

# 國立交通大學

## 光電工程研究所

### 博 士 論 文

臨界尺寸之高解析度光學量測

High resolution optical metrology for  
critical dimension measurement



研 究 生：徐得銘

指 導 教 授：陸懋宏 教授

中 華 民 國 九 十 六 年 六 月

臨界尺寸之高解析度光學量測

High resolution optical metrology for  
critical dimension measurement

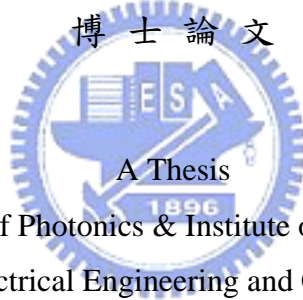
研究生：徐得銘

Student : Deh-Ming Shyu

指導教授：陸懋宏

Advisor : Mao-Hong Lu

國立交通大學  
光電工程研究所  
博士論文



Submitted to Department of Photonics & Institute of Electro-Optical Engineering

College of Electrical Engineering and Computer Science

National Chiao Tung University

in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Doctor

in

Electro-Optical Engineering

June 2007

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十六年六月

# 國立交通大學

## 論文口試委員會審定書

本校光電工程研究所博士班 徐得銘 君

所提論文 臨界尺寸之高解析度光學量測

合於博士資格標準、業經本委員會評審認可。

口試委員：  
趙于飛 教授  
蘇德欽 教授  
李正中 教授  
施宙聰 教授  
謝太炯 教授

指導教授：陸懋宏 教授  
陸懋宏 教授

所長：趙于飛 教授

系主任：董中堯 教授

中華民國 96 年 5 月 9 日

Institute of Electro-Optical Engineering  
National Chiao Tung University  
Hsinchu, Taiwan, R.O.C.

Date : 96/5/9

We have carefully read the dissertation entitled \_\_\_\_\_

High Resolution Optical Metrology for Critical Dimension Measurement

submitted by Deh-Ming Shyu in partial fulfillment of the requirements of the degree of DOCTOR OF PHILOSOPHY and recommend its acceptance.

Yu-Faye Chao

Prof. Yu-Faye Chao

Der-Chin Su

Prof. Der-Chin Su

Cheng-Chung Lee

Prof. Cheng-Chung Lee

Jow-Tsong Shy

Prof. Jow-Tsong Shy

Tai-Chiung Hsieh

Prof. Tai-Chiung Hsieh

Thesis Advisor : M.H. Lu

Prof. Mao-Hong Lu

Director of Institute of Electro-Optical Engineering : Yu-Faye Chao

Chairman of Department of Photonics : Jung G. Huang

# 臨界尺寸之高解析度光學量測

學生：徐得銘

指導教授：陸懋宏

國立交通大學光電工程研究所

## 摘要

臨界尺寸是在量測中所必須分辨的最小尺寸。在各種量測領域中，由於技術的發展與產品的更新，臨界尺寸也愈來愈微小。在半導體元件的製程中，臨界尺寸量測技術的發展有助於提高製作的良率。對於半導體元件的量測，主要有線寬量測，疊對量測，膜厚量測，材料分析，及粗糙度分析等，臨界尺寸量測是本論文研究的方向。

對於線寬的量測是採用跨焦取像量測法。在此研究中，結合了邊界元素法及物理光學追跡法來模擬有限光柵經顯微系統在光偵測器上的成像情況。當連續移動有限光柵對顯微物鏡的物距時，可以得到數幅含有光柵資訊的影像，藉由理論及量測的分析比對，可以得知有限光柵的幾何結構，此方法對於線寬的量測具有奈米等級的橫向解析度。

對於半導體元件的疊對量測，我們提出一干涉式散射儀架構來量測疊對光柵上層與下層之間的位移，藉由疊對光柵的量測可以得知在半導體製程中層與層之間的位移。在此研究中，首先建立所需要的演算法，在此使用修正過的嚴格耦合波演算架構，以符合所建立的量測系統，接著設計及製作一疊對光柵，並使用所架設的量測系統對此結構作一量測及分析量測的結構以得到層與層之間的位移。

# High Resolution Optical Metrology for Critical Dimension Measurement

Student : Deh-Ming Shyu Advisor : Mao-Hong Lu

Department of Photonics &  
Institute of Electro-Optical Engineering  
National Chiao-Tung University

## ABSTRACT

Critical dimension (CD) is the smallest size which must be resolved in specific measurement. The CD becomes smaller and smaller due to developments of technology and innovations of products. In the fabrication of integrated circuit, reliable CD measurement is the key procedure to improve the yields. The CD measurements include line-width, overlay, thickness, material, and roughness, etc. In this thesis we focus on the high resolution optical metrology for CD measurement.

For the measurement of line-width, we use the through-focus focus-metric method to measure the line-width. In this research, we combine the boundary element method and physical optical propagation to simulate the images of a finite grating. The images with different object distance are obtained when moving the finite grating along the optical axis. These images contain the information of the geometric structure of grating. By measuring and analyzing the finite grating, we can obtain the geometric structure of grating. The results show that the through-focus focus-metric method is sensitive for recognizing the line-width and

nano-scale resolution could be achieved.

For the overlay measurement, we proposed a new method, interfero-scatterometry, to measure the overlaid grating. By measuring the overlaid grating, the overlay between different layers in the integrated circuit can be obtained. First, we modify the rigorous coupled wave algorithm for our measurement system, and then design and fabricate an overlaid grating. After measuring and analyzing the grating by the interfero-scatterometer, we obtain the overlay between different layers.



## 誌謝

在五年的博士生活中，雖然遇到許多的困難，但經由不斷的努力，及辛苦耕耘，終於完成了此篇論文，在歡心之餘也在此由衷的感謝一路走來曾幫助我的人。

本論文得以完成要感謝的人很多，首先是指導老師陸懋宏教授，雖然在我博士班三年級的時候退休，但依然在光學領域的研究上諄諄教誨與指導，使我在此方面的學習有更深入的見解與廣闊的視野。在論文完成的過程中，周圍學長的經驗指點，同學之間的相互幫助，使論文完成的更加順利，在此感謝施至柔學長、林暉雄學長、柯俊宏學長、及常常跑來實驗室串門子的王夢偉學長的幫助。

在實驗室之外，特別要感謝工研院量測中心顯微檢測技術發展部的半導體疊對量測計畫歷年來的成員，由於彼此間的合作，讓我找到了博士論文的研究方向，也使得我從低潮中從新站起來，在此要特別感謝疊對量測的計畫主持人顧逸霞博士在研究上的協助，柯俊宏學長提供量測上所需要的測試元件，及劉安順同事在跨焦取像分析方面的幫助，沒有他們熱心的幫助，則此篇論文將難以完成。

最後要感謝的是我的姊妹，親朋好友，及在天國的父母親，在我求學階段對我的關心與默默的支持，讓我的學生生涯中能穩健地踏出每一步，希望他們都能擁有健康及喜樂。



# 目錄

中文摘要	I
英文摘要	II
誌謝	IV
目錄	V
圖目錄	VII
表目錄	X
符號表	XI
第一章 前言	1
1.1 臨界尺寸量測	1
1.2 疊對量測	2
1.3 資料庫比對	4
第二章 嚴格耦合波向量繞射理論	6
2.1 入射平面平行光柵法線平面之 TE 極化態入射	6
2.2 入射平面平行光柵法線平面之 TM 極化態入射	12
2.3 入射平面垂直光柵法線平面之 TE 極化態入射	14
2.4 入射平面垂直光柵法線平面之 TM 極化態入射	21
2.5 光柵之折射率表示式	22
2.6 角度式散射儀之模擬	25
2.7 干涉式散射儀之模擬	28



第三章 邊界元素法	32
3.1 無限空間之格林函數	32
3.2 格林函數之輻射條件	34
3.3 二維邊界元素法	38
3.3.1 二維二區邊界積分方程	38
3.3.2 二維二區邊界元素法	39
3.3.3 奇異點積分問題	46
3.3.4 二維多區邊界元素法	47
3.3.5 矩陣計算	52
3.4 光柵成像模擬	55
第四章 干涉式散射儀對疊對光柵之量測與分析	59
4.1 系統架構與模擬	59
4.2 最佳化參數	62
4.3 量測結果	65
4.4 結論	70
第五章 跨焦取像量測分析	71
5.1 結合邊界元素法及物理光學追跡之成像計算	71
5.2 實驗系統架構及量測	77
5.3 分析結果	82
5.4 結論	86
參考文獻	87
個人著作	91

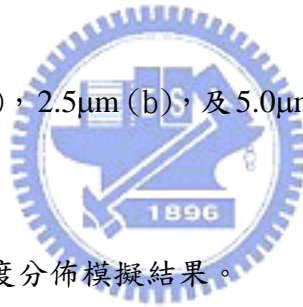


## 圖目錄

圖 2.1 二階光柵的基本幾何架構圖。	6
圖 2.2 表面蝕刻型的光柵可分為 L 層。	9
圖 2.3 二階光柵的基本幾何架構圖。	14
圖 2.4 單層二階光柵。	23
圖 2.5 光柵折射率分佈。	23
圖 2.6 單層二階光柵(偏移 $\Delta x$ )。	24
圖 2.7 光柵折射率分佈(位移 $0.2\mu\text{m}$ )。	24
圖 2.8 角度散射儀及其光學架構(a)及疊對光柵之幾何結構(b)。	26
圖 2.9 TE(a)及 TM(b)模態下，不同的入射角對零級之反射效率曲線。	27
圖 2.10 干涉式散射儀之光學架構。	28
圖 2.11 干涉式散射儀之計算流程圖。	30
圖 2.12 干涉式散射儀數值模擬結果。	31
圖 3.1 外域問題。	36
圖 3.2 區域分割示意圖。	38
圖 3.3 線性元素。	39
圖 3.4 元素(j)上的座標。	40
圖 3.5 觀察點i在邊界上時的處理。	46
圖 3.6 觀察點i與邊界 $\Gamma_1$ 的距離為 $\rho_0$ 。	47
圖 3.7 區域分割示意圖。	48
圖 3.8 區域分割示意圖。	51

圖 3.9 光柵成像模擬的幾何結構。	55
圖 3.10 五個週期的有限光柵結構。	55
圖 3.11 光柵的反射場強度分佈(TE 模態)。	57
圖 3.12 光柵成像附近的光場強度分佈(X-Y 平面)。	57
圖 4.1 干涉式散射儀之光學架構。	59
圖 4.2 疊對光柵之幾何結構。	60
圖 4.3 在週期800nm時的繞射效率對相位差之特徵曲線，x軸為相位差，y軸為繞射效率。	61
圖 4.4 在大範圍取樣下，最佳化參數模擬結果，光柵週期模擬範圍從1000nm至1800nm 間隔 10nm，L/S 變化從 5/5 至 8/2。SOM <sub>10nm</sub> 的峰值從週期 1160nm (a)移至週期1260nm (b)最後再回到週期1040nm (d)。SOM <sub>10nm</sub> 最大值位於週期1150nm。	62
圖 4.5 在小範圍取樣下，最佳化參數模擬結果，光柵週期模擬範圍從1000nm至1300nm 間隔 5nm，L/S 變化從 60/40 至 80/20。位於 B 點為 SOM <sub>10nm</sub> 的最大值，其值為 1.8287% (L/S 為 64/36，週期為 1215nm)。A 點為在大範圍取樣下所找到的最佳值。	63
圖 4.6 干涉式散射儀與角度式散射儀的疊對誤差 $\sigma$ 對繞射效率差 DDE 之關係曲線。	64
圖 4.7 干涉式散射儀之光學實驗架構。	66
圖 4.8 疊對光柵俯視圖。	67
圖 4.9 量測數據與比對結果。	68
圖 4.10 疊對光柵側視圖。	69
圖 5.1 跨焦取像量測系統(a)及光柵結構(b)。	71
圖 5.2 邊界分割示意圖。	72

圖 5.3 入射光場強度分佈。	72
圖 5.4 反射場在邊界 $\Gamma_1$ 的振幅(a)及相位(b)分佈。	73
圖 5.5 物理光學追跡示意圖。	75
圖 5.6 波前在邊界 $\Gamma_1$ (a)及 CCD(b)上的強度分佈。	76
圖 5.7 跨焦取像顯微物鏡之光學架構。	78
圖 5.8 白光光源光譜(a)及白光經濾光片之後的光譜(b)。	79
圖 5.9 光柵分別在工作距離為12.9955mm (a)，13.0000mm (b)，13.0020mm (c)，即13.0045mm (d)時的成像情況。	81
圖 5.10 TEM 量測結果。(a)右邊的線結構，(b)為左邊的線結構。	82
圖 5.11 光柵在 CCD 上的強度分佈。480nm 至 550nm 之單波長強度分佈及頻寬合成之強度分佈(b)。	83
圖 5.12 光柵離焦為 $0\mu\text{m}$ (a)， $2.5\mu\text{m}$ (b)，及 $5.0\mu\text{m}$ (c)時在 CCD 上的強度分佈。	84
圖 5.13 跨焦取像之能量梯度分佈模擬結果。	85
圖 5.14 跨焦取像之能量梯度量測與比對結果。	85



## 表目錄

表 3.1 光柵材料及折射率。	56
表 3.2 柱形透鏡參數。	56
表 4.1 光柵之結構參數及折射率。	60
表 4.2 相位差及最大效率差對間隔 50nm 的疊對位移之計算。	61
表 4.3 對於干涉式散射儀與角度式散射儀之疊對光柵最佳化參數。	64
表 4.4 疊對光柵厚度量測結果。	67
表 5.1 材料折射率。	73
表 5.2 50 倍顯微物鏡參數。	74
表 5.3 5 倍顯微物鏡參數。	75



## 符號表

1.  $\epsilon_0$  : 真空中的介電係數。
2.  $\epsilon$  : 介質中的介電係數。
3.  $\mu_0$  : 真空中的導磁係數。
4.  $\mu$  : 介質中的導磁係數。
5.  $v$  : 介質中的波速。
6.  $K$  : 光柵向量。
7.  $\Lambda$  : 光柵週期。



# 第一章 前言

臨界尺寸是根據在量測中必須分辨的最小尺寸。這在許多技術領域中是一個十分重要的課題。隨著半導體製程技術的快速發展，半導體元件的積集度(integration)已顯著提高。近年來線寬突破100nm已完成65nm線寬的半導體元件的量產，並正在積極的投入45nm線寬技術的開發。在此製程中的微影(photolithography)是關鍵過程，此過程中閘極線寬的量測，及層間的疊對量測，即臨界尺寸(critical dimension)的量測，已成為急需解決的任務。當閘極線寬變動時將會直接影響臨界電壓(threshold voltage)的特性，而層間的重疊定位則會影響層與層之間的聯結，這些都會影響元件的演示，良率及可靠性。

## 1.1 線寬的量測

首先討論閘極線寬的量測，傳統光學影像式的線寬量測機台由於受限光學繞射極限<sup>[1,2]</sup>與本身量測精確度等問題將不易達到量測上的要求。目前對於線寬的量測以CD-SEM<sup>[3-7]</sup>及AFM(Atomic Force Microscopy)<sup>[8-10]</sup>量測為主流。AFM量測原理是利用針尖原子與樣品表面原子間的微弱作用力來作為回饋，以維持針尖能在樣品上方以固定高度掃描，從而得知樣品表面的高低起伏。其橫向解析度約為2~10nm，而縱向解析度約為0.1nm。其缺點是掃描速度慢不利於線上(in-line)檢測。另一檢測線寬的方法為掃描式電子顯微鏡(Scanning Electron Microscopy, SEM)，掃描式電子顯微鏡將欲觀察的樣品放在底部，電子束與樣品作用產生二次電子的激發，再經收集放大。雖然加速電壓與解析度沒有穿透式來的高，但樣品更換與製作比較方便。其橫向解析度約為5nm，縱向解析度約為10nm。DUV光阻最讓人詬病的特性就是當曝光在SEM的電子束下時，它們會傾向於收縮。這種「線寬收縮」效應會影響到線寬的量測。所以要判斷所得到的結果是因為製程上的控制問題，還是出自於機台特性往往很難分析。其它發展中量測線寬的方法如小角度X光散射儀(small angle X-ray scattering)<sup>[11-13]</sup>。傳統上，利用X光的繞射來了解物質結構最成功的應用，為週期性的物質結構，如單晶。而對於介於週期性與非晶體之間的結構，如高分子聚合物，液晶，生物膜/蛋白質/DNA或是半導體製程中的線寬，X光小角度散射儀則提供另一方法，來檢測奈米級的結構特



徵。其原理如下，物質與 X 光的交互作用(電磁交互作用)，主要是光電吸收和來自於原子束縛電子的彈性散射。含大原子序原子的物質，因內含的束縛電子愈多，其對光的散射也就越強。但若整個物質內的電子分佈是均勻無序的(例如水)，那麼物質對 X 光的散射，也相對的沒有方向性的偏好，而在空間中形成均勻散射。當物質內部的電子密度開始有局部性的規則性出現時，例如，區域性的小驟集，物質對 X 光的散射模式，也會因這些局部的電子密度變化，出現相對的散射分佈特徵。而分析 X 光散射強度隨散射方向的變化特性，可以獲的物質內部的電子密度分佈的資訊，即物質的結構。線寬可以達到奈米級的解析度，其缺點為需要數小時的量測時間來收集所需要的 X 光散射能量。

跨焦取像量測法(through-focus focus-metric method)<sup>[14-18]</sup>可用於量測閹極線寬。一般常見的光學影像式量測機台的光學成像原理是藉由移動物體的物距，判斷影像是否清晰。物體在最佳成像位置上時，代表對焦完成，於影像感測器上將呈現最佳聚焦(in-focus)影像。若將物體相對於最佳成像位置沿光軸改變物距時，此物體的像距也隨之移動，在固定的影像感測器上所形成的影像將呈現離焦(out-focus)影像。利用此影像感測器所擷取的聚焦和離焦影像，藉由分析這些影像的資訊，可以獲得待測物體結構的參數，此方法稱為跨焦取像量測法。

目前對於跨焦取像量測法的理論分析是採用嚴格耦合波向量繞射理論(rigorous coupled wave algorithm)<sup>[19-30]</sup>。為了滿足嚴格耦合波的邊界條件，光柵的週期數目必須足夠多，然而在實際的應用中光柵的數目可能不足以滿足嚴格耦合波的使用條件，這將造成比對上的誤差。為了解決此問題我們使用了邊界元素法(boundary element method)<sup>[31-34]</sup>，邊界元素法可以藉由邊界的設定去計算有限週期數目的光柵。由於邊界元素法的特性，在計算速度上會比有限元素法(FEM)<sup>[35]</sup>及有限差分時域法(FDTD)<sup>[36,37]</sup>來的快。對跨焦取像量測法的模擬，分為兩部份，一為近場計算，另一為遠場計算。在近場計算方面，我們使用邊界元素法來計算入射光經由光柵反射的光場分佈，由近場所計算的結果，藉由物理光學追跡把近場的光場經由顯微鏡成像在像平面上。在第三章中探討邊界元素法的理論架構，在第五章利用邊界元素法及物理光學追跡來模擬分析跨焦取像量測，及分析實驗量測結果。

## 1.2 疊對量測

元件的疊對(overlay)定義為底層中心線與上層(光阻層)中心線間的平面距離。疊對的容差和疊對量測的容差隨著半導體製程的不斷升級而逐漸減小。對於一個線寬 $2\mu\text{m}$  CMOS 製程要求總的元件疊對的容差約 $1\mu\text{m}$ ，其疊對量測誤差的容差為 $100\text{nm}$ 。如果線寬壓縮到 $90\text{nm}$ ，其疊對的容差將減少至 $45\text{nm}$ ，疊對量測誤差的容差將小於 $4.5\text{nm}$ 。

目前所採用的疊對量測技術是所謂的影像法<sup>[38]</sup>。在測量過程中的標靶(target)為條碼套條碼(bar in bar)或方框套方框(box-in-box)，這裡相互套置的條碼或方框分別位於製程中的上層(光阻層)和下層(晶片)。在量測過程中對標靶照明和顯微放大，並對顯微像進行分析。對於一自動化的疊對量測儀，其測試受限於放大倍率和最終的像素量。通常放大率為 $2000\times$ 和 $512\times 512$ 像素， $1\mu\text{m}$ 將由10個以上的像素所顯示，如採用像素間的內插運算，可以獲得小於 $10\text{nm}$ 的邊界識別。以影像為基礎的疊對量測對於光學和晶片間的相對移動十分敏感，周邊環境的任何振動都會對影像為基礎的量測造成影響。由於像的解析度反比於波長，近年來為了滿足線寬愈來愈窄(小於 $65\text{nm}$ )的像解析度的要求，已積極開發利用 $150\text{nm} \sim 300\text{nm}$ 範圍深紫外(DUV)照明的 CCD 高解析度相機。其波長包含準分子雷射的 $248\text{nm}$ ， $193\text{nm}$ 和 $157\text{nm}$ 。即使採用了較短的波長，要達到奈米級的像解析度，來滿足半導體製程快速發展對疊對量測的要求是十分困難的。尋求其他的疊對量測技術已成為半導體製程的迫切需求。

1988年 Chappelow 等人<sup>[39,40]</sup>提出疊對量測的另一種方法。在此方法中利用線性光柵作為上層和下層疊對的標靶。上層和下層的線性光柵具有相同的周期。量測時所採用的照明光點遠大於光柵的線寬。2001年 Bischoff 等人提出由 $\pm 1$ 級繞射的繞射效率差來量測疊對。所採用的標靶是分別置於上下層的兩個同周期的線性光柵重疊而成。當一光柵的線中心與另一光柵的線中心或間距中心完全重合時，由於對稱性， $\pm 1$ 級繞射將會具有相同的振幅。當上下層光柵之間有任何一點位移，對稱性將被破壞， $\pm 1$ 級振幅之差將與其位移相關聯。近年來，H. T. Huang 等人<sup>[41,42]</sup>採用相似的線性光柵標靶結構，並對零級繞射光進行量測。在此量測中採用了寬波帶的光源，由所測得的零級繞射光的繞射效率比對可獲得疊對的數據。上述所

提出的基於對光在周期性標靶上散射分析的光學量測技術通常稱為散射量測法。從嚴格的物理觀點，光被周期性結構的標靶散射實質上是歸因於繞射，只是在廣義上被稱為散射。當一系列的周期排列的條狀結構(通常稱為線性光柵)被某種光源照射時，其散射(繞射)光的反射特性將與標靶結構密切相關。因此，分析散射信號的數據就可以獲得有關繞射光柵的形狀和結構參數的訊息。

在散射法的分析中<sup>[43-45]</sup>，得知光柵可量測的疊對範圍為光柵的一半週期，如果要具有較長的疊對量測範圍，必須採用較大的光柵週期，然而較大的光柵週期將會降低量測的靈敏度。干涉式的散射儀量測方法<sup>[46]</sup>，是藉由量測光柵的零級繞射光與由回朔反射(retro-reflection)所產生的+1 級繞射光所形成的干涉強度。此一量測方式將具有較大的疊對量測範圍及靈敏度，以及較簡單的光學系統架構。

過去週期性光柵都是利用標量繞射理論(scale diffraction theory)，其基礎建立在傅利葉光學(Fourier optics)上。標量繞射理論將光場看成為純量，此理論分析的好處在於簡單，不需要複雜的計算過程，它適用的範圍限制在尺寸較大的光學元件，即線寬遠大於入射光的波長。嚴格耦合波(rigorous coupled wave)則將光場以電磁波來作處理，利用兩種極化態，TE 模態和 TM 模態來表示，求滿足邊界條件的馬克斯威爾(Maxwell)方程式的解。此方法可用於計算光源波長與光柵週期很接近的情況下的光柵繞射。嚴格耦合波理論是求精確解的一種方法，所求的解更能接近真實情況。由於求解的過程不能利用簡單的數學方法得到，必須借助於一些數值處理方法，在第二章中探討嚴格耦合波的理论架構，在第四章利用嚴格耦合波來模擬分析干涉式散射儀，及分析實驗量測結果。

### 1.3 資料庫比對

上述的量測方法通常分成兩部份，稱為"正向"(forward)和"逆向"(inverse)問題。從簡單的意義上來說，正向部份是指信號的量測，而逆向部份是指對所測信號的分析以推得所需量測的結構。

在正向部份，對於散射儀而言，光被周期性結構散射可以產生許多繞射級的光束。對於目前半導體製程的線寬，結構周期可以做到甚小，以至於只有一個繞射級存在，此繞射級稱為零級繞射或鏡向繞射，此也是散射儀中最常用來測試的光束。利用鏡向繞射來分析光散射的常用方法之一是改變照明光束(通常採用雷射)

的入射角，同時相應改變偵測器的接受角，使入射角和接受角滿足反射條件，量測鏡向繞射的功率。不同角度的散射信號被稱為特徵值(signature)，而由不同角度的特徵值所組成的曲線稱為特徵曲線。它包含有繞射結構的訊息，例如光柵厚度和光柵線寬等。適當地改變結構周期，可以產生 $\pm 1$ 級繞射，這在一些散射儀中也被用來量測。

逆向部份是採用資料庫比對。首先利用理論模型，如嚴格耦合波，或是邊界元素法，先產生一系列的數據，它們涵蓋了光柵的各種結構參數，例如線寬，疊對，或是厚度等。對某一值域的參數進行計算後，所獲得的數據集合稱為資料庫(signature library)。當測得一信號，把它與資料庫的數據進行比對，找出最接近的模型數據。此模型數據所代表的結構參數即為量測設備所測得的結構參數。作為一個完整的量測設備必須具有一個軟體來執行資料庫的產生和對量測數據的比對和分析。



## 第二章 嚴格耦合波向量繞射理論

本章將探討 Chateau 所提出的嚴格耦合波向量繞射理論的計算方法，其中包含了 TE 極化態入射及 TM 極化態入射時的情況。並探討當光柵無偏移及具有偏移量時如何利用 Fourier 級數來表示，及角度散射儀與干涉式散射儀的模擬分析。

### 2.1 入射平面平行光柵法線平面之 TE 極化態入射

本節將探討入射平面平行光柵法線平面之 TE 極化態入射。光柵方向定義為光柵折射率變化的方向，如圖(2.1)所示為 x 軸方向，而光柵法線平面為光柵方向及光柵平面之法線方向所構成的平面，如圖中的 x-z 平面。

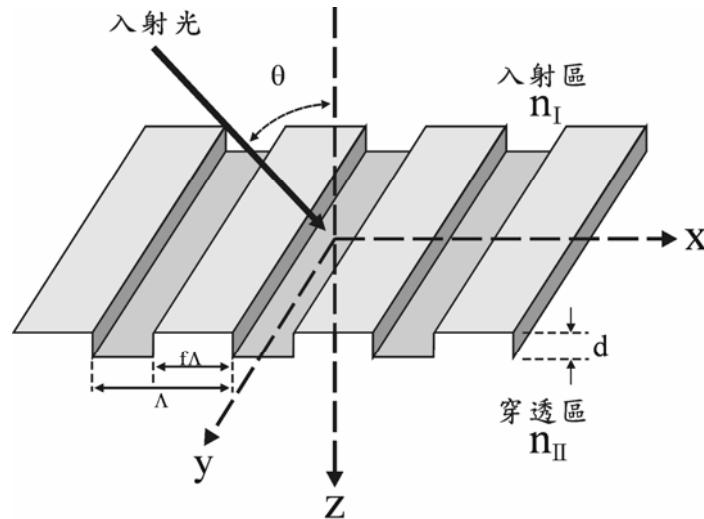


圖 2.1 二階光柵的基本幾何架構圖。

圖(2.1)為二階光柵的基本幾何架構圖，其中入射區與透射區的折射率分別為  $n_I$  及  $n_{II}$ ，光柵向量  $K = 2\pi/\Lambda$  在圖中為延著 x 軸， $\Lambda$  為光柵週期，光柵厚度為  $d$ ，入射角為  $\theta$ ， $f$  為工作週期，即折射率  $n_{II}$  在光柵週期裡所佔的比例。折射率隨著表面起伏而呈現週期變化，將之作傅利葉級數(Fourier series)展開，可表示如下

$$n^2(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} \tilde{n}_t \exp[itK_x x] \quad (2.1)$$

$K_x$  表示  $\vec{K}$  在 x 方向上的分量大小， $\tilde{n}_t$  為第 t 個傅利葉級數展開係數。我們將光柵區域 TE 極化態入射的電磁場用耦合波展開，即將  $E_y(x, z)$  和  $h_x(x, z)$  用耦合波展

開

$$E_y(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} E_y^{(t)}(z) \exp(ik_x^{(t)}x) \quad (2.2)$$

$$h_x(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} h_x^{(t)}(z) \exp(ik_x^{(t)}x) \quad (2.3)$$

其中為了簡化符號，我們令  $h = \mu_0 c H$ ， $\mu_0$  為真空中的導磁係數。 $k_x$  是  $x$  方向的波數，可以從入射場的相位匹配求得

$$k_x^{(0)} = k_0 n_1 \sin \theta = k_0 n_0 \sin \theta' \quad (2.4)$$

$n_0$  為光柵區的平均折射率， $\theta'$  為光柵內部的入射角。 $k_x^{(t)}$  ( $t \in \mathbb{Z}$ ) 可由 Floquet 條件求得

$$k_x^{(t)} = k_x^{(0)} + tK_x, \quad t \in \mathbb{Z} \quad (2.5)$$

$$K_x = \frac{2\pi}{\Lambda} \quad (2.6)$$

由 Maxwell 方程式， $\nabla \times E = i\omega\mu H$  可得

$$h_x(x, z) = \frac{i}{k_0} \frac{\partial E_y(x, z)}{\partial z} \quad (2.7)$$

將(2.2)及(2.3)式代入(2.7)式，則

$$\frac{dE_y^{(t)}(z)}{dz} = -ik_0 h_x^{(t)}(z), \quad t \in \mathbb{Z} \quad (2.8)$$

接下來考慮 Helmholtz 方程式

$$\nabla^2 E_y(x, z) + k_0^2 n^2 E_y(x, z) = 0 \quad (2.9)$$

利用(2.1)，(2.2)，及(2.8)式，消去(2.9)式中的二階微分項，可得

$$\frac{dh_x^{(t)}(z)}{dz} = -i \left\{ \frac{[k_z^{(t)}]^2}{k_0} E_y^{(t)}(z) + k_0 \sum_{\ell \neq t} \tilde{n}_{t-\ell} \times \exp[i(t-\ell)K_x z] E_y^{(\ell)}(z) \right\} \quad (2.10)$$

其中


$$[k_z^{(t)}]^2 = k_0^2 \tilde{n}_0 - [k_x^{(t)}]^2 \quad (2.11)$$

(2.8)及(2.10)式理論上為無限序列的一階微分方程組，可以聯立解 $E_y^{(t)}$ 及 $h_x^{(t)}$ 。但是在實際的數值分析過程中，只能對電磁場及折射率分佈截取有限的 $N$ 階展開。因此我們必須取足夠大的 $N$ 才能得到一定精度的解。

我們可以把聯立方程組寫成矩陣的形式

$$\frac{dU(z)}{dz} = [M]U(z) \quad (2.12)$$

此處 $U(z)$ 為 $2N \times 1$ 的向量，即

$$U(z) = \begin{bmatrix} E_y^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ E_y^{(\ell-v)}(z) \\ \vdots \\ E_y^{(\frac{N-1}{2})}(z) \\ h_x^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ h_x^{(\ell-v)}(z) \\ \vdots \\ h_x^{(\frac{N-1}{2})}(z) \end{bmatrix} \quad (2.13)$$


我們選擇 $N$ 為奇數， $\ell = 1, 2, 3, \dots, N$ ， $v = (N+1)/2$ 。(2.12)式中的矩陣 $M$ 為 $2N \times 2N$ 階的常係數矩陣，其元素為

$$M = -i \begin{bmatrix} 0 & k_0 I \\ k_0 W & 0 \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

其中各子矩陣為

$0$ :  $N \times N$  的零矩陣

$I$ :  $N \times N$  的單位矩陣

$$W : W_{t,t} = \frac{[k_z^{(t-v)}]^2}{k_0^2}$$

$$W_{t,\ell} = \tilde{n}_{t-\ell} \quad , \quad t \neq \ell \quad , \quad (t,\ell) \in \{0, \dots, N-1\}^2$$

(2.12)式中，其所求之解具有平移不變(shift-invariant)性質，在任意兩個座標  $z_1$  與  $z_2$  ( $z_2 > z_1$ ) 的解之間具有指數矩陣函數的關係

$$U(z_1) = \exp[-(z_2 - z_1)M]U(z_2) \quad (2.15)$$

我們可以用矩陣  $M$  的本徵值與本徵向量來表示矩陣  $M$ ，首先將矩陣  $M$  對角化如下

$$M = PDP^{-1} \quad (2.16)$$

矩陣  $P$  是矩陣  $M$  的本徵向量，而矩陣  $D$  是由矩陣  $M$  的本徵值  $e_\ell$  所組成的對角矩陣，即

$$D = \begin{bmatrix} e_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e_{2N} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$



所以可以將(2.15)式改寫成

$$U(z_1) = P \cdot \exp\{-(z_2 - z_1) \cdot D\} \cdot P^{-1} \cdot U(z_2) \quad (2.18)$$

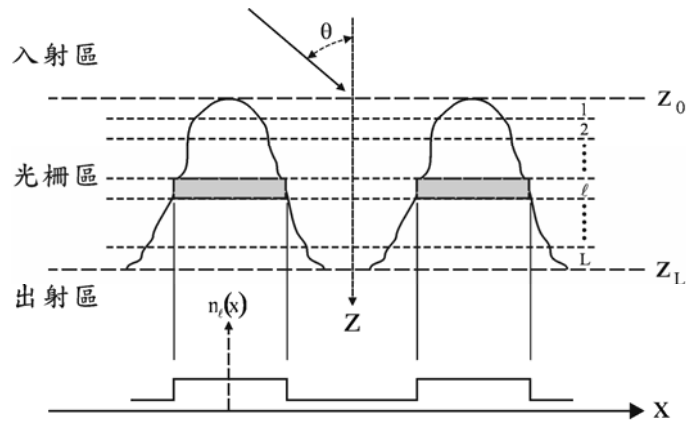


圖 2.2 表面蝕刻型的光柵可分為  $L$  層。

假設表面蝕刻型光柵可分為  $L$  層，如圖(2.2)所示，則整個光柵區域的特徵矩陣可以表示為為一薄層個別的本徵矩陣的連續乘積，因此整個本徵矩陣的一般化表示式可寫成



$$\prod_{\ell=1}^L P_1(z_{\ell-1}) \cdot \exp[-(z_\ell - z_{\ell-1})D_\ell] \cdot P_\ell(z_\ell)^{-1} \quad (2.19)$$

接下來我們考慮光柵邊界的問題，假設入射區與出射區域皆為均勻介質，我們將兩區域的電磁場分佈用 Rayleigh 展開來表示，如入射區域的電磁場分佈為

$$E_y(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \sum_{t=-\infty}^{\infty} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.20)$$

$$h_x(x, z) = -\frac{1}{k_0} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \frac{1}{k_0} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.21)$$

此處的  $k_x^{(t)}$  與(2.4)，(2.5)式所定義的相同， $k_{Fz}^{(t)} = [k_0^2 n_1^2 - (k_x^{(t)})^2]^{1/2}$ ， $n_1$  是入射區介質的折射率，而  $f_F^{(t)}$  與  $b_F^{(t)}$  分別為入射區域電場的入射與反射的複數振幅(符號  $f$  表示  $+z$  方向傳播，反之為  $b$ ; 下標  $F$  表示入射區，下標  $L$  表示出射區)。電磁場在無表面電流的邊界其切線方向的分量是連續的，因此由方程式(2.2)，(2.3)及(2.20)，(2.21)可得

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ E_y^{(t-v)}(z_0) \\ \vdots \\ \vdots \\ h_x^{(t-v)}(z_0) \\ \vdots \end{bmatrix} = [C(z_0)] \begin{bmatrix} \vdots \\ f_F^{(t-v)} \\ \vdots \\ \vdots \\ b_F^{(t-v)} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

其中

$$[C(z_0)] = \begin{bmatrix} \ddots & & 0 \\ & \exp[ik_{Fz}^{(t-v)}z_0] & \\ 0 & & \ddots \\ \ddots & & 0 \\ & -\frac{k_{Fz}^{(t-v)}}{k_0} \exp[ik_{Fz}^{(t-v)}z_0] & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddots & & 0 \\ & \exp[-ik_{Fz}^{(t-v)}z_0] & \\ 0 & & \ddots \\ \ddots & & 0 \\ & \frac{k_{Fz}^{(t-v)}}{k_0} \exp[-ik_{Fz}^{(t-v)}z_0] & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

同理，我們在出射區域可以用  $f_L^{(t)}$  與  $b_L^{(t)}$  分別表示透射和反射的傳播方向分別為  $+z$  與  $-z$  的電場複數振幅。若出射介質與光柵邊界為  $z_L$ ，亦可用相同的方式定義出出射區域的矩陣  $[C(z_L)]$ 。由(2.19)及(2.22)式，可得

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{f}_F^{(t-v)} \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{b}_F^{(t-v)} \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = [\mathbf{C}(z_0)]^{-1} \left\{ \prod_{l=1}^L \mathbf{P}_l(z_{l-1}) \cdot \exp[-(z_l - z_{l-1}) \cdot \mathbf{D}_l] \cdot \mathbf{P}_l(z_l)^{-1} \right\} [\mathbf{C}(z_L)] \begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{f}_L^{(t-v)} \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{b}_L^{(t-v)} \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

入射光之複數振幅定義如下  $\mathbf{f}_F^{(t-v)}$

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{f}_F^{(t-v)} \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

由於透射區沒有反射光，所以

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{b}_L^{(t-v)} \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

將(2.25)及(2.26)式代入(2.24)式可得  $2N$  個聯立方程式，對應  $2N$  個未知的  $\mathbf{f}_L^{(t-v)}$ ， $\mathbf{b}_L^{(t-v)}$ ，可得唯一的一組解。得到  $\mathbf{b}_F^{(t-v)}$  及  $\mathbf{f}_L^{(t-v)}$  之後，則透射光與反射光的繞射效率分別為

$$\eta_F^{(t-v)} = \operatorname{Re} \left[ \frac{\mathbf{k}_{Lz}^{(t-v)}}{\mathbf{k}_{Fz}^{(0)}} \right] \cdot |\mathbf{f}_L^{(t-v)}|^2 \quad (2.27)$$

$$\eta_B^{(t-v)} = \operatorname{Re} \left[ \frac{\mathbf{k}_{Fz}^{(t-v)}}{\mathbf{k}_{Fz}^{(0)}} \right] \cdot |\mathbf{b}_F^{(t-v)}|^2 \quad (2.28)$$

繞射效率定義為繞射光的強度除以入射光的強度之值。

## 2.2 入射平面平行光柵法線平面之 TM 極化態入射

類似於 TE 極化態入射，我們將 TM 極化態入射的電磁場用耦合波展開，即將  $H_y(x, z)$  和  $e_x(x, z)$  用耦合波展開，即

$$H_y(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} H_y^{(t)}(z) \exp(ik_x^{(t)}x) \quad (2.29)$$

$$e_x(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} e_x^{(t)}(z) \exp(ik_x^{(t)}x) \quad (2.30)$$

其中為簡化符號，令  $e = \epsilon_0 c E$ ， $\epsilon_0$  為真空中的介電係數。由 Maxwell 方程式  $\nabla \times H = -i\omega \epsilon_r(x) \epsilon_0 E$  ( $\epsilon_r(x)$  為延著  $x$  軸變化的相對介電係數) 可得

$$e_x(x, z) = \frac{-i}{k_0 \epsilon(x)} \frac{\partial H_y(x, z)}{\partial z} \quad (2.31)$$

將(2.29)，(2.30)式代入(2.31)式，推得

$$\frac{dH_y^{(t)}}{dz} = ik_0 \epsilon(x) e_x^{(t)}(z) \quad (2.32)$$

接下來考慮 Helmholtz 方程式

$$\nabla^2 H_y(x, z) + k_0^2 n^2 H_y(x, z) = 0 \quad (2.33)$$

將方程式(2.1)，(2.29)，(2.30)及(2.32)式代入方程式(2.33)，可得

$$\frac{de_x^{(t)}(z)}{dz} = -i \left\{ \frac{(k_x^{(t)})^2}{k_0 \epsilon(x)} \cdot H_y^{(t)}(z) - k_0 \cdot H_y^{(t)}(z) \right\} \quad (2.34)$$

方程式(2.32)及(2.34)可以改寫成矩陣型式，如下

$$\frac{dU(z)}{dz} = [M]U(z) \quad (2.35)$$

其中

$$U(z) = \begin{bmatrix} H_y^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ H_y^{(\ell-v)}(z) \\ \vdots \\ H_y^{(\frac{N-1}{2})}(z) \\ e_x^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ e_x^{(\ell-v)}(z) \\ \vdots \\ e_x^{(\frac{N-1}{2})}(z) \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

(2.35)式中的M矩陣為 $2N \times 2N$ 階的常係數矩陣，其元素如下

$$M = -i \cdot \begin{bmatrix} 0 & -k_0 G \\ k_0 V & 0 \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

其中各個子矩陣為

$$G : G_{t,t} = \varepsilon_0$$

$$G_{t,\ell} = \varepsilon_{t-\ell} \quad , \quad t \neq \ell \quad , \quad (t, \ell) \in \{0, \dots, N-1\}^2$$

$$V = K_x \cdot G^{-1} \cdot K_x - I$$

其中 $K_x$ 是由對角元素 $k_x^{(t)}/k_0$ 所組成的對角矩陣， $I$ 為單位矩陣。

接下來的推導與入射光為TE極化態的演算法相同，唯有須將入射區域的電磁場分佈改為

$$H_y(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \sum_{t=-\infty}^{\infty} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.38)$$

$$e_x(x, z) = -\frac{1}{k_0 n_1} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \frac{1}{k_0 n_1} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.39)$$

此處的 $k_x^{(t)}$ 與(2.4)，(2.5)式所定義的相同， $k_{Fz}^{(t)} = [k_0^2 n_1^2 - (k_x^{(t)})^2]^{1/2}$ ， $n_1$ 是入射區介質的折射率，而 $f_F^{(t)}$ 與 $b_F^{(t)}$ 分別為入射區域磁場入射與反射複數振幅(符號 $f$ 表示 $+z$ 方向傳播，反之為 $b$ ；下標 $F$ 表示入射區，下標 $L$ 表示出射區)。而出射區域與入射區域的繞射效率改為

$$\eta_F^{(t-v)} = \text{Re} \left[ \frac{k_{Lz}^{(t-v)} / n_{II}^2}{k_{Fz}^{(0)} / n_I^2} \right] \cdot |f_L^{(t-v)}|^2 \quad (2.40)$$

$$\eta_B^{(t-v)} = \text{Re} \left[ \frac{k_{Fz}^{(t-v)}}{k_{Fz}^{(0)}} \right] \cdot |b_F^{(t-v)}|^2 \quad (2.41)$$

### 2.3 入射平面垂直光柵法線平面之 TE 極化態入射

接著將探討當入射平面垂直光柵法線平面上時的情況，在此情況入射的光其所產生的繞射級為錐形分佈。我們分別採用 Moharam 的物理模型及 Chateau 的數值技巧來分析在 TE 極化態及 TM 極化態入射時的情況。

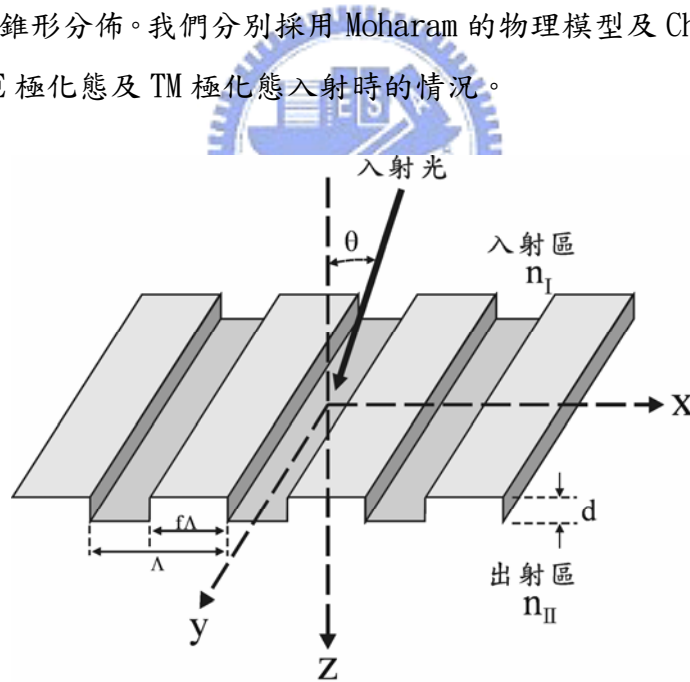


圖 2.3 二階光柵的基本幾何架構圖。

圖(2.3)為光柵的幾何架構，其中光柵方向為 $x$ 軸方向，即光柵的折射率在 $x$ 軸方向上為週期分佈，在 $y$ 軸方向上為一定值。在前兩節中所模擬的入射平面(incident plane)是位於 $x-z$ 平面，而本節所模擬的入射平面位於 $y-z$ 平面上。首先模擬 TE 極化態入射的情況，則入射區域( $z \leq z_0$ )與出射區域( $z \geq z_m$ )，

$|z_m - z_0| = d$  為光柵區的厚度)的電場分佈為

$$E_{I,x} = E_{inc} + \sum_i R_i \exp[-j(k_{xi}x + k_y y - k_{I,zi}z)] \quad , \quad z \leq z_0 \quad (2.42)$$

$$E_{II,x} = \sum_i T_i \exp\{-j[k_{xi}x + k_y y + k_{II,zi}z]\} \quad , \quad z \geq z_m \quad (2.43)$$

其中

$$E_{inc} = \exp[-jk_0 n_I (\sin(\theta)y + \cos(\theta)z)] \quad (2.44)$$

$$k_{xi} = k_0 \left(-i \frac{\lambda_0}{\Lambda}\right) \quad (2.45)$$

$$k_y = k_0 n_I \sin \theta \quad (2.46)$$

$$k_{\ell,zi} = \begin{cases} [(k_0 n_\ell)^2 - k_{xi}^2 - k_y^2]^{1/2} & , \quad (k_{xi}^2 + k_y^2)^{1/2} < k_0 n_\ell \\ -j[k_{xi}^2 + k_y^2 - (k_0 n_\ell)^2]^{1/2} & , \quad (k_{xi}^2 + k_y^2)^{1/2} > k_0 n_\ell \end{cases} \quad , \quad \ell = I, II \quad (2.47)$$

其中  $\theta$  為入射角， $n_I$  與  $n_{II}$  分別為 I、II 區域的折射率， $k_0 = 2\pi/\lambda_0$  為真空中的波向量， $\lambda_0$  則是入射波在真空中的波長。 $R_i$  與  $T_i$  分別為歸一化的反射與出射的繞射振幅， $k_{xi}$  與  $k_{\ell,zi}$  則是第  $i$  階繞射的波向量在  $x$  與  $z$  方向上的分量， $k_y$  為波向量在  $y$  方向上的分量。此外在光柵的第  $\ell$  層中，電場與磁場的切線分量為

$$E_{gx} = \sum_i S_{xi}(z) \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)] \quad (2.48)$$

$$H_{gy} = \frac{j}{\omega \mu_0} \sum_i U_{yi}(z) \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)] \quad (2.49)$$

其中  $\omega$  為光波的角頻率， $\mu_0$  為真空中的導磁係數(permeability)。 $S_{xi}$  與  $U_{yi}$  為第  $i$  階空間諧波(space harmonic)的歸一化振幅。由 Maxwell 方程式

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.50)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega \epsilon \mathbf{E} \quad (2.51)$$

其中  $\epsilon$  為材料的介電係數。由方程式(2.50)及(2.51)可知在光柵區域中，電場與磁場有如下的關係

$$\frac{\partial}{\partial z} E_{gx} = -j\omega\mu_0 H_{gy} \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} H_{gy} = -j\omega\varepsilon_0\varepsilon_r(x)E_{gx} + \frac{\partial}{\partial y} H_{gz} \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} H_{gz} = \frac{-k_y^2}{j\omega\mu_0} E_{gx} \quad (2.54)$$

將(2.48)式與(2.49)式代入上面的方程式，整理之後可得

$$\frac{dS_{xi}}{dz} = U_{yi} \quad (2.55)$$

$$\frac{dU_{yi}}{dz} = k_y^2 S_{xi} - k_0^2 \sum_p \varepsilon_{i-p} S_{xp} \quad (2.56)$$

由於  $\varepsilon_r(x) = n^2$ ，所以(2.56)式可以改寫為

$$\frac{dU_{yi}}{dz} = k_y^2 S_{xi} - k_0^2 \sum_p n_{i-p}^2 S_{xp} \quad (2.57)$$



(2.55)式及(2.57)式理論上為無限序列的一階微分方程組，可以聯立解  $S_{xi}$  及  $U_{yi}$ 。但是在實際的數值分析過程中，只能對電磁場及折射率分佈截取有限的  $N$  階展開。因此我們必須取足夠大的  $N$  才能得到一定精度的解。我們可以把聯立方程組寫成如下的矩陣形式

$$\frac{dV(z)}{dz} = [M]V(z) \quad (2.58)$$

此處  $V(z)$  為  $2N \times 1$  的向量，即

$$V(z) = \begin{bmatrix} S_{x, \frac{1-N}{2}}(z) \\ \vdots \\ S_{x,0}(z) \\ \vdots \\ S_{x, \frac{N-1}{2}}(z) \\ U_{y, \frac{1-N}{2}}(z) \\ \vdots \\ U_{y,0}(z) \\ \vdots \\ U_{y, \frac{N-1}{2}}(z) \end{bmatrix} \quad (2.59)$$

我們選擇  $N$  為奇數。(2.58)式中的矩陣  $M$  為  $2N \times 2N$  階的常係數矩陣，其元素為

$$M = \begin{bmatrix} 0 & I \\ W & 0 \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

其中各子矩陣為

$0$ :  $N \times N$  的零矩陣

$I$ :  $N \times N$  的單位矩陣



$$W = \begin{bmatrix} k_y^2 & -k_0^2 n_{-1}^2 & -k_0^2 n_{-2}^2 & \cdots & -k_0^2 n_{2-N}^2 & -k_0^2 n_{1-N}^2 \\ -k_0^2 n_1^2 & k_y^2 & -k_0^2 n_{-1}^2 & \cdots & -k_0^2 n_{3-N}^2 & -k_0^2 n_{2-N}^2 \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \\ -k_0^2 n_{N-2}^2 & -k_0^2 n_{N-3}^2 & -k_0^2 n_{N-4}^2 & \cdots & k_y^2 & -k_0^2 n_{-1}^2 \\ -k_0^2 n_{N-1}^2 & -k_0^2 n_{N-2}^2 & -k_0^2 n_{N-3}^2 & \cdots & -k_0^2 n_1^2 & k_y^2 \end{bmatrix} \quad (2.61)$$

(2.58)式中，其所求之解具有平移不變(shift-invariant)性質，在任意兩個座標  $z_1$  與  $z_2$  ( $z_2 > z_1$ ) 的解之間具有指數矩陣函數的關係

$$V(z_1) = \exp[-(z_2 - z_1)M]V(z_2) \quad (2.62)$$

我們可以用矩陣  $M$  的本徵值與本徵向量來表示矩陣  $M$ ，首先將矩陣  $M$  對角化如下

$$M = PDP^{-1} \quad (2.63)$$



矩陣  $P$  是矩陣  $M$  的本徵向量，而矩陣  $D$  是由矩陣  $M$  的本徵值  $e_\ell$  所組成的對角矩陣，即

$$D = \begin{bmatrix} e_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e_{2N} \end{bmatrix} \quad (2.64)$$

所以可以將(2.62)式改寫成

$$V(z_1) = P \cdot \exp\{-(z_2 - z_1) \cdot D\} \cdot P^{-1} \cdot V(z_2) \quad (2.65)$$

即

$$\begin{bmatrix} S_{x, \frac{1-N}{2}}(z_1) \\ \vdots \\ S_{x,0}(z_1) \\ \vdots \\ S_{x, \frac{N-1}{2}}(z_1) \\ U_{y, \frac{1-N}{2}}(z_1) \\ \vdots \\ U_{y,0}(z_1) \\ \vdots \\ U_{y, \frac{N-1}{2}}(z_1) \end{bmatrix} = [P(z_1)] \begin{bmatrix} \exp[-e_0(z_2 - z_1)] & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \exp[-e_{2N-1}(z_2 - z_1)] \end{bmatrix} [P(z_2)]^{-1} \begin{bmatrix} S_{x, \frac{1-N}{2}}(z_2) \\ \vdots \\ S_{x,0}(z_2) \\ \vdots \\ S_{x, \frac{N-1}{2}}(z_2) \\ U_{y, \frac{1-N}{2}}(z_2) \\ \vdots \\ U_{y,0}(z_2) \\ \vdots \\ U_{y, \frac{N-1}{2}}(z_2) \end{bmatrix} \quad (2.66)$$

假設表面蝕刻型光柵可分為  $L$  層，如圖(2.2)所示，則整個光柵區域的特徵矩陣可以表示為為一薄層個別的本徵矩陣的連續乘積，因此整個本徵矩陣的一般化表示式可寫成

$$\prod_{\ell=1}^L P_\ell(z_{\ell-1}) \cdot \exp[-(z_\ell - z_{\ell-1})D_\ell] \cdot P_\ell(z_\ell)^{-1} \quad (2.67)$$

接下來我們考慮光柵邊界的問題，假設入射區的邊界位於  $z_0$  處而出射區的邊界位於  $z_L$  處。由方程式(2.42)，方程式(2.44)，方程式(2.50)可以推得入射區域的電磁場分佈為

$$S_{xi} = \exp[-jk_0 n_1 \cos(\theta) z_0] + R_i \exp(jk_{1,zi} z_0) \quad (2.68)$$

$$U_{yi} = jk_{1,zi} R_i \exp(jk_{1,zi} z_0) \quad (2.69)$$

以矩陣型式表示如下

$$\begin{bmatrix} S_{x, \frac{1-N}{2}}(z_0) \\ \vdots \\ S_{x, 0}(z_0) \\ \vdots \\ S_{x, \frac{N-1}{2}}(z_0) \\ U_{y, \frac{1-N}{2}}(z_0) \\ \vdots \\ U_{y, 0}(z_0) \\ \vdots \\ U_{y, \frac{N-1}{2}}(z_0) \end{bmatrix} = [C(z_0)] \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ R_{\frac{1-N}{2}} \\ \vdots \\ R_0 \\ \vdots \\ R_{\frac{N-1}{2}} \end{bmatrix} \quad (2.70)$$

其中

$[C(z_0)] =$

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \\ 0 & \dots & \exp[-jk_0 \cos(\theta) z_0] & \dots & 0 \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \exp(jk_{1, \frac{1-N}{2}} z_0) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & \ddots & & & \\ 0 & \dots & \exp(jk_{1,0} z_0) & \dots & 0 \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \exp(jk_{1, \frac{N-1}{2}} z_0) \\ jk_{1, \frac{1-N}{2}} \exp(jk_{1, \frac{1-N}{2}} z_0) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & & & \ddots & \\ & & & jk_{1,0} \exp(jk_{1,0} z_0) & \\ & & & & \ddots & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & jk_{1, \frac{1-N}{2}} \exp(jk_{1, \frac{N-1}{2}} z_0) \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$(2.71)$$

接著由方程式(2.43)及方程式(2.50)可以推得出射區域的電磁場分佈為

$$S_{xi} = T_i \exp(-jk_{II,zi} z_L) \quad (2.72)$$

$$U_{yi} = -jk_{II,zi} T_i \exp(-jk_{II,zi} z_L) \quad (2.73)$$

以矩陣型式表示如下

$$\begin{bmatrix} S_{x, \frac{1-N}{2}}(z_L) \\ \vdots \\ S_{x,0}(z_L) \\ \vdots \\ S_{x, \frac{N-1}{2}}(z_L) \\ U_{y, \frac{1-N}{2}}(z_L) \\ \vdots \\ U_{y,0}(z_L) \\ \vdots \\ U_{y, \frac{N-1}{2}}(z_L) \end{bmatrix} = [C(z_L)] \begin{bmatrix} T_{\frac{1-N}{2}} \\ \vdots \\ T_0 \\ \vdots \\ T_{\frac{N-1}{2}} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.74)$$

其中

$[C(z_L)] =$

$$\begin{bmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & \exp(-jk_{II,zi} z_L) & & & \ddots & \\ 0 & \dots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ \ddots & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & -jk_{II,zi} \exp(-jk_{II,zi} z_L) & & & \ddots & \\ 0 & \dots & \ddots & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (2.75)$$

由方程式(2.67)，方程式(2.70)，及方程式(2.74)結合可得

$$\begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ R_{\frac{1-N}{2}} \\ \vdots \\ R_0 \\ \vdots \\ R_{\frac{N-1}{2}} \end{bmatrix} = [C(z_0)]^{-1} \left\{ \prod_{\ell=1}^L P_{\ell}(z_{\ell-1}) \cdot \exp[-(z_{\ell} - z_{\ell-1})D_{\ell}] \cdot P_{\ell}(z_{\ell})^{-1} \right\} [C(z_L)] \begin{bmatrix} T_{\frac{1-N}{2}} \\ \vdots \\ T_0 \\ \vdots \\ T_{\frac{N-1}{2}} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.76)$$

利用矩陣計算，可得  $R_i$  及  $T_i$ 。則透射光與反射光的繞射效率分別為

$$\eta_{T,i} = \operatorname{Re} \left[ \frac{k_{\parallel,zi}}{k_{I,0}} \right] \cdot |T_i|^2 \quad (2.77)$$

$$\eta_{R,i} = \operatorname{Re} \left[ \frac{k_{I,zi}}{k_{I,0}} \right] \cdot |R_i|^2 \quad (2.78)$$

其反射及出射光的繞射角度分別如下所示，其繞射級的分佈呈現錐形分佈。

$$\theta_{R,i} = \sin^{-1} \left( \frac{\lambda_0}{n_I \Lambda} \right) \hat{x} - \theta \hat{y} \quad (2.79)$$

$$\theta_{T,i} = \sin^{-1} \left( \frac{\lambda_0}{n_{II} \Lambda} \right) \hat{x} + \frac{n_I}{n_{II}} \theta \hat{y} \quad (2.80)$$

## 2.4 入射平面垂直光柵法線平面之 TM 極化態入射

接著模擬入射光為 TM 極化態入射的情況。入射區域 ( $z \leq z_0$ ) 與出射區域 ( $z \geq z_L$ ) 的磁場分佈為

$$H_{I,x} = H_{\text{inc}} + \sum_i R_i \exp[-j(k_{x_i}x + k_y y - k_{I,zi}z)] \quad , \quad z \leq z_0 \quad (2.81)$$

$$H_{II,x} = \sum_i T_i \exp\{-j[k_{x_i}x + k_y y + k_{II,zi}z]\} \quad , \quad z \geq z_L \quad (2.82)$$

其中

$$H_{\text{inc}} = \exp[-jk_0 n_I (\sin(\theta)y + \cos(\theta)z)] \quad (2.83)$$

而  $k_{x_i}$ ， $k_y$ ，及  $k_{\ell,zi}$  的定義與方程式 (2.45)-(2.47) 相同。在光柵的第  $\ell$  層中，電場與磁場的切線分量為

$$H_{gx} = \sum_i U_{x_i}(z) \exp[-j(k_{x_i}x + k_y y)] \quad (2.84)$$

$$E_{gy} = \frac{-j}{\omega \epsilon_0 \epsilon_r(x)} \sum_i S_{y_i}(z) \exp[-j(k_{x_i}x + k_y y)] \quad (2.85)$$

由 Maxwell 方程式，即方程式(2.50)及方程式(2.51)可知在光柵區域，電場與磁場有如下的關係

$$\frac{\partial}{\partial z} H_{gx} = j\omega\epsilon_0\epsilon_r(x)E_{gy} \quad (2.86)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} E_{gy} = j\omega\mu_0 H_{gx} + \frac{\partial}{\partial y} E_{gz} \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} E_{gz} = \frac{-jk_y^2}{\omega\epsilon_0\epsilon_r(x)} H_{gx} \quad (2.88)$$

將方程式(2.84)及方程式(2.85)代入上面的方程式，整理之後可得

$$\frac{dU_{xi}}{dz} = S_{yi} \quad (2.89)$$

$$\frac{dS_{yi}}{dz} = k_y^2 U_{xi} - k_0^2 \sum_p \epsilon_{i-p} U_{xp} \quad (2.90)$$

接下來的推演與與前一節的演算法相同，唯有須將繞射效率改為

$$\eta_{T,i} = \text{Re} \left[ \frac{k_{II,zi}/n_{II}^2}{k_{I,0}/n_I^2} \right] \cdot |T_i|^2 \quad (2.91)$$

$$\eta_{B,i} = \text{Re} \left[ \frac{k_{I,zi}}{k_{I,0}} \right] \cdot |R_i|^2 \quad (2.92)$$

## 2.5 光柵折射率表示式

我們主要討論線性極化態的電磁波入射至一維表面蝕刻型光柵，如圖(2.4)所示，其入射區及透射區的折射率分別為  $n_I$  以及  $n_{II}$ ，光柵向量  $K = 2\pi/\Lambda$  是延  $x$  軸，法線方向為  $z$  軸，光柵區的厚度為  $d$ ， $f$  為工作週期，其相對應的折射率隨著表面起伏而呈現週期變化，將之作傅利葉級數 (Fourier series) 展開，可表示為如下式

$$\begin{aligned}
 n^2(x) &= \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \tilde{n}_t \exp(i \frac{2\pi t}{\Lambda} x) \\
 &= \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \tilde{n}_t \exp(itK_x x)
 \end{aligned}
 \tag{2.93}$$

其中  $K_x$  為  $x$  軸上的光柵向量， $\tilde{n}_t$  為第  $t$  級傅利葉展開項的係數，表示如下

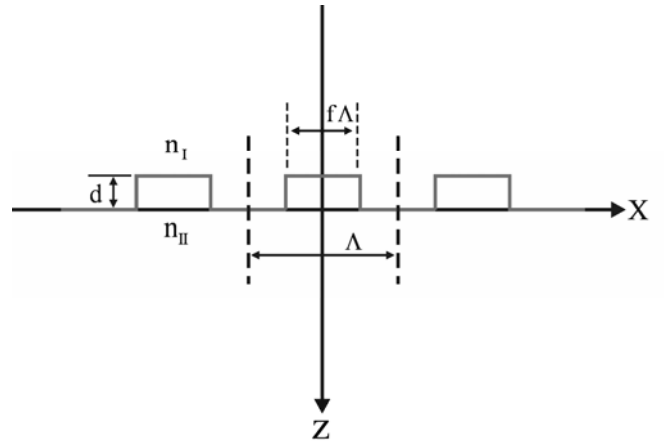


圖 2.4 單層二階光柵。

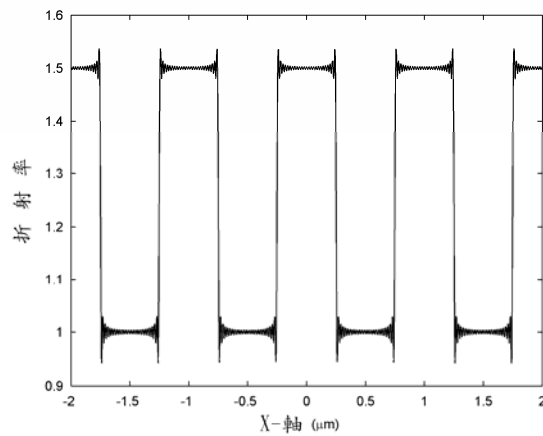


圖 2.5 光柵折射率分佈。

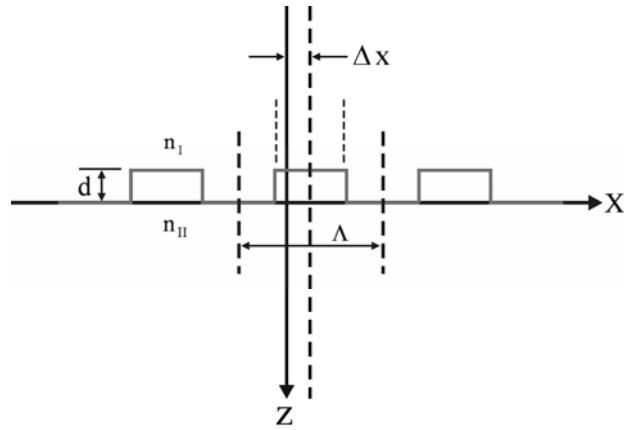


圖 2.6 單層二階光柵(偏移  $\Delta x$ )。

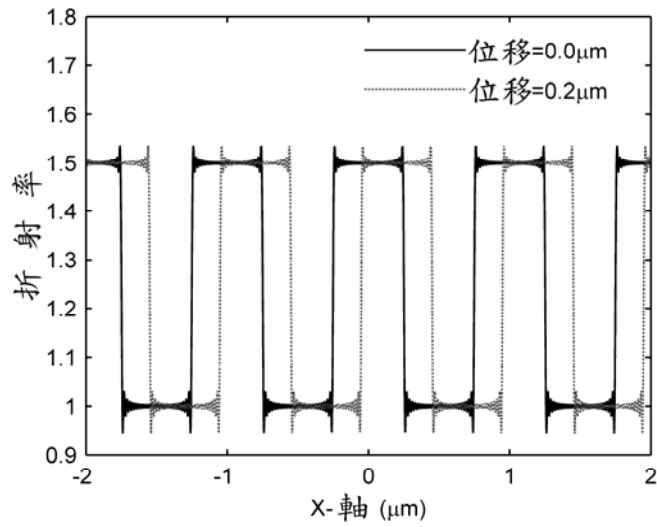


圖 2.7 光柵折射率分佈(位移  $0.2\mu\text{m}$ )。

$$\begin{aligned}\tilde{n}_0 &= \frac{1}{\Lambda} \left( \int_{-\Lambda/2}^{-f\Lambda/2} n_I^2 dx + \int_{-f\Lambda/2}^{f\Lambda/2} n_{II}^2 dx + \int_{f\Lambda/2}^{\Lambda/2} n_I^2 dx \right) \\ &= n_I^2(1-f) + n_{II}^2 f\end{aligned}\quad (2.94)$$

$$\begin{aligned}\tilde{n}_t &= \frac{1}{\Lambda} \left( \int_{-\Lambda/2}^{-f\Lambda/2} n_I^2 \exp(-itKx) dx + \int_{-f\Lambda/2}^{f\Lambda/2} n_{II}^2 \exp(-itKx) dx + \int_{f\Lambda/2}^{\Lambda/2} n_I^2 \exp(-itKx) dx \right) \\ &= (n_{II}^2 - n_I^2) \frac{\sin(\pi t f)}{\pi t}\end{aligned}\quad (2.95)$$

我們在這裡計算的僅有二階週期性光柵而已，而實際上的光柵剖面形狀當然不只這一種。圖(2.5)是在  $n_I = 1.0$ ， $n_{II} = 1.5$ ， $\Lambda = 1\mu\text{m}$ ，及  $f = 0.5$  時的模擬結果。由於本論文是探討上下層光柵的錯位所造成反射效率的改變，因此必須探討當光柵偏離中心位置時，如圖(2.6)所示，的傅利葉級數表示式。由於  $\tilde{n}_0$  不會隨著光柵的位移而改變，所以只需計算  $\tilde{n}_t$ 。設偏移量為  $\Delta x$ ，而  $\tilde{n}_t$  的計算如下

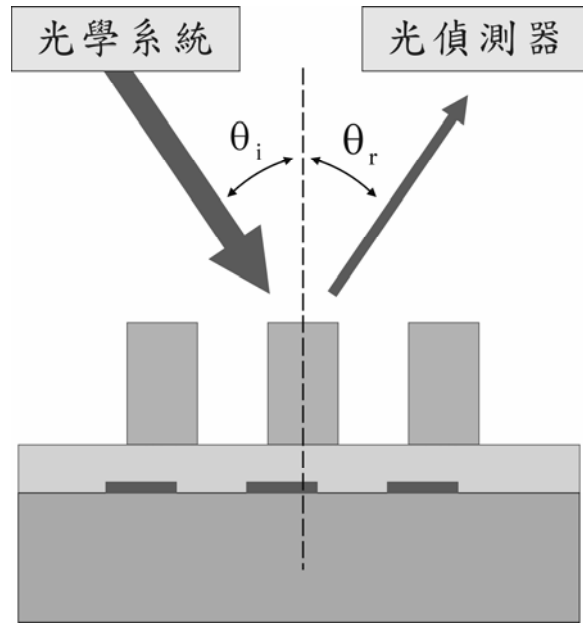
$$\begin{aligned}\tilde{n}_t &= \frac{1}{\Lambda} \left( \int_{-\Lambda/2}^{-f\Lambda/2+\Delta x} n_I^2 \exp(-itKx) dx + \int_{-f\Lambda/2+\Delta x}^{f\Lambda/2+\Delta x} n_{II}^2 \exp(-itKx) dx + \int_{f\Lambda/2+\Delta x}^{\Lambda/2} n_I^2 \exp(-itKx) dx \right) \\ &= (n_{II}^2 - n_I^2) \exp(-it \frac{2\pi\Delta x}{\Lambda}) \frac{\sin(\pi t f)}{\pi t}\end{aligned}\quad (2.96)$$

圖(2.7)為圖(2.5)的光柵位移  $0.2\mu\text{m}$  時的折射率分佈情形。

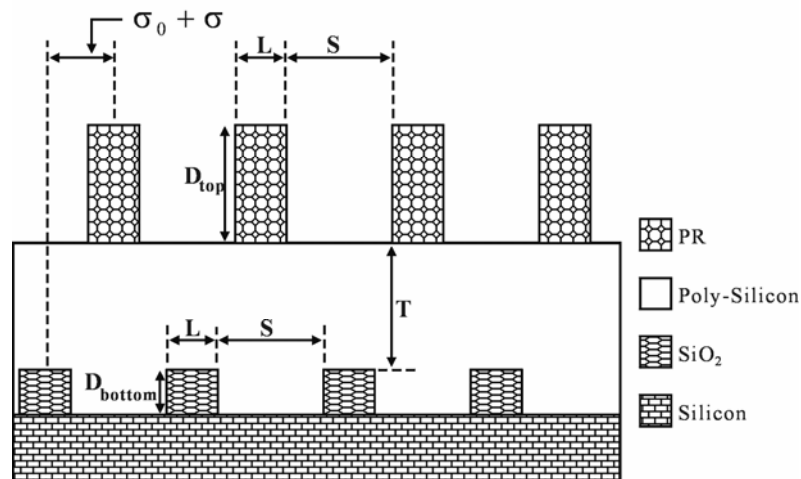
## 2.6 角度式散射儀之模擬

角度散射法所使用的散射儀其光學架構如圖(2.8a)所示，其量測方式為改變入射光入射在光柵上的入射角並藉由光偵測器接收其零級的繞射光。由於所量測的為入射光繞射的零級光，所以  $\theta_i = \theta_r$ 。一般此種量測儀器的光源波長為  $633\text{nm}$  的 He-Ne 雷射光，可掃瞄的角度大約為  $-45$  度至  $+45$  度。我們所模擬的疊對結構如圖(2.8b)所示，下層(bottom layer)為  $\text{SiO}_2$  所形成的光柵層，而上層(top layer)為光阻所形成的光柵層，介於上層與下層之間的為多晶矽(Poly-Silicon)，其為一均勻的薄層，而折射率如表 4.1 所示。L(line)代表為在一周期結構中線的寬度，在一周期結構中去除線寬度後所剩餘的寬度，即為線間距 S(space)。疊對(overlay)包括兩部份，一部份是由於在製作上下兩層光柵時製程誤差所造成的位移量，即是我們所需要量測的值( $\sigma$ )，另一部份是預置位移量( $\sigma_0$ )，它為設計的上層與下層之間相對位移值，其目的為增加量測的靈敏度。當預置位移量不同時，疊對誤差所導致的零級效率改變量將會有所不同，所以適當的選擇預置位移量將有助於增加量測的靈敏度。





(a)

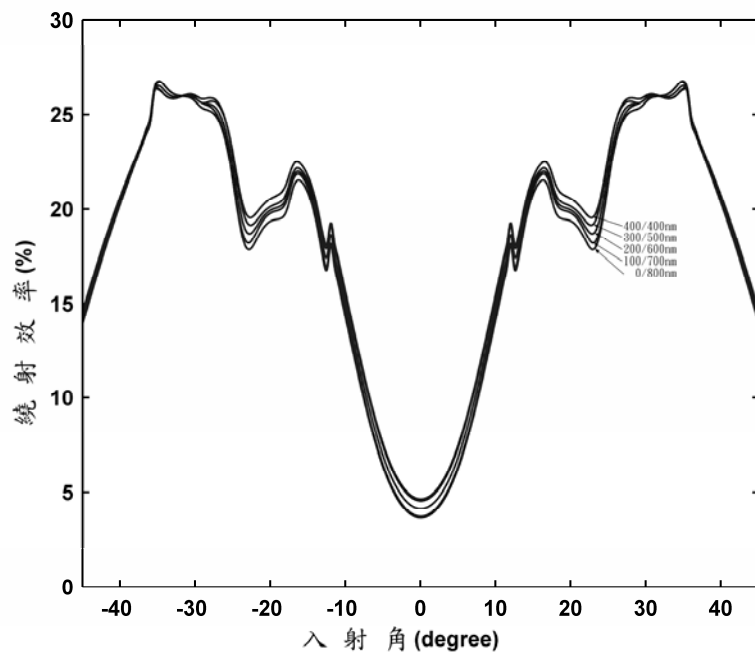
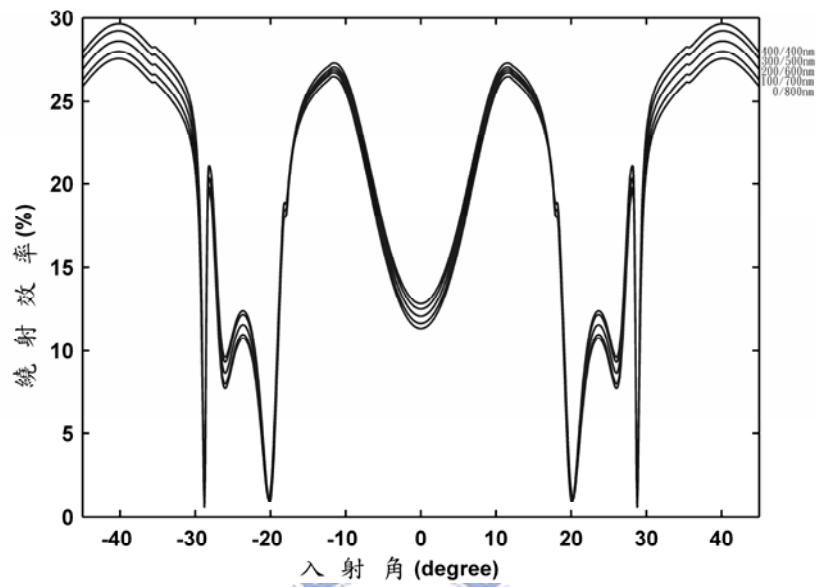


(b)

圖 2.8 角度散射儀及其光學架構(a)及疊對光柵之幾何結構(b)。

這裡所模擬的光柵參數為：週期=800nm， $L=400\text{nm}$ ， $S=400\text{nm}$ ， $D_{top} = 850\text{nm}$ ， $D_{bottom} = 5\text{nm}$ ， $T = 250\text{nm}$ ， $\sigma_0 = 0\text{nm}$ 。圖(2.9a)及圖(2.9b)分別為 TE 模態(s 偏光)及 TM 模態(p 偏光)下，疊對由 0nm 變化至 800nm 的曲線圖，其中橫軸為入射光入射在疊對光柵上的角度，縱軸為零級繞射效率。圖中的每一根曲線代表不同的疊對。由圖中可以知道當疊對超過光柵週期的一半時，其曲線將重複；例如當疊對為 300nm 時所模擬的曲線與當疊對為 500nm 時是相同的，這將造成疊對的誤判。此問題可由非對稱光柵結構來解決。從圖(2.9a)的 TE 模態模擬圖中可

以看出，當入射光在 40 度及 0 度附近因疊對位移有較大的零級繞射效率變化量，即是量測的靈敏度在這兩個區域較高。然而在 TM 模態下其靈敏度沒有 TE 模態來的大，故一般只量測 TE 模態下的繞射效率。



(b)

圖 2.9 TE(a)及 TM(b)模態下，不同的入射角對零級之反射效率曲線。

## 2.7 干涉式散射儀之模擬

在散射法的分析中，發現當入射光為零度及大角度入射時有較好的靈敏度，如圖(2.9)所示。此現象告訴我們，不需對整個角度範圍作量測，只需對一區域或一固定角度作量測，就可獲得相當好的量測精度。圖(2.10)是我們所採用的光學量測方式。在圖(2.10b)中，(1)是一垂直入射至光柵的平面波，(2)和(3)為(1)的零級及+1級繞射光，而(3)的繞射光經由一可調距離的反射鏡，由原光路反射(回朔反射, retro-reflection)至光柵上(4)，而此入射光束的+1級繞射光(5)由垂直方向出射。所以當光束(1)入射至光柵上時，在垂直方向會有兩道反射光，由此兩道光干涉強度，來分析所量測的光柵結構。由於此量測架構為垂直入射至疊對光柵，所以本身已具有接近散射儀量測的靈敏度，而再利用干涉的方式再一次的提高量測的靈敏度，如此整體的量測靈敏度將大於散射儀。

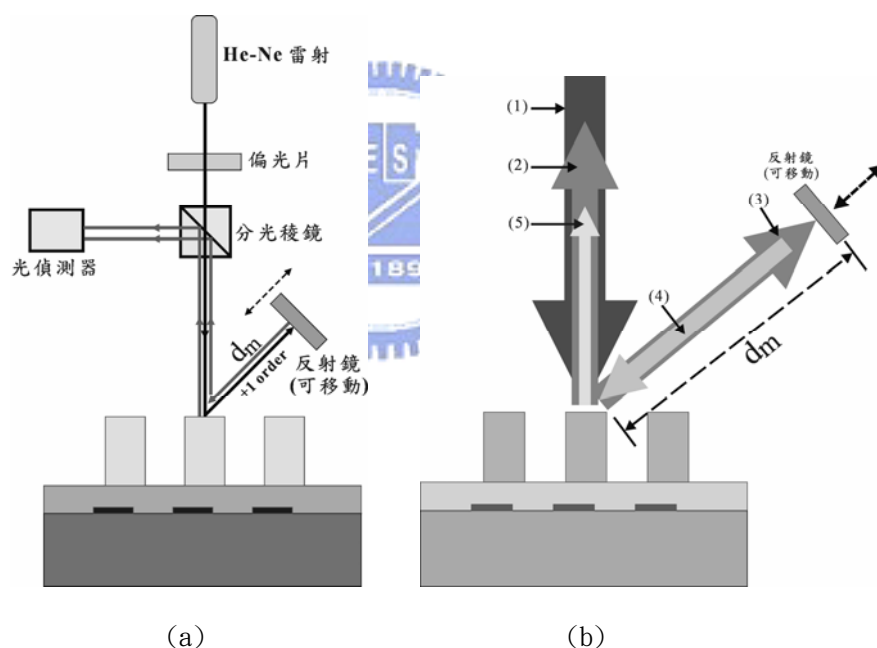


圖 2.10 干涉式散射儀之光學架構。

我們必須修改嚴格耦合波的演算法來符合此一光學架構的模擬，因為前面所介紹的嚴格耦合波的入射光為單一的平面波入射，而干涉式散射儀的光學架構其入射光可看成是兩道具有相同波長而有不同的振幅及相位的光入射至光柵上，所以我們必須對此做一修正。由 Chateau 所提出的演算法，可以用矩陣形式來描述此一系統，即

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{f}_F^{(i-v)} \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{b}_F^{(i-v)} \\ \vdots \end{bmatrix} = [\mathbf{C}(z_0)]^{-1} \left\{ \prod_{\ell=0}^{m-1} [\mathbf{G}_\ell] \right\} [\mathbf{C}(z_m)] \begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{f}_L^{(i-v)} \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{b}_L^{(i-v)} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.97)$$

其中  $\mathbf{f}_F$ ， $\mathbf{b}_F$ ，及  $\mathbf{f}_L$  分別為入射光束，反射光束，及透射光束的複數振幅。 $\mathbf{b}_L$  為由透射區反射的複數振幅，透射區無反射光故為零。 $[\mathbf{C}(z_0)]$  及  $[\mathbf{C}(z_m)]$  為入射區及透射區的介面矩陣， $[\mathbf{G}_\ell]$  為光柵區第  $\ell$  層的特性矩陣。對於此系統  $\mathbf{f}_F$  及  $\mathbf{b}_F$  可以定義如下

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{f}_F^{(-2)} \\ \mathbf{f}_F^{(-1)} \\ \mathbf{f}_F^{(0)} \\ \mathbf{f}_F^{(+1)} \\ \mathbf{f}_F^{(+2)} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ A_{+1} e^{i\theta_{f,+1}} \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.98)$$



$$\begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{b}_F^{(-1)} \\ \mathbf{b}_F^{(0)} \\ \mathbf{b}_F^{(+1)} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ B_{-1} e^{i\theta_{b,-1}} \\ B_0 e^{i\theta_{b,0}} \\ B_{+1} e^{i\theta_{b,+1}} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.99)$$

其中  $A_{+1}$  及  $\theta_{f,+1}$  為 +1 級入射光束的振幅與相位， $B_n$  及  $\theta_{b,n}$  為第  $n$  級繞射反射光束的振幅與相位。+1 級入射光束是由 +1 級的繞射反射光之逆向回饋所形成，故 +1 級的入射光束可以描述如下

$$A_{+1}^2 = \eta_m \cdot B_{+1}^2 \quad (2.100)$$

$$\theta_{f,+1} = \theta_{b,+1} + \frac{4\pi}{\lambda} d_m + \Delta\theta_m \quad (2.101)$$

其中  $\eta_m$  為反射鏡之反射效率， $d_m$  為光柵與反射鏡之間的初始距離，如圖(2.10b)所示。 $\Delta\theta_m$  是由於反射鏡移動所造成的相移。按流程圖(2.11)所示的疊代法，我們可以得到回朔光束正確的振幅  $A_{+1}$  及相位  $\theta_{f,+1}$ 。則可得到反射光束  $\mathbf{b}_F^{(0)}$  的振幅

$B_0$  及相位  $\theta_{b,0}$ ，而零級的繞射效率可獲得如下

$$\eta_B^{(0)} = |b_F^{(0)}|^2 \quad (2.102)$$

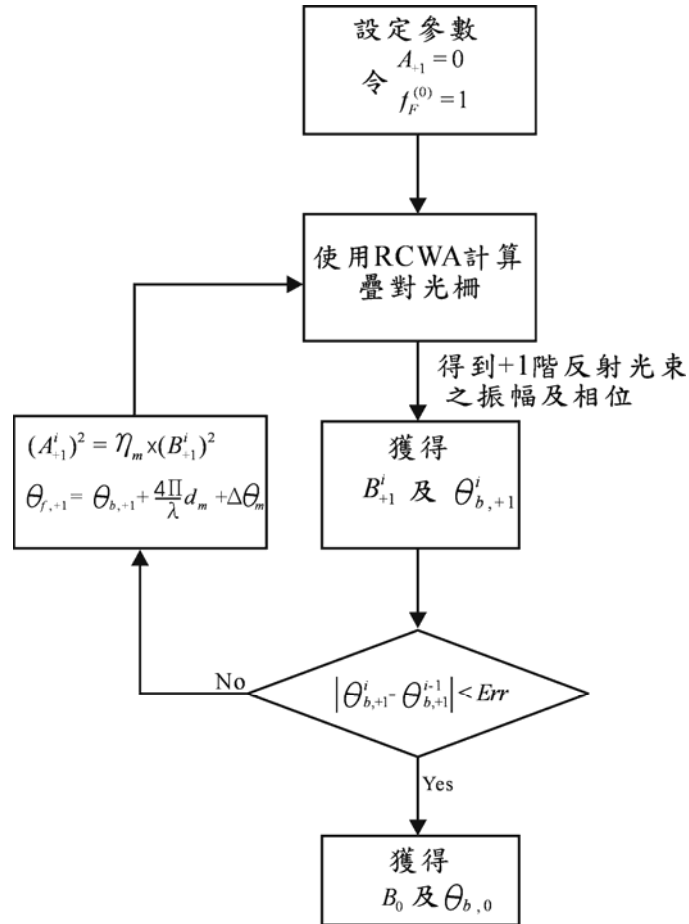


圖 2.11 干涉式散射儀之計算流程圖。

接著模擬疊對光柵在此干涉式散射量測系統中的情況，所採用的疊對光柵參數與前面相同。圖(2.12)為數值模擬的結果，其中橫軸是由於反射鏡移動所等效的相位改變量(phase shift)，縱軸為繞射效率。每條曲線代表不同的疊對，例如標示 150nm 的曲線表示其疊對為 150nm，其曲線變化比散射儀來得明顯，此點將有利於逆向的回推。

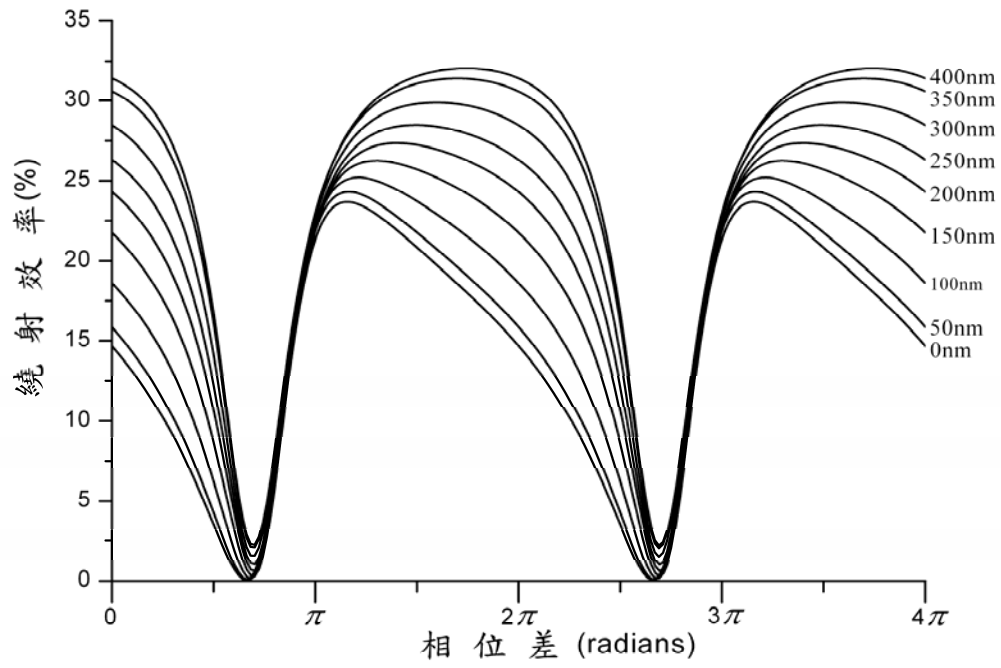


圖 2.12 干涉式散射儀數值模擬結果。



### 第三章 邊界元素法

邊界元素法(boundary element method)是利用格林函數(Green function)把嚴格電磁場的邊值問題等價地轉化為邊界積分方程的問題。邊界積分可以使計算維度降低，計算量減少，計算精確度高，且可利用有限元素法(finite element method)來求解邊界積分方程。邊界元素法對於有限或無限場域的有限邊界離散求解非常方便，容易處理開域的問題。本章主要分四部份，(1)如何利用格林函數推導出邊界積分方程，(2)多區域的邊界積分方程之推導，(3)利用有限元素法求解邊界積分方程。

#### 3.1 無限空間之格林函數

在線性，均勻，各向同性介質的無限空間中，任意瞬時空間電荷分佈為 $g(r,t)$ ，則在觀察點 $r$ 所產生的標量波函數應滿足非齊次標量波動方程

$$\nabla^2 u(r,t) - \frac{1}{v} \frac{\partial^2 u(r,t)}{\partial t^2} = -g(r,t) \quad (3.1)$$

式中 $v = 1/\sqrt{\mu\epsilon}$ 是介質中的波速， $\mu$ 及 $\epsilon$ 分別為介質的導磁係數及介電係數。標量波函數 $g(r,t)$ 可以表示標量位(電位，磁位)，也可以表示為向量場的直角分量(電場，磁場)。在電磁學中已給出上式的解為

$$u(r,t) = \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{g(r',t-R/v)}{R} dV' \quad (3.2)$$

$$R = |r - r'| \quad (3.3)$$

其中積分對象為體積 $V$ 中的點輻射源(source point)以 $dV'$ 表示。上式表明，在空間 $r$ 處和時間 $t$ 的 $u(r,t)$ 是由公式右邊在空間 $r'$ 處較早時間 $t - R/v$ 所產生的，時間上延遲了 $R/v$ ，因此稱為延遲位。如果電荷集中於某一點 $r'_0$ ，其電量隨時間以 $f_0(t)$ 的規律變化，即 $g(r',t) = \delta(r' - r'_0)f_0(t)$ ，令這種特定情況的 $u(r,t)$ 為 $G_0(r,r'_0;t)$ ，則由(3.2)式給出

$$G_0(r,r'_0;t) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|r - r'_0|} f_0(t - R/v) \quad (3.4)$$

一般  $g(\mathbf{r}', t)$  隨時間的變化規律可能逐點不同。為說明這一點，可用  $f_{r'}(t)$  來表示  $r'$  點上的電荷密度變化規律，而將  $g(\mathbf{r}', t)$  寫作  $g(\mathbf{r}')f_{r'}(t)$ 。使上式中  $r'_0$  為體積  $V$  中的任一點  $r'$ ，代入(3.2)式就可得到

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int_V g(\mathbf{r}', t) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) dV' \quad (3.5)$$

這個  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$  滿足方程

$$\nabla'^2 G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = -\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) f_{r'}(t) \quad (3.6)$$

上式中的  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$  稱為無限空間中時域標量格林函數。它隨時間的變化規律取決於源在各點的變化，這顯然是不便於計算的。下面將給出另一種形式的時域標量格林函數。如果場源不隨時間改變，即  $\partial/\partial t = 0$ ，(3.1)式即是 Poisson 方程，而(3.2)式即是靜電位的表示式，與場源隨時間的改變形式無關，且介質無損耗，它是在特定情況下的解。一般情形應當求場源和場對時間的傅利葉(Fourier)積分，而對其頻譜的每一分量求解。頻譜的各分量是頻率不同的輻射源的場。對於此輻射場，(3.6)式變為如下非齊次方程

$$\nabla'^2 G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) - k^2 G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = -\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) e^{j\omega t} \quad (3.7)$$

其中

$$k^2 = \omega^2 \sqrt{\mu\epsilon} = \frac{\omega^2}{v^2} \quad (3.8)$$

(3.7)式的解為

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \frac{e^{j(\omega t - k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3.9)$$

一般寫作

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{j\omega t} \quad (3.10)$$

(3.7)式及(3.9)式可以表示成



$$\nabla'^2 G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k^2 G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad (3.11)$$

和

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{-jk|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (3.12)$$

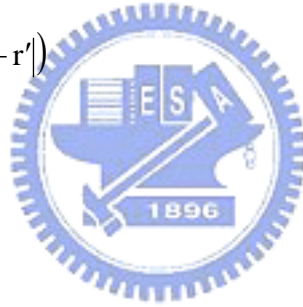
而  $u(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r})e^{j\omega t}$ ，則由下式給出

$$u(\mathbf{r}) = \int_V G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') dV' \quad (3.13)$$

上式中  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  是無限空間的頻域標量格林函數，它是單位點輻射源的位。(3.12) 式是三維無限空間的頻域標量格林函數，而二維無限空間的頻域標量格林函數可由柱座標系統導出如下

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{j}{4} H_0^{(2)}(k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \quad (3.14)$$

其中  $H$  為 Hankel 函數。



### 3.2 格林函數之輻射條件

為了用體積  $V$  中的源和邊界面  $S$  上的邊值來表示空間某點的位，需使用格林公式。格林公式是數理方法的一個基本公式，由高斯散度定理

$$\int_V \nabla' \cdot A dV' = \oint_S A \cdot dS' \quad (3.15)$$

其中算符  $\nabla'$  運算對象為體積  $V$  中的點輻射源，令  $A = v\nabla'u$ ，這裡的  $v$  和  $u$  為兩任意標量函數，在體積內二階導數連續，在邊界上一階導數連續。利用恆等式

$$\nabla' \cdot A = \nabla' \cdot (v\nabla'u) = v\nabla'^2 u - \nabla'v\nabla'u \quad (3.16)$$

得到

$$\int_V (v\nabla'^2 u - \nabla'v\nabla'u) dV' = \oint_S (v\nabla'u) \cdot dS' = \oint_S v \frac{\partial u}{\partial \hat{n}'} dS' \quad (3.17)$$

式中  $\hat{n}$  是邊界面  $S$  上，外法線的單位向量。上式稱為標量格林第一恆等式。將式中的  $v$  和  $u$  交換位置後的恆等式與原式相減，可得

$$\begin{aligned} \int_V (v\nabla'^2 u - u\nabla'^2 v) dV' &= \oint_S (v\nabla' u - u\nabla' v) \cdot dS' \\ &= \oint_S \left( v \frac{\partial u}{\partial \hat{n}'} - u \frac{\partial v}{\partial \hat{n}'} \right) dS' \end{aligned} \quad (3.18)$$

上式稱為標量格林第二恆等式或標量格林定理。現在先將(3.18)式用於單頻輻射場，使  $u$  滿足方程

$$\nabla'^2 u + k^2 u = -g(r') \quad (3.19)$$

並取

$$v = \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} \quad (3.20)$$

它滿足方程

$$\nabla'^2 v + k^2 v = -\delta(r' - r) \quad (3.21)$$

則由(3.18)式得到

$$\int_V \{v(-k^2 u - g(r')) - u(k^2 v + \delta(r' - r))\} dV' = \oint_S \left( v \frac{\partial u}{\partial \hat{n}'} - u \frac{\partial v}{\partial \hat{n}'} \right) dS' \quad (3.22)$$

由此可得

$$\begin{aligned} u(r) &= \int_V \frac{1}{4\pi|r-r'|} g(r') e^{-jk|r-r'|} dV' + \\ &\quad \oint_S \frac{1}{4\pi|r-r'|} \left\{ \frac{\partial u(r')}{\partial \hat{n}'} + \left[ \frac{1}{|r-r'|} u(r') + jku(r') \right] \frac{\partial}{\partial \hat{n}'} |r-r'| \right\} e^{-jk|r-r'|} dS' \end{aligned} \quad (3.23)$$

式中的體積分源分佈  $g(r)$  是指包含輻射源的各種形式的一般源分佈。現在研究上面公式的面積分項，如圖(3.1)所示，對於外域問題，包圍體積  $V$  的界面  $S$  是由有限界面  $S_0$  和無限大球面  $S_\infty$  所組成的，因而  $S = S_0 + S_\infty$  也是無限界面。假定  $g(r') = 0$ ，則上式可寫為

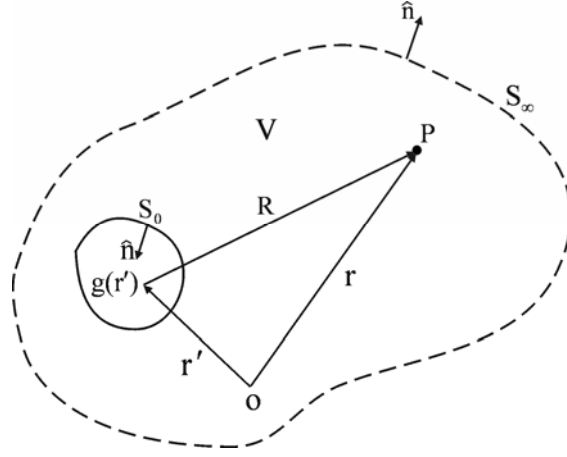


圖 3.1 外域問題。

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{r}) = & \frac{1}{4\pi} \int_{S_0} \left[ \frac{e^{-jk|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial \hat{n}'} - u(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial \hat{n}'} \left( \frac{e^{-jk|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) \right] dS' \\
 & + \frac{1}{4\pi} \int_{S_\infty} \left[ \frac{e^{-jk|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial \hat{n}'} - u(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial \hat{n}'} \left( \frac{e^{-jk|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) \right] dS' \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

我們將  $S_\infty$  擴大為無限大球面，是為了得到無限空間的解。當  $r' \rightarrow \infty$  時，有  $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow r' (r' \gg r)$  和  $\partial/\partial \hat{n}' \rightarrow \partial/\partial r'$ ，因而

$$\begin{aligned}
 & \int_{S_\infty} \left[ \frac{e^{-jkr'}}{r'} \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial r'} - u(\mathbf{r}') \left( -jk - \frac{1}{r'} \right) \left( \frac{e^{-jkr'}}{r'} \right) \right] dS' \\
 & = \int_{S_\infty} \left\{ \left[ \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial r'} + jku(\mathbf{r}') \right] \frac{e^{-jkr'}}{r'} + u(\mathbf{r}') \frac{e^{-jkr'}}{r'^2} \right\} dS' \quad (3.25)
 \end{aligned}$$

根據物理概念，當  $r' \rightarrow \infty$  時， $S_\infty$  面上的積分應趨於零，因為無限遠處就意味著互無影響。這就要求

$$\int_{S_\infty} u(\mathbf{r}') \frac{e^{-jkr'}}{r'^2} dS' \rightarrow 0 \quad (3.26)$$

和

$$\int_{S_\infty} \left[ \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial \hat{\mathbf{r}}'} + jku(\mathbf{r}') \right] \frac{e^{-jk|\mathbf{r}'|}}{r'} dS' \rightarrow 0 \quad (3.27)$$

因為  $S_\infty$  的面積與  $r'^2$  成正比，所以要求

$$\begin{cases} ru(\mathbf{r}) \rightarrow \text{有限值 (u 在無窮遠處為零)} \\ \left[ \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial \hat{\mathbf{r}}'} + jku(\mathbf{r}') \right] \rightarrow 0 \end{cases} \quad (3.28)$$

這兩個條件稱為輻射條件。它是在求得無限空間中解的各種表達式時用以檢驗的條件。

在(3.18)式中，如令  $v = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ，有

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{-jk|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (3.29)$$

則有(3.19)和(3.21)兩方程式，可將(3.23)式改用標量格林函數表示為

$$u(\mathbf{r}) = \int_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') dV' + \oint_S \left[ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial \hat{\mathbf{n}}'} - u(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \hat{\mathbf{n}}'} \right] dS' \quad (3.30)$$

現在只考慮(3.30)式中的面積分項，通過類似於(3.28)式的推導，並應用(3.28)式的結果，可以得到標量格林函數的輻射條件為

$$\begin{cases} \lim_{r \rightarrow \infty} rG = \text{有限值} \\ \lim_{r \rightarrow \infty} \left( \frac{\partial G}{\partial \mathbf{r}} + jkG \right) = 0 \end{cases} \quad (3.31)$$

(3.30)式為三維標量格林函數而二維標量格林函數表示如下

$$u(\mathbf{r}) = \int_S G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') dS' + \oint_{\Gamma} \left[ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial u(\mathbf{r}')}{\partial \hat{\mathbf{n}}'} - u(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \hat{\mathbf{n}}'} \right] d\Gamma' \quad (3.32)$$

其中

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{j}{4} H_0^{(2)}(k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \quad (3.33)$$

而其輻射條件與(3.31)式相同。

### 3.3 二維邊界元素法

當考慮到電腦的執行速度，及電腦記憶體容量時，三維邊界元素法在計算上需要工作站級的電腦系統及相當長的計算時間，所以在實際應用上有一定的限制。二維邊界元素法則較容易在個人電腦上執行，不需太久的計算時間，且我們提出一有效降低記憶體需求的演算法，及奇異點積分的解決方法，這些都會有效的減少計算的時間，所以我們將在本節探討二維邊界元素法。

#### 3.3.1 二維二區邊界積分方程

二維區域可藉由一邊界 $\Gamma_1$ 分割成兩區 $S_1$ 及 $S_2$ ，如圖(3.2)所示。 $S_1$ 及 $S_2$ 的邊界外法線向量分別為 $\hat{n}_1$ 及 $\hat{n}_2$ ，而折射率分別為 $n_1$ 及 $n_2$ 。其中入射場位於 $S_1$ 內，入射角度為 $\theta$ ，而 $S_2$ 無入射場存在。 $S_1$ 及 $S_2$ 分別滿足二維標量格林函數，表示如下

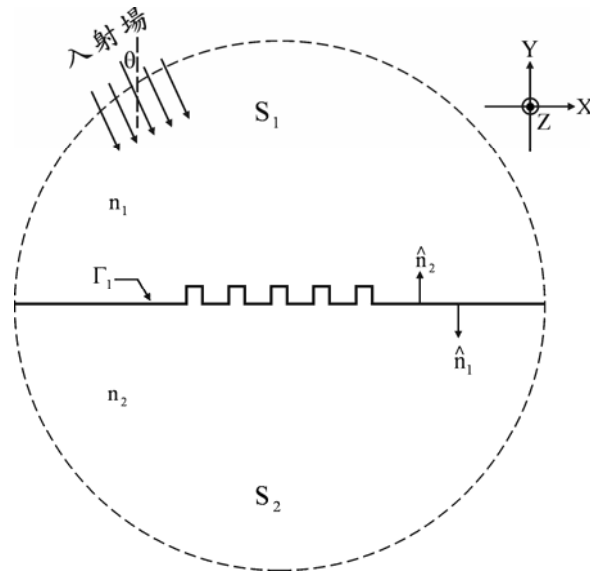


圖 3.2 區域分割示意圖。

$$-u(r_1) + \oint_{\Gamma_1} \left[ G_1(r_1, r'_1) \frac{\partial u(r'_1)}{\partial \hat{n}'_1} - u(r'_1) \frac{\partial G_1(r_1, r'_1)}{\partial \hat{n}'_1} \right] d\Gamma' = - \int_{S_1} G_1(r_1, r'_1) g(r'_1) dS' \quad r_1 \in S_1 \quad (3.34)$$

$$-u(r_2) + \oint_{\Gamma_1} \left[ G_2(r_2, r'_1) \frac{\partial u(r'_1)}{\partial \hat{n}'_2} - u(r'_1) \frac{\partial G_2(r_2, r'_1)}{\partial \hat{n}'_2} \right] d\Gamma' = 0 \quad r_2 \in S_2 \quad (3.35)$$

其中 $G_1$ 與 $G_2$ 分別為 $S_1$ 與 $S_2$ 的二維標量格林函數。因為 $S_2$ 無入射場存在，所以

$g(r'_2)=0$  以至於(3.35)式右項為零。當  $r_1$  和  $r_2$  位於邊界  $\Gamma_1$  上時，則(3.34)式及(3.35)式可表示如下

$$-u_{\Gamma_1, s_1}(r_{\Gamma_1}) + \oint_{\Gamma_1} \left[ G_1(r_{\Gamma_1}, r'_{\Gamma_1}) q_{\Gamma_1, s_1}(r'_{\Gamma_1}) - u_{\Gamma_1, s_1}(r'_{\Gamma_1}) \frac{\partial G_1(r_{\Gamma_1}, r'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{n}'_1} \right] d\Gamma' = - \int_{\Gamma_1} G_1(r_{\Gamma_1}, r'_{\Gamma_1}) g(r'_{\Gamma_1}) d\Gamma' \quad (3.36)$$

$$-u_{\Gamma_1, s_2}(r_{\Gamma_1}) + \oint_{\Gamma_1} \left[ G_2(r_{\Gamma_1}, r'_{\Gamma_1}) q_{\Gamma_1, s_2}(r'_{\Gamma_1}) - u_{\Gamma_1, s_2}(r'_{\Gamma_1}) \frac{\partial G_2(r_{\Gamma_1}, r'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{n}'_2} \right] d\Gamma' = 0 \quad (3.37)$$

其中

$$q_{\Gamma_1, s_1}(r'_{\Gamma_1}) = \frac{\partial u(r'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{n}'_1} \quad (3.38)$$

$$q_{\Gamma_1, s_2}(r'_{\Gamma_1}) = \frac{\partial u(r'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{n}'_2} \quad (3.39)$$

(3.36)式及(3.37)式為二維二區的邊界積分方程，接著我們將利用有限元素法去求解(3.36)式及(3.37)式。



### 3.3.2 二維二區邊界元素法

本節將說明如何使用有限元素法去求解邊界積分方程式(3.36)式及(3.37)式。圖(3.2)中的邊界  $\Gamma$  是一維的曲線。可用有限元素法進行離散化，把邊界  $\Gamma$  分成  $n$  段，每段稱為元素，元素可以是直線，也可以是曲線，且長度不需要相同，如圖(3.3)所示。則  $u_{\Gamma}$  及  $q_{\Gamma}$  被離散成元素  $u_{\Gamma}^j$  及  $q_{\Gamma}^j$ 。

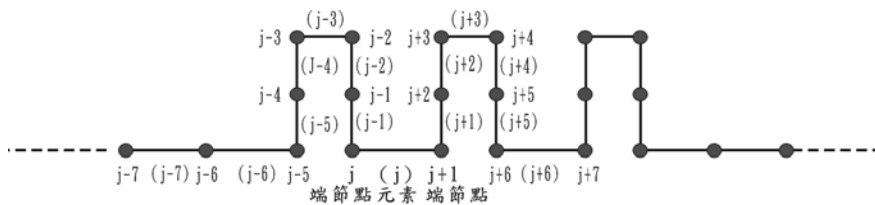


圖 3.3 線性元素。

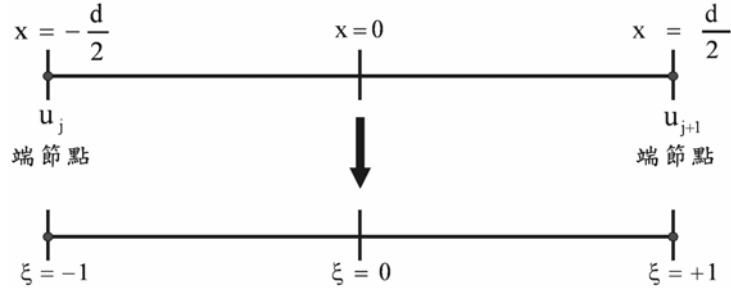


圖 3.4 元素(j)上的座標。

元素上需要計算未知量的那些點，稱做節點(node)，而元素的兩端稱為端點。節點的數目及取法隨著元素的種類不同而不同，可以分為定常元素，線性元素，混合元素和高次元素，在本論文中將使用線性元素。線性元素上的  $u$ 、 $q$  值在元素上是座標的線性函數，而節點位於元素兩端的端點，所以元素是直線段。如圖(3.4)所示，設元素(j)上的無量網局部座標為  $\xi = 2x/d$ ， $d$  為元素的長度，則元素上任一點  $u$ 、 $q$  值可以用兩個插值函數  $N_1$  及  $N_2$  來表示，例如  $u$ ，設

$$u = a + b\xi \quad (3.40)$$

其中  $a$ ， $b$  為未知數，由於

$$\begin{cases} u = u_{\Gamma}^j & , \text{當 } \xi = -1 \\ u = u_{\Gamma}^{j+1} & , \text{當 } \xi = +1 \end{cases} \quad (3.41)$$

可得

$$u(\xi) = N_1 u_{\Gamma}^j + N_2 u_{\Gamma}^{j+1} \quad (3.42)$$

其中

$$N_1 = \frac{1-\xi}{2} \quad , \quad N_2 = \frac{1+\xi}{2} \quad (3.43)$$

對於  $q$  也有同樣形式的公式。所以對(j)元素的  $u(\xi)$  及  $q(\xi)$  可以表示如下

$$u(\xi) = N_1 u_{\Gamma}^j + N_2 u_{\Gamma}^{j+1} = [N_1 \quad N_2] \begin{bmatrix} u_{\Gamma}^j \\ u_{\Gamma}^{j+1} \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

$$\mathbf{q}(\xi) = N_1 \mathbf{q}_\Gamma^j + N_2 \mathbf{q}_\Gamma^{j+1} = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_\Gamma^j \\ \mathbf{q}_\Gamma^{j+1} \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

則(3.36)式可表示如下，

$$\begin{aligned} -\mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^i + \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{\Gamma_{1,j}} G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{\Gamma_{1,S_1}}^j \\ \mathbf{q}_{\Gamma_{1,S_1}}^{j+1} \end{bmatrix} d\Gamma'(\xi) \right\} \\ - \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{\Gamma_{1,j}} \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_{1,S_1}}^j \\ \mathbf{u}_{\Gamma_{1,S_1}}^{j+1} \end{bmatrix} \frac{\partial G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_1} d\Gamma'(\xi) \right\} = - \sum_{j=1}^m \int_{\Gamma_{1,j}} G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \mathbf{g}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) d\Gamma'(\xi) \end{aligned} \quad (3.46)$$

由於積分內的 $\mathbf{u}$ 及 $\mathbf{q}$ 為定值，所以可以提出至積分外，

$$\begin{aligned} -\mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^i + \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{\Gamma_{1,j}} G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \end{bmatrix} d\Gamma'(\xi) \right\} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{\Gamma_{1,S_1}}^j \\ \mathbf{q}_{\Gamma_{1,S_1}}^{j+1} \end{bmatrix} \\ - \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{\Gamma_{1,j}} \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \end{bmatrix} \frac{\partial G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_1} d\Gamma'(\xi) \right\} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_{1,S_1}}^j \\ \mathbf{u}_{\Gamma_{1,S_1}}^{j+1} \end{bmatrix} = - \sum_{j=1}^m \int_{\Gamma_{1,j}} G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \mathbf{g}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) d\Gamma'(\xi) \end{aligned} \quad (3.47)$$

其中 $i$ 是觀察點的位置， $j$ 為點輻射源的位置。同樣地，(3.37)式可改寫如下

$$\begin{aligned} -\mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2}^i + \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{\Gamma_{1,j}} G_2(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \end{bmatrix} d\Gamma'(\xi) \right\} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{\Gamma_{1,S_2}}^j \\ \mathbf{q}_{\Gamma_{1,S_2}}^{j+1} \end{bmatrix} \\ - \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{\Gamma_{1,j}} \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \end{bmatrix} \frac{\partial G_2(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_2} d\Gamma'(\xi) \right\} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_{1,S_2}}^j \\ \mathbf{u}_{\Gamma_{1,S_2}}^{j+1} \end{bmatrix} = 0 \end{aligned} \quad (3.48)$$

在 $S_1$ 區中，令

$$\begin{cases} \int_{\Gamma_{1,j}} N_1 \frac{\partial G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_1} d\Gamma'(\xi) = s_1 H_{j,1}^i \\ \int_{\Gamma_{1,j}} N_2 \frac{\partial G_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_1} d\Gamma'(\xi) = s_1 H_{j,2}^i \end{cases} \quad (3.49)$$



$$\begin{cases} \int_{\Gamma_{1,j}} \mathbf{G}_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_1) \mathbf{N}_1 d\Gamma'(\xi) = s_1 \mathbf{G}_{j,1}^i \\ \int_{\Gamma_{1,j}} \mathbf{G}_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_1) \mathbf{N}_2 d\Gamma'(\xi) = s_1 \mathbf{G}_{j,2}^i \end{cases} \quad (3.50)$$

$$s_1 \phi_{\Gamma_{1,j}}^i = \int_{\Gamma_j} \mathbf{G}_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_1) \mathbf{g}(\mathbf{r}'_1) d\Gamma'(\xi) \quad (3.51)$$

則(3.47)式可改寫成

$$-\mathbf{u}_{\Gamma_1, s_1}^i - \sum_{j=1}^m [s_1 \mathbf{H}_{j,1}^i \quad s_1 \mathbf{H}_{j,2}^i] \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma, S_1}^j \\ \mathbf{q}_{\Gamma, S_1}^{j+1} \end{bmatrix} + \sum_{j=1}^m [s_1 \mathbf{G}_{j,1}^i \quad s_1 \mathbf{G}_{j,2}^i] \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{\Gamma, S_1}^j \\ \mathbf{q}_{\Gamma, S_1}^{j+1} \end{bmatrix} = -\sum_{j=1}^m s_1 \phi_{\Gamma_{1,j}}^i \quad (3.52)$$

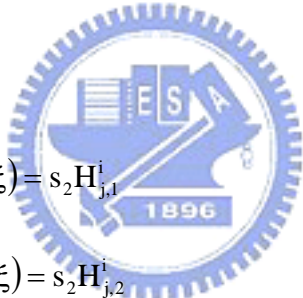
假設觀察點*i*是從1至*n*，而元素*j*是從1至*m*，且*m* = *n* - 1，則(3.52)式可展開如下

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} (1+s_1 \mathbf{H}_{1,1}^1) & (0+s_1 \mathbf{H}_{1,2}^1) \\ (0+s_1 \mathbf{H}_{1,1}^2) & (0+s_1 \mathbf{H}_{1,2}^2) \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} (0+s_1 \mathbf{H}_{2,1}^1) & (0+s_1 \mathbf{H}_{2,2}^1) \\ (1+s_1 \mathbf{H}_{2,1}^2) & (0+s_1 \mathbf{H}_{2,2}^2) \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} (0+s_1 \mathbf{H}_{3,1}^1) & (0+s_1 \mathbf{H}_{3,2}^1) \\ (0+s_1 \mathbf{H}_{3,1}^2) & (0+s_1 \mathbf{H}_{3,2}^2) \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} (0+s_1 \mathbf{H}_{m,1}^1) & (0+s_1 \mathbf{H}_{m,2}^1) \\ (0+s_1 \mathbf{H}_{m,1}^2) & (0+s_1 \mathbf{H}_{m,2}^2) \end{bmatrix} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \begin{bmatrix} (0+s_1 \mathbf{H}_{1,1}^{n-1}) & (0+s_1 \mathbf{H}_{1,2}^{n-1}) \\ (0+s_1 \mathbf{H}_{1,1}^n) & (0+s_1 \mathbf{H}_{1,2}^n) \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} (0+s_1 \mathbf{H}_{2,1}^{n-1}) & (0+s_1 \mathbf{H}_{2,2}^{n-1}) \\ (0+s_1 \mathbf{H}_{2,1}^n) & (0+s_1 \mathbf{H}_{2,2}^n) \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} (0+s_1 \mathbf{H}_{3,1}^{n-1}) & (0+s_1 \mathbf{H}_{3,2}^{n-1}) \\ (0+s_1 \mathbf{H}_{3,1}^n) & (0+s_1 \mathbf{H}_{3,2}^n) \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} (0+s_1 \mathbf{H}_{m,1}^{n-1}) & (0+s_1 \mathbf{H}_{m,2}^{n-1}) \\ (0+s_1 \mathbf{H}_{m,1}^n) & (0+s_1 \mathbf{H}_{m,2}^n) \end{bmatrix} \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{1,1}^1 & s_1 \mathbf{G}_{1,2}^1 \\ s_1 \mathbf{G}_{1,1}^2 & s_1 \mathbf{G}_{1,2}^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{2,1}^1 & s_1 \mathbf{G}_{2,2}^1 \\ s_1 \mathbf{G}_{2,1}^2 & s_1 \mathbf{G}_{2,2}^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{3,1}^1 & s_1 \mathbf{G}_{3,2}^1 \\ s_1 \mathbf{G}_{3,1}^2 & s_1 \mathbf{G}_{3,2}^2 \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{m,1}^1 & s_1 \mathbf{G}_{m,2}^1 \\ s_1 \mathbf{G}_{m,1}^2 & s_1 \mathbf{G}_{m,2}^2 \end{bmatrix} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{1,1}^{n-1} & s_1 \mathbf{G}_{1,2}^{n-1} \\ s_1 \mathbf{G}_{1,1}^n & s_1 \mathbf{G}_{1,2}^n \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{2,1}^{n-1} & s_1 \mathbf{G}_{2,2}^{n-1} \\ s_1 \mathbf{G}_{2,1}^n & s_1 \mathbf{G}_{2,2}^n \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{3,1}^{n-1} & s_1 \mathbf{G}_{3,2}^{n-1} \\ s_1 \mathbf{G}_{3,1}^n & s_1 \mathbf{G}_{3,2}^n \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} s_1 \mathbf{G}_{m,1}^{n-1} & s_1 \mathbf{G}_{m,2}^{n-1} \\ s_1 \mathbf{G}_{m,1}^n & s_1 \mathbf{G}_{m,2}^n \end{bmatrix} \end{bmatrix} \times \\ & \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^1 \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^{n-1} \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^n \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^1 \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^{n-1} \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^n \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} s_1 \phi_{\Gamma_{1,1}}^1 + s_1 \phi_{\Gamma_{1,2}}^1 + s_1 \phi_{\Gamma_{1,3}}^1 + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_{1,m}}^1 \\ s_1 \phi_{\Gamma_{1,1}}^2 + s_1 \phi_{\Gamma_{1,2}}^2 + s_1 \phi_{\Gamma_{1,3}}^2 + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_{1,m}}^2 \\ \vdots \\ s_1 \phi_{\Gamma_{1,1}}^{n-1} + s_1 \phi_{\Gamma_{1,2}}^{n-1} + s_1 \phi_{\Gamma_{1,3}}^{n-1} + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_{1,m}}^{n-1} \\ s_1 \phi_{\Gamma_{1,1}}^n + s_1 \phi_{\Gamma_{1,2}}^n + s_1 \phi_{\Gamma_{1,3}}^n + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_{1,m}}^n \end{bmatrix} \quad (3.53) \end{aligned}$$

上式可簡化如下，

$$\begin{aligned}
& \left[ \begin{array}{cccccc}
(1+s_1 H_{1,1}^1) & (s_1 H_{1,2}^1 + s_1 H_{2,1}^1) & (s_1 H_{2,2}^1 + s_1 H_{3,1}^1) & (s_1 H_{3,2}^1 + s_1 H_{4,1}^1) & \cdots & (s_1 H_{m-1,2}^1 + s_1 H_{m,1}^1) & (s_1 H_{m,2}^1) \\
(s_1 H_{1,1}^2) & (1+s_1 H_{1,2}^2 + s_1 H_{2,1}^2) & (s_1 H_{2,2}^2 + s_1 H_{3,1}^2) & (s_1 H_{3,2}^2 + s_1 H_{4,1}^2) & \cdots & (s_1 H_{m-1,2}^2 + s_1 H_{m,1}^2) & (s_1 H_{m,2}^2) \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
(s_1 H_{1,1}^{n-1}) & (s_1 H_{1,2}^{n-1} + s_1 H_{2,1}^{n-1}) & (s_1 H_{2,2}^{n-1} + s_1 H_{3,1}^{n-1}) & (s_1 H_{3,2}^{n-1} + s_1 H_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (1+s_1 H_{m-1,2}^{n-1} + s_1 H_{m,1}^{n-1}) & (s_1 H_{m,2}^{n-1}) \\
(s_1 H_{1,1}^n) & (s_1 H_{1,2}^n + s_1 H_{2,1}^n) & (s_1 H_{2,2}^n + s_1 H_{3,1}^n) & (s_1 H_{3,2}^n + s_1 H_{4,1}^n) & \cdots & (s_1 H_{m-1,2}^n + s_1 H_{m,1}^n) & (1+s_1 H_{m,2}^n)
\end{array} \right] \\
& + \left[ \begin{array}{cccccc}
(s_1 G_{1,1}^1) & (s_1 G_{1,2}^1 + s_1 G_{2,1}^1) & (s_1 G_{2,2}^1 + s_1 G_{3,1}^1) & (s_1 G_{3,2}^1 + s_1 G_{4,1}^1) & \cdots & (s_1 G_{m-1,2}^1 + s_1 G_{m,1}^1) & (s_1 G_{m,2}^1) \\
(s_1 G_{1,1}^2) & (s_1 G_{1,2}^2 + s_1 G_{2,1}^2) & (s_1 G_{2,2}^2 + s_1 G_{3,1}^2) & (s_1 G_{3,2}^2 + s_1 G_{4,1}^2) & \cdots & (s_1 G_{m-1,2}^2 + s_1 G_{m,1}^2) & (s_1 G_{m,2}^2) \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
(s_1 G_{1,1}^{n-1}) & (s_1 G_{1,2}^{n-1} + s_1 G_{2,1}^{n-1}) & (s_1 G_{2,2}^{n-1} + s_1 G_{3,1}^{n-1}) & (s_1 G_{3,2}^{n-1} + s_1 G_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (s_1 G_{m-1,2}^{n-1} + s_1 G_{m,1}^{n-1}) & (s_1 G_{m,2}^{n-1}) \\
(s_1 G_{1,1}^n) & (s_1 G_{1,2}^n + s_1 G_{2,1}^n) & (s_1 G_{2,2}^n + s_1 G_{3,1}^n) & (s_1 G_{3,2}^n + s_1 G_{4,1}^n) & \cdots & (s_1 G_{m-1,2}^n + s_1 G_{m,1}^n) & (s_1 G_{m,2}^n)
\end{array} \right] \times \\
& \left[ \begin{array}{c}
\mathbf{u}_{\Gamma_i, S_i}^1 \\
\mathbf{u}_{\Gamma_i, S_i}^2 \\
\vdots \\
\mathbf{u}_{\Gamma_i, S_i}^{n-1} \\
\mathbf{u}_{\Gamma_i, S_i}^n \\
\mathbf{q}_{\Gamma_i, S_i}^1 \\
\mathbf{q}_{\Gamma_i, S_i}^2 \\
\vdots \\
\mathbf{q}_{\Gamma_i, S_i}^{n-1} \\
\mathbf{q}_{\Gamma_i, S_i}^n
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
s_1 \phi_{\Gamma_i,1}^1 + s_1 \phi_{\Gamma_i,2}^1 + s_1 \phi_{\Gamma_i,3}^1 + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_i,m}^1 \\
s_1 \phi_{\Gamma_i,1}^2 + s_1 \phi_{\Gamma_i,2}^2 + s_1 \phi_{\Gamma_i,3}^2 + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_i,m}^2 \\
\vdots \\
s_1 \phi_{\Gamma_i,1}^{n-1} + s_1 \phi_{\Gamma_i,2}^{n-1} + s_1 \phi_{\Gamma_i,3}^{n-1} + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_i,m}^{n-1} \\
s_1 \phi_{\Gamma_i,1}^n + s_1 \phi_{\Gamma_i,2}^n + s_1 \phi_{\Gamma_i,3}^n + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_i,m}^n
\end{array} \right] \quad (3.54)
\end{aligned}$$

同樣地，在  $S_2$  區中，令

$$\begin{cases} \int_{\Gamma_{i,j}} N_1 \frac{\partial G_2(\mathbf{r}_{\Gamma_{i,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_i})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_2} d\Gamma'(\xi) = s_2 H_{j,1}^i \\ \int_{\Gamma_{i,j}} N_2 \frac{\partial G_2(\mathbf{r}_{\Gamma_{i,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_i})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_2} d\Gamma'(\xi) = s_2 H_{j,2}^i \end{cases} \quad (3.55)$$


$$\begin{cases} \int_{\Gamma_{i,j}} G_2(\mathbf{r}_{\Gamma_{i,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_i}) N_1 d\Gamma'(\xi) = s_2 G_{j,1}^i \\ \int_{\Gamma_{i,j}} G_2(\mathbf{r}_{\Gamma_{i,i}}, \mathbf{r}'_{\Gamma_i}) N_2 d\Gamma'(\xi) = s_2 G_{j,2}^i \end{cases} \quad (3.56)$$

則(3.48)式可改寫成

$$\begin{aligned}
& \left\{ -1 \cdot \begin{bmatrix} (1+s_2H_{1,1}^1) & (s_2H_{1,2}^1+s_2H_{2,1}^1) & (s_2H_{2,2}^1+s_2H_{3,1}^1) & (s_2H_{3,2}^1+s_2H_{4,1}^1) & \cdots & (s_2H_{m-1,2}^1+s_2H_{m,1}^1) & (s_2H_{m,2}^1) \\ (s_2H_{1,1}^2) & (1+s_2H_{1,2}^2+s_2H_{2,1}^2) & (s_2H_{2,2}^2+s_2H_{3,1}^2) & (s_2H_{3,2}^2+s_2H_{4,1}^2) & \cdots & (s_2H_{m-1,2}^2+s_2H_{m,1}^2) & (s_2H_{m,2}^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ (s_2H_{1,1}^{n-1}) & (s_2H_{1,2}^{n-1}+s_2H_{2,1}^{n-1}) & (s_2H_{2,2}^{n-1}+s_2H_{3,1}^{n-1}) & (s_2H_{3,2}^{n-1}+s_2H_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (1+s_2H_{m-1,2}^{n-1}+s_2H_{m,1}^{n-1}) & (s_2H_{m,2}^{n-1}) \\ (s_2H_{1,1}^n) & (s_2H_{1,2}^n+s_2H_{2,1}^n) & (s_2H_{2,2}^n+s_2H_{3,1}^n) & (s_2H_{3,2}^n+s_2H_{4,1}^n) & \cdots & (s_2H_{m-1,2}^n+s_2H_{m,1}^n) & (1+s_2H_{m,2}^n) \end{bmatrix} \right. \\
& + \left. \begin{bmatrix} (s_2G_{1,1}^1) & (s_2G_{1,2}^1+s_2G_{2,1}^1) & (s_2G_{2,2}^1+s_2G_{3,1}^1) & (s_2G_{3,2}^1+s_2G_{4,1}^1) & \cdots & (s_2G_{m-1,2}^1+s_2G_{m,1}^1) & (s_2G_{m,2}^1) \\ (s_2G_{1,1}^2) & (s_2G_{1,2}^2+s_2G_{2,1}^2) & (s_2G_{2,2}^2+s_2G_{3,1}^2) & (s_2G_{3,2}^2+s_2G_{4,1}^2) & \cdots & (s_2G_{m-1,2}^2+s_2G_{m,1}^2) & (s_2G_{m,2}^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ (s_2G_{1,1}^{n-1}) & (s_2G_{1,2}^{n-1}+s_2G_{2,1}^{n-1}) & (s_2G_{2,2}^{n-1}+s_2G_{3,1}^{n-1}) & (s_2G_{3,2}^{n-1}+s_2G_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (s_2G_{m-1,2}^{n-1}+s_2G_{m,1}^{n-1}) & (s_2G_{m,2}^{n-1}) \\ (s_2G_{1,1}^n) & (s_2G_{1,2}^n+s_2G_{2,1}^n) & (s_2G_{2,2}^n+s_2G_{3,1}^n) & (s_2G_{3,2}^n+s_2G_{4,1}^n) & \cdots & (s_2G_{m-1,2}^n+s_2G_{m,1}^n) & (s_2G_{m,2}^n) \end{bmatrix} \right\} \times \\
& \begin{bmatrix} u_{\Gamma_1, S_2}^1 \\ u_{\Gamma_1, S_2}^2 \\ \vdots \\ u_{\Gamma_1, S_2}^{n-1} \\ u_{\Gamma_1, S_2}^n \\ q_{\Gamma_1, S_2}^1 \\ q_{\Gamma_1, S_2}^2 \\ \vdots \\ q_{\Gamma_1, S_2}^{n-1} \\ q_{\Gamma_1, S_2}^n \end{bmatrix} = 0 \tag{3.57}
\end{aligned}$$

由(3.54)式及(3.57)式, 可得

$$\begin{bmatrix} -H_{11} & +p_{S_1}G_{12} \\ +H_{21} & +p_{S_2}G_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\Gamma_1} \\ q_{\Gamma_1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.58}$$

其中

$$H_{11} = \begin{bmatrix} (1+s_1H_{1,1}^1) & (s_1H_{1,2}^1+s_1H_{2,1}^1) & (s_1H_{2,2}^1+s_1H_{3,1}^1) & (s_1H_{3,2}^1+s_1H_{4,1}^1) & \cdots & (s_1H_{m-1,2}^1+s_1H_{m,1}^1) & (s_1H_{m,2}^1) \\ (s_1H_{1,1}^2) & (1+s_1H_{1,2}^2+s_1H_{2,1}^2) & (s_1H_{2,2}^2+s_1H_{3,1}^2) & (s_1H_{3,2}^2+s_1H_{4,1}^2) & \cdots & (s_1H_{m-1,2}^2+s_1H_{m,1}^2) & (s_1H_{m,2}^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ (s_1H_{1,1}^{n-1}) & (s_1H_{1,2}^{n-1}+s_1H_{2,1}^{n-1}) & (s_1H_{2,2}^{n-1}+s_1H_{3,1}^{n-1}) & (s_1H_{3,2}^{n-1}+s_1H_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (1+s_1H_{m-1,2}^{n-1}+s_1H_{m,1}^{n-1}) & (s_1H_{m,2}^{n-1}) \\ (s_1H_{1,1}^n) & (s_1H_{1,2}^n+s_1H_{2,1}^n) & (s_1H_{2,2}^n+s_1H_{3,1}^n) & (s_1H_{3,2}^n+s_1H_{4,1}^n) & \cdots & (s_1H_{m-1,2}^n+s_1H_{m,1}^n) & (1+s_1H_{m,2}^n) \end{bmatrix} \tag{3.59}$$

$$G_{12} = \begin{bmatrix} (s_1G_{1,1}^1) & (s_1G_{1,2}^1+s_1G_{2,1}^1) & (s_1G_{2,2}^1+s_1G_{3,1}^1) & (s_1G_{3,2}^1+s_1G_{4,1}^1) & \cdots & (s_1G_{m-1,2}^1+s_1G_{m,1}^1) & (s_1G_{m,2}^1) \\ (s_1G_{1,1}^2) & (s_1G_{1,2}^2+s_1G_{2,1}^2) & (s_1G_{2,2}^2+s_1G_{3,1}^2) & (s_1G_{3,2}^2+s_1G_{4,1}^2) & \cdots & (s_1G_{m-1,2}^2+s_1G_{m,1}^2) & (s_1G_{m,2}^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ (s_1G_{1,1}^{n-1}) & (s_1G_{1,2}^{n-1}+s_1G_{2,1}^{n-1}) & (s_1G_{2,2}^{n-1}+s_1G_{3,1}^{n-1}) & (s_1G_{3,2}^{n-1}+s_1G_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (s_1G_{m-1,2}^{n-1}+s_1G_{m,1}^{n-1}) & (s_1G_{m,2}^{n-1}) \\ (s_1G_{1,1}^n) & (s_1G_{1,2}^n+s_1G_{2,1}^n) & (s_1G_{2,2}^n+s_1G_{3,1}^n) & (s_1G_{3,2}^n+s_1G_{4,1}^n) & \cdots & (s_1G_{m-1,2}^n+s_1G_{m,1}^n) & (s_1G_{m,2}^n) \end{bmatrix} \tag{3.60}$$

$$H_{21} = \begin{bmatrix} (1+s_2H_{1,1}^1) & (s_2H_{1,2}^1+s_2H_{2,1}^1) & (s_2H_{2,2}^1+s_2H_{3,1}^1) & (s_2H_{3,2}^1+s_2H_{4,1}^1) & \cdots & (s_2H_{m-1,2}^1+s_2H_{m,1}^1) & (s_2H_{m,2}^1) \\ (s_2H_{1,1}^2) & (1+s_2H_{1,2}^2+s_2H_{2,1}^2) & (s_2H_{2,2}^2+s_2H_{3,1}^2) & (s_2H_{3,2}^2+s_2H_{4,1}^2) & \cdots & (s_2H_{m-1,2}^2+s_2H_{m,1}^2) & (s_2H_{m,2}^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ (s_2H_{1,1}^{n-1}) & (s_2H_{1,2}^{n-1}+s_2H_{2,1}^{n-1}) & (s_2H_{2,2}^{n-1}+s_2H_{3,1}^{n-1}) & (s_2H_{3,2}^{n-1}+s_2H_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (1+s_2H_{m-1,2}^{n-1}+s_2H_{m,1}^{n-1}) & (s_2H_{m,2}^{n-1}) \\ (s_2H_{1,1}^n) & (s_2H_{1,2}^n+s_2H_{2,1}^n) & (s_2H_{2,2}^n+s_2H_{3,1}^n) & (s_2H_{3,2}^n+s_2H_{4,1}^n) & \cdots & (s_2H_{m-1,2}^n+s_2H_{m,1}^n) & (1+s_2H_{m,2}^n) \end{bmatrix} \tag{3.61}$$

$$G_{22} = \begin{bmatrix} (s_2 G_{1,1}^1) & (s_2 G_{1,2}^1 + s_2 G_{2,1}^1) & (s_2 G_{2,2}^1 + s_2 G_{3,1}^1) & (s_2 G_{3,2}^1 + s_2 G_{4,1}^1) & \cdots & (s_2 G_{m-1,2}^1 + s_2 G_{m,1}^1) & (s_2 G_{m,2}^1) \\ (s_2 G_{1,1}^2) & (s_2 G_{1,2}^2 + s_2 G_{2,1}^2) & (s_2 G_{2,2}^2 + s_2 G_{3,1}^2) & (s_2 G_{3,2}^2 + s_2 G_{4,1}^2) & \cdots & (s_2 G_{m-1,2}^2 + s_2 G_{m,1}^2) & (s_2 G_{m,2}^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ (s_2 G_{1,1}^{n-1}) & (s_2 G_{1,2}^{n-1} + s_2 G_{2,1}^{n-1}) & (s_2 G_{2,2}^{n-1} + s_2 G_{3,1}^{n-1}) & (s_2 G_{3,2}^{n-1} + s_2 G_{4,1}^{n-1}) & \cdots & (s_2 G_{m-1,2}^{n-1} + s_2 G_{m,1}^{n-1}) & (s_2 G_{m,2}^{n-1}) \\ (s_2 G_{1,1}^n) & (s_2 G_{1,2}^n + s_2 G_{2,1}^n) & (s_2 G_{2,2}^n + s_2 G_{3,1}^n) & (s_2 G_{3,2}^n + s_2 G_{4,1}^n) & \cdots & (s_2 G_{m-1,2}^n + s_2 G_{m,1}^n) & (s_2 G_{m,2}^n) \end{bmatrix} \quad (3.62)$$

$$A = \begin{bmatrix} s_1 \phi_{\Gamma_1,1}^1 + s_1 \phi_{\Gamma_1,2}^1 + s_1 \phi_{\Gamma_1,3}^1 + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_1,m}^1 \\ s_1 \phi_{\Gamma_1,1}^2 + s_1 \phi_{\Gamma_1,2}^2 + s_1 \phi_{\Gamma_1,3}^2 + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_1,m}^2 \\ \vdots \\ s_1 \phi_{\Gamma_1,1}^{n-1} + s_1 \phi_{\Gamma_1,2}^{n-1} + s_1 \phi_{\Gamma_1,3}^{n-1} + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_1,m}^{n-1} \\ s_1 \phi_{\Gamma_1,1}^n + s_1 \phi_{\Gamma_1,2}^n + s_1 \phi_{\Gamma_1,3}^n + \cdots + s_1 \phi_{\Gamma_1,m}^n \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

$$\mathbf{u}_{\Gamma_1} = \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1} = \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2} \quad (3.64)$$

$$\mathbf{q}_{\Gamma_1} = \frac{1}{p_{S_1}} \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1} = -\frac{1}{p_{S_2}} \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_2} \quad (3.65)$$

而  $\mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}$  及  $\mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2}$  表示如下

$$\mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^1 \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^{n-1} \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^n \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^1 \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^{n-1} \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^n \end{bmatrix} \quad (3.66)$$

$$\mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2}^1 \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2}^{n-1} \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_2}^n \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_2}^1 \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_2}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_2}^{n-1} \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_2}^n \end{bmatrix} \quad (3.67)$$

當  $u = E_z$ ， $p_{S_i} = 1$  ( $i=1,2$ ) 時，為 TE 極化態。當  $u = H_z$ ， $p_{S_i} = n_i^2$  ( $i=1,2$ ) 時為 TM 極化態。由線性代數的方法可求的(3.58)式中的邊界場量  $u_\Gamma$  及  $q_\Gamma$ ，再由(3.34)式及(3.35)式可求的區域  $S_1$  及  $S_2$  內任一點的場量。

### 3.3.3 奇異點積分問題

當方程式(3.34)式及(3.35)式中的  $r_1$  和  $r_2$  位於邊界  $\Gamma_1$  上時，即觀察點移至邊界上，且當觀察點與點幅射源重疊時，會使得方程式(3.36)式-(3.37)式及方程式(3.47)式-(3.48)式中積分項的格林函數為無限大，這會造成計算結果產生很大的誤差。一般的解決方法如下，首先考慮(3.47)式，我們先把觀察點  $i$  移至邊界處，但  $i$  點附近的邊界要改變一下，變為以  $i$  點為圓心的圓線，這樣  $i$  點還是內點，如圖(3.5)所示

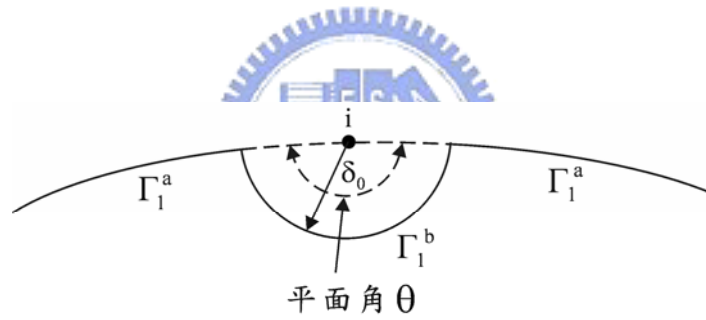


圖 3.5 觀察點  $i$  在邊界上時的處理。

這個圓的半徑很小， $r_1 = \delta_0$ ， $\theta$  為圓相對於  $i$  點所展開的平面角，此時我們把界面分成兩個部分來考慮，一個是鼓起的部分界面  $\Gamma_1^b$ ，另一個是剩下的界面  $\Gamma_1^a$ 。對於新界面  $\Gamma_1^a + \Gamma_1^b$  來講，因為  $i$  是內點，所以(3.47)式仍可使用。當觀察點  $i$  位於點幅射源  $j$  時，(3.47)式可以表示成

$$\begin{aligned}
 & -u_{\Gamma_1, S_1}^i + \int_{\Gamma_1^b} G_1(r_{\Gamma_1, i}, r'_\Gamma) [N_1 \quad N_2] d\Gamma_1^b(\xi) \begin{bmatrix} q_{\Gamma_1, S_1}^i \\ q_{\Gamma_1, S_1}^{i+1} \end{bmatrix} - \int_{\Gamma_1^a} [N_1 \quad N_2] \frac{\partial G_1(r_{\Gamma_1, i}, r'_\Gamma)}{\partial \hat{n}'_1} d\Gamma_1^a(\xi) \begin{bmatrix} u_{\Gamma_1, S_1}^i \\ u_{\Gamma_1, S_1}^{i+1} \end{bmatrix} = \\
 & - \int_{\Gamma_1^b} G_1(r_{\Gamma_1, i}, r'_\Gamma) g(r'_\Gamma) d\Gamma_1^b(\xi) \quad (3.68)
 \end{aligned}$$

上式的積分只要把實際的格林函數代入，就可得

$$\begin{cases} \int_{\Gamma_{1,i}^b} \mathbf{G}_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_1) [\mathbf{N}_1 \quad \mathbf{N}_2] d\Gamma_1^b(\xi) \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^i \\ \mathbf{q}_{\Gamma_1, S_1}^{i+1} \end{bmatrix} = 0 \\ \int_{\Gamma_{1,i}^b} [\mathbf{N}_1 \quad \mathbf{N}_2] \frac{\partial \mathbf{G}_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_1)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_1} d\Gamma_1^b(\xi) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^i \\ \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^{i+1} \end{bmatrix} = -\frac{\theta}{2\pi} \mathbf{u}_{\Gamma_1, S_1}^i \\ \int_{\Gamma_{1,i}^b} \mathbf{G}_1(\mathbf{r}_{\Gamma_{1,i}}, \mathbf{r}'_1) \mathbf{g}(\mathbf{r}'_1) d\Gamma_1^b(\xi) = 0 \end{cases} \quad (3.69)$$

因此，當觀察點*i*位於點幅射源*j*時的奇異點積分就可以解決了，(3.48)式也可以用同樣地方法來處理。上述為一般的奇異點積分的解決方法，而在本論文中所採用的為一較為簡單的方法，如圖 3.6 所示，我們把觀察點*i*不完全移至邊界 $\Gamma_1$ 上，而是與邊界 $\Gamma_1$ 有一極小的距離 $\rho_0$ ，當 $\rho_0$ 足夠小時，則所計算的結果會與上述的方法相同，此種方法的好處是不需為了在奇異點的積分而修改程式，有利用程式的撰寫，且在積分計算時可以省去判斷觀察點是否位於點幅射源的時間，因此可以明顯地加快計算上的時間。

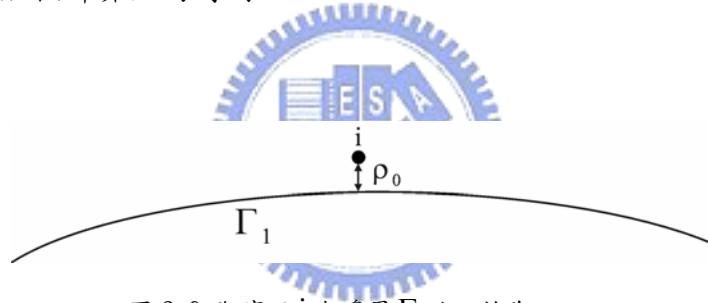


圖 3.6 觀察點*i*與邊界 $\Gamma_1$ 的距離為 $\rho_0$ 。

### 3.3.4 二維多區邊界元素法

在推導二維多區的邊界元素法之前，我們先推導二維三區的邊界元素法會比較容易了解。二維三區域可藉由二個邊界 $\Gamma_1$ 及 $\Gamma_2$ 分割成三區 $S_1$ ， $S_2$ 及 $S_3$ ，如圖(3.7)所示。 $S_1$ ， $S_2$ 及 $S_3$ 的邊界法線向量定義如圖所示，而折射率分別為 $n_1$ ， $n_2$ 及 $n_3$ 。其中入射場位於 $S_1$ 內，入射角為 $\theta$ ，而 $S_2$ 及 $S_3$ 無入射場存在。 $S_1$ ， $S_2$ 及 $S_3$ 分別滿足二維標量格林函數，表示如下

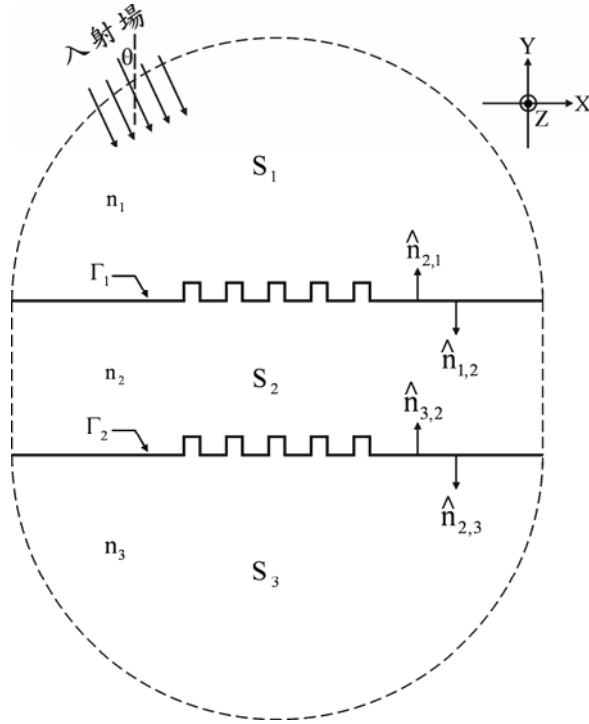


圖 3.7 區域分割示意圖。

$$-u(\mathbf{r}_1) + \oint_{\Gamma_1} \left[ G_{1,2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \frac{\partial u(\mathbf{r}'_1)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{1,2}} - u(\mathbf{r}'_1) \frac{\partial G_{1,2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{1,2}} \right] d\Gamma' = - \int_{S_1} G_{1,2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) g(\mathbf{r}'_1) dS' \quad \mathbf{r}_1 \in S_1 \quad (3.70)$$

$$-u(\mathbf{r}_2) + \int_{\Gamma_1} \left[ G_{2,1}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1) \frac{\partial u(\mathbf{r}'_1)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,1}} - u(\mathbf{r}'_1) \frac{\partial G_{2,1}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,1}} \right] d\Gamma' + \int_{\Gamma_2} \left[ G_{2,3}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \frac{\partial u(\mathbf{r}'_2)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,3}} - u(\mathbf{r}'_2) \frac{\partial G_{2,3}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,3}} \right] d\Gamma' = 0 \quad \mathbf{r}_2 \in S_2 \quad (3.71)$$

$$-u(\mathbf{r}_3) + \oint_{\Gamma_2} \left[ G_{3,2}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_2) \frac{\partial u(\mathbf{r}'_2)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{3,2}} - u(\mathbf{r}'_2) \frac{\partial G_{3,2}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_2)}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{3,2}} \right] d\Gamma' = 0 \quad \mathbf{r}_3 \in S_3 \quad (3.72)$$

當  $\mathbf{r}_1$  和  $\mathbf{r}_2$  位於邊界  $\Gamma_1$  上時，則(3.70)式及(3.71)式可以表示如下

$$-u_{\Gamma_1, S_1}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}) + \oint_{\Gamma_1} \left[ G_{1,2}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) q_{\Gamma_1, S_1}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) - u_{\Gamma_1, S_1}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \frac{\partial G_{1,2}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{1,2}} \right] d\Gamma' = - \int_{\Gamma_1} G_{1,2}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) g(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) d\Gamma' \quad (3.73)$$

$$-u_{\Gamma_1, S_2}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}) + \int_{\Gamma_1} \left[ G_{2,1}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) q_{\Gamma_1, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) - u_{\Gamma_1, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \frac{\partial G_{2,1}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,1}} \right] d\Gamma' \quad (3.74)$$

$$+ \int_{\Gamma_2} \left[ G_{2,3}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_2}) q_{\Gamma_2, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_2}) - u_{\Gamma_2, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_2}) \frac{\partial G_{2,3}(\mathbf{r}_{\Gamma_1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_2})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,3}} \right] d\Gamma' = 0$$

(3.73)式及(3.74)式可使用有限元素法表示如下

$$\begin{bmatrix} +H_{11} & -p_{S_1} G_{12} & 0 & 0 \\ +H_{21} & +p_{S_2} G_{22} & +H_{23} & -p_{S_2} G_{24} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\Gamma_1} \\ q_{\Gamma_1} \\ u_{\Gamma_2} \\ q_{\Gamma_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.75)$$

其中邊界 $\Gamma_1$ 及 $\Gamma_2$ 的 $u$ 值及 $q$ 值可表示如下

$$\begin{cases} u_{\Gamma_1} = u_{\Gamma_1, S_1} = u_{\Gamma_1, S_2} \\ u_{\Gamma_2} = u_{\Gamma_2, S_2} = u_{\Gamma_2, S_3} \end{cases} \quad (3.76)$$

$$\begin{cases} q_{\Gamma_1} = \frac{1}{p_{S_1}} q_{\Gamma_1, S_1} = -\frac{1}{p_{S_2}} q_{\Gamma_1, S_2} \\ q_{\Gamma_2} = \frac{1}{p_{S_2}} q_{\Gamma_2, S_2} = -\frac{1}{p_{S_3}} q_{\Gamma_2, S_3} \end{cases} \quad (3.77)$$

當 $u = E_z$ ， $p_{S_i} = 1$  ( $i = 1, 2, 3$ )時，為TE極化態。當 $u = H_z$ ， $p_{S_i} = n_i^2$  ( $i = 1, 2, 3$ )時為TM極化態。當 $r_2$ 和 $r_3$ 位於邊界 $\Gamma_2$ 上時，則(3.71)式及(3.72)式可以表示如下

$$-u_{\Gamma_2, S_2}(\mathbf{r}_{\Gamma_2}) + \int_{\Gamma_1} \left[ G_{2,1}(\mathbf{r}_{\Gamma_2}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1}) q_{\Gamma_1, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) - u_{\Gamma_1, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_1}) \frac{\partial G_{2,1}(\mathbf{r}_{\Gamma_2}, \mathbf{r}'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,1}} \right] d\Gamma' \quad (3.78)$$

$$+ \int_{\Gamma_2} \left[ G_{2,3}(\mathbf{r}_{\Gamma_2}, \mathbf{r}'_{\Gamma_2}) q_{\Gamma_2, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_2}) - u_{\Gamma_2, S_2}(\mathbf{r}'_{\Gamma_2}) \frac{\partial G_{2,3}(\mathbf{r}_{\Gamma_2}, \mathbf{r}'_{\Gamma_2})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{2,3}} \right] d\Gamma' = 0$$



$$-u_{\Gamma_2, S_3}(r_{\Gamma_2}) + \oint_{\Gamma_2} \left[ G_{3,2}(r_{\Gamma_2}, r'_{\Gamma_2}) q_{\Gamma_2, S_3} - u_{\Gamma_2, S_3}(r'_{\Gamma_2}) \frac{\partial G_{3,2}(r_{\Gamma_2}, r'_{\Gamma_2})}{\partial \hat{n}'_{3,2}} \right] d\Gamma' = 0 \quad (3.79)$$

(3.78)式及(3.79)式可使用有限元素法表示如下,

$$\begin{bmatrix} +H_{31} & +p_{S_2} G_{32} & +H_{33} & -p_{S_2} G_{34} \\ 0 & 0 & +H_{41} & +p_{S_3} G_{42} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\Gamma_1} \\ q_{\Gamma_1} \\ u_{\Gamma_2} \\ q_{\Gamma_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.80)$$

由(3.75)式及(3.80)式可得

$$\begin{bmatrix} +H_{11} & -p_{S_1} G_{12} & 0 & 0 \\ +H_{21} & +p_{S_2} G_{22} & +H_{23} & -p_{S_2} G_{24} \\ +H_{31} & +p_{S_2} G_{32} & +H_{33} & -p_{S_2} G_{34} \\ 0 & 0 & +H_{41} & +p_{S_3} G_{42} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\Gamma_1} \\ q_{\Gamma_1} \\ u_{\Gamma_2} \\ q_{\Gamma_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.81)$$

由(3.81)式可得每一邊界的  $u$  及  $q$  值，再由(3.70)式-(3.72)式得任一區域的場點之場量。二維多區域可藉由  $m$  個邊界  $\Gamma_1$  至  $\Gamma_m$  分割成  $m+1$  區  $S_1, S_2$  至  $S_{m+1}$ ，如圖(3.8)所示。而入射場可位於任一邊界上，則  $S_1, S_2$  至  $S_{m+1}$  分別滿足二維標量格林函數，表示如下

$$-u(r_1) + \oint_{\Gamma_1} \left[ G_{1,2}(r_1, r'_{\Gamma_1}) \frac{\partial u(r'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{n}'_{1,2}} - u(r'_{\Gamma_1}) \frac{\partial G_{1,2}(r_1, r'_{\Gamma_1})}{\partial \hat{n}'_{1,2}} \right] d\Gamma' = -\delta_1 \int_{\Gamma_1} G_{1,2}(r_1, r'_{\Gamma_1}) g(r'_{\Gamma_1}) d\Gamma' \quad (3.82)$$

$r_1 \in S_1$

$$-u(r_i) + \int_{\Gamma_{i-1}} \left[ G_{i,i-1}(r_i, r'_{\Gamma_{i-1}}) \frac{\partial u(r'_{\Gamma_{i-1}})}{\partial \hat{n}'_{i,i-1}} - u(r'_{\Gamma_{i-1}}) \frac{\partial G_{i,i-1}(r_i, r'_{\Gamma_{i-1}})}{\partial \hat{n}'_{i,i-1}} \right] d\Gamma' \\ + \int_{\Gamma_i} \left[ G_{i,i+1}(r_i, r'_{\Gamma_i}) \frac{\partial u(r'_{\Gamma_i})}{\partial \hat{n}'_{i,i+1}} - u(r'_{\Gamma_i}) \frac{\partial G_{i,i+1}(r_i, r'_{\Gamma_i})}{\partial \hat{n}'_{i,i+1}} \right] d\Gamma' = -\delta_i \int_{\Gamma_i} G_{i,i+1}(r_i, r'_{\Gamma_i}) g(r'_{\Gamma_i}) d\Gamma' \quad (3.83)$$

$r_i \in S_i, \quad i = 2, 3, \dots, m$

$$-u(\mathbf{r}_{m+1}) + \oint_{\Gamma_m} \left[ G_{m+1,m}(\mathbf{r}_{m+1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_m}) \frac{\partial u(\mathbf{r}'_{\Gamma_m})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{m+1,m}} - u(\mathbf{r}'_{\Gamma_m}) \frac{\partial G_{m+1,m}(\mathbf{r}_{m+1}, \mathbf{r}'_{\Gamma_m})}{\partial \hat{\mathbf{n}}'_{m+1,m}} \right] d\Gamma' = 0$$

$$\mathbf{r}_{m+1} \in S_{m+1} \quad (3.84)$$

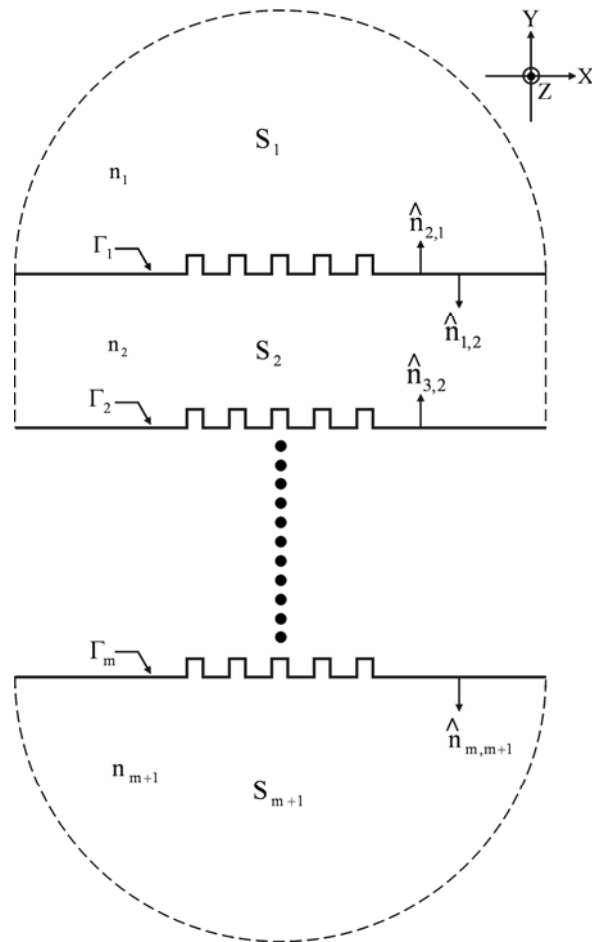


圖 3.8 區域分割示意圖。

當入射場位於邊界  $\Gamma_i$  時則  $\delta_i = 1$ ，否則  $\delta_i = 0$ 。由可上述之方法可得二維多區域的矩陣表示式如下



可簡化表示如下

$$\begin{bmatrix} M_{12} & M_{13} & 0 & 0 & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & 0 & 0 \\ 0 & M_{31} & M_{32} & M_{33} & 0 \\ 0 & 0 & M_{41} & M_{42} & M_{43} \\ 0 & 0 & 0 & M_{51} & M_{52} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} UQ_1 \\ UQ_2 \\ UQ_3 \\ UQ_4 \\ UQ_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} UQ_{11} \\ UQ_{12} \\ UQ_{13} \\ UQ_{14} \\ UQ_{15} \end{bmatrix} \quad (3.87)$$

其中

$$UQ_i = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_i} \\ \mathbf{q}_{\Gamma_i} \end{bmatrix} \quad (3.88)$$

$$UQ_{1i} = \begin{bmatrix} \delta_i \mathbf{A}_i \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.89)$$

$$M_{i1} = \begin{bmatrix} +H_{i(i-1)i} & +p_{S_i} G_{i(i-1)i} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.90)$$

$$M_{i2} = \begin{bmatrix} +H_{iii} & -p_{S_i} G_{iii} \\ +H_{(i+1)ii} & +p_{S_{i+1}} G_{(i+1)ii} \end{bmatrix} \quad (3.91)$$

$$M_{i3} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ +H_{(i+1)(i+1)i} & -p_{S_{i+1}} G_{(i+1)(i+1)i} \end{bmatrix} \quad (3.92)$$

由(3.87)式，可得

$$M_{12}UQ_1 + M_{13}UQ_2 = UQ_{11} \quad (3.93)$$

$$M_{i1}UQ_{(i-1)} + M_{i2}UQ_i + M_{i3}UQ_{(i+1)} = UQ_{1i} \quad (i = 2,3,4) \quad (3.94)$$

$$M_{51}UQ_4 + M_{52}UQ_5 = UQ_{15} \quad (3.95)$$

由(3.95)式，可得

$$UQ_5 = T_{54}UQ_4 + A_{54} \quad (3.96)$$

其中

$$T_{54} = -\frac{M_{51}}{M_{52}} \quad (3.97)$$

$$A_{54} = \frac{1}{M_{52}} UQ_{15} \quad (3.98)$$

把(3.96)式代入當 $i=4$ 的(3.94)式中，可得

$$UQ_4 = T_{43} UQ_3 + A_{43} \quad (3.99)$$

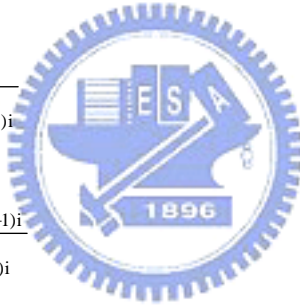
把(3.99)式代入當 $i=3$ 的(3.94)式中，可得 $UQ_3$ 。接著把所得的 $UQ_3$ 代入 $i=2$ 的(3.94)式中，可得 $UQ_2$ ，所以

$$UQ_i = T_{i(i-1)} UQ_{i-1} + A_{i(i-1)} \quad (i=2,3,4) \quad (3.100)$$

其中

$$T_{i(i-1)} = -\frac{M_{i1}}{M_{i2} + M_{i3} T_{(i+1)i}} \quad (3.101)$$

$$A_{i(i-1)} = \frac{UQ_{1i} - M_{i3} A_{(i+1)i}}{M_{i2} + M_{i3} T_{(i+1)i}} \quad (3.102)$$



由(3.93)式及(3.100)式，可得

$$UQ_1 = \frac{UQ_{11} - M_{13} A_{21}}{M_{12} + M_{13} T_{21}} \quad (3.103)$$

則 $UQ_i$  ( $i=1,2,\dots,5$ )用以下的方法可以很容易的求的。首先，由(3.97)式及(3.98)式可以直接求得 $T_{54}$ 及 $A_{54}$ 。把 $T_{54}$ 及 $A_{54}$ 的值代入當 $i=4$ 的(3.101)式及(3.102)式中，可求得 $T_{43}$ 及 $A_{43}$ 的值，再把其值代入 $i=3$ 的(3.101)式及(3.102)式中，可求的 $T_{32}$ 及 $A_{32}$ 的值，再一次的把所求得的 $T_{32}$ 及 $A_{32}$ 的值代入 $i=2$ 的(3.101)式及(3.102)式中，可獲得 $T_{21}$ 及 $A_{21}$ 的值，由所求得的 $T$ 值與 $A$ 代入(3.96)，(3.99)及(3.100)式，則可求得 $UQ_i$  ( $i=1,2,\dots,5$ )，由(3.88)式可以得到邊界的 $u_r$ 及 $q_r$ 。對於二維多區的邊界限元素法的矩陣形式都可以用上述的方法求得 $u_r$ 及 $q_r$ ，且可加快矩陣計算的速度，及有效地減少計算所需的記憶體。

### 3.4 光柵成像模擬

本節將使用邊界元素法來模擬光柵的成像。圖(3.9)所示為光柵成像的模擬結構，一平面光入射至一具有5個週期的有限光柵，其繞射光經由一柱形透鏡成像在像平面。整個空間被分成6個區域 $S_1$ 至 $S_6$ 及5個邊界 $\Gamma_1$ 至 $\Gamma_5$ 。其中區域 $S_1$ 為像空間所在的區域，區域 $S_3$ 至 $S_6$ 為物空間所在的區域，而 $S_2$ 為透鏡區。區域 $S_i$ 的折射率為 $n_i$  ( $i=1,2,\dots,6$ )，其中 $n_1$ 、 $n_3$ 及 $n_4$ 為1.0。光柵是由區域 $S_5$ 及 $S_6$ 所構成，其中區域 $S_5$ 的材料為光阻，區域 $S_6$ 是矽基版。一平面波垂直入射至邊界 $\Gamma_3$ 上。邊界 $\Gamma_3$ 是一個虛擬邊界，因為它對邊界兩邊的光場不會有任何的影響。經由光柵反射的光場經由柱形透鏡成像在像平面，我們可以用前幾節所介紹的邊界元素法來模擬此結構。

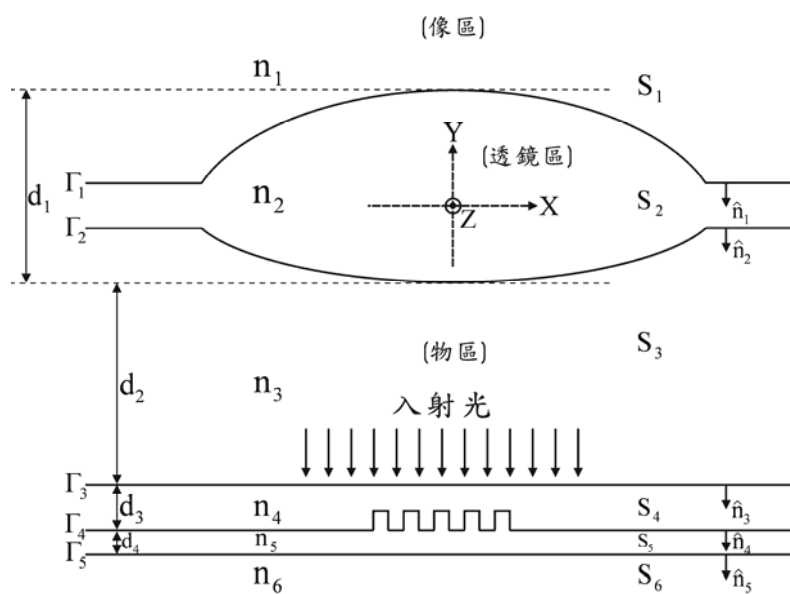


圖 3.9 光柵成像模擬的幾何結構。

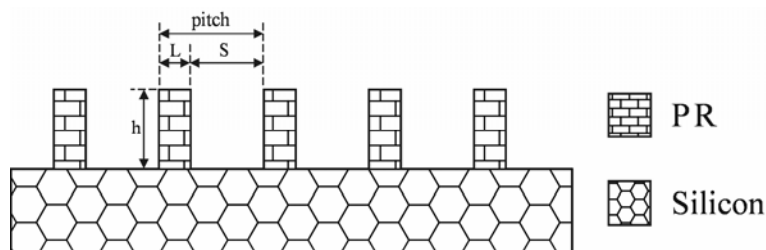


圖 3.10 五個週期的有限光柵結構。

	材料	折射率(n,k)
光柵	PR	1.574-0.002i
基版	Silicon	3.867-0.020i

表 3.1 光柵材料及折射率。

圖(3.10)及表(3.1)為所模擬的光柵結構及參數，五個週期的有限光柵被製作在一矽基版上，其材料為光阻。其中光柵週期(pitch)為 $1.0\mu\text{m}$ ，L/S的比例為0.11，即線寬為 $100\text{nm}$ ，而光柵的高度(h)為 $100\text{nm}$ 。圖(3.10)的光柵是由三個區域( $S_4$ ， $S_5$ 及 $S_6$ )及二個邊界( $\Gamma_4$ ， $\Gamma_5$ )所組成。

	曲率半徑 (R)	厚度( $\mu\text{m}$ )	折射率 (n)	半徑( $\mu\text{m}$ )	錐形係數 (K)
物		87.3			
$\Gamma_2$	-0.1020	70	2.0	70	-0.5230
$\Gamma_1$	-0.5825	1230		70	18.8417
像					

表 3.2 柱形透鏡參數。

表(3.2)為柱形透鏡的幾何參數，柱形透鏡是由邊界 $\Gamma_1$ 及 $\Gamma_2$ 所構成，其數值孔徑及放大率分別為0.5及10x。邊界 $\Gamma_1$ 及 $\Gamma_2$ 可由函數 $\text{sag}_y(x)$ 描述如下

$$\text{sag}_y(x) = \frac{C \cdot x^2}{1 + \sqrt{1 - (1 + K)C^2 \cdot x^2}} \quad (3.104)$$

其中K為錐形係數(conic constant)，C為曲率(curvature)， $C = 1/R$ 。透鏡厚度( $d_1$ )為 $70\mu\text{m}$ ，寬度為 $140\mu\text{m}$ ，而折射率( $n_2$ )為2.0。透鏡的物距及像距分別為 $87.3\mu\text{m}$ 及 $1230\mu\text{m}$ 。由於物距為 $87.3\mu\text{m}$ 所以在模擬中設定 $d_2$ 為 $87.0\mu\text{m}$ ， $d_3$ 為 $0.3\mu\text{m}$ ，且在邊界 $\Gamma_3$ 的入射場的寬度為 $15.0\mu\text{m}$ 。圖(3.11)為光柵的TE模態的反射場，由圖中可以看出0， $\pm 1$ ，及 $\pm 2$ 級的繞射光存在於反射場中。雖然所模擬的光柵只具有五個週期，但光柵的繞射級依然存在於反射場中。

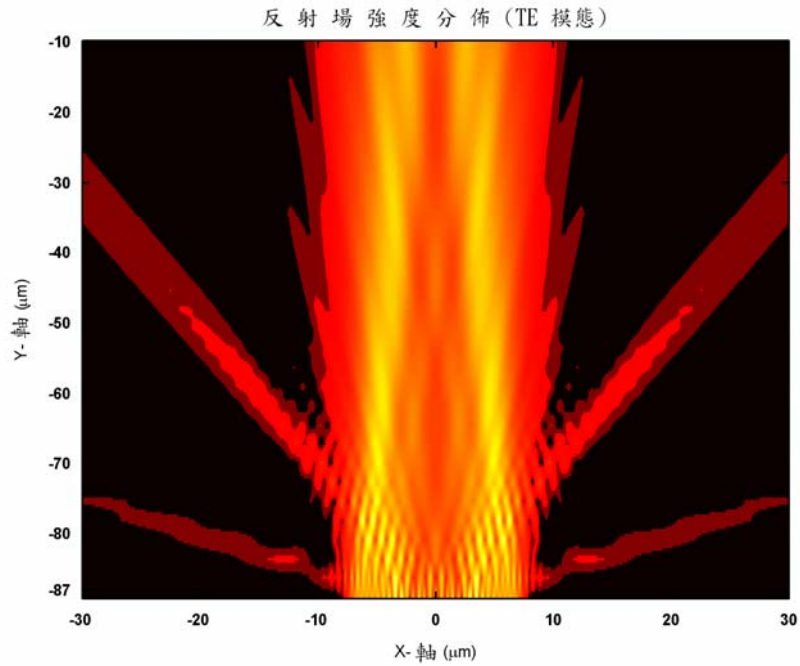


圖 3.11 光柵的反射場強度分佈(TE 模態)。

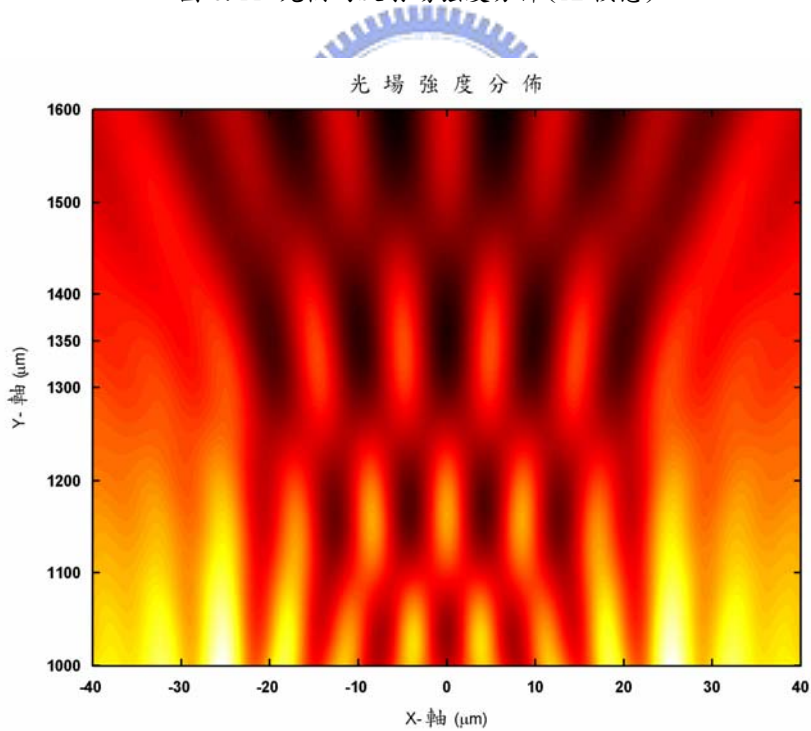


圖 3.12 光柵成像附近的光場強度分佈(X-Y 平面)。

經由光柵反射的光場藉由所設計的柱形透鏡成像在像平面，圖(3.12)為在像平面附近的光場分佈，由圖中可以看到光柵的像出現在  $y$  為  $1020\mu\text{m}$ ， $1160\mu\text{m}$ ， $1340\mu\text{m}$ ，及  $1600\mu\text{m}$ ，而且對於相鄰的光柵像中具有  $180^\circ$  的相位差。如  $y$  為



1160 $\mu\text{m}$  的光柵像中，光柵的線(line)及線間距(space)分別為亮場及暗場，然而當  $y$  為 1340 $\mu\text{m}$  時，光柵的線及線間距變為暗場及亮場，這現象為 Talbot<sup>[44]</sup> 自成像所造成的相位差。由於我們使用微柱透鏡來計算光柵的成像，這在實際應用上將會造成困難，因此在第五章裡我們將利用邊界元素法及物理光學追跡來模擬光柵經實際的顯微物鏡成像之後的光場分佈。



## 第四章 干涉式散射儀對疊對光柵之量測與分析

本章將建立在第二章裡所提出的干涉式散射儀之疊對量測系統，並量測一製作出的疊對光柵，並利用干涉式散射儀的理論架構來分析量測數據，進而得出疊對光柵的上層與下層之間的位移量，並利用掃描式電子顯微鏡對疊對光柵做橫切面的量測來分析系統的量測誤差。

### 4.1 系統架構與模擬

本實驗的系統架構如圖(4.1)所示，He-Ne 雷射(633nm)為光源，偏光片用來控制入射光的極化方向，在此系統我們只考慮 TE 模態入射。入射光垂直入射至疊對光柵上，且+1 級的繞射光藉由反射鏡回朔反射(retro-reflection)至光柵上，藉由移動反射鏡來調變回朔反射光入射在光柵上的相位。如此兩反射光(由垂直入射所產生的零級繞射光與回朔反射所產生的+1 級繞射光)將在疊對光柵的垂直方向上產生干涉。藉由干涉強度的量測，與模擬的結果比較，則可得知疊對誤差。

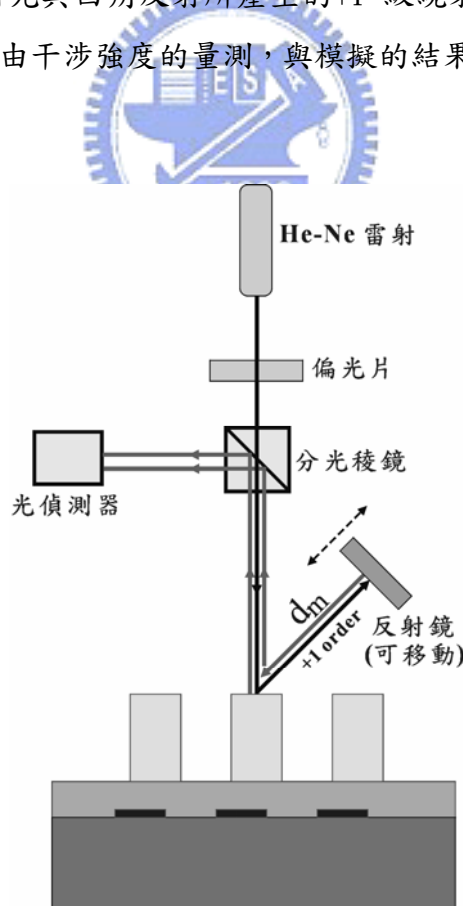


圖 4.1 干涉式散射儀之光學架構。

圖(4.2)及表(4.1)所示為量測的光柵結構與幾何參數。在一矽基板上，線性光柵被分別置於上層及下層裡，中間為一薄膜層。為了增加疊對量測上的靈敏度，在設計疊對光柵時，會具有一預置的位移量 $\sigma_0$ 。在上下層光柵製作過程中，因製作所產生的疊對誤差為 $\sigma$ ，則上下層光柵之間的疊對位移量定義為 $\Delta x = \sigma_0 + \sigma$ 。 $L$ 及 $S$ 表示為光柵的線寬及線間距(space)，光柵的週期(pitch)為 $L+S$ 。 $D_{top}$ 及 $D_{bottom}$ 分別表示上層光柵及下層光柵的厚度。

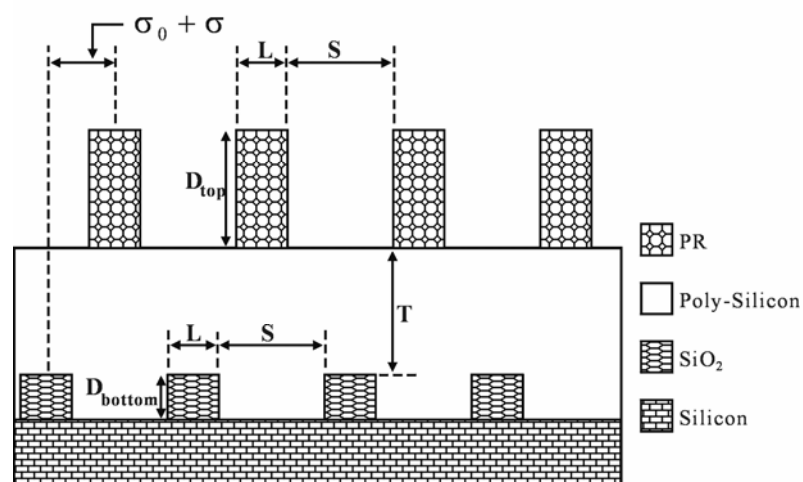


圖 4.2 疊對光柵之幾何結構。

層	材料	厚度	折射率(n,k)
上層	Photoresist	850nm	1.624-0.000i
中間層	Polysilicon	200nm	3.926-0.059i
下層	SiO <sub>2</sub>	50 nm	1.463-0.000i
基板	Silicon	—	3.867-0.020i

表 4.1 光柵之結構參數及折射率。

假設 $L/S = 1/1$ ，光柵週期為 $800\text{nm}$ ， $\sigma_0 = 0\text{nm}$ ，及入射波長為 $\lambda = 633\text{nm}$ ，其干涉式散射儀的模擬結果如圖(4.3)所示，其中 $x$ 軸為反射鏡移動所造成的光程差， $y$ 軸為垂直光柵方向的繞射效率。圖中每一條特徵曲線代表不同的疊對位移，如 $150\text{nm}$ 的特徵曲線代表上下層光柵的疊對位移為 $150\text{nm}$ 。分析圖中的特徵曲線，可以得知相鄰的特徵曲線的最大效率差是發生在某一相位差，如疊對位移

從 50nm 至 100nm，其最大效率差是 2.8715%，且發生在相位差為  $0.178\pi$ ，如表 (4.2) 所示。

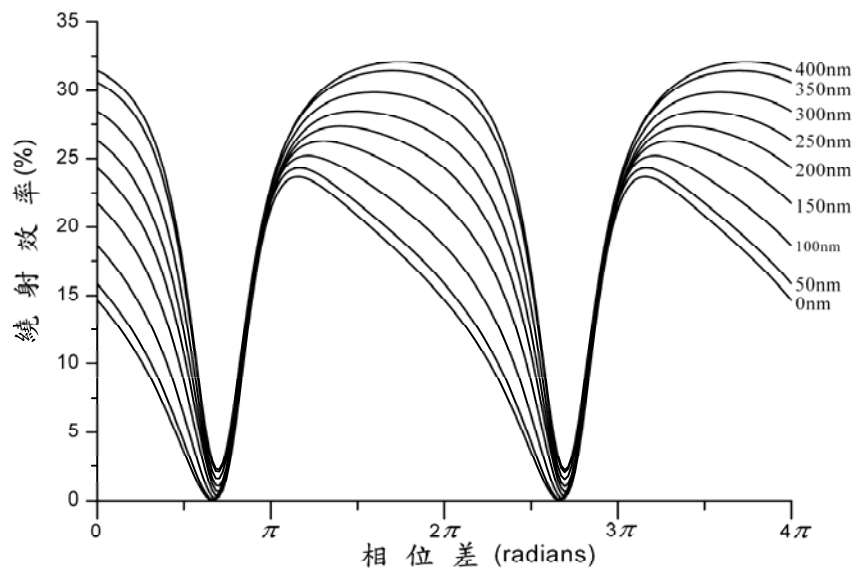


圖 4.3 在週期 800nm 時的繞射效率對相位差之特徵曲線，x 軸為相位差，y 軸為繞射效率。

疊對位移(nm)	最大效率差(%)	相位差(rad)
0-50	1.1910	$0.122\pi$
50-100	2.8715	$0.178\pi$
100-150	3.3368	$0.233\pi$
150-200	2.7563	$0.250\pi$
200-250	2.2571	$0.256\pi$
250-300	2.4712	$0.294\pi$
300-350	2.5014	$0.322\pi$
350-400	0.9243	$0.256\pi$

表 4.2 相位差及最大效率差對間隔 50nm 的疊對位移之計算。

從表(4.2)中可以發現在最大效率差中的最大值是發生在疊對位移從 100nm 至 150nm 時。因此在製作疊對光柵時，我們可以使上下層光柵之間有一預置的疊對位移為 100nm 至 150nm，使其在量測疊對誤差時有一較大的靈敏度。在模擬中，定義疊對量測的靈敏度為  $SOM_{10nm}$ ，其為間隔 10nm 下的最大效率差的最大值，如前例中的  $SOM_{10} = 0.667\%$ 。

## 4.2 最佳化參數

在線性光柵的製作過程中，我們可以最佳化線性光柵的結構，使其疊對量測具有最佳的靈敏度。在不影響製程的情況下，我們可以優化的光柵參數為光柵週期及L/S的比例。在此將使用網格搜尋法，首先把參數做等比例的分割，模擬每一網格點的數值，可得一最佳化的範圍，在此範圍中再縮小分割的距離，以得一較精確的最佳化參數。

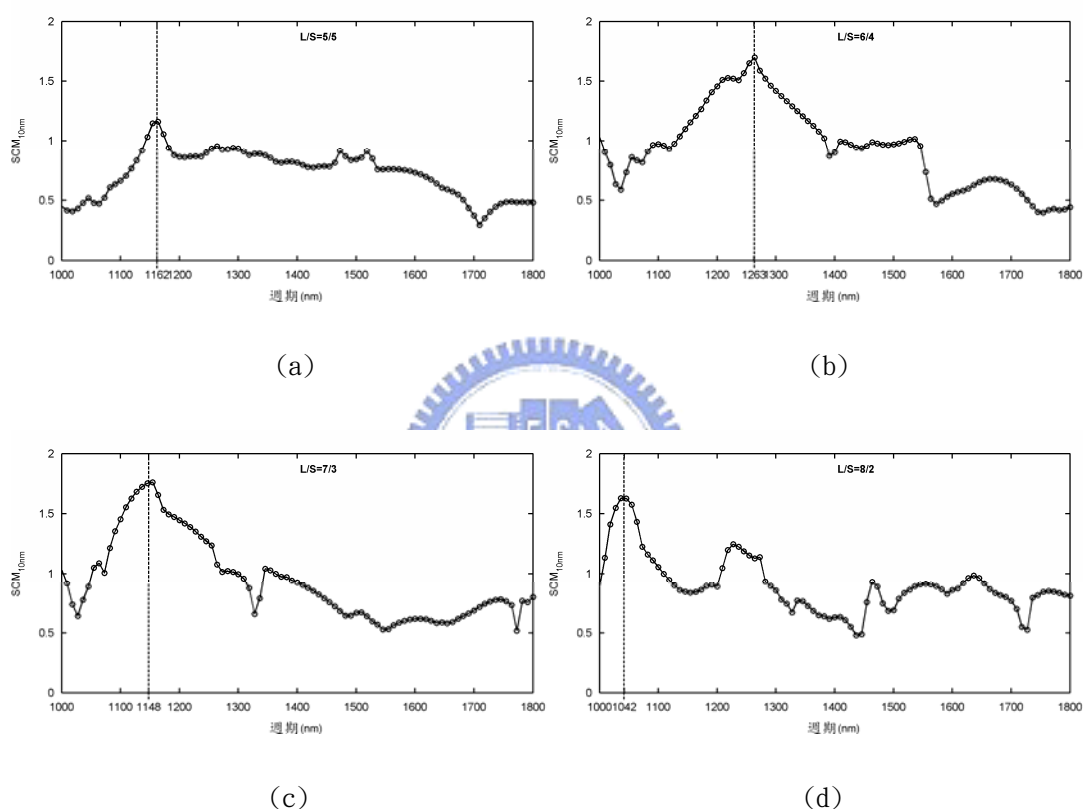


圖 4.4 在大範圍取樣下，最佳化參數模擬結果，光柵週期模擬範圍從1000nm至1800nm間隔10nm，L/S變化從5/5至8/2。 $SOM_{10nm}$ 的峰值從週期1160nm (a)移至週期1260nm (b)最後再回到週期1040nm (d)。 $SOM_{10nm}$ 最大值位於週期1150nm。

在此我們最佳化圖(4.2)及表(4.1)的疊對光柵結構，其中光柵週期的模擬範圍從1000nm至1800nm間隔10nm，而L/S變化從5/5至8/2。圖(4.4)描述了模擬的結果，x軸為光柵的週期，y軸為 $SOM_{10nm}$ 的數值。當L/S的比例從5/5變化至8/2時， $SOM_{10nm}$ 的峰值位置從週期1160nm移動至1260nm再回到1040nm，從圖(4.4)中可得 $SOM_{10nm}$ 在L/S=7/3週期為1150nm時具有最大值為1.76%。為了找到更

精確的最佳化參數，我們縮小模擬的範圍及取樣的間隔，模擬週期從1000nm變化至1300nm，間隔為5nm，而L/S從60/40變化至80/20。圖(4.5)為模擬的結果，而最佳化的參數從原來的A點移至到B點，而B點所示的週期及L/S比例就是所設計的疊對光柵之最佳化參數。

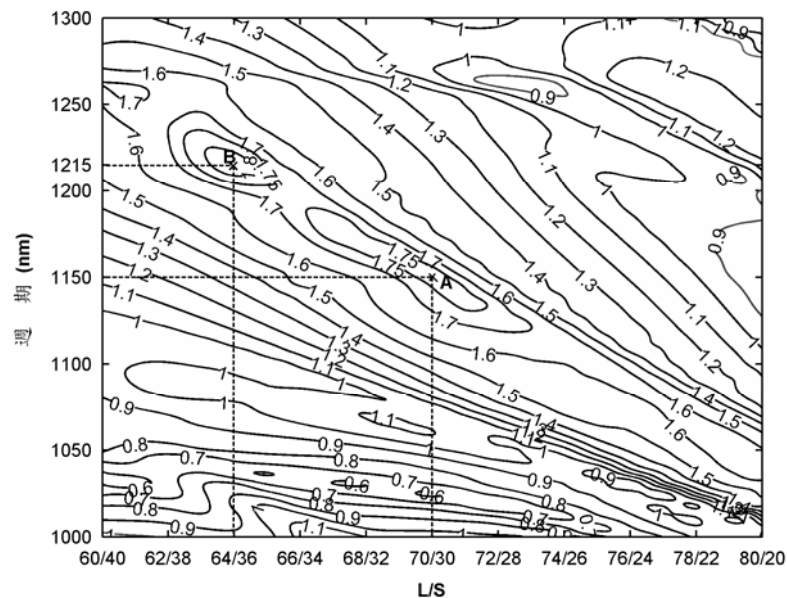


圖 4.5 在小範圍取樣下，最佳化參數模擬結果，光柵週期模擬範圍從1000nm至1300nm間隔5nm，L/S變化從60/40至80/20。位於B點為 $SOM_{10nm}$ 的最大值，其值為1.8287% (L/S為64/36，週期為1215nm)。A點為在大範圍取樣下所找到的最佳值。

最後我們比較干涉式散射儀與角度式散射儀的靈敏度及可量測範圍，即圖(4.2)的疊對光柵分別在兩系統下對位移具有最佳量測靈敏度的結構下做比較。表(4.3)為兩者的最佳化參數，圖(4.6)為模擬結果，其中x軸為疊對誤差 $\sigma$ ，y軸為繞射效率差DDE，定義為

$$DDE = DE_{\sigma} - DE_{\sigma_0} \quad (4.1)$$

其中 $DE_{\sigma}$ 為疊對誤差在 $\sigma$ 時的繞射效率。白色長條圖為干涉式散射儀的模擬結果，其可量測的範圍為-250nm至135nm，而黑色長條圖為角度式散射儀的模擬結果，其可量測的範圍為-160nm至70nm，所以干涉式散射儀可量測範圍比角度式散射儀多了67.4%。分析疊對誤差 $\sigma$ 在+50nm至-50nm之間的靈敏度分

析，可得干涉式散射儀的DDE平均值為4.9%，而角度式散射儀的DDE平均值為3.3%，因此干涉式散射儀的靈敏度在疊對誤差+50nm至-50nm之間比角度式散射儀多47.3%。

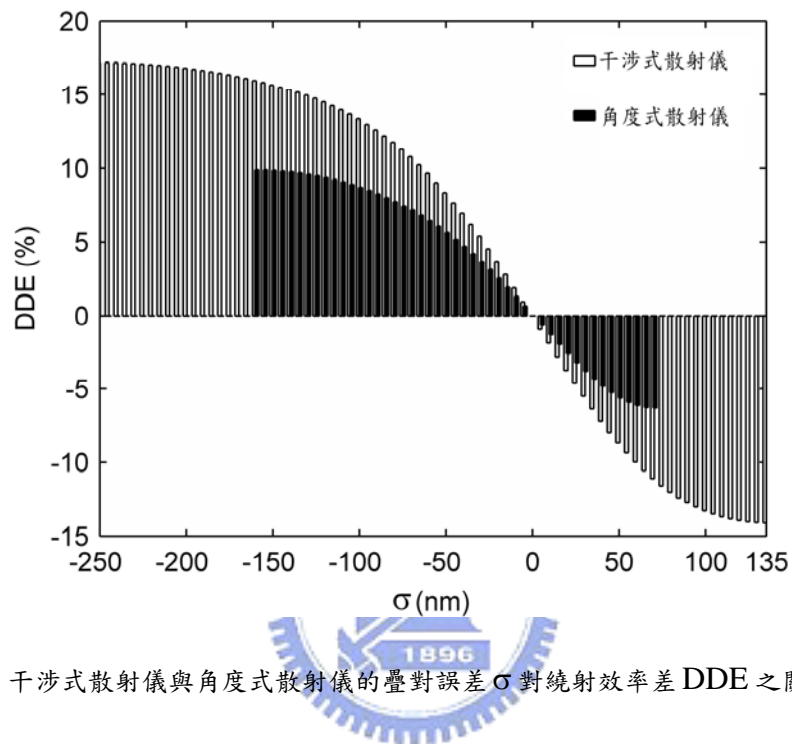


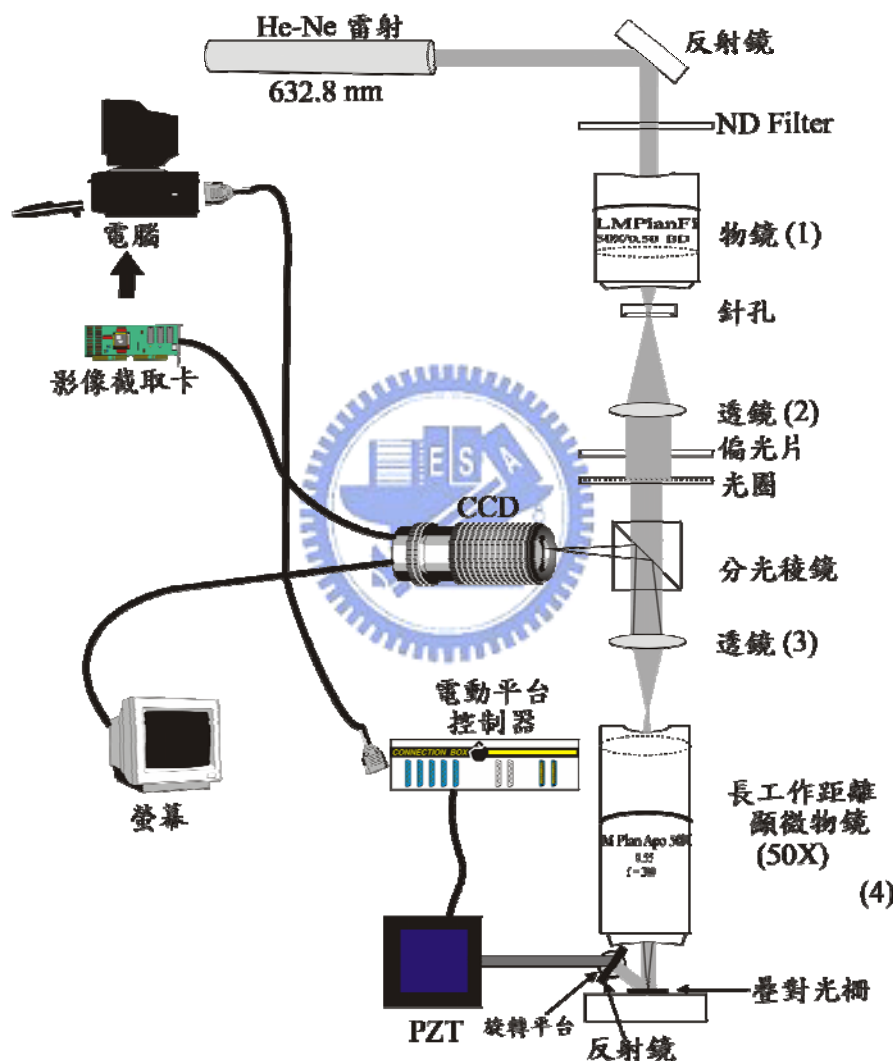
圖 4.6 干涉式散射儀與角度式散射儀的疊對誤差  $\sigma$  對繞射效率差 DDE 之關係曲線。

	週期 (nm)	L/S	$\sigma_0$ (nm)	
干涉式散射儀	1215	64/36	300	相位差 = $1.667\pi$ rad
角度式散射儀	460	48/52	395	角度 = $14.3^\circ$

表 4.3 對於干涉式散射儀與角度式散射儀之疊對光柵最佳化參數。

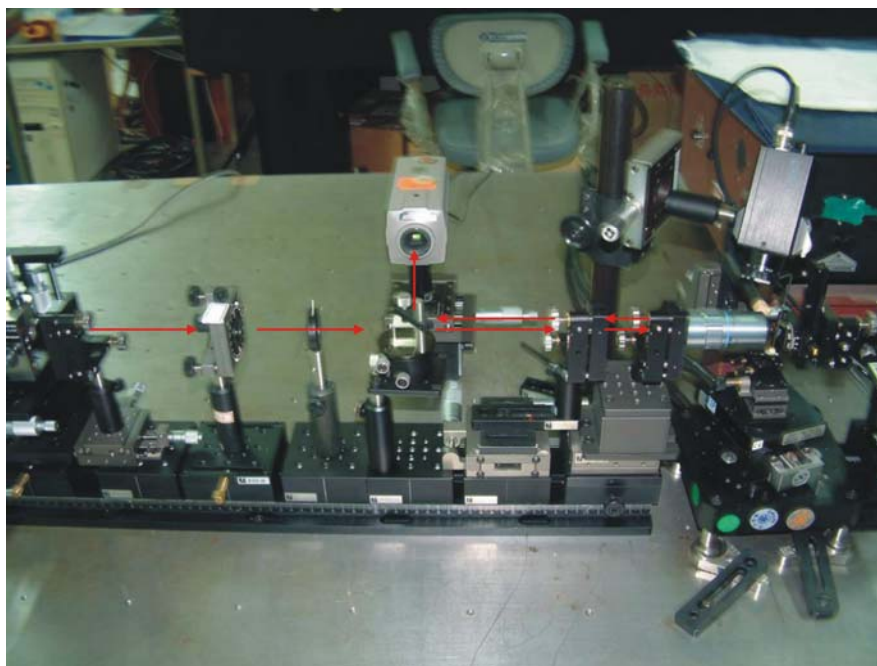
### 4.3 量測結果

圖(4.7)為所架設的干涉式散射儀，其中光源為632.8nm的He-Ne雷射，經由針孔及透鏡(1,2)而達到空間濾波及準直(collimate)。準直光束經由偏光片來控制輸入的光束成為TE模態，再經由透鏡(3)及長工作距離顯微物鏡(4)入射至疊對光柵上，且入射光束為近似平面波。藉由PZT及反射鏡來控制回朔反射至疊對光柵的光程，最後使用光偵測器來量測干涉光的強度。



(a)





(b)

圖 4.7 干涉式散射儀之光學實驗架構。



我們製作了一個用於干涉式散射儀使用的疊對光柵，其結構如圖(3.2)及表(3.1)所示，且採用表(3.3)的最佳化參數。為了滿足嚴格耦合波的邊界條件，即光柵的週期線數為無窮多，而在實際製作上只要有足夠多的週期數目即可(一般實際應用時，週期數目大於 20 個以上)。圖(4.8)為製作出的疊對光柵，其大小為  $85\mu\text{m}\times 65\mu\text{m}$ 。然而在製作過程中的誤差使得疊對光柵的厚度有了些許的改變，我們使用原子力顯微鏡(atomic force microscopy, AFM)去量測每一層的厚度，其結果列於表(4.4)中。

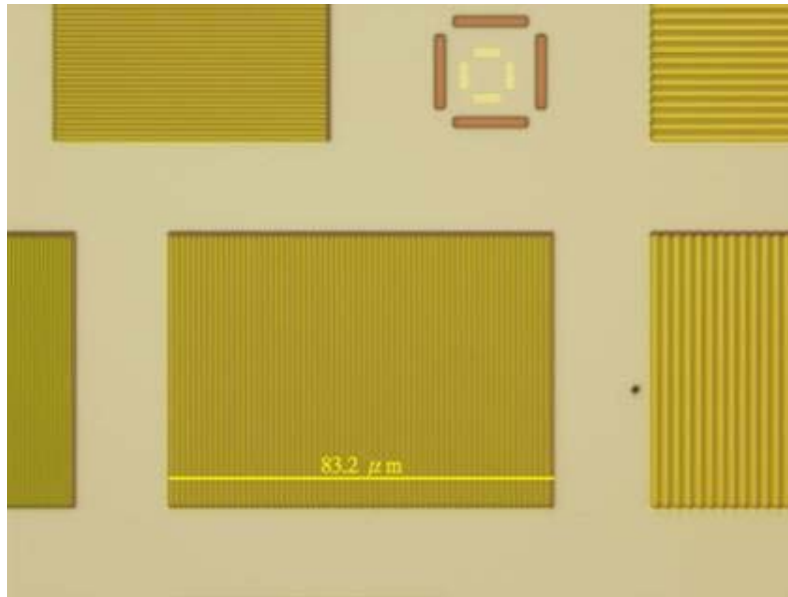


圖 4.8 疊對光柵俯視圖。

層	材料	厚度	折射率(n,k)
上層	Photoresist	789.30nm	1.624-0.000i
中間層	Polysilicon	102.48nm	3.926-0.059i
下層	SiO <sub>2</sub>	49.85nm	1.463-0.000i
基板	Silicon	—	3.867-0.020i

表 4.4 疊對光柵厚度量測結果。

我們使用干涉式散射儀來量測此疊對光柵，以獲得所需要的量測數據。在得到量測數據之後所要作的是逆向回推，所使用的方法為最小平方法(least-square minimization)。所謂最小平方法，即是把所量測的數據與資料庫數據(根據形變誤差，及疊對位移的範圍以嚴格耦合波計算所作的資料庫)相減取平方，則可得量測數據與每一筆資料庫數據的差值，其最小的差值所對應的數據就是回推的數據。圖(4.9)為比對所得之結果，圖中圓圈代表干涉式散射儀量測的結果，實線代表資料庫比對後最接近的理論曲線。經由比對後得知其疊對位移  $\Delta x$  為 433nm，由於我們所設定的  $\sigma_0$  為 395nm，所以此疊對光柵的疊對誤差  $\sigma$  為 133nm。

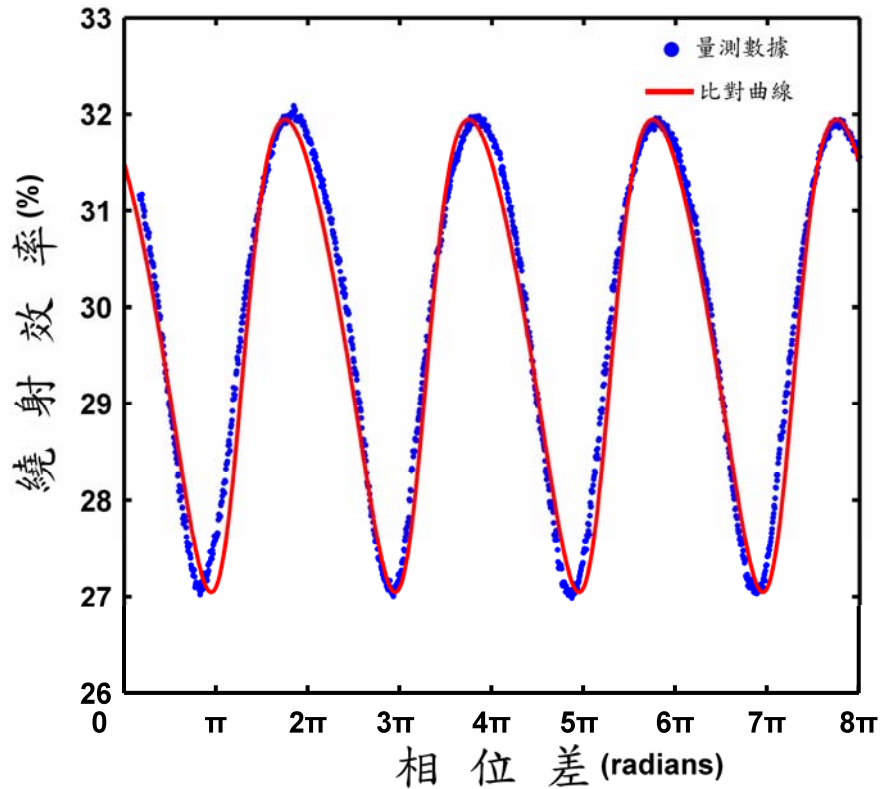
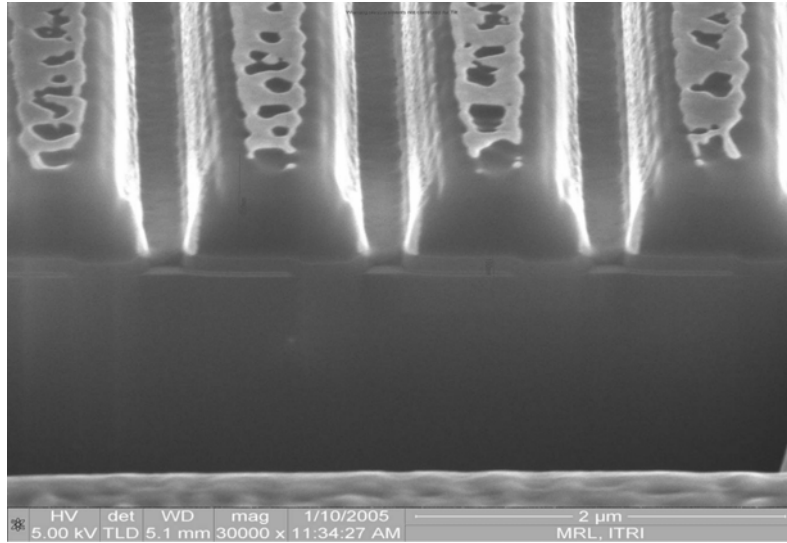
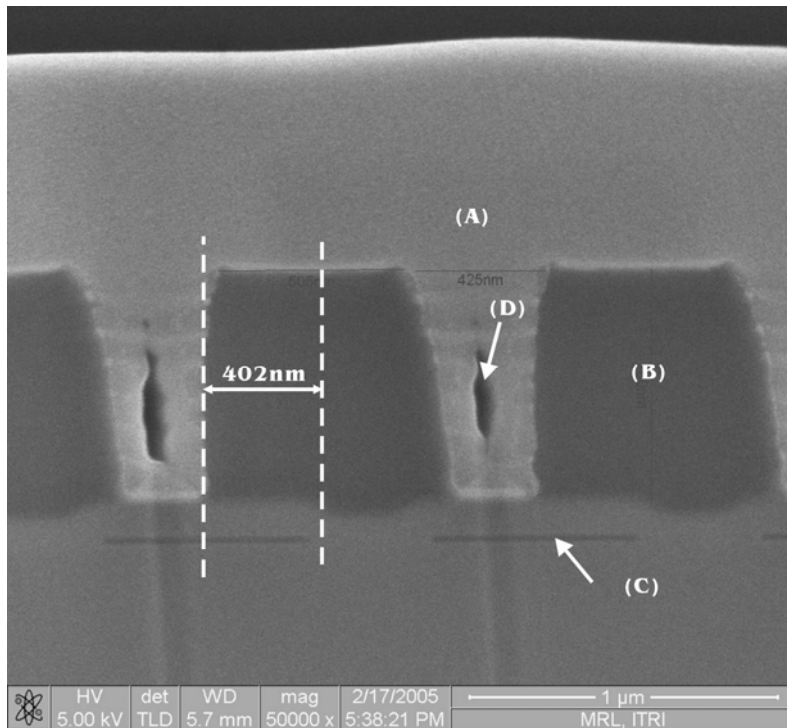


圖 4.9 量測數據與比對結果。

為了檢驗所量測的疊對光柵的疊對位移值，我們用掃瞄式電子顯微鏡去量測疊對光柵的橫截面，如圖(4.10)所示，其中(A)是用於保護光阻的材料，使疊對光柵在做橫截面切割時不會改變上層光柵的結構，(B)為光阻，(C)為SiO<sub>2</sub>，(D)是(A)層所形成的間隙。經由掃瞄式電子顯微鏡的量測，可知疊對位移 $\Delta x$ 為402nm，與我們用干涉散射儀量測的數據差了31nm。誤差的來源可分為兩方面，一為量測系統的不確定性，二為資料庫對疊對光柵的形變的建立不夠完整，如在資料庫中光柵的側邊(side-wall)是直線的，而在實際情況中為曲線且兩側邊為非對稱，這都會造成比對上的誤差。



(a)



(b)

圖 4.10 疊對光柵側視圖。

#### 4.4 結論

在此工作中，我們提出了干涉式散射儀的光學量測系統架構，及如何運用嚴格耦合波向量繞射理論去計算此光學系統量測疊對光柵的繞射效率。接著比較了干涉式散射儀與傳統式散射儀對於疊對光柵量測上的靈敏度。對於所設計的疊對光柵結構，由模擬的結果顯示傳統式散射儀的疊對量測範圍為-160nm 至 70nm 而干涉式散射儀為-250nm 至 135nm。而當疊對從-50nm 至 50nm 時，干涉式散射儀的靈敏度比傳統式散射儀多了 47.3%。此種干涉式散射儀架構比一般的散射儀來得簡單且疊對位移量測的範圍與靈敏度都比較高。因此使用干涉式的散射儀可以解決使用傳統式散射儀無法同時提昇疊對量測的範圍與靈敏度的問題。



## 第五章 跨焦取像量測與分析

跨焦取像量測法(through-focus focus-metric method)是一種藉由在不同的工作距離下量測物體的影像，在此物體為光柵。由於是在不同的工作距離下量測光柵圖樣，所以可以得到一系列的光柵影像，包含最佳聚焦(in-focus)及離焦(out-focus)的影像，由這些影像資料的分析結果與理論數據比對，可獲得所量測的光柵幾何結構。本章主要分三部份，分別為(1)結合邊界元素法及物理光學追跡之成像計算，(2) 實驗架構及量測，(3)量測結果與分析。

### 5.1 結合邊界元素法及物理光學追跡之成像計算

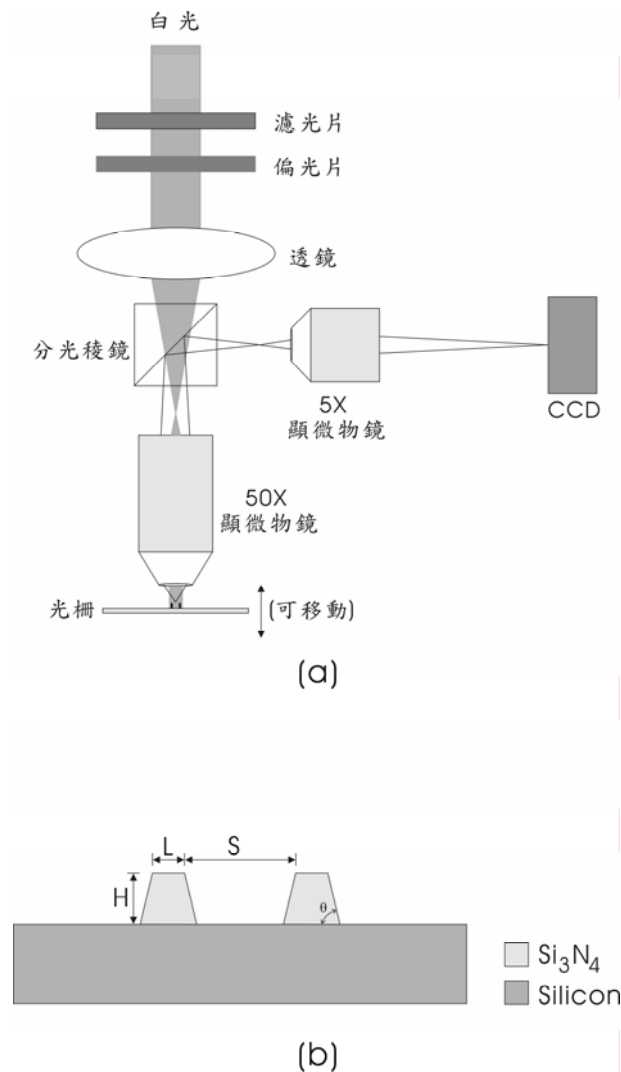


圖 5.1 跨焦取像量測系統(a)及光柵結構(b)。

圖(5.1a)為我們所使用的跨焦取像量測系統，一白光光源經由濾光片，偏光片，顯微物鏡，平行入射至一有限光柵。此一有限光柵只有兩條線，如圖(5.1b)所示。由光柵反射的光場經由 50 倍及 5 倍的顯微物鏡成像在 CCD 上。對此光學系統的模擬，分為兩部份，分別為近場區和遠場區。在近場計算方面，我們使用邊界元素法來計算入射光經由光柵反射的光場分佈，如第三章的圖(3.11)所示。在遠場計算方面，由近場所計算的結果，藉由物理光學追跡把近場的光場經由顯微鏡成像在像平面上。

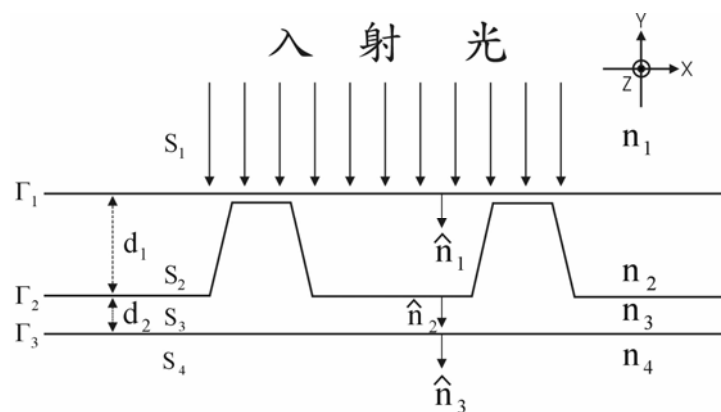


圖 5.2 邊界分割示意圖。

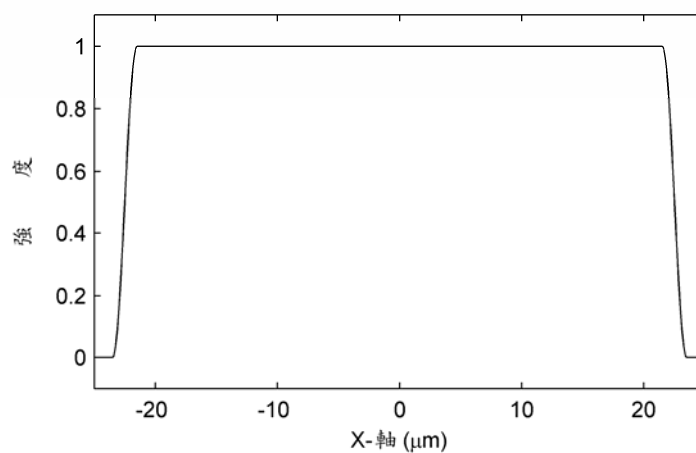
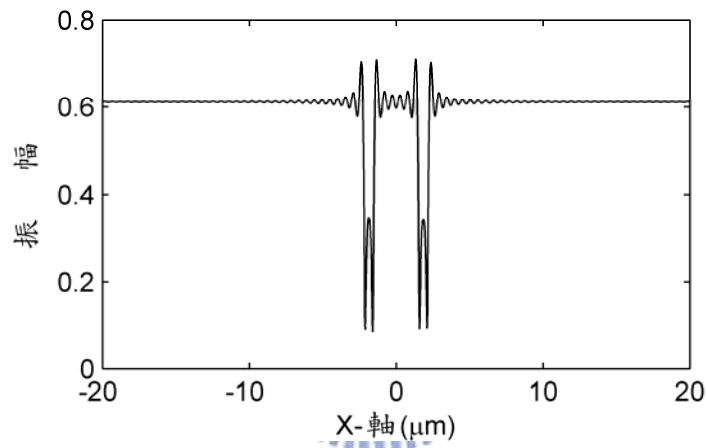


圖 5.3 入射光場強度分佈。

波長(nm)	Si	Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>
480	4.422-0.0871i	2.0694
490	4.353-0.0781i	2.0650
500	4.296-0.0703i	2.0609
510	4.246-0.0640i	2.0570
520	4.195-0.0581i	2.0533
530	4.149-0.0527i	2.0498
540	4.108-0.0473i	2.0464
550	4.073-0.0406i	2.0433

表 5.1 材料折射率。



(a)



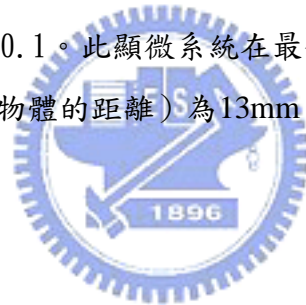
(b)

圖 5.4 反射場在邊界 $\Gamma_1$ 的振幅(a)及相位(b)分佈。



圖(5.1b)為所設計的光柵結構，其中線寬(L)為 $0.7\mu\text{m}$ ，線間距(S)為 $3.0\mu\text{m}$ ，高度(H)為 $50\text{nm}$ ，及側壁角度( $\theta$ )為 $90^\circ$ 。入射光的波長為 $530\text{nm}$ 。當一近似的平面波入射至此有限光柵上時，其反射場的計算可有邊界元素法計算得知。首先，圖(5.1b)的結構可以由數個邊界所組成如圖(5.2)所示，其中高度 $d_1$ 及 $d_2$ 分別為 $55\text{nm}$ 及 $0\text{nm}$ ，折射率 $n_1$ 及 $n_2$ 為 $1.0$ ， $n_3$ 為 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 的折射率， $n_4$ 為 $\text{Si}$ 的折射率，如表(5.1)所示。一近似的平面波由邊界 $\Gamma_1$ 入射至有限光柵上，圖(5.3)為在 $\Gamma_1$ 上近似平面波的強度分佈，此近似平面波的直徑為 $45\mu\text{m}$ 。圖(5.4)為TE模態模擬的結果，其反射場是由入射至有限光柵的散射光所造成的。由計算可得反射場在邊界 $\Gamma_1$ 的振幅及相位分佈，如圖(5.4)所示。

在 $\Gamma_1$ 的波前分佈經由50倍及5倍的顯微物鏡放大了250倍後成像於CCD上，在此所使用的顯微鏡參數如表(5.2)和(5.3)所示，其中50倍及5倍顯微物鏡的數值孔徑(NA)分別為0.55及0.1。此顯微系統在最佳聚焦(in-focus)成像下的工作距離(即顯微物鏡前端至物體的距離)為 $13\text{mm}$ ，而像平面至顯微物鏡後端的距離為 $160\text{mm}$ 。



面	曲率半徑	錐形係數	厚度(mm)	折射率	半徑(mm)
1(物)			13.0		
2	-68.629	17.672	20.0	2.0	8.25
3	-29.287	-0.172	12.0		14.50
4	84.237	0.531	20.0	2.0	18.21
5	-123.541	-2.336	26.0		18.01
6	27.622	-0.122	20.0	2.0	12.69
7	61.422	19.011	6.0		6.88
8	-16.386	-1.279	15.0	2.0	3.92
9	8.484	-1.291	178.0		2.06

表 5.2 50 倍顯微物鏡參數。

面	曲率半徑	錐形係數	厚度(mm)	折射率	半徑(mm)
1			50.0		
2	26.687	0	10.0	2.0	5.34
3	673.267	0	2.6		4.64
4	53.350	-5.799	10.0	2.0	4.44
5	38.360	8.255	1.0		3.865
6	-222.480	401.682	10.0	2.0	3.858
7	93.418	66.783	160.0		3.905
8(像)					

表 5.3 5 倍顯微物鏡參數。

在此我們可以用物理光學追跡的方法，計算出  $\Gamma_1$  的波前經由鏡組之後的成像情況。在此我們使用 ASAP 光學軟體中的物理光學追跡，在 ASAP 模擬中，對於任一光場分佈可以用高斯光束疊加而成如圖(5.5a)所示，而每一個高斯光束可以用五條光線來表示，如圖(5.5b)所示，即一條主光線(base ray)，二條腰光線(waist ray)，及二條發散光線(divergence ray)。主光線位於高斯光束的中心，用來表示高斯光束傳播的方向，腰光線是一條平行於主光線的光線，用來描述高斯光束的半徑，而發散光射是用來表示高斯光束的發散方向。在任一平面的光場分佈，可由光線追跡的結果，還原成高斯光束，再由高斯光束疊加而成實際的光場分佈。

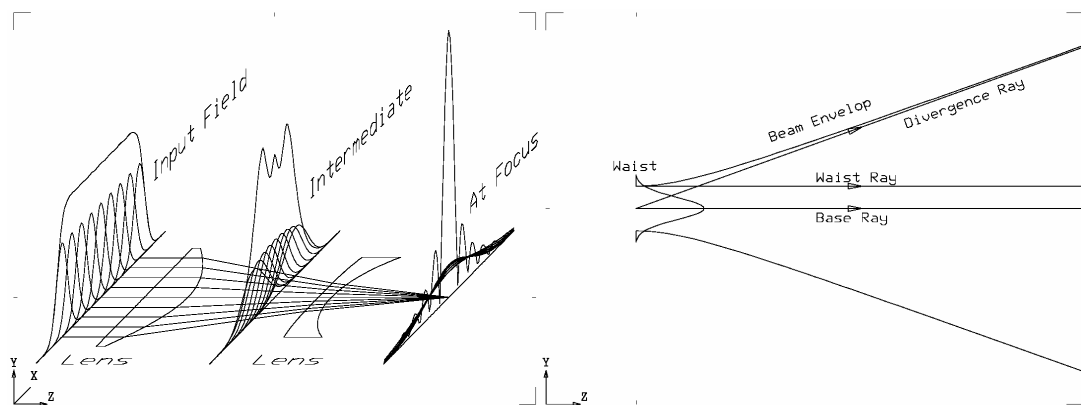


圖 5.5 物理光學追跡示意圖。

圖(5.6)為波前在 $\Gamma_1$ 及經由 250 倍顯微物鏡成像在 CCD 上的強度分佈情形。圖(5.6a)中強度分佈的高頻部份經由顯微物鏡成像之後被消除了，如圖(5.6b)所示，這是因為透鏡系統本身可以看作是一個空間的低通濾波器的原故所至。

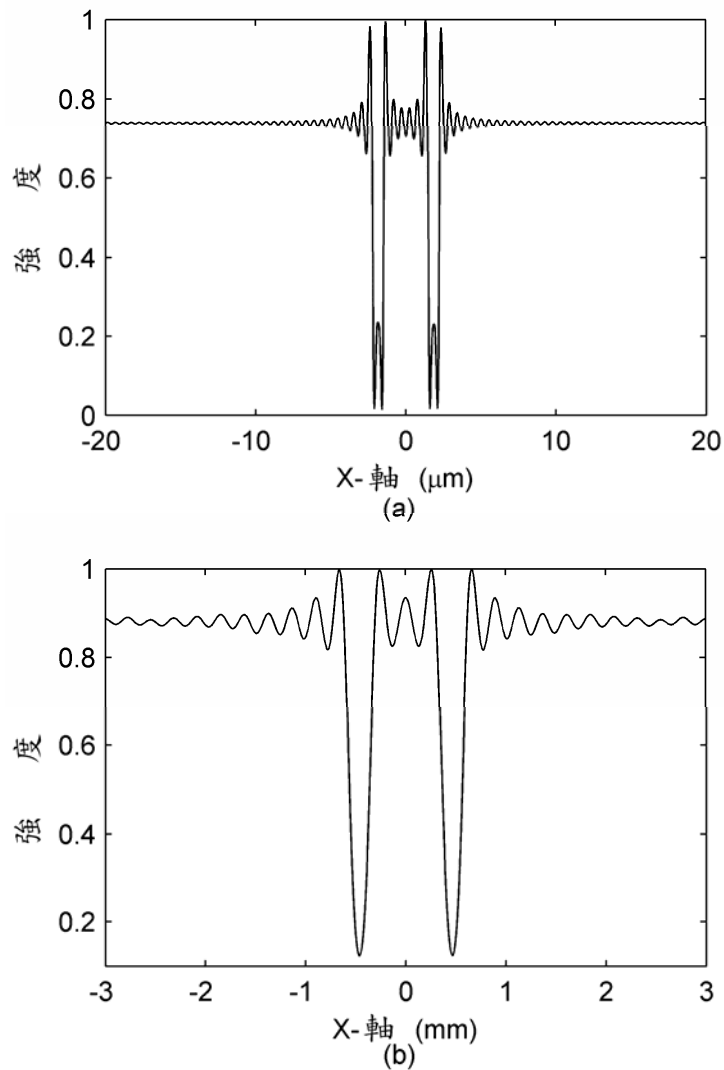
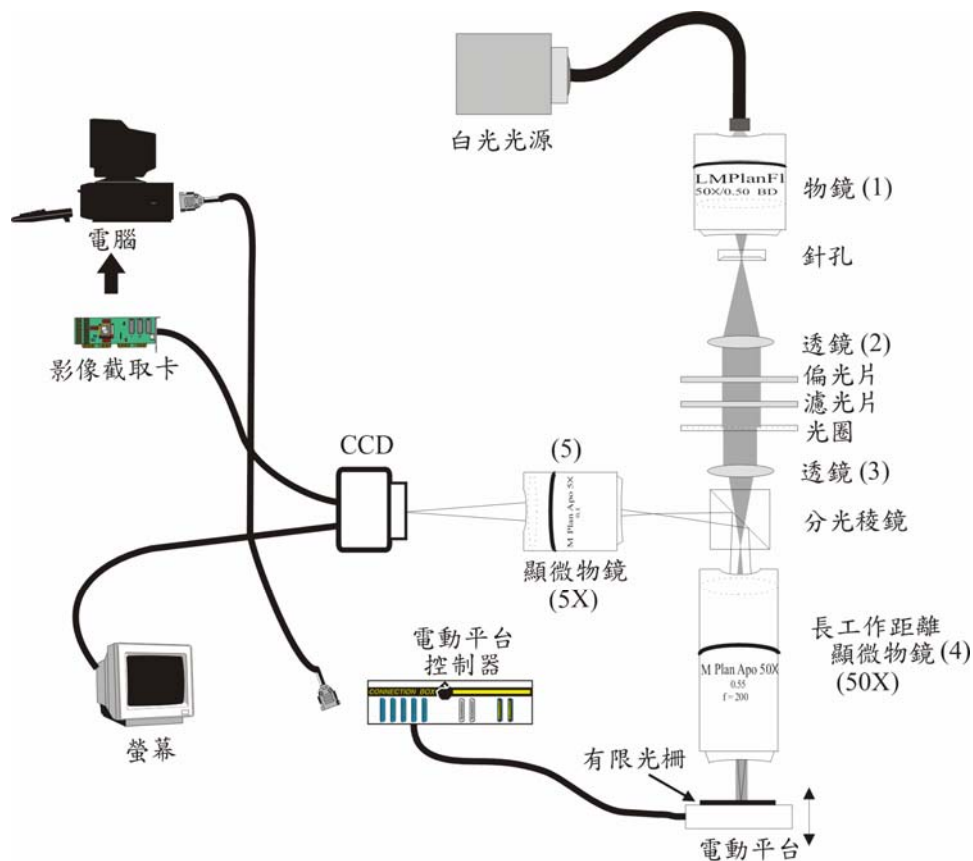


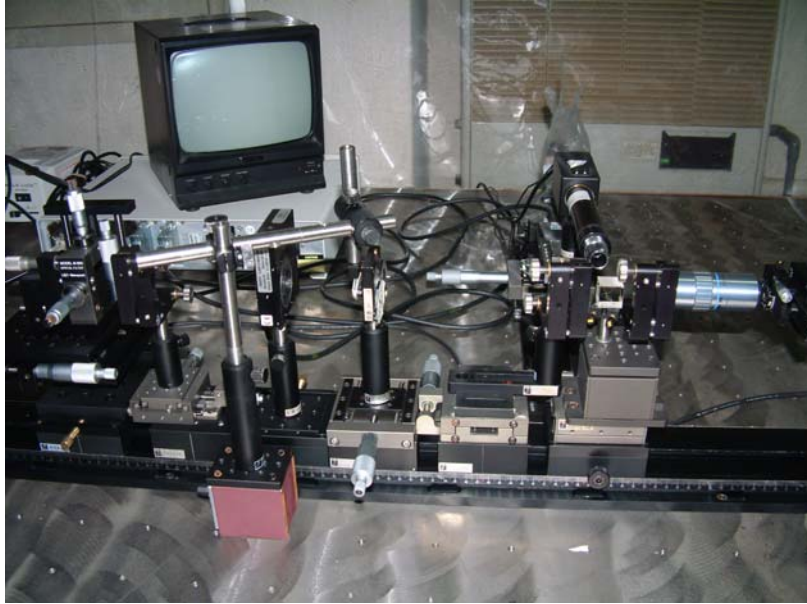
圖 5.6 波前在邊界 $\Gamma_1$ (a)及 CCD(b)上的強度分佈。

## 5.2 實驗系統架構及量測

圖(5.7)為實際量測所使用的量測架構。白光為此系統的光源，經由針孔及透鏡(1,2)而達到空間濾波及準直，準直光束經由濾光片控制入射的波段。圖(5.8a)及圖(5.8b)為白光光源及經由濾光片之後的光譜分佈。此準直光再經由偏光片控制其偏振態，在此我們使用 TE 模態，此光束再經由透鏡(3)及長工作距離顯微物鏡(4)入射在一有限光柵上，且入射光束為一近似的平面波，藉由電動平台控制 50X 顯微物鏡前端至有限光柵的距離，即工作距離，此系統在最佳聚焦 (in-focus) 成像下的工作距離為 13.0mm。由光柵反射的光場經由 50 倍及 5 倍的顯微物鏡成像在 CCD 上，在此我們固定像平面至顯微物鏡後端的距離為 160mm。為了取得跨焦的影像，移動工作距離從 12.95mm 至 13.05mm，間隔  $0.5\mu\text{m}$  去取像。

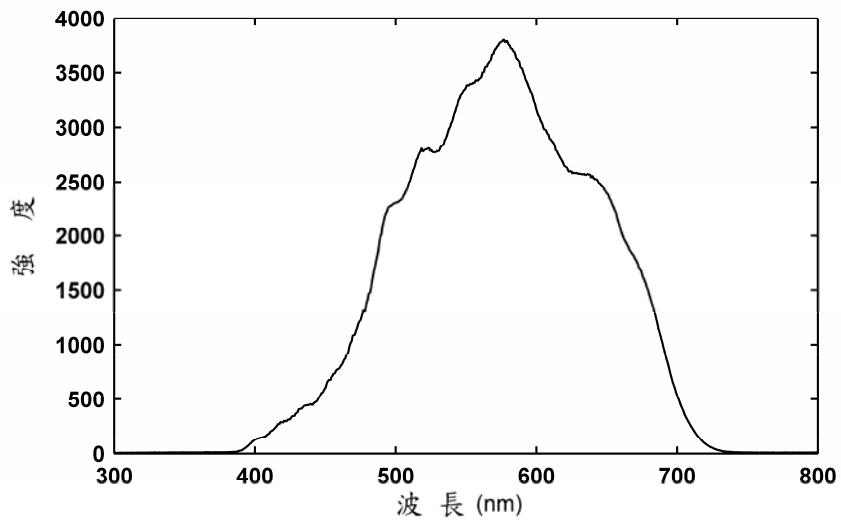


(a)

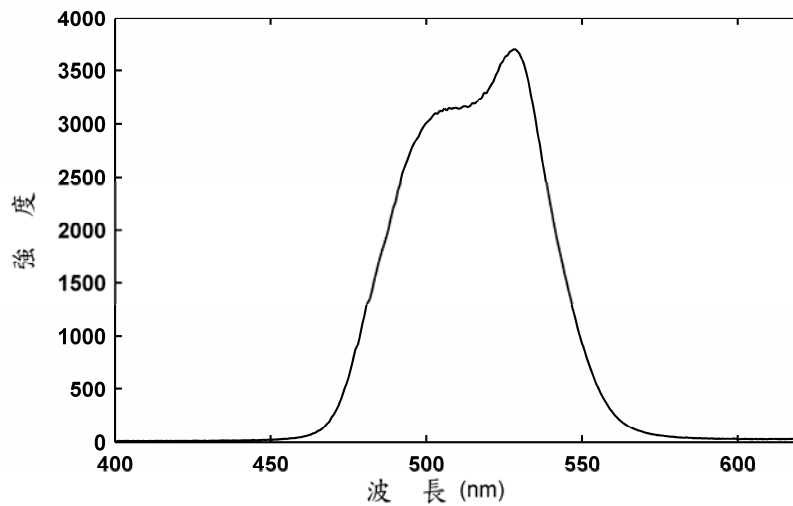


(b)

圖 5.7 跨焦取像顯微物鏡之光學架構。



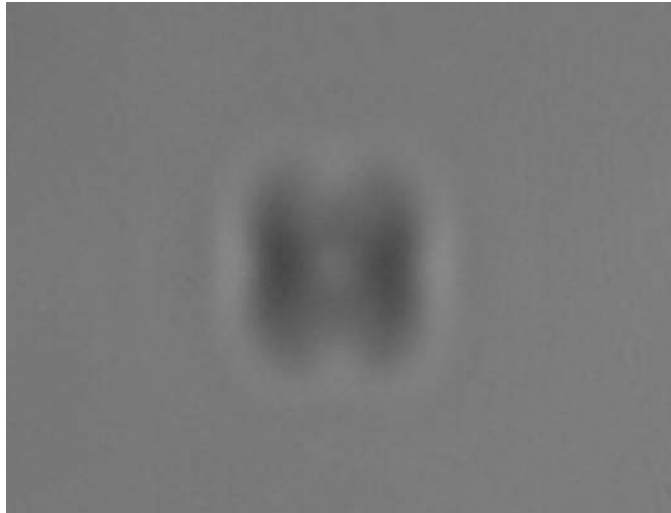
(a)



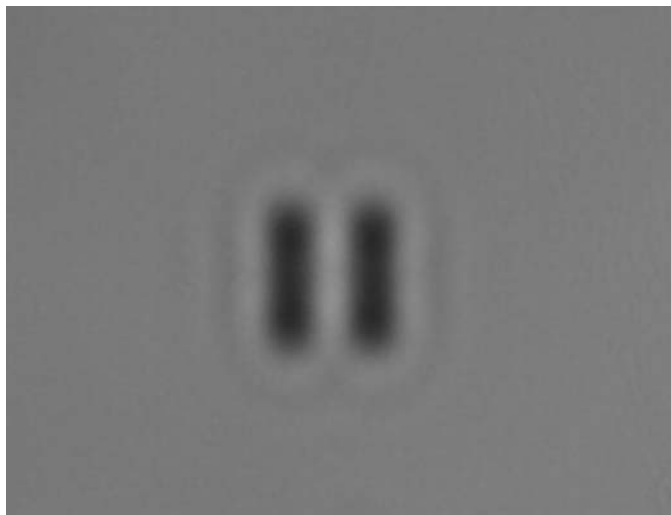
(b)

圖 5.8 白光光源光譜(a)及白光經濾光片之後的光譜(b)。

在此量測中我們所設計製作的光柵結構參數與 5.1 節所使用的光柵結構相同，即兩個週期的有限光柵，基板材料為 Si，光柵材料為  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ，線寬(L)為  $0.7\mu\text{m}$ ，線間距(S)為  $3.0\mu\text{m}$ ，高度(H)為  $50\text{nm}$ ，側壁角度( $\theta$ )為  $90^\circ$ ，光柵在 Z 方向的長度為  $4.7\mu\text{m}$ 。圖(5.9)為此有限光柵經由顯微物鏡在不同的工作距離下的部份量測結果。圖(5.9b)為工作距離為  $13\text{mm}$  時的影像，即在焦點上的影像，其它為離焦時的影像，由圖中可以發現光柵的像除了在焦點上之外，在離焦時也可以看到一較明顯的光柵成像，其強度分佈與在焦點上的光柵成像互補，即相位差為  $180^\circ$ ，這現象因光柵的 Talbot effect 所引起。



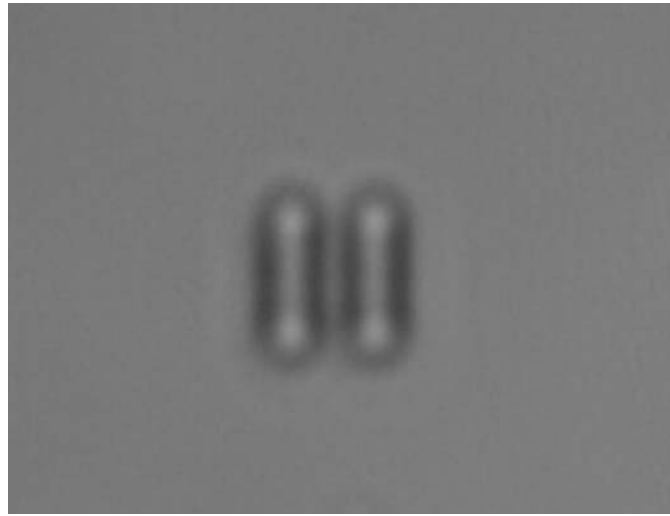
(a)



(b)



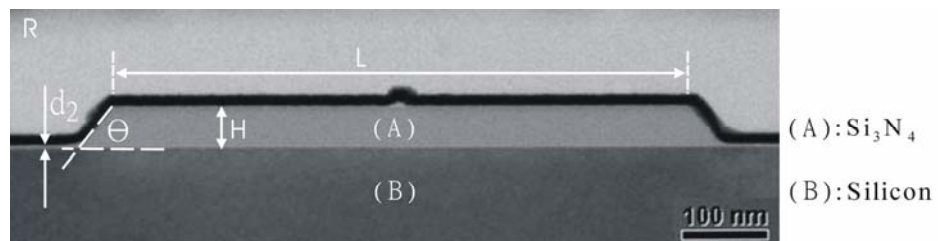
(c)



(d)

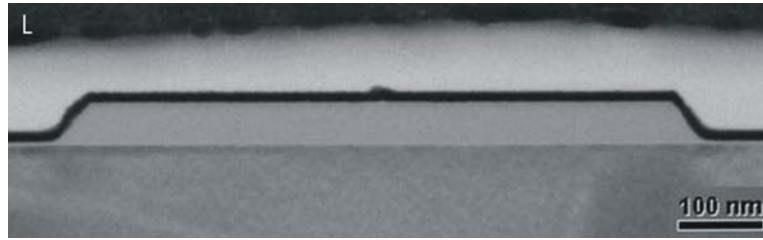
圖 5.9 光柵分別在工作距離為12.9955mm (a)，13.0000mm (b)，  
13.0020mm (c)，即13.0045mm (d)時的成像情況。

由於製作的誤差會造成我們所設計的光柵結構與實際的光柵結構會有差別，因此使用穿透式電子顯微鏡(Transmission Electron Microscopy, TEM)去量測此一有限光柵的實際結構，如圖(5.10)所示，由量測的結果可以得知線寬(L)為0.6713 $\mu\text{m}$ ，高度(H)為49.7nm，側壁角度( $\theta$ )為52.63°，及厚度( $d_2$ )為2.9nm。



(a)



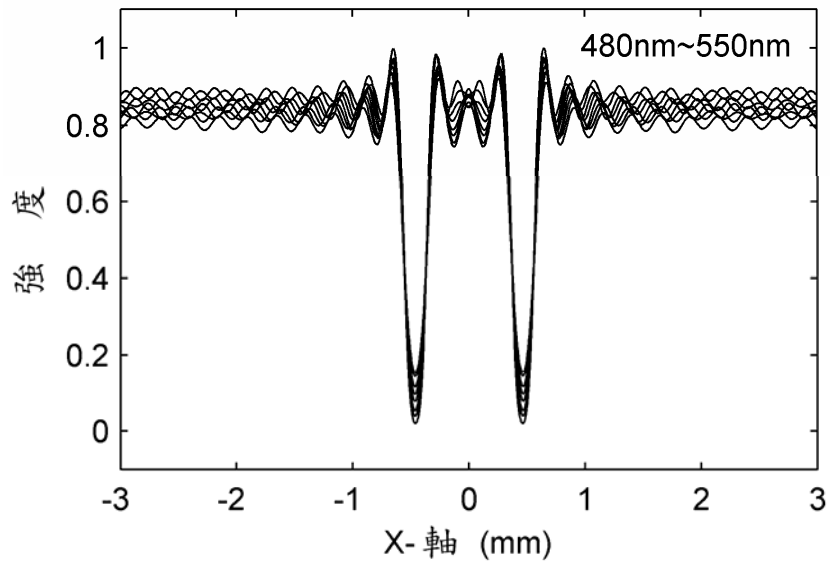


(b)

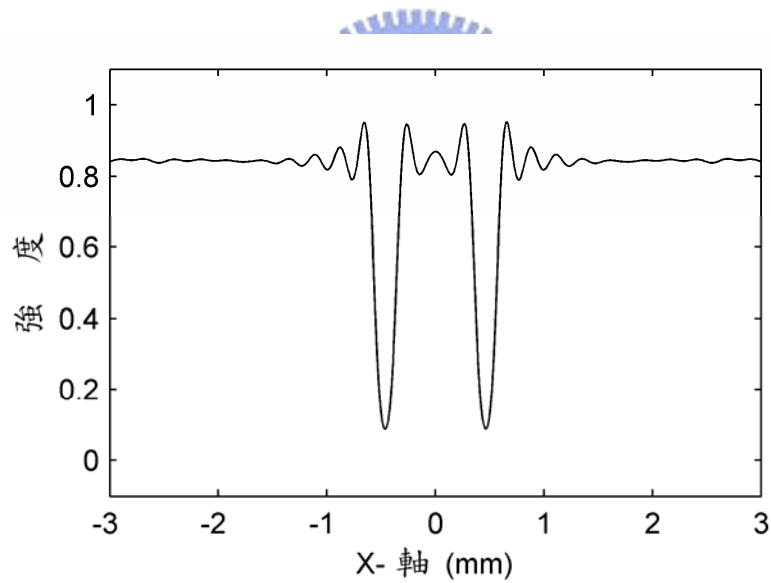
圖 5.10 TEM 量測結果。(a)右邊的線結構，(b)為左邊的線結構。

### 5.3 分析結果

本節將分析跨焦取像量測數據分析結果與理論計算的比對結果，來證明我們所採用的理論計算模型適用於跨焦取像量測的分析。在 5.1 節中的光柵成像計算中，假設光源為單波長，然而在 5.2 節中實際入射至有限光柵的為一有限頻寬的光源，如圖(5.8b)所示，這在理論模擬中必須考慮進去。由圖(5.8b)可知，入射至有限光柵的光源頻譜主要分佈為 480nm 至 550nm，在理論計算中用間隔 10nm 的單波長光源，即 480nm，490nm，...，550nm，去疊加合成 480nm 至 550nm 頻寬的光源。在此理論計算的有限光柵結構採用 5.2 節 TEM 量測的結果，即線寬(L)為 0.6713 $\mu\text{m}$ ，線間距(S)為 3.0 $\mu\text{m}$ ，高度(H)為 49.7nm，側壁角度( $\theta$ )為 52.63°，及厚度( $d_2$ )為 2.9nm。圖(5.11a)是在工作距離為 13mm 時不同波長在 CCD 上的強度分佈。根據 CCD 對不同波長的感光靈敏度去疊加各個波長的強度，來合成頻寬為 480nm 至 550nm 的強度分佈，如圖(5.11b)所示。由圖中可以看出光柵邊界的強度振盪經由頻寬的合成之後趨於平緩。



(a)



(b)

圖 5.11 光柵在 CCD 上的強度分佈。480nm 至 550nm 之單波長強度分佈及頻寬合成之強度分佈(b)。

當我們移動光柵的工作距離，使得光柵在 CCD 上為離焦時的影像，即固定像平面至顯微物鏡後端距離為 160mm，沿光軸方向移動工作距離，使其偏離 13mm。圖 (5.12) 為光柵在離焦為 0 $\mu$ m，2.5 $\mu$ m，及 5.0 $\mu$ m 時在 CCD 上的強度分佈模擬結

果。當光柵在不同離焦情況下，在 CCD 上所呈現的強度分佈會與光柵的幾何結構有密切的關係。我們使用能量梯度法(gradient energy method)去分析在不同離焦情況下的強度分佈，能量梯度定義如下

$$FM_{GE} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |\nabla f(x_i)|^2 \quad (5.1)$$

其中  $m$  為取樣點數， $f(x)$  為  $x$  軸上的強度分佈函數，計算範圍從  $x = -2\text{mm}$  至  $x = +2\text{mm}$ 。圖(5.13)為能量梯度計算的模擬結果，其中離焦範圍從  $-15\mu\text{m}$  至  $+20\mu\text{m}$ ，由圖中可以看到有三個主要的峰值，其為光柵的自成像所造成的結果。

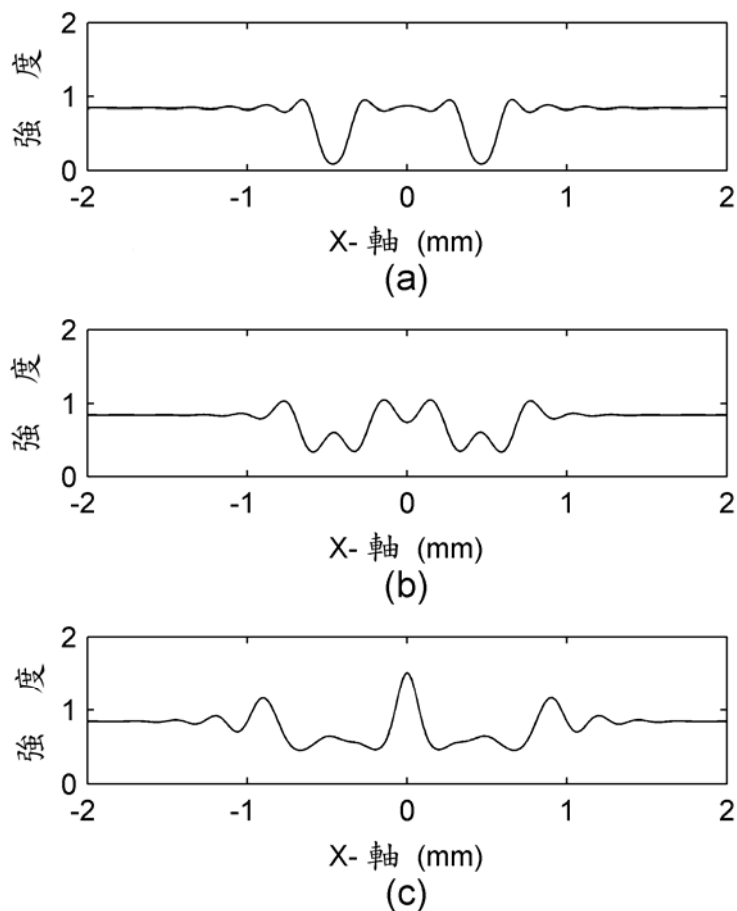


圖 5.12 光柵離焦為  $0\mu\text{m}$  (a)， $2.5\mu\text{m}$  (b)，及  $5.0\mu\text{m}$  (c) 時在 CCD 上的強度分佈。

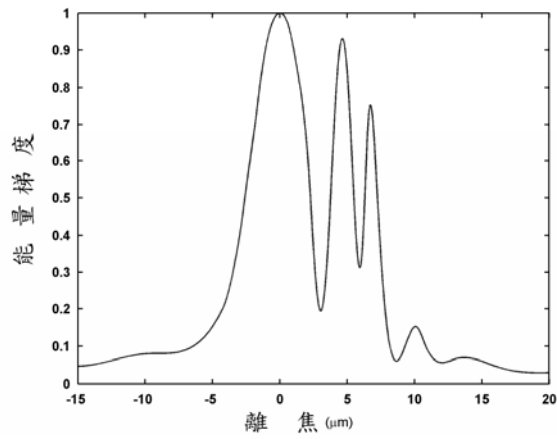


圖 5.13 跨焦取像之能量梯度分佈模擬結果。

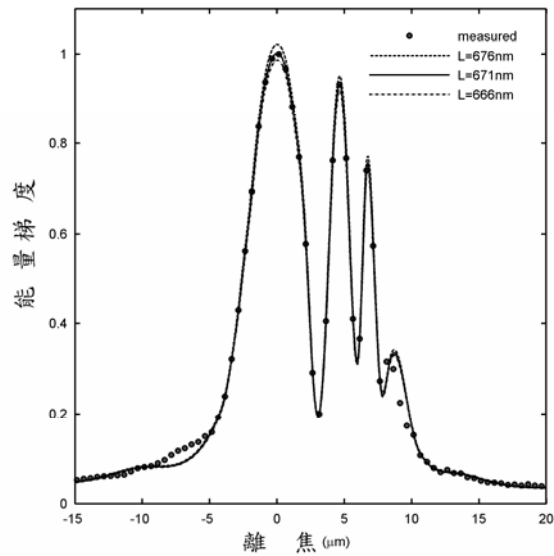


圖 5.14 跨焦取像之能量梯度量測與比對結果。

圖(5.14)為所製作的有限光柵經由跨焦取像量測分析的結果與理論計算結果的比對，其中圓點代表在不同離焦距離下的量測結果，曲線為在不同線寬  $L=676\text{nm}$ ， $671\text{nm}$ ，及  $666\text{nm}$  下的理論計算結果。由圖中可知在線寬( $L$ )為

671nm 下為最接近量測的結果，且當線寬改變 $\pm 5\text{nm}$ 時，可看出模擬上的差異，這說明了此量測系統對線寬的量測具有奈米等級的解析度，且我們對於有限光柵成像的理論計算有很好的一致性。

## 5.4 結論

在此工作中，我們結合了邊界元素法及物理光學追跡去模擬具有兩個週期的有限光柵經由 250 倍顯微物鏡在 CCD 上的成像情況。當連續移動有限光柵對顯微物鏡的距離，可以在 CCD 上得到數幅光柵的影像，再藉由能量梯度的分析，可以得到光柵結構對在不同工作距離下的影像關係曲線。在理論與量測的分析中，可以得知對於二個週期的有限光柵理論計算與量測結果有很好的一致性，且量測的解析度具有奈米等級。在我們的工作中，因為對於光柵的實際結構已用 TEM 量測得知，所以在理論計算上是用已知的光柵結構去做理論上的模擬，然而在實際的應用上對於光柵的實際結構是不知道的，所以在實際的應用上必須使用資料庫比對的方式去建立不同光柵結構的理論曲線，再把光柵量測的曲線與之比對，來獲得光柵的實際結構。



## 參考文獻

1. J. W. Goodman, Introduction to Fourier Optics (McGraw-Hill, New York, 1996), Chap. 6.
2. M. Born and E. Wolf, Principles of Optics (Cambridge University Press, Cambridge, 1999), Chap. 9.
3. N. T. Sullivan and R. M. Newcomb, "Critical dimension measurement in the SEM: comparison of backscattered vs. secondary electron detection," Proc. SPIE, vol. 2196, pp.118-127, 1994.
4. R. Quattrini, C. W. MacNaughton, R. C. Elliott, W. Ng, R. Malhotra, M. Ananth, and Jason C. Yee, "Initial characterization results of a low-voltage CD SEM for reticle metrology," Proc. SPIE, vol. 3236, pp.154-159, 1997.
5. J. S. Villarrubia, R. G. Dixson, S. N. Jones, J. R. Lowney, M. T. Postek, R. A. Allen, and M. W. Cresswell, "Intercomparison of SEM, AFM, and electrical linewidths," Proc. SPIE, vol. 3677, pp.587-598, 1999.
6. T. S. Hayes and R. S. Henninger, "E-beam column monitoring for improved CD SEM stability and tool matching," Proc. SPIE, vol. 3998, pp.65-72, 2000.
7. J. S. Villarrubia and A. E. Vladar, "Dimensional metrology of resist lines using a SEM model-based library approach," Proc. SPIE, vol. 5375, pp.199-209, 2004.
8. B. Su, K. C. Rajkumar, and M. Agrawal, "Limitation of CD AFM on resist foot detection," Proc. SPIE, vol. 3332, pp.151-162, 1998.
9. S. Gonda, K. Kinoshita, H. Noguchi, and T. Kurosawa, "AFM measurement of linewidth with sub-nanometer scale precision," Proc. SPIE, vol. 5752, pp.156-162, 2005.
10. G. Dahlen, M. Osborn, H. C. Liu, R. Jain, W. Foreman, and J.R. Osborne, "Critical dimension AFM tip characterization and image reconstruction applied to the 45-nm node," Proc. SPIE, vol. 6152, pp.214-220, 2006.
11. Y. S. Ku, A. S. Liu, and N. Smith, "Through-focus technique for nano-scale grating pitch and linewidth analysis," Opt. Express, vol. 13, pp.6699-6708, 2005.
12. R. M. Silver, R. Attota, M. Stocker, M. Bishop, J. Jun, and R. Larrabee, "High-resolution optical metrology," Proc. SPIE, vol. 5752, pp.67-79, 2005.
13. R. Attota, R. M. Silver, T. A. Germer, and M. Bishop, "Application of

Through-focus Focus-metric Analysis in High Resolution Optical Metrology, ”  
Proc. SPIE, vol. 5752, pp.1441-1449, 2005.

14. M. Subbarao and J. K. Tyan, “Selecting the Optimal Focus Measure for Auto-focusing and Depth-From-Focus,” IEEE Trans. On Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. 20, pp.864-869, 1998.
15. D. M. Shyu, M. H. Lu, “Analysis of through-focus images with boundary-element method in high resolution optical metrology. Rev. of Scientific Instruments, vol. 77, 2006.
16. M. G. Moharam, E. B. Grann, and D. A. Pommet, “Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings,” J. Opt. Soc. Am. A, vol. 12, pp.1068-1076, 1995.
17. N. Chateau and J. P. Hugonin, “Algorithm for the rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction,” J. Opt. Soc. Am. A, vol. 11, pp.1321-1331, 1994.
18. E. N. Glytsis and T. K. Gaylord, “Rigorous three-dimensional coupled-wave diffraction analysis of single and cascaded anisotropic gratings,” J. Opt. Soc. Am. A, vol. 4, pp.2061-2080, 1987.
19. D. M. Pai and K. A. Awade, “Analysis of dielectric gratings of arbitrary profiles and thicknesses,” J. Opt. Soc. Am. A, vol. 8, pp.755-762, 1991.
20. A. K. Cousins and S. C. Gottschalk, “Application of the impedance formalism to diffraction grating with multiple coating layers,” App. Opt., vol. 29, pp.4269-4271, 1990.
21. P. Cornet, J. Chandezon, and C. Faure, “Conical diffraction of a plane wave by an inclined parallel-plate grating,” J. Opt. Soc. Am. A, vol. 14, pp. 437-449, 1997.
22. S. Peng and G. M. Morris, “Efficient implementation of rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings,” J. Opt. Soc. Am. A, vol. 12, pp.1087-1096, 1995.
23. S. T. Han, Y. L. Tsao, R. M. Walser, and M. F. Becker, “ Electromagnetic scattering of two-dimensional surface-relief dielectric gratings,” App. Opt., vol. 31, pp. 2343-2352, 1992.
24. D. A. Pommet, M. G. Moharam, and E. B. Grann, “Limits of scalar diffraction theory for diffractive phase elements,” J. Opt. Soc. Am. A, vol. 11, pp.1827-1834, 1994.

25. E. N Glytsis and T. K. Gaylord, “ Rigorous 3-D coupled wave diffraction analysis of multiple superposed gratings in anisotropic media,” *App. Opt.*, vol. 28, pp. 2401-2421, 1989.
26. M. G. Moharam and T. K. Gaylord, “Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 3, pp.1780-1787, 1986.
27. E. N. Glytsis and T. K. Gaylord, “ Three-dimensional(vector) rigorous coupled-wave analysis of anisotropic grating diffraction,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 7, pp.1399-1420, 1990.
28. J. S. Ye, B. Z. Dong, B. Y. Gu, G. Z. Yang, and S. T. Liu, “Analysis of a closed-boundary axilens with long focal depth and high transverse resolution based on rigorous electromagnetic theory,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 19, pp.2030-2035, 2002.
29. J. S. Ye, B. Y. Gu, B. Z. Dong, and S. T. Liu, “Applications of improved first Rayleigh-Sommerfeld method to analyze the performance of cylindrical microlenses with different f-numbers,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 22, pp. 862-869, 2005.
30. K. Hirayama, E. N. Glytsis, and T. K. Gaylord, “Rigorous electromagnetic analysis of diffraction by finite-number-of-periods gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 14, pp.907-917, 1997.
31. Y. Nakata and M. Koshiba, “Boundary-element analysis of plane-wave diffraction from grove-type dielectric and metallic gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 7, pp.1494-1502, 1990.
32. J. E. Akin, *Application and implementation of finite element methods* (Academic, London, 1982).
33. A. Taflove, *Finite-Difference Time-Domain Method* (Artech House, Boston, 1995).
34. R. Harrington, *Time-Harmonic Electromagnetic Fields* (McGraw-Hill, New York, 1961).
35. N. T. Sullivan, ” Semiconductor pattern overlay,” *Handbook of Critical Dimension Metrology and Process Control*, K. M. Monahan, Ed., vol. CR52, pp.160-188 SPIE, Bellingham, 1993.
36. R. E. Chappelow and L. P. Hayes, ”Measurement of registration of overlaid test patterns by the use of reflected light,” U.S. Patent No. 4,757,207, July 12, 1988.



37. W. Yang, L. W. Roger, and S. Rabello, "A novel diffraction based spectroscopic method for overlay metrology," *Pro. SPIE*, vol. 5038, pp. 200-207, 2003.
38. J. Bishoff, R. Brunner, J. Bauer, and U. Haak, "Light diffraction based overlay measurement," *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XV*, N. T. Sullivan, Ed., vol. 4344, pp.222-233, 2001.
39. H. T. Huang, G. Raghavendra, A. Sezginer, and K. Johnson, "Scatterometry-based overlay metrology," *Pro. SPIE*, vol. 5038, pp.126-137, 2003.
40. P. C. Logofatu, "Sensitivity analysis of grating parameter estimation," *App. Opt.*, vol. 41, pp.7179-7186, 2002.
41. Y. S. Ku, S. C. Wang, D. M. Shyu, and N. Smith, "Scatterometry-based metrology with feature region signatures matching," *Opt. Express*, vol. 14, 2006.
42. C. H. Ko, Y. S. Ku, N. Smith, D. M. Shyu, and S. C. Wang, "Comparisons of overlay measurement using conventional bright-field microscope and angular scatterometer," *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XIX*, Richard M. Silver, Editor, pp. 987-996, 2005.
43. D. M. Shyu, M. H. Lu, "Overlay metrological system for overlaid linear gratings by an interferoscatterometer," *Rev. of Scientific Instruments*, vol. 76, 2005.
44. H. F. Talbot, "Facts relating to optical science no. IV," *Phil. Mag.* 9 (1836).

## 個人著作

### Paper

1. Deh-Ming Shyu, Mao-Hong Lu and Chun-Hung Ko ” High-resolution through-focus metric with two-pitch grating target,” Journal of Optics Communications (2007).
2. Deh-Ming Shyu and Mao-Hong Lu, “Analysis of the through-focus images with boundary-element method in high resolution optical metrology,” Review of Scientific Instruments, vol. **77** (2006).
3. Deh-Ming Shyu and Mao-Hong Lu, “Overlay metrological system for overlaid linear gratings by an interferoscatterometer,” Review of Scientific Instruments, vol. **76** (2005).
4. Yi-Sha Ku, Shih-Chun Wang, Deh-Ming Shyu, Nigel Smith, “Scatterometry-based metrology with feature region signatures matching,” Optics Express, vol. **14**, No. 19. (2006).
5. Keh-Yi Lee, Deh-Ming Shyu, Rong-Terng Juang, Chih-Feng Huang, “A novel structure of the beam splitter based on multiple-waveguide couplers,” Journal of optical communications, vol. **20**, pp. 122-125 (1999).
6. Keh-Yi Lee, Deh-Ming Shyu, Yeang-Yih Jong, “Analysis of abruptly-bent ridge Ti:LiNbO waveguides by beam propagation method involving the Runge-Kutta algorithm,” Journal of optical communications, vol. **20**, pp. 168-173 (1999).
7. Keh-Yi Lee, Rong-Terng Juang, Chih-Feng Huang, Deh-Ming Shyu, Yeang-Yih Jong, “Beam propagation analysis of optical waveguides by the Runge-Kutta method,” International journal of modeling and simulation, vol. **21**, pp. 234-239 (2001).

### Conference

1. Deh-Ming Shyu, Yi-Sha Ku, Nigel Smith, “Angular Scatterometry for Line-Width Roughness Measurement, Proc. of SPIE, vol. **6518** (2007).
2. Deh-Ming Shyu, Chun-Hung Ko, Yi-Sha Ku, “Grating-type biochip inspection system using angular scatterometer,” International Symposium on Micro & Nano Technology (2006).

3. Shih-Chun Wang, Yi-Sha Ku, Deh-Ming Shyu, Chun-Hung Ko, Nigel Smith, “Influence of semiconductor manufacturing process variation on device parameter measurement for angular scatterometry,” Proc. of SPIE, vol. **6152** (2006).
4. Chun-Hung Ko, Yi-Sha Ku, Nigel Smith, Deh-Ming Shyu, Shih-Chun Wang, Sheng-Hua Lu, “ Comparisons of overlay measurement using conventional bright-field microscope and angular scatterometer,” Proc. of SPIE, vol. **5752** (2005).

### **Patent**

1. Dual-lens hybrid diffractive/refractive imaging system, US6724532.
2. 二片式繞射/折射複合型成像系統, I220699。

### **Others**

1. 陸懋宏, 徐得銘, “散射儀用於疊對的量測,” 機械月刊 2005, 頁 8-16。

