punkt a:

$$\vec{\eta}(p_1, \cdots, p_N) \approx \vec{\eta}(a_1, \cdots, a_N)$$
$$+\nabla\vec{\eta}(a_1, \cdots, a_N) \cdot (p_1 - a_1, \cdots, p_N - a_N)$$

Damit erhalten wir dann eine Näherung für p:

$$\vec{p} \approx (\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}\mathbf{J}^T\left(\vec{\eta}_{meas} - \vec{\eta}(a_1, \cdots, a_N)\right) + \vec{a}$$

Dabei beschreibt $\mathbf{J}$ die Ableitung der Beugungseffizienz nach den Gitterparametern:

$$\mathbf{J} = \nabla\vec{\eta}(a_1, \cdots, a_N) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \eta_1}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial \eta_1}{\partial p_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \eta_L}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial \eta_L}{\partial p_N} \end{pmatrix}$$

3 Analytische Bestimmung der Gradienten

Zur Berechnung der Jacobi-Matrix benötigen wir also die Ableitung aller Beugungseffizienzen nach allen Profilparametern. Berechnen wir diese Ableitung numerisch über Differenzenquotienten benötigen wir eine zusätzliche elektromagnetische Berechnung je Gitterparameter. Die gesamte Rechenzeit beträgt dann also für N Parameter $t_{FD} = (N+1) \cdot t_{RCWA}$, wobei t_{RCWA} die Zeit für eine elektromagnetische Rechnung ist. Verwenden wir den symmetrischen

Differenzenquotienten, um genauere Ableitungen zu bekommen brauchen wir sogar $2N$ elektromagnetische Rechnungen. In einer kürzlich erschienenen Publikation wurde von Van der Aa [4] gezeigt, dass sich für 1D-Gitter die Ableitung der Effizienz nach den Profilparametern auf die Ableitung der Eigenwerte und Eigenvektoren zurück führen lässt. So können diese Ableitungen bestimmt werden ohne ein zusätzliches Eigenwertproblem zu lösen. Da das Lösen des Eigenwertproblems einen Großteil der Rechenzeit des RCWA-Algorithmus in Anspruch nimmt, kann so die Rechenzeit im Vergleich zur numerischen Bestimmung reduziert werden.
In dieser Arbeit wurde das Verfahren auf zweidimensionale Gitter übertragen. Der RCWA-Algorithmus für zweidimensionale Gitter unterscheidet sich nicht prinzipiell vom Algorithmus für 1D-Gitter, daher lässt sich die Methode von Van der Aa auch auf zweidimensionale Beugungsgitter übertragen. Lediglich die Ableitung der Matritzen aus den Fourier-Koeffizienten der Permittivität lassen sich im Allgemeinen nicht mehr analytisch berechnen, so dass die Ableitung der Matrizen numerisch bestimmt werden muss.
Die „analytische" Berechnung der Ableitung kann also auch für zweidimensionale Gitter ohne das Lösen eines zusätzlichen Eigenwertproblems berechnet werden. Die Rechenzeit für N Parameter ist dann $t_{ana} = t_{RCWA} + N \cdot t_{Ableitung}$, wobei $t_{Ableitung}$ die Zeit für die Berechnung der Ableitung nach einem Profilparameter ist.

4 Vergleich mit numerischer Berechnung

4.1 Genauigkeit und Konvergenz

Vergleicht man die numerisch und die analytisch berechneten Ableitungen, so stimmen diese sehr gut überein (s. Abb. 2). Auch bei der Konvergenz, also bei der Betrachtung der Ableitung mit steigender Modenzahl, zeigt die analytisch berechnete Ableitung das gleiche Verhalten, wie die numerisch bestimmte.

4.2 Rechenzeit

Wir vergleichen nun die Rechenzeit der numerischen und der analytischen Ableitungsbestimmung. Als Speedup definieren wir den Quotienten aus der Rechenzeit für die numerische Ableitung t_{FD} und der Zeit für die analytische Ableitung t_{ana}. Betrachten wir das Verhältnis von $t_{Ableitung}$ und t_{RCWA}, so konvergiert dieses für steigende Modenzahlen auf einen festen Wert von ca. 0.2. Der Speedup ist damit nur noch abhängig von der Parameterzahl. Betrachten wir beispielsweise 5 Gitterparameter so bringt die analytische Ableitungsberechnung einen Faktor 3 in der Rechengeschwindigkeit (s. Abb. 3).

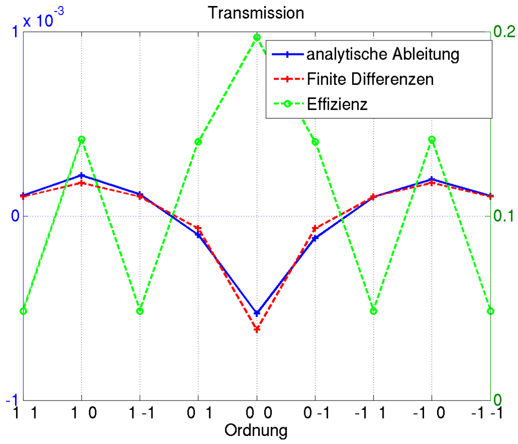

Abbildung 2 *Vergleich der Ableitungen*

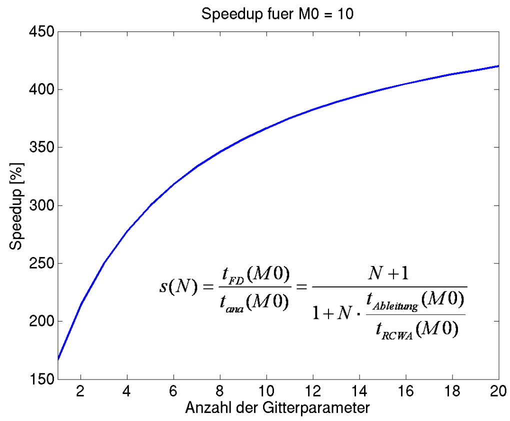

Abbildung 3 *Speedup über der Anzahl Gitterparameter*

5 Zusammenfassung

Eine Erweiterung des RCWA-Algorithmus erlaubt die direkte Berechnung von Ableitungen der Beugungseffizienz nach den Gitterparametern eines zweidimensionalen Gitters. Dies bringt einen erheblichen Geschwindigkeitsvorteil bei der Betrachtung des inversen Gitterbeugungsproblems, beispielsweise zur Bestimmung von Gitterparametern.

Literatur

[1] C. Raymond, M. Littau, A. Chuprin, and S. Ward, "Comparison of solutions to the scatterometry inverse problem," Proceedings of SPIE **5375**, 564–575 (2004).

[2] 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 (1995).

[3] L. Li, "New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings," J. Opt. Soc. Am. A **14**(10), 2758–2767 (1997).

[4] N. van der Aa and R. Mattheij, "Computing shape parameter sensitivity of the field of one-dimensional surface-relief gratings by using an analytical approach based on RCWA," J. Opt. Soc. Am. A **24**(9), 2692–2700 (2007).