

國立交通大學

光電工程研究所

碩士論文

疊對光柵結構參數最佳化分析
(模擬退火演算法)與疊對誤差之比對

The optimization analysis of the structure parameters of overlaid gratings

(Simulated annealing algorithm)

and an algorithm for computing the overlay error

研究生：盧俊瑋

指導教授：陸懋宏教授

中華民國九十四年六月

疊對光柵結構參數最佳化分析
(模擬退火演算法)與疊對誤差之比對

The optimization analysis of the structure parameters of overlaid gratings

(Simulated annealing algorithm)

and an algorithm for computing the overlay error

研究生：盧俊瑋

Student : Jun-Wei Lu

指導教授：陸懋宏

Advisor : Mao-Hong Lu



碩士論文

A Thesis
Submitted to Institute of Electro-Optical Engineering
College of Electronic Engineering and Computer Science
National Chiao Tung University
in partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of master
in Electro-Optical Engineering
June 2005
HsinChu, Taiwan, Republic of China

中華民國 九十四年 六月

疊對光柵結構參數最佳化分析 (模擬退火演算法)與疊對誤差比對

研究生：盧俊璋

指導教授：陸懋宏

國立交通大學 光電工程研究所

摘 要

本論文是以嚴格耦合波理論來分析疊對光柵的各項參數。光柵疊對誤差可利用零級繞射效率變化來求得，此方法為非接觸式和非破壞性量測，並可量測疊對誤差至奈米等級。

設計一矽基板上具有上下兩層光柵，其上層光柵材料為光阻，下層光柵材料為介質，控制上下層光柵的錯位量，使其從零至一光柵週期，再藉由 Chateau 所提出的嚴格耦合波理論來分析計算光柵之繞射效率，並經由上下層光柵的錯位使零級繞射效率產生變化來回推求得光柵的錯位量。

論文中將分析梯形光柵在錯位結構下的繞射情況，並利用全區域範圍與部分區域範圍之搜尋方法來進行疊對誤差的比對，以及使用網格法、N 點法、模擬退火法與綜合法來搜尋光柵結構參數，使在模擬分析時具有最佳的靈敏度。

The optimization analysis of the structure parameters of overlaid gratings (Simulated annealing algorithm) and an algorithm for computing the overlay error

Student : Jun-Wei Lu

Advisor : Mao-Hong Lu

Institute of Electro-Optical Engineering
National Chiao Tung University

Abstract

In this thesis, the rigorous coupled wave analysis (RCWA) is used to simulate the overlaid gratings. The overlay can be found by the zero order diffractive efficiency. This method, scatterometry, has the advantages of being noncontact and nondestructive, and an accuracy of nanometer.

The structure in our simulation is the overlay of two linear gratings. On a silicon substrate, two layers with linear grating structure are overlaid and in between a thin film layer is deposited. We change the overlay of the overlaid gratings from zero to one pitch, and analyze the zero-order diffractive efficiency of the overlaid gratings by RCWA. Then, the overlay between the overlaid gratings can be found.

We also analyze the zero order diffractive efficiencies of overlaid gratings with non-zero sidewall angles. The overlay can be regressed by global and partial-global searches. The parameters of the overlaid gratings can be optimized for the highest sensitivity by the mesh-grid method, the N-point method, the simulated annealing method, and the hybrid method.

誌謝

在交大光電所這段求學的日子裡，看著自己論文能夠如期完成，這一路所需要感謝的人實在很多。首先要感謝的是指導老師 陸懋宏教授的耐心指導，促使我更加獨立思考、判斷分析與研究的能力，讓我在學習過程與為人處事上亦是獲益良多。

在論文研究方面，有幸能得許多學長不厭其煩的指導，使其論文能更加如期完成。感謝徐得銘學長在光學理論、程式語言、分析方法和論文寫作方面給予我相當多的指導與建議。王夢偉學長在我求學過程中給予的指教和意見。施至柔學長、姚柏宏學長、鮑友南學長和王俊勛學長在學習及生活中的關心與幫助。陳建丞學長、馮致華學長、陳慶勳學長和呂怡瑱學姊在課業學習及論文研究上的寶貴意見和經驗的傳授。

此外，要感謝實驗室同學銘成、廷彥在兩年生活中的陪伴與幫助，以及課業上的討論與意見。及瑞傑、傳煜、俊毅、國峰等等同學們和室友國樺在課業與生活上的關心照顧。還有益邦、重義、家慶、書銘、國輝、憲徽、承翰、少堂、永旭、致豪等…，這些陪伴我一起成長的好朋友們。

最後，特別要感謝父母親對予我全力支持，讓我能在無後顧之憂下得以順利地完成學業，沒有他們就沒有今天的我！感謝在新竹的阿姨對我無微不至的關心照顧，使我在陌生的新竹加倍感受到溫暖；以及佩慈一路上的鼓勵與關懷，使我在研究路途中找到更多的信心，生活上也更加多采多姿。要感謝的人太多，感謝的話也說不完，在此僅以此論文獻給我最敬愛的父母、師長、阿姨、佩慈以及所有幫助過我與愛護關心我的每一位朋友，非常感謝你們。

俊瑋
于 新竹交大
2005年7月

目錄

	頁次
中文摘要	i
英文摘要	ii
誌謝	iii
目錄	iv
表目錄	vii
圖目錄	viii
第一章 緒論	1
1-1 前言	1
1-2 研究動機	3
1-3 論文章節安排	6
第二章 嚴格耦合波向量繞射理論	7
2-1 前言	7
2-2 嚴格耦合波向量繞射理論	9
2-2-1 TE 極化態入射	10
2-2-2 TM 極化態入射	17
2-3 光柵折射率表示式	19
第三章 疊對光柵模擬分析	23
3-1 單層光柵模擬分析	23

3-2 疊對光柵模擬分析 -----	28
第四章 梯形光柵模擬分析 -----	31
4-1 單層梯形光柵模擬分析 -----	31
4-2 具梯形角度之疊對光柵模擬分析 -----	37
第五章 光柵疊對誤差比對 -----	43
5-1 前言 -----	43
5-2 全區域範圍 -----	44
5-2-1 全區域範圍分析光柵疊對誤差 -----	44
5-2-2 全區域範圍分析光柵疊對誤差舉例 -----	48
5-2-3 討論 -----	51
5-3 部分區域範圍 -----	52
5-3-1 最大平均靈敏度範圍 -----	53
5-3-1-1 靈敏度 -----	53
5-3-1-2 最大平均靈敏度範圍 -----	54
5-3-1-3 最大平均靈敏度範圍舉例 -----	56
5-3-1-4 討論 -----	61
5-3-2 M 點最大靈敏度 -----	62
5-3-2-1 M 點最大靈敏度 -----	62
5-3-2-2 M 點最大靈敏度舉例 -----	65



第六章 光柵結構參數之最佳化	69
6-1 前言	69
6-2 網格法	71
6-2-1 網格法舉例說明	71
6-2-2 討論	74
6-3 N 點法	74
6-3-1 N 點法舉例說明	75
6-3-2 討論	76
6-4 模擬退火演算法	77
6-4-1 模擬退火演算法	77
6-4-2 模擬退火演算法舉例說明	83
6-4-3 討論	87
6-5 綜合法	88
6-5-1 網格法+縮小區間網格法	88
6-5-2 網格法+N 點法+模擬退火演算法	91
6-5-3 討論	98
第七章 結論	99
參考文獻	101
作者簡歷	103

表目錄

表 1.1	2004 國際半導體科技藍圖(ITRS)製程線寬的演進-----	1
表 5.1	模擬入射角 $\theta_i = 13^\circ \sim 17^\circ$, 錯位量 $D = 0 \sim 200nm$ 的零級繞射效率值(%) ----	57
表 5.2	假設模擬量測入射角 $\theta_i = 13^\circ \sim 17^\circ$ 入射於疊對光柵的零級繞射效率值(%) --	57
表 5.3	模擬入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$, 錯位量 $D = 0 \sim 50nm$ 的零級繞射效率值(%) -----	59
表 5.4	假設模擬量測入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ 入射於疊對光柵的零級繞射效率值(%) --	59
表 5.5	模擬入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$, 錯位量 $D = 20 \sim 30nm$ 的零級繞射效率值(%) ----	60
表 5.6	模擬入射角 $0^\circ, 1^\circ, 2^\circ, 26^\circ, 29^\circ$, 錯位量 $D = 0 \sim 200nm$ 的零級繞射效率值(%) ---	66
表 5.7	假設模擬量測入射角 $0^\circ, 1^\circ, 2^\circ, 26^\circ, 29^\circ$ 入射於疊對光柵的零級繞射效率值(%) -	66
表 5.8	模擬入射角 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$, 錯位量 $D = 0 \sim 50nm$ 的繞射效率值(%) -	67
表 5.9	假設模擬量測入射角 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ 入射疊對光柵的繞射效率值(%)	67
表 5.10	模擬入射角 $\theta_i = 29^\circ, 28^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$, 錯位量 $D = 20 \sim 30nm$ 的繞射效率值(%)	68
表 6.1	光柵結構參數最佳化分析之變數定義表-----	72
表 6.2	光柵結構參數最佳化分析之變數定義表-----	83
表 6.3	模擬退火演算法演算中的參數設定表-----	84
表 6.4	模擬退火演算法搜尋路徑軌跡參數表-----	85
表 6.5	模擬退火演算法搜尋路徑軌跡參數表-----	87
表 6.6	光柵結構參數最佳化分析之變數定義-大步距分析-----	90
表 6.6	光柵結構參數最佳化分析之變數定義-小步距分析-----	90
表 6.8	網格法的參數設定表-----	92
表 6.9	使用 9 點法搜尋光柵結構參數最佳化之路徑軌跡參數值表-----	93
表 6.10	使用模擬退火演算法搜尋分析之變數設定表-----	94
表 6.11	模擬退火演算法演算中的參數設定表-----	94
表 6.12	模擬退火演算法搜尋路徑軌跡參數表-----	95
表 6.13	模擬退火法使用隨機取樣和 9 點法取樣之搜尋路徑參數表-----	97

圖目錄

圖 1.1 曝光對準時光罩與晶圓上對準鍵圖	3
圖 2.1 二階光柵的基本幾何架構圖	10
圖 2.2 表面蝕刻型的光柵可分為 L 層之示意圖	14
圖 2.3 單層二階光柵示意圖	20
圖 2.4 光柵折射率分佈圖	21
圖 2.5 單層二階光柵(偏移中心 s)示意圖	22
圖 2.6 光柵(偏移中心 s)折射率分佈圖	22
圖 3.1 單層光柵系統結構圖	24
圖 3.2 TE 模態, 不同入射角入射, 對不同 N 階矩陣大小下之零級繞射效率曲線	25
圖 3.3 TM 模態, 不同入射角入射, 對不同 N 階矩陣大小下之零級繞射效率曲線	25
圖 3.4 TE 模態, 不同的入射角對零級繞射效率曲線	27
圖 3.5 TM 模態, 不同的入射角對零級繞射效率曲線	27
圖 3.6 上下層錯位光柵之系統結構圖	29
圖 3.7 TE 模態, 不同的入射角及錯位量對零級繞射效率曲線	30
圖 3.8 TM 模態, 不同的入射角及錯位量對零級繞射效率曲線	30
圖 4.1 單層梯形光柵系統結構圖	32
圖 4.2 梯形光柵分割結構示意圖	33
圖 4.3 TE 模態, 單層梯形光柵繞射效率分佈(一)	33
圖 4.4 TE 模態, 單層梯形光柵繞射效率分佈(二)	34
圖 4.5 TM 模態, 單層梯形光柵繞射效率分佈(一)	34
圖 4.6 TM 模態, 單層梯形光柵繞射效率分佈(二)	35
圖 4.7 TE 模態, 單層梯形光柵對不同的梯形角的零級繞射效率分佈作圖	36
圖 4.8 TM 模態, 單層梯形光柵對不同的梯形角的零級繞射效率分佈作圖	36
圖 4.9 具梯形角度之疊對光柵結構	37
圖 4.10 TE 模態, 具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 1^\circ$)	38
圖 4.11 TE 模態, 具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 2^\circ$)	38
圖 4.12 TE 模態, 具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 3^\circ$)	39

圖 4.13	TE 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 4^\circ$)	39
圖 4.14	TE 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 5^\circ$)	40
圖 4.15	TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 1^\circ$)	40
圖 4.16	TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 2^\circ$)	41
圖 4.17	TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 3^\circ$)	41
圖 4.18	TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 4^\circ$)	42
圖 4.19	TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 5^\circ$)	42
圖 5.1	全區域範圍分析光柵疊對誤差的流程圖	46
圖 5.2	TE 模態入射光以不同入射角及錯位量的零級繞射效率曲線(一)	47
圖 5.3	TE 模態入射光以不同入射角及錯位量的零級繞射效率曲線(二)	47
圖 5.4	疊對光柵以不同入射角之 TE 模態入射光入射所量測的零級繞射效率曲線	49
圖 5.5	模擬疊對光柵錯位量 $D = 0 \sim 200nm$ ，步距 $50nm$ 形成的零級繞射效率曲線	49
圖 5.6	模擬疊對光柵錯位量 $D = 50 \sim 100nm$ ，步距 $10nm$ 形成的零級繞射效率曲線	50
圖 5.7	圖 5.6 中之區域放大圖	50
圖 5.8	模擬疊對光柵錯位量 $D = 60 \sim 70nm$ ，步距 $2nm$ 形成的零級繞射效率曲線	51
圖 5.9	TE 模態入射光以不同入射角及錯位量的零級繞射效率曲線	52
圖 5.10	部分區域取最大平均靈敏度範圍分析光柵疊對誤差的流程圖	55
圖 5.11	不同入射角與錯位量模擬零級繞射效率曲線圖($D = 0 \sim 200nm$ ，步距 $50nm$)	57
圖 5.12	不同入射角與錯位量模擬零級繞射效率曲線圖($D = 0 \sim 50nm$ ，步距 $10nm$)	58
圖 5.13	不同入射角與錯位量模擬零級繞射效率曲線圖($D = 20 \sim 30nm$ ，步距 $2nm$)	60
圖 5.14	不同入射角與錯位量模擬零級繞射效率曲線圖($D = 0 \sim 200nm$ ，步距 $50nm$)	61
圖 5.15	部分區域取 M 個最大靈敏度之入射角分析光柵疊對誤差的流程圖	64
圖 5.16	不同入射角與錯位量模擬零級繞射效率曲線圖($D = 0 \sim 200nm$ ，步距 $50nm$)	66
圖 6.1	光柵結構參數最佳化分析-三維立體圖	73
圖 6.2	光柵結構參數最佳化分析-圖 6.1 之等高線圖	73
圖 6.3	N 點法之示意圖($N=9$)	76
圖 6.4	波茲曼(Boltzmann)機率分布函數圖	79
圖 6.5	模擬退火演算法流程圖	82
圖 6.6	模擬退火演算法的搜尋路徑軌跡圖	85

圖 6.7 模擬退火演算法的搜尋路徑軌跡圖	86
圖 6.8 網格法+縮小區間網格法搜尋光柵結構參數最佳化分析結果等高線圖	90
圖 6.9 使用 9 點法來分析光柵結構之最佳化的路徑軌跡圖	93
圖 6.10 模擬退火演算法所搜尋分析的路徑軌跡圖	95
圖 6.11 模擬退火演算法使用隨機取樣和 9 點法取樣的搜尋路徑軌跡圖	97



第一章 緒論

1-1 前言

近年來隨著半導體技術的演進與製程技術的進步，元件的大小從微米(micrometer)漸漸地走向奈米(nanometer)的尺度，也因此有許多新的製程技術便相應而生。根據 2004 國際半導體科技準則(International Technology Roadmap of Semiconductor ,ITRS)的規劃與預測，如表 1.1 所示，從 2001 年的 0.15 微米線寬發展到 0.13 微米再到至今的 90 奈米線寬，而線寬在 0.13 微米以下則是正式從微米時代進入了奈米時代的領域。在半導體製造工藝迎來了 90 奈米的時代，下一個研究開發的焦點將轉移到 65 奈米製程的工藝。在 2004 年隨著 300 釐米晶圓及 90 奈米技術的進一步量產，65 奈米技術節點也已經正式進入開發與試製的階段。根據 ITRS 的規劃和預測，2007 年將迎來 65 奈米工藝的時代，所以目前各個廠商與研究單位皆全力進行對 65 奈米製程工藝的開發與研究[1, 2]。

表 1.1 2004 國際半導體科技藍圖(ITRS)製程線寬的演進

Year of Production	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
Technology Node				hp90			hp65			hp45			hp32
MPU/ASIC 1/2 Pitch(nm)	130	115	107	90	80	70	65	57	50	45	40	35	32
Wafer overlay metrology precision(nm)			3.5	3.2	2.8	2.5	2.3	2.1	1.9	1.8		1.4	1.3

單位：nanometer

2007年將成為65奈米製程世代，以65奈米製程量產的系統晶片，不僅面積只有目前最先進90奈米製程的50%、耗電量大幅降低，性能卻更加提升，未來將應用於數位家電、手機等消費性的產品中。然而隨著製程線寬縮小的推進，在製程技術上將面臨微影技術成為半導體製程上的最大瓶頸。

微影製程在半導體製造中一直扮演著舉足輕重的角色，隨著半導體產品技術需求的提升，微影技術也需不斷地提高解析度以製作更微小的尺寸。微影技術的目的是將積體電路結構的圖形製作在光罩(mask)上，然後將光罩上的圖形轉印在塗佈有機光阻(photo resist)薄膜的晶圓上，經過穿過光罩光線的照射及顯影的處理，光阻層便可呈現出與光罩上相同圖形結構，並可將圖形適當地縮小，以便在晶圓上製造出許多相同電路結構的積體電路產品，而微影技術的方法在本論文中就不做加以的介紹。

本論文主要是在探討在微影製程疊對量測(overlay metrology)的技術，即光罩與晶圓之間的對準技術。目前半導體製程在線寬大於90奈米的對準技術都是使用光學顯微鏡來判讀半導體製程中層對層(layer to layer)之間的疊對(overlay)，其方法是在光罩與晶圓上製作對準鍵圖形，如圖 1.1 所示，再利用顯微鏡將光罩與晶圓上對準鍵圖形影像放大由 CCD 輸出螢幕，藉由影像疊對的方式來校正光罩與晶圓之間的對準。這在未來半導體製程技術進入65奈米時代後，將會遇到微影製程疊對量測技術的準確度已無法達到所要求的精度，這將對整個半導體製程上是一個重大的問題及瓶頸所在。

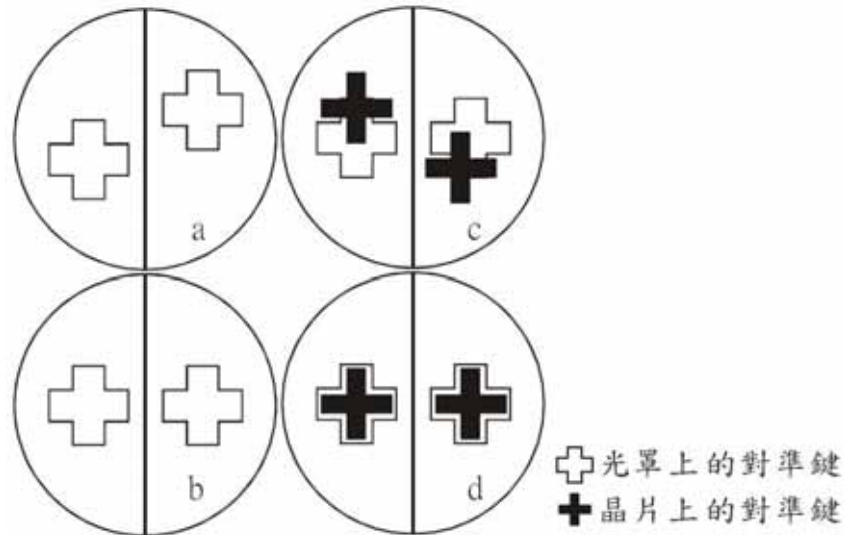


圖 1.1 曝光對準時光罩與晶圓上之對準鍵圖

1-2 研究動機

隨著半導體製程工藝技術的進步，半導體製程的線寬設計也逐年減小，由早期的微米尺度進展到深次微米的尺度，而早期所使用的傳統顯微鏡來判讀半導體製程中層對層之間的疊對準確度已無法達到所要求的精度，這是因為傳統顯微鏡所使用的光學系統的繞射極限及像差所造成，因此必須藉助更精密的光學自動判讀系統來完成。因此，自 90's 年代開始，微影疊對量測技術搭載先進光學模組(optical module)及精密自動控制工作平台乃應運而生並蓬勃發展，廣泛應用於先進半導體製程中層對層之間的微影疊對量測。

根據 ITRS 2004 年對於半導體製程的線寬要求，如表 1.1 所示，線寬已由 2003 年的 107nm 減小為 90nm；相對於微影疊對量測的準確性要求則

由 2003 年的 3.5nm 減小為 3.2nm。因此，預期在次世代線寬 65nm 的微影製程疊對量測技術準確度將要求達到 2.3nm。然而，礙於實際製程中隱藏了無法量化之人為及製程所導入的誤差，所以目前商品化之微影疊對量測機台僅能藉由重複量測微影疊對圖像得出量測的精密度，以及量測微影疊對圖像 0° 和 180° (晶圓旋轉 180°) 的差異來計算出量測機台的系統誤差，以稽核微影疊對誤差量測的準確性。

本研究是採用嚴格耦合波理論(rigorous coupled wave theory)來分析半導體光柵的各項參數，進而估算由於上下層光柵的錯位所造成各個繞射級的繞射效率之改變，由此可推算出光柵疊對的誤差，以應用於改善半導體製程上的對準誤差及提昇其對準精度達至數奈米。

過去分析表面蝕刻型光柵都是利用標量繞射理論(scalar diffraction theory)來進行分析，其基礎理論是建立於傅利葉光學(Fourier optics)上，標量繞射理論是將光當作純量來進行分析，而此理論分析的好處在於使用簡單，且不需要複雜的計算過程，但它適用的範圍侷限於較大的光學元件下，即刻紋尺寸(feature size, s)(線寬)遠大於入射光波長($s/\lambda \gg 1$)，或是條紋深寬比(r)較小的元件($r/\lambda \sim 1$)。

嚴格耦合波理論是將光波以電磁波來表示做處理分析，並利用 TE 極化態和 TM 極化態來表示之，其分析主要是求滿足邊界條件的馬克斯威爾方程式(Maxwell's Equation)的解。其優點為能夠在入射光光源的波長與光柵的

光柵週期，兩者在很接近的情況下進行分析光柵繞射的結果。由於嚴格耦合波理論是求精確解的一種方法，所以得知的解更能接近真實情況。由於求解的過程中並不是可由簡單的數學分析方法來求得解，而必須在借助於一些數值分析方法來進行處理分析，以利用計算機來進行運算。故在本論文中在計算分析方法是採用 1994 年由 Chateau 所提出的理論及數值分析方法來撰寫模擬程式。而在模擬分析上是設計一矽基板上具有上下兩層光柵，其上層光柵材料為光阻，下層光柵材料為介質，控制上下層光柵的錯位量，使其從零至一光柵週期，再藉由 Chateau 所提出的嚴格耦合波理論來分析計算光柵之繞射效率，並經由上下層光柵的錯位使零級繞射效率產生變化來回推求得光柵的錯位量。



1-3 論文章節安排

本論文共分為七 chapters，目的是來說明半導體製程中層對層之間的疊對量測分析，利用本論文中的理論與分析方法來進行上下層光柵錯位、光柵形變及疊對誤差的模擬分析，最後再利用演算法來對光柵結構參數的最佳化進行分析模擬。故本論文各章節的排列方式如下所示：

第一章 緒論

第二章 嚴格耦合波向量繞射理論

第三章 上下層光柵錯位模擬分析

第四章 梯形光柵模擬分析

第五章 疊對誤差比對

第六章 光柵結構參數最佳化演算法

第七章 結論



第二章 嚴格耦合波向量繞射理論

2-1 前言

現今光柵的應用已相當廣泛，諸如積體光學(integrated optics)、光資訊處理及計算(optical data processing and computing)、全相術(holography)和光譜(spectroscopy)等等。而分析光柵主要有兩種理論來分析其光柵特性，一種為傳統上所使用的標量理論(scalar diffraction theory)，另一種為向量繞射理論(vector diffraction theory)。過去大部分都是使用標量理論來做模擬分析，其理論基礎多起源於傅利葉光學(Fourier optics)理論，在應用及計算上較為簡易方便，但是精確性相對地降低，所以在應用於分析上有所限制。而向量繞射理論則具直接求解馬克斯威爾方程式(Maxwell's equation)，滿足適當的邊界條件，以得到的真實的情況。由於在計算機運算過程中會有少許的誤差產生，影響到計算的精確度。解決方法只要經過一些數值方法分析，使運算數值精確度達到所需標準以內，依然能得到相當的精確解。

最先利用耦合波理論(Rigorous coupled wave theory)分析體積型相位光柵的是 Kogenik，他利用一些近似的方法來進行分析，但其方法會使運算的精確度下降，最後無法得到精確的電磁波方程式解。由於 Kogenik 提出了一種簡易數值分析方法，雖然所運算的精確度不高，但也因此引領著大家踏進入此領域，對此數值分析做更多的研究與探討。

近年來計算機科技進步迅速，提出許多新的數學方法來解電磁學之波動方程式，例如：直接求解法、利用疊代法求解等等。有了許多的數值分析方法，使得耦合波理論可應用於多種週期性光柵之模擬分析，例如：平面光波（包含斜向入射以及被吸收）傳播入射體積型光柵(volume gratings)、表面損耗型光柵(surface relief gratings)、多層鍍膜光柵(gratings with multiple coating layers)等等。其中的代表作為 1981 年 Moharam 和 Gaylord 所提出的嚴格耦合波理論(rigorous couple wave theory)，可分析體積型平面光柵。1982 年 Moharam 又提出利用嚴格耦合波理論分析表面蝕刻型的介電質光柵，此後也將嚴格耦合波理論應用至 TM 入射、反射式光柵、損耗介值等等分析研究。



近年來嚴格耦合波理論的相關研究都則偏重於數值演算法的改進。Moharam 的嚴格耦合波理論雖然在數學上可以得到精確解，但是實際上其數值計算結果的收斂性質不易控制，而數值方法的精確度對結果的正確與否有決定性的影響。

在 1994 年 Chateau 以 Moharam 的嚴格耦合波理論為基礎提出新的演算法，可增加精確度與效率。1995 年 Morharam 又提出對稱性與精確度更佳的數學推導與傳輸矩陣(transmittance matrix)。此外其他也有 Peng、Lalanne 與 Morris 等分別也對不同條件下的嚴格耦合波理論提出其他的演算改進方法。嚴格耦合波理論分析不但適用於一般的理想光柵形式，也可以計算製

程引入的輪廓誤差對光柵效率的影響，或是應用於其他光電元件中的光柵結構。而本論文中是以 Chateau 的疊代法做為理論基礎來撰寫模擬程式，在本章將對嚴格耦合波理論作簡單的介紹。

2-2 嚴格耦合波向量繞射理論[3~19]

嚴格耦合波理論為分析週期性光柵的向量繞射理論。而向量繞射理論是以馬克斯威爾方程式為出發點，進而找出滿足邊界條件的解。由於光柵為週期性之結構，因此可利用 Fourier 級數來表示電磁場及光柵的折射率分佈，其中 Fourier 級數的項數即代表數值解的精確度。本節將探討 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，並探討當光柵中心無偏移量及具有偏移量時，其折射率分佈的表示方法。

2-2-1 TE 極化態入射

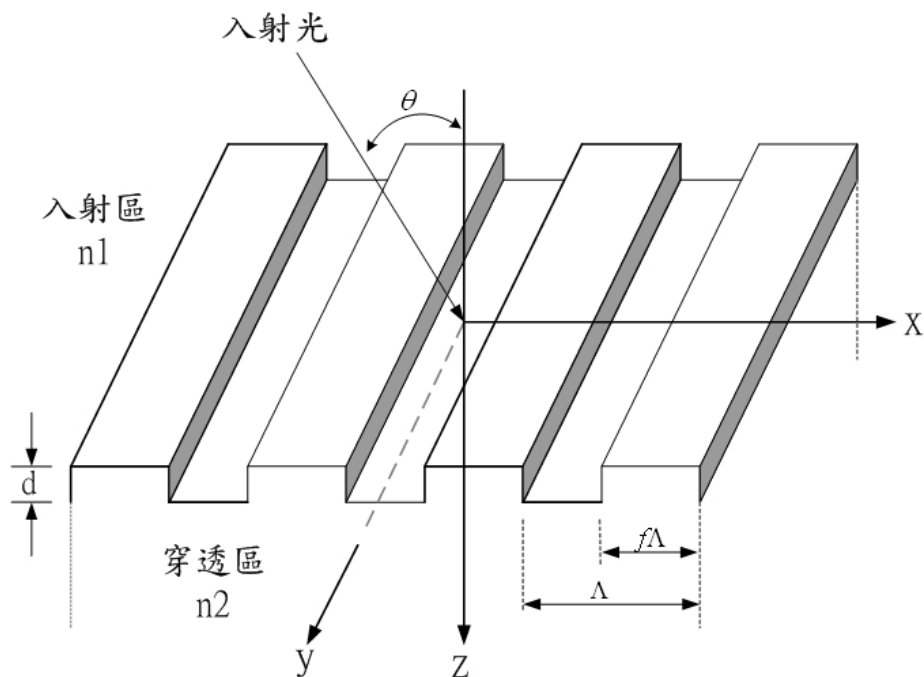


圖 2.1 二階光柵的基本幾何架構圖

圖 2.1 為二階光柵之基本幾何架構模型。其入射光之入射面(incident plane)為平行於刻痕方向(pitch direction)，入射角 θ ，入射區折射率 n_1 ，透射區折射率 n_2 ，光柵週期為 Λ ， f 為折射率 n_2 在光柵週期裡所佔的比例，其定義為工作週期(duty cycle)，光柵厚度為 d 。

光柵區的折射率分佈可以使用 Fourier 級數描述如下：

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

其中 $n(x, z)$ 為光柵在 x, z 平面的折射率分佈， \tilde{n}_t 為 Fourier 係數。此部分在後面 2-2-3 章節將會做加以介紹。

由於向量繞射理論是求解符合邊界條件下之馬克斯威爾方程式。故在週期性光柵下，可將光柵區域之 TE 極化態入射的電磁場用耦合波展開，即 $E_y(x, z)$ 和 $h_x(x, z)$ 用耦合波展開如下：

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

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

其中為了簡化符號，故令 $\bar{h} = \mu c \bar{H}$ 。

在 x 方向的波數 k_x ，可從入射場的相位匹配求得：

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

其中 n_0 為光柵區的平均折射率， θ' 為光柵內部的入射角。

$k_x^{(t)} (t \in Z)$ 可由 Floquet 條件求得：

$$\begin{aligned} k_x^{(t)} &= k_x^{(0)} + tK_x \\ K_x &= \frac{2\pi}{\Lambda} \quad t \in Z \end{aligned} \quad (2.5)$$

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

$$h_x(x, z) = \frac{i}{k_0} \frac{\partial E_y(x, z)}{\partial z} \quad (2.6)$$

將(2.1)、(2.2)及(2.3)式代入(2.6)式，則

$$\frac{dE_y^{(t)}(z)}{dz} = -ik_0 h_x^{(t)}(z) \quad t \in Z \quad (2.7)$$

考慮 Helmholtz 方程式：

$$\nabla^2 E_y(x, z) + k_0^2 n^2 E_y(x, z) = 0 \quad (2.8)$$

利用(2.1)、(2.2)、(2.3)及(2.7)式，消去(2.8)式中的 $E_y^{(l)}$ 二階微分

項，可得：

$$\frac{dh_x^{(l)}(z)}{dz} = -i \left\{ \frac{[k_z^{(l)}]^2}{k_0} E_y^{(l)}(z) + k_0 \sum_{l \neq t} \tilde{n}_{t-l} \cdot E_y^{(l)}(z) \right\} \quad (2.9)$$

$$\text{其中 } [k_z^{(l)}]^2 = k_0^2 \tilde{n}_0 - [k_x^{(l)}]^2 \quad (2.10)$$

由(2.7)及(2.9)式理論上為無限序列的一階微分方程組，可將聯立解 $E_y^{(l)}$ 及 $h_x^{(l)}$ 。但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。因此必須取足夠大的 N 才能得到一定精度的解。

接下來可將(2.7)與(2.9)式聯立方程組寫成矩陣的形式如下：

$$\frac{dU(z)}{dz} = [M]U(z) \quad (2.11)$$

此處 $U(z)$ 為 $2N \times 1$ 的向量，即

$$U(z) = \begin{bmatrix} E_y^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ E_y^{(l-\nu)}(z) \\ \vdots \\ E_y^{(\frac{N-1}{2})}(z) \\ h_x^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ h_x^{(l-\nu)}(z) \\ \vdots \\ h_x^{(\frac{N-1}{2})}(z) \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

接下來的步驟是選定有限奇數 N 值，令 $l=1,2,3,\dots,N$ ， $\nu=(N+1)/2$ 。在

(2.11)式中的矩陣 M 為 $2N \times 2N$ 階的常係數矩陣，其元素為

$$M = -i \begin{bmatrix} 0 & k_0 I \\ k_0 W & 0 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

其中各子矩陣為

0 : $N \times N$ 的零矩陣。

I : $N \times N$ 的單位矩陣。

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

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

在(2.11)式中，其所求之解具有平移不變(shift-invariant)性質，故在任意兩個座標 z_1 與 z_2 ($z_2 > z_1$) 的解之間具有指數矩陣函數的關係，其表示如下：

$$U(z_1) = \exp[-(z_2 - z_1)M]U(z_2) \quad (2.14)$$

利用矩陣 M 的特徵值與特徵向量來表示矩陣 M ，再將矩陣 M 對角化，

其矩陣 M 表示如下：

$$M = PDP^{-1} \quad (2.15)$$

矩陣 P 為矩陣 M 之特徵向量，而矩陣 D 為由矩陣 M 的特徵值 e_l 所組成的對角

矩陣，其矩陣 D 表示如下：

$$D = \begin{bmatrix} e_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e_{2N} \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

所以可以將(2.14)式改寫成

$$U(z_1) = P \cdot \exp\{-(z_2 - z_1) \cdot D\} \cdot P^{-1} \cdot U(z_2) \quad (2.17)$$

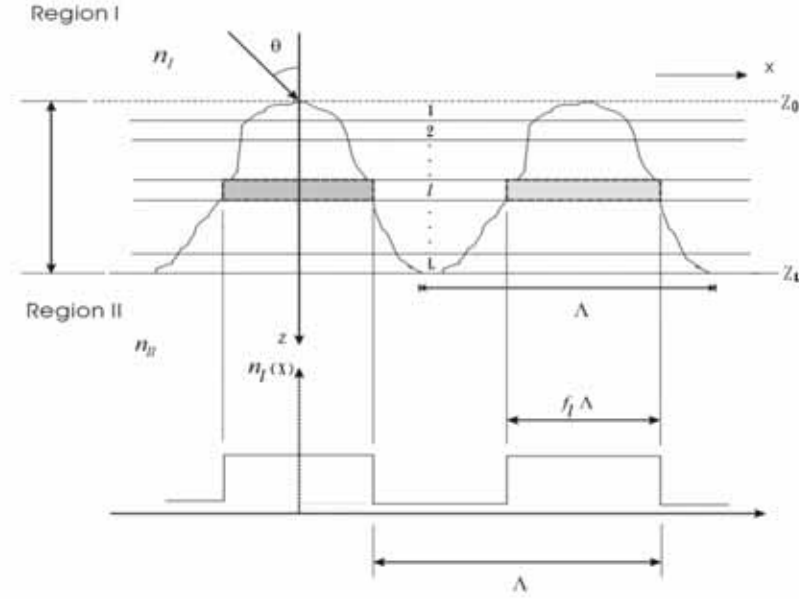


圖 2.2 表面蝕刻型的光柵可分為 L 層之示意圖

而對於多階光柵可以視為多層表面蝕刻型光柵的重疊組合，各層的光柵週期相同，唯只有在工作週期(duty cycle)上有所差異。如圖 2.2 所示。假設表面蝕刻型光柵可分為 L 層，則整個光柵區域的特徵矩陣可以表示為每一薄層特徵矩陣的連續乘積，因此整個特徵矩陣的一般化表示式可寫成：

$$\prod_{l=1}^L P_l(z_{l-1}) \cdot \exp[-(z_l - z_{l-1})D_l] \cdot P_l(z_l)^{-1} \quad (2.18)$$

其中 z_l 為每一層邊界的座標 ($z_0 < z_1 < z_2 < \dots < z_L = D_L$)。

接下來考慮光柵邊界的情況，假設入射區域與出射區域皆為均勻介質，再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

$$E_y(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \sum_{t=-\infty}^{\infty} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.19)$$

$$h_x(x, z) = -\frac{1}{k_0} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \frac{1}{k_0} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.20)$$

此處的 $k_x^{(t)}$ 與 (2.4) 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 b 表示 $-z$ 方向傳播；下標 F 表示入射區，下標 L 表示出射區)。

由於電磁場在無表面電流的邊界其切線方向分量是連續性的，故利用光柵區域及入射區域、出射區域的電磁場之邊界連續性與邊界條件，即可由方程式 (2.2)、(2.3)、(2.19) 及 (2.20) 可得

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ E_y^{(t-\nu)}(z_0) \\ \vdots \\ h_x^{(t-\nu)}(z_0) \\ \vdots \end{bmatrix} = [C(z_0)] \begin{bmatrix} \vdots \\ f_F^{(t-\nu)} \\ \vdots \\ b_F^{(t-\nu)} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

其中

$$[C(z_0)] = \begin{bmatrix} \ddots & & & & 0 \\ & \exp[ik_{Fz}^{(t-\nu)} z_0] & & & \\ 0 & & \ddots & & \\ \ddots & & & 0 & \\ & -\frac{k_{Fz}^{(t-\nu)}}{k_0} \exp[ik_{Fz}^{(t-\nu)} z_0] & & & \\ 0 & & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddots & & & & 0 \\ & \exp[-ik_{Fz}^{(t-\nu)} z_0] & & & \\ 0 & & \ddots & & \\ \ddots & & & 0 & \\ & \frac{k_{Fz}^{(t-\nu)}}{k_0} \exp[-ik_{Fz}^{(t-\nu)} z_0] & & & \\ 0 & & & \ddots & \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

同理，在透射區域可用 $f_L^{(t)}$ 與 $b_L^{(t)}$ 分別表示傳播方向為 $+z$ 與 $-z$ 的電場複數振幅。若透射介質與光柵邊界為 z_L ，亦可以用相同的方式定義出透射區域的矩陣 $C(z_L)$ 。結合入射區域、透射區域及光柵區域，可由 (2.18) 及 (2.21) 式，可得

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ f_F^{(t-\nu)} \\ \vdots \\ \vdots \\ b_F^{(t-\nu)} \\ \vdots \end{bmatrix} = [C(z_0)]^{-1} \left\{ \prod_{l=1}^L P_l(z_{l-1}) \cdot \exp[-(z_l - z_{l-1}) \cdot D_l] \cdot P_l(z_l)^{-1} \right\} [C(z_L)] \begin{bmatrix} \vdots \\ f_L^{(t-\nu)} \\ \vdots \\ \vdots \\ b_L^{(t-\nu)} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

取入射光之複數振幅 $f_F^{(t-\nu)}$ 定義如下：

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ f_F^{(t-\nu)} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

由於透射區沒有反射光，所以

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ b_L^{(t-\nu)} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

最後將(2.24)及(2.25)式代入(2.23)式即可得 $2N$ 個聯立方程式，對應 $2N$ 個未知數 $f_L^{(t-\nu)}$ 和 $b_L^{(t-\nu)}$ ，因此可得唯一的一組解。求得 $f_L^{(t-\nu)}$ 及 $b_F^{(t-\nu)}$ 後，則

透射光與反射光的繞射效率分別為

$$\eta_F^{(t-\nu)} = \operatorname{Re} \left[\frac{k_{Lz}^{(t-\nu)}}{k_{Fz}^{(0)}} \right] \cdot |f_L^{(t-\nu)}|^2 \quad (2.26)$$

$$\eta_B^{(t-\nu)} = \operatorname{Re} \left[\frac{k_{Fz}^{(t-\nu)}}{k_{Fz}^{(0)}} \right] \cdot |b_F^{(t-\nu)}|^2 \quad (2.27)$$

上述為嚴格耦合波向量繞射理論對週期性光柵的分析方法，由於在數值計算中(2.23)式包含了一連串的矩陣連乘積，所以在演算計算中有許多不同的改進方法。

2-2-2 TM 極化態入射

接下來考慮 TM 極化態入射的情況，其基本原理和 TE 極化態相似。先將 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

$$H_y(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} H_y^{(t)}(z) \exp(ik_x^{(t)}x) \quad (2.28)$$

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

其中為了簡化符號，故令 $\bar{e} = \varepsilon_0 c \vec{E}$ 。

由 Maxwell 方程式， $\nabla \times \vec{H} = -i\omega \varepsilon(x) \varepsilon_0 \vec{E}$ 可得

$$e_x(x, z) = \frac{-i}{k_0 \varepsilon(x)} \frac{\partial H_y(x, z)}{\partial z} \quad (2.30)$$

將(2.28)及(2.29)式代入(2.30)式，即可推得

$$\frac{dH_y^{(t)}}{dz} = ik_0 \varepsilon(x) e_x^{(t)}(z) \quad t \in Z \quad (2.31)$$

接下來考慮 Helmholtz 方程式

$$\nabla^2 H_y(x, z) + k_0^2 n^2 H_y(x, z) = 0 \quad (2.32)$$

將方程式(2.1)、(2.28)、(2.29)及(2.31)代入方程式(2.32)，可得

$$\frac{de_x^{(t)}(z)}{dz} = -i \left\{ \frac{(k_x^{(t)})^2}{k_0 \varepsilon(x)} \cdot H_y^{(t)}(z) - k_0 \cdot H_y^{(t)}(z) \right\} \quad (2.33)$$

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

由(2.31)及(2.33)式理論上為無限序列的一階微分方程組，可將聯立解 $E_y^{(t)}$ 及 $h_x^{(t)}$ 。但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。因此必須取足夠大的 N 才能得到一定精度的解。

將方程式(2.31)及(2.33)可以改寫成矩陣型式，如下所示：

$$\frac{dU(z)}{dz} = [M]U(z) \quad (2.34)$$

此處 $U(z)$ 為 $2N \times 1$ 的向量，即

$$U(z) = \begin{bmatrix} H_y^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ H_y^{(l-v)}(z) \\ \vdots \\ H_y^{(\frac{N-1}{2})}(z) \\ e_x^{(\frac{1-N}{2})}(z) \\ \vdots \\ e_x^{(l-v)}(z) \\ \vdots \\ e_x^{(\frac{N-1}{2})}(z) \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

接下來的步驟是選定有限奇數 N 值，令 $l=1,2,3,\dots,N$ ， $v=(N+1)/2$ 。在

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

$$M = -i \cdot \begin{bmatrix} 0 & -k_0 G \\ k_0 V & 0 \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

其中各個子矩陣為

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

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

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

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，唯有不同的是須將入射區域的電磁場分佈改為

$$H_y(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \sum_{t=-\infty}^{\infty} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.37)$$

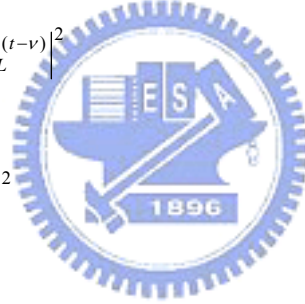
$$e_x(x, z) = -\frac{1}{k_0 n_1} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} f_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x + k_{Fz}^{(t)}z]\} + \frac{1}{k_0 n_1} \sum_{t=-\infty}^{\infty} k_{Fz}^{(t)} b_F^{(t)} \exp\{i[k_x^{(t)}x - k_{Fz}^{(t)}z]\} \quad (2.38)$$

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 b 為表示 $-z$ 方向傳播; 下標 F 表示入射區，下標 L 表示出射區)。

接下來的矩陣運算處理，皆與入射光為 TE 極化態相同。而最後透射區域與入射區域的繞射效率為

$$\eta_F^{(t-\nu)} = \text{Re} \left[\frac{k_{Lz}^{(t-\nu)}/n_2^2}{k_{Fz}^{(0)}/n_1^2} \right] \cdot |f_L^{(t-\nu)}|^2 \quad (2.39)$$

$$\eta_B^{(t-\nu)} = \text{Re} \left[\frac{k_{Fz}^{(t-\nu)}}{k_{Fz}^{(0)}} \right] \cdot |b_F^{(t-\nu)}|^2 \quad (2.40)$$



2-3 光柵折射率表示式

此章節主要是討論線性極化態的電磁波入射到表面蝕刻型光柵，如圖 2.3 所示。其入射區及透射區的折射率分別為 n_1 以及 n_2 ，光柵向量 $K = 2\pi/\Lambda$ 是延著 x 軸，法線方向為 z 軸，光柵區的厚度為 d ， f 為折射率 n_2 在光柵週期裡所佔的比例，定義為工作週期(duty cycle)，對應的折射率隨著表面起伏而呈現週期變化，將其做傅利葉級數(Fourier series)展開，可表示為如下式：

$$n^2(x) = \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \tilde{n}_t \exp(i \frac{2\pi t}{\Lambda} x) \quad (2.41)$$

若光柵向量不完全沿著 x 軸方向，則

$$n^2(x, z) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} \tilde{n}_t \exp[it(K_x x + K_z z)] \quad (2.42)$$

K_x 及 K_z 分別表示 \bar{K} 在 x 方向及 z 方向的分量大小。

其中 \tilde{n}_t 為第 t 個傅利葉級數展開項的係數，其表示如下：

$$\begin{aligned} \tilde{n}_0 &= \frac{1}{\Lambda} \left(\int_{-\Lambda/2}^{-f\Lambda/2} n_1^2 dx + \int_{-f\Lambda/2}^{f\Lambda/2} n_2^2 dx + \int_{f\Lambda/2}^{\Lambda/2} n_1^2 dx \right) \\ &= n_1^2(1-f) + n_2^2 f \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} \tilde{n}_t &= \frac{1}{\Lambda} \left(\int_{-\Lambda/2}^{-f\Lambda/2} n_1^2 \exp(-itKx) dx + \int_{-f\Lambda/2}^{f\Lambda/2} n_2^2 \exp(-itKx) dx + \int_{f\Lambda/2}^{\Lambda/2} n_1^2 \exp(-itKx) dx \right) \\ &= (n_2^2 - n_1^2) \frac{\sin(\pi f t)}{\pi t} \end{aligned} \quad (2.44)$$

在此只僅討論二階週期性光柵，而實際上的光柵剖面形狀有許多種分佈。圖 2.4 為圖 2.3 單層二階光柵之折射率分佈圖，假設 $n_1 = 1.0$ ， $n_2 = 1.5$ ， $\Lambda = 1\mu\text{m}$ 及 $f = 0.5$ 時，由(2.41)、(2.43)及(2.44)式所模擬出的折射率分佈圖。

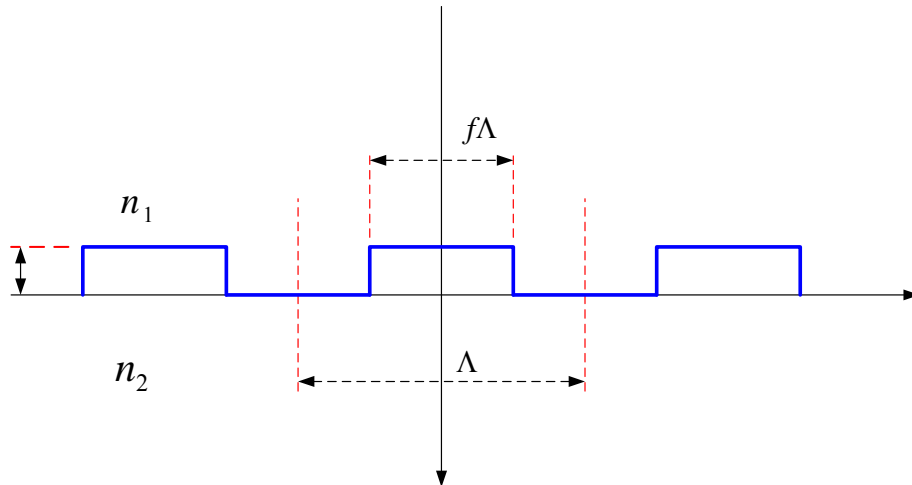


圖 2.3 單層二階光柵示意圖

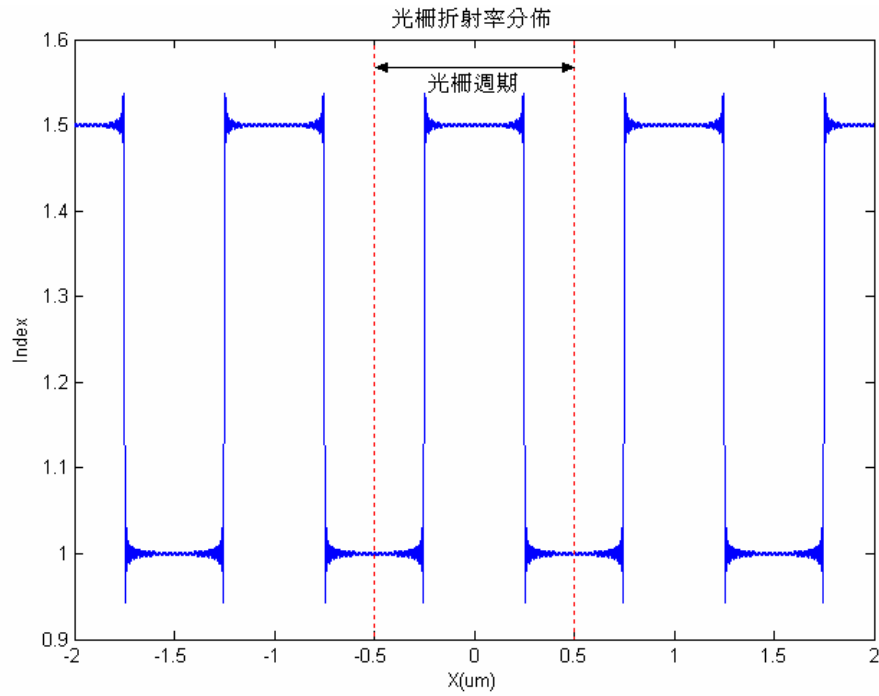


圖 2.4 光柵折射率分佈圖

為了討論上下層光柵錯位所造成的繞射效率的改變，先探討當光柵偏移中心位置時，所形成的光柵折射率分佈。由圖 2.5 所示，假設光柵的偏移量為 s ，光柵折射率的分佈由 Fourier 積分表示式。由於 \tilde{n}_0 不會隨著光柵的偏移而改變，所以只需要計算 \tilde{n}_t 。而 \tilde{n}_t 的表示如下：

$$\begin{aligned} \tilde{n}_t &= \frac{1}{\Lambda} \left(\int_{-\Lambda/2}^{-f\Lambda/2+d} n_1^2 \exp(-itKx) dx + \int_{-f\Lambda/2+d}^{f\Lambda/2+d} n_2^2 \exp(-itKx) dx + \int_{f\Lambda/2+d}^{\Lambda/2} n_1^2 \exp(-itKx) dx \right) \\ &= (n_2^2 - n_1^2) \exp(-it \frac{2\pi d}{\Lambda}) \frac{\sin(\pi f)}{\pi} \end{aligned} \quad (2.45)$$

圖 2.6 為圖 2.5 單層二階光柵(偏移中心 s)之折射率分佈圖，其假設 $n_1 = 1.0$ ， $n_2 = 1.5$ ， $\Lambda = 1\mu m$ 及 $f = 0.5$ 時，由(2.41)、(2.43)及(2.45)式所模擬出的折射率分佈圖。

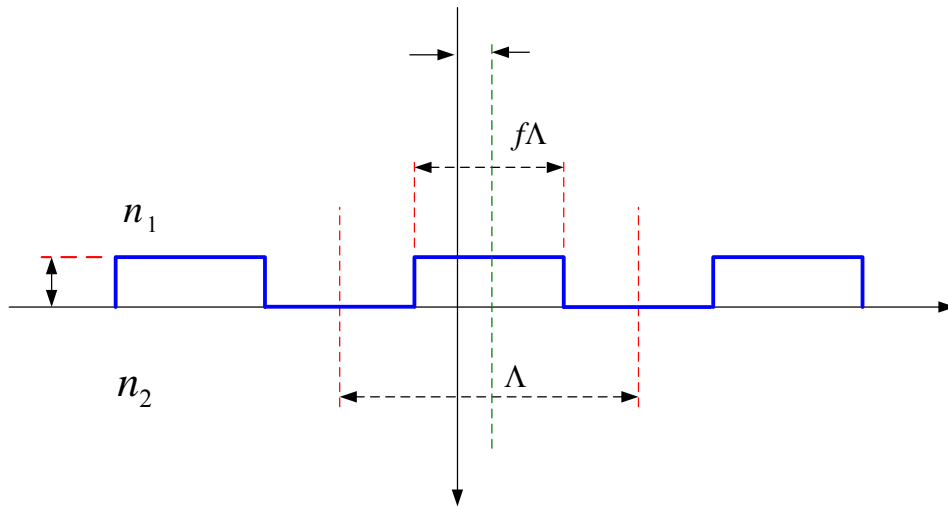


圖 2.5 單層二階光柵(偏移中心 s) 示意圖

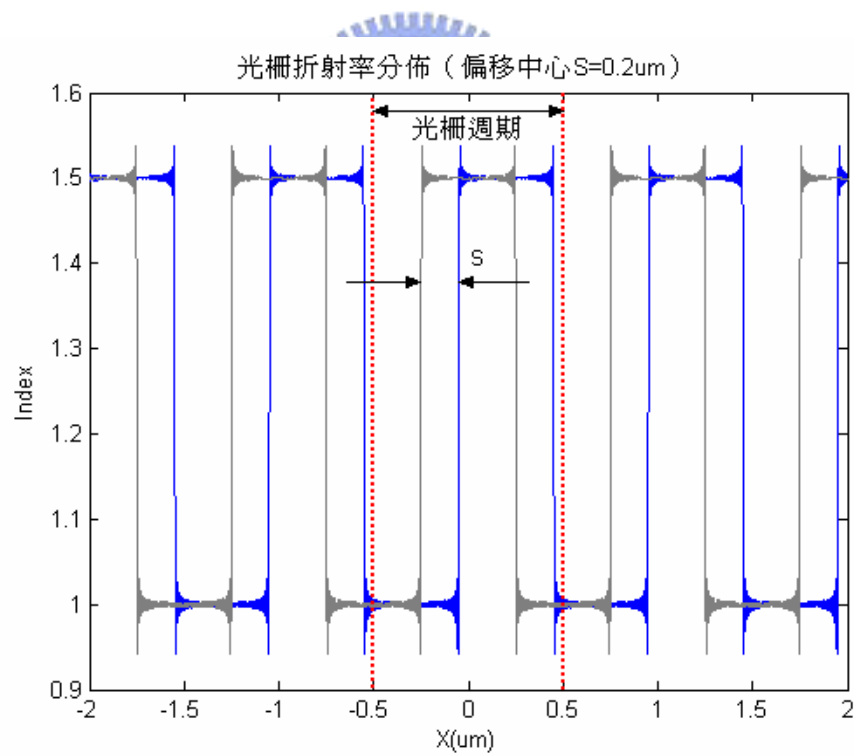


圖 2.6 光柵(偏移中心 s) 折射率分佈圖

第三章 疊對光柵模擬分析

本章是利用第二章中所介紹的嚴格耦合波向量繞射理論，Chateau 所提出的演算方法來進行分析。主要來探討在半導體製程中層對層之間的疊對量測方法，即為微影疊對的量測。本論文是設計一矽基板上具有上下兩層光柵，其上層光柵材料為光阻，下層光柵材料為介質，控制上下層光柵的錯位量，使其從零至一光柵週期，再藉由 Chateau 所提出的嚴格耦合波理論來分析計算光柵之繞射效率，並經由上下層光柵的錯位使零級繞射效率產生變化來回推求得光柵的錯位量。

在模擬分析上由不同入射角的入射光入射於光柵，不同入射角所對應反射的零級繞射效率的變化來進行分析。若將上下層光柵產生一錯位量時，此錯位會對於繞射效率也會產生改變，即可由此繞射效率的改變來進行錯位量的回推比對。故本章首先是分析單層光柵由於入射光在不同入射角入射時，所產生的零級繞射效率的變化，接著分析疊對光柵之上下層產生錯位時，所產生的零級繞射效率的改變。

3-1 單層光柵零級繞射效率分析

首先分析單層光柵由不同入射角之入射光入射，所造成的零級繞射效率的變化，本論文所設計其單層光柵系統結構如圖 3.1 所示。

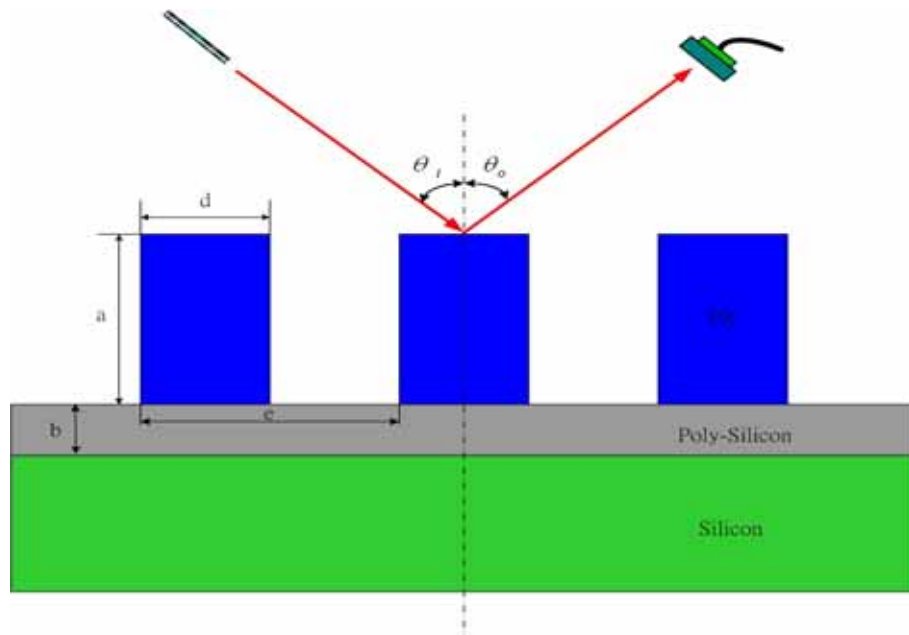


圖 3.1 單層光柵系統結構圖

在單層光柵結構中，假設 $a = 850\text{nm}$ ， $b = 200\text{nm}$ ， $d = 400\text{nm}$ ， $e = 800\text{nm}$ ，即光柵週期(grating period)為 800nm ，工作週期(duty cycle)為 0.5 。其中光柵材料為光阻(PR)，而在光波長 $0.6328\mu\text{m}$ 下，光阻(PR)折射率為 $n_{PR} = 1.629069$ ，多晶矽(Poly-Silicon)折射率為 $n_{Poly-Si} = 3.8329 + 0.03329i$ ，矽(Silicon)折射率為 $n_{Si} = 3.8727 + 0.01579i$ 。令入射光的波長為 $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ ，入射光之入射角度掃描範圍為 $\theta_i = -45^\circ \sim 45^\circ$ ，由於偵測器為偵測零級的反射光，所以入射角等於反射角($\theta_i = -\theta_o$)。

分析單層光柵零級繞射效率，首先必須先定義方程式(2.13)式中的 N 階矩陣(即 order 數)之 N 值。 N 值需要定義多大時才能夠滿足所需的精確度，故在此先分析當入射光為 TE 模態及 TM 模態下，在不同入射角之入射光入射時，因不同的 N 矩陣大小下所產生的繞射效率變化。

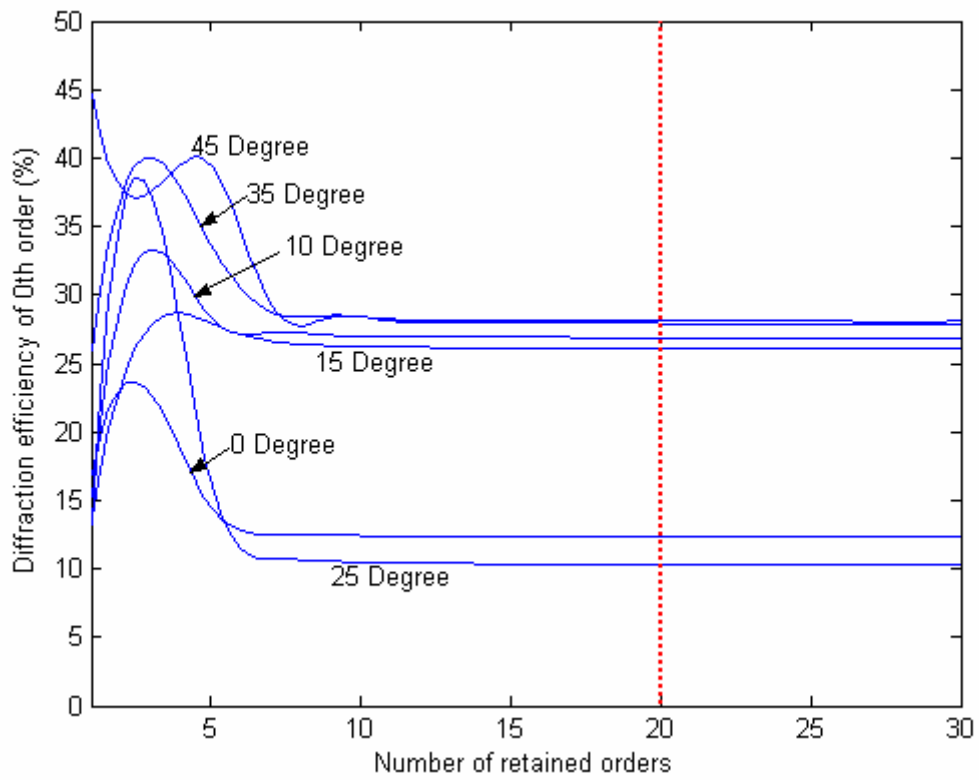


圖 3.2 TE 模態，不同入射角入射，對不同 N 階矩陣大小下之零級繞射效率曲線

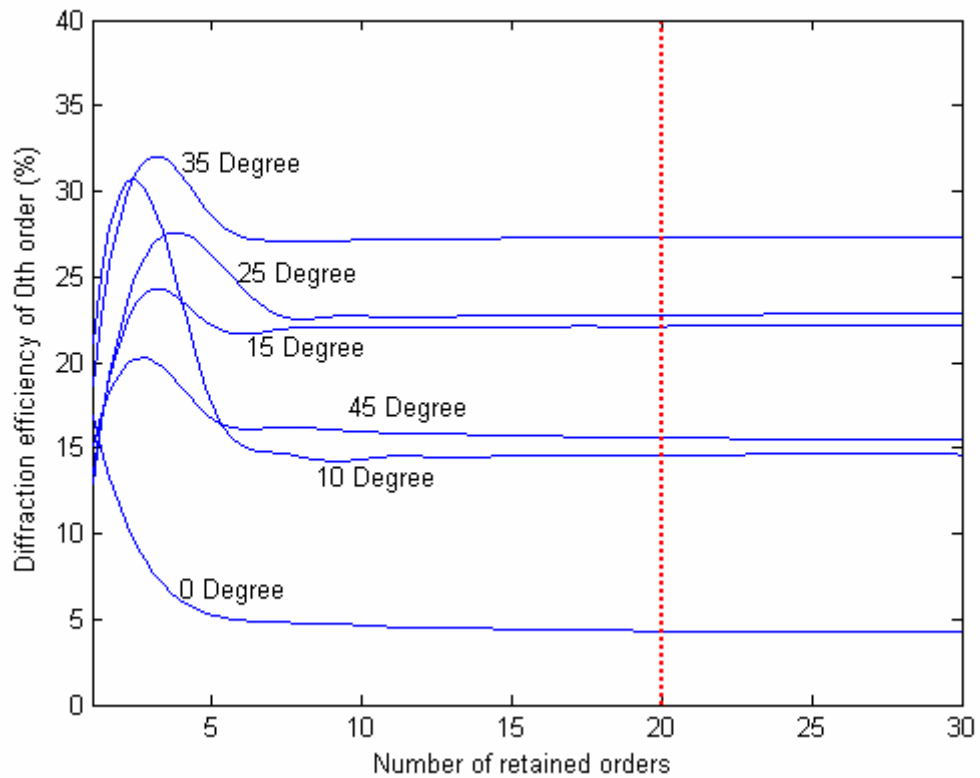


圖 3.3 TM 模態，不同入射角入射，對不同 N 階矩陣大小下之零級繞射效率曲線

圖 3.2 和圖 3.3 分別為 TE 模態及 TM 模態，入射光由不同角度入射時零級反射光的繞射效率曲線隨著 N 階矩陣的大小而有變化。從兩圖中可以看出當 N 階小於 10 時，不同入射角度之入射光的繞射效率曲線變動很大，然而當 N 階大於 20 左右時，其繞射效率幾乎維持一定值。因此對於單層光柵結構而言，TE 及 TM 模態的矩陣階數 N 應取大於 20 才有足夠的精確度。由於(2.13)式所定義 N 為有限奇數值，故在本論文中之 N 值皆定義為 21。

由以上對光柵的一般參數定義後，接著模擬分析當入射光分別為 TE 模態及 TM 模態，其入射光之入射角度 θ_i 由 -45° 變化到 45° 時，零級的繞射效率曲線變化，如圖 3.4 和圖 3.5 所示。由兩圖形可發現，當入射光之入射角由 $\theta_i = -45^\circ \sim 0^\circ$ 的曲線與 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 的曲線，以入射角零度為基準兩邊為對稱的圖形。而由圖 3.4 中可以看出在 TE 模態下，繞射效率曲線在入射角 $\theta_i = 20^\circ \sim 30^\circ$ 之間區域變化較為劇烈，其餘入射角區域曲線變化較為平緩。圖 3.5 中之 TM 模態，繞射效率曲線較 TE 模態的曲線穩定，其繞射效率曲線沒有較大的震盪變化。

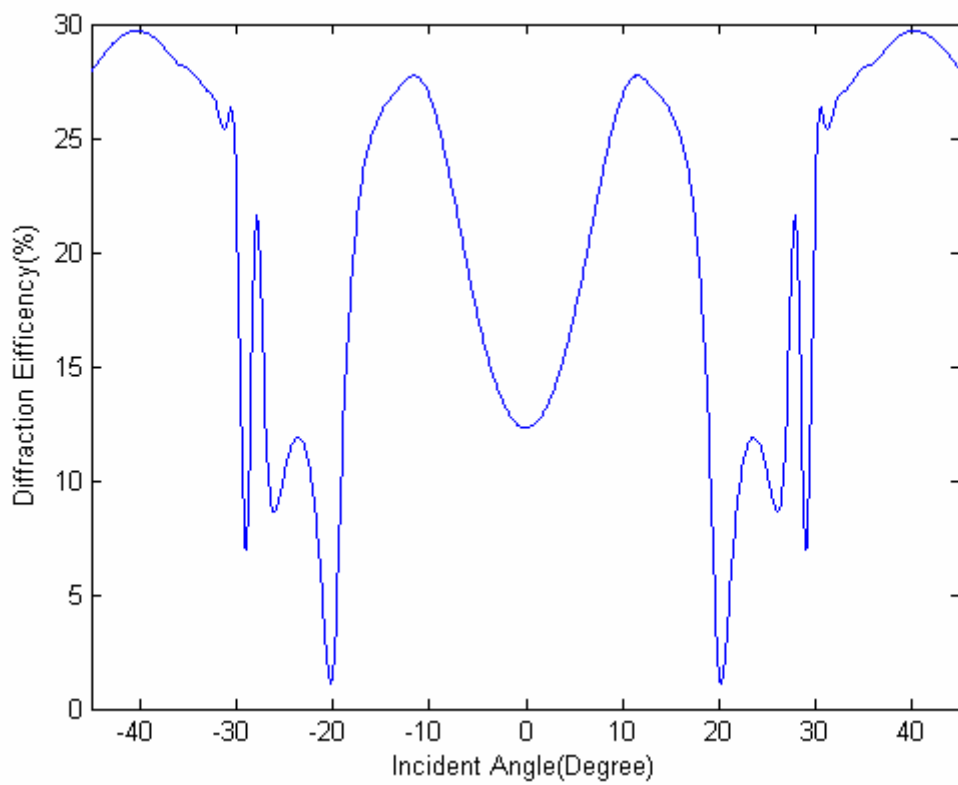


圖 3.4 TE 模態，不同的入射角對零級繞射效率曲線

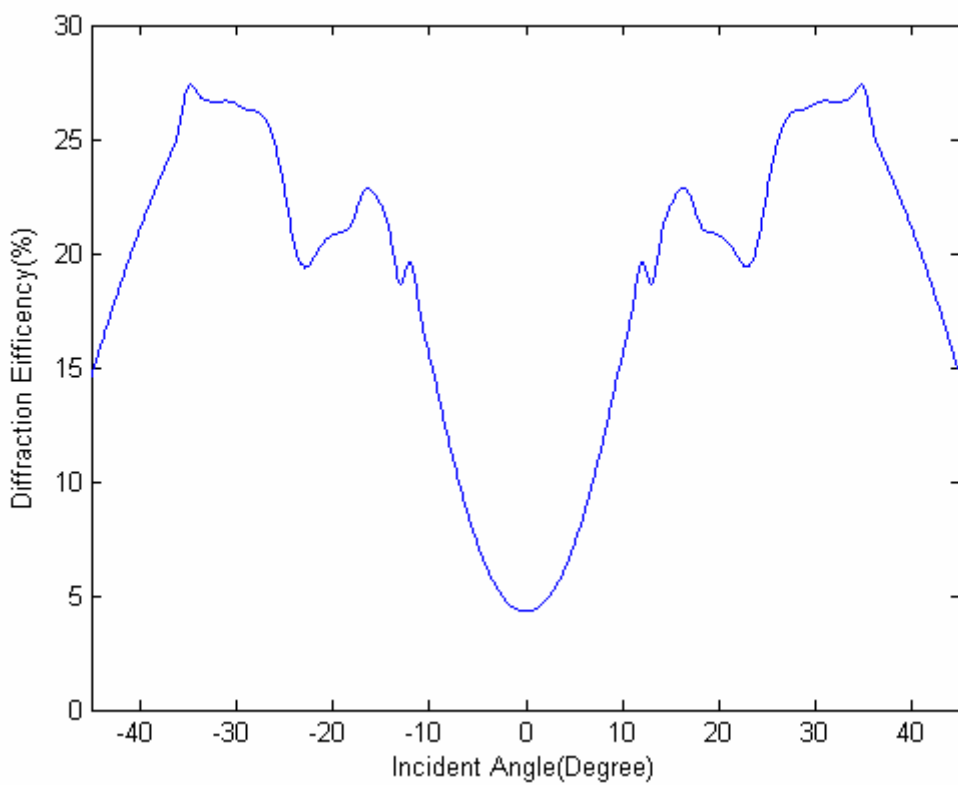


圖 3.5 TM 模態，不同的入射角對零級繞射效率曲線

3-2 疊對光柵模擬分析

本論文是以疊對光柵的分析來取代半導體製程中之微影疊對量測，藉由疊對光柵之上下層光柵之間的錯位來進行模擬分析疊對誤差。藉由不同錯位量的疊對光柵分析 TE 模態與 TM 模態，以不同入射角之入射光入射於光柵，反射所產生的零級繞射效率曲線。

圖 3.6 為疊對光柵系統結構圖，假設 $a = 850nm$ ， $b = 200nm$ ， $c = 50nm$ ， $d = 400nm$ ， $e = 800nm$ ，即光柵週期(grating period)為 $800nm$ ，工作週期(duty cycle)為 0.5。其中上層光柵材料為光阻(PR)，而在光波長為 $0.6328\mu m$ 下，光阻 (PR) 折射率為 $n_{PR} = 1.629069$ ，多晶矽 (Poly-Silicon) 折射率為 $n_{Poly_Si} = 3.8329 + 0.03329i$ ，下層光柵材料為 SiO_2 ，在光波長為 $0.6328\mu m$ 下其 SiO_2 折射率為 $n_{SiO_2} = 1.4568683$ ，矽 (Silicon) 折射率為 $n_{Si} = 3.8727 + 0.01579i$ 。令入射光的波長為 $\lambda = 0.6328\mu m$ ，入射光之入射角度掃瞄範圍為 $\theta_i = -45^\circ \sim 45^\circ$ ，由於偵測器為偵測零級的反射光，所以入射角等於反射角($\theta_i = -\theta_o$)。為了簡化計算的複雜化，假設疊對光柵之上下層光柵的光柵週期與工作週期相同，且上層光柵與下層光柵之間具有一錯位量為 D 。在本論文中，疊對光柵之上層光柵皆是以相同的光柵週期與工作週期來進行分析討論。

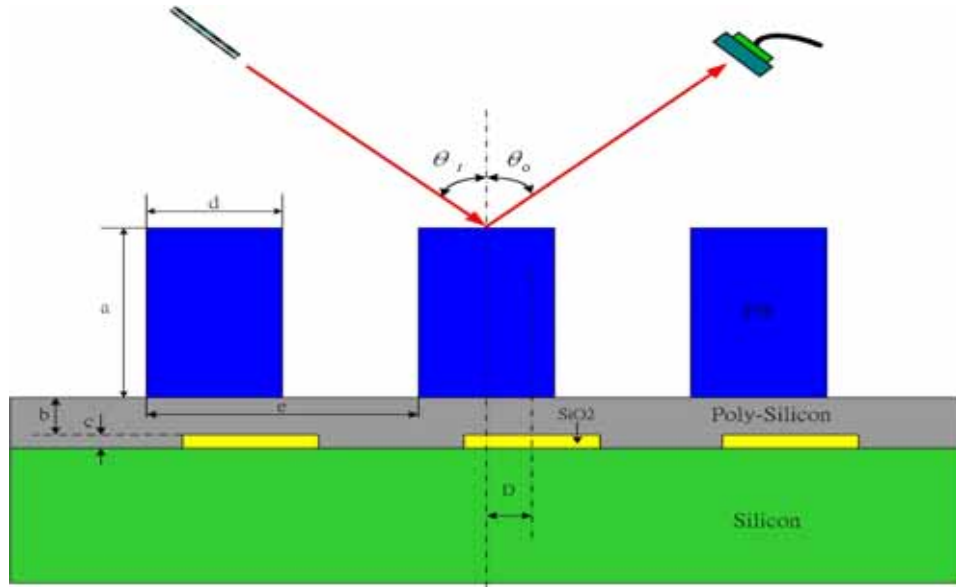


圖 3.6 疊對光柵之系統結構圖

圖 3.7 與圖 3.8 分別為 TE 模態及 TM 模態，由不同入射角度，錯位量 D 由 $0nm$ 變化至 $800nm$ 所產生之的繞射效率曲線圖。由兩圖中可得知當錯位量 D 超過二分之一光柵週期後，其曲線是重疊的情況。例如：光柵週期為 $800nm$ ，當錯位量 D 為 $300nm$ 所模擬出來的繞射效率曲線與錯位量 D 為 $500nm$ 的繞射效率曲線是相同重疊的。雖然這容易造成錯位量 D 的判斷錯誤，也使得量測的範圍侷限在二分之一光柵週期，但此問題可由非對稱光柵結構來解決，即上下層光柵的光柵週期不同，但在本論文只對相同週期的光柵來做討論分析。

由圖 3.7 可知，當入射光為 TE 模態時，其入射光的入射角在大於 30 度與 0 度附近，對於疊對光柵在不同錯位量所產生的繞射效率曲線有較大的靈敏度。靈敏度在本論文定義為某一入射角對應各個錯位量所產生的零級繞

射效率曲線之間的差異程度。由圖 3.8 可知，其入射光為 TM 模態，其繞射效率曲線之間的靈敏度沒有 TE 模態大。

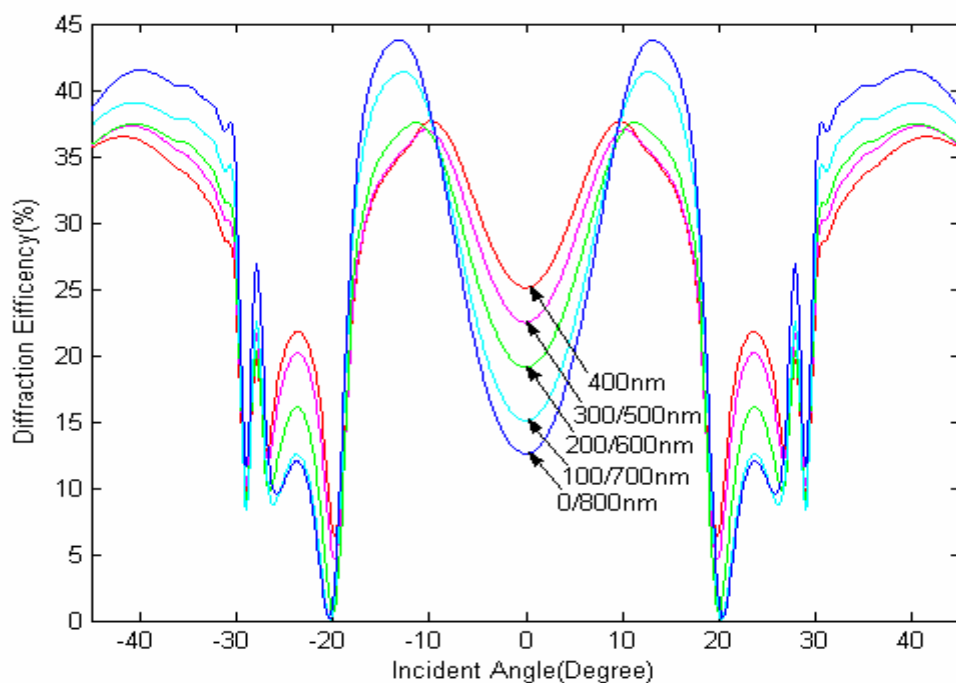


圖 3.7 TE 模態，不同的入射角及錯位量對零級繞射效率曲線 (錯位量 $D = 0nm \sim 800nm$)

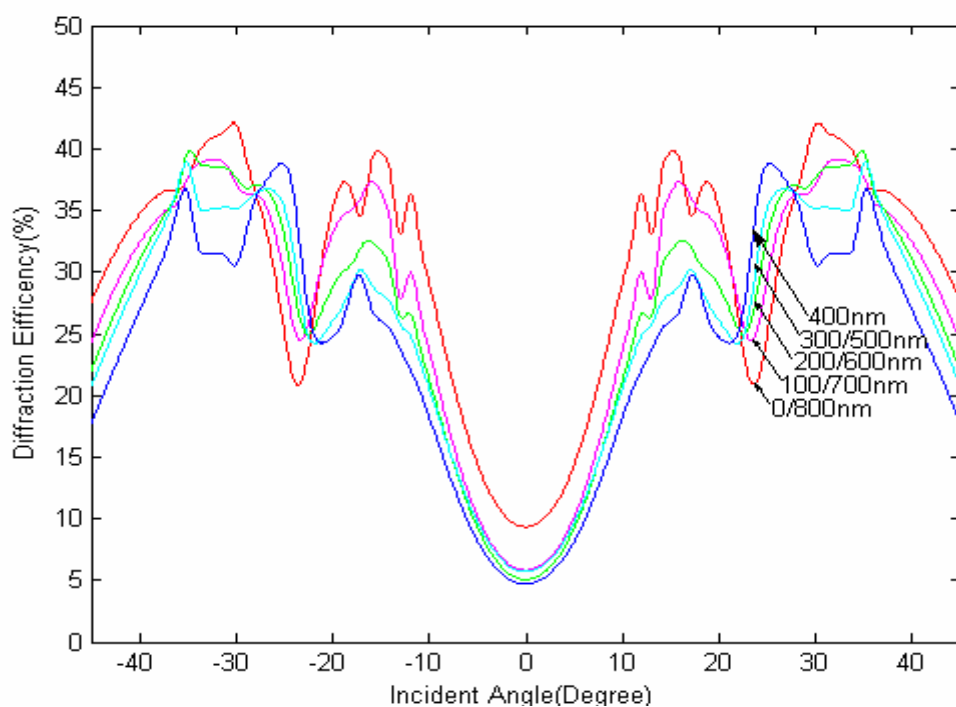


圖 3.8 TM 模態，不同的入射角及錯位量對零級繞射效率曲線 (錯位量 $D = 0nm \sim 800nm$)

第四章 梯形光柵模擬分析

本章將分析在光柵製作過程中，所造成的製程誤差對於繞射效率有何影響。在半導體光柵製作過程中最容易造成光柵的形狀變形，一般矩形光柵容易造成形狀變形為梯形形狀。所以在此章將分析單層梯形光柵與中心具有錯位量與具有梯形角度的疊對光柵，因在光柵製作過程中，使矩形光柵產生梯形光柵的形狀改變時，所造成零級繞射效率的變化，與在不同梯形角度時對於零級繞射效率有何改變與影響。

4-1 單層梯形光柵模擬分析

首先分析單層梯形光柵對於零級繞射效率有何影響。為了分析梯形光柵，可以把梯形結構的光柵切割成由數個長方形光柵所組成。圖 4.1 為單層梯形光柵系統結構圖和圖 4.2 為梯形光柵分割結構示意圖。其中 l_u 和 l_d 分別為梯形光柵的上寬度及下寬度， Z_g 為梯形光柵的厚度， $Z_d = Z_g / Mn$ 為單一矩形光柵的厚度， Mn 為分割層數， d_n 為第 n 層矩形光柵的長度，可由下式得出

$$d_n = l_u + 2 \times (2n - 1) \times \frac{l_d - l_u}{4n} \quad (4.1)$$

設光柵週期為 Λ 則每一層的矩形光柵的工作週期為

$$f_n = \frac{d_n}{\Lambda} \quad (4.2)$$

由 f_n 及 Z_d 可以定義出梯形光柵的結構，接下來則需要來分析光柵分割的層數 Mn ，需要多少的光柵分割層數 Mn ，才能使數值模擬趨於穩定狀態，而數值達到所需的精確度。

由於半導體光柵在製程過程中，所會造成的光柵形狀變形的梯形角 θ_d 最大約為 5 度，因此在分析分割層數 Mn 過程中，先使用梯形角為 5 度所產生的光柵形狀變形來分析梯形光柵所需的分割層數，使數值模擬分析趨於穩定狀態，而數值也達到所需的精確度。

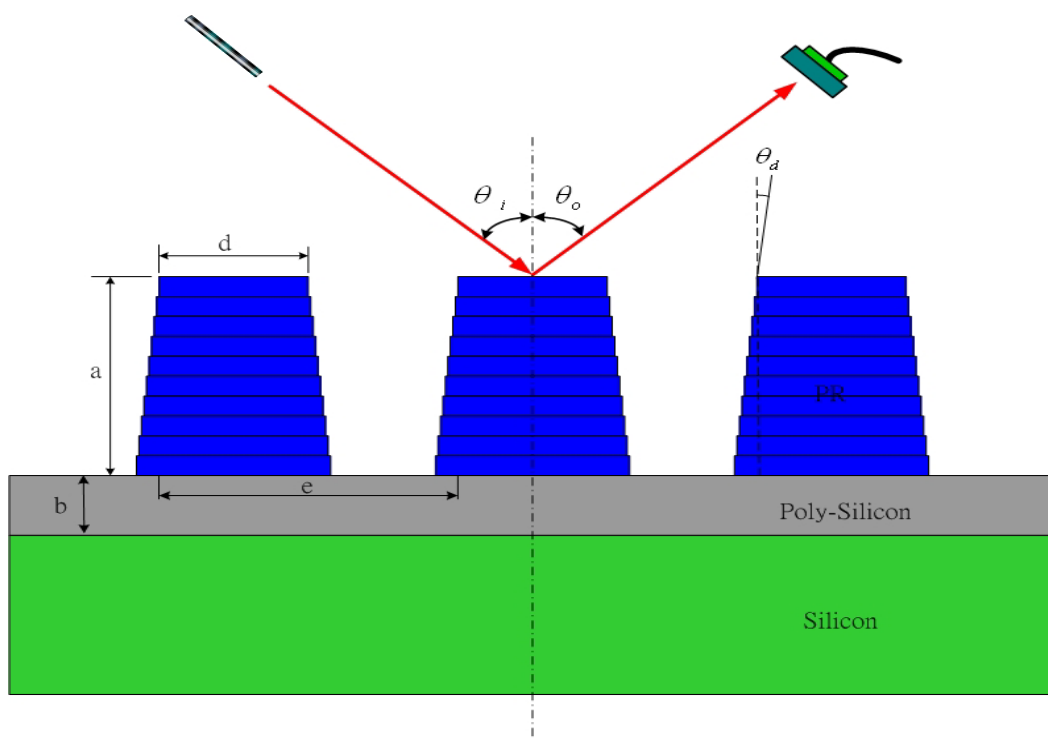


圖 4.1 單層梯形光柵系統結構圖

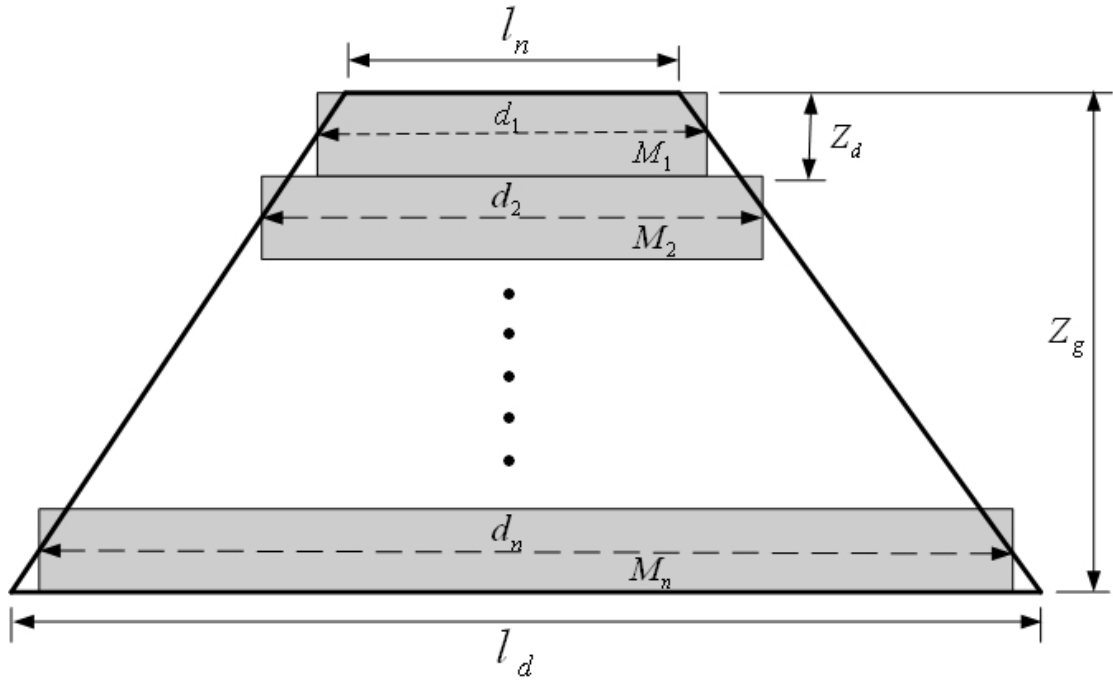


圖 4.2 梯形光柵分割結構示意圖

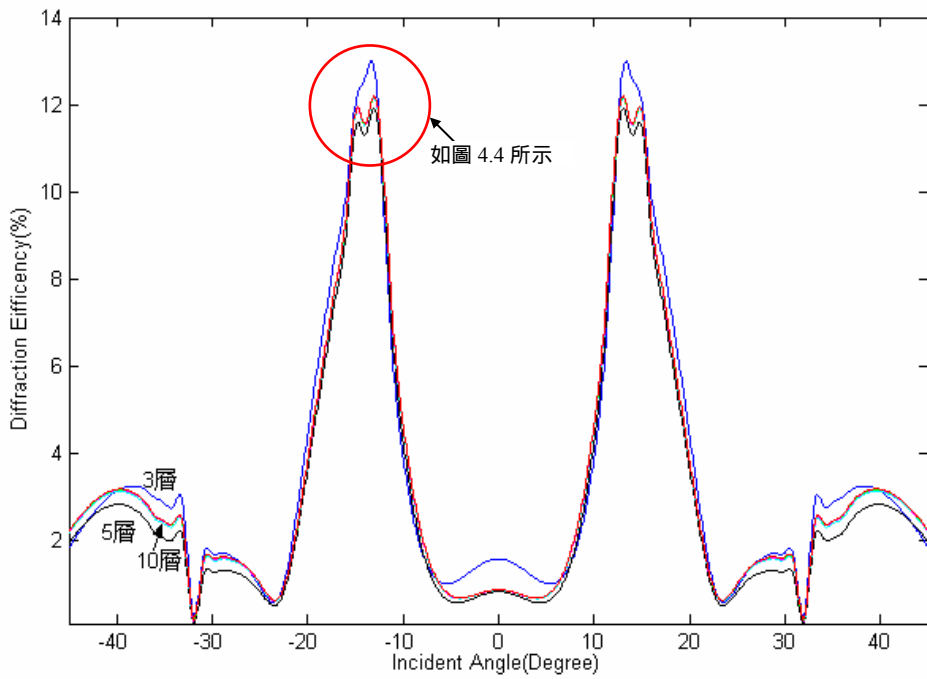


圖 4.3 TE 模態，單層梯形光柵繞射效率分佈(一)

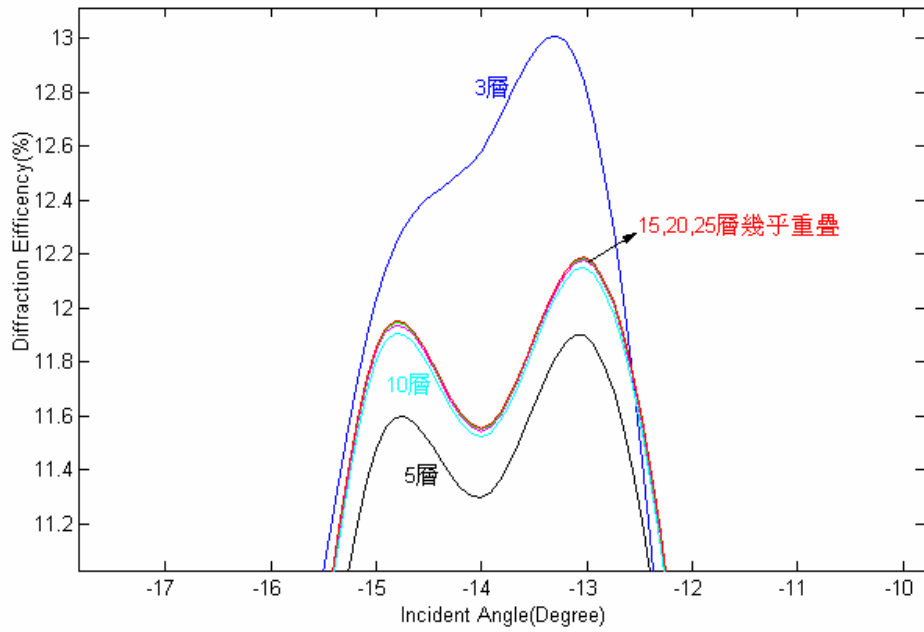


圖 4.4 TE 模態，單層梯形光柵繞射效率分佈(二)

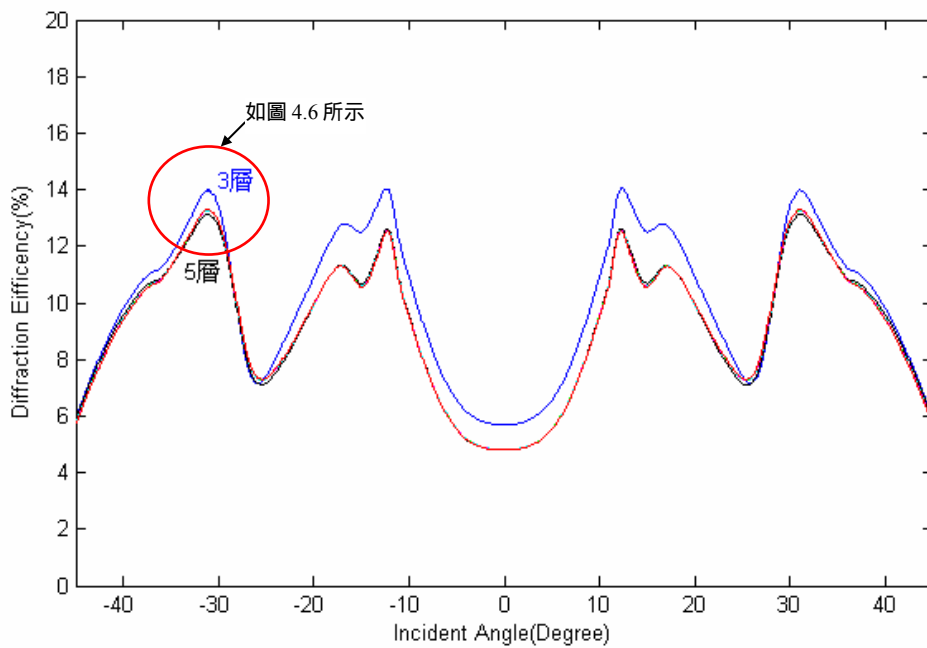


圖 4.5 TM 模態，單層梯形光柵繞射效率分佈(一)

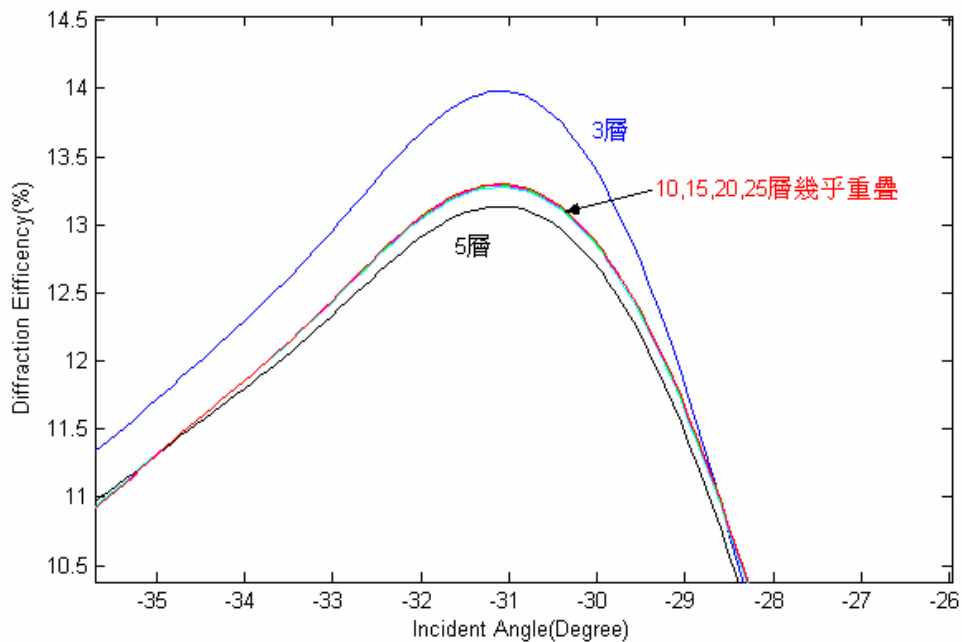


圖 4.6 TM 模態，單層梯形光柵繞射效率分佈(二)

由圖 4.3、圖 4.4、圖 4.5 及圖 4.6 中可以知道，當入射光為 TE 模態，分割層數 Mn 在 15 層以上時其曲線已幾乎重合，入射光為 TM 模態，分割層數 Mn 在 10 層以上時其曲線也已幾乎重合在一起。所以在接下來的計算模擬中將使用分割層數 Mn 為 20 層的矩形光柵來分析模擬梯形光柵。

接著將計算梯形光柵在不同梯形角與不同的角度入射時所造成的效率改變，分別分析模擬了梯形光柵在梯形角分別為 0 度至 5 度的零級繞射效率曲線圖。如圖 4.7 和圖 4.8 所示。

由圖 4.7 及圖 4.8 可知，不論是 TE 模態或是 TM 模態當有一小角度的梯形角存在時，繞射效率曲線的改變是很明顯的。當梯形光柵之梯形角越大時，其繞射效率值越小。所以在藉由量測繞射效率曲線來回推上下層光

柵的錯位量時，要考慮因製程所會造成的光柵形狀變形，即梯形誤差，不然所推的的錯位量可能將會有很大的誤差存在。

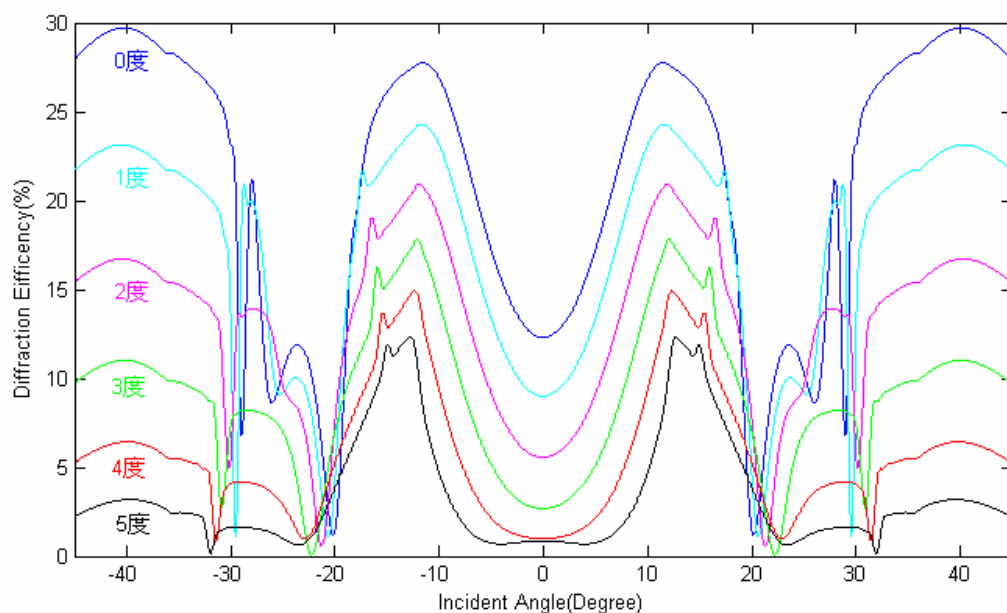


圖 4.7 TE 模態，單層梯形光柵對不同梯形角的零級繞射效率分佈作圖

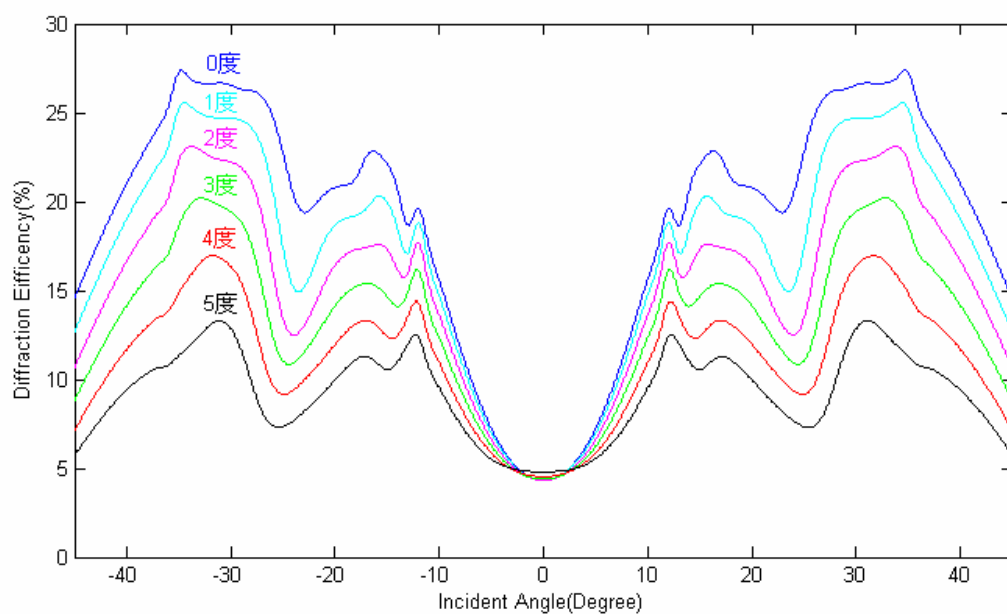


圖 4.8 TM 模態，單層梯形光柵對不同梯形角的零級繞射效率分佈作圖

4-2 具梯形角度之疊對光柵模擬分析

本節我們將分析具有梯形角度的疊對光柵結構，如圖 4.9 所示。為了簡化複雜度，假設上下層光柵的梯形角度是相同的，即 $\theta_d = \theta_{d1} = \theta_{d2}$ 。由於下層光柵的厚度很薄，所以下層梯形光柵的分割層數只需 5 層的矩形光柵即可。在本節分別模擬了入射光為 TE 模態與 TM 模態，在不同入射角度的入射光入射於疊對光柵，疊對光柵的梯形角度由 1 度至 5 度的改變，對於不同的錯位量所產生的零級繞射效率曲線來進行分析。此模擬結果可由圖 4.10 至圖 4.19 可知，當疊對光柵的梯形角度越大時，則光柵的繞射效率值下降也越多，且對於光柵錯位的靈敏度也隨之下降。有此可知，光柵製程所產生梯形形變的梯形角度，對於其繞射效率值與靈敏度有很大的影響。

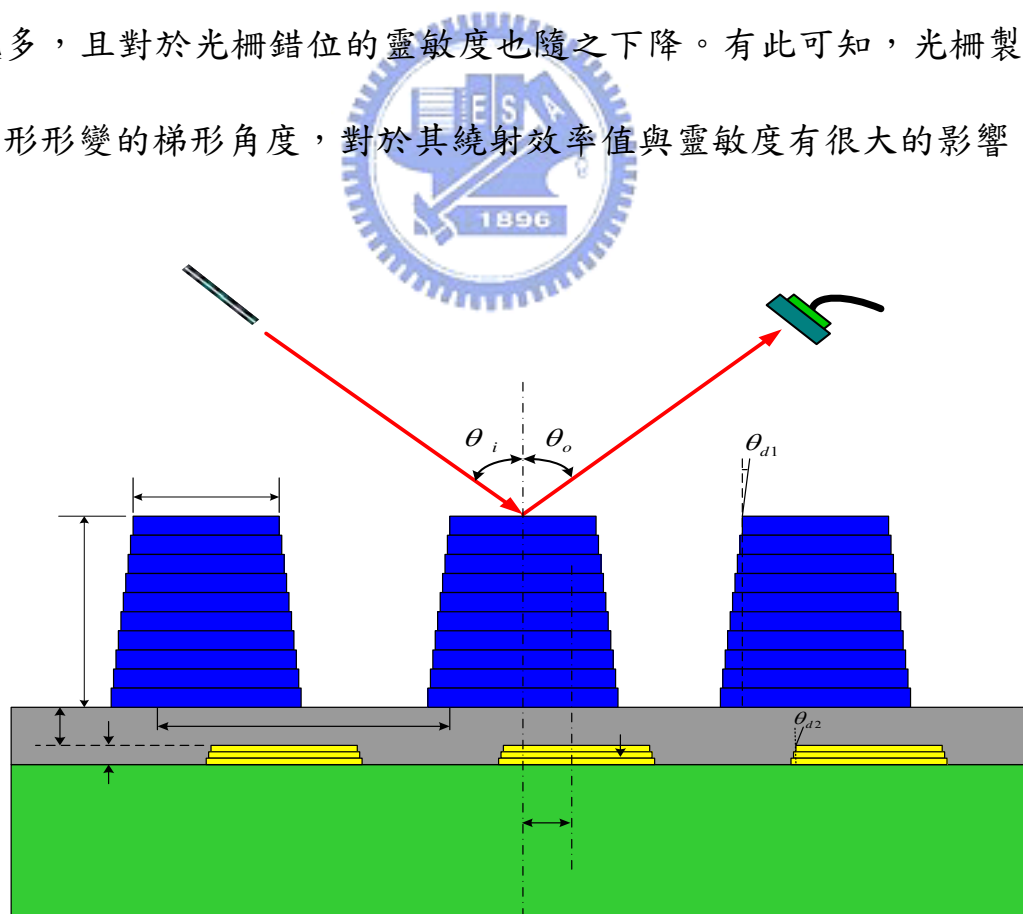


圖 4.9 具梯形角度之疊對光柵結構

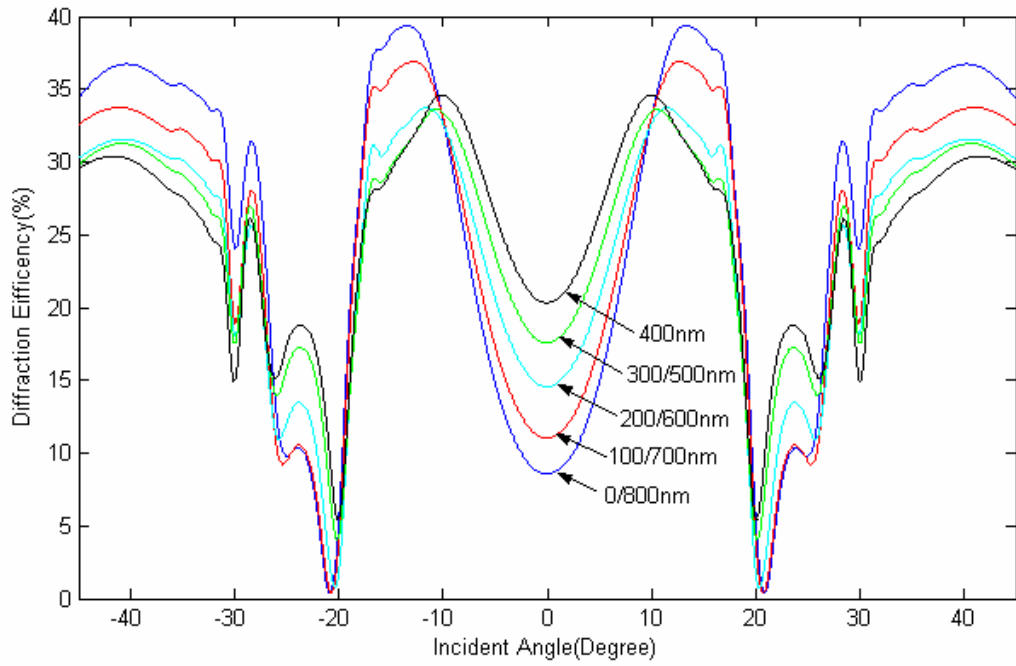


圖 4.10 TE 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 1^\circ$)

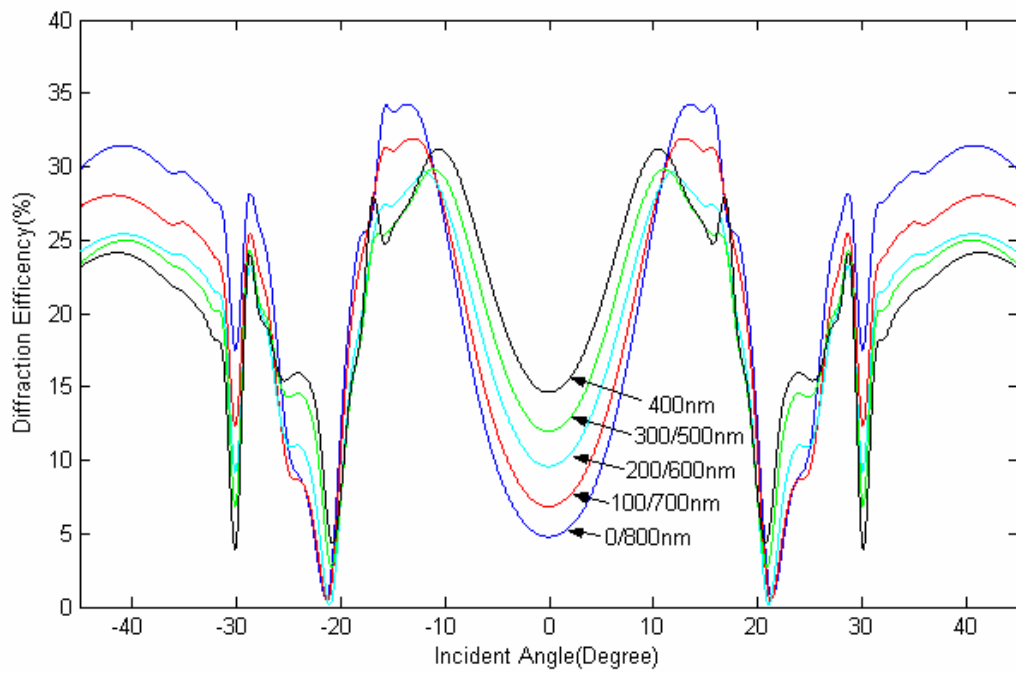


圖 4.11 TE 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 2^\circ$)

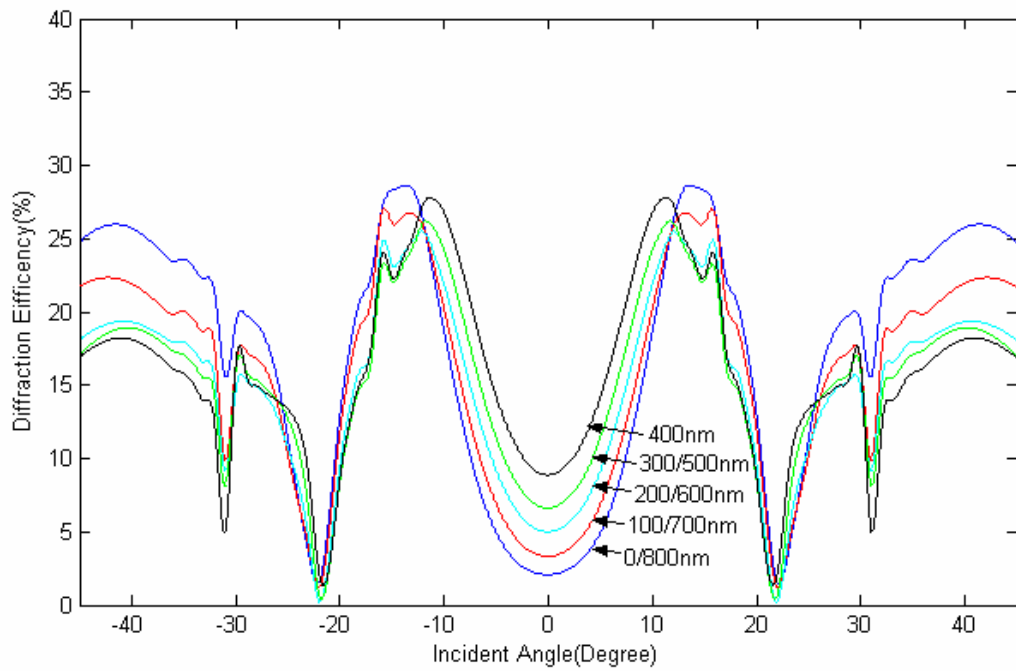


圖 4.12 TE 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 3^\circ$)

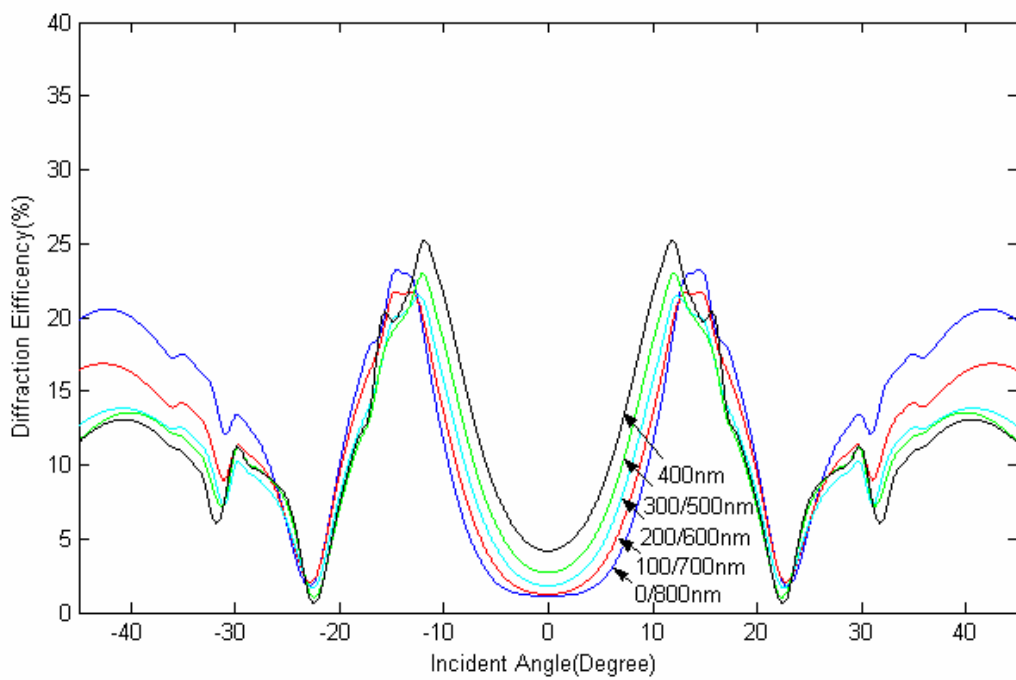


圖 4.13 TE 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_d = 4^\circ$)

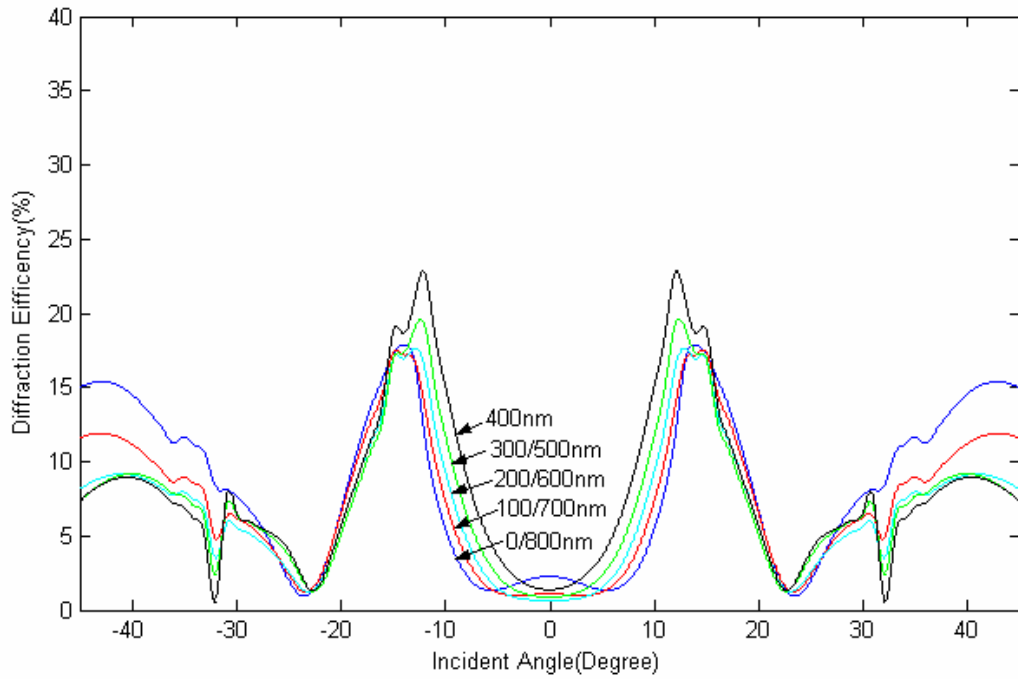


圖 4.14 TE 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_a = 5^\circ$)

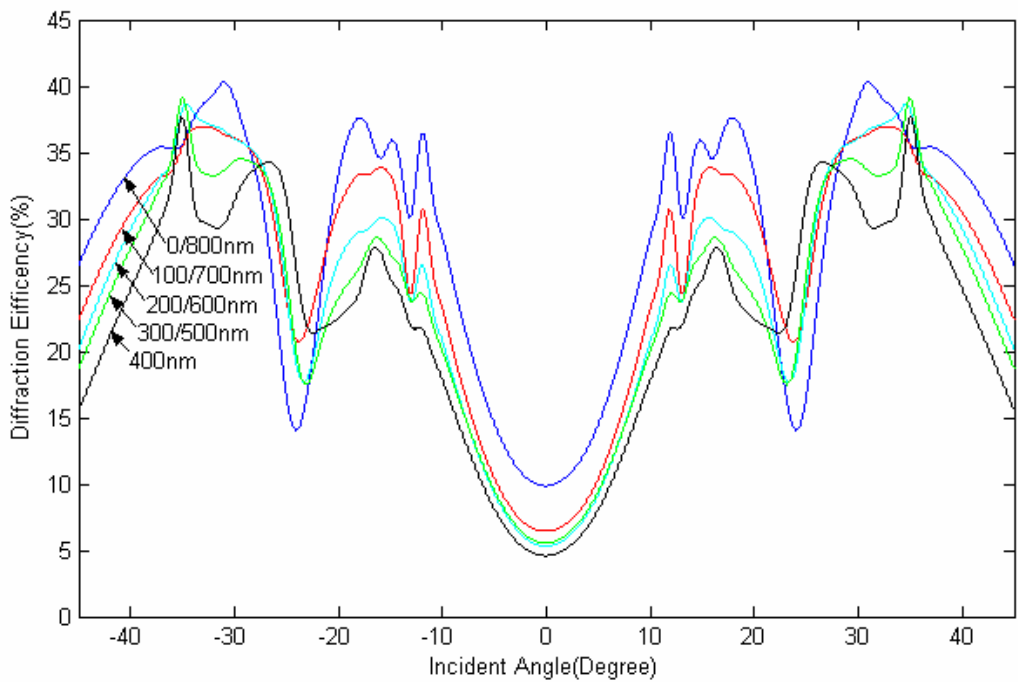


圖 4.15 TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_a = 1^\circ$)

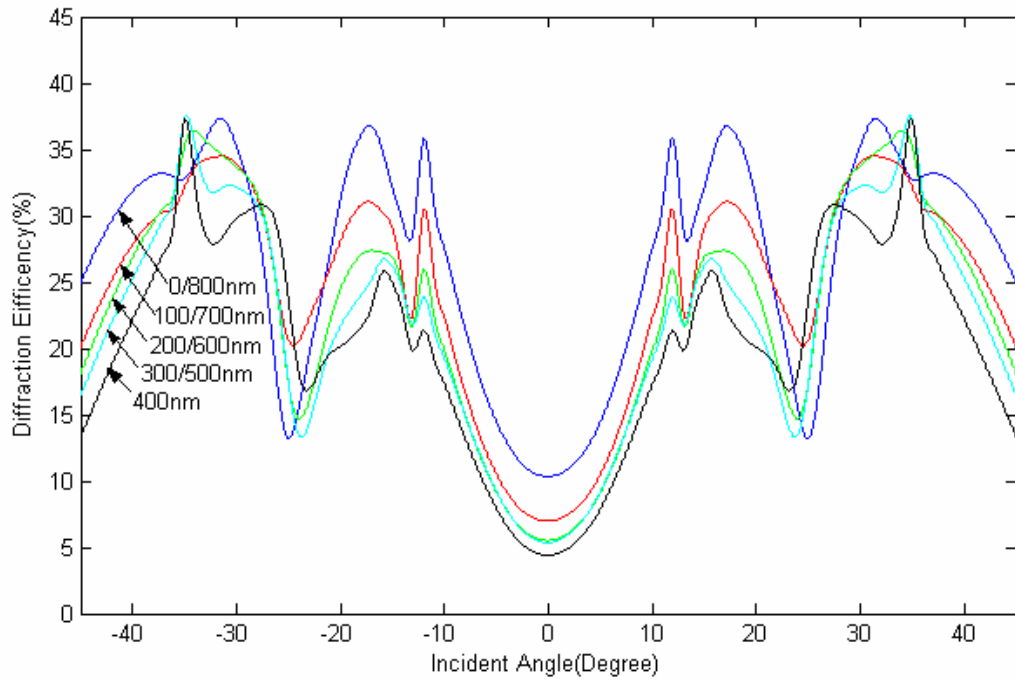


圖 4.16 TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈 ($\theta_d = 2^\circ$)

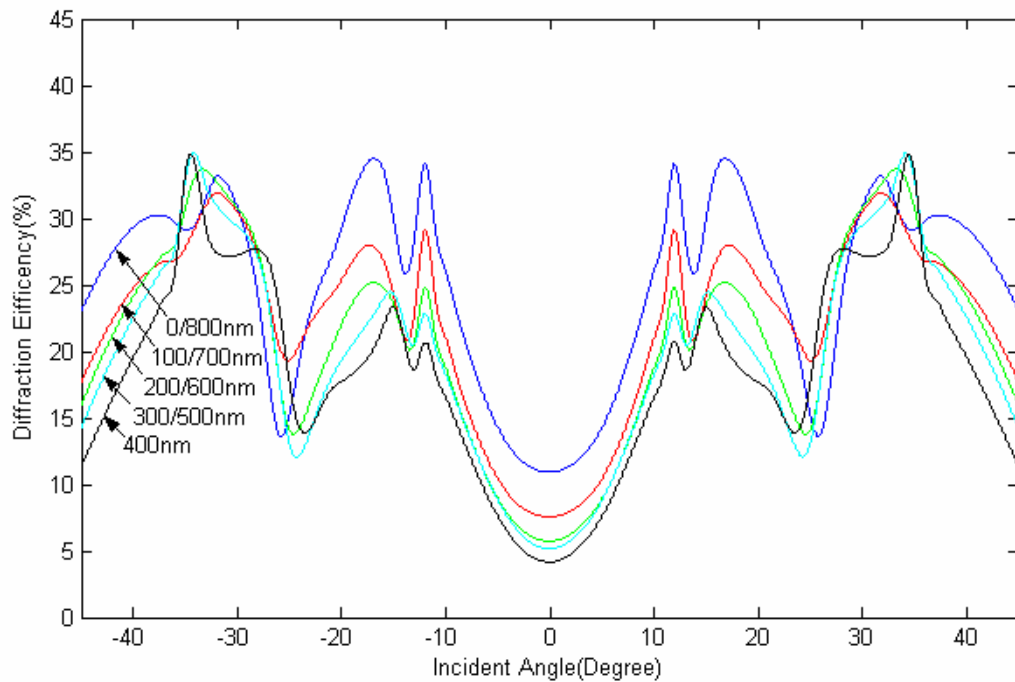


圖 4.17 TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈 ($\theta_d = 3^\circ$)

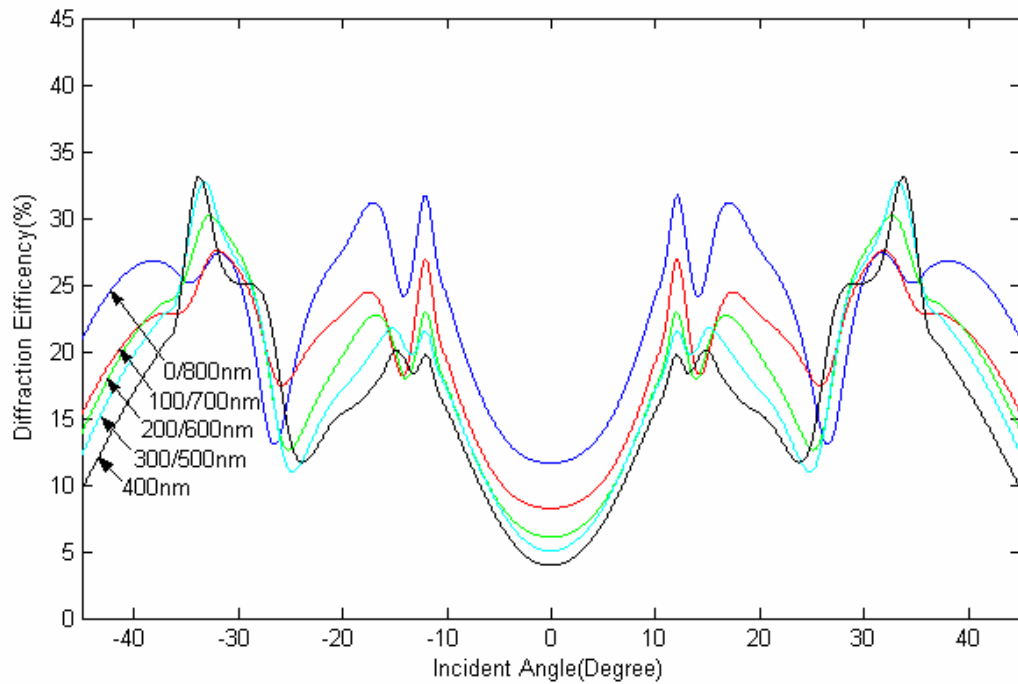


圖 4.18 TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_i = 4^\circ$)

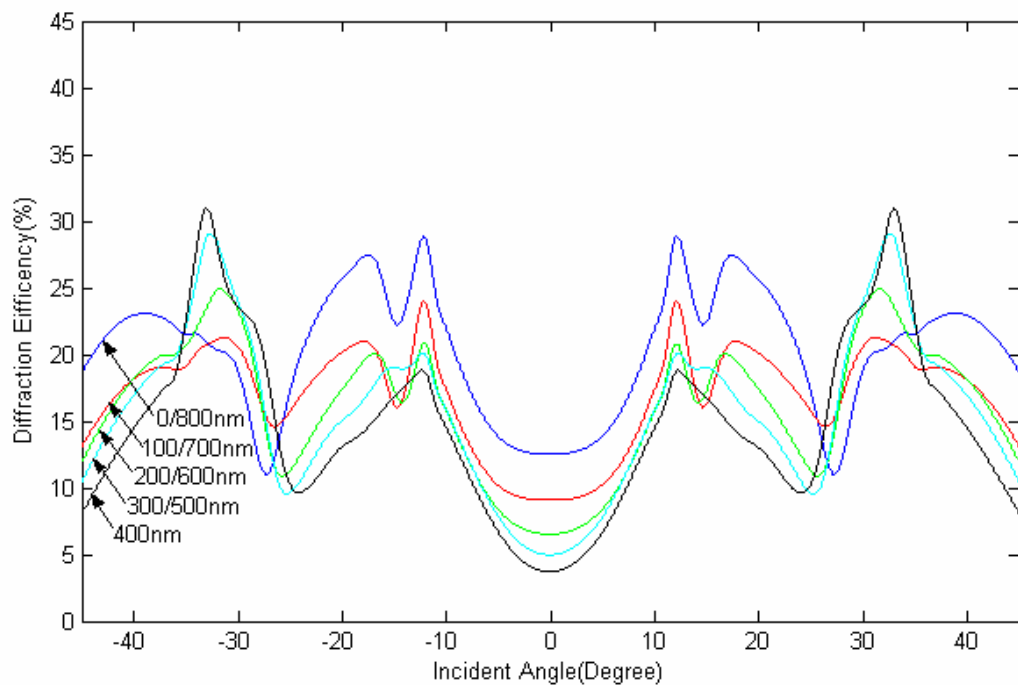


圖 4.19 TM 模態，具梯形角度之疊對光柵的零級繞射效率分佈($\theta_i = 5^\circ$)

第五章 光柵疊對誤差比對

5-1 前言

半導體製程中層對層之間的疊對(overlay)量測(即為微影疊對量測)為重要的一環，此疊對的誤差會影響到製程準確度。故在本章所要探討的是光柵疊對誤差的比對分析，利用量測與模擬所產生的繞射效率來進行比對，進而由此來回推光柵的錯位量。在本章也是設計一矽基版上具有上下兩層的光柵來進行分析，控制上下層光柵的錯位量來做為微影疊對誤差分析的依據。

利用不同入射角的入射光入射於光柵，再由不同錯位量所產生的繞射效率曲線變化來進行疊對誤差的分析，藉由繞射效率曲線的變化來回推光柵的錯位量。疊對誤差分析方法在本章主要分為全區域範圍和部分區域範圍來進行疊對誤差的比對。由前幾章節可知，在週期性光柵進行疊對誤差比對時，當其錯位量超過二分之一光柵週期時容易造成誤判的情況發生，這都是因為當錯位量超過二分之一光柵週期時其繞射效率曲線會有重疊的情況(如圖 3.7 和圖 3.8，當光柵錯位量為 300nm 時的繞射效率曲線與錯位量為 500nm 的繞射效率曲線重疊，錯位量為 200nm 與 600nm 重疊，錯位量為 100nm 與 700nm 重疊)。因此在本章所討論的週期性光柵之疊對誤差量測，其疊對誤差的量測範圍為二分之一光柵週期以內。

在本章為了方便模擬，所以在模擬過程中皆是以理想光柵來進行模擬

分析，即無梯形變形的情況。但在實際分析疊對誤差時，則必須考慮到製程誤差的問題，即當利用繞射效率來回推光柵錯位量時，必須把製程誤差所產生的梯形光柵之梯形角度加入至回推錯位量的計算中，如此才能得到精確的錯位量。

5-2 全區域範圍

光柵疊對誤差分析是利用不同錯位量及入射角的入射光入射於光柵，反射所產生的零級繞射效率曲線來進行比對並回推光柵的錯位量。所謂全區域範圍比對分析是指利用量測與模擬所產生的繞射效率曲線來進行比對與回推光柵錯位量的工作。



5-2-1 全區域範圍分析光柵疊對誤差

全區域範圍分析光柵疊對誤差的流程圖如圖 5.1 所示。首先將欲量測的疊對光柵元件以不同入射角之入射光入射於光柵，量測不同入射角反射所產生的零級繞射效率曲線。接著利用模擬的曲線來進行比對，輸入疊對光柵元件的結構參數，模擬當上下層光柵錯位量在 $X \sim Y$ nm 範圍，步距為 S nm，入射光以不同入射角入射其反射所產生的零級繞射效率曲線。有了量測與模擬之曲線後，即可進行疊對誤差回推比對的工作，比對工作是以全區域範圍來進行比對，即為利用量測曲線與模擬曲線來進行比對。

但是在做全區域範圍疊對誤差分析時無法完全利用曲線來進行比對，

這是因為在某些入射角入射時，其繞射效率曲線會有重疊或交錯及不規則排列的情況，這容易造成疊對誤差的誤判情況發生。舉例說明：如圖 3.6 上下層錯位光柵之系統結構，假設 $a = 850\text{nm}$ ， $b = 200\text{nm}$ ， $c = 4\text{nm}$ ， $d = 400\text{nm}$ ， $e = 800\text{nm}$ ，光柵週期(grating period)為 800nm ，工作週期(duty cycle)為 0.5。令上下層光柵有一錯位量 $D = 0 \sim 400\text{nm}$ ，錯位量模擬步距為 100nm ，模擬不同入射角之 TE 模態入射光入射於光柵的繞射效率曲線，如圖 5.2 和圖 5.3 所示。由圖 5.3 可知，不同錯位量的繞射曲線並非每個入射角入射皆都是有規則性的，如入射角 θ_i 為 $17^\circ \sim 21^\circ$ 時，其各不同錯位量的曲線間成不規則排列且有重疊與交錯的情況，故此區域在進行繞射效率曲線比對時，容易造成無法判斷或誤判錯位量的情況發生。而解決此問題方法是在進行全區域範圍進行比對時，將取整體曲線 80% 或 80% 以上的相似比對，以避免無法判斷與誤判的情況發生。

接著就可以判斷出疊對光柵錯位量的範圍，否則將模擬錯位量之 X, Y 改變再進行比對。假設光柵疊對誤差所比對的錯位量範圍在 $x \sim y\text{nm}$ 之間，接著將比對範圍與步距 S 縮小再進行繞射效率曲線的模擬與比對。重複將比對範圍與步距縮小，然而可以得到疊對光柵元件的錯位量值。在進行疊對誤差比對分析時，由圖 5.2 可知，入射光之入射角 $\theta_i = -45^\circ \sim 45^\circ$ ，其繞射效率曲線是對稱的，所以在進行疊對誤差比對時可以只量測或模擬入射角 $\theta_i = -45^\circ \sim 0^\circ$ 或 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 來進行比對分析。

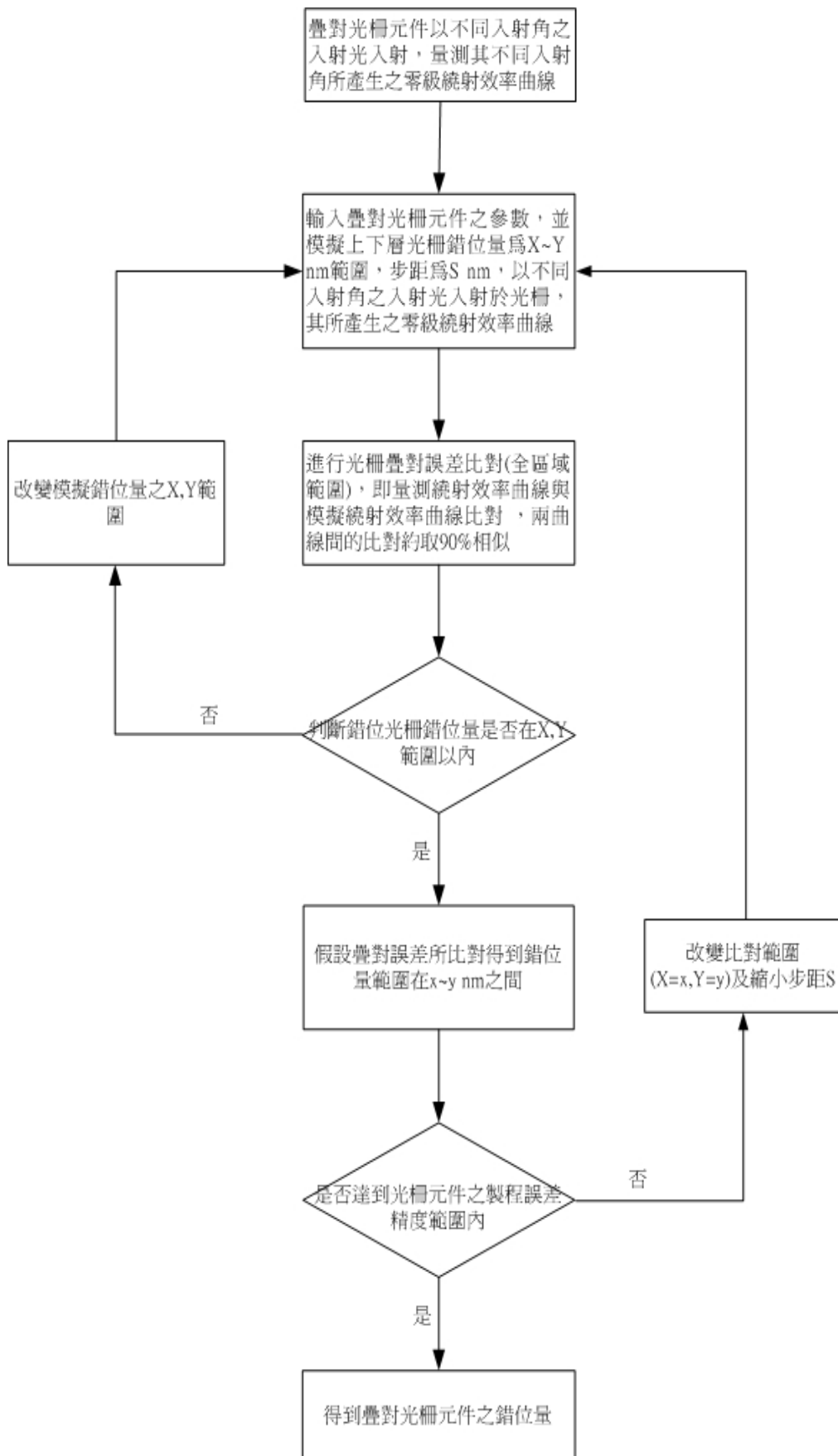


圖 5.1 全區域範圍分析光柵疊對誤差的流程圖

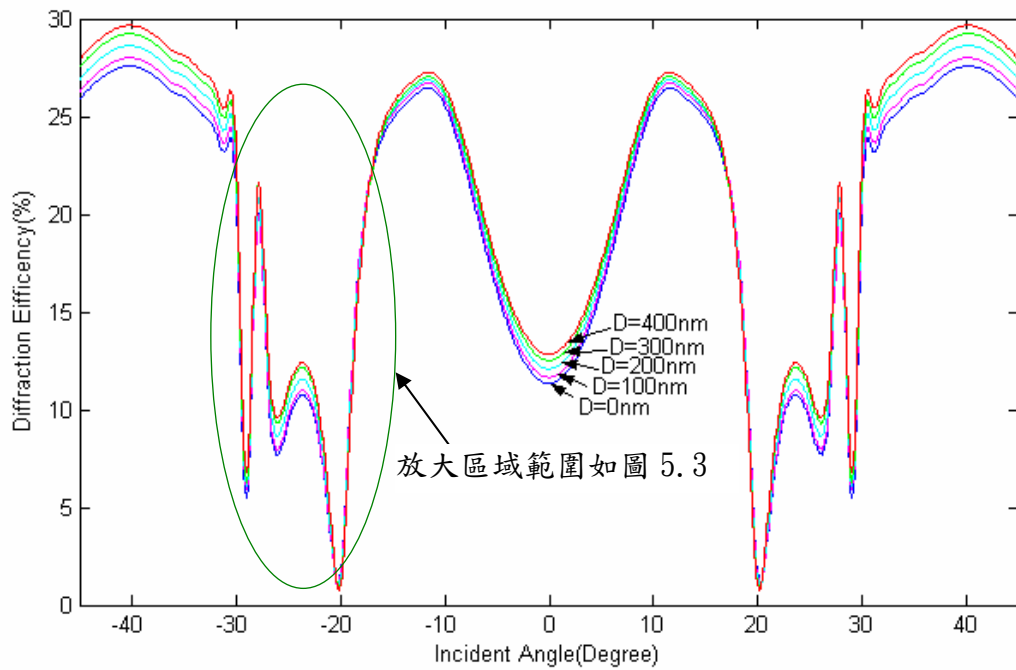


圖 5.2 TE 模態入射光以不同入射角及錯位量的零級繞射效率曲線(一)
 (依圖 3.6 之光柵結構 $a = 850\text{nm}$, $b = 200\text{nm}$, $c = 4\text{nm}$, $d = 400\text{nm}$, $e = 800\text{nm}$)

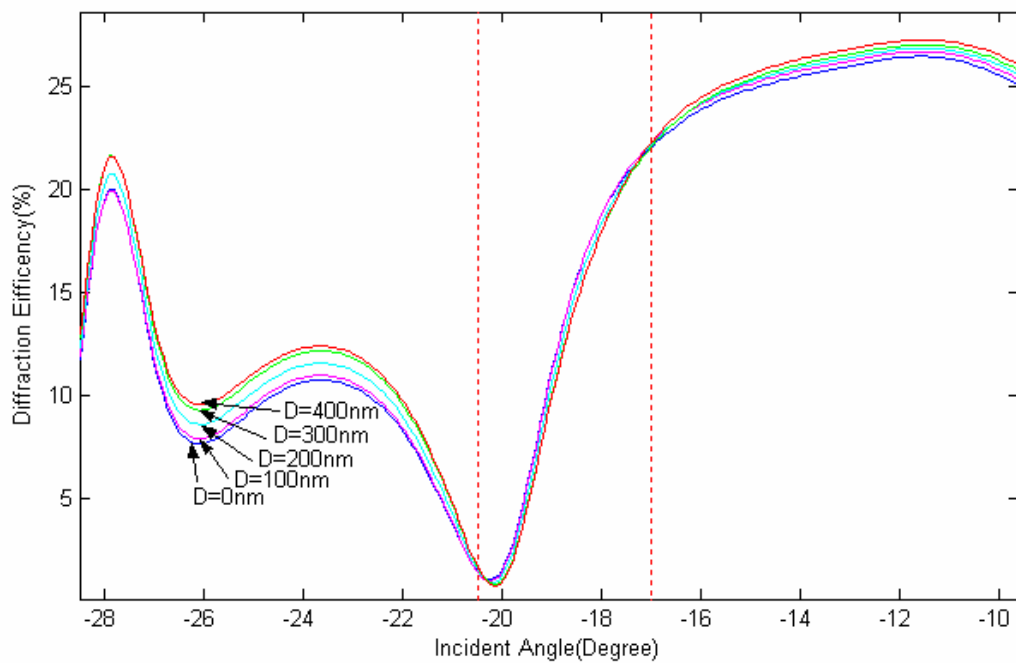


圖 5.3 TE 模態入射光以不同入射角及錯位量的零級繞射效率曲線(二)

5-2-2 全區域範圍分析光柵疊對誤差舉例

有一疊對光柵元件如圖 3.6 所示， $a = 850nm$ ， $b = 200nm$ ， $c = 4nm$ ， $d = 400nm$ ， $e = 800nm$ ，光柵週期為 $800nm$ ，工作週期為 0.5。假設疊對光柵有一錯位量為 D 。

首先將疊對光柵元件以不同入射角度($\theta_i = -45^\circ \sim 45^\circ$)之 TE 模態入射光入射於光柵，其系統結構如圖 3.6 所示。零級反射光由偵測器接收，假設模擬量測所產生之繞射曲線為圖 5.4 所示。接著以計算機模擬疊對光柵在不同錯位量時所會產生的零級繞射效率曲線，錯位量 D 範圍取 $0 \sim 200nm$ ，模擬步距為 $50nm$ ，將疊對光柵所模擬量測出的曲線與計算機模擬出的曲線做比對，曲線比對的相似度取 90%。其兩曲線比對結合如圖 5.5 所示，由圖可知其疊對光柵的錯位量在 $50 \sim 100nm$ 之間。

將縮小錯位量 D 範圍為 $50 \sim 100nm$ ，模擬步距為 $10nm$ 來進行計算機模擬。計算機所模擬產生的繞射效率曲線再與模擬量測產生的繞射效率曲線做比對分析，其曲線比對如圖 5.6 及圖 5.7 所示。由圖 5.7 可知疊對光柵的錯位量介於 $60 \sim 70nm$ 之間。再將縮小錯位量 D 範圍為 $60 \sim 70nm$ ，步距為 $2nm$ 進行計算機模擬。計算機所模擬產生的繞射效率曲線再與模擬量測產生的繞射效率曲線做比對工作，其曲線比對如圖 5.8 所示。由圖 5.8 可知模擬量測的曲線與計算機模擬疊對光柵的錯位量 $68nm$ 之曲線重疊，故有此可知其疊對光柵的錯位量為 $68nm$ 。

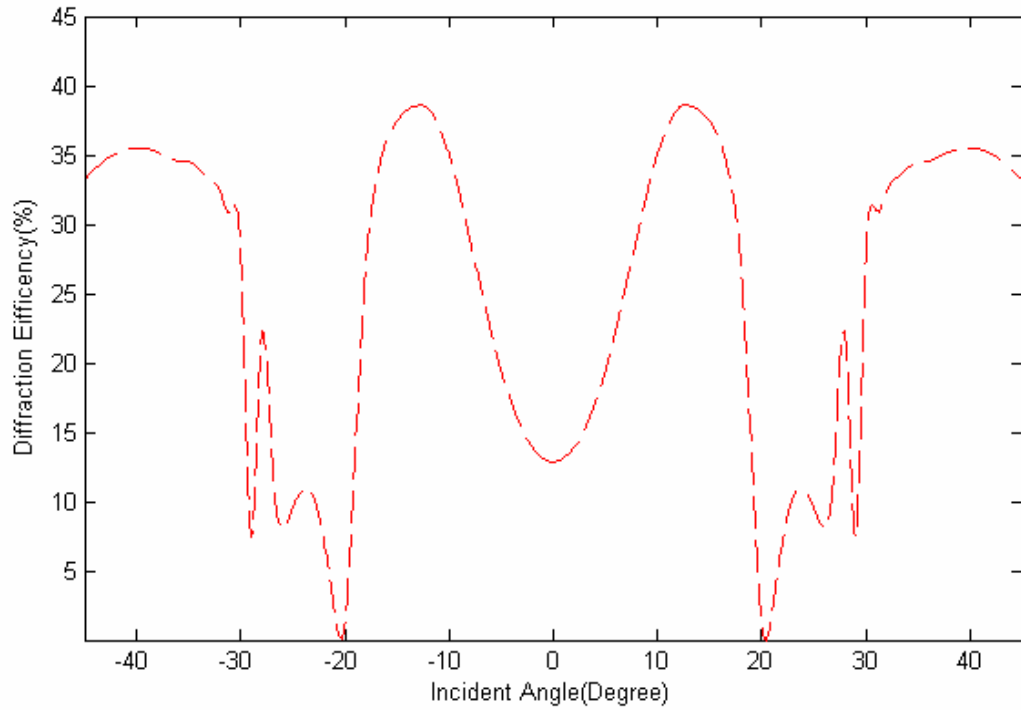


圖 5.4 疊對光柵以不同入射角之 TE 模態入射光入射所量測的零級繞射效率曲線

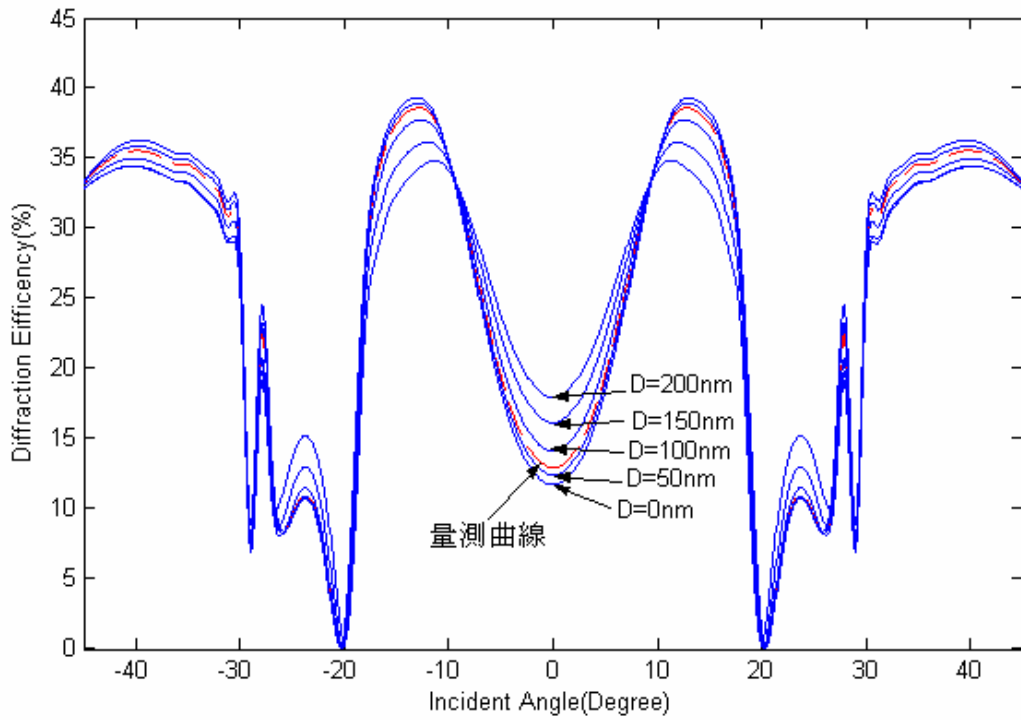


圖 5.5 模擬疊對光柵的錯位量 $D = 0 \sim 200\text{nm}$ ，步距 50nm 形成的零級繞射效率曲線與圖 5.4 量測曲線結合比對圖。

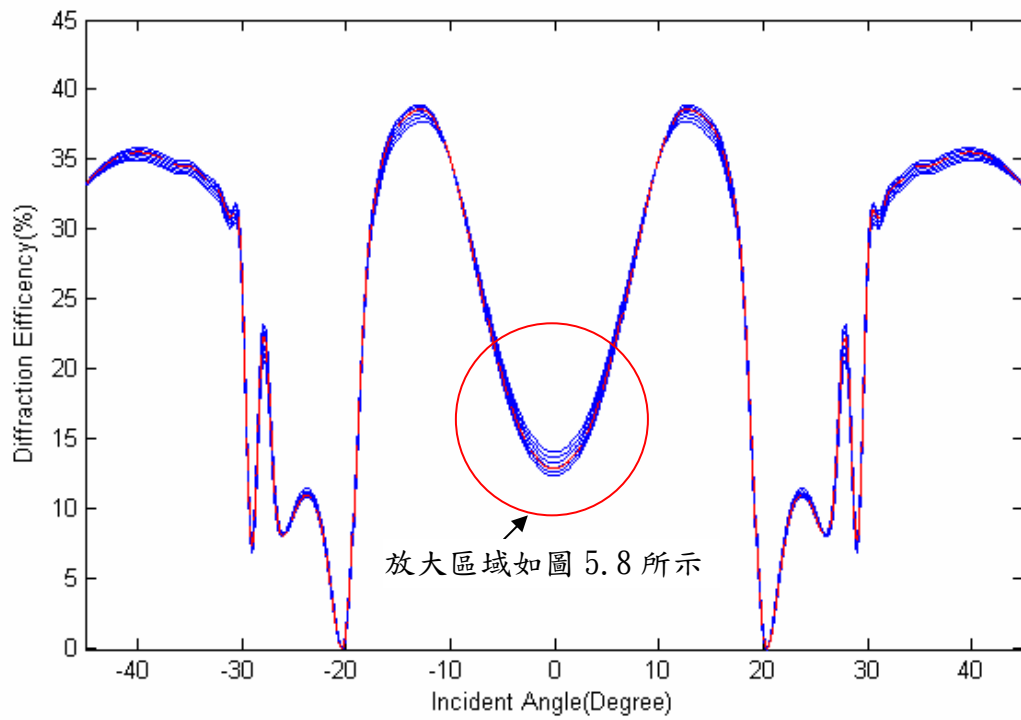


圖 5.6 模擬疊對光柵的錯位量 $D = 50 \sim 100\text{nm}$ ，步距 10nm 形成的零級繞射效率曲線與圖 5.4 量測曲線結合比對圖。

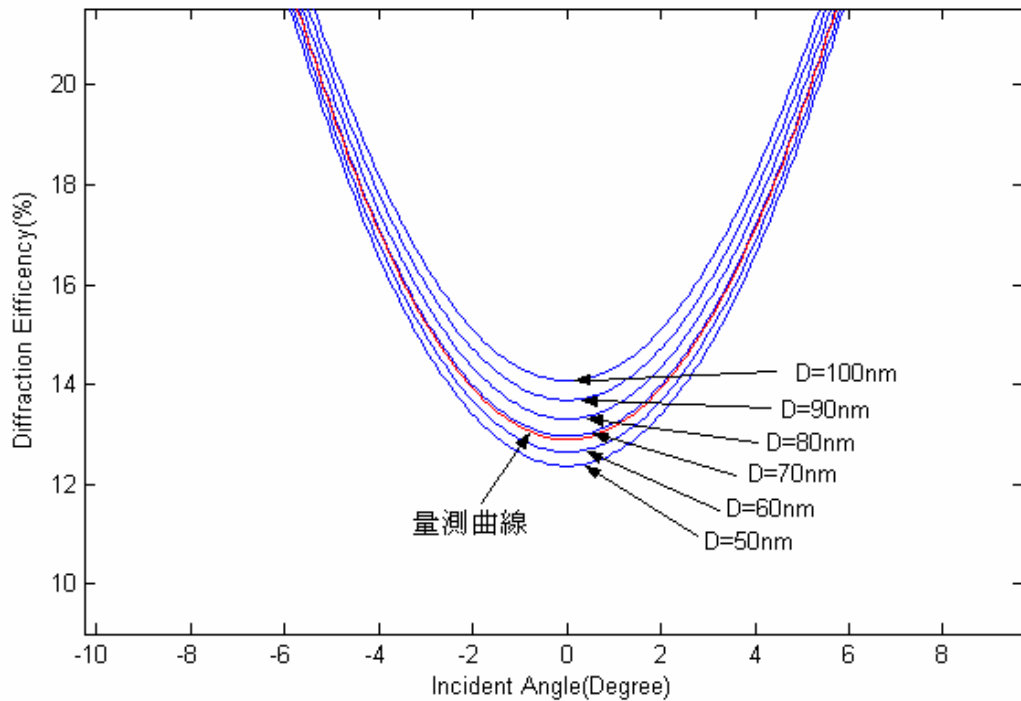


圖 5.7 圖 5.6 中之區域放大圖

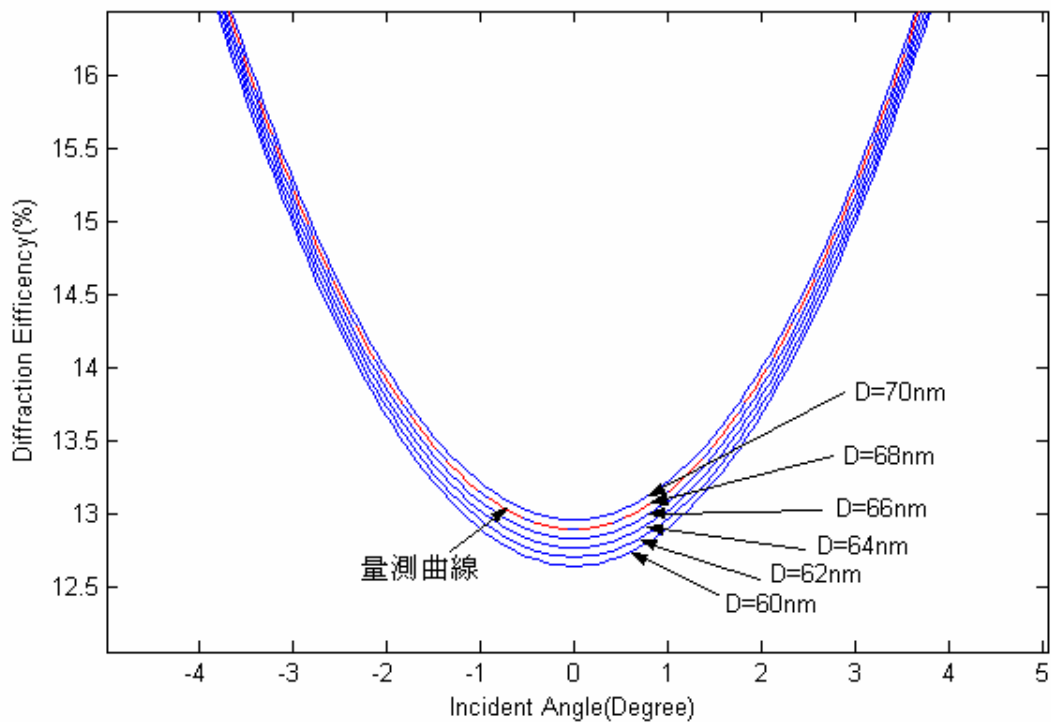


圖 5.8 模擬疊對光柵的錯位量 $D = 60 \sim 70\text{nm}$ ，步距 2nm 形成的零級繞射效率曲線與圖 5.4 量測曲線結合比對圖，最後可知疊對光柵錯位量為 68nm



5-2-3 討論

使用全區域範圍來分析光柵的疊對誤差，在繞射效率曲線較複雜(如各錯位量的曲線重疊、交錯或呈現不規則排列)的情況下會容易產生無法判斷或誤判光柵的錯位量。舉例說明：如圖 3.6 上下層錯位光柵之系統結構， $a = 850\text{nm}$ ， $b = 200\text{nm}$ ， $c = 50\text{nm}$ ， $d = 400\text{nm}$ ， $e = 800\text{nm}$ ，光柵週期為 800nm ，工作週期為 0.5 。令上下層光柵有一錯位量 $D = 0 \sim 400\text{nm}$ ，模擬步距為 100nm ，模擬 TE 模態光以不同入射角入射於光柵，反射的繞射效率曲線，如圖 5.9 所示。由圖 5.9 可知，在入射角 $\theta_i = 8^\circ \sim 32^\circ$ 之間所形成的繞射效率曲線，呈現不規則性的排列與多處曲線有重疊與交錯的情況發生，因此當在進行曲

線比對時，會不容易判斷出疊對光柵的錯位量。為了改善當繞射效率曲線較複雜時也能進行光柵疊對誤差的比對分析，所以接下來章節將介紹利用部分區域範圍來進行疊對誤差比對的方法。

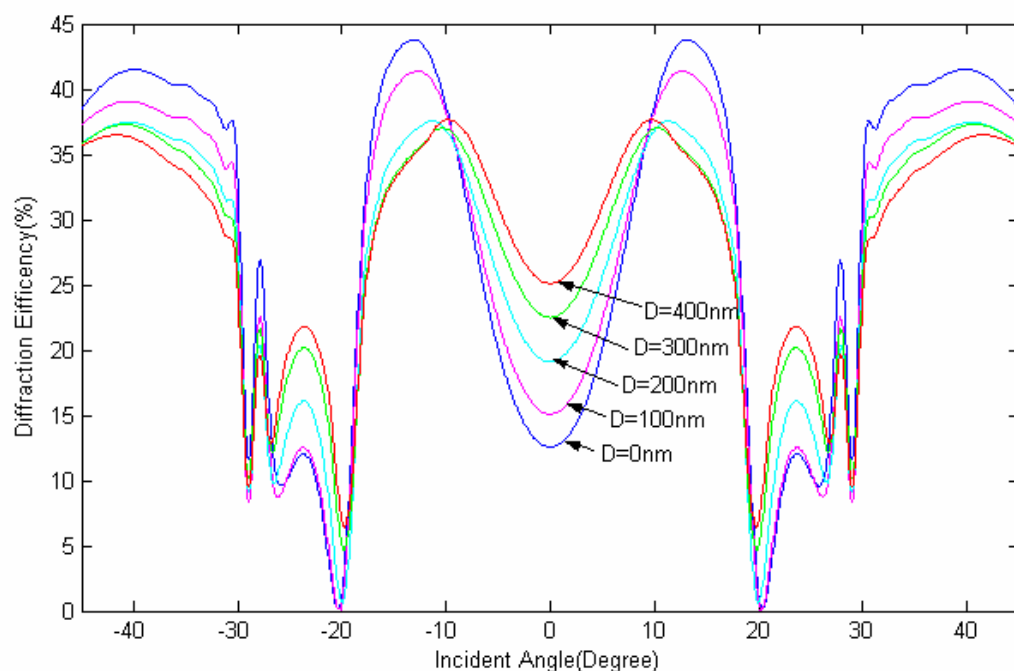


圖 5.9 TE 模態入射光以不同入射角及錯位量的零級繞射效率曲線 (依圖 3.6 之光柵結構 $a = 850\text{nm}$, $b = 200\text{nm}$, $c = 50\text{nm}$, $d = 400\text{nm}$, $e = 800\text{nm}$)

5-3 部分區域範圍

為了改善全區域範圍分析光柵疊對誤差所會遭遇到的問題，就是不同錯位量及入射角所產生的繞射效率曲線，若各個曲線間較複雜，呈現不規則排列及多處曲線有重疊及交錯的情況下，容易造成量測曲線與模擬曲線間的比對困難或產生誤判的情形發生。所以在本節將利用部分區域範圍來分析光柵疊對的誤差比對，以解決曲線較複雜時所遭遇到的問題。其部分區域範圍比對的方法，在本論文分為兩種，一種為取最大平均靈敏度範

圍，另一種為取 M 點最大靈敏度。故接下來的兩小節將對此兩種方法來做簡單的介紹。

5-3-1 最大平均靈敏度範圍

部分區域取最大平均靈敏度範圍是指在分析光柵疊對誤差時，在不同錯位量及入射角所產生的繞射效率。取某一入射角度範圍來進行疊對誤差比對，在此角度範圍內對於不同錯位量所形成的繞射效率曲線之間的靈敏度平均值為最大平均靈敏度值。再利用此入射角度範圍來做量測及模擬上的分析比對工作。由於此方法只取靈敏度較高的入射角度範圍來進行疊對誤差的比對，因此可避免利用全區域範圍來進行疊對誤差比對時，所會遇到曲線不規則或曲線較複雜時而無法比對的情況發生。

5-3-1-1 靈敏度

首先定義何謂靈敏度(Sensitivity)?在本論文之中的靈敏度為在某一入射角度，其每一錯位量所對應繞射效率值之間的差異程度，而此差異程度以均方根誤差(Root mean square error ,RMSE)來表示之，均方根誤差的數學表示式如(5.1)所示。當靈敏度越高時，代表其入射角之中的每一錯位量所對應的繞射效率值之間的差異程度越大，這在進行光柵疊對誤差比對時，能提高比對的準確度。相反地，當靈敏度低時，其表示每一錯位量對應的繞射效率值相當接近，這在進行疊對誤差比對時容易造成誤判的情況發生。

$$\text{均方根誤差} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (a_i - a_j)^2}{n(n-1)}} \quad i \neq j \quad (5.1)$$

其中 n 為共有 n 條繞射效率曲線(即為模擬錯位量的個數)，

a_i, a_j 為對應不同錯位量的第 i, j 條繞射效率曲線之繞射效率值。

5-3-1-2 最大平均靈敏度範圍

利用部分區域取最大平均靈敏度範圍來做分析光柵疊對誤差，其流程如圖 5.10 所示。首先以疊對光柵元件的結構參數模擬上下層光柵，當錯位量範圍為 $X \sim Y \text{ nm}$ ，模擬步距為 $S \text{ nm}$ 時，以不同入射角（由於 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 和 $\theta_i = -45^\circ \sim 0^\circ$ 所模擬出的繞射效率曲線為對稱，故為了計算方便可只取入射角為 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 或 $\theta_i = -45^\circ \sim 0^\circ$ 來進行模擬）之入射光入射於光柵，其反射產生之零級繞射效率曲線。接著計算不同入射角入射與錯位量所形成的靈敏度值，並求以每 P 個入射角度內之平均靈敏度值，最後取最大平均靈敏度值所對應的入射角度範圍及繞射效率值，假設最大平均靈敏度值對應入射角度範圍為 $\theta_1 \sim \theta_p$ 度及繞射效率值為 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p$ (α_p 為 $k \times 1$ 矩陣 $k = (Y - X)/S + 1$)。在疊對光柵元件的量測，以入射角 $\theta_i = \theta_1 \sim \theta_p$ 度入射於光柵，量測其反射的零級繞射效率值，假設量測的繞射效率值為 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ 。再將模擬及量測所得到繞射效率值來進行比對分析。假設疊對誤差比對所得到的錯位量範圍在 $x \sim y \text{ nm}$ 之間，接著改變錯位量模擬範圍 ($X = x, Y = y$) 與縮小模擬步距，模擬以不同入射角 ($\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$) 入射於光柵，取最大平均靈敏度值所對應的零

級繞射效率值與入射角度範圍，再做模擬及量測的比對。重複縮小模擬比對的範圍，最後即可得到疊對光柵的錯位量。

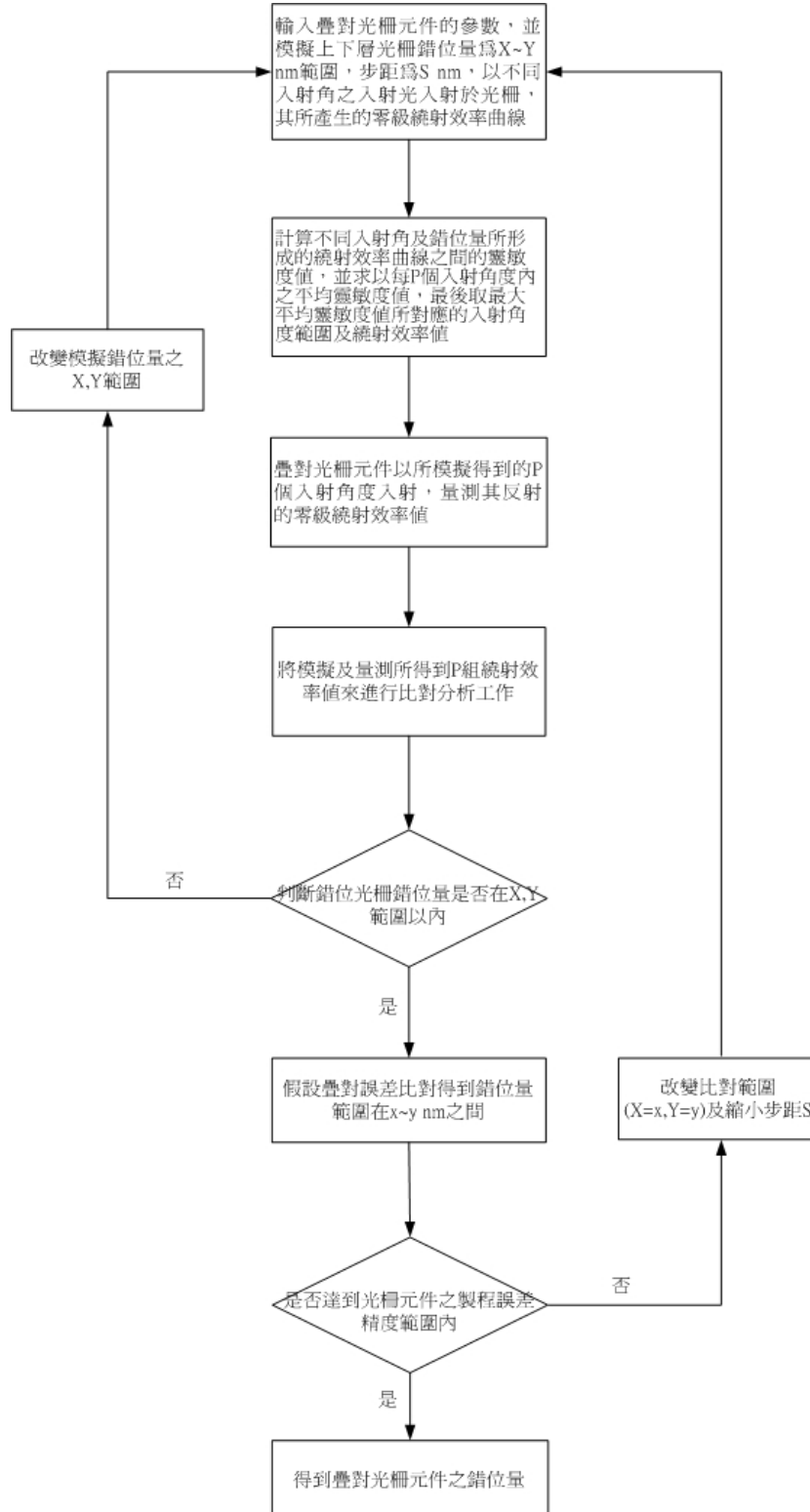


圖 5.10 部分區域取最大平均靈敏度範圍分析光柵疊對誤差的流程圖

5-3-1-3 最大平均靈敏度範圍舉例

有一疊對光柵元件結構如圖 3.6 所示， $a = 850\text{nm}$ ， $b = 200\text{nm}$ ， $c = 50\text{nm}$ ， $d = 400\text{nm}$ ， $e = 800\text{nm}$ ，即光柵週期為 800nm ，工作週期為 0.5。假設疊對光柵有一錯位量為 D ，藉由模擬比對來分析出疊對光柵的錯位量 D 。

首先將其疊對光柵元件之結構參數帶入模擬程式中進行分析，錯位量 $D = 0 \sim 200\text{nm}$ ，模擬步距為 50nm ，入射光之入射角 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ ，模擬不同入射角的 TE 模態入射光及不同錯位量反射所產生的零級繞射效率曲線，如圖 5.11 所示。計算每一入射角度之各個錯位量的繞射效率值之間的靈敏度值，再以 5($P=5$)個入射角度為一範圍單位計算其平均靈敏度，取最大平均靈敏度所對應的入射角度與繞射效率值。模擬得到最大平均靈敏度所對應的入射角為 $\theta_i = 13^\circ \sim 17^\circ$ ，其入射角度所對應的繞射效率值列於表 5.1 所示。接著模擬量測疊對光柵之繞射效率值，TE 模態入射光以入射角 $\theta_i = 13^\circ \sim 17^\circ$ 入射於疊對光柵，量測其反射光的零級繞射效率值，假設模擬量測所得的繞射效率值列於表 5.2 所示。

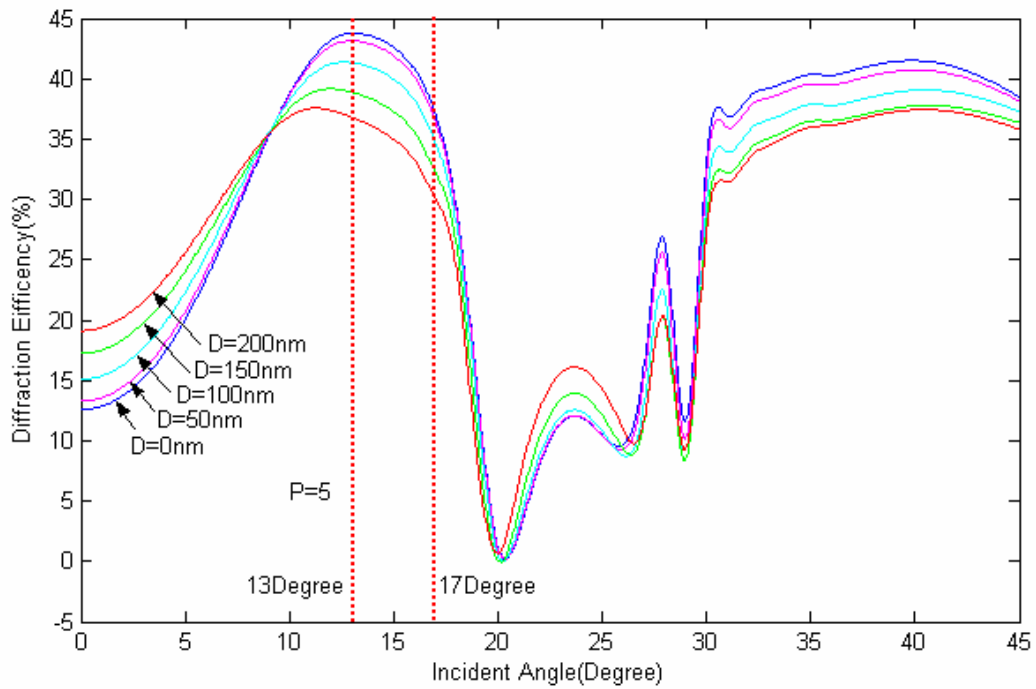


圖 5.11 不同入射角與錯位量所模擬出的零級繞射效率曲線圖
 ($\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$, $D = 0 \sim 200nm$, 步距 $50nm$, $P = 5$)

表 5.1 模擬入射角 $\theta_i = 13^\circ \sim 17^\circ$ 及錯位量 $D = 0 \sim 200nm$ 的零級繞射效率值(%)

錯位量 入射角度	0nm	50nm	100nm	150nm	200nm
13°	43.7622	43.1368	41.3299	38.8838	36.8034
14°	43.5038	42.8362	40.9089	38.2914	36.0635
15°	42.6075	41.9336	39.9756	37.2883	34.9885
16°	40.7819	40.1313	38.2232	35.5668	33.2685
17°	37.1325	36.5175	34.7318	32.2458	30.0494

表 5.2 假設模擬量測入射角 $\theta_i = 13^\circ \sim 17^\circ$ 入射於疊對光柵的零級繞射效率值(%)

入射角度	繞射效率(%)
13°	43.6299
14°	43.3625
15°	42.4650
16°	40.6447
17°	37.0024

由表 5.1 和表 5.2，模擬與模擬量測的繞射效率值來進行疊對誤差比對，比對結果顯示疊對光柵錯位量 D 在 $0nm \sim 50nm$ 之間。接下來再以錯位量 $D = 0 \sim 50nm$ ，步距為 $10nm$ ，以入射角 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 入射，模擬其繞射效率曲線並計算每一入射角度之各個錯位量的繞射效率值之間的靈敏度值，其繞射效率曲線如圖 5.12 所示。相同以 5(P=5)個入射角度為一範圍單位計算其平均靈敏度，取最大平均靈敏度所對應的入射角度及繞射效率值。模擬得到最大平均靈敏度所對應的入射角為 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ ，其入射角度所對應的繞射效率值列於表 5.3 所示。接著模擬量測疊對光柵的繞射效率，TE 模態入射光以入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ 入射於疊對光柵，量測其反射的零級繞射效率值，假設模擬量測所得的繞射效率值列表 5.4 所示。

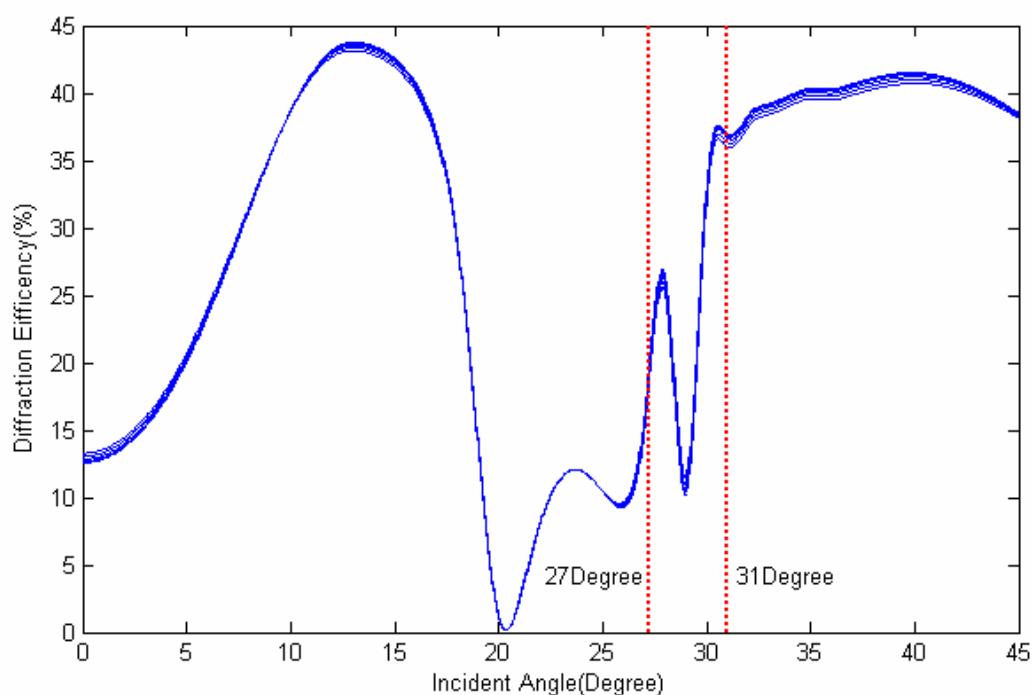


圖 5.12 不同入射角與錯位量所模擬出的零級繞射效率曲線圖
($\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ ， $D = 0 \sim 50nm$ ，步距 $10nm$)

表 5.3 模擬入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ 及錯位量 $D = 0 \sim 50nm$ 的零級繞射效率值(%)

錯位量 入射角度	0nm	10nm	20nm	30nm	40nm	50nm
27°	16.0169	15.9720	15.8390	15.6233	15.3333	14.9807
28°	26.4942	26.4344	26.2571	25.9683	25.5783	25.1007
29°	11.6257	11.5557	11.3534	11.0405	10.6487	10.2146
30°	33.2206	33.1700	33.0209	32.7810	32.4621	32.0794
31°	36.9504	36.9093	36.7876	36.5899	36.3234	35.9979

表 5.4 假設模擬量測入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ 入射於疊對光柵的零級繞射效率值(%)

入射角度	繞射效率(%)
27°	15.7827
28°	26.1818
29°	11.2699
30°	32.9580
31°	36.7360

由表 5.3 和表 5.4，模擬與模擬量測的繞射效率值來進行疊對誤差比對，比對結果其疊對光柵錯位量 D 在 $20nm \sim 30nm$ 之間。接下來再以錯位量 $D = 20 \sim 30nm$ ，步距為 $2nm$ ，以入射角 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 入射，模擬其繞射效率曲線並計算每一入射角度之各個錯位量的繞射效率值之間的靈敏度值，其繞射效率曲線如圖 5.13 所示。相同以 5(P=5) 個入射角度為一範圍單位計算其平均靈敏度，取最大平均靈敏度所對應的入射角度及繞射效率值。而模擬得到最大平均靈敏度所對應的入射角為 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ ，其入射角度所對應的繞射效率值列於表 5.5 所示。而模擬量測入射光以入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ 入射於疊對光柵，其反射的零級繞射效率值如同表 5.4 所示。

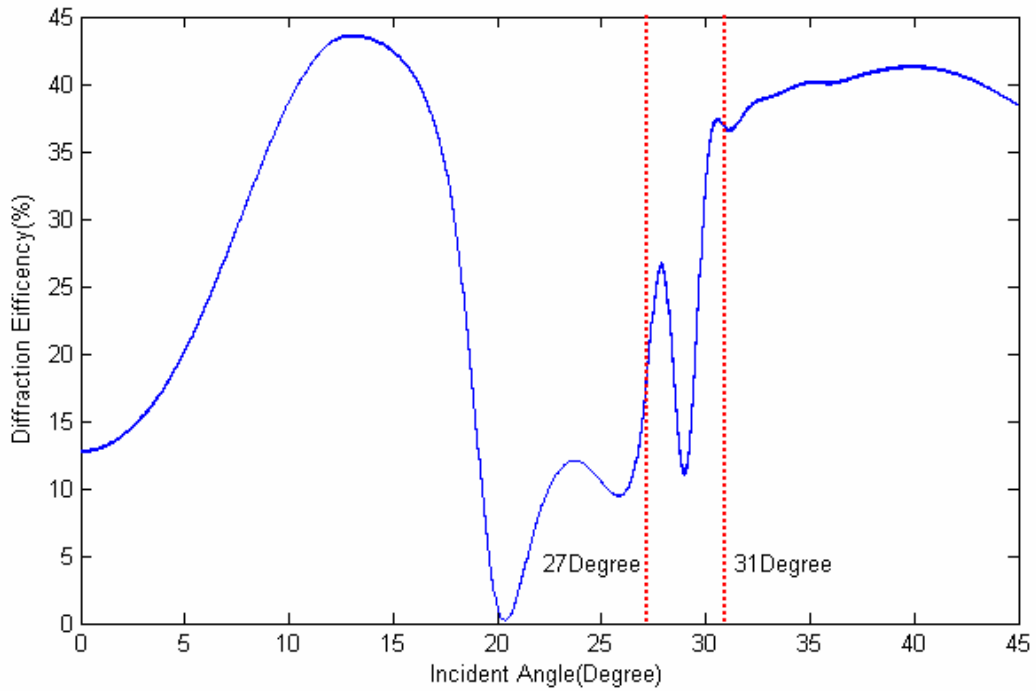


圖 5.13 不同入射角與錯位量所模擬出的零級繞射效率曲線圖
 ($\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$, $D = 20 \sim 30nm$, 步距 $2nm$)

表 5.5 模擬入射角 $\theta_i = 27^\circ \sim 31^\circ$ 及錯位量 $D = 20 \sim 30nm$ 的零級繞射效率值(%)

錯位量 入射角度	20nm	22nm	24nm	26nm	28nm	30nm
27°	15.8390	15.8023	15.7623	15.7190	15.6727	15.6233
28°	26.2571	26.2080	26.1545	26.0967	26.0346	25.9683
29°	11.3534	11.2988	11.2399	11.1771	11.1105	11.0405
30°	33.0209	32.9799	32.9353	32.8872	32.8357	32.7810
31°	36.7876	36.7539	36.7173	36.6777	36.6352	36.5899

由表 5.4 和表 5.5，模擬與模擬量測的繞射效率值來進行疊對誤差比對，比對結果其疊對光柵錯位量 D 在 $22 \sim 24nm$ 之間，即得到疊對光柵元件上下層之錯位量為 $23nm$ 。

5-3-1-4 討論

部分區域取最大平均靈敏度範圍方法來比對疊對誤差，雖然可避開曲線重疊或交錯部分以避免造成比對錯誤的情況發生，但是在取入射角度範圍個數 P 值時， P 值的取法會依不同錯位量所模擬出的繞射效率曲線有所限制。當 P 值取太大時，即入射角的範圍較大，會有可能遇到曲線重疊或交錯的部分，造成無法比對或誤判的情況，例如：圖 5.14 當 $P=10$ 時，其入射角在 20 度附近，其曲線有重疊與交錯的現象。若 P 值取太小時，會造成所比對出的錯位量結果無法判斷其準確度。

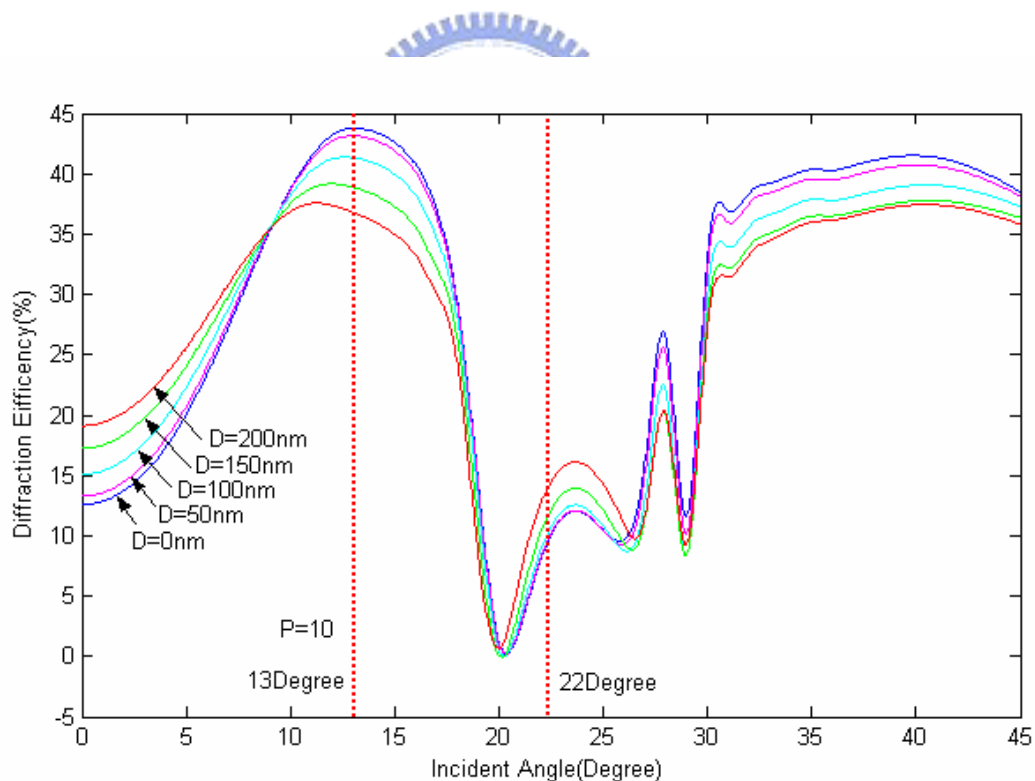


圖 5.14 不同入射角與錯位量所模擬出的零級繞射效率曲線圖
($\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ ， $D = 0 \sim 200nm$ ，步距 $50nm$ ， $P = 10$)

P 值的取法，即取入射角的範圍大小，需要配合模擬出的曲線來判斷是否恰當，曲線是否有重疊或交錯的部分，以避免造成無法比對或準確度不高的情形發生。故 P 值的定義為部分區域取最大平均靈敏度範圍的缺點，因此在下一小節將介紹解決此問題的方法，其方法是利用取 M 點最大靈敏度的入射角來進行分析比對，以減少 P 值定義的步驟。

5-3-2 M 點最大靈敏度

取 M 點最大靈敏度是指在分析光柵疊對誤差時，在不同錯位量及入射角所產生的繞射效率曲線，取 M 個入射角度對於不同錯位量所形成的繞射效率曲線之間的靈敏度最大值，再以此 M 個入射角度來進行量測及模擬上的分析比對工作。由於此方法只取靈敏度較高的入射角度來進行疊對誤差比對，因此可避免全區域範圍疊對誤差比對方法所會遇到的曲線不規則或曲線重疊交錯而無法比對情形，對於取最大平均靈敏度 P 個入射角度範圍，也可避免在定義 P 值大小時會遇到曲線不規則或曲線重疊交錯的區域，造成比對發生問題或比對結果準確度不高的情形發生。

5-3-2-1 M 點最大靈敏度

利用部分區域取 M 個最大靈敏度的入射角來進行光柵疊對誤差的分析，其流程如圖 5.15 所示。首先將疊對光柵元件的結構參數帶入模擬程式

中進行模擬分析，錯位量 $D = X \sim Y$ nm，模擬步距為 S nm，入射光的入射角 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ ，模擬 TE 模態入射光以不同入射角及錯位量所產生的零級繞射效率曲線。然後計算每一入射角度各個之不同錯位量的繞射效率值之間的靈敏度，取 M 個最大值靈敏度所對應的入射角度及繞射效率值，假設 M 個最大靈敏度所對應之入射角度為 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_M$ 及繞射效率值為 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M$ (α_n 為 $k \times 1$ 矩陣 $k = (Y - X)/S + 1$ ， $n = 1 \sim M$)。接著以模擬所得到的 M 個入射角 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_M$ 來對疊對光柵來進行繞射效率的量測，TE 模態入射光以入射角 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_M$ 入射於疊對光柵，量測反射的零級繞射效率值。再將模擬及量測所得到 M 個入射角 ($\theta_1 \sim \theta_M$) 所對應的繞射效率值來進行比對工作。假設疊對誤差比對所得到的錯位量範圍在 $x \sim y$ nm 之間，接著改變疊對比對範圍 ($X = x, Y = y$) 及縮小模擬步距 S ，模擬以不同入射角 ($\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$) 入射於光柵，再取 M 個最大靈敏度值所對應的零級繞射效率值與入射角度，做模擬及量測的比對。重複縮小模擬比對的範圍，最後即可得到疊對光柵的錯位量。

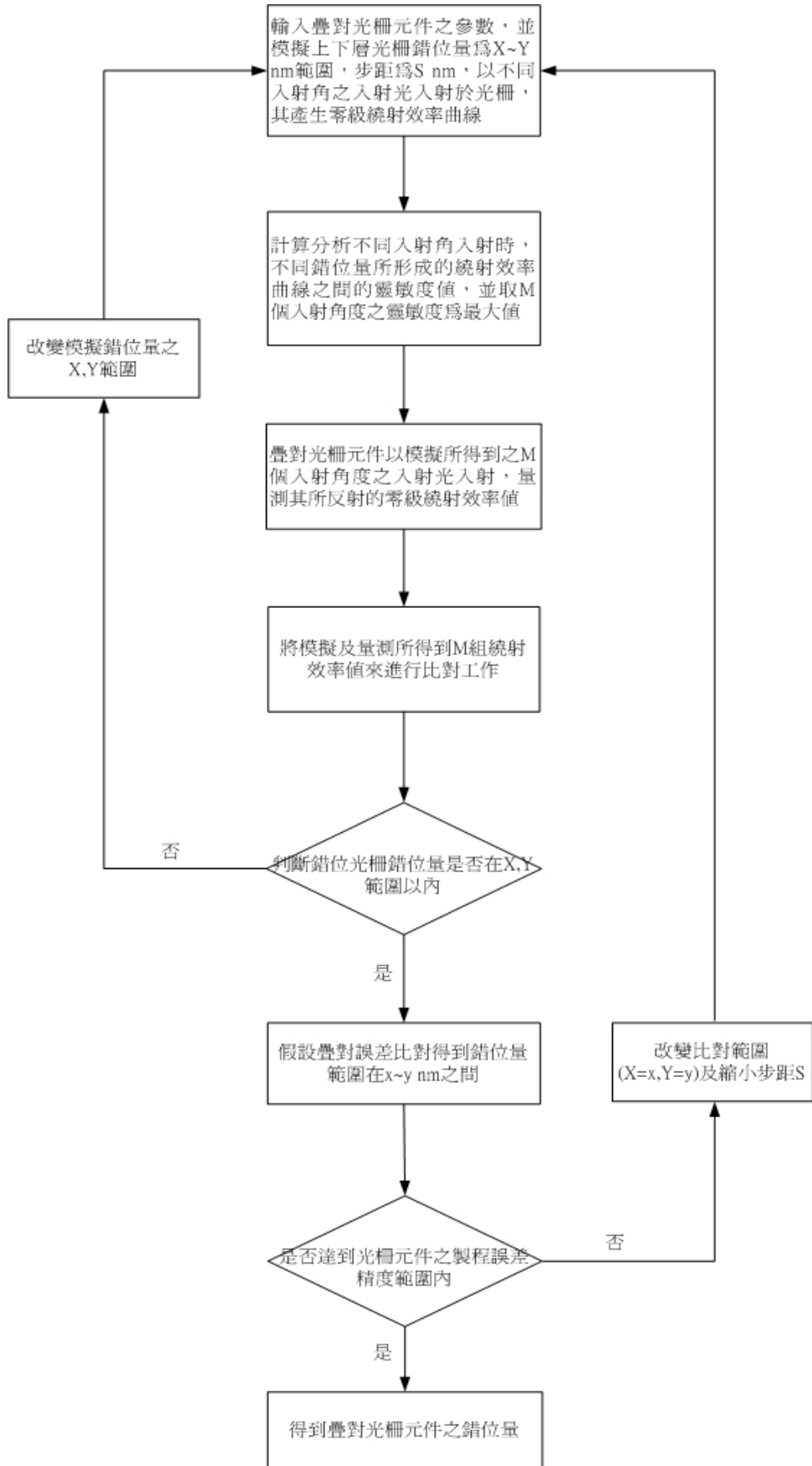


圖 5.15 部分區域取 M 個最大靈敏度之入射角分析光柵疊對誤差的流程圖

5-3-2-2 M 個最大靈敏度舉例

有一疊對光柵元件其結構如圖 3.6 所示， $a = 800nm$ ， $b = 200nm$ ， $c = 50nm$ ， $d = 400nm$ ， $e = 800nm$ ，即光柵週期為 $800nm$ ，工作週期為 0.5。假設錯位光柵有一錯位量為 D ，模擬分析疊對光柵的錯位量 D 。

首先將其疊對光柵元件的結構參數帶入模擬程式中進行分析，錯位量 $D = 0 \sim 200nm$ ，步距為 $50nm$ ，入射光之入射角 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ ，模擬不同入射角的 TE 模態入射光及不同錯位量所產生的零級繞射效率曲線，如圖 5.16 所示。然後計算每一入射角度所對應不同錯位量之繞射效率值的靈敏度，取 5 ($M = 5$) 個最大值靈敏度所對應的入射角度及繞射效率值，其 5 個最大靈敏度所對應的入射角度為 $0^\circ, 1^\circ, 2^\circ, 26^\circ, 29^\circ$ ，其繞射效率值列於表 5.6。接著以模擬所得到的 5 個入射角 $0^\circ, 1^\circ, 2^\circ, 26^\circ, 29^\circ$ 來對疊對光柵來進行繞射效率的模擬量測。TE 模態入射光以入射角 $0^\circ, 1^\circ, 2^\circ, 26^\circ, 29^\circ$ 入射於疊對光柵，模擬量測反射的零級繞射效率值。假設量測出的零級繞射效率值列於表 5.7。

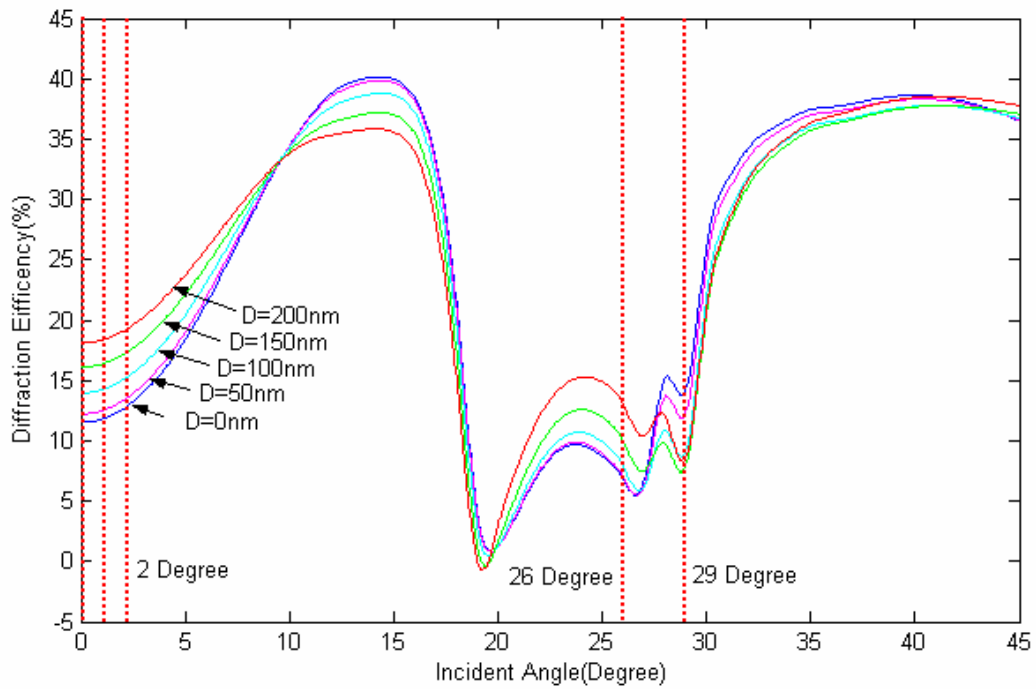


圖 5.16 不同入射角與錯位量所模擬出的零級繞射效率曲線圖
 ($\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$, $D = 0 \sim 200\text{nm}$, 步距 50nm)

表 5.6 模擬入射角 $0^\circ, 1^\circ, 2^\circ, 26^\circ, 29^\circ$ 及錯位量 $D = 0 \sim 200\text{nm}$ 的零級繞射效率值(%)

錯位量 入射角度	0nm	50nm	100nm	150nm	200nm
0°	11.5217	12.2100	13.9510	16.0977	18.0907
1°	11.7916	12.4789	14.2136	16.3485	18.3318
2°	12.6067	13.2896	15.0021	17.0979	19.0490
26°	6.8554	7.0170	7.8926	9.9944	13.0688
29°	14.1856	12.2437	9.0895	7.9334	8.4884

表 5.7 假設模擬量測入射角 $0^\circ, 1^\circ, 2^\circ, 26^\circ, 29^\circ$ 入射於疊對光柵的零級繞射效率值(%)

入射角度	繞射效率(%)
0°	11.8867
1°	12.1562
2°	12.9693
26°	6.9285
29°	13.1034

由表 5.6 和表 5.7，模擬與量測的繞射效率值來進行疊對誤差比對，比對結果其疊對光柵錯位量 D 在 $0nm \sim 50nm$ 之間。接下來再以錯位量 $D = 0 \sim 50nm$ ，步距為 $10nm$ ，入射光之入射角 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ ，模擬其繞射效率曲線並計算每一入射角度所對應不同錯位量的繞射效率值的靈敏度，取 5 個最大值靈敏度所對應的入射角度及繞射效率值，其 5 個最大靈敏度所對應之入射角度為 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ ，其繞射效率值列於表 5.8。接著模擬量測疊對光柵的繞射效率，TE 模態入射光以入射角 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ 入射於疊對光柵，模擬量測其反射的零級繞射效率值。假設模擬量測所得的繞射效率值列於表 5.9。

表 5.8 模擬入射角 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ 及錯位量 $D = 0 \sim 50nm$ 的繞射效率值(%)

錯位量 入射角度	0nm	10nm	20nm	30nm	40nm	50nm
28°	15.1441	15.0779	14.8830	14.5701	14.1555	13.6605
29°	14.1856	14.0957	13.8328	13.4158	12.8739	12.2437
30°	26.0173	25.9554	25.7732	25.4802	25.0918	24.6278
31°	31.5912	31.5470	31.4165	31.2056	30.9236	30.5831
32°	34.2447	34.2114	34.1125	33.9521	33.7366	33.4746

表 5.9 假設模擬量測入射角 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ 入射於疊對光柵的繞射效率值(%)

入射角度	繞射效率(%)
28°	14.3322
29°	13.1034
30°	25.2574
31°	31.0442
32°	33.8289

由表 5.8 和表 5.9，模擬與量測的繞射效率值來進行疊對誤差比對，比對結果其疊對光柵錯位量 D 在 $30nm \sim 40nm$ 之間。接下來再以錯位量 $D = 30 \sim 40nm$ ，步距為 $2nm$ ，入射光之入射角 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 入射，模擬其繞射效率曲線並計算每一入射角度所對應不同錯位量之繞射效率值的靈敏度，接著取 5 個最大值靈敏度所對應的入射角度及繞射效率值，其 5 個最大靈敏度所對應之入射角度為 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ ，繞射效率值列於表 5.10。接著模擬量測疊對光柵的繞射效率值，TE 模態入射光以入射角 $\theta_i = 28^\circ, 29^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ 入射於疊對光柵，模擬量測其反射光之零級繞射效率值，其模擬量測所得的繞射效率值與表 5.9 所示相同。

表 5.10 模擬入射角 $\theta_i = 29^\circ, 28^\circ, 30^\circ, 31^\circ, 32^\circ$ 及錯位量 $D = 20 \sim 30nm$ 的繞射效率值(%)

錯位量 入射角度	30nm	32nm	34nm	36nm	38nm	40nm
29°	13.4158	13.3163	13.2121	13.1034	12.9906	12.8739
28°	14.5701	14.4946	14.4153	14.3322	14.2456	14.1555
30°	25.4802	25.4096	25.3353	25.2574	25.1762	25.0918
31°	31.2056	31.1545	31.1007	31.0442	30.9851	30.9236
32°	33.9521	33.9132	33.8721	33.8289	33.7837	33.7366

由表 5.9 和表 5.10，模擬與模擬量測的繞射效率值來進行疊對誤差比對，比對結果其與疊對光柵錯位量 D 在 $36nm$ 的繞射效率值相同，即得到疊對光柵元件上下層光柵的錯位量 D 為 $36nm$ 。

第六章 光柵結構參數最佳化

6-1 前言

光柵的疊對誤差比對是利用不同錯位量的繞射效率變化來回推疊對光柵的錯位量，在不同入射角與錯位量反射所產生的繞射效率曲線，並非在曲線之間皆有一定的規則性排列，即曲線間會有重疊及交錯的部分，所以在比對過程中只取各繞射效率曲線之間的最大靈敏度所對應的入射角來進行分析比對，以避免曲線的不規則排列而造成比對錯誤的情況發生。

在設計光柵元件時，為了使模擬光柵在不同錯位量的繞射效率曲線之間有較高的靈敏度，所以可對光柵結構參數做最佳化的分析。當靈敏度較高時，可使在進行疊對誤差比對時有較高的準確度。相反的，若靈敏度較低時，其不同錯位量所產生之繞射效率曲線容易遇到曲線重疊或交錯的部分，使得在進行疊對誤差比對時會產生誤判或無法比對的情況發生。在光柵結構參數最佳化分析中，利用最佳化的演算法來搜尋最佳化的光柵結構參數，使光柵在進行疊對誤差比對時其繞射效率曲線之間有較高的靈敏度。

一般而言，最佳化演算法可被視為求某個函數的極大值(或極小值)，或者可將這些演算法當成搜尋的技術，以搜尋出較符合所要求的答案。因此在本論文中的光柵結構參數最佳化分析，主要是搜尋分析光柵的光柵週期(Grating Period)與工作週期(Duty Cycle)的最佳化，而光柵的厚度一般在製程中都是固定的參數。

本章光柵結構參數最佳化有四種方法。一為網格法，其網格法是將欲分析的變數以網格方式排列，對每一格做運算分析，最後能搜尋到最佳化之值。稍後的分析方法都是將欲分析的變數以網格方式排列來作分析，只是其運算分析方法不同。二為 N 點法，其 N 點法是在網格中取一初始點作為計算的起點，接著以初始點為基礎點，取 N 點規則性的排列進行運算分析，若 N 點中有一點之分析值比初始值大時，就再以此點為基礎點，取相同 N 點規則性的排列來進行運算分析，以此類推，進而由路徑軌跡來進行搜尋最佳化。三為模擬退火演算法，由於模擬所產生的繞射效率曲線並不複雜，可利用演算法中的模擬退火演算法來進行搜尋光柵結構之最佳化，使在模擬分析時具有最佳的靈敏度。四為綜合方法，其綜合方法是將網格法、N 點法及模擬退火法結合使用來進行分析，結合了三種方法的優點，使在分析上更有效率。在以下章節就以此四種分析方法來做簡單的介紹與討論，在本章為了計算方便也皆是以理想光柵來做分析討論。

6-2 網格法

網格法是將欲分析的變數以網格的方式排列，對每一點運算求其靈敏度值，最後在網格中找尋靈敏度最大之值與對應的光柵週期和工作週期，此即為最佳的光柵結構參數值。在此靈敏度值是指某一光柵結構(光柵週期和工作週期)在不同錯位量所產生之繞射效率曲線，每一入射角度所對應的靈敏度值，取其靈敏度最大之值來進行分析。

網格法是在分析光柵結構參數最佳化中最為傳統的方法，將每一點都計算出其靈敏度值，最後再取最大靈敏度值與所對應之光柵週期和工作週期。此方法雖然可以很準確得到最佳化的光柵結構參數，但需要每一個光柵結構參數都計算，造成分析需要較長的時間，故分析的效率低。因此這為網格法的優缺點。下面就利用網格法來分析光柵結構參數最佳化舉一例子。

6-2-1 網格法舉例說明

假設有一疊對光柵元件如圖 3.6 所示， $a = 850nm$ ， $b = 200nm$ ， $c = 50nm$ 為定值，而 d 和 e 為變數，即光柵週期(grating period)和工作週期(duty cycle)為分析的變數，其分析光柵結構參數最佳化之變數定義列於表 6.1。光柵週期的變數由於上層光柵厚度 a 較大，所以光柵週期的變數取 $200nm \sim 1000nm$ 。入射角度由於 $\theta_i = -45^\circ \sim 0^\circ$ 與 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 之繞射效率曲線為對稱，所以為了方便計算，入射角度變數只取 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 來作分析。錯位量

D 的變數由於疊對光柵的錯位量超過二分之一光柵週期時，其繞射曲線會重疊($D = 0nm$ 與 $D = 800nm$ 曲線重疊， $D = 100nm$ 與 $D = 700nm$ 曲線重疊，以此類推)，所以在此錯位量 D 的變數取光柵週期 $\times 1/4 \pm 20nm$ 。

由以上定義的光柵結構參數後，接著計算每一變數的光柵結構所產生的繞射效率曲線之間的最大靈敏度值，再以每一光柵結構之最大靈敏度值來分析光柵結構參數之最佳化。圖 6.1 為光柵結構參數分析後所產生的三維立體圖形， X, Y 方向分別為光柵週期與工作週期之變數， Z 方向則為靈敏度值。圖 6.2 為圖 6.1 之等高線圖。

表 6.1 光柵結構參數最佳化分析之變數定義表

分析變數	變數範圍	步距
光柵週期(d_{nm})	200nm~1000nm	50nm
工作週期(d/e)	0.1~0.9	0.05
角度掃描範圍(θ°)	0度~45度	1度
錯位量(D_{nm})	光柵週期 $\times 1/4 \pm 20nm$	10nm

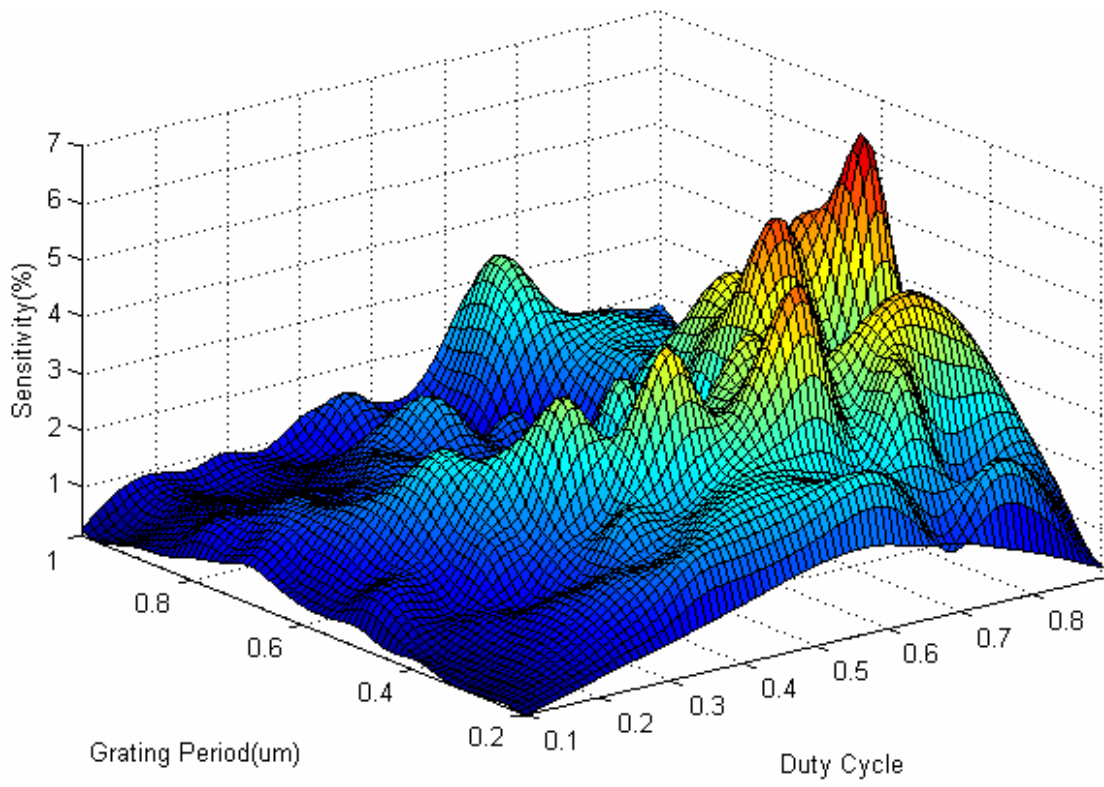


圖 6.1 光柵結構參數最佳化分析-三維立體圖
 ($a = 850nm$, $b = 200nm$, $c = 50nm$)

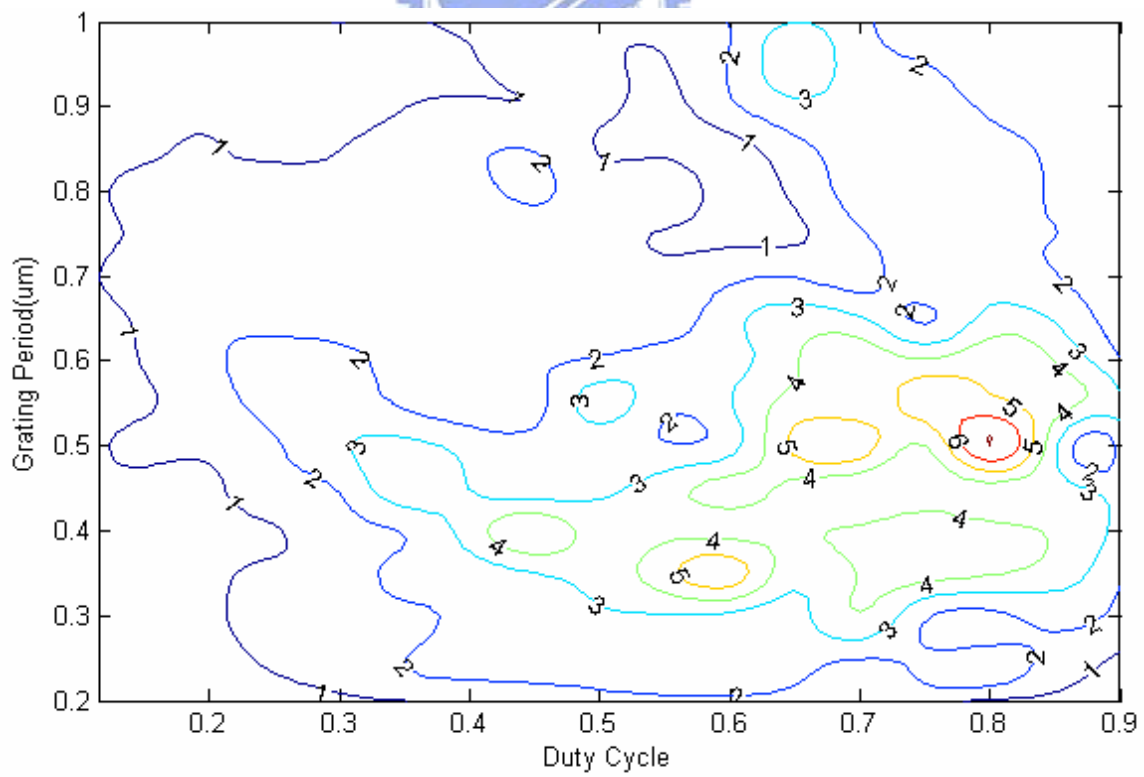


圖 6.2 光柵結構參數最佳化分析-圖 6.1 之等高線圖
 ($a = 850nm$, $b = 200nm$, $c = 50nm$)

由圖 6.1 和圖 6.2 可知，光柵最佳化的結構參數，光柵週期(grating period)為 500nm ，工作週期(duty cycle)為 0.8 ，此光柵結構在不同錯位量所產生的繞射效率曲線之間的靈敏度為 6.9931% 。使用網格法來分析此光柵結構參數最佳化所運算的時間約 4.2 小時，其花費時間太長，效率太低。

6-2-2 討論

使用網格法來搜尋光柵結構參數之最佳化，利用較為傳統的方式，每一個變數都計算分析，最後再做分析判斷來搜尋光柵之最佳化。雖然網格法可以正確地搜尋光柵的最佳化結構參數，由於是每一個變數都需進行運算，使得搜尋分析的效率降低，所花費的時間過長。因此在本論文在光柵結構參數最佳化的分析，分析的時間欲縮短在小於一個小時以內，所以接下來的方法是以縮短分析時間為目的，以搜尋光柵結構最佳化的方式來進行最佳化分析，也與網格法所分析的結果作比對是否分析正確。

6-3 N 點法

N 點法也是將欲分析的變數以網格的方式排列，再取 N 點以規則排列依序作分析運算，搜尋光柵最佳化之結構參數。以 N 點法來搜尋光柵結構最佳化之參數不像網格法是網格每一格都運算後再進行分析，N 點法是以一初始點為基準點，再以規則排列的 N 點依序搜尋，直到 N 點其中一點的靈敏度值比基準點的靈敏度值大，則將此點取代基準點，再以相同的規則排列 N

點進行依序搜尋，以此類推，直到 N 點的靈敏度皆沒有比基準點的靈敏度大時才停止搜尋。

6-3-1 N 點法舉例說明

假設取 9 點來進行搜尋光柵最佳化之結構參數，其 9 點的排列方式如圖 6.3 所示。令基準點 A 為初始點(圖 6.3(a.))，以基準點 A 開始運算其光柵結構之靈敏度值，接著以 1, 2, 3, ..., 7, 8 點依序運算。假設運算到第 8 點其光柵結構之靈敏度值比基準點 A 的靈敏度值大，接下來再以第 8 點為基準點 B(圖 6.3(b.))，及依序 1, 2, 3, ... 計算其光柵結構之靈敏度。假設第 2 點其光柵結構之靈敏度值比基準點 B 的靈敏度值大，接下來再以第 2 點為基準點 C(圖 6.3(c.))，及依序 1, 2, 3, ... 計算其光柵結構之靈敏度。假設第 3 點其光柵結構之靈敏度值比基準點 B 的靈敏度值大，接下來再以第 3 點為基準點 D(圖 6.3(d.))，及依序 1, 2, 3, ... 計算其光柵結構之靈敏度。以此類推，直到搜尋到靈敏度最大值，即為光柵結構參數之最佳化。

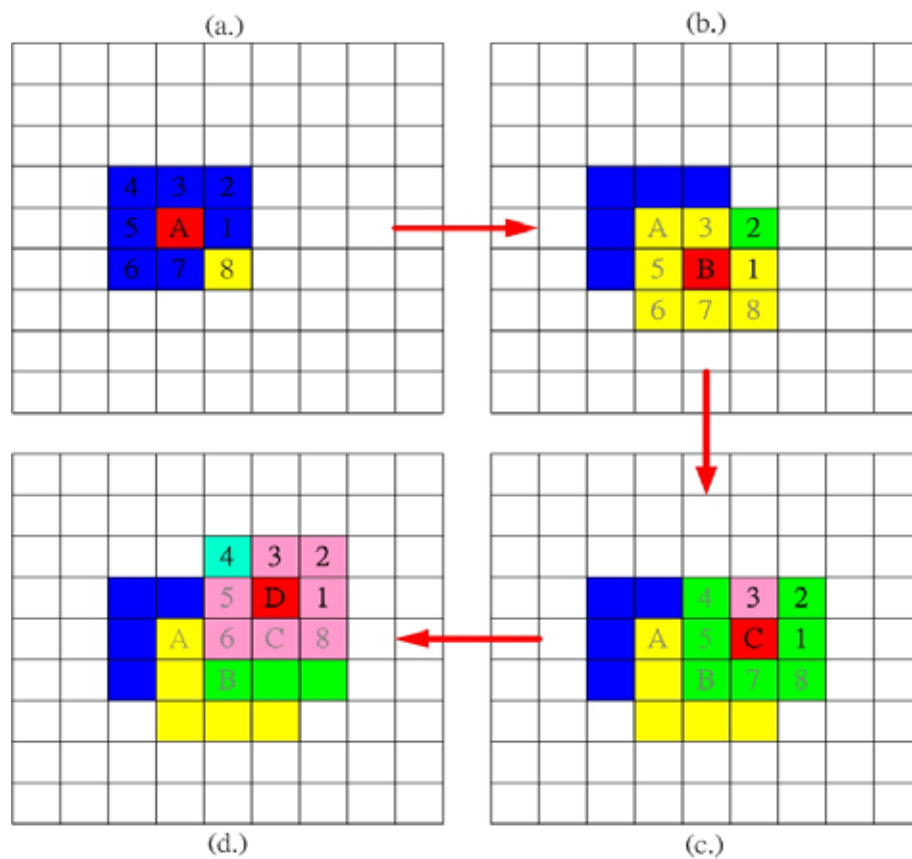


圖 6.3 N 點法之示意圖(N=9)

6-3-2 討論

N 點法為搜尋光柵結構參數最佳化較簡單的方法，但由圖 6.2 可知其光柵結構中有許多的次最大值，即為局部最大值(local maximum)，所以再使用 N 點法搜尋光柵結構最佳化時，容易陷入局部最大值中無法跳出來，造成誤判的情況發生。使用 N 點法時，初始點及 N 點的排列方式的設定非常重要，初始點設定的位置與排列方式也都會影響到搜尋最佳化的可靠度。因此在本論文中是取 N 點法中簡單方便的優點，方便搜尋到鄰近區域的最佳化，再與其他方法的優點來結合使用分析，使能達到所需要的目的條件。

6-4 模擬退火演算法

模擬退火演算法(Simulated Annealing, SA)是搜尋分析最佳化方法其中之一，其是一種解決最佳化問題的演化式演算法。模擬退火法具有較佳的全域搜尋能力，並可以處理各種變數型態（如連續、整數或離散）的最佳化問題，而且搜尋方法則較為簡單，因此近年來廣受重視。最早是由 Metropolis 等人於 1953 年提出，由 Kirkpatrick 等人(1983)用組合最佳化問題及 1985 年由 Cemym 用它來解 VLSI 設計問題，才逐漸將這套演算法發揚光大，而近年來模擬退火演算法被視為是解決最佳化問題的通用技術，也有許多人在模擬退火法做許多改良，以其能在最佳化分析應用得廣泛。

6-4-1 模擬退火演算法



在冶金學上，如果將金屬緩慢冷卻，其金屬結構能自然的求出最小能量狀態。若將金屬急速冷卻，則無法獲得最小的能態。而在長晶的過程中也是如此，如果急速降溫，則無法獲得好的結晶。其金屬的緩慢退火與淬火過程中，能獲得系統的最低能量，科學家根據仿效及模擬此物理現象，發展出模擬退火法。

由其原理可知，模擬退火法是應用溫度來調整接受較差結果的機率，同時反覆的進行求解，直至達到均衡狀態。當某一溫度下的均衡狀態達成後，溫度將降至次一水準，接著重複上述的操作，直至溫度達到結束溫度時，演算結束。

模擬退火法在其反覆求解的過程中，不但接受較佳的鄰近解，同時在一定機率範圍內接受較差的鄰近解，因此具有跳脫局部極小而達到整體最小之能力。模擬退火法的最大特徵在於它除了接受較優的解外，仍然給定一機率以接受較差的解，其機率即為波茲曼(Boltzmann)機率分布。最初在 T 值較大時，其接受較差解的機率較大，隨著 T 值減少，接受較差解的機率也跟著降低，最後當 T 接近 0，較差的解就不再被接受，這個特徵使得模擬退火法不同於鄰近搜尋法(neighbour search)和最速下降法(gradient descent)，其模擬退火演算法利用隨機取樣的方式，使其具有跳出局部最佳解而達到全域最佳解的能力。

首先先說明波茲曼(Boltzmann)機率分布，波茲曼機率分布函數由(6.1)式表示，其中 ΔE 為能量差 ($\Delta E = E_{x+1} - E_x$)， K 為波茲曼係數， T 為當時狀態的溫度。波茲曼機率分布函數圖如圖 6.4 所示，由圖 6.4 可知當時狀態溫度 T 較高時，其波茲曼機率相對較高，相反地，狀態溫度 T 較低時，其波茲曼機率相對較低。而在波茲曼機率分布函數中，能量差 ΔE 與狀態溫度 T 為變數，波茲曼係數 K 值為一常數，一般起初的波茲曼機率分布函數設定為 $\exp(-\Delta E/KT) \geq 0.5$ (也有一說是 ≥ 0.999)，所以由此與能量差 ΔE 與狀態溫度 T ，即可定義出波茲曼係數 K 值。

$$\text{波茲曼(Boltzmann)機率分布函數} = \exp(-\Delta E/KT) \quad (6.1)$$

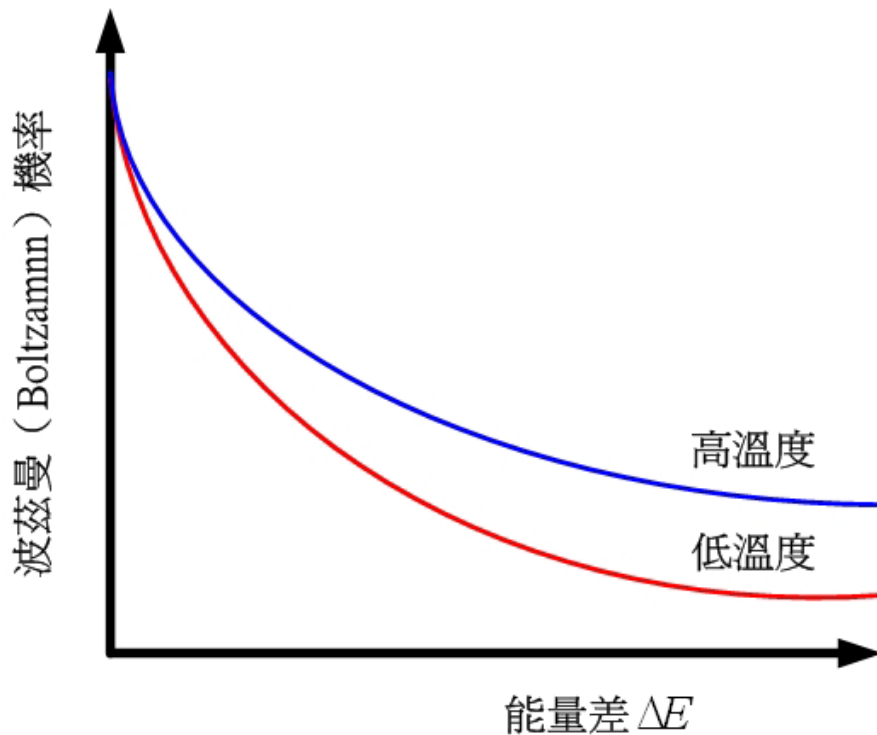


圖 6.4 波茲曼(Boltzmann)機率分布函數圖

在光柵結構參數最佳化主要是搜尋如何的光柵結構參數能有最大靈敏度值，使在疊對誤差分析比對時有較高的準確度。接下來將說明在光柵結構參數最佳化分析對於模擬退火演算法的設計及其運算過程，使用模擬退火演算法之步驟如下：

1. 決定光柵結構之各項參數、波茲曼係數 K 值與最終溫度 T_f 。
2. 設定起始溫度 T_m ， $m=0$ ；起始狀態為 $\bar{X}(g,d)$ ， $\bar{X}(g,d)$ 向量包含光柵週期(grating period)(g)與工作週期(duty cycle) (d)變數， $s(\bar{X})$ 為起使狀態的能量，即為光柵結構在起使所定義的光柵週期(g)和工作週期(d)，在不同錯位量所產生繞射效率曲線之間的靈敏度值。假設 $\bar{X}(g,d)$ 狀態為最佳的狀態， $s(\bar{X})$ 為目前最大靈敏度值。

3. 改變狀態為 $\bar{X}'(g',d')$ ，即改變光柵週期與工作週期之變數，改變方式可利用隨機取樣或其他取樣的方式。 $\bar{X}'(g',d')$ 狀態的能量為 $S(\bar{X}')$ ，也即為光柵結構所定義的光柵週期(g')和工作週期(d')，在不同錯位量所產生繞射效率曲線之間的靈敏度值。
4. 計算能量差為 $\Delta S = S(\bar{X}') - S(\bar{X})$ ，即為 $\bar{X}(g,d)$ 狀態與 $\bar{X}'(g',d')$ 狀態之間的靈敏度差。
5. 若 $|\Delta S| >$ 設定值，
- 若 $\Delta S > 0$ ，令 $g = g'$ ， $d = d'$ ，即接受新的狀態， $\bar{X}'(g',d')$ 狀態取代 $\bar{X}(g,d)$ 狀態， $\bar{X}'(g',d')$ 狀態的能量 $S(\bar{X}')$ 也取代 $\bar{X}(g,d)$ 狀態的能量 $S(\bar{X})$ 。接下來回到步驟 3，繼續進行。
 - 若 $\Delta S < 0$ ，則產生一個 0 至 1 之間的亂數 Q ，並計算波茲曼機率 $P = \exp(-\Delta E/KT)$ 。
 - 若 $P > Q$ ，令 $g = g'$ ， $d = d'$ ，即接受新的狀態， $\bar{X}'(g',d')$ 狀態取代 $\bar{X}(g,d)$ 狀態， $\bar{X}'(g',d')$ 狀態的能量 $S(\bar{X}')$ 也取代 $\bar{X}(g,d)$ 狀態的能量 $S(\bar{X})$ 。接下來回到步驟 3，繼續進行。
 - 若 $P < Q$ ，則 $\bar{X}(g,d)$ 狀態還是為最佳的狀態， $S(\bar{X})$ 也還是為目前最大靈敏度值，並回到步驟 3，繼續進行。
6. 若 $|\Delta S| <$ 設定值，判斷溫度 T_m 是否小於或等於最終溫度 T_f ，及是否達到收斂條件。

a. 若 $T_m > T_f$ ，則降低溫度 $T_{m+1} = \alpha \times T_m$ ，其中 α 冷卻率，一般 $\alpha = 0.8 \sim 0.99$ 之間。

I. 若 $\Delta S > 0$ ，令 $g = g'$ ， $d = d'$ ，即接受新的狀態， $\bar{X}'(g', d')$ 狀態取代 $\bar{X}(g, d)$ 狀態， $\bar{X}'(g', d')$ 狀態的能量 $S(\bar{X}')$ 也取代 $\bar{X}(g, d)$ 狀態的能量 $S(\bar{X})$ 。接下來回到步驟 3，繼續進行。

II. 若 $\Delta S < 0$ ，則 $\bar{X}(g, d)$ 狀態還是為最佳的狀態， $S(\bar{X})$ 也還是為目前最大靈敏度值，並回到步驟 3，繼續進行。

b. 若 $T_m < T_f$ ，

I. 若未達到所設定之收斂條件，

i. 若 $\Delta S > 0$ ，令 $g = g'$ ， $d = d'$ ，即接受新的狀態， $\bar{X}'(g', d')$ 狀態取代 $\bar{X}(g, d)$ 狀態， $\bar{X}'(g', d')$ 狀態的能量 $S(\bar{X}')$ 也取代 $\bar{X}(g, d)$ 狀態的能量 $S(\bar{X})$ 。接下來回到步驟 3，繼續進行。

ii. 若 $\Delta S < 0$ ，則 $\bar{X}(g, d)$ 狀態還是為最佳的狀態， $S(\bar{X})$ 也還是為目前最大靈敏度值，並回到步驟 3，繼續進行。

II. 若達到所設定之收斂條件，則執行下一步驟。

7. 溫度小於最終溫度 ($T_m < T_f$)，及達到收斂條件，則結束程式運算，輸出結果。

光柵結構參數最佳化分析對於模擬退火演算法的設計及其運算過程如上所述，而流程圖如 6.5 所示。

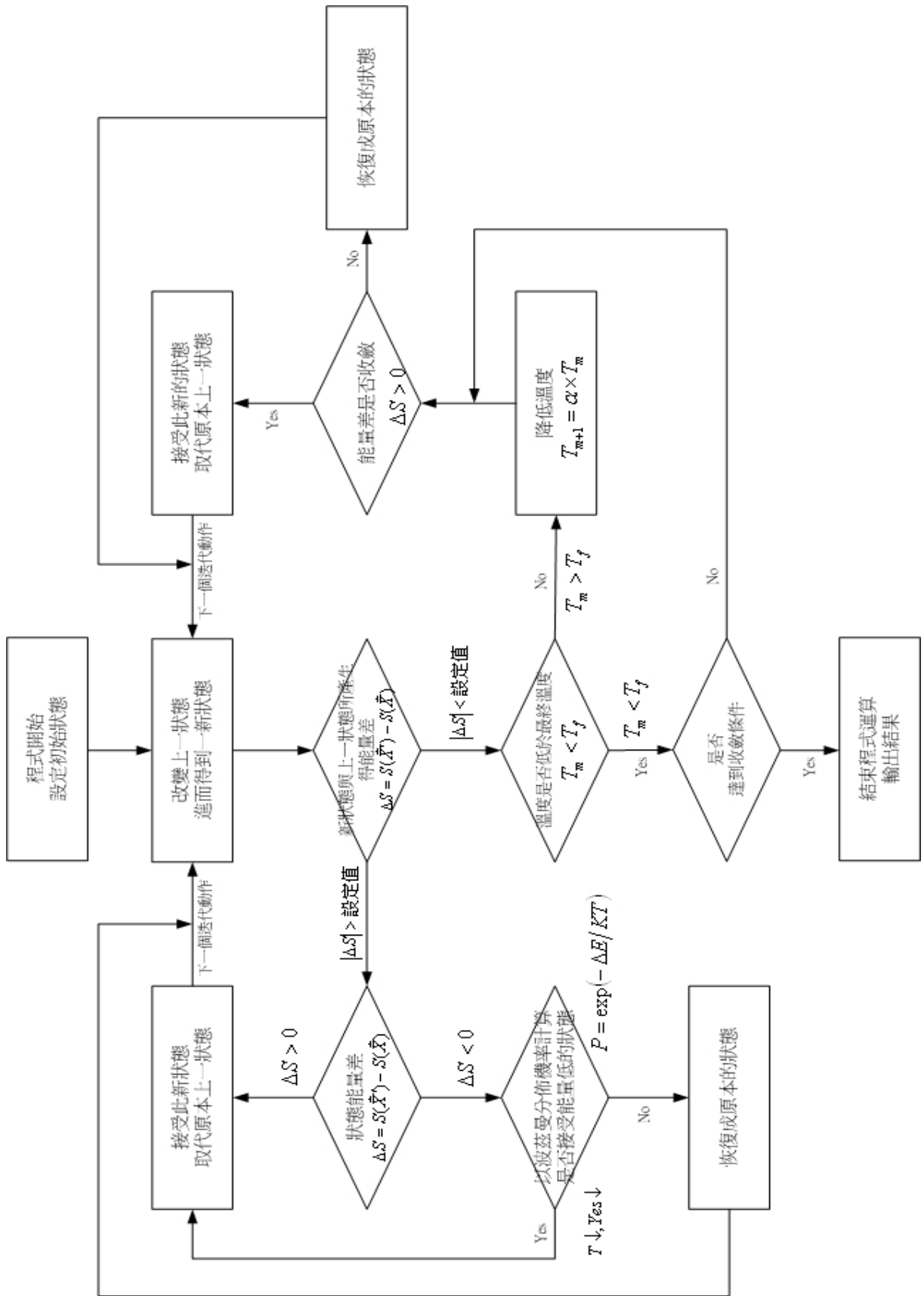


圖 6.5 模擬退火演算法流程圖

6-4-2 模擬退火演算法舉例說明

假設有一疊對光柵元件如圖 3.6 所示， $a = 850\text{nm}$ ， $b = 200\text{nm}$ ， $c = 50\text{nm}$ 為定值，而 d 和 e 為變數，即光柵週期(grating period)和工作週期(duty cycle) 為分析的變數，其分析光柵結構參數最佳化之變數定義如表 6.2 所示。光柵週期的變數由於上層光柵厚度 a 較大，所以光柵週期的變數取 $200\text{nm} \sim 1000\text{nm}$ 。入射角度由於 $\theta_i = -45^\circ \sim 0^\circ$ 與 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 之繞射效率曲線為對稱，所以為了方便計算，入射角度變數只取 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ 來做分析。錯位量 D 的變數由於疊對光柵的錯位量超過二分之一光柵週期時，其繞射曲線會重疊($D = 0\text{nm}$ 與 $D = 800\text{nm}$ 曲線重疊， $D = 100\text{nm}$ 與 $D = 700\text{nm}$ 曲線重疊，以此類推)，所以在此錯位量 D 的變數取光柵週期 $\times 1/4 \pm 20\text{nm}$ 。在模擬退火演算法演算中的參數設定如表 6.3 所示。

表 6.2 光柵結構參數最佳化分析之變數定義表

分析變數	變數範圍	步距
光柵週期($d\text{nm}$)	200nm~1000nm	50nm
工作週期(d/e)	0.1~0.9	0.05
角度掃描範圍(θ°)	0度~45度	1度
錯位量($D\text{nm}$)	光柵週期 $\times 1/4 \pm 20\text{nm}$	10nm

表 6.3 模擬退火演算法演算中的參數設定表

模擬退火演算法之參數設定	
起始值-光柵週期(nm)	500
起始值-工作週期	0.5
起始溫度 T_m (Degree)	100
最終溫度 T_f (Degree)	1
冷卻率 α	0.85
降溫溫度條件 $ \Delta S $	0.2
波茲曼係數 K 值	0.003
最大迭代次數	1000

模擬退火法在此的取樣方式是採用隨機取樣的方式來搜尋光柵結構參數，光柵週期和工作週期的最佳化。由以上的參數來進行光柵結構參數最佳化的分析，分析結果如圖 6.6 模擬退火演算法的搜尋路徑與表 6.4 模擬退火演算法搜尋路徑結果參數所示。由圖 6.6 與表 6.4 可知，當使用模擬退火法來搜尋光柵結構最佳化，在搜尋過程中由於波茲曼機率的關係，搜尋路徑由局部最大值區域跳出兩次，最後因為溫度下降使得波茲曼機率變小，然而要接受較差解的機率也變小，使得最後搜尋到最大值的區域，光柵週期為 500nm，工作週期為 0.8，其靈敏度值為 6.9931%。其利用模擬退火法搜尋最佳化所使用的時間約 3.0 小時。

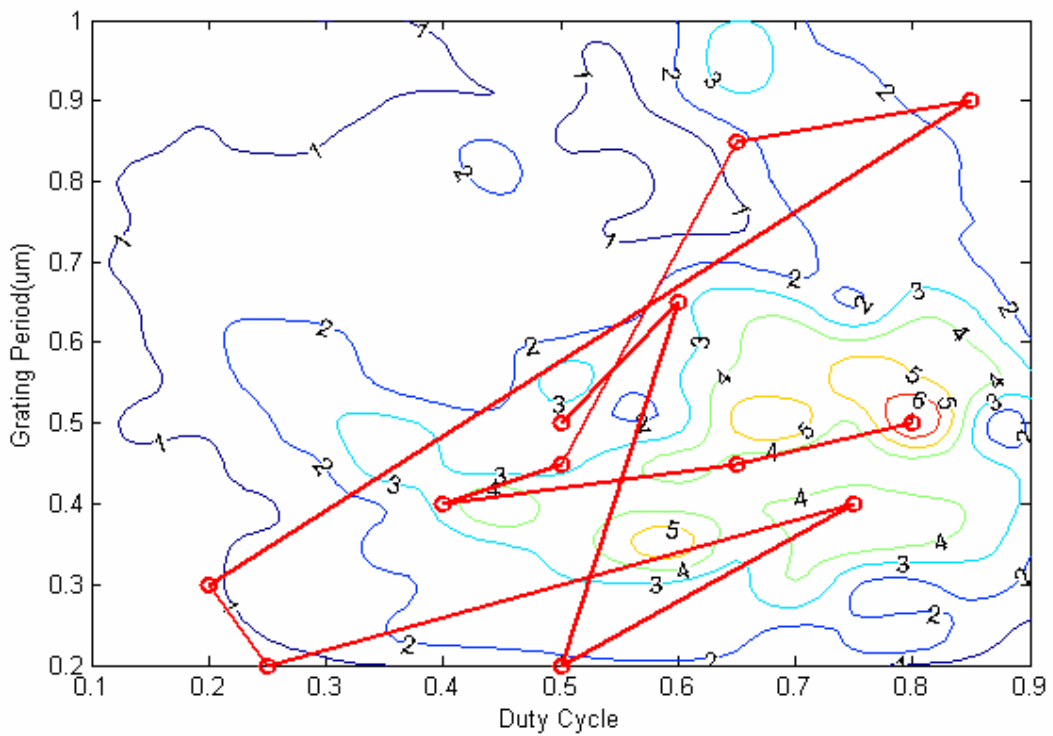


圖 6.6 模擬退火演算法的搜尋路徑軌跡圖

表 6.4 模擬退火演算法搜尋路徑軌跡參數表

	Grating Period(nm)	Duty Cycle	Sensitivity(%)
1.	500	0.5	2.2746
2.	650	0.6	2.7181
3.	200	0.5	1.56
4.	400	0.75	4.6124
5.	200	0.25	0.65624
6.	300	0.2	0.87963
7.	900	0.85	1.5178
8.	850	0.65	1.7037
9.	450	0.5	2.7382
10.	400	0.4	3.4437
11.	450	0.65	3.6908
12.	500	0.8	6.9931

若以相同的光柵結構參數及變數，只將起始值做一改變，其光柵週期為 300nm ，工作週期為 0.2 ，以模擬退火演算法來進行光柵結構參數最佳化的搜尋。分析結果如圖 6.7 模擬退火演算法的搜尋路徑與表 6.5 模擬退火演算法搜尋路徑結果參數所示。由圖 6.7 與表 6.5 可知，在搜尋過程中由於溫度與波茲曼機率的關係，搜尋路徑由局部最大值區域跳出一次，在搜尋路徑第 10 時由最大值區域跳出一次，最後搜尋逐漸收斂還是會回到最大值的區域中得到光柵結構參數之最佳化。其光柵結構參數最佳化，光柵週期為 500nm ，工作週期為 0.8 ，其靈敏度值為 6.9931% 。利用模擬退火法來搜尋光柵最佳化所使用的時間約 3.1 小時。

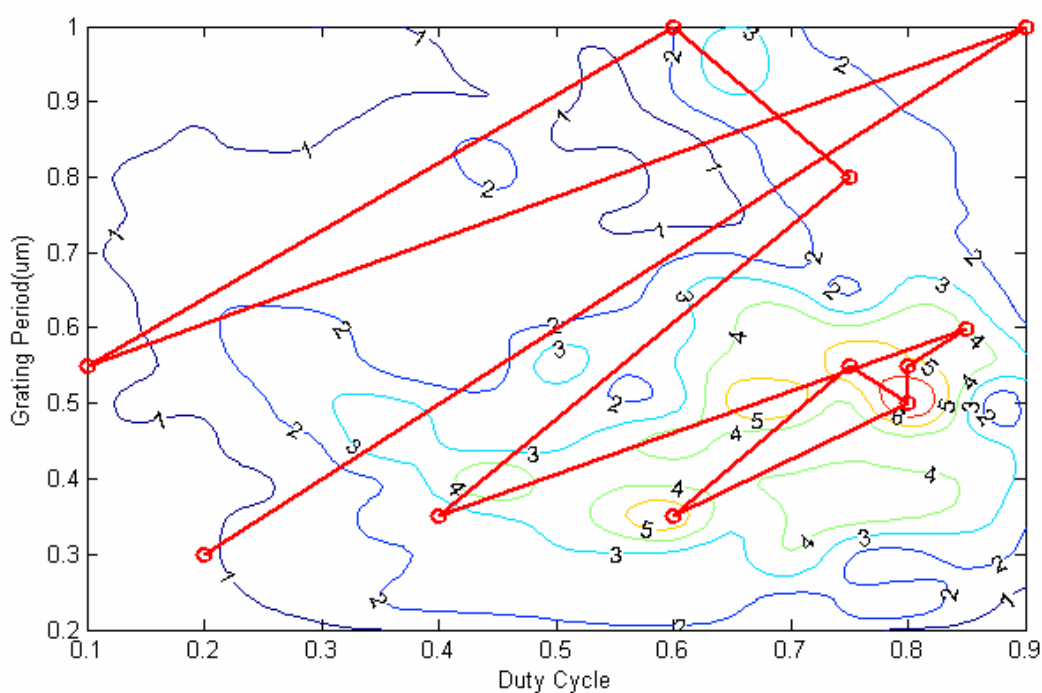


圖 6.7 模擬退火演算法的搜尋路徑軌跡圖
(起始值：光柵週期為 300nm ，工作週期為 0.2)

表 6.5 模擬退火演算法搜尋路徑軌跡參數表

	Grating Period(nm)	Duty Cycle	Sensitivity(%)
1.	300	0.2	0.87963
2.	1000	0.9	1.8183
3.	550	0.1	0.46817
4.	1000	0.6	2.0444
5.	800	0.75	2.1898
6.	350	0.4	2.3946
7.	600	0.85	3.9882
8.	550	0.8	5.3048
9.	500	0.8	6.9931
10.	550	0.75	5.5179
11.	350	0.6	5.5386
12.	500	0.8	6.9931

6-4-3 討論

使用模擬退火演算法來搜尋光柵結構參數之最佳化，其搜尋軌跡取樣的方式是採用隨機取樣的方式，其目的是避免搜尋軌跡陷入局部極大值的區域，而有機會地跳出局部極大值區域。模擬退火法乃是利用溫度的高低來使得波茲曼機率產生變化，及搜尋軌跡採用隨機取樣的方式來進行最佳化的搜尋。然而在使用模擬退火演算法時的一些參數設定，還是需要靠經驗來判斷決定，才能在較短的時間內搜尋到正確的最佳化值。

在使用模擬退火演算法來搜尋光柵結構參數之最佳化，其搜尋分析所花費的時間約為 3 小時左右，雖然這比使用網格法來搜尋最佳化較快一小時半左右，但這距離本論文的目標，搜尋最佳化所花費時間在一小時以內還有一段差距，所以在下一節就對於時間效率做一改進的方法介紹說明。

6-5 綜合法

綜合法是欲結合網格法、N 點法與模擬退火演算法三種方法來進行搜尋分析光柵結構參數的最佳化，擷取每個方法的優點來進行分析，其目的是欲縮短搜尋最佳化的時間。本節的目的是要將搜尋光柵結構參數最佳化分析所花費的時間縮短在一個小時以內，以提高分析的效率。在本節分別說明兩種方法，一為網格法+網格法，二為網格法+N 點法+模擬退火演算法，來搜尋光柵結構之最佳化分析。

6-5-1 網格法+縮小區間網格法

在 6-2 節中是利用網格法來搜尋光柵結構之最佳化所花費的時間約為 4.2 小時左右，但如果最佳化分析的步距較小時，其搜尋分析所會花費的時間會更長。所以在本小節是利用重複使用網格法的分析方法來搜尋光柵之最佳化，以將靈敏度較低的區域省略分析，即可縮短搜尋分析的時間。

當分析光柵結構參數步距較小時，可利用兩次或兩次以上網格法來進行搜尋光柵結構之最佳化，以縮短分析的時間。使用兩次或兩次以上網格法來分析是指先以較大的步距來進行分析，以得到光柵最佳化的結構參數（光柵週期和工作週期），再以所得到之結構參數為基準點，取適當分析的範圍後再繼續以較小的步距來進行分析，以此類推，即可得到光柵結構參數的最佳化，如此即可將靈敏度較低的區域省略分析，以縮短搜尋分析的時間。

如 6-2-2 章節的例子，以相同的光柵結構參數($a = 850nm$, $b = 200nm$, $c = 50nm$)來進行兩次網格法結構參數最佳化的分析，首先先以表 6.6 較大步距的光柵結構參數變數來進行搜尋光柵結構最佳化，即可得到光柵週期為 $600nm$ ，工作週期 0.7。然後再以表 6.7 小步距的光柵結構參數變數及分析範圍來進行搜尋，其小步距的搜尋範圍設定以光柵週期為 $600nm$ ，工作週期 0.7 為基準，光柵週期 $600 \pm 200nm$ ，工作週期 0.7 ± 0.2 (工作週期 ≤ 1.0) 的搜尋範圍，如圖 6.8(a) 中線框所示。即最後可以得到光柵結構最佳化之光柵週期為 $500nm$ ，工作週期為 0.8，其分析結果等高線圖形如圖 6.8 所示，圖 6.8(a) 為網格法使用大步距(表 6.6 的變數參數分析) 所分析的等高線圖，圖 6.8(b) 為網格法使用小步距(表 6.7 的變數參數分析) 所分析的等高線圖。

使用網格法+縮小區間網格法搜尋分析所花費時間約 1.5 小時，搜尋分析的時間雖然比使用一次網格法搜尋的時間縮短了約三分之一，但距離本論文的目標，搜尋最佳化的時間需在一個小時以內，還是需要改進，所以在下一小節將使用另一方法來進行分析，使搜尋最佳化分析能夠達到所需之要求。

表 6.6 光柵結構參數最佳化分析之變數定義-大步距分析

分析變數	變數範圍	步距
光柵週期(d_{nm})	200nm~1000nm	200nm
工作週期(d/e)	0.1~0.9	0.2
角度掃描範圍(θ°)	0度~45度	1度
錯位量(D_{nm})	光柵週期 $\times 1/4 \pm 20nm$	10nm

表 6.7 光柵結構參數最佳化分析之變數定義-小步距分析

分析變數	變數範圍	步距
光柵週期(d_{nm})	600nm $\pm 200nm$	50nm
工作週期(d/e)	0.7 ± 0.2	0.05
角度掃描範圍(θ°)	0度~45度	1度
錯位量(D_{nm})	光柵週期 $\times 1/4 \pm 20nm$	10nm

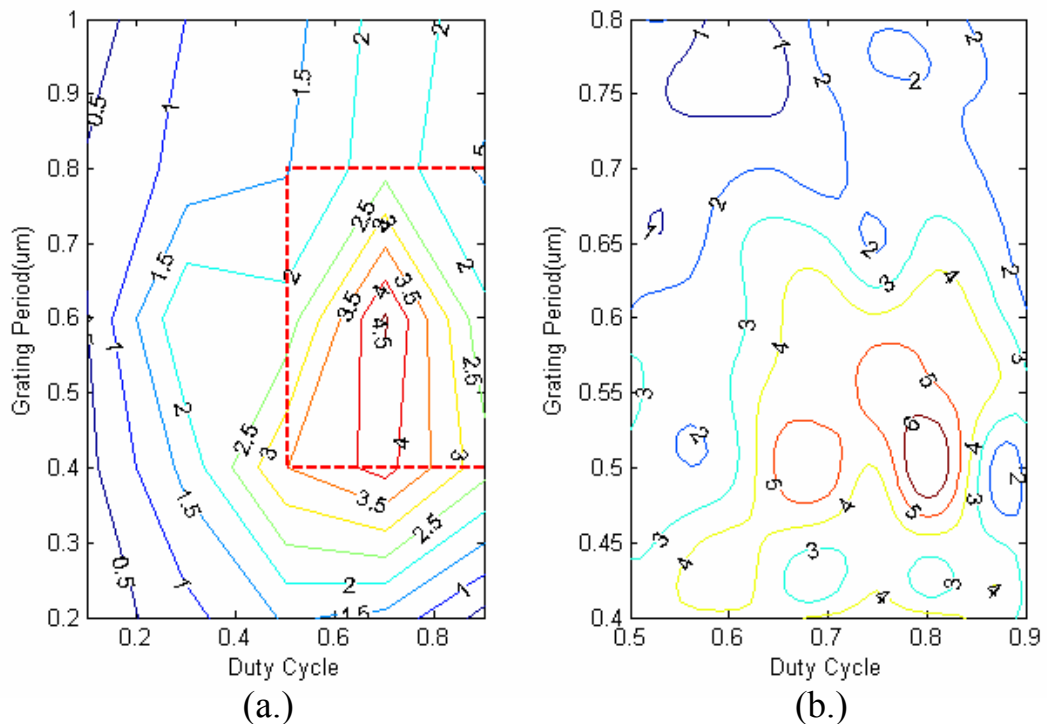


圖 6.8 網格法+縮小區間網格法搜尋光柵結構參數最佳化分析結果等高線圖

6-5-2 網格法+N 點法+模擬退火演算法

網格法+N 點法+模擬退火演算法是結合三種方法搜尋光柵結構最佳化，擷取每個方法的優點來進行最佳化的分析。首先是利用網格法搜尋 N 點法的起始值，以其起始值再利用 N 點法來搜尋鄰近區域的最佳光柵結構參數，接著以 N 點法所搜尋到的最佳化結果(光柵週期與工作週期)，來當作模擬退火演算法的起始值來進行分析，其使用模擬退火演算法是擷取隨機取樣的優點，使其在分析時有機會可以跳出局部極大值(local maximum)的區域，避免陷入局部極大值無法跳出，造成誤判最佳化的情形。在此綜合法是結合三種方法搜尋光柵結構最佳化，其可以提高搜尋分析的效率，縮短運算時間，也可以提高搜尋分析的準確度。接下來利用舉例來說明網格法+N 點法+模擬退火演算法的分析方法，。

網格法+N 點法+模擬退火演算法的最佳化分析方法舉例說明如下：

假設有一疊對光柵元件如圖 3.6 所示， $a = 700nm$ ， $b = 250nm$ ， $c = 50nm$ 為定值，而 d 和 e 為變數，即光柵週期(grating period)和工作週期(duty cycle)為分析的變數。在分析中光柵週期的變數取 $200nm \sim 1000nm$ ，工作週期的變數取 $0.1 \sim 0.9$ ，入射角度變數取 $\theta_i = 0^\circ \sim 45^\circ$ ，錯位量 D 的變數取光柵週期 $\times 1/4 \pm 20nm$ 。

以下為利用網格法+N 點法+模擬退火演算法來搜尋光柵結構參數之最佳化分析的步驟：

- a. 首先使用網格法來搜尋光柵結構參數最佳化，網格法的參數設定如表 6.8 所示。使用網格法的目的是要搜尋 N 點法的起始值，此起始值有可能是極大值(即光柵結構之最佳化)，也有可能是局部極大值。為了縮短搜尋所需的時間，所以在網格法的搜尋變數的步距首先設定較大，以決定出下一步驟 N 點法的起始值。使用表 6.8 參數所分析出之結果：光柵週期為 $400nm$ ，工作週期為 0.5 ，其靈敏度值為 3.4338% 。

表 6.8 網格法的參數設定表

分析變數	變數範圍	步距
光柵週期(d_{nm})	$200nm \sim 1000nm$	$200nm$
工作週期(d/e)	$0.1 \sim 0.9$	0.2
角度掃描範圍(θ°)	$0 \text{ 度} \sim 45 \text{ 度}$	1 度
錯位量(D_{nm})	$\text{光柵週期} \times 1/4 \pm 20nm$	$10nm$

- b. 利用 N 點法來搜尋光柵結構之最佳化，而以網格法所搜尋得到的光柵週期 $400nm$ ，工作週期 0.5 為起始點來進行搜尋。在此是使用 9 點法來進行搜尋，其 9 點排列方式如圖 6.3 所示。然而使用 9 點法來分析光柵結構之最佳化結果，其路徑軌跡如圖 6.9 所示，其搜尋路徑軌跡的參數值列於表 6.9 所示，N 點法最後搜尋最佳化結果為光柵週期 $350nm$ ，工作週期 0.6 。由圖 6.9 可知，其使用 9 點法來搜尋光柵結構最佳化，最後陷入局部極大值的區域。當然這在模擬分析時是無法判

斷在搜尋時是否陷入局部極大值的區域，在此是為了方便說明，所以先以網格法分析的圖形來說明之。

表 6.9 使用 9 點法搜尋光柵結構參數最佳化之路徑軌跡參數值表

	Grating Period(nm)	Duty Cycle	Sensitivity (%)
1.	400	0.5	3.4338
2.	400	0.55	3.5889
3.	350	0.6	4.8492

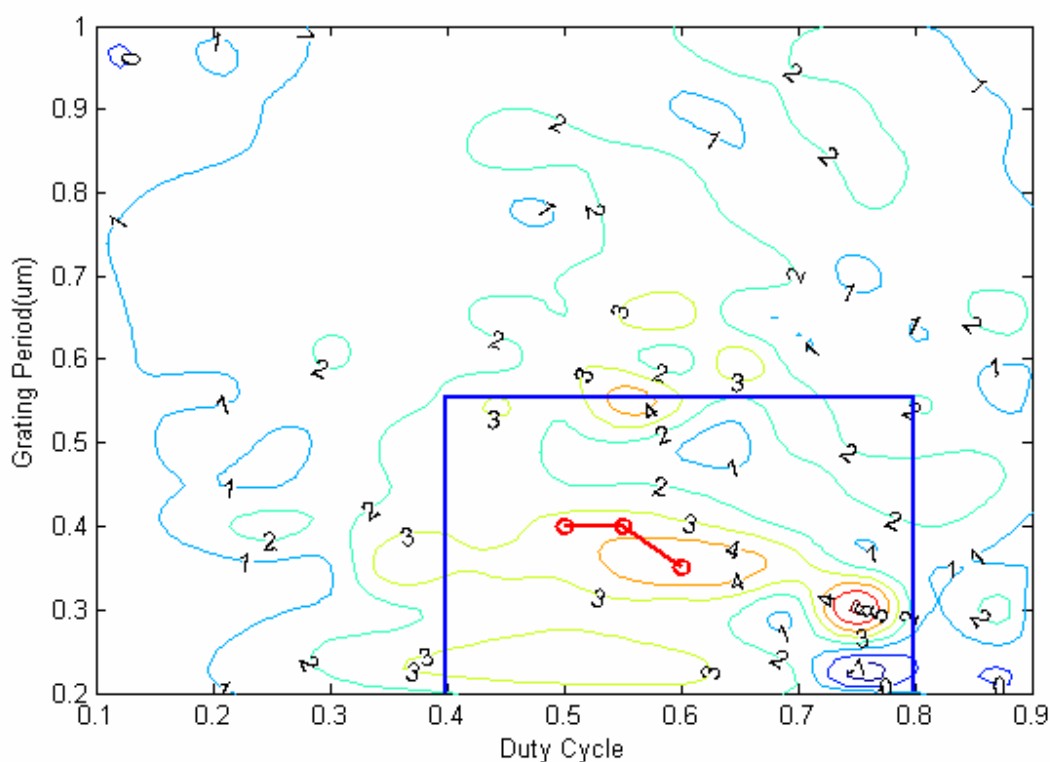


圖 6.9 使用 9 點法來分析光柵結構之最佳化的路徑軌跡圖

- c. 接下來使用模擬退火演算法來進行分析光柵結構之最佳化，其目的是此方法有機會可以跳出局部極大值的區域，以避免在搜尋分析時陷入局部極大值區域。模擬退火演算法是以 N 點法最後所搜尋到的最佳化結果，光柵週期 350nm ，工作週期 0.6 為基準點，設定一搜尋範圍區域，

其搜尋範圍由圖 6.9 中的線框所示，光柵週期 $350\text{nm} \pm 200\text{nm}$ ，工作週期 0.6 ± 0.2 。使用模擬退火演算法的變數設定列於表 6.10 所示。利用表 6.10 的變數設定來進行模擬退火演算法的搜尋分析，其模擬退火法的參數設定列於表 6.11 所示。在搜尋取樣方式是採用隨機取樣的方法來進行搜尋，以便可以跳出局部極大值的區域。在最佳化分析最後模擬退火法所搜尋分析的路徑軌跡如圖 6.10 所示，其搜尋分析的結果參數值列於表 6.12 所示。

表 6.10 使用模擬退火演算法搜尋分析之變數設定表

分析變數	變數範圍	步距
光柵週期 (d_{nm})	$350\text{nm} \pm 200\text{nm}$	50nm
工作週期 (d/e)	0.6 ± 0.2	0.05
角度掃瞄範圍 (θ°)	0 度 ~ 45 度	1 度
錯位量 (D_{nm})	光柵週期 $\times 1/4 \pm 20\text{nm}$	10nm

表 6.11 模擬退火演算法演算中的參數設定表

模擬退火演算法之參數設定	
起始值-光柵週期 (nm)	350
起始值-工作週期	0.6
起始溫度 T_m (Degree)	100
最終溫度 T_f (Degree)	1
冷卻率 α	0.85
降溫溫度條件 $ \Delta S $	0.2
波茲曼係數 K 值	0.002
最大迭代次數	100

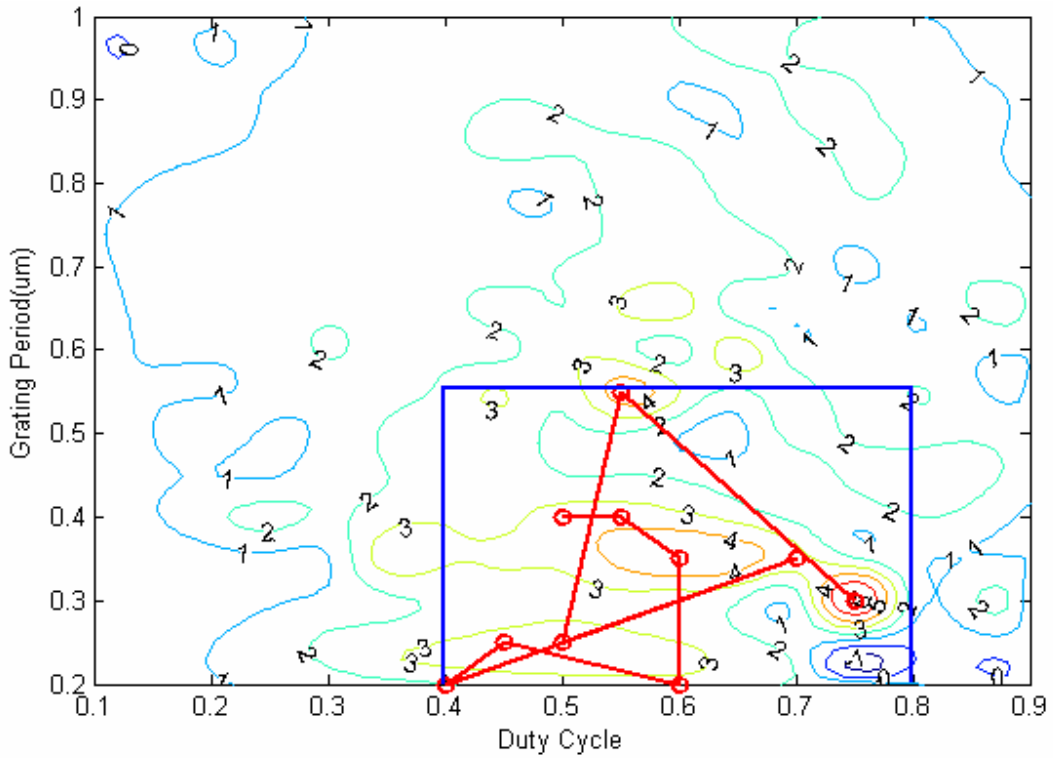


圖 6.10 模擬退火法所搜尋分析的路徑軌跡圖

表 6.12 模擬退火演算法搜尋路徑結果參數表

	Grating Period(nm)	Duty Cycle	Sensitivity(%)
1.	400	0.5	3.4338
2.	400	0.55	3.5889
3.	350	0.6	4.8492
4.	200	0.6	2.3443
5.	250	0.45	3.2812
6.	200	0.4	1.9355
7.	350	0.7	3.3327
8.	250	0.5	3.4126
9.	550	0.55	4.4784
10.	300	0.75	6.2451

由圖 6.10 與表 6.12 可知，在前三個路徑軌跡為使用網格法與 N 點法所搜尋的路徑軌跡，之後皆為使用模擬退火法的路徑軌跡。有此

可發現在第四步及第六步皆從局部極大值跳出，直到最後搜尋到此光柵結構參數的最佳化，其結果光柵週期為 $300nm$ ，工作週期為 0.75 。在使用網格法+N 點法+模擬退火演算法來搜尋光柵結構參數的最佳化分析整體運算時間約 53 分鐘，所以此方法已達到本論文的目標，搜尋分析時間在一小時以內。

假若以上例中，在模擬退火法中的取樣方式做一改變，將取樣方式採用隨機取樣再加上如圖 6.3 的 N 點法的路徑軌跡排列取樣的方式，也就是先以隨機取樣的方式來跳出局部極大值或接受較差之值，之後再使用 N 點法取樣方式來搜尋鄰近區域是否有最佳化之值，接著在使用隨機取樣的方式來搜尋，重複隨機取樣及 N 點取樣動作，直到模擬退火法達到收斂條件，得到光柵結構參數的最佳化為止。

假設以隨機取樣及 9 點法取樣方式來搜尋如上例之光柵結構參數最佳化，其分析結果的路徑軌跡如圖 6.11 所示與各路徑軌跡參數值列於表 6.13。由圖 6.11 與表 6.13 可知，在搜尋路徑第四步時跳出局部極大值區域，再使用 9 點法來搜尋此鄰近區域，但鄰近並未有較佳的參數，故之後再由隨機取樣方式跳出局部極大值區域到第五步，接著再使用 9 點法來搜尋此鄰近區域，及隨機取樣方式跳出局部極大值區域到第六步，然後再使用 9 點法來搜尋此鄰近區域，最後搜尋得到光柵結構參數之最佳化，如同只使用隨機取樣方式，光柵週期為 $300nm$ ，

工作週期為0.75。但在使用隨機取樣及N點法取樣來搜尋分析最佳化運算所需的時間約為45分鐘，可說是再搜尋效率上又進一步。

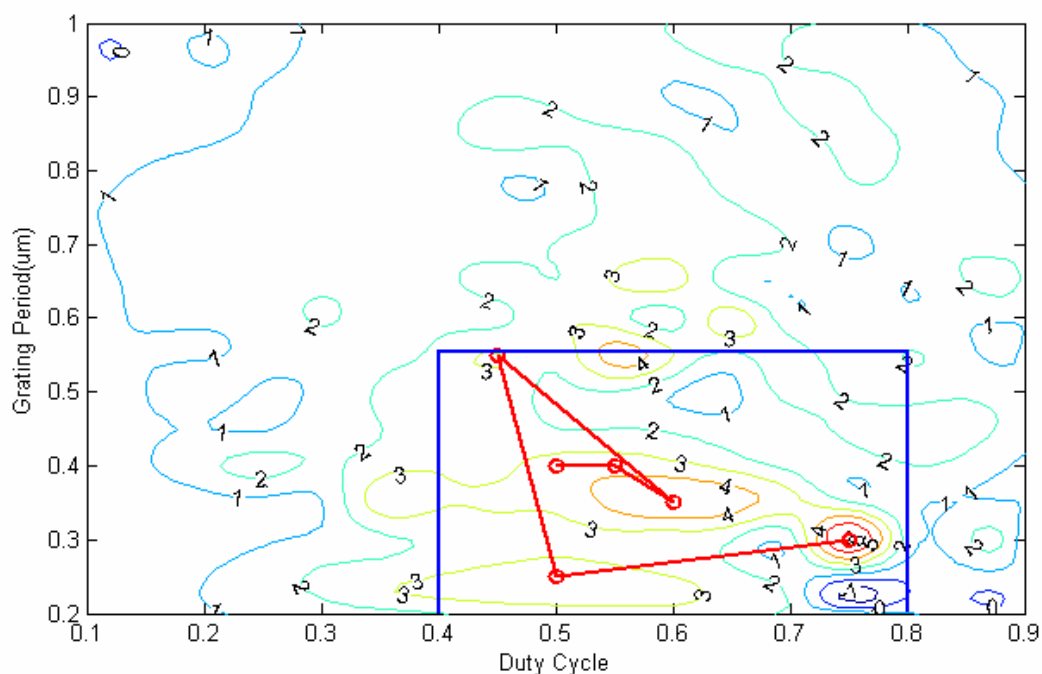


圖 6.11 模擬退火法使用隨機取樣及9點法取樣之搜尋路徑軌跡圖

表 6.13 模擬退火法使用隨機取樣及9點法取樣之搜尋路徑參數表

	Grating Period(nm)	Duty Cycle	Sensitivity(%)
1.	400	0.5	3.4338
2.	400	0.55	3.5889
3.	350	0.6	4.8492
4.	550	0.45	3.0587
5.	250	0.5	3.4126
6.	300	0.75	6.2451

6-5-3 討論

綜合法就是集合了網格法、N 點法和模擬退火演算法三種方法的優點來進行分析。網格法+縮小區間網格法搜尋最佳化是先把靈敏度值較差的區域省略分析；再將靈敏度較高的區域作詳細的分析，由此可縮短約三分之一的搜尋時間，但未達到本論文的目標，搜尋時間在一小時以內。

網格法+N 點法+模擬退火法搜尋最佳化，其利用網格法搜尋分析的準確性來搜尋 N 點法的起始點，而 N 點法是利用其搜尋其鄰近區域來搜尋最佳化，最後再利用模擬退火演算法之隨機取樣方式及波茲曼機率分佈的優點來跳出及避免陷入局部極大值的區域。而在使用綜合法來搜尋分析最佳化時，搜尋運算所花費的時間可以縮短在一小時以內，所以使用網格法+N 點法+模擬退火法搜尋光柵結構參數最佳化即可達到本論文的目標。

第七章 結論

利用上下層光柵的錯位可以達到微小移動量的檢測，由於是利用光柵的零級繞射效率來回推求得上下層光柵的錯位量，所以此方法是屬於非接觸式與非破壞性的量測，並可量測疊對誤差至奈米等級。故此種量測錯位量的方法非常適合作為半導體製程對準誤差的量測。

在第三章中，對理想的疊對光柵已有良好的模擬分析，然而在實際的光柵製作過程中，很難製作出如此理想的疊對光柵結構，即為梯形角度 $\theta_d = 0^\circ$ ，所以在第四章中針對此問題來做模擬分析，發現只要光柵存在一微小的梯形角度，其對零級繞射效率將會有很明顯的變化，此改變對於光柵錯位量的回推將會存在很大的誤差問題，因此當由繞射效率回推光柵錯位量時必須把梯形角度加入至回推的計算分析中，如此才能得到精確的光柵錯位量。

第五章是對疊對光柵來做疊對誤差的分析比對，本章中為了方便模擬分析皆是以理想光柵來做說明，但若光柵存在一微小的梯形角度時，則在模擬分析上也必須把梯形角度加入於計算分析中，如此才能夠求得精確的錯位量。但由於目前無法實際做出精準的疊對光柵來做實驗分析驗證，所以本章皆是以舉例的方式來說明本論文所提出的疊對誤差比對方法。本論文所提出的疊對誤差比對方法，在模擬量測的準確度可以達到 1nm 或許可以更小，這在未來世代線寬 45nm、32nm 或更小線寬皆可使用此方法來做

光柵疊對誤差的比對。雖然在模擬分析上對於疊對量測的準確度可以達到 1nm，但是在實際量測上是否可以達到如此的精確度，這都要取決於量測的技術與設備。

在第六章中，搜尋光柵結構參數最佳化的目的是為了使光柵在分析疊對誤差比對時有較高的準確度，因此本論文使用網格法、N 點法、模擬退火法和綜合法來搜尋光柵結構參數的最佳化，使在模擬分析時具有最佳的靈敏度，而每個搜尋最佳化的方法都有它的優缺點所在。在最後的綜合法，是擷取前三種搜尋方法的優點來進行最佳化分析，最後模擬的結果可達到本論文的目標，搜尋分析時間在一小時以內。在綜合法中要使搜尋最佳化的效率及準確度提高，這關鍵是在 N 點法的路徑排列方式與模擬退火法的各個參數設定，這些都需靠經驗的累積與判斷。

搜尋最佳化的方法有非常多種，每一種方法都有它的優缺點，而要以本身的目標條件來選擇方法做搜尋分析，如此才能提高分析效率與準確度。在論文主要是以模擬退火法來搜尋光柵結構參數的最佳化，但此方法需要定義許多參數才能有較高的分析效率，及在搜尋路徑軌跡上採用隨機取樣的方式，使得在搜尋路徑上無法掌握。因此最後使用綜合法，使在模擬退火法中的參數設定能有較簡單的方法來進行定義，雖然在搜尋路徑中也是採用隨機取樣的方式，但由於搜尋範圍縮小，故可由參數的設定來對搜尋路徑軌跡有所掌握與限制，搜尋時間也可控制在目標範圍以內。

參考文獻

- 1.顧逸霞，「次世代微影疊對量測技術」，量測資訊，第96期，18頁，民國93年3月。
- 2.顧逸霞，陳燦林，「散射儀於半導體奈米製程檢測之應用」，機械工業雜誌，第267期，119~126頁，民國94年6月。
- 3.Weidong Yang,Roger Lower-Webb,Silvio Rabello, “A novel diffraction based spectroscopic method for overlay metrology”, Proceeding of SPIE, vol.5038, pp 200-207, 2003.
- 4.Hsu-Ting Huang,Gayathri Raghavendra,Apo Sezginer,Fred Stanke, “Scatterometry-Based Overlay Metrology”, Proceeding of SPIE, vol.5038, pp126-137, 2003.
- 5.Xinhui Niu, “Specular Spectroscopic Scatterometry in DUV Lithography”, J.Opt.Soc.Am A, vol.5, no.8, pp 1270-1280.
- 6.Nicolas Chateau, “Algorithm for the rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction”, J.Opt.Soc.Am.A, vol.11, no.4, pp 1321-1332, 1994.
- 7.M.G.Moharam, “Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings”, J.Opt.Soc.Am. A, vol.12, no.5, pp 1068-1077, 1995.
- 8.Gang Bao,DavidC, “Mathematical studies in rigorous grating theory”, J.Opt.Soc.Am. A, vol.12, no.5, pp 1029-1045, 1995.
- 9.M.G.Moharam, “Stable implementaion of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings”, J.Opt.Soc.Am. A, vol.12, no.5, pp 1078-1088, 1995.
- 10.Xinhui Niu,Nickhil Jakatdar,Junwei Bao, “Specular Spectroscopic Scatterometry”, IEEE Tran. On Semiconductor Manufacturing, vol.14, no.2, pp 97-111, May 2001.
- 11.Petre C. Logofatu, “Sensitivity analysis of grating parameter estimation”, Applied Optics, vol.41, no.34, pp 7179-7186, 2002.
- 12.Emmanuel M.Drege,Rayan M.Al-Assad, “Mathematical analyses of inverse scatterometry”, Proceeding of SPIE, vol.4689, pp 151-160, 2002.
- 13.S. Kirk Patrick,C. D. Gelatt,M. P. Vecchi, “Optimization by simulated annealing”, Science, vol.220, no4598, pp 671-680, May 1983.
- 14.DeH-Ming Shyu,Mao-Hong Lu, “Overlay metrological system for overlaid linear gratings by an interferoscatterometer”, Review of Scientific Instruments, vol.76, no.085103, 2005.
- 15.林鴻飛，「多層式二階光柵的分析與製作」，國立交通大學，碩士論文，民國88年。
- 16.陳勇星，「基於嚴格耦合波理論對繞射光柵之向量繞射理論分析」，國立交通大學，碩士論文，民國88年。
- 17.王維科，「彩色光柵的設計、製作與量測」，國立交通大學，碩士論文，民國90年。

18. 陳晏佐，「分光光柵的設計製作之研究」，國立交通大學，碩士論文，民國 91 年。
19. 張維中，「以基因區域搜尋演算法設計繞射型濾波元件」，國立交通大學，碩士論文，民國 92 年。
20. 張智星，Matlab 程式設計與應用，清蔚科技出版，2000。
21. 莊鎮嘉，鄭錦聰，Matlab 程式設計進階篇，全華科技出版，2004。
22. 黃俊銘，數值方法-使用 Matlab 程式語言，全華科技出版，2003。



作者簡歷

姓名：盧俊瑋(Jun-Wei Lu)

性別：男

出生年月日：1979年7月27日

籍貫：台灣省台北縣

學歷：

國立交通大學 光電工程研究所 碩士班

國立台北科技大學 機械工程系

