# РАСЧЕТ И ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФРАКЦИОННЫХ МИКРО- И НАНОСТРУКТУР

Стенограмма доклада на семинаре по компьютерной оптике и обработке изображений

Л.Л. Досколович<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия, <sup>2</sup>Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия

### Аннотация

Представлен ряд направлений исследований в области нанотехнологий. Рассмотрено решение обратной задачи рефлектометрии, состоящей в определении параметров периодических микро- и наноструктур по измерениям отраженного поля. Рассмотрен расчет дифракционных структур для формирования высокочастотных интерференционных картин поверхностных электромагнитных волн. Приведены результаты исследования дифракционных решеток с резонансными магнитооптическими свойствами.

<u>Ключевые слова</u>: рефлектометрия, прямая задача дифракции, обратная задача дифракции, дифракционная решетка, поверхностные электромагнитные волны.

Уважаемые коллеги, тема моего выступления «Расчет и исследование дифракционных микро- и наноструктур» (слайд 1). Я представлю ряд исследований, которые, на мой взгляд, можно отнести к области нанотехнологий.

Первая часть доклада посвящена оптической рефлектометрии (слайд 2). Рефлектометрия - метод оптической метрологии, основанный на определении геометрических и физических параметров исследуемой микро- или наноструктуры (в данном случае дифракционной решетки) по измерению интенсивности отраженного поля. Возможность измерения и контроля параметров наноразмерных структур позволяет отнести данный метод к нанометрологии. Принцип измерения состоит в следующем. Исследуемая структура (дифракционная решетка) освещается коллимированным пучком. Интенсивность отраженного от структуры пучка (интенсивность нулевого отраженного порядка дифракции) измеряется в зависимости от длины волны или угла падения падающего излучения. Геометрические параметры и характеристики материала исследуемой структуры тесно связаны с интенсивностью отраженного пучка и могут быть восстановлены по измерениям интенсивности отраженного пучка. Точность измерений с использованием метода рефлектометрии может быть нанометр и выше, что в сотни раз меньше используемых для измерений длин волн. Оборудованием рефлектометрии являются эллипсометры.

Набор измеренных интенсивностей 0-го отраженного порядка дифракции при различных параметрах падающего пучка называют сигнатурой. После выполнения измерений, определение параметров дифракционной решетки сводится к решению обратной задачи, состоящей в восстановлении геометрических параметров структуры по измеренной сигнатуре. Субволновые размеры исследуемой структуры требуют решения обратной задачи в рамках электромагнитной теории. Необходимым инструментом для решения обратной задачи являются методы решения прямой задачи дифракции световой волны на дифракционной решетке с известными параметрами.

Нами разработано программное обеспечение «Grating» для решения указанных прямых и обратных задач дифракции (слайд 3). В частности, программное обеспечение включает решение задач дифракции на двумерных и трехмерных дифракционных решетках, фотонных кристаллах и многослойных покрытиях. По скорости и точности созданное программное обеспечение превосходит известную коммерческую программу «Gsolver» американской компании Grating Solver Development Company. Первый вариант программного обеспечения был создан мною в рамках пакета Matlab. Современная версия на языке С++ разрабатывалась С.Г. Волотовским и нашими аспирантами И.И. Кадоминым и Е.А. Кадоминой. Программное обеспечение может быть дополнено графическим интерфейсом. Считаю, что в этом случае программное обеспечение, как продукт для моделирования дифракционных решеток, станет продуктом коммерческого уровня.

Был разработан ряд методов для решения обратной задачи рефлектометрии, состоящей в восстановлении геометрических параметров структуры по измеренной сигнатуре (слайд 4). Не вдаваясь в подробности методов, поясню обратную задачу на примере трапецеидальной решетки.

Введем функцию ошибки  $f(\mathbf{p})$  (слайд 5). Функция зависит от параметров решетки (вектор **p**) и представляет разность между измеренной сигнатурой и сигнатурой для параметров **p**. Все предложенные методы состоят в минимизации этой функции ошибки. Вектор **p**, обеспечивающий минимум, и есть оценка параметров.

Для оценки рабочих характеристик методов использовалась следующая схема численного эксперимента. Как правило, диапазоны определяемых параметров известны заранее (определяются технологией) и составляют несколько десятков нанометров. В указанных диапазонах случайно генерируется тройка параметров и вычисляется сигнатура (вектор коэффициентов отражения). В данном примере сигнатура вычислялась для 18 длин волн в диапазоне 300÷900 нм при угле падения 71 градус для волны с ТМ-поляризацией. По предложенным методам находятся оценки параметров, которые сравниваются с исходными параметрами. По результатам сравнения сгенерированных параметров и полученных оценок определяется точность вычисления параметров.

На данных графиках (слайд 6) приведены результаты работы метода, состоящего в прямой оптимизации функции ошибки по методу главных осей (principal axis method). Результаты показаны для 200 испытаний, номер испытания указан по оси Ох, а по оси Оу указана ошибка определения параметров по указанной методике. Ошибка определения параметров составляет тысячные доли нанометра. Главным недостатком метода прямой оптимизации являются значительные вычислительные затраты, связанные с многократным решением прямой задачи дифракции при расчете сигнатур. Это ограничивает область применения метода для задач оценки параметров в реальном времени. Время решения обратной задачи по данному методу составляет 3-5 секунд на стандартном компьютере.

Следующий метод основан на использовании нейронной сети (слайды 7,8). Для нейронной сети основная вычислительная нагрузка приходится на этап обучения сети. Вычисление выхода обученной сети происходит быстро, что делает ее удобным инструментом оценки параметров в реальном времени. В работе использовалась сеть типа многослойный персептрон. Ошибка определения параметров по данному методу составляет сотые доли нанометра при времени решения в сотые доли секунды.

Следующий метод основан на построении полиномиальных аппроксимаций для интенсивностей нулевого отраженного порядка (слайды 9, 10). Использование полиномиальных аппроксимаций можно рассматривать как вариант теории возмущений. Как и для нейронной сети, основная вычислительная нагрузка приходится на предварительный этап построения полиномов. Ошибка определения параметров по данному методу также составляет сотые доли нанометра при времени решения в сотые доли секунды.

Второе рассматриваемое направление «с приставкой нано» относится к формированию интерференционных картин поверхностных электромагнитных волн (ПЭВ), или поверхностных плазмонов (слайд 11). Предполагаемая область применения – фотолитография. В этом случае интерференционная картина регистрируется в резисте и затем можно произвести соответствующий оптический элемент. В настоящий момент это очень популярное направление. Позвольте начать с небольшого введения. ПЭВ - это мода, которая может распространяться вдоль границы раздела между металлом и диэлектриком. ПЭВ существует только для ТМ-поляризации. На верхнем рисунке (слайд 11) показана известная схема для генерации ПЭВ. При определенном угле падения ТМ-волны, большем угла полного внутреннего отражения, на нижней границе металлической пленки формируется ПЭВ. При использовании двух падающих волн можно сформировать две ПЭВ, распространяющиеся в противоположных направлениях, и получить непосредственно под пленкой интерференционную картину ПЭВ.

Для возбуждения пары ПЭВ было предложено использовать простейшую бинарную диэлектрическую дифракционную решетку (слайд 12). В результате исследований было установлено, что ПЭВ можно возбуждать высшими дифракционными порядками, т.е. порядками с номерами -m, +m, m>1. В этом случае получается качественная интерференционная картина, период которой в 2*m* раз меньше, чем период исходной дифракционной решетки. Таким образом, можно использовать простую низкочастотную бинарную решетку для формирования высокочастотной интерференционной картины ПЭВ. На рисунке (слайд 12) показана интерференционная картина, период которой в 10 раз меньше, чем у исходной решетки, т.е. распределение поля здесь приведено под одним периодом. Важным технологическим параметром является так называемый фактор усиления поля (field enhancement factor), который показывает увеличение интенсивности в пиках интерференции относительно интенсивности падающей волны. В данной схеме он очень высокий, 60-70 раз. В предложенной схеме диэлектрическая проницаемость материала решетки должна быть больше, чем в подложке. Это ограничение можно снять, если использовать для возбуждения ПЭВ затухающие порядки.

На следующем слайде (слайд 13) показан аналогичный результат, но интерференционная картина формируется затухающими дифракционными порядками с номерами +5, -5. Период интерференционной картины составляет 154 нм, интерференционная картина имеет высокий контраст, усиление поля составляет более 50 раз. Отметим, что, хотя период интерференционной картины постоянен, ширину ступеньки, формируемой на периоде, можно менять за счет изменения времени экспозиции.

По моей оценке, достижимый период интерференционной картины в рамках данного подхода составляет 1/4-1/5 длины волны. В данном случае период меньше длины волны в 3,2 раза. Необходимое разрешение (размер растра дискретизации) для изготовления подобных периодических структур методом фотолитографии составляет не менее четверти периода интерференционной картины. Это позволяет говорить о возможности использования данного подхода для достижения наноразрешения с размером порядка десятой длины волны.

Предложенный подход может быть использован для формирования двумерных картин ПЭВ с помощью трехмерных дифракционных решеток (слайд 14). В частности, можно использовать бинарную радиальную решетку (бинарный дифракционный аксикон) для формирования кольцевых структур и бинарную трехмерную решетку для формирования двумерных периодических структур. Указанная радиальная решетка также обеспечивает фокусировку ПЭВ в центре интерференционной картины. Считаю, что эффективность такой «линзы» превышает эффективность существующих аналогов. В общем случае возможно использование дифракционных решеток с криволинейными зонами для формирования интерференционных картин с криволинейными линиями. Исследованиями по данному направлению со мной занимаются аспирант И.И. Кадомин и студенты 656-ой группы Д. Быков и Е. Безус.

Третье направление исследований посвящено исследованию дифракционных решеток с резонансными свойствами (слайд 15). Для достижения рассматриваемых резонансных свойств нет необходимости использования решеток с существенно субволновым периодом, хотя их отдельные элементы могут быть существенно наноразмерными. В связи с этим считаю обоснованным использование приставки «нано» в приложении к данным структурам.

В настоящее время большое внимание уделяется эффекту экстраординарного пропускания (extraordinary optical transmission), состоящему в резонансном увеличении интенсивности света, проходящего через дифракционную решетку. Данным эффектом обладают дифракционные решетки, изготовленные из материалов с высокой проводимостью (серебро, золото). Мы занимаемся исследованием магнитооптических свойств двухслойных структур, содержащих бинарную дифракционную решетку с эффектом экстраординарного пропускания и равномерно намагниченный слой. Намагниченный слой сам по себе обладает свойством вращать плоскость поляризации. Это явление называется эффектом Фарадея в прошедшем пучке и эффектом Керра – в отраженном пучке. Мотивом для исследований указанной двухслойной структуры было следующее. Дифракционные решетки традиционно используются для возбуждения мод в плоскопараллельном волноводе. Волноводное распространение излучения в магнитном слое может привести к усилению эффектов Фарадея и Керра за счет увеличения пути. Таким образом, указанная двухслойная структура может обладать как свойством резонансного пропускания, так и эффектом резонансного вращения плоскости поляризации.

Это предположение оказалось верным. На рисунке (слайд 15) показаны спектры пропускания и угла Фарадея для двухслойной структуры со следующими параметрами. На рисунке четко виден пик пропускания и совпадающий с ним резонанс угла поворота плоскости поляризации. В данном случае поворот плоскости поляризации почти на порядок больше, чем у однородного магнитного слоя с такой же толщиной. Этот результат был опубликован в Physical Review Letters с московскими коллегами В.И. Белотеловым (МГУ) и А.К. Звездиным (Институт общей физики РАН).

Аналогичный эффект имеет место и для двумерных двухслойных структур (слайд 16). Использование двумерной трехслойной структуры позволяет увеличить угол поворота плоскости поляризации почти в 20 раз при значительном пропускании более 40% (слайд 17).

В предыдущих примерах вектор намагниченности слоя был перпендикулярен магнитному слою (так называемая полярная геометрия). Была также исследована двухслойная структура, у которой вектор намагниченности слоя лежит в плоскости слоя (слайд 18). Для такой структуры был обнаружен новый «интенсивностный» эффект. На рисунке показаны спектры пропускания двухслойной структуры с немагнитным слоем (синяя линия) и магнитным слоем (красная линия). Рисунок показывает резонансное изменение коэффициента пропускания для магнитной структуры. Использование внешнего магнитного поля для намагничивания и размагничивания нижнего слоя позволяет предложить транспарант с управляемым пропусканием. Данный эффект находится в стадии объяснения. Со мной над этой проблемой работают студенты Дмитрий Быков и Евгений Безус. Мы связываем данный эффект с аномалиями Рэлея-Вуда.

В последней части выступления я хотел бы повторить ряд старых результатов, касающихся расчета и исследования дифракционных оптических элементов (ДОЭ) в рамках электромагнитной теории (слайды 19-23). Разработанные нами алгоритмические и программные средства позволяют рассчитывать линзы и другие оптические элементы в рамках электромагнитной теории. В частности, на данном слайде (слайд 21) приведены новые результаты по расчету фокусатора в кольцо с радиусом в 5 длин волн и линзы с 8 градациями рельефа. Созданное программное обеспечение «Grating» для решения задач дифракции адаптировано к кластерным вычислениям. Это позволяет моделировать трехмерные ДОЭ с размером апертуры в 20-25 длин волн. При этом решение задачи дифракции занимает около суток. В двумерном случае ограничений нет, апертура ДОЭ может составлять сотни и тысячи длин волн.

### Благодарности

Работа выполнена при поддержке «Фонда содействия отечественной науке», грантов РФФИ № 07-07-97601-р\_офи, 07-01-96602-р\_поволжье\_а, 07-07-91580-АСП\_а, 08-07-99005-р\_офи, гранта Президента РФ № НШ-3086.2008.9.

Спасибо за внимание.







Слайд З

# Solving inverse problem of scatterometry

# **Used approaches**

Approach 1. Direct optimization with use of principal axis method (for binary and trapezium grating)

Approach 2. Neural network approach (for trapezium grating)

Approach 3. Original approach based on polynomial representation of zero order intensities (for binary, trapezium and transistor-type grating)

# Degree of product availability

Approach 1 - High, C++ software Approach 2 - Low, Matlab software Approach 3 - <u>High, C++ software</u>

< / E 5



2008

Слайд 5

# Results of optimization approach for trapezium grating











Слайд 8

# Method of polynomial approximation

The method is based on construction of polynomial approximation for each point of signature

$$S_m(\mathbf{p},\mathbf{v}_m) = \sum_i a_i(\mathbf{v}_m) p_i + \sum_{ii} a_{ij}(\mathbf{v}_m) p_i p_j + \dots, m = 1,\dots,L,$$

where **p** is the vector of optimization parameters,  $\mathbf{v}_m$  is the vector of parameters of incident wave for signature point.

The second step includes solution of optimization problem

 $f(\mathbf{p}) = \|\mathbf{S}(\mathbf{p}) - \mathbf{S}\| \rightarrow \min$ 

within constructed polynomial model of signature S(p).

Parameters of trapezium grating:

 $h \in [68; 92] \text{ nm}, p \in [53; 77] \text{ nm} (d=100 \text{ nm}), \alpha \in [2; 8]^{\circ}.$ Refractive indices: n = 1.6 for grating material, n = 2 for substrate. Parameters of signature:  $\lambda \in [180; 900] \text{ nm},$ number of wavelengths N = 13, angle of incidence  $\theta = 45^{\circ}$ , polarization – TE.

< / ⊑ ⇒

Слайд 9

# Results of polynomial approximation approach for trapezium grating



Слайд 10





Слайд 12



# GENERATION OF 2D INTERFERENCE PATTERNS OF SURFACE PLASMONS



# Radial binary grating (d=1.94µm) with a gold film and

Radial binary grating (d=1.94 $\mu$ m) with a gold film and interference pattern generated underneath the metal film (d=1.94 $\mu$ m);





3D binary grating (d=1.94µm) with a gold film and Interference pattern generated underneath the metal film within one period.

R.







Резонансные магнитооптические эффекты в дифрационных решётках с намагниченным слоем // Компьютерная оптика, 2007, **31** 

Слайд 17





# <section-header><section-header><section-header><section-header><section-header><section-header><section-header>







### DESIGN AND ANALYSIS OF DIFFRACTIVE MICRO- AND NANO-STRUCTURES

Shorthand record of the presentation at seminar.

L.L. Doskolovich<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Image Processing Systems of the RAS, Samara, Russia, <sup>2</sup>S.P. Korolyov Samara State Aerospace University, Samara, Russia

# Abstract

A number of research directions in the field of nanotechnologies are presented. The solution of the inverse problem of reflectrometry aimed at finding parameters of the periodic micro- and nano-structures from the measurements of the backscattered field is considered. Design of diffractive structures to produce high-frequency interference patterns of surface plasmons is presented. Results of the analysis of diffraction gratings with resonant magneto-optical properties are discussed. <u>Key words</u>: reflectometry, direct problem of diffraction, inverse problem of diffraction, diffraction grating, surface plasmons.

<u>Citation</u>: Doskolovich LL. Design and analysis of diffractive micro- and nano-structures (Shorthand record of the presentation at seminar). Computer Optics 2008; 32(2): 136-50.

<u>Acknowledgements</u>: The work was supported by the "Russian Science Support Foundation" grant RFFI 07-07-97601-r\_ofi number, 07-01-96602-r\_povolzhe\_a, 07-07-91580-ASTP\_A, 08-07-99005-r\_ofi, RF President Grant number NSH-3086.2008.9.