

Untersuchungen zu deterministischem und stochastischem Streulicht in hocheffizienten binären Beugungsgittern

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Physikalisch-Astronomischen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Dipl.-Phys. Martin Heusinger
geboren am 02.05.1986 in Meiningen

Gutachter:

1. Prof. Dr. Uwe Detlef Zeitner

Institut für angewandte Physik, Friedrich-Schiller-Universität Jena

2. PD Dr. Andreas Erdmann

Fraunhofer-Institut für Integrierte Systeme und Bauelementetechnologie, Erlangen

3. Prof. Dr.-Ing. Jürgen Czarske

Institut für Grundlagen der Elektrotechnik und Elektronik, Technische Universität Dresden

Tag der Disputation: 20.08.2019

All the compliments that I have received never gave me so much pleasure as the discovery of a theoretic truth, or the confirmation of a calculation by experiment.

AUGUSTIN-JEAN FRESNEL

Abstract

A critical limitation for the application of optical diffraction gratings in high performance spectrometry is their stray light behavior. Current space projects within the frame of the 8th earth observation program governed by the *European Space Agency* (ESA) have strong demands on both deterministic stray light artifacts (*Rowland ghosts*) as well as the diffuse stray light background. However, up to date, the stray light generating mechanisms in gratings are poorly understood and there is a need for models that allow a correct prediction of the scattered light distribution. The aim of this work is to bridge that gap by categorizing the multiplicity of different stray light sources and analyzing their impact on the stray light performance of the grating (regardless of the fabrication technology). Further, on the example of electron beam lithography and based on the derived models, the stray light sources of the used e-beam writer *Vistec SB350 OS* will be identified and methods for improving the stray light performance will be deduced.

Accordingly, this work is divided into 2 main sections. The first part (Chapter 3) concerns about deterministic shape deviations of the realized grating structure from the desired one. Here, especially large-scale segmentation errors leading to a super period and therefor to Rowland ghosts within the stray light spectrum are investigated. The second part (Chapter 4) is dedicated to stochastic shape deviations, which generate a continuous stray light background. In particular, this chapter focuses on *line edge roughness* (LER) of the grating lines as this disturbance is of critical interest in both scientific research and technological applications.

A challenging aspect of this work is to keep the theoretical investigation generally valid, even though especially the deterministic artifacts strongly depend on the fabrication technology. However, deterministic stray light artifacts in the form of Rowland ghosts have in common that they originate in a strongly periodic superstructure, no matter what kind of lithography technology was used. In the case of *sequential technologies*¹ such a super period results from an imperfect stitching of the segments. Within the frame of an analytic model, it will be shown that the parti-

¹Meaning that a large-scale optical grating is composed out of many small but equal pieces (*segments*), which are laterally arranged in order to fill up the entire grating area.

cular type of imperfection results in a unique characteristic of the according stray light spectrum, which thus acts similar as a fingerprint. In particular, it is found that a stochastic positioning error of the segments does not lead to Rowland ghosts at all, but rather generates a continuous stray light background with sharp dips at the expected ghost-positions. It can be deduced that Rowland ghosts never originate in stochastic but always in systematic disturbances. For the most part, the analytical investigations are explained in terms of phenomenological considerations. By means of rigorous simulations and stray light measurements on gratings with artificially induced errors it is shown that the analytic results can largely be transferred to deep small-period-gratings. On the basis of the obtained findings, it can finally be determined that the e-beam writer suffers from a deterministic segment positioning error of about $\Delta p_{\text{seg}} = 5 \text{ nm}$. A recalibration of the segment-positioning on the basis of *angle resolved scattering* (ARS) measurements enhances the stitching accuracy to $\Delta p_{\text{seg}} < 1 \text{ nm}$.

In the second part of this work, the main focus was to develop a suitable model describing the scattered radiation caused by LER. For gratings within the range of *thin element approximation* (TEA) a simple analytical expression for the ARS is derived. In this way, the scattered light distribution can be reproduced correctly for both scattering angles and angles of incidence up to 90 degrees. The derived formula reveals a significant effect of the grating geometry on the stray light distribution, e.g., the scattering increases quadratically in the grating depth and inversely with the grating period. In addition, detailed examinations show that a favorable choice of the dependencies of the phase shift and the Fresnel coefficients on the angle of incidence and scattering angle, respectively, even make it possible to distinguish the direction of polarization. This is substantiated by clear parallels to the *Rayleigh-Rice formula* for scattering of rough surfaces. However, further investigations are needed for TM-polarized light, as it is described correctly only for an angle of incidence of 0 degrees. Nevertheless, this can be explained in terms of phenomenological considerations.

The analytic investigations are verified within the scope of a novel 1D-ARS-simulation method, which comprises the two-dimensionality of the stochastic disturbance by means of a simple multiplication of the 1D-simulation results with the *power spectral density* (PSD) and additional pre-factors. The approach allows a simplification of the complex 2D-problem to a 1D-problem, which results in an enormous reduction of the computational effort by several orders of magnitude. But still, the model provides exact results within the dispersion plane of the grating. Even in a wide conical range parallel to the dispersion plane, very good matches to complete 2D-simulations are demonstrated. This tool now allows for the first time to perform stray light simulations on long-period-gratings (that are not possible to investigate within the straight forward 2D-approach).

On the basis of the derived models, the LER-induced stray light behavior of binary gratings is systematically investigated. On the example of a current high performance spectrometer grating (designed within the frame of the FLEX-project in cooperation with ESA), it is demonstrated that the stray light characteristics can already be considered within the grating design process. A noteworthy difference to long-period-gratings is that, apart from the grating depth, the duty cycle also has a significant influence on the scattered light distribution. While the grating depth determines the intensity of the scattered light, the duty cycle mainly affects the qualitative distribution and provokes local maxima and minima within the stray light spectrum. The strategy of using a low grating depth and a moderate duty cycle when designing gratings with low stray light level can be confirmed by the calculations.

For the FLEX-grating the roughness parameters will be determined and the corresponding ARS-simulation is compared to an ARS-measurement. It is found that the scattered light distribution is determined not solely by LER but particularly due to stochastic *Shot*¹ positioning errors. By exploring the influence of the e-beam exposure strategy, several writing strategies influencing the Shot positioning error are found. By an optimization of the writing principle it was finally possible to fabricate a grating with LER-confined stray light background.

¹A Shot is a rectangular shaped electron beam with homogeneous (lateral) intensity distribution, which serves as the basic building block in the so called *variable shaped beam* writing.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	v
Einleitung	1
1 Physik der Beugungsgitter	5
1.1 Das Beugungsproblem	5
1.2 Lösung des Beugungsproblems mit Hilfe der Methode rigoros gekoppelter Wellen (RCWA)	9
1.3 Binäre Gitter für Hochleistungsspektrometrie	11
1.3.1 Anforderungen an Spektrometergitter	11
1.3.2 Das FLEX-Gitter	13
1.3.3 Streulichtproblematik in Spektrometergittern	14
1.4 Herstellung binärer Gitter	16
1.4.1 Allgemeiner Herstellungsprozess	16
1.4.2 Elektronenstrahlolithographische Strukturerzeugung	18
2 Methoden zur Charakterisierung des Gitterstreulichts	21
2.1 Streulichtmessung	21
2.2 Grundlagen zur Streulichtsimulation	27
3 Deterministisches Streulicht: Gittergeister	31
3.1 Segmentierungsfehler als Quelle der Gittergeister	31
3.2 Analytische Untersuchung der Segmentierungsfehler	34
3.2.1 Stochastischer Positionierungs- und Belichtungsfehler	36
3.2.2 Deterministischer Positionierungsfehler	39
3.2.3 Systematischer Shotformat- und Shotpositionierungsfehler	41
3.2.4 Fazit	43
3.3 Segmentierungsfehler bei tiefen Phasengittern	44
3.3.1 Gitter mit künstlichen Segmentierungsfehlern	44
3.3.2 Identifikation der Segmentierungsfehler im Elektronenstrahlschreiber	46
3.4 Reduktion der Gittergeister	47
3.4.1 Rekalibrierung	47
3.4.2 Randomisierung	50
4 Stochastisches Streulicht	55
4.1 Kantenrauheit als Quelle diffusen Streulichts	55
4.1.1 Charakterisierung der Kantenrauheit	55
4.1.2 Entstehung der Kantenrauheit	57
4.1.3 Quantifizierung der Kantenrauheit	59
4.1.4 Modellierung: Erzeugung künstlicher rauer Kanten	63

4.2	Modellierung der von Kantenrauheit hervorgerufenen Streuung	64
4.2.1	Skalare Beugungstheorie im Rahmen der TEA	65
4.2.2	Rigoreuse Simulation diffuser Streuung	67
4.3	Theoretische Untersuchung	70
4.3.1	Gitter im Gültigkeitsbereich der TEA	70
4.3.2	Streulicht in tiefen Phasengittern	79
4.3.3	Konische Streuung	82
4.4	Experimentelle Untersuchung	84
4.4.1	Gitter mit künstlicher Kantenrauheit	84
4.4.2	Interpretation des Streulichtspektrums elektronenstahlithographisch her- gestellter Gitter	86
4.4.3	Reduktion des Streulichtuntergrunds	89
5	Zusammenfassung	95
	Literaturverzeichnis	99
A	Auflistung der Parameter zur Beschreibung gestörter Gitter	111
B	Ableitung von Gleichung (4.17)	113
C	Analogie von Gleichung (4.17) zur Rayleigh-Rice-Streutheorie rauer Oberflächen	117
	Danksagung	119
	Publikationen	121
	Ehrenwörtliche Erklärung	123

Einleitung und Zielstellung

Diffraktive Optiken und insbesondere simple optische Beugungsgitter haben die Forschung der letzten 200 Jahre enorm beeinflusst. Seit *David Rittenhouse* das Beugungsgitter im Jahre 1786 erfand [1] und *Joseph von Fraunhofer* im Jahre 1820 erstmals die Beugung von Licht an periodischen Strukturen systematisch untersuchte, erfuhren Beugungsgitter ein stetig wachsendes wissenschaftliches und technologisches Interesse. Mit deren kontinuierlicher Weiterentwicklung und der Begründung der Spektralanalyse durch *Kirchhoff* und *Bunsen* im Jahre 1860 entwickelten sich optische Gitter zu einem unverzichtbaren Werkzeug für spektrometrische Messungen [2, 3]. Insbesondere in der Astronomie und Astrophysik gelangen so erstaunliche Entdeckungen. Mit der Hilfe spektroskopischer Instrumente wurden die Absorptionslinien im Spektrum der Sterne entdeckt, womit deren chemische Zusammensetzung und Temperatur bestimmt werden kann. Weitere wegweisende Entdeckungen stellen die Rotverschiebung der Galaxien (*Vesto Slipher*, 1912 [4, 5]), die Expansion des Universums (*Edwin Hubble* und *Georges Lemaitre*, 1927-1929 [6, 7]) und die Entdeckung der Quasare (*Maarten Schmidt*, 1963 [8]) dar. Über die Bestimmung der Rotationsgeschwindigkeit von Galaxien trugen Beugungsgitter sogar zur Entdeckung der dunklen Materie bei (*Vera Rubin*, 1970 [9]) und die Vermessung der kosmischen Hintergrundstrahlung (erstmalig durch *Arno Penzias* und *Robert Wilson*, 1964 [10], und hochaufgelöst mit Hilfe des Satelliten COBE¹ [11], 1989-1993) lieferte wichtige Erkenntnisse zur Entstehung des Universums. Aktuelle und zukünftige astronomische Anwendungen umfassen die Suche nach extrasolaren Planeten und außerirdischem Leben [12, 13]. Bei der sogenannten Radialgeschwindigkeitsmethode, bei der die Anziehungskraft eines Planeten eine periodische Bewegung des Sterns verursacht, müssen Sternbewegungen v_{\odot} in der Größenordnung weniger m/s gemessen werden [14–16] (z.B. für das System Jupiter-Sonne beträgt $v_{\odot} = 13 \frac{\text{m}}{\text{s}}$), was einer Dopplerverschiebung von nur $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 10^{-9}$ entspricht. Neben den Herausforderungen der astronomischen Beobachtungstechnik ist heutzutage die Anwendung der Spektrometergitter für Erdbeobachtungszwecke von außerordentlich hoher Bedeutung. Im Rahmen des 8. Erdbeobachtungsprogramms der *European Space Agency* (ESA) wird unter anderem der *Fluorescence-Explorer*-Satellit (FLEX) entwickelt [17]. Ziel dieses Projektes ist die globale

¹COsmic Background Explorer. Nachfolgeprojekte waren WMAP (Wilkinson Microwave Anisotropy Probe, 2001-2010) und Planck (2009-2013).

Überwachung der photosynthetischen Aktivität durch spektrometrische Messung der Chlorophyll-Fluoreszenz (im Wellenlängenbereich $\lambda = 640\text{nm} \dots 800\text{nm}$) um so den Gesundheitszustand der weltweiten Vegetation zu erforschen [18, 19]. Weitere Erdbeobachtungsprojekte der ESA, welche die Entwicklung von Beugungsgittern vorantreiben, hören auf Namen wie *Sentinel 1-6*, *CarbonSat* oder TROPOMI¹ [20–22].

Die Anforderungen dieser Forschungsgebiete an das Beugungsgitter sind enorm. Neben hohen Beugungseffizienzen wird eine sehr große Dispersion und ein hohes Auflösungsvermögen verlangt [20, 23]. In vorangegangenen Arbeiten wurde gezeigt, dass diese Spezifikationen mit simplen binären Beugungsgittern, deren Periode p im Bereich der Wellenlänge λ des zu untersuchenden Lichts liegt, erfüllt werden können [24–26]. Um ein hohes Auflösungsvermögen zu erreichen, ist es zudem wichtig, möglichst großflächige Gitter herzustellen. Die Kombination aus kleinen Gitterperioden und großen Gitterflächen ist technologisch sehr anspruchsvoll und neigt dazu, sowohl *stochastische* als auch *deterministische* Abweichungen von der gewünschten, streng periodischen Gittergeometrie zu induzieren. Jegliche Störung der idealen Periodizität führt allerdings zum Auftreten von Streulicht. Gerade moderne Hochleistungsspektrometer müssen aber auch ein sehr hohes Signal-Rausch-Verhältnis und ein geringes Streulichtniveau aufweisen. Damit zeigen die Zielparameter (Effizienz, Dispersion, Auflösung, Streulichtniveau) eine gegensätzliche Abhängigkeit von den Gitterparametern (Periode, Gitterfläche). Um diesen Gegensatz zu durchbrechen ist eine genaue Kenntniss und Analyse der Mechanismen, welche zu Streulicht in Gittern führen, nötig, wozu diese Arbeit einen wesentlichen Beitrag leistet.

Die Ursachen möglicher Abweichungen der hergestellten von der idealen Gitterstruktur sind mannigfaltig und ebenso abhängig von der Herstellungstechnologie. Beispielsweise führt die *Oberflächenrauheit* des verwendeten Substrates oder zusätzlicher optischer Beschichtungen [27], wie sie z.B. in hochreflektiven Gittern zum Einsatz kommen [28], zu diffus gestreutem Licht. Dieses Problem ist schon weitreichend untersucht [29–33] und mittlerweile können Oberflächen mit RMS²-Werten im Subnanometerbereich gefertigt und charakterisiert werden [34]. Zusätzlich induziert die *Kantenrauheit* der binären Gitterlinien eine stochastische Formabweichung, welche mit RMS-Werten im Bereich einiger Nanometer deutlich kritischere Auswirkungen auf das Streulichtverhalten der Gitter haben sollte. Die stochastischen Eigenschaften der Kantenrauheit sind detailliert untersucht [35–37] und auch die Auswirkungen auf die Beugungseffizienzen (z.B. bei

¹TROPOspheric Monitoring Instrument

²Hiermit wird der quadratische Mittelwert bezeichnet (engl.: *Root Mean Square*), welcher der Standardabweichung einer mit Mittelwert Null gaußförmig verteilten Zufallszahl entspricht.

Scatterometriemessungen¹⁾ wurden analysiert [40, 41]. Die Auswirkungen auf das Streulichtverhalten sind jedoch unzureichend erforscht. Diese Lücke soll mit dieser Arbeit geschlossen werden.

Weiterhin führen Überperioden, die aufgrund technologischer Besonderheiten der Herstellungstechnologie in das Gitter eingeschrieben werden, zu deterministischen Formabweichungen und damit zum Auftreten sogenannter *Gittergeister*, also diskreter *Peaks* im Streulichtspektrum [42]. Besonders sequentielle Schreibstrategien (*Direct Laser Writing* [43, 44], *Elektronenstrahl-lithographie* [45]) und sogenannte *Step&Repeat*-Methoden (*Projektionslithographie* [46], *DUV-Lithographie* [47], *Scanning beam interference lithography* [48]), bei denen das großflächige Gitter aus vielen kleineren Teilsegmenten zusammengesetzt wird, neigen zur Ausbildung von Überperioden. Aber auch in *holographisch* hergestellten Gittern, welche aufgrund ihres interferometrischen Herstellungsprinzips eigentlich keine Überperioden ausbilden [42, 49], wurden schon Gittergeister beobachtet [50, 51], welche meist ihre Ursache im komplexen und anspruchsvollen Aufbau der Strahlaufbereitung haben.

Das Ziel dieser Arbeit besteht darin, diese Vielzahl an Streulichtquellen in eindimensionalen binären Gittern zu analysieren und möglichst allgemeingültig zu beschreiben. Dabei sollen die Auswirkungen der unterschiedlichen Strukturfehler auf die optische Funktion des Gitters untersucht werden, wobei vor allem die genaue Verteilung der gestreuten Strahlung entlang der Dispersionsrichtung des Gitters von Interesse ist. Eine erste Klassifizierung wird durch eine Unterteilung der Arbeit in die zwei Schwerpunkte *deterministisches* und *stochastisches* Streulicht vorgenommen, wobei für stochastische Störungen der Fokus auf Kantenrauheit gelegt wird. Zu jedem dieser Schwerpunkte werden folgende Untersuchungen durchgeführt: Zunächst werden die Auswirkungen der Fehler auf die Streulichtverteilung im Rahmen analytischer und rigoroser Modelle theoretisch beschrieben. Diese Modelle werden anschließend experimentell verifiziert indem Gitter mit künstlich eingeschriebenen Fehlern untersucht werden. Zur Herstellung verschiedener Testgitter wird die Elektronenstrahlithographie verwendet, welche es aufgrund ihrer sequentiellen Schreibstrategie erlaubt, vielseitige Gitterstrukturen mit definierten Störungen zu erzeugen. Im dritten Schritt werden die der Elektronenstrahlithographie inherenten Herstellungsfehler mit Hilfe von Streulichtmessungen identifiziert und Techniken entwickelt, um diese Fehler und damit das Streulicht zu reduzieren. Dabei wird demonstriert, dass winkelaufgelöste Streulichtmessungen als ergänzendes Werkzeug zur Bestimmung verschiedenartiger Herstellungsfehler verwendet werden können. Als Beispielgitter dient größtenteils ein im Rahmen des FLEX-Projektes benötigtes Gitter. Dabei handelt es sich um ein binäres Spektrometergitter in Kieselglas mit einer Periode von

¹⁾ *Scatterometrie* ist eine Methode zur Charakterisierung periodischer Strukturen unterhalb der optischen Auflösungsgrenze, welche üblicherweise auf der Vermessung der Beugungseffizienzen bei verschiedenen Wellenlängen und Einfallswinkeln beruht [38, 39].

$p = 667 \text{ nm}$, welches im Wellenlängenbereich $\lambda \approx 600 \dots 800 \text{ nm}$ Beugungseffizienzen von mehr als 80% aufweist.

Der Aufbau dieser Arbeit richtet sich nach der Zielstellung. **Kapitel 1** dient der Einführung der physikalischen und technologischen Konzepte. In **Kapitel 2** werden die in dieser Arbeit verwendeten Methoden zur Charakterisierung des Gitterstreulichts vorgestellt. **Kapitel 3** widmet sich der Untersuchung deterministischer Streulichtartefakte, wobei zunächst eine Interpretation des Streulichtspektrums unoptimierter Gitter gezeigt wird. Eine Aufarbeitung im Rahmen skalarer Beugungstheorie und optischer Simulationsmethoden beantwortet die Frage, inwieweit winkelaufgelöste Streulichtmessungen zur Identifikation der Strukturfehler herangezogen werden können. Am Beispiel elektronenstrahlolithographisch hergestellter Gitter wird eine solche Analyse demonstriert. Das Kapitel schließt mit experimentellen Untersuchungen zur Optimierung der Streulichteigenschaften am Beispiel des FLEX-Gitters. **Kapitel 4** konzentriert sich auf die durch Kantenrauheit verursachte diffuse Streuung. Dabei wird besonderes Augenmerk auf die Entwicklung geeigneter analytischer und numerischer Methoden zur korrekten Berechnung der Streulichtverteilung gelegt. Auf Basis der abgeleiteten Modelle werden winkelaufgelöste Messungen des Streulichtuntergrunds analysiert. Darüber hinaus werden Ansätze zu dessen Reduktion abgeleitet und in experimentellen Untersuchung verifiziert. Im abschließendem **Kapitel 5** erfolgt eine Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit.

1 Physik der Beugungsgitter

Als Beugungsgitter bezeichnet man in der Optik ein Bauteil, welches eine periodische Modulation der optischen Konstanten aufweist und dadurch eine beugende (diffraktive) Wirkung auf elektromagnetische Wellen ausübt. Diese weitreichende Definition umfasst eine Vielzahl verschiedener Gittertypen. Zunächst kann nach der Dimensionalität der Periodizität unterschieden werden. Zu eindimensionalen Gittern zählt man neben *Oberflächenreliefgittern* (wie spektroskopische Beugungsgitter oder Pulscompressorgitter) auch Faser- und Wellenleitergitter oder hochreflektierende Bragg-Reflektoren. Hingegen können sogenannte Photonische Kristalle zwei- und dreidimensionale Periodizitäten aufweisen und nicht zuletzt besitzt jede natürliche Kristallstruktur eine dreidimensionale Gittergeometrie.

Eine durch das Beugungsgitter propagierende Welle kann dabei sowohl in ihrer Phase als auch in ihrer Amplitude entsprechend der Struktur des Gitters periodisch moduliert werden. Beeinflusst das Gitter nur die Amplitude der einfallenden Welle, so spricht man von einem *Amplitudengitter*, wird nur die Phase moduliert, handelt es sich um ein *Phasengitter*. Phasengitter lassen sich beispielsweise anhand ihres Oberflächenprofils klassifizieren. So gibt es neben komplizierten Kinoformelementen [52], welche eine kontinuierliche Oberflächenstruktur besitzen, einfacher herzustellende binäre oder mehrstufige Phasenelemente. Amplitudenwirksame Gitter absorbieren dabei einen Teil der einfallenden Strahlung und führen so zu einem unvermeidlichen Effizienzverlust, weshalb in optischen Anwendungen typischerweise Phasengitter präferiert werden, welche hocheffiziente Strahlablenkung und -formung erlauben.

In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich eindimensionale Oberflächenreliefgitter mit binärem (d.h. auf nur zwei Höhenstufen basierendem) Oberflächenprofil untersucht, welche sowohl Wirkung auf Amplitude als auch Phase haben können.

1.1 Das Beugungsproblem

Der Querschnitt durch ein binäres Gitter, die wichtigsten geometrischen Parameter und das prinzipielle Beugungsproblem sind in Abb. 1.1(a) schematisch dargestellt. Charakteristische Größen eines binären Gitters sind Periode p , Stegbreite b und Gittertiefe d , von welchen sich der Füllfaktor

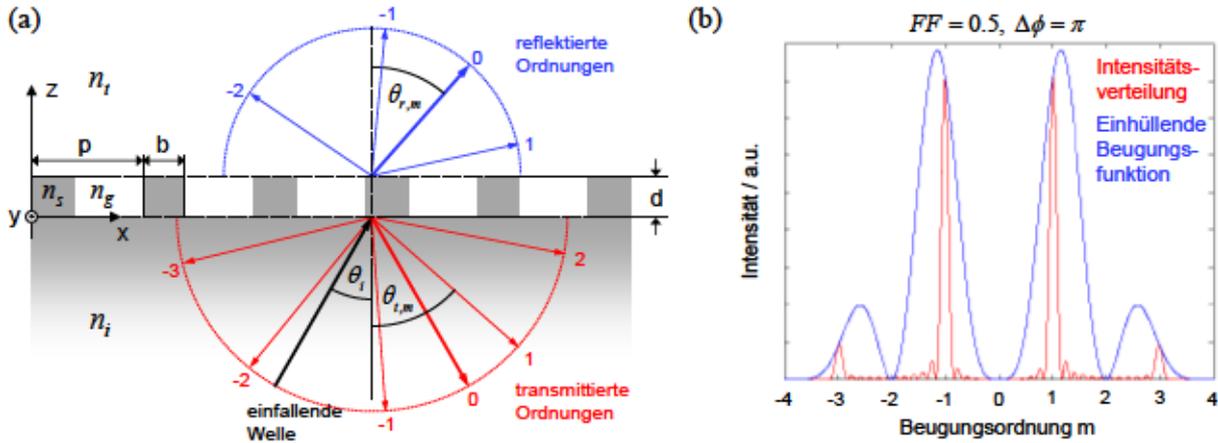


Abb. 1.1: (a) Beugungsproblem am binären Gitter: Abhängig von der Gittergeometrie und der Beleuchtung (Periode p , Stegbreite b , Gittertiefe d , Einfallswinkel θ_i , Wellenlänge λ) sollen Richtungen und Effizienzen der propagierenden Beugungsordnungen bestimmt werden. (b) Fernfeld-Intensitätsverteilung (rot) eines Phasengitters mit $b = p/2$ (d.h. Füllfaktor $FF = 0.5$), Gittertiefe $d = \lambda/2\Delta n$ (entsprechend einer Phasenverschiebung $\phi = \pi$) und $N = 6$ beleuchteten Perioden im Rahmen der „dünn-Elemente-Approximation“ (TEA) und einhüllende Beugungsfunktion (blau). Durch Wahl der Parameter b und d lässt sich die Intensität der einzelnen BOs steuern. Hier wurde b und d so gewählt, dass die 0. BO verschwindet.

FF und das Aspektverhältnis AV entsprechend

$$FF = \frac{b}{p} \qquad AV = \frac{d}{b}. \qquad (1.1)$$

ableiten lassen. Eine unter dem Winkel θ_i auf das Beugungsgitter einfallende ebene Welle erzeugt sowohl in Transmission als auch in Reflexion eine endliche Anzahl ebener Wellen, welche als Beugungsordnungen (BO) bezeichnet werden. Die Beugungsordnungen m werden dabei ausgehend von der spekularen Ordnung mit positiven und negativen ganzen Zahlen $m \in (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ durchnummeriert. Das Beugungsproblem am Gitter umfasst das Bestimmen der Ausbreitungsrichtungen und der Intensitäten der einzelnen Ordnungen auf Basis der Gittergeometrie und der Eigenschaften der einfallenden Welle.

Die Ausbreitungsrichtungen $\theta_{r/t,m}$ der gebeugten ebenen Wellen lassen sich durch die *Gittergleichung* [53, S. 305]

$$n_{i/t} \sin \theta_{r/t,m} = n_i \sin \theta_i + m \frac{\lambda}{p} \qquad (1.2)$$

ermitteln, wobei λ die Wellenlänge des einfallenden Lichts und $n_{i/t}$ die Brechzahlen der jeweiligen Halbräume sind. Die Anzahl und die Ausbreitungsrichtung der propagierenden Beugungsordnungen hängt also neben den Brechzahlen und dem Einfallswinkel im Wesentlichen vom Verhältnis der Wellenlänge zur Gitterperiode ab. Dabei gilt: je kleiner die Periode (bei fester Wellenlänge),

desto weniger propagierende Ordnungen treten auf. Für $p \leq \frac{2\lambda}{n_i+n_{i'}}$ und beliebigem Einfallswinkel sind maximal die 0. und die ± 1 . BO ausbreitungsfähig und schon für $p \leq \frac{\lambda}{n_i+n_{i'}}$ kann unabhängig vom Einfallswinkel nur noch die 0. Ordnung propagieren (sogenannte *Zero-Order-Gitter*). Die große Wellenlängenabhängigkeit der Beugungswinkel in höheren Ordnungen für $p \approx \lambda$, welche die normale Dispersion des Brechungsindex um ein Vielfaches übersteigen kann [53, S. 335], ist v.a. für spektroskopische Anwendungen interessant.

Die Verteilung des einfallenden Lichtes in die propagierenden Beugungsordnungen kann durch die Beugungseffizienz

$$\eta_m = \frac{P_m}{P_i} \quad (1.3)$$

beschrieben werden, wobei mit P_m die Leistung der m -ten BO und mit P_i die eingestrahelte Leistung bezeichnet wird. Kennt man die Feldverteilung der gebeugten Wellen kurz vor ($z = 0$) oder kurz nach ($z = d$) dem Gitter, so lassen sich die Effizienzen der Beugungsordnungen aus der Fouriertransformierten dieser Felder berechnen (*Fourieroptik* [54]). Ein Gitter, dessen Periode deutlich größer und dessen Tiefe viel kleiner als die Wellenlänge des einfallenden Lichts ist, kann im Rahmen der *dünne Elemente Näherung* (engl.: *thin element approximation, TEA*) behandelt werden [54–56]. Die Feldverteilung im Gitterbereich wird vernachlässigt und das Feld bei $z = d$ entspricht dann weitgehend der Transmissionsfunktion des Gitters, welche eine mögliche Absorption und Phasenverschiebung bei Propagation des Lichts durch den Gitterbereich berücksichtigt. Für ein reines Phasengitter, welches zwischen Steg und Graben die Phasenverschiebung $\Delta\phi$ erzeugt, wird die Transmissionsfunktion durch

$$g(x) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \Pi\left(\frac{x-np}{p}\right) e^{i\Pi\left(\frac{x-np}{b}\right)\Delta\phi} \quad (1.4)$$

beschrieben, wobei die Rechteckfunktion $\Pi(x)$ durch $\Pi(x) = 1$ für $|x| < 0.5$ und $\Pi(x) = 0$ für $|x| \geq 0.5$ definiert ist. Im Rahmen der *Fourieroptik* liefert das Betragsquadrat der Fouriertransformierten dieser Funktion einen Ausdruck für die Intensitätsverteilung im Fernfeld (vgl. [53, S.304] für ein reines Amplitudengitter)

$$I(f) \propto \underbrace{\left[\frac{\sin(N_p \pi f p)}{N_p \sin(\pi f p)} \right]^2}_{\text{Interferenzfunktion}} \times \underbrace{\left[p^2 \text{sinc}^2(\pi f p) + 2(1 - \cos \Delta\phi) \cdot (b^2 \text{sinc}^2(\pi f b) - p b \text{sinc}(\pi f b) \text{sinc}(\pi f p)) \right]}_{\text{Beugungsfunktion}}, \quad (1.5)$$

wobei $f = (n_{r/t}/\lambda) \sin(\theta_{r/t})$ die Ortsfrequenz und N_p die Zahl der beleuchteten Spalte symbolisiert. Die Phasenverschiebung lässt sich nach $\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda}(n_s - n_g)d$ berechnen, wobei $n_{s/g}$ der Brechungsindex des Steges bzw. des Grabens bedeutet. Diese Formel beinhaltet alle geometrischen und optischen Parameter des binären Gitters und erlaubt eine Abschätzung der Beugungseffizienzen für Gitter im Gültigkeitsbereich der TEA. Für ein Phasengitter mit $p/\lambda = 10$, $FF = 0.5$ und $\Delta\phi = \pi$ ist die Intensitätsverteilung in Abb. 1.1(b) als rote Kurve dargestellt. Die *Interferenzfunktion*¹ in Gleichung (1.5) bestimmt dabei lediglich die Ausprägung der Beugungsordnungen in Abhängigkeit von der Anzahl der beleuchteten Spalte und wird für $N_p \rightarrow \infty$ zum *Dirac-Kamm*, d.h. zu diskreten Peaks im Winkelspektrum². Damit bestimmt sie auch die Ausbreitungsrichtungen der Beugungsordnungen, woraus sich schließlich die Gittergleichung (1.2) ableiten lässt. Die Intensitäten der einzelnen Ordnungen werden jedoch von der einhüllenden *Beugungsfunktion*³ beschrieben, welche als blaue Kurve in Abb. 1.1(b) gezeigt ist. Die Beugungsfunktion wird durch die Feinstruktur innerhalb einer Periode bestimmt und kann so eingestellt werden, dass unterschiedliche optische Funktionen realisiert werden können. In Abb. 1.1(b) wurde das Gitterprofil beispielsweise so gestaltet, dass die 0. BO und alle geradzahigen Ordnungen vollständig unterdrückt werden.

Die Fourieroptik unter Anwendung der TEA bietet damit eine Möglichkeit zum Design von Beugungsgittern und allgemein von diffraktiven optischen Elementen auf Basis einer gewünschten optischen Zielfunktion. Weit verbreitet ist die TEA beispielsweise beim Design *computergenerierter Hologramme* [57,58], welche zwar eine komplexe Geometrie aufweisen, meist aber mit großen Strukturgrößen, kleinen Ablenkwinkeln und Strukturweiten im Bereich $d < \lambda/\Delta n$ arbeiten.

Im Rahmen der TEA wird jedoch die Ausbreitung des elektromagnetischen Feldes innerhalb der Gitterstruktur vernachlässigt. Für sehr kleine Gitterperioden $p \approx \lambda$ und große Gittertiefen $d > \lambda$, wie sie in hochdispersiven Elementen wie Spektrometergittern zur Anwendung kommen, verliert diese skalare Näherung ihre Gültigkeit [59]. Um auch in diesem Fall zuverlässige Aussagen über die Beugungseffizienzen zu erhalten, muss die Feldpropagation innerhalb des Gitters berücksichtigt werden, was eine direkte Auswertung der Maxwellgleichungen erforderlich macht. Eine etablierte Methode stellt die Analyse rigoros gekoppelter Wellen (engl.: *Rigorous Coupled Wave Analysis*, RCWA, bzw. andere Bezeichnung: *Fourier Modal Methode*, FMM) dar, deren elektromagnetische, auf Gittermoden basierende Theorie schon in den 60er Jahren entwickelt [60–62], schließlich von Moharam et. al [63–65] vollständig formuliert und in den folgenden Jahren hin-

¹Wird in der Literatur auch oft als *Gitterfunktion* bezeichnet, da hier nur die Periode p und Spaltanzahl N_p als freie Parameter eingehen.

²Für endliche N_p generiert die Interferenzfunktion zusätzliche schwache Nebenmaxima zwischen den deutlich ausgeprägten Beugungsordnungen (auch erkennbar in Abb. 1.1(b)). Dies wird in Kap. 3.2.1 noch eine Rolle spielen.

³Wird auch *Spaltfunktion* genannt [53].

sichtlich numerischer Stabilität und Konvergenz kontinuierlich verbessert wurde [66–68]. Heute ist die RCWA als vorgefertigter Algorithmus in kommerziell erhältlicher Software implementiert (z.B. *Unigit*, *GSolver*, *MCGrating*) und fungiert für den Nutzer ähnlich einer Black Box, welche Gittergeometrie und Beleuchtungseigenschaften als Eingabe benötigt und das vollständig gelöste Beugungsproblem (Feldverteilung, Beugungswinkel, Effizienzen und Phasen der Beugungsordnungen) als Ausgabe generiert. Ausführliche Untersuchungen und eine anschauliche phänomenologische Beschreibung für spezielle Gittergeometrien finden sich in den Arbeiten von Clausnitzer *et al.* [69]. Da die RCWA in dieser Arbeit als zentrales Simulationswerkzeug benutzt wird, sollen die ihr zugrundeliegenden Ideen im Folgenden kurz dargestellt werden.

1.2 Lösung des Beugungsproblems mit Hilfe der Methode rigoros gekoppelter Wellen (RCWA)

Will man die Ausbreitung des elektromagnetischen Feldes in der Gitterregion und schließlich die konkrete Feldverteilung der gebeugten Wellen bestimmen, muss der vektorielle Charakter der elektrischen und magnetischen Felder berücksichtigt und die Maxwellgleichungen gelöst werden. Dies kann mit Hilfe numerischer Methoden, wie z.B. der Methode rigoros gekoppelter Wellen (RCWA), realisiert werden [65, 68, 70, 71]. Das Problem am eindimensionalen binären Beugungsgitter wird dabei in zwei unabhängige Fälle entsprechend der unterschiedlichen Polarisationszustände der einfallenden Welle separiert. Man unterscheidet TE-polarisiertes Licht, bei dem die elektrische Feldkomponente nur einen Anteil senkrecht zur Einfallsebene (xz -Ebene in Abb. 1.1) besitzt (d.h. $\vec{E} = (0, E_y, 0)$, $\vec{H} = (H_x, 0, H_z)$), und TM-polarisiertes Licht, bei dem der Vektor des elektrischen Feldes in der Einfallsebene liegt (d.h. $\vec{E} = (E_x, 0, E_z)$, $\vec{H} = (0, H_y, 0)$). Diese separate Betrachtung erlaubt eine enorme Vereinfachung der Maxwell'schen Gleichungen. Die 6 gekoppelten Differentialgleichungen, die aus dem Induktionsgesetz und dem erweiterten Durchflutungsgesetz folgern, lassen sich schließlich entkoppeln und zu zwei Differentialgleichungen zusammenfassen, bei der die einzige Unbekannte E_y (für TE-polarisiertes Licht) bzw. H_y (für TM-polarisiertes Licht) ist (die sogenannte *Helmholtzgleichung*).

Um die Helmholtzgleichungen für die zwei unterschiedlichen Polarisationszustände zu lösen, wird die Brechungsindexverteilung in der Gitterregion in eine Fourierreihe (zur Basis der Gitterperiode) entwickelt. Da das elektromagnetische Feld im Gitterbereich dieselbe Periodizität wie das Gitter aufweisen muss (*Blochtheorem*), kann auch dieses in einer Fourierreihe zu der selben periodischen Basis entwickelt werden. Die periodische Basis stellt die kleinste Einheit der

periodischen Struktur dar und wird auch als *Elementarzelle* bezeichnet¹. Setzt man die beiden Fourierreihen in die Helmholtzgleichung ein, so führt das letztlich auf ein Eigenwertproblem, von welchem die Eigenfunktionen $w_q(x)$ und Eigenwerte γ_q die Gittermoden bestimmen, die im Gitter angeregt werden. Die Summe aller angeregten Gittermoden bestimmt schließlich das elektromagnetische Feld in der Gitterregion, welches durch folgenden Ausdruck beschrieben werden kann

$$F_G = \sum_{q=1}^{\infty} w_q(x) \left[c_q^+ \cdot e^{-ik_0\gamma_q z} + c_q^- \cdot e^{ik_0\gamma_q(z-d)} \right]. \quad (1.6)$$

Hierbei fungiert F als Platzhalter für E_y im TE-Fall bzw. H_y im TM-Fall. Der Index G verdeutlicht die Gültigkeit der Feldgleichung nur im periodisch modulierten Gitterbereich und $k_0 = 2\pi/\lambda$ repräsentiert den Betrag des Wellenzahlvektors.

Da bis hierher die einfallende Welle in keiner Weise betrachtet wurde, enthalten die abgeleiteten Feldgleichungen noch immer unbekannte Koeffizienten c_q^+ und c_q^- . Diese Koeffizienten geben an, wie stark welche Gittermoden durch die einfallende Welle angeregt werden. Um die Koeffizienten und damit die Stärke der angeregten Gittermoden zu bestimmen, muss das Randwertproblem bzw. die Übergangsbedingungen gelöst werden. Hierzu nimmt man eine Unterteilung des Raumes in drei Bereiche vor: den Bereich der einfallenden Welle und der reflektierten Ordnungen (R -Bereich, $-\infty < z < 0$, vgl. Abb. 1.1), den periodisch modulierten Bereich (Gitterbereich G , $0 < z < d$) und den Bereich der transmittierten Ordnungen (T -Bereich, $d < z < \infty$). Die reflektierten bzw. transmittierten Felder F_R und F_T werden nun durch sogenannte *Rayleigh-Reihen* dargestellt

$$F_R = F_i + \sum_{m=-\infty}^{\infty} R_m e^{-i\vec{k}_{R,m}\vec{r}} \quad (1.7)$$

$$F_T = \sum_{m=-\infty}^{\infty} T_m e^{-i\vec{k}_{T,m}(\vec{r}-\vec{e}_z d)}, \quad (1.8)$$

welche eine Superposition aller vorhandenen Felder im jeweiligen Halbraum beschreiben. Dabei bezeichnet F_i das einfallende Feld, R_m und T_m die komplexen Amplituden der m -ten BO der reflektierten bzw. transmittierten Felder und $\vec{k}_{R/T,m}$ die entsprechenden Wellenvektoren. Die Bedingung, dass die Tangentialkomponenten des elektrischen und magnetischen Feldes (also E_y , H_x bzw. H_y , E_x) an den Grenzflächen der drei Raumbereiche ($z = 0$ und $z = d$) stetig übergehen müssen, führt zu einem linearen Gleichungssystem, aus welchem c_q^+ , c_q^- , R_m und T_m eindeutig bestimmt werden können.

Das Beugungsproblem ist damit vollständig und eindeutig gelöst und aus den Koeffizien-

¹Dieser Ansatz impliziert, dass die RCWA nur für streng periodische Strukturen verwendet werden kann. Diese Einschränkung kann durch das in Abschnitt 2.2 beschriebene Vorgehen umgangen werden.

ten kann sowohl die exakte Feldverteilung im und gleich nach dem Gitter als auch die genauen Beugungseffizienzen der propagierenden Ordnungen berechnet werden. Dennoch bringt der Algorithmus einige Einschränkungen vor allem hinsichtlich der numerischen Implementierung mit sich:

1. Die Helmholtzgleichung wird im Ortsfrequenzraum gelöst, weshalb nur streng periodische Strukturen berechnet werden können. Berechnungen nicht-periodischer Effekte können jedoch durch Wahl einer möglichst großen Simulationsdomäne näherungsweise realisiert werden (siehe Kap. 2.2).
2. Obwohl prinzipiell Gitter egal welchen Oberflächenprofils Gittermoden besitzen, können nur die Moden des binären Rechteckgitters analytisch bestimmt werden. Das rechteckige Oberflächenprofil wird damit zum Baustein für kontinuierliche Oberflächenprofile, welche in einer sogenannten „Treppenstufenapproximation“ angenähert werden müssen. Die Approximation hat zur Folge, dass das Simulationsergebniss von der optischen Funktion des kontinuierlichen Profils abweichen kann [72]. Da in dieser Arbeit hauptsächlich binäre Gitterprofile untersucht werden, spielt diese Einschränkung eine nur untergeordnete Rolle.
3. Die Fourierreihen der Brechungsindexverteilung und des Feldes im Gitterbereich besitzen typischerweise eine unendliche Anzahl an Fourierkoeffizienten. Da ein numerischer Algorithmus keine unendlichen Gleichungssysteme berechnen kann, ist es notwendig die unendlichen Summen in Gleichung (1.6) - (1.8) auf eine endliche Anzahl $2N_R + 1$ an Summanden zu reduzieren. N_R bezeichnet man dabei als *Rayleighordnung*, welche die Zahl der in der Berechnung verwendeten Moden angibt. Um die Amplituden R_m und T_m der Beugungsordnung hinreichend genau zu berechnen, sollte neben den propagierenden Moden eine ausreichende Zahl evaneszenter Moden berücksichtigt werden. Daher muss im Vorfeld geprüft werden, ab welcher Rayleighordnung N_R der Algorithmus zu verlässlichen Ergebnissen konvergiert.

1.3 Binäre Gitter für Hochleistungsspektrometrie

1.3.1 Anforderungen an Spektrometergitter

Spektrometrie ist eine Technik zur spektralen Untersuchung elektromagnetischer Strahlung einer unbekanntenen Quelle. Das Ziel einer spektrometrischen Messung ist es, die Intensität der elektromagnetischen Strahlung in Abhängigkeit von seiner Wellenlänge zu bestimmen. Dazu ist eine Zerlegung der Strahlung in seine spektralen Komponenten erforderlich, wozu ein dispersives optisches

Kenngröße	Spezifikationen
Dispersion	$\geq 0.1^\circ\text{nm}^{-1}$
Effizienz	$> 90\%$ für Designwellenlänge
Bandbreite	anwendungsabhängig, $\approx 100\text{nm}$
Polarisationskontrast	$< 5\%$
Gittergeister	relative Intensität $< 10^{-4}$
Streulicht	„Grating Design and manufacturing process shall be optimized in order to minimize stray-light diffusion around diffracted direction“ [75]
Gitterfläche	$50 \dots 400\text{cm}^2$

Tab. 1.1: Typische Anforderungen an die optische Funktion von Hochleistungsspektrometergittern wie sie heutzutage in der Astronomie und Erdbeobachtung zum Einsatz kommen.

Element benutzt werden muss.¹ Die Wellenlängenabhängigkeit des Beugungswinkels höherer Ordnungen macht insbesondere Beugungsgitter für Anwendungen in der Spektrometrie interessant, da diese als dispersives Element fungieren können. Leitet man die Gittergleichung (1.2) nach der Wellenlänge ab, so erhält man für die Winkeldispersion D_G eines Gitters den Zusammenhang

$$D_G = \frac{\partial \theta_m(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{m}{p \cdot \cos \theta_m}, \quad (1.9)$$

welcher beschreibt, wie sich die Änderung der Wellenlänge der einfallenden Strahlung auf die Propagationsrichtung der m -ten BO auswirkt. Demnach besitzen vor allem Gitter mit kleiner Periode p eine hohe Dispersion. Besonders deutlich wird die Stärke der Winkeldispersion eines Gitters, wenn man sie mit der eines üblichen Prismenspektrometers vergleicht. Die Winkeldispersion eines Prismas aus Flintglas (für $\lambda \approx 500\text{nm}$) liegt in der Größenordnung von $D_p \approx 0.05^\circ\text{nm}^{-1}$ [53, S.358], wohingegen ein Gitter mit $p = 500\text{nm}$ und $\theta_{m=1} = 40^\circ$ eine Winkeldispersion von $D_G \approx 0.15^\circ\text{nm}^{-1}$ besitzt, also um einen Faktor 3 stärker ist. Für Hochleistungsgitterspektrometer, wie sie u.a. in der Astronomie und der Erdbeobachtung zum Einsatz kommen [17, 73–75], ist allerdings nicht nur eine hohe Dispersion wichtig. Um Intensitätsverluste zu vermeiden werden meist Beugungseffizienzen in der nutzbaren Beugungsordnung von typischerweise mehr als 90% gefordert. Zur Aufnahme eines möglichst breitbandigen Spektrums ist außerdem eine hohe spektrale Bandbreite nötig und meist ist eine polarisationunabhängige Beugungseffizienz gewünscht. Eine Auflistung typischer Anforderungen an Spektrometergitter für Weltraumanwendungen findet sich in Tabelle 1.1.

¹Dispersion bezeichnet ganz allgemein die Abhängigkeit einer physikalischen Größe von der Wellenlänge/Frequenz einer Welle. So unterscheidet man in der Optik z.B. Geschwindigkeitsdispersion, Brechungsindexdispersion oder Winkeldispersion. Hier ist die Abhängigkeit des Beugungswinkels $\theta_m(\lambda)$ von der Wellenlänge gemeint.

1.3.2 Das FLEX-Gitter

Untersuchungen von Clausnitzer *et al.* haben gezeigt, dass im Falle binärer Gitter hohe Beugungseffizienten insbesondere in der sogenannten *Littrow-Konfiguration erster Ordnung* erreicht werden können [69]. In dieser Anordnung werden Gitter mit Perioden im Bereich der Wellenlänge des zu untersuchenden Lichts so beleuchtet, dass die $-1.$ und $0.$ BO symmetrisch propagieren, d.h. $\theta_{r/t,-1} = -\theta_{r/t,0}$ [25] (siehe Abb. 1.2(a)). Setzt man diese Bedingung in Gleichung (1.2) ein, so erhält man für den Einfallswinkel $\theta_{i,L}$

$$\sin \theta_{i,L} = \frac{\lambda}{2n_i p}, \quad (1.10)$$

welcher auch als Littrowwinkel bezeichnet wird. Für ein hocheffizientes binäres Spektrometergitter, welches im Rahmen des *FLEX*¹-Projektes am *Fraunhofer Institut für angewandte Optik und Feinmechanik (IOF)* in Zusammenarbeit mit der *European Space Agency (ESA)* gefertigt wurde und die in Tab. 1.1 genannten Spezifikationen für eine Designwellenlänge von $\lambda = 720\text{nm}$ erfüllt, ist das Design in Abb. 1.2(a) skizziert. Bei einer Periode von $p = 667\text{nm}$, einer Stegbreite von $b = 430\text{nm}$ und einer Gittertiefe von $d = 1639\text{nm}$ besitzt das Gitter ein Aspektverhältnis von $AV \approx 7$ und die Beugungseffizienzen des Gitters müssen mit rigorosen Methoden berechnet werden. Abbildung 1.2(b) zeigt die berechnete Abhängigkeit der Effizienz der $-1.$ BO bei Be-

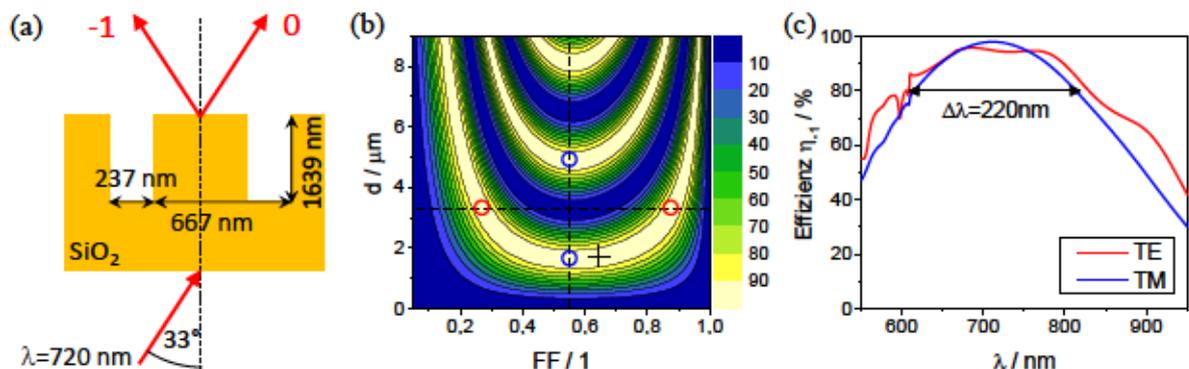


Abb. 1.2: (a) Design des im Rahmen des FLEX-Projektes gestalteten Spektrometergitters und Anordnung des Gitters in Littrowkonfiguration. (b) RCWA-Simulation der Effizienz der $-1.$ BO für $\lambda = 720\text{nm}$, $\theta_i = 33^\circ$ (in Luft) und TM-Polarisation. Das Zieldesign ist durch ein schwarzes Kreuz markiert. Die farbigen Markierungen sind in Kap. 4.3.2 von Interesse. (c) Abhängigkeit von η_{-1} von der Wellenlänge und Bestimmung der Bandbreite $\Delta\lambda$ für $\eta_{-1} > 80\%$.

leuchtung in Littrowkonfiguration mit TM-polarisiertem Licht der Wellenlänge $\lambda = 720\text{nm}$ von der Tiefe und dem Füllfaktor des Gitters. Es zeigt sich, dass eine Variation der Gittertiefe d und des Füllfaktors FF einen signifikanten Einfluss auf die Effizienz der nutzbaren Beugungsordnung hat.

¹FLuorescence EXplorer. Satellitenmission zur Erforschung des Gesundheitszustandes der weltweiten Vegetation [17–19].

Insbesondere treten Bänder mit hocheffizienten Lösungen des Beugungsproblems mit $\eta_{-1} > 98\%$ auf, welche durch Bänder unterbrochen werden, in denen η_{-1} auf nahezu 0% abfällt. Dieses Verhalten kann mit der Interferenz von gleich stark angeregten Gittermoden erklärt werden, die aus dem Gitter auskoppeln und sich im Fernfeld konstruktiv bzw. destruktiv überlagern. Insbesondere in Littrowkonfiguration (für $p \approx \lambda$) werden effektiv nur zwei Moden im Gitter angeregt, deren Stärke und Phasenverschiebung vom Füllfaktor und v.a. von der Gittertiefe abhängt. Ausführliche Untersuchungen findet man in [69]. Ein so gestaltetes Gitter hat häufig die vorteilhafte Eigenschaft, dass eine Variation der Wellenlänge in einem gewissen Bereich $\Delta\lambda$ um die Designwellenlänge zunächst keinen deutlichen Einfluss auf die Beugungseffizienz besitzt. Das vorgestellte FLEX-Gitter besitzt beispielsweise eine Bandbreite von $\Delta\lambda = 220\text{nm}$, in der die Effizienz der -1 . Ordnung immer über 80% liegt (Abb. 1.2(c)). Außerdem zeigt die RCWA-Simulation, dass die optische Funktion nahezu unabhängig von der Polarisation ist.

Da die vorliegende Arbeit im Rahmen des FLEX-Projektes durchgeführt wurde, wird die dabei gestaltete Gitterstruktur eine zentrale Rolle bei allen durchgeführten Untersuchungen spielen. Die abgeleiteten Zusammenhänge besitzen jedoch eine sehr allgemeine Gültigkeit.

1.3.3 Streulichtproblematik in Spektrometergittern

Am Beispiel des FLEX-Gitters sieht man, dass simple binäre Beugungsgitter die Anforderungen von Hochleistungsspektrometern zuverlässig adressieren können: Ein geeignetes Gitterdesign in Littrow-Konfiguration erlaubt eine große Dispersion sowie eine hohe und breitbandige Beugungseffizienz für beide Polarisationsrichtungen. Allerdings stellt das vorgestellte Gitterdesign mit seinen kleinen Perioden und engen Toleranzen bezüglich Grabenbreite und Gittertiefe große Anforderungen an den Herstellungsprozess. Insbesondere muss die Homogenität der Gittergeometrie über die gesamte Gitterfläche gewährleistet werden, was für großflächige Gitter im Bereich von bis zu 400cm^2 [26] eine technisch anspruchsvolle Aufgabe ist. Schon geringste Strukturabweichungen im Bereich von wenigen Nanometern haben das Potential niedrigfrequente Störungen zu erzeugen, die zu unerwünschten Beugungseffekten führen, welche die optische Funktion des Gitters im Allgemeinen als *Streulicht* überlagern. Die Periodizität P dieser eingebrachten Störungen liegt dabei üblicherweise im Bereich von wenigen Gitterperioden bis hin zu mehreren tausend Gitterperioden $P \approx 10p \dots 10000p$. Bei dem so generierten Streulicht kann man generell zwischen *deterministischem* und *stochastischem* Streulicht unterscheiden. *Deterministisches Streulicht* wird von einer festen Störperiode P_0 hervorgerufen und erzeugt eine Vielzahl an diskreten Störordnungen, welche sich neben den Beugungsordnungen des Gitters als diskrete Peaks im Winkelspektrum zeigen. Die Intensität der Störordnungen ist typischerweise mehrere Größenordnungen schwächer als die

Intensität der Nutzordnung. Aufgrund dieses Erscheinungsbildes haben die Störordnungen auch die Bezeichnung *Gittergeister* bzw. *Rowland Geister* bekommen [42, 45, 76–79]. *Stochastisches Streulicht* hingegen wird von einer homogen verteilten Störperiode generiert. Keine der auftretenden Störperioden ist dabei präferiert, d.h. sollte eine stärkere Auswirkung auf die optische Funktion haben. Folglich zeigt sich stochastisches Streulicht im Winkelspektrum als homogen verteilter *Streulichtuntergrund* sehr geringer Strahlungsstärke. Neben deterministischem und stochastischem Streulicht kann man noch *halbdeterministisches* Streulicht einführen, welches gewissermaßen den Übergang von deterministischem zu vollkommen stochastischem Streulicht beschreibt. Halbdeterministisches Streulicht lässt sich durch eine Verteilung von Störperioden beschreiben, welche eine zentrale Störperiode P_0 und eine Verteilungsbreite ΔP besitzt. Im Spektrum zeigt sich dieses Streulicht in Form von verschmierten Peaks, die je nach Stärke von ΔP in einen homogenen Untergrund mit einem breiten lokalen Maxima übergehen. In der vorliegenden Arbeit spielt dieses Streulicht allerdings eine untergeordnete Rolle und wird nur in Kapitel 3.4.2 diskutiert.

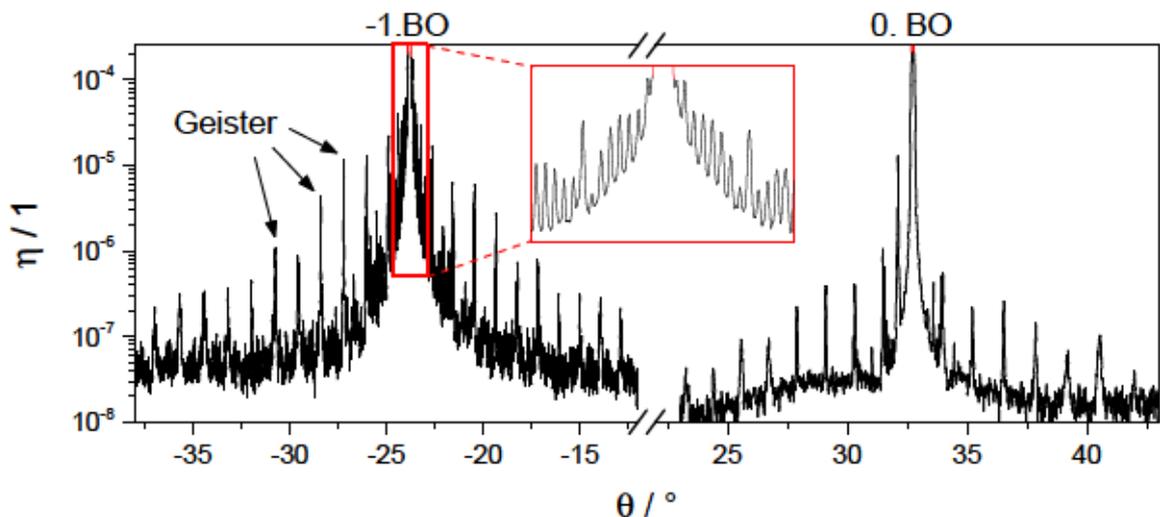


Abb. 1.3: Typische winkelaufgelöste Streulichtmessung um die $-1.$ und $0.$ BO eines nicht-optimierten Spektrometergitters (FLEX-Design, $p = 667$ nm) in Transmission bei $\theta_i = 33^\circ$ (in Luft) und $\lambda = 633$ nm. Dargestellt ist die auf die einfallende Leistung P_i normierte Streulichtleistung $\eta = P_s/P_i$ über dem Streuwinkel θ . Da die Messwellenlänge von der Designwellenlänge abweicht, ist die Littrowbedingung nicht erfüllt und die $0.$ und $-1.$ BO propagieren nicht symmetrisch. Für einen Streuwinkel $\theta = \theta_{-1} = -23.8^\circ$ beträgt die Beugungseffizienz der $-1.$ BO $\eta(\theta_{-1}) = \eta_{-1} \approx 0.86$.

Eine Streulichtmessung um die $-1.$ und $0.$ BO einer frühen Version des FLEX-Gitters für $\lambda = 633$ nm und $\theta_i = 33^\circ$ ist in Abb. 1.3 gezeigt. Man erkennt deutlich die Gittergeister (diskrete Peaks), welche insbesondere neben der Nutzordnung (bei $\theta_{-1} = -23.8^\circ$) auftreten und aus einem überlagerten kontinuierlichen Streulichtuntergrund herausragen. Wenn schwache spektrometrische Signale durch Streulicht überlagert werden, können diese stark verfälscht werden. Insbesondere Gittergeister können zu einer Fehlinterpretation der spektrometrischen Messung führen. Daher ist

es von großem Interesse, Streulicht in großflächigen (binären) Spektrometergittern zu verstehen und Techniken zu entwickeln, dieses zu reduzieren.

1.4 Herstellung binärer Gitter

Die Ursachen von deterministischem und stochastischem Streulicht sind zu einem großen Teil von der verwendeten Herstellungstechnologie abhängig. In diesem Abschnitt soll daher die grundsätzliche Vorgehensweise zur Herstellung binärer Gitter mit hohem Aspektverhältnis und im Besonderen die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Technik der Elektronenstrahlolithographie beschrieben werden. Dabei soll besonderes Augenmerk auf mögliche herstellungsbedingte Strukturabweichungen gelegt werden, die zu Streulicht in der optischen Funktion führen können.

1.4.1 Allgemeiner Herstellungsprozess

Der allgemeine lithographische Herstellungsprozess mikrooptischer Strukturen, zu welchen auch binäre Gitter zählen, unterteilt sich im Wesentlichen in 2 fundamentale Schritte: Zum Einen das Realisieren der gewünschten lateralen Struktur in einer dünnen Polymerschicht, welche z.B. ein strahlungsempfindlicher *Resist* sein kann. Zum Anderen das (proportionale) Übertragen der erzeugten Struktur in das gewünschte Trägermaterial, wobei eine vorgegebene Strukturtiefe erreicht werden soll und der Struktur damit eine 3-Dimensionalität gegeben wird. Das Erzeugen der Struktur im Resist stellt den eigentlichen lithographischen Prozess dar und bestimmt wichtige Größen wie Periode und Füllfaktor des Gitters. Nicht weniger wichtig ist jedoch der Strukturübertrag in das Substrat, welcher Aspektverhältnis und Ausprägung der binären Gittergeometrie festlegt, aber auch Einfluss auf den Füllfaktor hat. In der Praxis verwendet man oft mehrstufige Prozesse, die meist komplizierte Schichtsysteme erfordern. Die Herstellung der in der vorliegenden Arbeit untersuchten Gitter erfolgte nach der in Abb. 1.4 gezeigten Prozesskette. Ein gereinigtes Kieselglassubstrat wird zunächst mit einer etwa $d_{Cr} \approx 100\text{nm}$ dicken Chromschicht und einem $d_{res} \approx 300\text{nm}$ dicken strahlungsempfindlichen Polymer (*Resist*) beschichtet. In der vorliegenden Arbeit wird hauptsächlich der Resist FEP171 (*Perfluorethylenpropylen*) der Firma *Fuji Film* verwendet. Im eigentlichen lithographischen Schritt wird der Resist anschließend mit elektromagnetischer oder Teilchenstrahlung belichtet. Der dadurch erfolgte Energieeintrag ändert die chemische Struktur des Resists. Insbesondere kommt es zum Aufbrechen bzw. Vernetzen von Polymerketten (Details findet man z.B. in [80,81]), wodurch sich die Löslichkeit der belichteten Bereiche gegenüber einem Lösungsmittel ändert. Man spricht von einem *Positivresist* (*Negativresist*) wenn sich die Löslichkeit der belichteten Bereiche erhöht (erniedrigt). Wird der Resist nun einem Lösungsmittel ausgesetzt, so

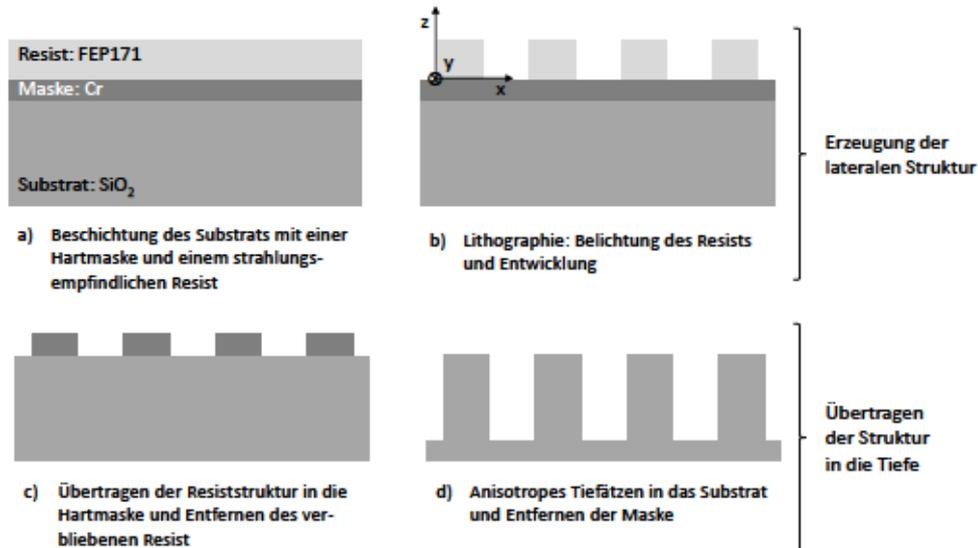


Abb. 1.4: Im Rahmen dieser Arbeit angewendeten Prozessschritte zur Herstellung eines binären Gitters.

wird das belichtete laterale Muster in ein Resistprofil überführt. Das laterale Profil muss nun über Ätzprozesse in das Substrat übertragen werden. Um tiefe binäre Gitter zu erzeugen, muss ein möglichst anisotroper Ätzprozess verwendet werden, welcher einen Materialabtrag nur in z -Richtung zulässt. Als Maß lässt sich der Grad der *Anisotropie* $A_{\text{etch}} = 1 - \frac{r_{xy}}{r_z}$ festlegen, welcher über das Verhältnis der lateralen zur senkrechten Ätzrate r_{xy} bzw. r_z definiert ist. Einen absolut anisotropen Strukturübertrag erhält man für $A_{\text{etch}} = 1$. Der Strukturübertrag wird weiterhin durch einen nicht zu vermeidenden Ätzabtrag der Maske beeinträchtigt, welcher durch die *Selektivität* $S_{\text{etch}} = \frac{r_{\text{Substrat}}}{r_{\text{Maske}}}$ beschrieben wird. Die Selektivität gibt damit das Verhältnis der Ätzrate des zu strukturierenden Materials r_{Substrat} zur Ätzrate des Maskenmaterials r_{Maske} bei einem gegebenen Ätzprozess an [82, S. 234]. Um tiefe Gitter herzustellen muss ein Maskenmaterial gewählt werden, welches gegenüber dem Substratmaterial eine möglichst große Selektivität besitzt. Da bei typischen anisotropen Trockenätzprozessen die Selektivität des Resist gegenüber einem Kieselglassubstrat zu gering ist, um Gitter großer Tiefen zu erzeugen, muss eine zusätzliche Hartmaske verwendet werden. Üblicherweise wird Chrom als Hartmaske verwendet, da dieses (bei den verwendeten reaktiven Ätzprozessen) eine ausreichend hohe Selektivität gegenüber Kieselglas aufweist (vgl. Abb. 1.4). Für die Vielzahl an möglichen physikalischen und chemischen Ätzverfahren stehen sich die Größen Anisotropie und Selektivität jedoch meist diametral entgegen [83, S. 142 ff.]. Dies ist skizzenhaft in Abb. 1.5 illustriert. Das Reaktive Ionenätzen stellt meist einen guten Kompromiss zwischen Anisotropie und Selektivität dar [84]. Für den hier verwendeten Ätzprozess des *Reaktiven Ionenätzens* (RIE) mittels *induktiv gekoppeltem Plasma* (ICP) [85] weist die Materialkomposition aus Resist, Chrom und Kieselglassubstrat sowohl für den Strukturübertrag vom Resist in die Hartmaske, als auch von der Hartmaske in das Substrat, eine ausreichend hohe Selektivität bzw. Anisotropie auf,

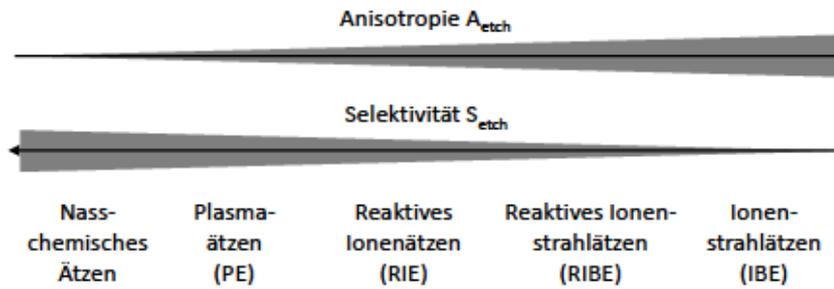


Abb. 1.5: Veranschaulichung der prinzipiellen Abhängigkeit der Selektivität und Anisotropie für unterschiedliche Ätzprozesse. Für die dargestellten Ätzverfahren nimmt der Anteil des chemischen Ätzabtrags von links nach rechts ab und der Anteil des physikalischen Ätzabtrags zu [83, S. 142 ff.].

wenn für das Ätzen der Maske Chlor und Sauerstoff und des Kieselglassubstrats Fluoroform CHF_3 und Octafluorocyclobutan C_4F_8 als reaktives Gas benutzt wird. Im Rahmen dieser Arbeit wurde dafür die Ätzanlage *SI-500-300* der Firma *Sentech Instruments* verwendet.

1.4.2 Elektronenstrahlithographische Strukturierung

Das in Kapitel 1.3 vorgestellte Gitterdesign mit Strukturgrößen von $CD \approx 230\text{nm}$ (engl.: *critical dimension*, CD) und hohen Aspektverhältnissen von $AV \approx 7$ stellt große Anforderungen an den Herstellungsprozess. Die Technologie der *Elektronenstrahlithographie* (engl.: *electron beam lithography*, EBL) hat sich als eine vielseitige Methode etabliert, welche es erlaubt, solche Gitter mit hoher Zuverlässigkeit und Genauigkeit herzustellen. Die sequentielle Schreibstrategie erlaubt es außerdem, Gitter mit definierten Störungen zu erzeugen. Dieser Vorteil soll im Rahmen dieser Arbeit genutzt werden, weshalb die EBL als Technologie zur Herstellung der Gitter ausgewählt wurde. Aufgrund der kurzen *de-Broglie*-Wellenlänge [86, 87] der beschleunigten Elektronen ($\lambda_{e^-} < 10^{-11}\text{m}$) ist das Auflösungsvermögen dieser Technologie nicht beugungsbegrenzt. Stattdessen bestimmen die Elektronenoptiken und Ablenssysteme sowie die Streuung des Elektronenstrahls im Resist bzw. Substrat die minimal erreichbare kleinste Strukturgröße, welche im Sub-10nm-Bereich liegt [88–91].

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Elektronenstrahlenschreiber vom Typ *SB350 OS* der Firma *Vistec* verwendet. Diese Anlage arbeitet mit dem „*Variable shaped beam*“-Prinzip (VSB) [92, 93], bei dem ein Elektronenstrahl mit gaußförmigem lateralem Intensitätsprofil aufgeweitet und anschließend mit Hilfe zweier Rechteckblenden geformt wird (Abb. 1.6). Nachfolgend wird der geformte Strahl (ein sogenannter *Shot* der Dimensionen $\Delta x \times \Delta y$) durch Elektronenoptiken verkleinert und mit elektromagnetischen Ablenssystemen auf der Probe positioniert. Die Größe des Shots kann variiert werden und beträgt maximal $2.5\ \mu\text{m} \times 2.5\ \mu\text{m}$. Δy wird üblicherweise auf $2.5\ \mu\text{m}$ ge-

setzt und für die x -Komponente wird die durch einen Vorhalt¹ v korrigierte Grabenbreite $\Delta x = b + v$ eingestellt. Das Ablenkensystem gliedert sich in 2 Stufen. Das Mikroablenksystem erlaubt eine sehr

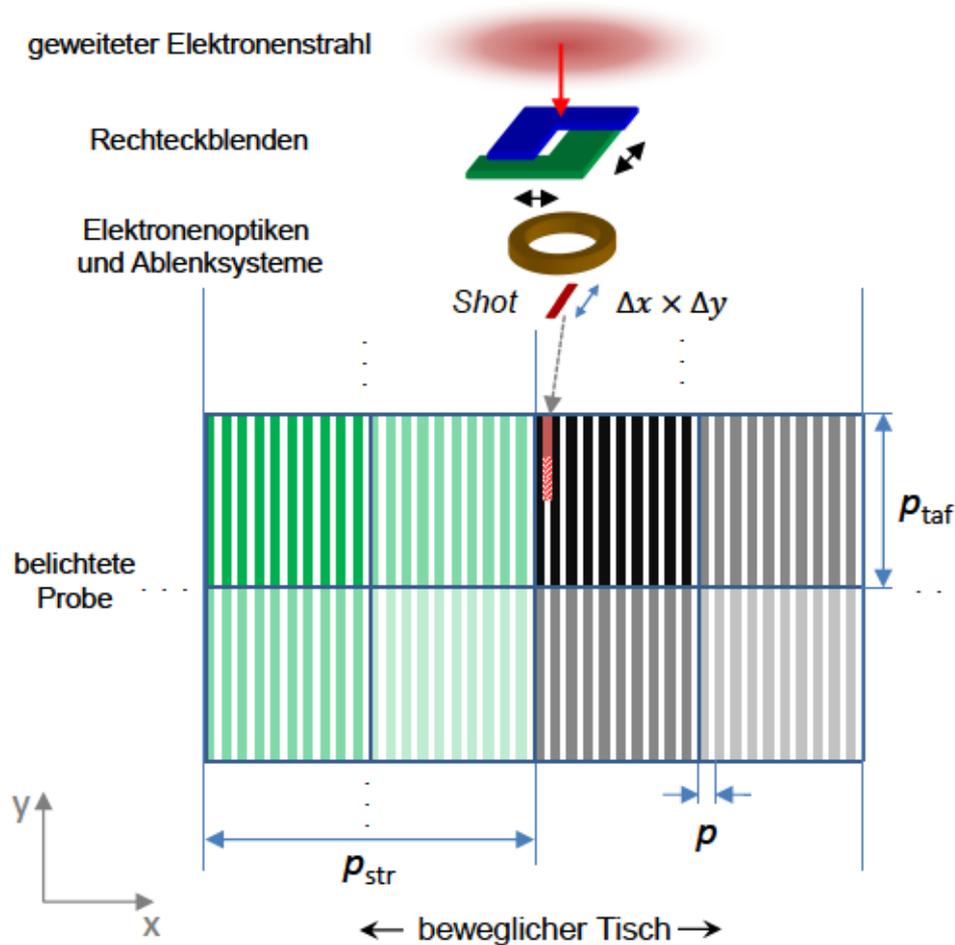


Abb. 1.6: Schema der elektronenstrahlolithographischen Belichtung nach dem „Variable shaped beam“-Prinzip (VSB). Der durch Rechteckblenden geformte Elektronenstrahl (*Shot*) kann innerhalb eines *Teilarbeitsfeldes* (TAF) der Größe $p_{\text{taf}} \times p_{\text{taf}}$ sehr genau positioniert werden. Mit Hilfe gestufter Ablenkensysteme werden die TAFs zunächst zu „Streifen“ (STR) und schließlich zum großflächigen Gitter zusammengesetzt.

genaue Positionierung des Shots innerhalb eines begrenzten Bereichs der Ausdehnung von etwa $35 \mu\text{m} \times 35 \mu\text{m}$, welcher als *Teilarbeitsfeld* (TAF) bezeichnet werden soll. Die Belichtung größerer Bereiche erfordert eine Verschiebung des Teilarbeitsfeldes, was über das Hauptablenksystem geschieht. Die Anordnung der Teilarbeitsfelder ist in x -Richtung begrenzt, in y -Richtung wird der Tisch, der das Substrat trägt, kontinuierlich nachgeführt. Daher trägt dieser Bereich die Bezeichnung „Streifen“ (STR) und besitzt üblicherweise eine Ausdehnung von $p_{\text{str}} = 625 \mu\text{m}$. Die Aneinanderreihung der Streifen zur vollen Gitterfläche geschieht durch mechanische Bewegung des Substrattisches in x -Richtung.

¹Der Vorhalt berücksichtigt die Verbreiterung der Gräben aufgrund der Anisotropie des RIE-ICP-Ätzprozesses und v. a. aufgrund des Überätzens der Chrom-Hartmaske, was dem Aufsteilen der Kanten dient. Für die in dieser Arbeit verwendeten Prozesse muss ein Vorhalt von etwa $v = 50 \text{nm}$ beachtet werden.

Diese „*Stitching*“ genannte, sequentielle Schreibstrategie sorgt für eine große Flexibilität des Elektronenstrahlschreibers hinsichtlich der herstellbaren Mikrostruktur. Allerdings führt dieser Ansatz auch zu sehr hohen Schreibzeiten. Für das in Kapitel 1.3 vorgestellte FLEX-Gitter beträgt die Schreibgeschwindigkeit etwa 5.5 min/cm^2 . Die hohe Auflösung und Flexibilität allerdings prädestinieren die Elektronenstrahlithographie als Fertigungstechnologie für besondere Hochleistungsanwendungen von optischen Gittern und allgemein mikrooptischen Elementen.

Das Zusammensetzen des großflächigen Gitters aus einzelnen Segmenten kann zur Ausbildung von Überperioden im Gitter führen, welche schließlich als deterministische Streulichtartefakte (Gittergeister) in Erscheinung treten. Weiterhin können zufällige Formabweichungen (z.B. Kantenrauheit, welche ihre Ursache u.a. im stochastischem Elektroneneinschlag bei der Belichtung hat, vgl. Kap. 4.1.2) stochastisches Streulicht verursachen. Eine Untersuchung beider Effekte erfordert geeignete experimentelle und theoretische Charakterisierungsmethoden, welche im folgenden Kapitel vorgestellt werden sollen.

2 Methoden zur Charakterisierung des Gitterstreulichts

Für die in dieser Arbeit präsentierten Untersuchungen wird prinzipiell nach folgender Methodik vorgegangen: Zunächst werden die untersuchten Störquellen durch Einführen einer Vielzahl an Störparametern morphologisch beschrieben. Darauf basierend wird die durch die Störquellen hervorgerufene Streulichtverteilung sowohl analytisch im Rahmen der TEA als auch numerisch mit Hilfe optischer Simulationsmethoden (RCWA) untersucht. Die aufgestellten theoretischen Modelle werden schließlich durch winkelaufgelöste Streulichtmessungen verifiziert. In diesem Kapitel soll die zur experimentellen Bestimmung der Streulichtverteilung realisierte Messmethode vorgestellt werden (Kap. 2.1). Außerdem werden in Kap. 2.2 die Grundlagen des verwendeten Simulationsprinzips eingeführt.

2.1 Streulichtmessung

Streulicht an Gittern lässt sich in unterschiedliche Arten unterteilen. Einerseits tritt ein diffuser, kontinuierlicher Streulichtuntergrund auf, welcher im gesamten zweidimensionalen Halbraum verteilt ist. Andererseits führen die Gittergeister zu diskreten Peaks im Streulichtspektrum, welche insbesondere im Nahwinkelbereich um die spektrometrisch nutzbare Beugungsordnung identifiziert werden sollen. Eine simultane Messung des im gesamten Halbraum verteilten Untergrundes und des Nahwinkelbereichs ist messtechnisch sehr schwierig. In dieser Arbeit wurden daher zwei Ansätze verfolgt, welche jeweils eine der beiden Messaufgaben erfüllen. Die Konzepte sollen im Folgenden beschrieben werden. Beide Messmethoden sind auf Streulichtmessung entlang der Dispersionsrichtung des Gitters bei klassischem (nicht-konischem) Einfall beschränkt.

Variante 1 - Messaufbau zur Messung des diffusen Streulichtuntergrunds

Bei Aufbau des Messplatzes wurde sich an den in [34] beschriebenen experimentellen Realisierungen orientiert. Der Streulichtmessplatz sollte demnach folgende Kriterien erfüllen:

1. Der Einfallswinkel θ_i und insbesondere der Streuwinkel θ müssen mit einer hohen Genau-

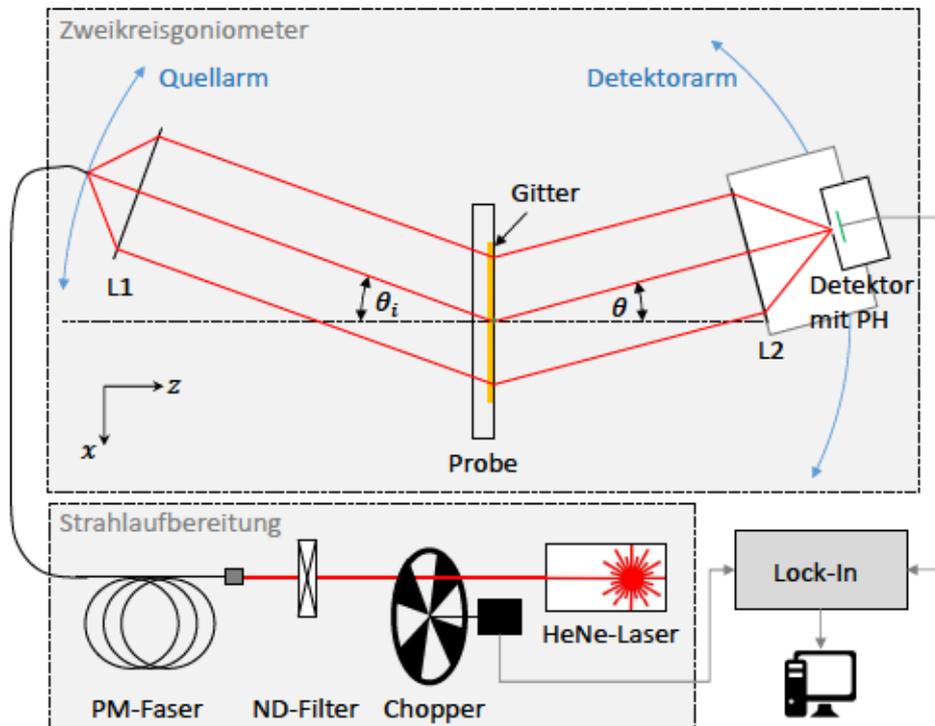


Abb. 2.1: Skizze des Messaufbaus zur experimentellen Bestimmung des Streulichtuntergrunds: Ein Helium-Neon-Laser wird zunächst über ein Chopper-Rad moduliert, mit einem optionalen Neutralfilter auf die gewünschte Intensität abgeschwächt und anschließend in eine polarisationserhaltende Einmodenfaser eingekoppelt. Das andere Ende der Faser befindet sich auf dem Goniometerquellarm. Die Linse L1 kollimiert das Licht auf das Gitter und die kollimierte Streustrahlung wird mittels L2 durch ein Pinhole (PH) auf den Detektor fokussiert.

igkeit einstellbar sein.

2. Die einfallende Strahlung muss sehr schmalbandig und die Polarisation kontrollierbar sein.
3. Die einfallende Strahlung muss eine große Gitterfläche ausleuchten, um auch die Messung großperiodischer Störungen sicherzustellen. Außerdem sollte ein sauberes Strahlprofil gewährleistet werden.
4. Im Strahlengang sollten möglichst wenige optische Elemente verwendet werden, um sekundäre Streulichtquellen zu reduzieren.
5. Der Detektor muss einen sensitiven Detektionsbereich mit einer möglichst kleinen Winkelöffnung besitzen und die Messung von sekundärem Streulicht vermeiden.

Der realisierte Messaufbau zur Bestimmung des diffusen Streulichtuntergrunds ist in Abb. 2.1 gezeigt. Dabei wird die winkelaufgelöste Streuung (engl.: *angle resolved scattering*, ARS) entlang der Dispersionsrichtung des Gitters mit Hilfe eines Zweikreisgoniometers gemessen. Das durch

Piezoaktuatoren kontrollierte Goniometer besteht aus einem Quell- und einem Detektorarm, welche jeweils um $\pm 180^\circ$ um die zentral positionierte Probe rotiert werden können. Die Rotation erfolgt dabei mit einer Genauigkeit von $d\theta \approx 0.001^\circ$. Als Lichtquelle wird ein Helium-Neon-Laser verwendet, der bei einer Wellenlänge von $\lambda = 632.8\text{nm}$ mit einer Halbwertsbreite (engl.: *Full width Half Maximum*, FWHM) von nur 2pm emittiert [94]. Die experimentelle ARS ist somit frei von Dispersionsartefakten aufgrund der Bandbreite der Laserstrahlung. Der verwendete Laser besitzt außerdem ein linear polarisiertes Strahlungsfeld, welches in eine polarisationserhaltende Einmodenfaser (*PM-SM-Faser*) eingekoppelt wird. Das andere Ende der Faser wird auf dem Quellarm des Goniometers befestigt, was eine komfortable Handhabung der einfallenden Strahlung erlaubt. Die Kontrolle der Polarisation erfolgt durch einfaches Drehen des auskoppelnden Faserendes und ohne Verwendung zusätzlicher Elemente wie Polarisatoren. Außerdem liefert die Grundmode der Faser ein sehr gut gaußförmiges Intensitätsprofil. Abbildung 2.2 zeigt eine Langzeitmessung der Laserleistung von etwa 5 Stunden unter Verwendung zusätzlicher *Neutraldichte-filter* (ND-Filter). Nach statistischer Auswertung der Messung lässt sich die zeitliche Stabilität der Laserleistung zu etwa 3% bestimmen. Die Messung der TE-polarisierten Strahlung erfolgte mit einem zusätzlichen Analysator, wodurch der Polarisationskontrast der einfallenden Strahlung zu etwa $P_{TE}/P_{TM} = 3500$ bestimmt werden konnte.

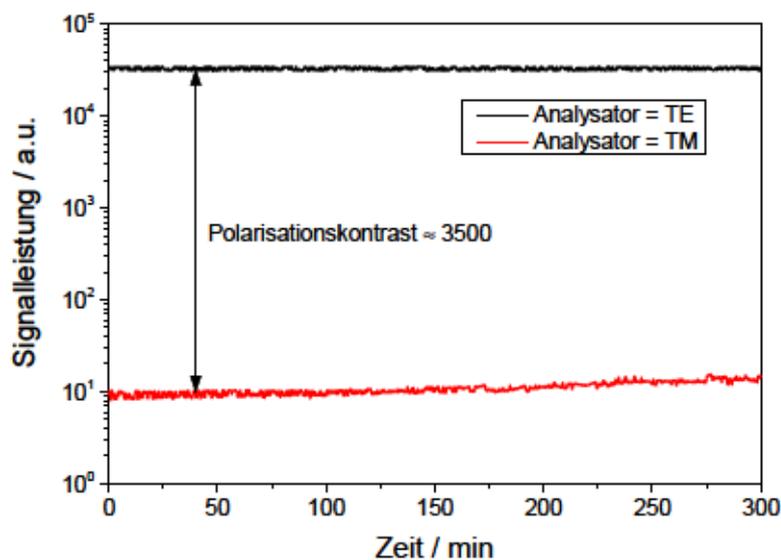


Abb. 2.2: Laserstabilitätsmessung und Bestimmung des Polarisationskontrasts. Die Polarisation vor dem Analysator wurde auf TE eingestellt.

Der Strahl wird schließlich durch eine einfache Linse (L1 in Abb. 2.1) auf einen Durchmesser von etwa 15mm kollimiert und auf die Probe ausgerichtet. Die gestreute Strahlung wird durch Verwendung einer zweiten Linse L2 auf ein Pinhole, welches direkt vor dem Detektor montiert ist, fokussiert. Ein schmaler Pinholedurchmesser vor dem Detektor garantiert, dass nur Signale in einem schmalen Bereich um den eingestellten Streuwinkel gemessen werden. Als Detektor wird ein konventioneller Silizium-Photodiodendetektor der Firma *Linus* verwendet, welcher einen

Dynamikbereich von etwa 4.5 Größenordnungen besitzt. Aufgrund der schwachen Signale der gestreuten Strahlung ist es nötig, nach dem *Lock-in-Prinzip* zu messen [95]. Daher ist zusätzlich ein Chopper zwischen Laser und Faserkopplung positioniert worden. Das so modulierte Messsignal wurde über einen Vorverstärker an den Lock-in-Verstärker weitergegeben und schließlich digital am PC ausgelesen. Die gesamte Steuerung der Proben-, Quell- und Detektorpositionierung kann ebenfalls vom Computer aus kontrolliert werden.

Eine gemessene Signalleistung $P_S(\theta)$ und die Leistung P_i der einfallenden Strahlung liefert schließlich die winkelaufgelöste Streulichtmessung [34]

$$ARS_{\text{exp}}(\theta) = \frac{P_S(\theta)}{P_i \cdot \Omega} = \frac{\eta_S(\theta)}{\Omega}, \quad (2.1)$$

wobei η_S die Effizienz des gemessenen Signals darstellt. Mit diesem Messaufbau ist es möglich, Signale im Effizienzbereich von $\eta_S = 10^{-8}, \dots, 5 \cdot 10^{-4}$ (vgl. Abb. 2.3(a)) zu detektieren: stärkere Signale bringen den Detektor in Sättigung, schwächere Signale verschwinden im thermischen Rauschen. Der Raumwinkel Ω beschreibt den Winkelbereich, über den der Detektor integriert, und kann nach

$$\Omega_{1D} = 2 \arctan \frac{s}{2F} \quad \Omega_{2D} = 4\pi \sin^2 \frac{\Omega_{1D}}{2} \quad (2.2)$$

für 1D- bzw. 2D-Streuung berechnet werden [96, 97], wobei s der Pinholedurchmesser und $F = 5 \text{ cm}$ die Brennweite der Linse L2 ist. Neben der Laserleistung bietet das Pinhole damit die Möglichkeit, den ARS-Messbereich entsprechend der Stärke der gestreuten Strahlung zu variieren. Dies ist in Abb. 2.3(b) demonstriert, welche Signaturen des Streulichtmessplatzes bei Verwendung unterschiedlicher Pinhole-Durchmesser zeigt. Während ein Pinhole mit $s = 800 \mu\text{m}$ (was einem Raumwinkel von $\Omega_{2D} = 2.01 \cdot 10^{-4} \text{ sr}$ entspricht) Streulicht im Bereich $ARS \approx 3 \cdot 10^{-5} \dots 4 \cdot 10^{-1} \text{ sr}^{-1}$ (schwarze Kurve in Abb. 2.3(b)) messbar macht, ermöglicht ein Pinhole mit $s = 20 \mu\text{m}$ ($\Omega_{2D} = 1.27 \cdot 10^{-7} \text{ sr}$) nur die Messung starker Streuung im Bereich $ARS \approx 4 \cdot 10^{-2} \dots 3 \cdot 10^2 \text{ sr}$ (rote Kurve in Abb. 2.3(b)). Wie wir sehen werden, liegt das typische Streulichtniveau, welches bei den Gittern auftritt, genau in dem Bereich, der mit dem $800 \mu\text{m}$ -Pinhole abgedeckt wird.

Statt des Pinholes kann auch ein schmaler Spalt vor den Detektor montiert werden, was vor allem bei 1D-Streulichtmessung und bei sehr eng stehenden Gittergeistern vorteilhaft ist. Für einen Spalt der Dimension $s_x \times s_y$ berechnet sich der 1D- bzw. 2D-Raumwinkel dann nach

$$\Omega_{1D,x/y} = 2 \arctan \frac{s_{x/y}}{2F} \quad \Omega_{2D} = 4 \arcsin \left(\sin \frac{\Omega_{1D,x}}{2} \sin \frac{\Omega_{1D,y}}{2} \right). \quad (2.3)$$

Die Genauigkeit der ARS-Messung wird entsprechend Gleichung (2.1) hauptsächlich durch die Sta-

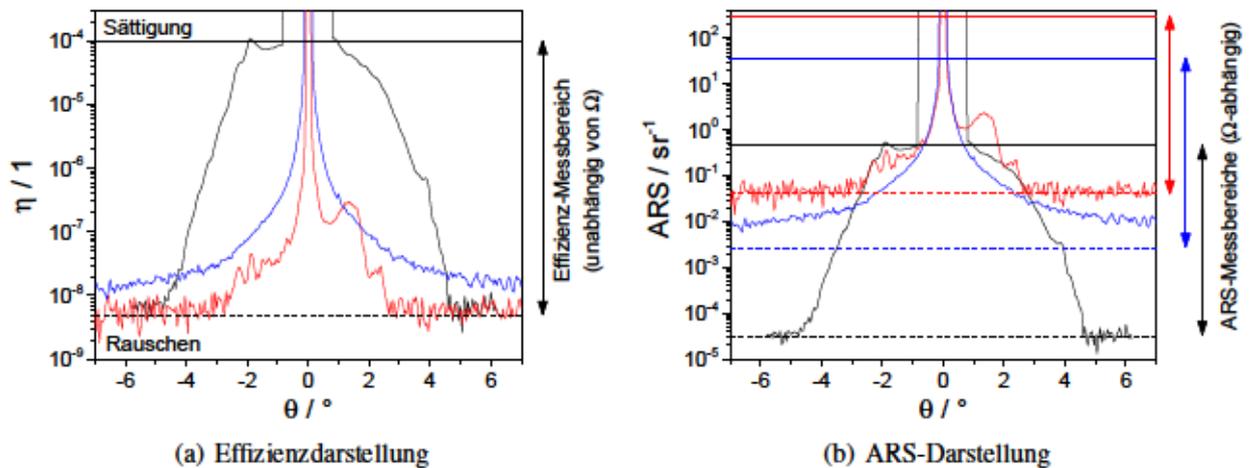


Abb. 2.3: Signatur der verschiedenen Messsysteme in Effizienzdarstellung (a) und ARS-Darstellung (b). Das Detektorrauschen beginnt etwa bei $\eta < 5 \cdot 10^{-9}$, die Sättigung tritt für Signale $\eta > 10^{-4}$ auf. Diese Grenzen sind durch gestrichelte bzw. durchgezogene Linien markiert. Der ARS-Messbereich kann durch den Detektoröffnungswinkel Ω eingestellt werden: Variante 1 mit einem Pinhole des Durchmessers $s = 800 \mu\text{m}$ (schwarz), Variante 1 mit $s = 20 \mu\text{m}$ (rot), Variante 2 mit einem Spalt der Breite $s_x = 50 \mu\text{m}$ (blau).

bilität der Laserleistung bestimmt und liegt demnach bei $\left(\frac{\Delta \text{ARS}}{\text{ARS}}\right)_{\text{exp}} = \frac{\Delta P_s}{P_s} + \frac{\Delta P_i}{P_i} \approx 6\%$. Die Ungenauigkeit bei Bestimmung des Raumwinkels wird vernachlässigt, da die Spalt-/Pinholedimensionen und die Brennweite der Linse sehr genau bekannt sind.

Die Grenzen dieses Messaufbaus liegen darin, deterministische Streulichtartefakte (Gittergeister) in einem engen Winkelbereich um die Nutzordnung zu messen. Die Gittergeister besitzen typischerweise eine Effizienz von $\eta < 10^{-5}$. In diesem Bereich werden sie jedoch vollständig von der Signatur des $800 \mu\text{m}$ -Pinhole-Aufbaus überdeckt (schwarze Kurve in Abb. 2.3(a)). Möglich wäre die Messung der Geisterintensität unter Verwendung eines $20 \mu\text{m}$ -Pinholes. Die Justage des Messaufbaus und insbesondere die Ausrichtung der Dispersionsebene, in der auch die Geister liegen, ist dabei jedoch ungleich schwerer und nicht praktikabel (eine nach aufwändiger Justage erfolgreich durchgeführte Messung zeigt Abb. 2.5). Einen Ausweg liefert eine leichte Variation des Messaufbaus, welche im Folgenden beschrieben wird.

Variante 2 - Messaufbau zur Messung der Gittergeister

Bei den Gittergeistern handelt es sich typischerweise um sehr scharfe und schwache Streulichtartefakte, welche zudem in einem engen Winkelbereich von nur 0.1° um die Nutzordnung auftreten können. Gerade auch der Nahwinkelbereich ist wichtig für die Charakterisierung von Spektrometergittern, weshalb eine aussagekräftige Messung von großem Interesse ist. Die um viele Größenordnungen stärkere Intensität der Nutzordnung gegenüber den Gittergeistern und deren enge Separation im Winkelspektrum macht es allerdings sehr schwierig, die Geister aufzulösen. Der

vorgestellte Messaufbau zur Messung des diffusen Streulichts mit seiner breiten Signatur und seiner relativ großen Detektoröffnung versagt diesbezüglich. Daher ist es nötig, einen speziellen Aufbau maßgeschneidert für die Vermessung der Gittergeister einzurichten. Eine Skizze des realisierten Aufbaus zeigt Abb. 2.4. Prinzipiell gibt es dabei nur wenige Änderungen des schon

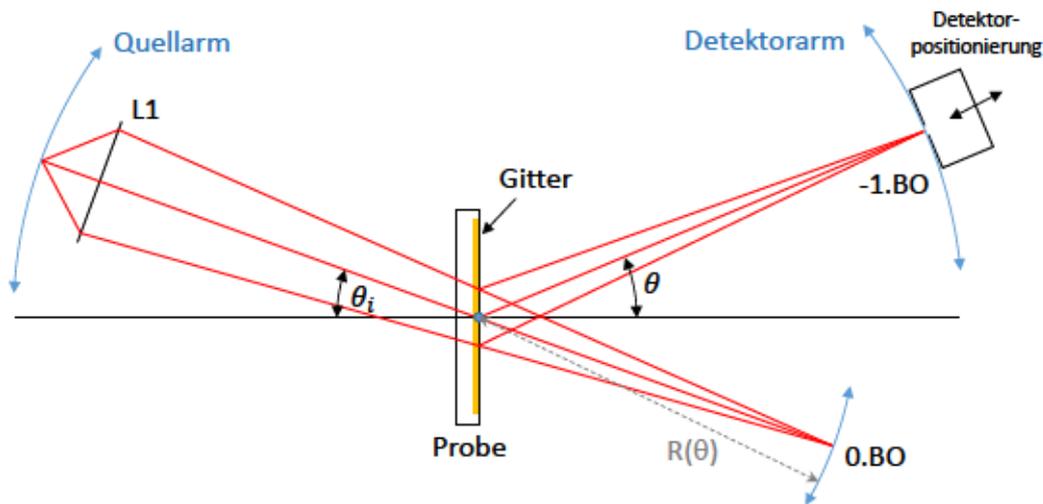


Abb. 2.4: Skizze des Messaufbaus zur Messung der Gittergeister. Bei Fokussierung der einfallenden Strahlung durch die Probe hindurch kommt es zu einer radialen Verschiebung der Fokusebene $R(\theta)$ abhängig vom Streuwinkel θ .

vorgestellten Aufbaus. Einerseits wurde die Linse L2 vor dem Detektor entfernt. Stattdessen wird die Linse L1 so verschoben, dass der Strahl durch die Probe hindurch auf den Detektor fokussiert wird. Weiterhin wird das Pinhole vor dem Detektor durch einen vertikalen Spalt der Dimensionen $50\mu\text{m} \times 2\text{mm}$ ersetzt. Diese Änderungen haben zur Folge, dass eine höhere Winkelauflösung erreicht wird (aufgrund der kleinen horizontalen Spaltdimension) und der Aufbau dennoch justagefreundlich bleibt (aufgrund der größeren vertikalen Spaltdimension). Außerdem reduziert sich die Wirkung der Signatur im Effizienzbereich nahe um das Nutzsignal (siehe blaue Kurve in Abb. 2.3(a)), was also eine Messung der Geister im engen Winkelbereich um die Nutzordnung ermöglicht. Dieser Messaufbau besitzt allerdings zwei bedeutende Nachteile: Einerseits werden multiple Reflexe, die durch Mehrfachreflexion der im Substrat propagierenden Beugungsordnungen entstehen, mit gemessen, was beim ursprünglichen Versuchsaufbau nicht der Fall ist. Andererseits hat die Fokussierung durch das Gitter hindurch zur Folge, dass die Fokusebene der gestreuten Strahlung nicht mehr auf einem Halbkreis mit konstantem Radius sitzt. Stattdessen ist die Fokusebene der $-1.$ BO gegenüber der Fokusebene der $0.$ BO verschoben (siehe Abb. 2.4), entsprechendes gilt für die Gittergeister. Man kann mit diesem Versuchsaufbau also nur in einem begrenzten Winkelbereich von $\approx \pm 10^\circ$ um die interessante Ordnung messen. Diese beiden Effekte sind deutlich in der in Abb. 2.5 dargestellten Beispielmessung zu erkennen. In der Messung tritt

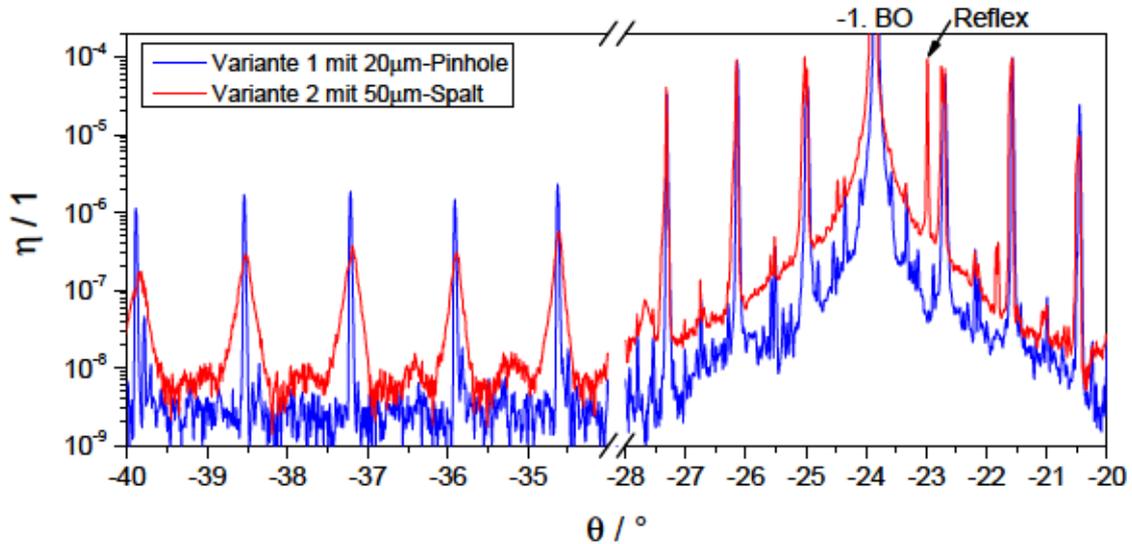


Abb. 2.5: Beispielhafte Streulichtmessung zur Bestimmung der Gittergeister an einem Versuchsgitter (FLEX-Design) mit $p = 667 \text{ nm}$, $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ und $\theta_i = 33^\circ$ (in Luft). Es werden der Messaufbau „Variante 1“ (mit einem Pinhole des Durchmessers $20 \mu\text{m}$) und „Variante 2“ (mit einem Spalt der Dimensionen $50 \mu\text{m} \times 2 \text{ mm}$) verglichen. Die Messung erfolgte in Transmission um die $-1.$ BO bei $\theta_{-1} = -23.8^\circ$.

der zusätzliche Reflex, welcher mit einem Pfeil gekennzeichnet ist, nur bei Messung mit Variante 2 auf, wohingegen genau dieser Peak bei Messung mit Variante 1 verschwindet. Außerdem sieht man bei Variante 2 eine Verbreiterung der Gittergeister mit zunehmendem Abstand von der Nutzordnung, welche auf den Detektor fokussiert wurde. Variante 1 hingegen misst immer scharfe Gittergeister. Bei Verwendung eines sehr kleinen Pinholes ist diese Variante also auch für die Messung der Geister besser geeignet und es gibt augenscheinlich keinen Grund auf Variante 2 zurückzugreifen. Allerdings sind die Anforderungen an die Justage enorm und praktisch nicht realisierbar. Die als blaue Kurve dargestellten Messergebnisse in Abb. 2.5 sind einer höchst peniblen und zeitaufwendigen Justage zu verdanken.

2.2 Grundlagen zur Streulichtsimulation

Zur rigorosen Simulation der gestreuten Strahlung müssen die Strukturabweichungen, welche zur Streuung führen, in der Elementarzelle des RCWA-Algorithmus berücksichtigt werden. Dies kann durch Einführen einer Überperiode $P_x = N_x \cdot p$ realisiert werden, welche eine aus vielen einzelnen Gitterperioden p zusammengesetzte Elementarzelle repräsentiert [98,99]. Dabei müssen die Strukturabweichungen entsprechend des zu untersuchenden Fehlers beim Aneinanderreihen der Einzelperioden in die Überperiode eingebaut werden. Eine solche Elementarzelle als Zusammenschluss mehrerer Grundperioden besitzt dann neben den Hauptbeugungsordnungen des Gitters zusätzliche

Beugungsordnungen, welche als Streulichtordnungen bezeichnet werden sollen. Beispielsweise findet man für das FLEX-Gitter 8 propagierende Beugungsordnungen bei einer aus $N_x = 4$ Grundperioden zusammengesetzten Elementarzelle (siehe Abb. 2.6). Um eine näherungsweise kontinuierliche Streulichtverteilung zu berechnen, muss eine sehr hohe Zahl N_x einzelner Gitterperioden einbezogen werden. Die Auswirkung des Parameters N_x ist in Abb. 2.6 gezeigt: mit wachsendem

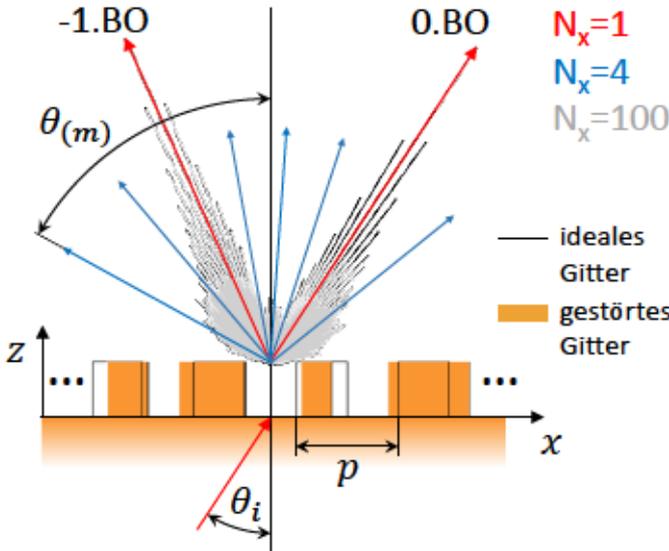


Abb. 2.6: Illustration zur rigorosen Streulichtsimulation: Bei Erhöhung der Zahl N_x der Gitterperioden in der RCWA-Elementarzelle treten zusätzliche Beugungsordnungen auf. Bei einem ungestörten Gitter tragen diese keine Energie, bei einer Störung werden sie zu Streulichtordnungen.

N_x treten auch immer mehr Streulichtordnungen auf und im Grenzfall von $N_x \rightarrow \infty$ erhält man einen quasi-kontinuierlichen Streulichtuntergrund. Für endliches N_x lassen sich die Streulichtordnungen mit $m = m_{\min}, \dots, m_{\max}$ durchnummerieren und der zugehörige Streuwinkel θ_m kann mit Hilfe der Gittergleichung berechnet werden¹. Im Falle eines idealen ungestörten Gitters besitzen all die Störordnungen eine Intensität von Null. In diesem Fall treten nur die Hauptbeugungsordnungen des Gitters auf und man erhält das gleiche Ergebnis wie für $N_x = 1$. Im Falle irgendeiner beliebigen Störung (z.B. Segmentierungsfehler oder stochastische Störungen aufgrund der Kantenrauheit) der strengen Gitterperiodizität tragen die zusätzlichen Streulichtordnungen jedoch einen gewissen Energiebetrag und damit eine Beugungseffizienz η_m . Analog zur Streulichtmessung kann die ARS bestimmt werden, indem die Beugungseffizienz der Störordnung durch ihren zugehörigen Öffnungswinkel geteilt wird, was näherungsweise durch

$$ARS_{1D}(\theta_m) \approx \frac{\eta_m}{\left| \frac{\theta_{m-1} + \theta_m}{2} - \frac{\theta_{m+1} + \theta_m}{2} \right|} = \frac{2\eta_m}{|\theta_{m-1} - \theta_{m+1}|} \quad (2.4)$$

gegeben ist. Da es sich hierbei um ein eindimensionales Modell handelt, sind die Einheiten von ARS_{1D} in rad^{-1} gegeben.

¹Der Index m wird später weggelassen und der Streuwinkel entlang der Dispersionsrichtung des Gitters nur noch mit θ bezeichnet.

Dieses Prinzip lässt sich analog in die zweite Dimension erweitern, indem in Richtung der Gitterstege eine charakteristische Größe $P_y = N_y \cdot \Delta y$ festgelegt wird. Die Elementarzelle ist dann zweidimensional und besitzt die laterale Ausdehnung $P_x \times P_y$. Diese Struktur generiert im RCWA-Algorithmus nun Beugungsordnungen sowohl innerhalb der Dispersionsebene (xz -Ebene in Abb. 2.7) als auch senkrecht dazu (in *Kreuzdispersionsrichtung*), wobei wieder zwischen den Hauptbeugungsordnungen des Gitters und den Streulichtordnungen unterschieden werden kann. Analog zum 1D-Fall kann auch hier jeder Störordnung (m_x, m_y) ein Raumwinkel $\Delta\Omega_{m_x m_y}$ zugeordnet werden. Entsprechend wird die 2D-Streuung nach

$$ARS_{2D}(\theta_{m_x m_y}, \theta_{y, m_x m_y}) \approx \frac{\eta_{m_x m_y}}{\Delta\Omega_{m_x m_y}} \quad (2.5)$$

berechnet, wobei $\eta_{m_x m_y}$ die Effizienz der (m_x, m_y) -ten Streuordnung und $\theta_{y, m_x m_y}$ den Beugungswinkel in Kreuzdispersionsrichtung repräsentiert. Die zweidimensionale diffuse Streuung nach Gleichung (2.5) trägt damit die Einheit sr^{-1} . Da wir hauptsächlich am Streulicht in der Dispersionsebene (xz -Ebene) interessiert sind, kann der Index m_y weitestgehend Null gesetzt werden, was auch $\theta_{y, m_x 0} = 0$ zur Folge hat. Abbildung 2.7 zeigt die in dieser Arbeit verwendeten Konventionen zur Bezeichnung der Streuwinkel.

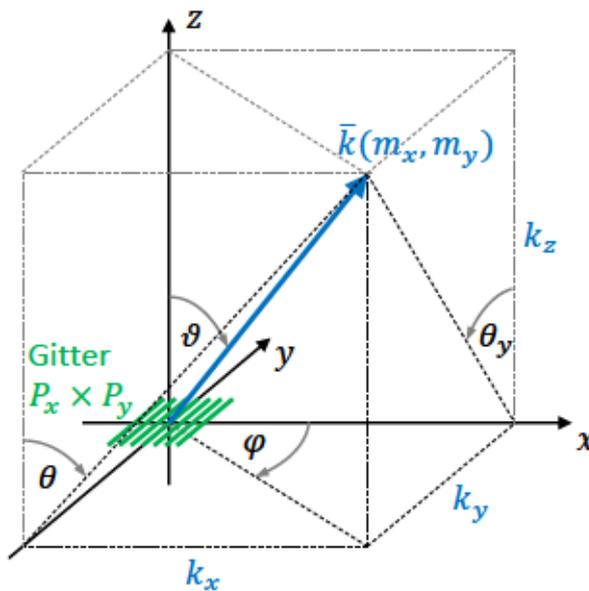


Abb. 2.7: Konventionen für die in dieser Arbeit verwendeten Bezeichnungen der Streuwinkel im Fall konischer Streuung. Im meist untersuchten Fall klassischer (nicht konischer) Streuung wird $m_y = 0$ und damit $\theta_y = 0$.

Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass die Indizes m bzw. m_x und m_y bei Angabe des Streuwinkels nicht von Wichtigkeit sind und daher im weiteren Verlauf dieser Arbeit weggelassen werden. Der Streuwinkel entlang der Dispersionsrichtung des Gitters wird dann analog zu den Streulichtmessungen mit θ und der Streuwinkel senkrecht zur Dispersionsebene wird mit θ_y bezeichnet.

3 Deterministisches Streulicht: Gittergeister

Deterministisches Streulicht, welches im Winkelspektrum in Form diskreter Störpeaks auftritt, hat seinen Ursprung in periodischen Störungen der Gittergeometrie. Die Ursache solcher periodischen Fehler liegt direkt in der Herstellungstechnologie begründet. Im diesem Kapitel soll eine möglichst umfassende Untersuchung der Gittergeister präsentiert werden. Der Schwerpunkt wird dabei auf die elektronenstrahlolithographische Gitterherstellung gelegt, die Ergebnisse sind jedoch verallgemeinerbar auf jede Technologie, die vergleichbare periodische Störungen in der Gittergeometrie verursacht. Zunächst wird in Kap. 3.1 das Streulichtspektrum eines Gitters analysiert und die auftretenden Überperioden identifiziert. In Kap. 3.2 erfolgt eine theoretische Beschreibung der verschiedenartigen periodischen Fehler im Rahmen einfacher analytischer Modelle. Eine experimentelle Verifizierung der theoretischen Untersuchungen an Gittern mit künstlich eingeschriebenen Fehlern und rigorose Erweiterung auf tiefe Phasengitter erfolgt in Kap. 3.3. Darauf basierend soll der exakte Fehler, der beim Elektronenstrahlschreiben auftritt, festgestellt werden. Schließlich werden in Kap. 3.4 Untersuchungen vorgestellt, die eine Reduktion der Gittergeister zum Ziel haben.

3.1 Segmentierungsfehler als Quelle der Gittergeister

Die sequentielle Schreibstrategie in der Elektronenstrahlolithographie (EBL) und die damit verbundene *Segmentierung* des Gitters in Streifen und Teilarbeitsfelder kann zur Ausbildung von Gittergeistern in der optischen Funktion des Gitters führen [100, 101]. Aufgrund unvermeidbarer Segmentierungsfehler beim Zusammensetzen der Teilsegmente zum großflächigen Gitter kommt es zur Ausprägung der Überperioden $p_{\text{shot}} \approx 2.5 \mu\text{m}$, $p_{\text{taf}} \approx 35 \mu\text{m}$ und $p_{\text{str}} \approx 625 \mu\text{m}$ neben der dominierenden Gitterperiode p . Wie in Abb. 1.6 zu erkennen, wirkt die Shot-Periode nur senkrecht zur Dispersionsrichtung des Gitters, wohingegen die TAF- und STR-Periode auch Gittergeister in Dispersionsrichtung hervorrufen.

Eine etablierte Methode, die Auswirkungen der Segmentierungsfehler zu reduzieren, ist die

Technik der „*Multipassbelichtung*“ [102, 103]. Bei diesem Ansatz wird der Resist mehrfach belichtet, wobei die Dosis in jedem einzelnen Belichtungsschritt entsprechend der Anzahl der Belichtungen N_{MP} auf $D = D_0/N_{MP}$ reduziert wird. Die Gesamtblendendosis D_0 bleibt damit unverändert, jedoch erfolgt in jeder Teilbelichtung eine laterale Verschiebung der Segmente um dem N_{MP} -ten Bruchteil ihrer Größe bezüglich der Position der Segmente der vorhergegangenen Teilbelichtung. Der Parameter N_{MP} wird dabei *Pass-Zahl* genannt. Auf diese Weise kommt es zu einem Überlapp der Segmente der N_{MP} Teilbelichtungen und so zu einem Mittelungseffekt, der die Artefakte an den Stoßstellen der Gittersegmente reduzieren soll. Um die Auswirkungen der Multipassbelichtung auf die Ausprägung der Gittergeister zu überprüfen, wurden zwei Gitter der Periode $p = 667$ nm mit unterschiedlicher Passzahl belichtet und anschließend ihre winkelaufgelöste Streuung in einem engen Bereich von $\Delta\theta = \pm 5^\circ$ um die -1 . Beugungsordnung (BO, $\theta_{-1} \approx -23.8^\circ$) gemessen [101]. Aufgrund der zwei unterschiedlichen Überperioden p_{taf} und p_{str}

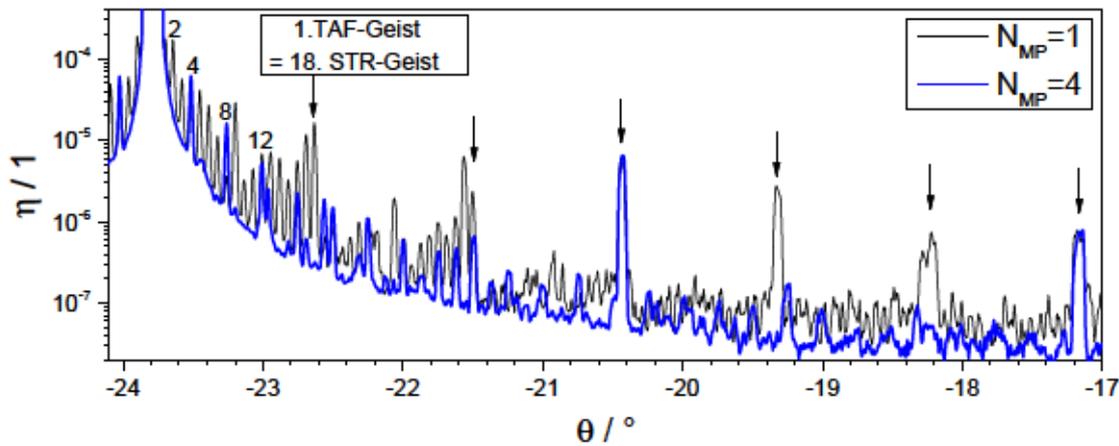


Abb. 3.1: Vergleich winkelaufgelöster Streulichtmessungen in Transmission (bei $\lambda = 633$ nm, $\theta_i = 33^\circ$ in Luft) um die -1 . BO (bei $\theta_{-1} \approx -23.8^\circ$) zweier Gitter (FLEX-Design mit $p = 667$ nm), die mit unterschiedlichen Pass-Zahlen N_{MP} gefertigt wurden. Die STR-Geister wurden nummeriert und die TAF-Geister sind durch schwarze Pfeile gekennzeichnet.

lassen sich in Abb. 3.1 zwei unterschiedliche Arten von Gittergeistern identifizieren, welche entsprechend als *TAF-Geister* bzw. *STR-Geister* bezeichnet werden sollen. Die schwarzen Pfeile in Abb. 3.1 kennzeichnen die TAF-Geister, wohingegen die STR-Geister beginnend bei der -1 . BO durchnummeriert wurden. Aus der Streulichtmessung des 1-Pass-Gitters lässt sich ableiten, dass die Positionen genau eines TAF-Geistes und eines STR-Geistes mit dem Beugungswinkel θ_{-1} der -1 . BO übereinstimmen. Eine Erklärung dieser Beobachtung liefert ein genauer Blick in die Schreibstrategie des Elektronenstrahlschreibers: Da ein einzelner Shot niemals zweigeteilt wird, muss die TAF-Größe immer ein ganzzahliges Vielfaches der Gitterperiode sein. Zusätzlich ist die STR-Größe immer ein Vielfaches der TAF-Größe. Beide Werte liegen jedoch immer so nah wie möglich an den Vorgaben von $p_{taf} = 35$ μ m und $p_{str} = 625$ μ m. Dann ergibt sich für die tatsächlich

belichteten Segmentgrößen

$$p_{\text{taf}} = 52 \cdot p = 34.684 \mu\text{m} \quad (3.1)$$

$$p_{\text{str}} = 18 \cdot p_{\text{taf}} = 624.312 \mu\text{m}. \quad (3.2)$$

Jeder 18. STR-Geist muss also mit einem TAF-Geist übereinstimmen, was in Abb. 3.1 leicht überprüft werden kann. Entsprechend sollte der $-52.$ TAF-Geist mit der $-1.$ BO übereinstimmen, was aber in der präsentierten Messung nicht überprüft werden kann, da der Bezug zur 0. BO fehlt.

Eine Konsequenz der Multipassbelichtung stellt die Reduktion der Segment-Größen um den Faktor N_{MP} auf effektive Segment-Größen $p_{\text{taf/str,eff}} = p_{\text{taf/str}}/N_{\text{MP}}$ dar. Folglich sollten für größere N_{MP} weniger Gittergeister in der Streulichtmessung auftreten. Dieser Effekt ist deutlich in der in Abb. 3.1 dargestellten blauen Messkurve des 4-Pass-Gitters zu sehen. Verglichen mit der schwarzen Kurve des 1-Pass-Gitters verbleibt nur jeder vierte STR-Geist und die dazwischenliegenden Geister verschwinden fast vollständig. Ein ähnlicher Effekt kann für die TAF-Geister beobachtet werden, wohingegen hier jeder dritte TAF-Geist verbleibt. Dies ist auf einen komplexeren Algorithmus bei der Datengenerierung für die Schreibanlage zurückzuführen und soll hier nicht weiter ausgeführt werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Multipassbelichtung die Zahl der Gittergeister effektiv reduziert, aber die verbleibenden Geister eine nahezu unveränderte Intensität aufweisen. Der Segmentierungsfehler kann dadurch also nicht korrigiert werden, stattdessen bewirkt diese Technik eher eine Problemverlagerung. Es ist daher wünschenswert, die genaue Ausprägung und Stärke der auftretenden Segmentierungsfehler festzustellen und darauf aufbauend mögliche Strategien zu deren Reduktion abzuleiten. Eine umfangreiche theoretische und experimentelle Untersuchung der Auswirkungen verschiedenartiger Segmentierungsfehler auf das Streulichtspektrum wird in den folgenden Kapiteln durchgeführt.

Die Ausbildung von Überperioden, die Gittergeister in der optischen Funktion von Gittern generieren, ist nicht nur auf die elektronenstrahlolithographische Herstellung von Gittern beschränkt. Solche Störungen können prinzipiell in allen sequentiellen Technologien auftreten, wobei darunter das Zusammensetzen eines großflächigen Gitters aus einer Vielzahl kleinerer Segmente einheitlicher Größe verstanden wird. Generell fallen darunter alle *Step-and-repeat*-Technologien und sogar die sogenannten *Continuous-Path*-Technologien [81]. Neben der EBL kann es daher in der Projektionslithographie, der DUV-Lithographie [46, 47], der Nanoimprint-Lithographie [104, 105] und dem Laser-Direktschreiben [44] auftreten. Doch auch in geritzten Gittern sind Gittergeister eine häufig beobachtete Erscheinung [76–79] und sogar in holographisch hergestellten Gittern wurden schon solche Artefakte gemessen [50, 51].

3.2 Analytische Untersuchung der Segmentierungsfehler

In Abschnitt 3.1 haben wir gesehen, dass die Gittergeister eindeutig auf die segmentierende Schreibstrategie zurückzuführen sind, welche das Gitter in Teilsegmente unterteilt, diese nacheinander belichtet und zum großflächigen Gitter zusammensetzt („*Stitching*“). Aufgrund von Imperfektionen beim Zusammensetzen manifestieren sich diese Teilsegmente im fertigen Gitter als Überperioden. Um Aussagen über die genaue Ausprägung dieser Überperioden treffen zu können, sollen im Folgenden zunächst theoretische Untersuchungen im Rahmen der Fourieroptik unter Anwendung der TEA durchgeführt werden. Dabei sollen die Untersuchungen ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf nur eine Überperiode p_{seg} ¹ und die folgenden Segmentierungsfehler beschränkt werden:

1. Stochastischer Segment-Positionierungsfehler $\sigma_{\text{seg},p}$

Unvermeidlicher Fehler, welcher bei Ausrichtung der Einzelsegmente zueinander auftritt und die Abweichung $\Delta p_{\text{seg},l}$ der Position des l -ten belichteten Segments von seiner gewünschten Position beschreibt (siehe Abb. 3.2(a)). Der Fehler wird dabei als gaußförmig verteilt angenommen mit Mittelwert $\langle \Delta p_{\text{seg},l} \rangle = 0$ und Standardabweichung $\sigma_{\text{seg},p}$. Dieser Fehler führt zu einer konstanten Verschiebung aller Stege innerhalb eines Segments, welche aber von Segment zu Segment stochastisch variiert.

2. Stochastischer Segment-Belichtungsfehler $\sigma_{\text{seg},b}$

Angelehnt an den stochastischen Positionierungsfehler ist ein zufälliger Fehler der Belichtungs dosis vorstellbar. Ein solcher Fehler wirkt sich auf die Graben- bzw. Stegbreite innerhalb eines Teilsegments aus, welche stochastisch um ihren Zielwert b variiert. Diese Abweichung kann ebenfalls durch eine Gaußverteilung mit der Standardabweichung $\sigma_{\text{seg},b}$ beschrieben werden.

3. Deterministischer Segment-Positionierungsfehler Δp_{seg}

Systematischer Fehler, welcher eine konstante Lücke ($\Delta p_{\text{seg}} > 0$) bzw. Überlapp ($\Delta p_{\text{seg}} < 0$) zwischen benachbarten Segmenten beschreibt. Da dieser Fehler immer gleich groß ist, führt er zu einer Änderung der Segmentperiode $p_{\text{seg}} = N \cdot p + \Delta p_{\text{seg}}$, wobei N die Zahl der Gitterperioden pro Segment beschreibt.

4. Systematischer Shotformatfehler C_b

Auch wenn ein perfektes laterales Ausrichten der Segmente stattfindet, können in realen Gittern Störungen innerhalb der Segmente auftreten. Eine systematische Ortsabhängigkeit

¹Bei der theoretischen Untersuchung wird nur eine einfache Segmentierung untersucht, wohingegen der Elektronenstrahlschreiber eine zweifache Segmentierung zeigt. Diese zwei speziellen Segmente wurden in Kap. 3.1 als TAF und STR bezeichnet. Hier wird allgemein die Bezeichnung „Segment“ (seg) verwendet.

der Belichtungsdosis innerhalb eines Segments, welche sich für jedes Segment auf die gleiche Art wiederholt, führt beispielsweise zu einer entsprechenden Variation der Grabenbreite (siehe Abb. 3.2(d)) und damit zu einer Ausbildung der Segmente als Überperiode im Gitter. Ganz allgemein können solche Fehler, welche die Graben- bzw. Stegbreite beeinflussen, als systematische Fehler des Shotformats bezeichnet werden. Um die Analyse solcher Fehler möglichst allgemein zu halten soll von einer quadratischen Modulation der Grabenbreite innerhalb eines Segments ausgegangen werden, was als Taylor-Approximation erster Ordnung eines beliebigen symmetrischen Profils verstanden werden kann:

$$b_n = b_0 + C_b \cdot \left(n - \frac{N}{2}\right)^2, \quad (3.3)$$

wobei b_0 die ungestörte Grabenbreite des idealen Gitters darstellt und $n = 1, \dots, N$ ($N = 52$ im Falle des FLEX-Gitters, vgl. Gl. (3.1)). Siehe auch Tab. A.2 in Anhang A) die Gitterperioden innerhalb eines Segments durchnummeriert. Der Parameter C_b ist ein Maß für die Stärke des Dosisfehlers und kann sowohl positiv als auch negativ sein.

5. Systematischer Shotpositionierungsfehler C_p

Analog zum systematischen Shotformfehler kann eine systematische Störung der Shotpositionierung innerhalb eines Segments auftreten. Entsprechend soll auch dieser Fehler als symmetrisch angenommen werden und kann nach

$$\Delta p_n = C_p \cdot \left(n - \frac{N}{2}\right)^2 \quad (3.4)$$

beschrieben werden, wobei Δp_n die Abweichung der n -ten Steg- bzw. Grabenposition von ihrer Idealposition darstellt und $n = 1, \dots, N$ die Gitterperioden innerhalb eines Segments durchnummeriert (vgl. Tab. A.2 in Anhang A). Analog zu C_b beschreibt der Parameter C_p die Stärke des Positionierungsfehlers und kann sowohl positiv als auch negativ sein.

Um die analytische Untersuchung möglichst einfach zu halten, werden die folgenden Ableitungen im Rahmen der Fourieroptik (Fraunhofernäherung) unter Anwendung der TEA ausgeführt und auf einfache Amplitudengitter beschränkt [100]. Die TEA beschränkt die Gültigkeit der Ableitungen auf Gitter, deren Perioden viel größer und deren Gittertiefen viel kleiner als die einfallende Wellenlänge ($p \gg \lambda \gg d$) sind. In Abschnitt 3.3 werden wir jedoch sehen, dass die Ergebnisse im Falle der Gittergeister auch auf tiefe Phasengitter ($d > \lambda$) mit Perioden im Bereich der Wellenlänge $p \approx \lambda$ übertragbar sind. Weiterhin muss erwähnt werden, dass im Rahmen der folgenden Untersuchung nur eindimensionale Gitterprofile betrachtet werden. Modulationen entlang der Gitterstege werden also nicht betrachtet.

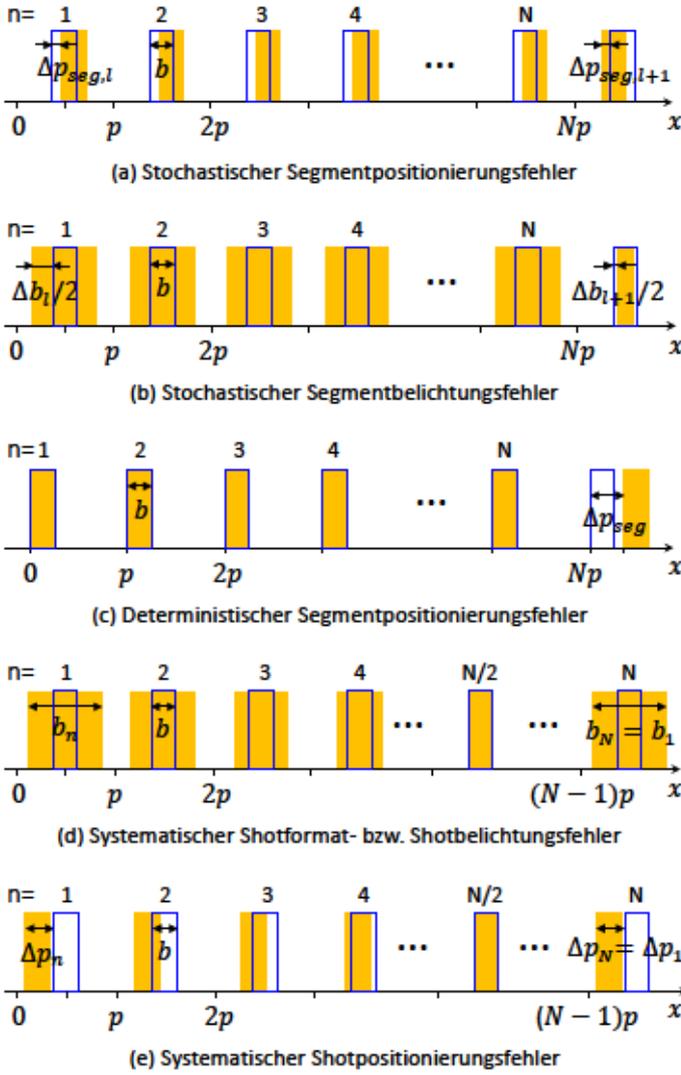


Abb. 3.2: Illustration möglicher Segmentierungsfehler, die beim Zusammensetzen der Segmente im sequentiellen Herstellungsprozess auftreten können. Die gelben Rechtecke repräsentieren die gestörte Gitterstruktur, wohingegen die blau umrandeten Rechtecke die ungestörten Struktur markieren.

3.2.1 Stochastischer Positionierungs- und Belichtungsfehler

Die Transmissionsfunktion $g(x)$ eines Gitters mit stochastischer Störung der Segmentpositionierung kann mathematisch durch eine Summe von Rechteckfunktionen beschrieben werden, wobei jede einzelne Rechteckfunktion einer einzelnen Gitterperiode entspricht. Bei Aneinanderreihung von L Gittersegmenten, welche jeweils eine Ausdehnung von N Gitterperioden besitzen, ergibt sich die Doppelsumme

$$g(x) = \sum_{l=0}^{L-1} \sum_{n=0}^{N-1} \Pi \left(\frac{x - (lnp + np + \frac{p}{2} + \Delta p_{seg,l})}{b + \Delta b_l} \right), \quad (3.5)$$

wobei $\Delta p_{seg,l}$ die stochastische Verschiebung der Stege innerhalb des l -ten Segments, die mit der Verteilungsbreite $\sigma_{seg,p}$ variiert, beschreibt und Δb_l entsprechend den Fehler in der Grabenbreite (mit Verteilungsbreite $\sigma_{seg,b}$, vgl. Tab. A.2). Hierbei wird angenommen, dass die Störungen $\Delta p_{seg,l}$ und Δb_l so klein sind, dass kein Überlapp benachbarter Gitterlinien auftritt. Die Fouriertransfor-

mation der Transmissionsfunktion wird nun nach

$$G(f) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) \cdot e^{-i2\pi fx} dx \quad (3.6)$$

berechnet, wobei f die Ortsfrequenz darstellt. Algebraische Umformungen dieser Gleichung führen letztendlich zu einem Erwartungswert

$$\langle |G(f)|^2 \rangle = e^{-4\pi^2 f^2 \sigma_{\text{seg},p}^2} \cdot |\Psi(f;NL)|^2 + L(1 - e^{-4\pi^2 f^2 \sigma_{\text{seg},p}^2}) \cdot |\Psi(f;N)|^2, \quad (3.7a)$$

für ein $\sigma_{\text{seg},p}$ -gestörtes Gitter, welcher die qualitative Intensitätsverteilung der gebeugten (und gestreuten) Strahlung im Fernfeld beschreibt. Eine ausführliche Herleitung dieser Gleichung findet man in [100]. $\Psi(f;N)$ stellt hierbei das Beugungsbild eines ungestörten Amplitudengitters mit N beleuchteten Spalten dar, d.h.

$$\Psi(f;N) = b \cdot \text{sinc}(fb) \cdot \frac{\sin(\pi N p f)}{\sin(\pi p f)} \cdot e^{-i\pi f N p}. \quad (3.7b)$$

Gleichung (3.7a) besteht aus zwei Termen, wobei der erste Term das Beugungsbild eines Gitters mit NL beleuchteten Perioden beschreibt. Der Multiplikator $e^{-4\pi^2 f^2 \sigma_{\text{seg},p}^2}$ stellt einen Dämpfungsfaktor dar, welcher den Intensitätsverlust der Beugungsordnungen beschreibt und für $\sigma_{\text{seg},p} \ll p$ näherungsweise konstant eins ist. Für sehr große $L \rightarrow \infty$ liefert dieser Term die ausgeprägten Beugungsordnungen des ungestörten Gitters. Der zweite Term hingegen beschreibt das aufgrund der Störung $\sigma_{\text{seg},p}$ induzierte Streulicht. Eine Taylorentwicklung erster Ordnung des Streulichtterms um $\sigma_{\text{seg},p} = 0$ liefert den Zusammenhang

$$\langle |G(f)|^2 \rangle = e^{-4\pi^2 f^2 \sigma_{\text{seg},p}^2} \cdot |\Psi(f;NL)|^2 + 4L\sigma_{\text{seg},p}^2 \sin^2(\pi b f) \cdot \frac{\sin^2(\pi N p f)}{\sin^2(\pi p f)}. \quad (3.7c)$$

Für das $\sigma_{\text{seg},b}$ -gestörte Gitter findet man entsprechend

$$\langle |G(f)|^2 \rangle = e^{-\pi^2 f^2 \sigma_{\text{seg},b}^2} \cdot |\Psi(f;NL)|^2 + L\sigma_{\text{seg},b}^2 \cos^2(\pi b f) \cdot \frac{\sin^2(\pi N p f)}{\sin^2(\pi p f)}, \quad (3.8)$$

wobei hier lediglich ein schwächerer Dämpfungsfaktor auftritt und statt der Sinusfunktion im Streulichtterm findet man nun die Kosinusfunktion.

Eine graphische Darstellung der von Gleichung (3.7c) und (3.8) prognostizierten winkelaufgelösten Streuung zeigt Abb. 3.3 für ein Gitter mit Überperiode $p_{\text{seg}} = 52p$, $p = 1 \mu\text{m}$, $b = 250 \text{ nm}$ und verschiedene $\sigma_{\text{seg},p/b}$. Die Grafik zeigt keine Gittergeister in Form scharf separierter Peaks, stattdessen erscheint ein diffuser Streulichtuntergrund, welcher regelmäßig verteilte lokale Mini-

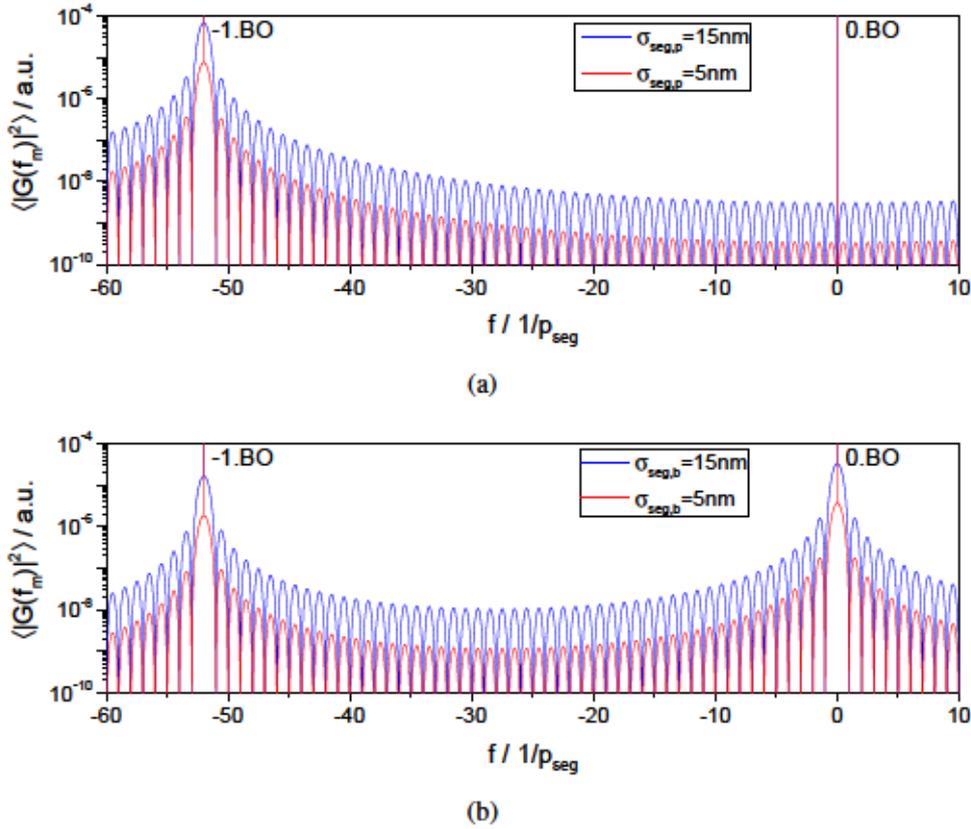


Abb. 3.3: (a) Fernfeld-Beugungsbild nach Gl. (3.7c) mit den Gitterparametern $p = 1 \mu\text{m}$, $b = 250 \text{ nm}$ und $N = 52$ und variierender Störung $\sigma_{\text{seg},p}$. (b) Fernfeld-Beugungsbild nach Gl. (3.8) für variierende Störung $\sigma_{\text{seg},b}$.

ma im Streulichtspektrum aufweist. Diese Minima fallen streng auf eine Intensität von null ab und sind exakt an den Positionen

$$f_m = \frac{m \cdot k_{\text{seg}}}{2\pi} = \frac{m}{p_{\text{seg}}} \quad (3.9)$$

der zu erwartenden Gittergeister zu finden, wobei im vorliegenden Fall $N = 52$, $m \in \mathbb{Z}$, $m \neq 52$ gilt. Weiterhin kann man erkennen, dass das Streulicht nicht gleichverteilt im Spektrum auftritt. Insbesondere steigt es in der Nähe der -1 . BO (bei $m = 52$) um mehr als 3 Größenordnungen an, während es beim $\sigma_{\text{seg},p}$ -gestörten Gitter um die 0 . BO (bei $m = 0$) auf einem konstant niedrigen Niveau verbleibt. Ein detaillierter Vergleich zeigt sogar, dass die 0 . BO direkt in einem lokalen Minimum sitzt, wohingegen die -1 . BO mit dem lokalen Streulichtmaximum zusammenfällt. Beim $\sigma_{\text{seg},b}$ -gestörten Gitter hingegen steigt das Streulicht um die 0 . BO ebenso stark an und es tritt kein Minimum bei $m = 0$ auf. Stattdessen findet sich dort sogar das globale Streulichtmaximum. Dieser Unterschied ist auf den Kosinusterm in Gl. (3.8) zurückzuführen.

Dieses Streulichtverhalten lässt sich auch anschaulich verstehen. Der stochastische Positio-

nierungsfehler $\sigma_{\text{seg},p}$ fungiert dabei als Maß für die Kohärenz zwischen den zusammengesetzten Segmenten. Je größer $\sigma_{\text{seg},p}$ wird, desto schwächer wird die Kohärenz. Dabei ist es aufschlussreich, die beiden Extremfälle vollständiger Kohärenz ($\sigma_{\text{seg},p} = 0$) und keiner Kohärenz ($\sigma_{\text{seg},p} \rightarrow \infty$) zu betrachten. Für $\sigma_{\text{seg},p} = 0$ sind alle Segmente „in Phase“ und Gl. (3.7a) liefert die ungestörte Gitterfunktion $\langle |G(f)|^2 \rangle = |\Psi(f;NL)|^2$ ohne Auftreten von Streulicht. Bei vollständigem Verlust der Kohärenz jedoch entkoppeln die optischen Funktionen der L Segmente und ihre einzelnen Intensitätsmuster addieren sich. Als Beugungsbild erhält man dann die summierte Intensitätsverteilung von L ungestörten Gittern mit N beleuchteten Perioden $\langle |G(f)|^2 \rangle = L|\Psi(f;N)|^2$. Ein solches Gitter liefert verschmierte Hauptbeugungsordnungen und $N - 2$ Nebenmaxima bzw. $N - 1$ Minima, welche streng auf Null abfallen (entsprechend der Interferenzfunktion in Gl. (1.5) [53, S.320]). Diese Nebenmaxima und Minima beobachten wir auch im Fall $\sigma_{\text{seg},p} \ll p$ als Streulichtuntergrund, siehe Abb. 3.3. Um das Streulichtspektrum für kleine Störungen korrekt zu beschreiben, sind nur noch die in Gl. (3.7a) auftretenden Dämpfungsterme notwendig, welche eine Wichtung zwischen $|\Psi(f;NL)|^2$ und $|\Psi(f;N)|^2$ vornehmen und gewissermaßen den „Kohärenzgrad“ zwischen den Segmenten berücksichtigen. Im Falle eines stochastischen Belichtungsfehlers kann man auf analoge Art und Weise argumentieren.

3.2.2 Deterministischer Positionierungsfehler

Da es sich bei diesem Segmentierungsfehler um einen systematischen Fehler handelt, der für jedes Segment gleich ist, kann die Transmissionsfunktion des Gitters als einfache Summe über die N Perioden eines Segments aufgeschrieben werden:

$$g(x) = \sum_{n=0}^{N-1} \Pi\left(\frac{x - (np + \frac{b}{2})}{b}\right). \quad (3.10)$$

Dies ist die simple Rechteckfunktion eines ungestörten, aus N Spalten bestehenden Amplitudengitters (siehe Abb. 3.2). Die periodische Fortsetzung dieses Segments zum großflächigen Gitter wird in der Berechnung der Fourierkoeffizienten berücksichtigt, indem die Integrationsgrenzen auf die Ausdehnung des Segments $x = 0 \dots p_{\text{seg}}$ beschränkt werden. Lediglich bei der modifizierten Segmentgröße $p_{\text{seg}} = Np + \Delta p_{\text{seg}}$ zeigt sich schließlich die (konstante) Störung Δp_{seg} . Das Beugungsbild kann nun durch Berechnung der Fourierkoeffizienten von Gl. (3.10) entsprechend

$$G_m = \int_0^{Np + \Delta p_{\text{seg}}} g(x) \cdot e^{-imk_{\text{seg}}x} dx \quad (3.11)$$

bestimmt werden. Der Index m indiziert dabei die der Überperiode p_{seg} entsprechenden Beugungsordnungen - also die Gittergeister. Die Auswertung von Gl. (3.11) liefert schließlich die diskrete

Funktion

$$|G_m|^2 = b^2 \cdot \text{sinc}^2\left(mk_{\text{seg}} \frac{b}{2\pi}\right) \cdot \frac{\sin^2\left(Nmk_{\text{seg}} \frac{p}{2}\right)}{\sin^2\left(mk_{\text{seg}} \frac{p}{2}\right)} \quad (3.12a)$$

$$= \left| \Psi\left(m \cdot \frac{k_{\text{seg}}}{2\pi}; N\right) \right|^2 \quad (3.12b)$$

mit dem von Δp_{seg} abhängigen Gittervektor $k_{\text{seg}} = \frac{2\pi}{Np + \Delta p_{\text{seg}}}$. Eine graphische Darstellung der von Gleichung (3.12a) beschriebenen Streuung zeigt Abb. 3.4 für ein Gitter mit Überperiode $p_{\text{seg}} = 52p$, $p = 1 \mu\text{m}$, $b = 250 \text{ nm}$ und unterschiedlich starken Störungen Δp_{seg} . Die dargestellten

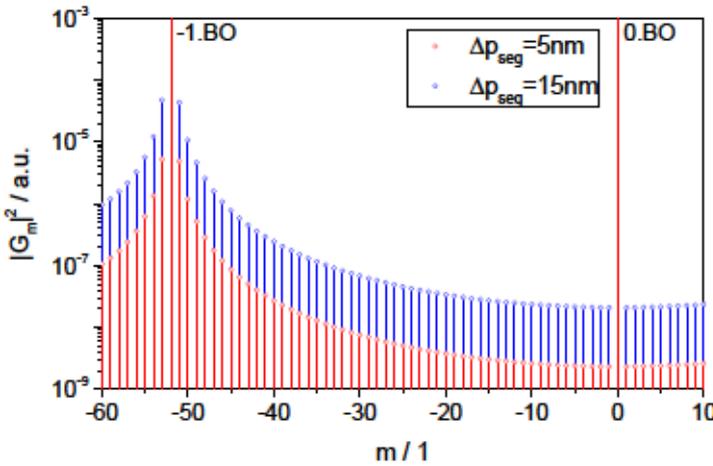


Abb. 3.4: Fernfeld-Beugungsbild mit den Gitterparametern $p = 1 \mu\text{m}$, $b = 250 \text{ nm}$ und $N = 52$ und variierender Störung Δp_{seg} .

Kurven wurden dabei auf die Intensität der $-1.$ BO (bei $m = -52$) normiert. Im Gegensatz zum stochastischen Positionierungsfehler (vgl. Abb. 3.3) gibt es nun keinen homogenen Streulichtuntergrund, jedoch treten scharfe diskrete Gittergeister auf. Ihre Positionen im Frequenzraum sind auch hier durch Gleichung (3.9) bestimmt, jedoch mit gestörter Überperiode $p_{\text{seg}} = Np + \Delta p_{\text{seg}}$. Für $\Delta p_{\text{seg}} \ll p$ stimmen ihre Positionen näherungsweise mit den Streulichtminima des stochastischen Positionierungsfehlers überein (vgl. Abb. 3.3). Neben diesem offensichtlichen Unterschied verhalten sich die Streulichtkurven von deterministischem und stochastischem Positionierungsfehler jedoch sehr ähnlich. So steigt die Intensität der gestreuten Strahlung in der Nähe der $-1.$ BO signifikant an, wohingegen sie um die $0.$ BO auf einem konstant niedrigen Niveau verbleibt. Weiterhin führt eine Vergrößerung der Störung um den Faktor 3 in beiden Fällen zu einer Erhöhung des Streulichtniveaus um den Faktor 9 (vgl. Abb. 3.4 und 3.3).

Auch im Falle des deterministischen Positionierungsfehlers ist es möglich, das Streulichtverhalten anschaulich zu verstehen. Die Funktion (3.12b) beschreibt diskrete Beugungsordnungen an den Stellen $f = \frac{m}{p_{\text{seg}}}$, deren Intensität durch die optische Funktion $|\Psi(f; N)|^2$ eines ungestörten Gitters mit N beleuchteten Perioden bestimmt wird. Dies wird verständlicher, wenn man Glei-

chung (3.12b) als kontinuierliche Funktion

$$|G(f)|^2 = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta\left(f - \frac{m}{p_{\text{seg}}}\right) \cdot |\Psi(f; N)|^2 \quad (3.12c)$$

aufschreibt, in der $|\Psi(f; N)|^2$ als Einhüllende der durch $\delta(f - m/p_{\text{seg}})$ gegebenen diskreten Ordnungen wirkt. Für $\Delta p_{\text{seg}} = 0$ fallen die Delta-Peaks direkt mit den Minima der einhüllenden Funktion zusammen und die Geister haben eine Intensität von Null (siehe Abb. 3.5). Für wachsendes

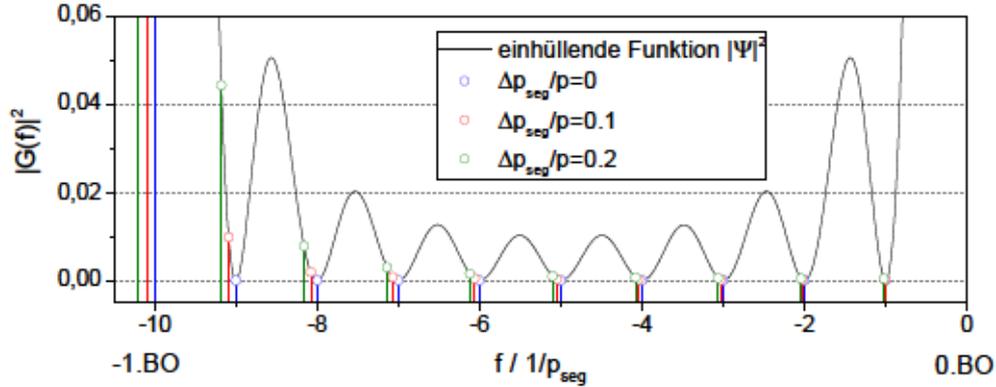


Abb. 3.5: Illustration zur anschaulichen Erklärung der Streulichtverteilung aufgrund eines deterministischen Segmentpositionierungsfehlers, wobei für die einhüllende Funktion lediglich die Interferenzfunktion (vgl. Gl. (1.5)) $|\Psi|^2 = \sin^2(\pi f) / [N^2 \sin^2(\pi f/N)]$ mit $N = 10$ gesetzt wurde.

Δp_{seg} wandern die Peaks allerdings immer weiter aus den Nullstellen der Einhüllenden heraus, und zwar umso weiter je größer m ist. Dies hat zur Folge, dass auch die Intensität der Geister mit m wächst. Nahe um die 0. BO werden die Nebenmaxima der einhüllenden Funktion mit wachsendem $|f|$ zunächst kleiner, was dem Anwachsen der Gittergeister entgegenwirkt, sodass sie dort auf einem konstanten Niveau verbleiben.

3.2.3 Systematischer Shotformat- und Shotpositionierungsfehler

Auch hier kann die Transmissionsfunktion aufgrund der angenommenen Systematik der Fehler als sich wiederholende Summe über die N Perioden innerhalb eines Segments modelliert werden

$$g(x) = \sum_{n=0}^{N-1} \Pi\left(\frac{x - (np + \frac{p}{2} + \Delta p_n(C_p))}{b_n(C_b)}\right), \quad (3.13)$$

wobei die systematischen Fehler durch Gl. (3.3) und (3.4) und ihre Ausprägungsstärke durch $C_{b/p}$ gegeben ist. Eine Illustration dieses Strukturmodells ist in Abb. 3.2 dargestellt und die qualitative Intensitätsverteilung der dadurch hervorgerufenen Gittergeister ist durch die Fourierkoeffizienten G_m von Gl. (3.13) gegeben. Deren detaillierte algebraische Berechnung findet sich in [100] und

liefert für ein nur durch einen Shotformatfehler gestörtes Gitter

$$G_m(C_b) = \Psi\left(m\frac{k_{\text{seg}}}{2\pi}; N\right) + e^{-imk_{\text{seg}}\frac{p}{2}} \cdot \cos\left(\frac{mk_{\text{seg}}b}{2}\right) \times \sum_{n=0}^{N-1} \Delta b_n \cdot e^{-imk_{\text{seg}}np}, \quad (3.14)$$

wobei Ψ wieder nach Gleichung (3.7b) definiert ist. Die Gittergeister eines in der Shotpositionierung systematisch gestörten Gitters werden entsprechend durch

$$G_m(C_p) = \Psi\left(m\frac{k_{\text{seg}}}{2\pi}; N\right) - 2ie^{-imk_{\text{seg}}\frac{p}{2}} \cdot \sin\left(\frac{mk_{\text{seg}}b}{2}\right) \times \sum_{n=0}^{N-1} \Delta p_n \cdot e^{-imk_{\text{seg}}np} \quad (3.15)$$

analytisch beschrieben. Beide Gleichungen sind sehr ähnlich und unterscheiden sich qualitativ nur durch die Kosinus- bzw. Sinusfunktion. Eine numerische Auswertung des Betragsquadrates der Fourierkoeffizienten $|G_m^2|$ ist in Abb. 3.6 dargestellt. Auch diese Belichtungsfehler führen zu Git-

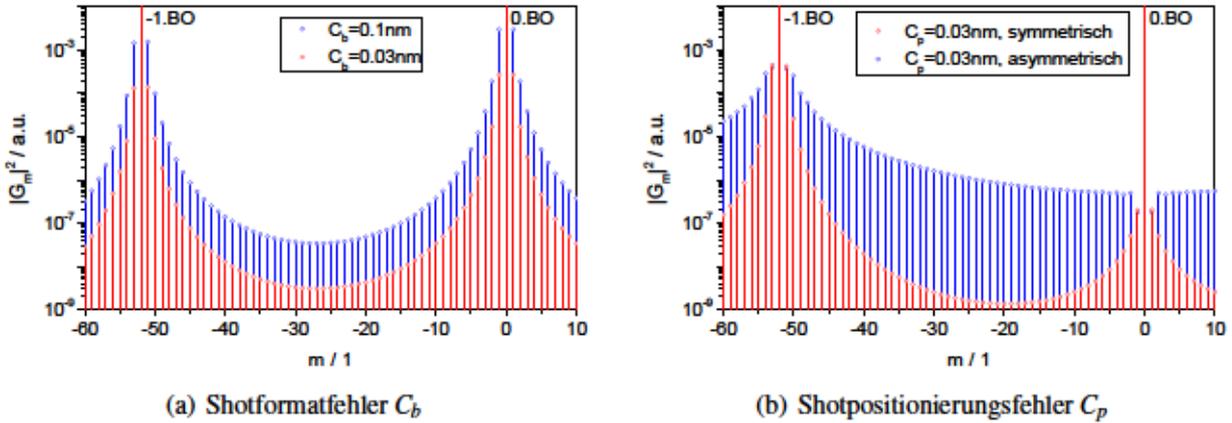


Abb. 3.6: (a) Fernfeld-Beugungsbild nach Gl. (3.14) mit den Gitterparametern $p = 1 \mu\text{m}$, $b = 250 \text{ nm}$ und $N = 52$ und variierender Störung C_b . (b) Fernfeld-Beugungsbild nach Gl. (3.15) für symmetrischen und asymm. Fehler $C_p = 0.03 \text{ nm}$.

tergeistern in Form deutlicher Spitzen im Streulichtspektrum. Im Gegensatz zu den vorher untersuchten Segmentierungsfehlern findet man hier jedoch eine starke Zunahme der Geisterintensität sowohl um die -1 . als auch um die 0 . BO des Gitters. Die Zunahme der Geister um die 0 . BO ist für den Shotpositionierungsfehler deutlich schwächer ausgeprägt, da der Sinusterm in Gl. (3.15) dem Anwachsen der Geister für $m \rightarrow 0$ entgegen wirkt. Zwischen den Hauptbeugungsordnungen brechen die Geister in ihrer Intensität um mehr als 4 Größenordnungen ein. Bei einer Änderung des Störparameters $C_{b/p}$ bleiben die beobachteten Charakteristiken unverändert. Lediglich die Gesamtintensität des Störfeldes wird durch $C_{b/p}$ beeinflusst.

Die Gleichungen (3.14) und (3.15) sind sehr allgemeingültig und bieten die Möglichkeit die qualitative Intensitätsverteilung jeder beliebigen systematischen Störung der Shotposition und des Shotformats (oder noch allgemeiner: der Grabenposition und der Grabenbreite) schnell und ein-

fach numerisch zu berechnen. Dabei zeigt sich, dass schon eine leichte Variation des Shotpositionierungsfehlers deutliche Auswirkungen auf den Intensitätsverlauf der Gittergeister hat. Statt des über ein Segment symmetrischen Positionierungsfehlers entsprechend Gl. (3.4) wurde ein asymmetrischer Fehler definiert durch

$$\Delta p_n = \begin{cases} C_p \cdot \left(n - \frac{N}{2}\right)^2, & \text{für } n < \frac{N}{2} \\ -C_p \cdot \left(n - \frac{N}{2}\right)^2, & \text{für } n \geq \frac{N}{2} \end{cases} \quad (3.16)$$

untersucht und dessen Streulichtspektrum in Abb. 3.6(b) für $C_p = 0.03 \text{ nm}$ dargestellt. Schon diese leichte Änderung führt dazu, dass das zugehörige Streulichtspektrum kaum noch von den Geistern, welche durch einen deterministischen Positionierungsfehler der Segmente (Abb. 3.4) generiert werden, unterscheidbar ist.

3.2.4 Fazit

Die aufgezeigte Analyse der verschiedenen Segmentierungsfehler, welche eine Überperiode im Gitter erzeugen können, zeigt, dass jeder Fehler spezifische Streulichtartefakte im Fernfeld-Spektrum des Gitters generiert. Dabei ist zunächst bemerkenswert, dass ein stochastischer Positionierungsfehler nur einen diffusen Streulichtuntergrund erzeugt, jedoch nicht für die scharfen Intensitätsspitzen verantwortlich ist, als welche die Gittergeister in der Messung beobachtet und definiert wurden. Stattdessen generiert dieser Fehler sogar streng auf Null abfallende Streulichtminima an den erwarteten Geisterpositionen. Statt stochastischer Segmentierungsfehler müssen also systematische Fehler für die Gittergeister verantwortlich sein. Die untersuchten systematischen Fehler zeigen ein deutlich unterscheidbares Streulichtverhalten und eine Streulichtmessung kann folglich dazu beitragen, den im Herstellungsprozess auftretenden Fehler ausfindig zu machen¹.

Der skalare Ansatz im Fraunhofer-Limit vernachlässigt Propagationseffekte im Gitterbereich und ist daher begrenzt auf Gitter, welche eine viel größere Periode als die Wellenlänge besitzen. Diese Einschränkung ist gültig für die Überperiode p_{taf} und p_{str} der elektronenstrahlolithographisch gefertigten Gitter, jedoch nicht für die Gitterperiode $p = 667 \text{ nm}$ und Tiefe $d = 1639 \text{ nm}$ des in dieser Arbeit untersuchten Phasengitters. In den folgenden Abschnitten soll daher zunächst untersucht werden, inwiefern die Ergebnisse auf tiefe, kleinperiodige Gitter übertragbar sind, um anschließend die Segmentierungsfehler bei der elektronenstrahlolithographischen Herstellung des FLEX-Gitters zu identifizieren.

¹Auch wenn ein eindeutiges Identifizieren des Belichtungsfehlers nicht möglich sein sollte, so kann der mögliche Fehler zumindest stark eingegrenzt werden.

3.3 Segmentierungsfehler bei tiefen Phasengittern

3.3.1 Gitter mit künstlichen Segmentierungsfehlern

Das Ziel dieses Abschnittes ist es, die Anwendbarkeit des analytischen Modells auf tiefe Phasengitter zu prüfen. Hierfür werden 3 Gitter mit verschiedenen Segmentierungsfehlern sowohl im Experiment als auch im Rahmen rigoroser Simulationen untersucht. Das Gitterdesign entspricht dabei den Vorgaben des monolithischen FLEX-Gitters mit optischen Konstanten von Kieselglas $n = 1.457$ bei der Untersuchungswellenlänge $\lambda = 633 \text{ nm}$. Die Überperiode wurde auf $p_{\text{seg}} = p_{\text{taf}} = 34.684 \text{ nm}$ festgelegt, was dem 52-fachen der Gitterperiode entspricht und die hergestellten Gitter wurden mit künstlichen Segmentierungsfehlern ausgestattet. Dabei wurden die Belichtungsdaten entsprechend eines

1. stochastischen Positionierungsfehlers mit $\sigma_{\text{seg}} = 5 \text{ nm}$
2. deterministischen Positionierungsfehlers mit $\Delta p_{\text{seg}} = 15 \text{ nm}$
3. systematischen Shotformatfehlers mit $C_b = 0.03 \text{ nm}$

modifiziert. Die Ergebnisse der rigorosen Simulationen und der Streulichtmessungen sind in Abb. 3.7 dargestellt. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der rigorosen und experimentellen Untersuchung. Insbesondere bestätigt sich die Vorhersage des analytischen Modells zum qualitativen Verlauf der Gittergeister im Winkelspektrum auch im Falle der tiefen Phasengitter: Der stochastische Fehler zeigt einen kontinuierlichen Streulichtuntergrund mit Einbrüchen an den Geisterpositionen wohingegen der deterministische Positionierungsfehler und der Shotformatfehler wohldefinierte Geister generieren. Im Falle des Shotformatfehlers fällt eine Abweichung der Messung von der Simulation auf. Der monotone Verlauf der simulierten Gittergeister kann im Experiment nicht bestätigt werden, welches stattdessen eine scheinbar stochastische Schwankung der Geisterintensitäten um die simulierten Geister zeigt. Die Ursache dieser Diskrepanz liegt im minimalen Inkrement des Shotformats von 1 nm . Die Shotformatfehler Δb_n aus Gl. (3.14) kann also nur ein ganzzahliges Vielfaches dieses Inkrements sein, wird in der Simulation entsprechend Gl. (3.3) jedoch als kontinuierlich angenommen. Passt man die Simulation entsprechend an die experimentellen Bedingungen an, so erhält man einen ähnlich schwankenden Intensitätsverlauf der Gittergeister (Abb. 3.7(c)).

Offensichtlich lässt sich der qualitative Verlauf der Gittergeister auch für das in diesem Abschnitt untersuchte tiefe Phasengitter im Rahmen der TEA beschreiben. Eine Begründung für dieses Verhalten liegt in der im Vergleich zur Wellenlänge großen Periode der für die Geister verantwortlichen Überstruktur. Diese Periode erfüllt weitgehend die Bedingung der dünne-Elemente-

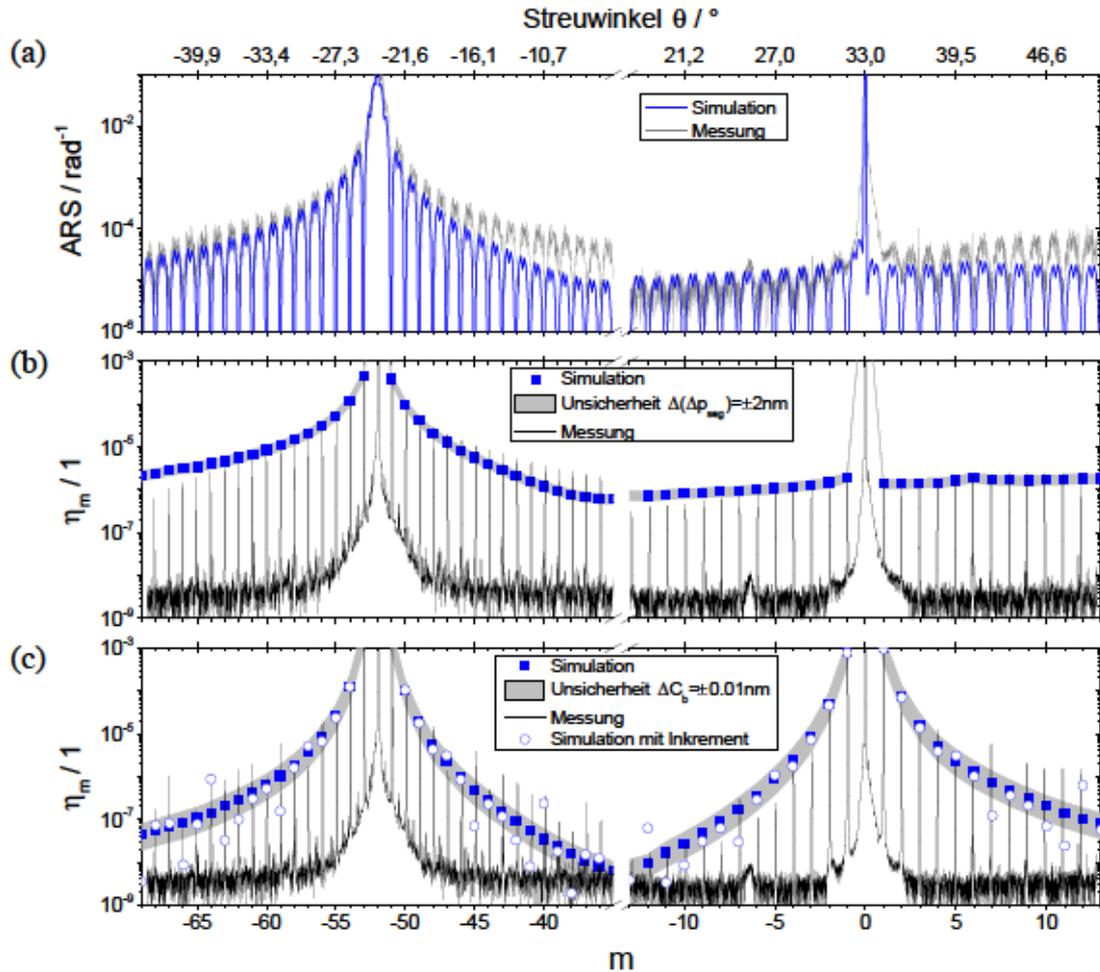


Abb. 3.7: ARS-Simulations- und Messergebnisse des FLEX-Gitters mit künstlich induzierten Segmentierungsfehlern: (a) Stochastischer Positionierungsfehler $\sigma_{\text{seg}} = 5 \text{ nm}$. (b) Deterministischer Positionierungsfehler $\Delta p_{\text{seg}} = 15 \text{ nm}$. (c) Systematischer Shotformatfehler $C_b = 0.03 \text{ nm}$. Die Graphen sind jeweils in einem Winkelbereich von etwa $\pm 15^\circ$ um die -1 . und 0 . BO dargestellt, welche bei $m = -52$ ($\theta = -23.8^\circ$) und $m = 0$ ($\theta = \theta_i = 33^\circ$) lokalisiert sind.

Approximation. Um diese Beobachtung weiter zu verifizieren, soll am Beispiel des systematischen Belichtungsfehlers die Abhängigkeit der Gittergeister von der Polarisation, von der Wellenlänge und vom Gittertyp (Transmissionsgitter, Reflexionsgitter) untersucht werden. Die simulierten Streulichtspektren sind exemplarisch in Abb. 3.8 zusammengefasst. Darin zeigt sich, dass der qualitative Verlauf der Gittergeister im Wesentlichen durch die Art des Fehlers bestimmt wird. Parameter wie Wellenlänge, Polarisation und Gittertyp zeigen nur einen marginalen Einfluss. Unabhängig von diesen Parametern zeigt jede Kurve in Abb. 3.8 eine Zunahme der Geister um die Beugungsordnungen, wie es auch im Rahmen der TEA für den systematischen Shotformatfehler prognostiziert wurde. Dies wurde analog für die anderen Segmentierungsfehler festgestellt. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der qualitative Verlauf der Gittergeister mit Hilfe simpler analytischer Modelle im Rahmen der Fourieroptik vorhergesagt werden kann.

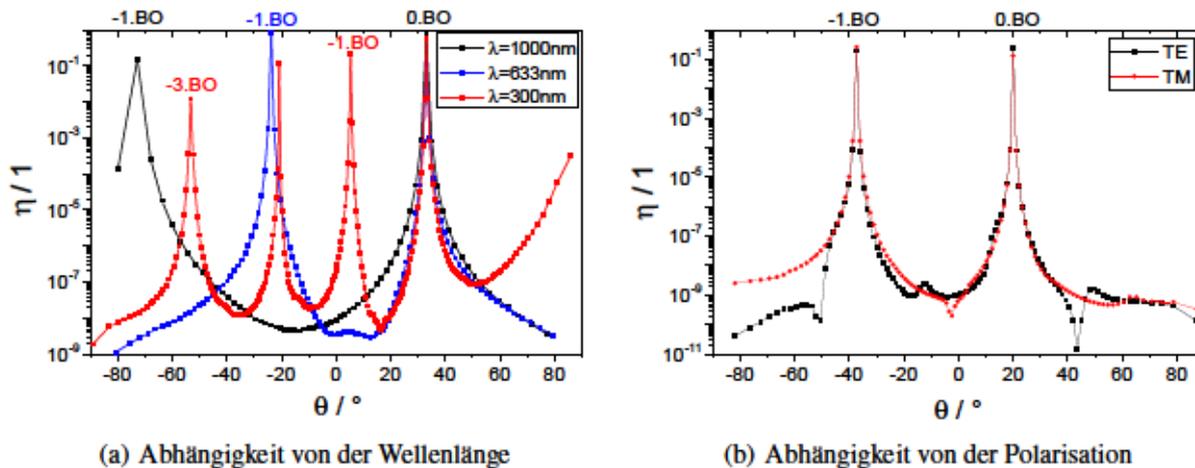


Abb. 3.8: Die mit der RCWA simulierten Streulichtspektren zeigen die Abhängigkeit der Gittergeister von der Wellenlänge, von der Polarisation und vom Gittertyp für einen systematischen Shotformatfehler der Stärke $C_b = 0.03 \text{ nm}$: (a) Geister beim FLEX-Gitter (in Transmission) für verschiedene λ bei $\theta_i = 33^\circ$ (in Luft). (b) Geister für die Resiststruktur des FLEX-Gitters (vgl. Abb. 1.4) in Reflexion für unterschiedliche Polarisationen bei $\lambda = 633 \text{ nm}$ und $\theta_i = 20^\circ$ (in Luft).

3.3.2 Identifikation der Segmentierungsfehler im Elektronenstrahlschreiber

In den vorigen Abschnitten konnte gezeigt werden, dass die Auswirkungen der Segmentierungsfehler auf das Streulichtspektrum sogar für tiefe Phasengitter innerhalb der TEA beschreibbar sind. Weiterhin wurde gefunden, dass die möglichen Segmentierungsfehler, die im Elektronenstrahlschreiber auftreten können, einen eindeutigen „Fingerabdruck“ im Streulichtspektrum des Gitters hinterlassen. Es bietet sich also die Möglichkeit, den vorrangig auftretenden Fehler, der bei elektronenstrahlolithographischer Herstellung auftritt, mit Hilfe von Streulichtmessungen zu identifizieren. Ein solches Vorgehen besitzt offensichtlich 2 prinzipielle Nachteile: Einerseits kommt es im Streulichtspektrum immer zu einer Mischung von möglicherweise gleichzeitig auftretenden Fehlern. Andererseits ist es möglich, dass nicht alle Fehler in der vorherigen Untersuchung erfasst wurden und unbekannte Effekte das Streulichtspektrum überlagern. Nichtsdestotrotz lassen sich die möglichen Fehlerquellen durch Vergleich der Simulation mit Streulichtmessungen eingrenzen. Die in Abb. 1.3 dargestellte Streulichtmessung um die 0. und $-1.$ BO des FLEX-Gitters zeigt deutliche Gittergeister, welche insbesondere um die $-1.$ BO eine hohe Intensität besitzen. Um die 0. BO hingegen verbleiben die Gittergeister auf einem um etwa zwei Größenordnungen schwächeren Niveau, werden aber dennoch geringfügig stärker, je näher sie an der 0. BO liegen. Offensichtlich tritt im Schreibprozess also kein signifikanter stochastischer Positionierungsfehler auf. Die beschriebene Intensitätsverteilung der Gittergeister um die Hauptbeugungsordnungen lässt außerdem darauf schließen, dass der dominierende Segmentierungsfehler entweder auf eine deterministische

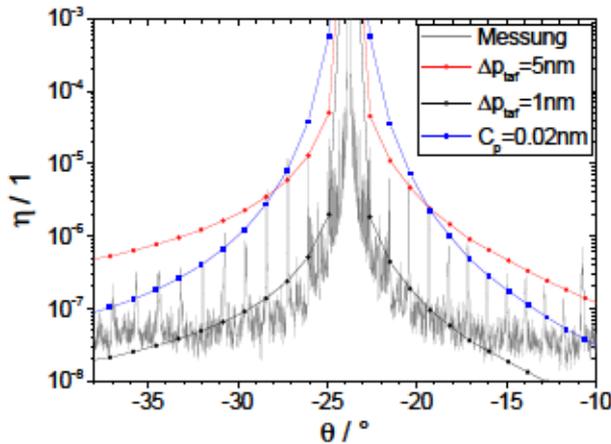


Abb. 3.9: Vergleich einer winkelaufgelösten Streulichtmessung um die $-1.$ BO (bei $\theta_{-1} = -23.8^\circ$) des nicht-optimierten FLEX-Gitters mit Simulationen der Gittergeister, welche durch einen deterministischen Positionierungsfehler hervorgerufen werden. $\theta_i = 33^\circ$ (in Luft), $p = 667$ nm, $\lambda = 633$ nm, $\bar{P} = \text{TM}$.

Positionierungsungenauigkeit Δp_{seg} oder auf einen systematischen Shotpositionierungsfehler C_p zurückzuführen ist. Zieht man in Betracht, dass auch Fehlerkombinationen auftreten können, so kann auch ein systematischer Shotformatfehler C_b beitragen.

Um die Auswahl an möglichen Belichtungsfehlern weiter einzugrenzen, ist in Abb. 3.9 der Vergleich verschiedener Geistersimulationen mit einer Streulichtmessung am FLEX-Gitter gezeigt [106]. Die Messkurve stimmt demnach am besten mit den Geistern überein, welche von einem Positionierungsfehler Δp_{taf} hervorgerufen werden. Der Shotpositionierungsfehler (und auch der Shotformatfehler, welcher hier nicht gezeigt ist) hingegen generiert sehr starke Geister in direkter Nähe zur $-1.$ BO. Für größere Abstände von der $-1.$ BO hingegen werden die Geister schnell um mehrere Größenordnungen schwächer. Diese Fehler können daher als maßgebliche Ursache ausgeschlossen werden, auch wenn sie möglicherweise einen kleinen Beitrag zum Gesamtfehler leisten. Wie man Abb. 3.9 entnehmen kann, sollte der dominierende Positionierungsfehler etwa im Bereich von $\Delta p_{\text{taf}} \approx 5$ nm liegen. Weiterhin kann man in der Abbildung erkennen, dass es der Messaufbau ermöglicht, eine minimale Positionierungsgenauigkeit von etwa 1 nm nachzuweisen.

Da es sich bei der Ursache der Gittergeister um einen systematischen Fehler handelt, sollte es möglich sein, diesen zu reduzieren. Im nächsten Abschnitt sollen daher verschiedene Methoden untersucht werden, welche eine Korrektur der Positionierung erlauben und so einer Ausbildung der Gittergeister entgegenwirken.

3.4 Reduktion der Gittergeister

3.4.1 Rekalibrierung

Der Elektronenstrahlschreiber *SB350 OS* der Firma *Vistec* bietet verschiedene Kalibrierungsparameter, die eine Steuerung der TAF- und STR-Positionierung erlauben [101]. Üblicherweise werden die Parameter in regelmäßigen Messungen überwacht und eine Kalibrierung des Segmentierungs-

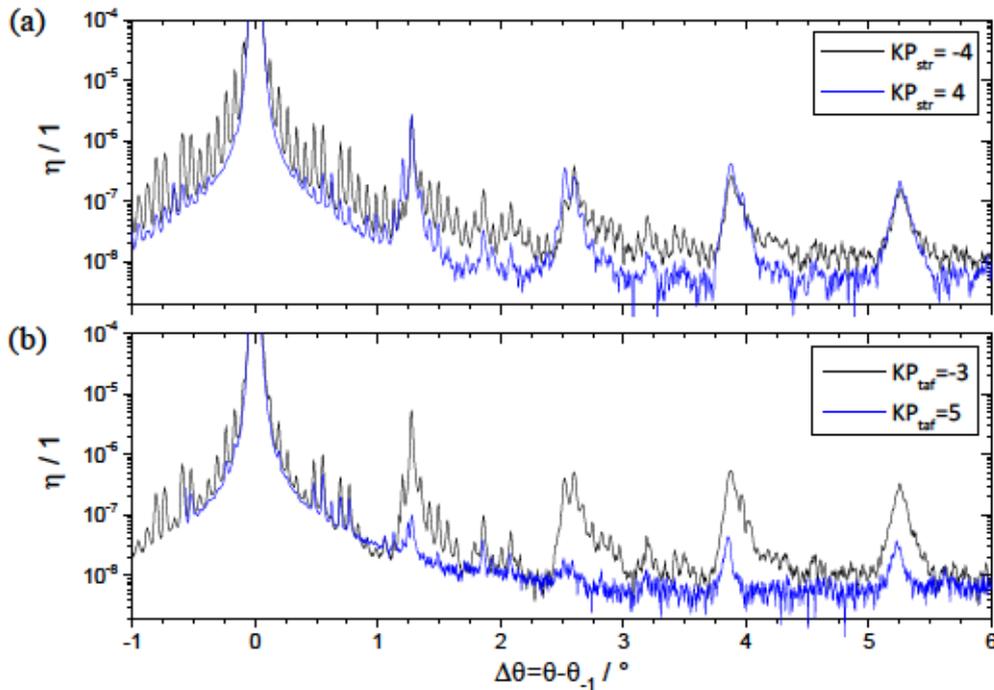


Abb. 3.10: ARS-Messungen um die -1 . BO (bei $\Delta\theta = 0^\circ$) von jeweils 2 Gittern welche mit (a) verschiedenen Einstellungen des Makroablenksystems und (b) verschiedenen Einstellungen des Mikroablenksystems gefertigt wurden. Die Gitter mit $p = 667$ nm wurden in Reflexion vermessen mit $\theta_i = 20^\circ$ und $\lambda = 633$ nm.

prozesses vorgenommen. Die Kalibrierungsmethode beruht dabei auf der Vermessung ausgewählter Koordinatenpositionen von speziellen Teststrukturen, welche gesondert belichtet werden. Diese Methode erlaubt es, die Positionierung der Teilsegmente mit einer hohen Genauigkeit zu kontrollieren und die Ausrichtung der TAFs und STRs zu steuern. Allerdings ist die hohe Genauigkeit lokal auf die Ausdehnung der Teststrukturen begrenzt und versagt für großflächige Beugungsgitter und insbesondere für integrierende Effekte wie Streulicht. Daher müssen die relevanten Kalibrierungsparameter direkt mit der Aufnahme und Auswertung von Streulichtmessungen bestimmt werden. Dies ist mit der Herstellung einer größeren Anzahl an Gittern verbunden, die jeweils mit einem anderen Parameter belichtet werden müssen. Hinzu kommt, dass die Optimierung nicht nur auf ein Segment beschränkt ist, sondern sowohl die TAFs als auch die STRs kalibriert werden müssen. Um den zeit- und arbeitsaufwändigen Herstellungsprozess von Substratbeschichtung, Belichtung, Resistentwicklung, Chromätzen, Quarzglasätzen und Chromentfernung zu verkürzen, soll die folgende experimentelle Untersuchung direkt nach der Resistentwicklung ausgeführt werden, da schon die Resiststruktur die Information über die Positionsgenauigkeit enthält. Die ARS-Messung muss dann aufgrund der hochreflektiven Chromschicht in Reflexion erfolgen. Wie in Abschnitt 3.2 gezeigt wurde sollte dies keine grundsätzlichen Auswirkungen auf die Charakteristiken der Gittergeister haben.

Für die Positionierungskontrolle der TAFs und STRs existieren im Wesentlichen 2 unterschiedliche Ablenssysteme, denen letztendlich 2 Kalibrierparameter zugeordnet werden können: Die TAF-Positionierung wird durch das Mikroablenssystem gesteuert und kann durch den Kalibrierparameter KP_{taf} ausgedrückt werden. Die STR-Positionierung erfolgt mit dem Makroablenssystem und wird durch den Kalibrierparameter KP_{str} beschrieben. Aufgrund der Komplexität der Anlage lassen sich die Kalibrierparameter nicht direkt in einem entsprechenden Positionierungsfehler ausdrücken und werden daher in beliebigen Einheiten angegeben (a.u.). Die Angaben $KP_{\text{taf}} = 0$ bzw. $KP_{\text{str}} = 0$ beziehen sich dabei auf den zu Abb. 3.9 zugehörigen Kalibrierzustand. Die vermessenen Gitter wurden im 1-Pass-Regime belichtet und die Kalibrierparameter variiert. Für jedes Gitter wurde ein Parameter konstant gehalten, wobei der andere variiert wird. Eine Auswahl der resultierenden ARS-Messungen zeigt Abb. 3.10, in der die beste und schlechteste Kurve bzgl. der STR- bzw. TAF-Geister dargestellt ist. Tatsächlich zeigen die Messungen, dass die STR- und TAF-

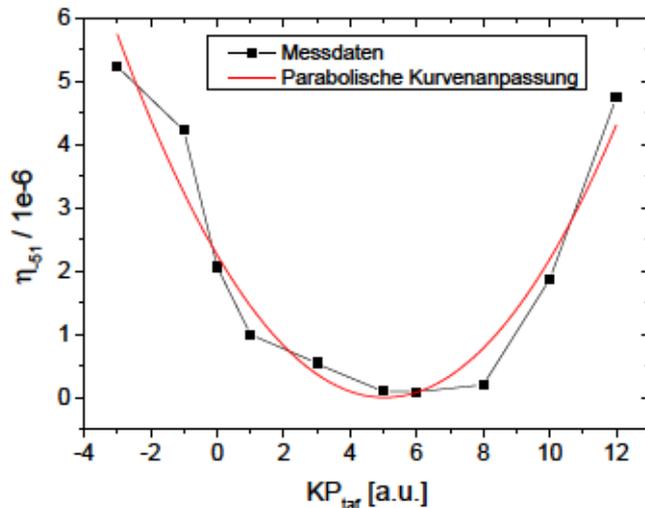


Abb. 3.11: Intensität des ersten TAF-Peaks neben der Nutzordnung als Funktion des Kalibrierzustandes des Mikroablenssystems und parabolische Kurvenanpassung zur Bestimmung des besten Kalibrierzustandes.

Positionierung mit einer hohen Genauigkeit gesteuert werden kann und die Stärke der 2 verschiedenen Typen von Gittergeistern voneinander unabhängig sind. Insbesondere zeigt Abb. 3.10(a), dass die STR-Geister im Winkelbereich $\pm 1^\circ$ um die $-1. \text{BO}$ um etwa eine Größenordnung reduziert werden können, während die TAF-Geister dabei in keiner Weise beeinflusst werden. Andererseits ermöglicht das Mikroablenssystem eine signifikante Reduktion der TAF-Geister. So kann beispielsweise der erste TAF-Peak neben der Nutzordnung (bei $\Delta\theta = 1.3^\circ$) um 2 Größenordnungen reduziert werden, während die Intensität der STR-Geister nahezu unverändert bleibt.

Obwohl die Gittergeister so nicht komplett verschwinden, kann der günstigste Kalibrierzustand ermittelt werden. Trägt man beispielsweise die Stärke des ersten TAF-Geistes als Funktion des Parameters Δp_{taf} auf, so erhält man die in Abb. 3.11 dargestellte Kurve, welche mit dem in Abschnitt 3.3.1 prognostizierten Verlauf übereinstimmt. Dieser näherungsweise parabolische Kur-

venverlauf kann durch einen Parabelfit angepasst werden, um so den besten Kalibrierzustand zu bestimmen, welcher bei $KP_{\text{taf}} = 5$ a.u. liegt.

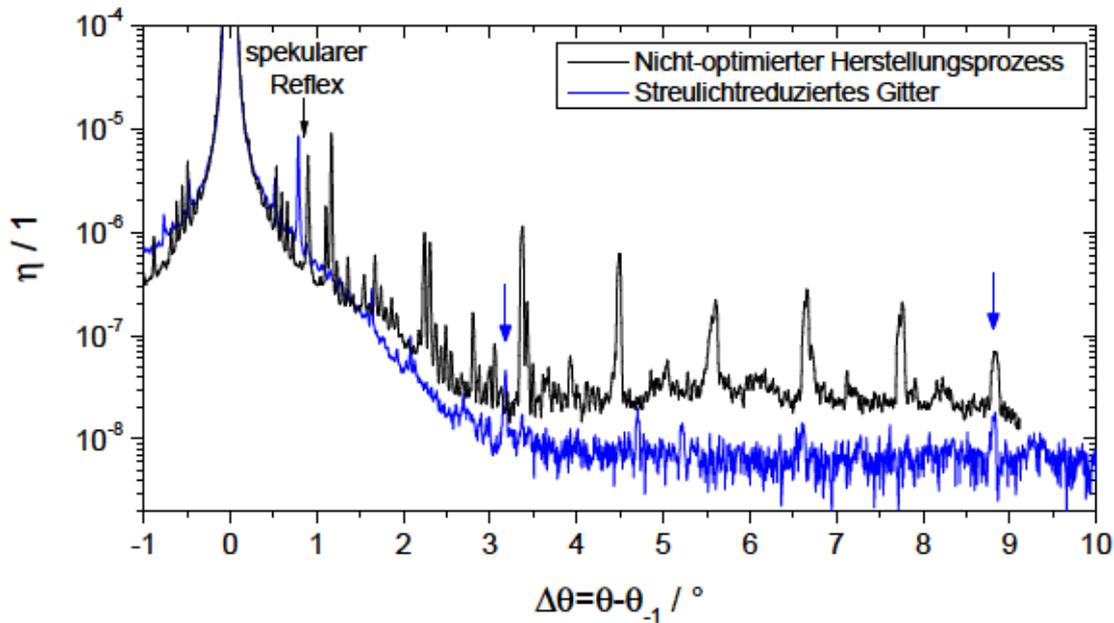


Abb. 3.12: Gegenüberstellung der Streulichtmessungen zweier Gitter, von denen eines im nicht-optimierten Herstellungsprozess und eines nach Rekalibrierung der Elektronenstrahlschreibanlage gefertigt wurde. Die Pfeile kennzeichnen die im streulichtreduzierten Gitter verbliebenen Geister.

Kombiniert man die optimierte TAF- und STR-Positionierung mit einer Multipass-Belichtung, so können zusätzlich eine große Anzahl der verbliebenen Gittergeister unterdrückt werden. Abbildung 3.12 zeigt das Streulichtspektrum eines Gitters, welches im optimierten Kalibrierzustand und im 8-Pass-Regime belichtet wurde, im direkten Vergleich zur Streulichtperformance eines unoptimierten Gitters. Man erkennt eine deutliche Verbesserung des Streulichtverhaltens. Die Gittergeister können auf diese Art fast vollständig unterdrückt werden. Lediglich zwei (in der Abbildung mit einem blauen Pfeil gekennzeichneten) Geister verbleiben mit einer sehr schwachen Intensität von etwa 8 Größenordnungen unterhalb der Nutzordnung.

3.4.2 Randomisierung

Eine weitere Möglichkeit, die Gittergeister zu unterdrücken, besteht darin, die strenge Periodizität der Überstruktur zu stören [107]. Dies kann realisiert werden, indem die Segmentgrößen während des Schreibens eines Gitters (stochastisch) variiert werden. Bevor experimentelle Untersuchungen dazu vorgestellt werden, sollen die Möglichkeiten dieser Methode kurz mit Hilfe optischer Simulationsmethoden (RCWA) untersucht werden.

Theoretische Untersuchung

Die idealisierte Ausführung der Randomisierung der Überperioden besteht darin, Segmente mit stochastisch variierender Größe aneinander zu reihen. Es soll im Folgenden angenommen werden, dass die stochastische Verteilung der Segmentgrößen durch den gaußverteilten Parameter $N \propto \mathcal{N}(N_0, \sigma_N)$ beschrieben werden kann, wobei N die Zahl der Gitterperioden pro Teilsegment angibt und sich die Segmentgröße demnach nach $p_{\text{seg}} = Np$ berechnet. N_0 bezeichnet die mittlere Segmentgröße ($N_0 = 52$ für das Standard-FLEX-Gitter) und σ_N die Stärke der Randomisierung. Da eine rigorose Berechnung der Streuung einer solchen randomisierten Struktur eine große Zahl zusammenhängender Segmente erfordert, wird in den Simulationen $N_0 = 20$ gewählt und die Gesamtzahl der berücksichtigten Gitterperioden (Größe der Elementarzelle) auf $N_x = 400$ festgelegt. Dies bedeutet, dass durchschnittlich 20 Segmente aneinandergereiht werden. Bei der Aneinanderreihung der Segmente soll zusätzlich zum deterministischen Positionierungsfehler Δp_{seg} der systematische Shotformatfehler C_b untersucht werden. Als Gitterstruktur für die rigorosen Simulationen diente wieder das Design des FLEX-Gitters. Für $\Delta p_{\text{seg}} = 5$ nm und $C_b = 0.01$ nm sind die Simulationsergebnisse jeweils für variierendes σ_N in Abb. 3.13 dargestellt. Jede Kurve stellt dabei die Mittelung aus 32 Einzelrechnungen dar. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich die Zahl der

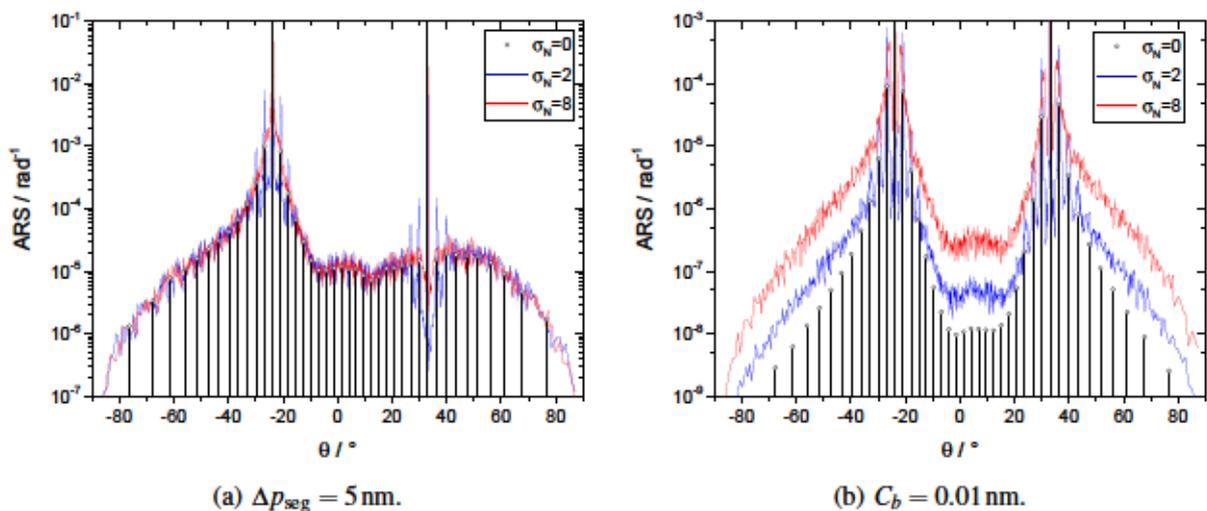


Abb. 3.13: ARS-Simulationen für ein Gitter mit randomisierter Segmentgröße definiert durch $N_0 = 20$ und die im Graphen angegebene Randomisierungsstärke σ_N für einen deterministischen Positionierungsfehler (a) und einen Systematischen Belichtungsfehler (b). Erst bei $\sigma_N = 8$ (d.h. $\mathcal{V} = 1,2$) verschwinden alle Gittergeister.

Gittergeister schon bei einer Randomisierungsstärke von $\sigma_N = 2$ signifikant reduziert. Vor allem im Winkelbereich zwischen der 0. und $-1.$ BO verschwinden die Gittergeister komplett und werden stattdessen zu einem diffusen Streulichtuntergrund verbreitert. Nur in direkter Umgebung zu den Hauptbeugungsordnungen verbleiben unscharfe Gittergeister. Eine weitere Erhöhung von σ_N

sorgt für eine weitere Reduktion der verbliebenen Gittergeister bis sie schließlich bei $\sigma_N = 8$ komplett verschwinden. Es ist insbesondere zu erwähnen, dass durch die Randomisierung im Δp_{seg} -gestörten Gitter eine homogene Umverteilung der Geisterintensität im Winkelhalbraum stattfindet und demzufolge kein zusätzliches Streulicht durch die Randomisierung generiert wird. Dies sieht man im $\text{ARS}(\theta)$ -Graphen daran, dass sich die 3 verschiedenen Kurven (für $\sigma_N = 0, 2, 8$) alle quantitativ exakt gleichen. Im Gegensatz dazu zeigt ein C_b -gestörtes Gitter einen zusätzlichen Anstieg des homogenen Streulichtuntergrundes mit zunehmender Randomisierungsstärke σ_N . Hier wird durch die Randomisierung also zusätzliches Streulicht generiert.

Ein gleiches Ergebnis erzielt man wieder mit simplen analytischen Betrachtungen, welche hier nur im Rahmen der numerischen Fouriertransformation durchgeführt wurden (nicht graphisch dargestellt). Eine solche Untersuchung liefert die zusätzliche Erkenntnis, dass die Güte der Geisterreduktion vom Verhältnis $\mathcal{V} = \frac{3\sigma_N}{N_0}$ abhängt und eine vollständige Unterdrückung der Gittergeister erst ab $\mathcal{V} \approx 1$ möglich ist. Dies bedeutet, dass die Geister nur bei einer sehr starken Randomisierung überhaupt erst vollständig verschwinden.

Zwischen den 2 untersuchten Segmentierungsfehlern fallen letztlich noch 2 Besonderheiten auf. Bei vollständiger Unterdrückung der Geister (Kurve mit $\sigma_N = 8$) verbleibt im Δp_{seg} -gestörten Gitter ein Einbruch im Streulichtuntergrund im engen Winkelbereich um die 0. BO. Dies kann physikalisch dadurch erklärt werden, dass es bei $\theta = \theta_i$ nicht zu einer Verschmierung des Geistes kommt und damit keine Umverteilung der Intensität in diesem Winkelbereich stattfindet. Beim C_b -gestörten Gitter tritt sogar neben beiden Hauptbeugungsordnung ein Einbruch im Streulichtuntergrund auf. Eine genaue Betrachtung zeigt, dass die Hauptbeugungsordnungen trotzdem auf einem kleinen lokalen Streulichtmaximum liegen. Dieses Verhalten ist phänomenologisch schwer zu erklären. Aufklärung könnte eine skalare Analyse, wie sie in Kapitel 3.2 durchgeführt wurde, liefern, was hier allerdings nicht getan werden soll.

Experimentelle Untersuchung

Die experimentelle Realisierung einer randomisierten Struktur ist sehr schwierig. Es gibt 2 Unterschiede zum beschriebenen theoretischen Modell. Einerseits treten im Experiment 2 Überperioden auf, welche beide randomisiert werden müssen. Andererseits handelt es sich bei den TAFs um flächige quadratische Segmente, was eine Randomisierung zusätzlich erschwert. Es soll daher eine deutliche Vereinfachung vorgenommen werden, welche darin besteht, die TAF- und STR-Größen während einer Multipass-Belichtung in jedem Pass zu ändern. Durch Überlappung der unterschiedlich großen Segmente soll die Regelmäßigkeit der Abstände zwischen den TAF- und STR-Grenzen gebrochen werden. Dabei wurden 2 verschiedene Ansätze verfolgt, welche in Tabelle 3.1 beschrieben sind. Zum einen soll das gesamte Spektrum der TAF- und STR-Größen, welche

(a) Randomisierungsvariante #1			(b) Randomisierungsvariante #2		
Pass	$p_{\text{taf}} / \mu\text{m}$	$p_{\text{str}} / \mu\text{m}$	Pass	$p_{\text{taf}} / \mu\text{m}$	$p_{\text{str}} / \mu\text{m}$
1	$23p = 15.341$	$13p_{\text{taf}} = 199.433$	1	$49p$	$17p_{\text{taf}}$
2	$31p = 20.667$	$13p_{\text{taf}} = 268.801$	2	$50p$	$17p_{\text{taf}}$
3	$37p = 24.679$	$17p_{\text{taf}} = 419.543$	3	$51p$	$17p_{\text{taf}}$
4	$43p = 28.681$	$17p_{\text{taf}} = 487.577$	4	$52p$	$17p_{\text{taf}}$
5	$53p = 35.351$	$17p_{\text{taf}} = 600.967$	5	$53p$	$17p_{\text{taf}}$
6	$59p = 39.359$	$17p_{\text{taf}} = 669.001$	6	$54p$	$17p_{\text{taf}}$
7	$67p = 44.689$	$17p_{\text{taf}} = 759.713$	7	$55p$	$17p_{\text{taf}}$
8	$73p = 48.691$	$19p_{\text{taf}} = 925.129$	8	$56p$	$17p_{\text{taf}}$

Tab. 3.1: Randomisierungsvarianten realisiert durch eine 8-Pass-Belichtung mit unterschiedlich großen Segmenten in jedem Pass.

der Elektronenstrahlschreiber erlaubt, ausgenutzt werden. Die erlaubten TAF- und STR-Größen bewegen sich im Bereich $p_{\text{taf}} = (10 \mu\text{m}, \dots, 50 \mu\text{m})$ bzw. $p_{\text{str}} = (200 \mu\text{m}, \dots, 1000 \mu\text{m})$. Die Segmentgrößen werden dabei als Vielfaches der Gitterperiode so gewählt, dass der ganzzahlige Faktor eine Primzahl ist, was ein Zusammenfallen der Segmentgrenzen unterschiedlicher Pässe so weit wie möglich vermeidet. In einer zweiten Variante sollen die Segmentgrößen nur schwach um den mittleren Wert $p_{\text{taf}} \approx 35 \mu\text{m}$ bzw. $p_{\text{str}} \approx 600 \mu\text{m}$ variieren. Die exakten Werte der bei den Belichtungen in jedem Pass eingestellten TAF- bzw. STR-Größen sind in Tab. 3.1 zusammengefasst.

Die Streulichtmessungen der so belichteten Proben sind in Abb. 3.14 dargestellt. Im Vergleich zur grau gezeichneten Streulichtmessung des unoptimierten Gitters erkennt man, dass die Zahl und Stärke der Gittergeister deutlich abgenommen hat. Vor allem die STR-Geister im Bereich $\Delta\theta < 1^\circ$ verschwinden vollständig. Dennoch weisen die Gitter mit randomisierten Überperioden noch immer deutliche Gittergeister auf. Insbesondere bei Randomisierungsvariante #1 lassen sich die auftretenden Geister eindeutig den eingestellten TAF-Perioden zuordnen. Der Vergleich zur in Abb. 3.14(a) grau gezeichneten Referenzkurve des unoptimierten Gitters zeigt, dass die Randomisierung lediglich eine Schwächung der TAF-Geister bewirkt. Die erhoffte Störung der strengen Periodizität der Überstruktur tritt nicht auf. Auch wenn der Überlapp unterschiedlich großer Segmente im fertigen Gitter aperiodische Abstände zwischen den Segmentgrenzen erzeugt, so treten in jedem einzelnen Pass doch streng periodische Segmente auf, welche schließlich nur zu einer Pseudorandomisierung führen und in der Streulichtmessung als Gittergeister zum Vorschein kommen. Auf die gleiche Weise lässt sich die Messung des Gitters interpretieren, welches mit Randomisierungsvariante #2 geschrieben wurde. Auch hier verschwinden die STR-Geister völlig. Zu sehen sind aber noch immer die TAF-Geister der unoptimierten Gitter, welche aber mit zunehmendem Abstand von der Hauptbeugungsordnung (bei $\Delta\theta = 0^\circ$) immer breiter werden. Ursache hierfür sind die um die TAF-Größe des unoptimierten Gitters ($p_{\text{taf}} = 52p$) nur leicht variierenden TAF-Größen

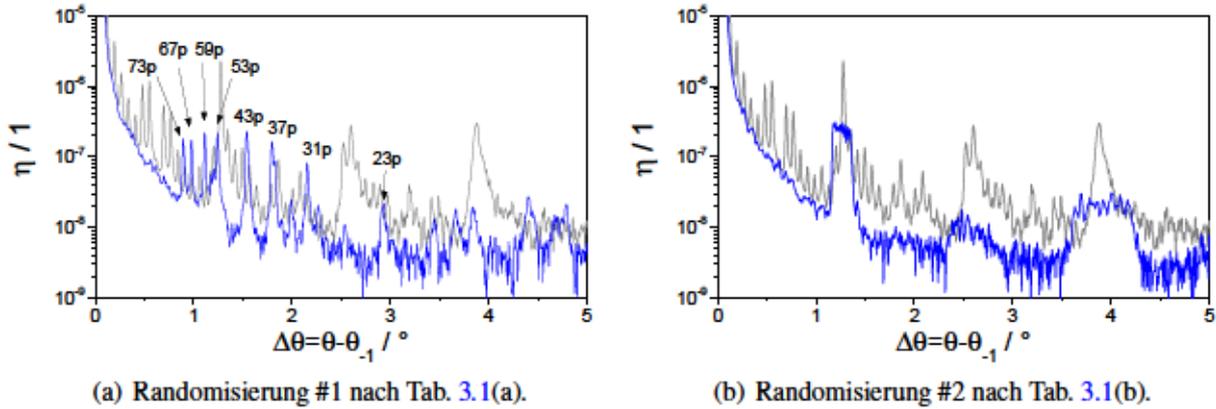


Abb. 3.14: Streulichtmessungen um die $-1.$ BO von Gittern mit randomisierten Segmentgrößen. Die Messungen erfolgten in der Resiststruktur des FLEX-Gitters bei $\theta_i = 20^\circ$ und in Reflexion. Die Streulichtmessung des unoptimierten 1-Pass-Gitters ist als Referenzkurve grau dargestellt.

des randomisierten Gitters. Die Geister jedes einzelnen Passes fallen dann für $\Delta\theta \neq 0^\circ$ nicht mehr exakt zusammen (für $\Delta\theta = 0^\circ$ fallen alle Geister mit der $-1.$ BO zusammen) und führen deshalb zu einer Verteilung der Geisterintensität um die Position des entsprechenden Geistes des unoptimierten Gitters. Die Intensität höherer Geister wird immer stärker im Winkelraum verteilt, was eine stärkere Verbreiterung bedeutet. Dies kann in Abb. 3.14(b) für die ersten 3 Geister neben der Nutzordnung gut beobachtet werden, auch wenn der mittlere Geist (bei $\Delta\theta \approx 2.6^\circ$) unerwartet stark verbreitert bzw. geschwächt ist. Eine genaue Betrachtung zeigt sogar, dass die verbreiterten Geister (bei $\Delta\theta \approx 1.3^\circ$ und $\Delta\theta \approx 3.9^\circ$) jeweils 8 Spitzen entsprechend der 8 TAF-Größen in jedem Einzelpass zeigen.

Es stellt sich schließlich noch die Frage, warum eine Multipass-Belichtung mit konstanten Segmentgrößen in jedem Pass eine so effektive Reduktion der Anzahl der Geister bewirkt (siehe Abb. 3.1), eine Multipass-Belichtung mit unterschiedlichen Segmentgrößen in jedem Pass jedoch nicht (Randomisierung, Abb. 3.14). Die wahrscheinlichste Ursache ist, dass die Multipassbelichtung bei konstanten Segmentgrößen p_{taf} eine sehr genaue Verschiebung der Einzelpasse um den Betrag $\frac{p_{\text{taf}}}{N_{MP}}$ zum vorhergehenden Pass bewirkt (wobei N_{MP} wieder die Passzahl darstellt). Die Gittergeister, welche durch die Einzelpasse erzeugt werden, interferieren dann destruktiv, falls es sich nicht um den N_{MP} -ten Gittergeist ausgehend von der $-1.$ BO handelt. Bei der N_{MP} -Pass-Belichtung mit konstanten Segmentgrößen ist also nur noch jeder N_{MP} -te Geist zu sehen. Bei der N_{MP} -Pass-Belichtung mit variierenden Segmentgrößen befinden sich die Geister der Einzelpasse nicht an den selben Positionen im Winkelraum und können nicht destruktiv interferieren. Daher sind noch immer alle TAF-Perioden in der Streulichtmessung der pseudo-randomisierten Gitter identifizierbar.

4 Stochastisches Streulicht

Ein prominentes Beispiel für eine Quelle von diffusem Streulicht in binären Gittern stellt die Kantenrauheit (engl.: *line edge roughness*, LER) dar. Im folgenden Kapitel soll daher die LER als Quelle des Streulichtuntergrunds detailliert untersucht werden. Zunächst werden in Kapitel 4.1 die Charakteristika und Ursachen der LER vorgestellt. Außerdem wird ermittelt, wie stark die LER im verwendeten Herstellungsprozess ausgeprägt ist. In Abschnitt 4.2 wird eine Analyse des durch LER hervorgerufenen Streulichts im Rahmen der Fourieroptik (unter Anwendung der TEA) vorgestellt und ein eindimensionales rigoroses Modell entwickelt, welches die exakte Berechnung der ARS in der Dispersionsebene jedes beliebigen lamellaren Gitters erlaubt. Darauf basierend findet in Abschnitt 4.3 eine umfassende Analyse der Streulichtspektren verschiedener Gittertypen statt, wobei ein Gefühl für den Einfluss aller beteiligten Parameter (LER-Parameter, Gittergeometrie, optische Indizes, Beleuchtung) vermittelt werden soll. Abschnitt 4.4 beschäftigt sich dann mit der experimentellen Verifizierung der aufgestellten Modelle, indem Gitter mit einer künstlichen Kantenrauheit hergestellt und vermessen werden. Weiterhin soll der Streulichtuntergrund des FLEX-Gitters analysiert und mögliche Techniken zur Reduktion des Streulichtniveaus untersucht werden.

4.1 Kantenrauheit als Quelle diffusen Streulichts

4.1.1 Charakterisierung der Kantenrauheit

Unter Kantenrauheit (LER) versteht man die stochastisch variierende Abweichung einer Kante von ihrer gewünschten Idealposition, was durch die Zufallsfunktion $X(y)$ beschrieben werden kann, wobei y die laterale Position entlang der Kante angibt. Diese Abweichung wird im herkömmlichen Sinne durch eine meist gaußförmige Wahrscheinlichkeitsverteilung mit Mittelwert $\mu = 0$ und Standardabweichung σ beschrieben. Da es sich bei LER tatsächlich jedoch um einen stochastischen Prozess², also eine Abfolge von Zufallszahlen, handelt, müssen weitere Parameter eingeführt werden, um sie vollständig zu charakterisieren. Diese Parameter sind bekannt als *Korrelationslänge* ξ

²Es handelt sich sogar um einen *ergodischen* stochastischen Prozess. Ergodisch bedeutet, dass die Eigenschaften des stochastischen Prozesses von einem endlichen langen Ausschnitt abgeleitet werden können [108].

und *Rauheitsexponent* α und können mit Hilfe der Autokorrelation bestimmt werden [29, 109, S.13 ff.]. Die *Autokorrelationsfunktion*¹ (ACF) einer rauen Kante lässt sich durch

$$ACF(\Delta y) = \int_{-\infty}^{\infty} X(y)X(y + \Delta y)dy \quad (4.1)$$

berechnen und für selbst-affine Rauheiten, worum es sich bei Kantenrauheiten handelt [110–113], durch

$$ACF(\Delta y) = \sigma^2 e^{-(\Delta y/\xi)^{2\alpha}} \quad (4.2)$$

modellieren. Die ACF beschreibt somit die Korrelation einer Kante zu einer um Δy verschobenen Kopie ihrer selbst und die Parameter ξ und α stellen ein Maß für die Reichweite dar, innerhalb derer sich der Kantenverlauf wenig ändert bzw. innerhalb derer sich die Kantenpositionen noch gegenseitig beeinflussen. Neben der ACF ist ein Analyse der spektralen Leistungsdichte (engl.: *power spectral density*, PSD) von Interesse, da hier der Beitrag individueller Ortsfrequenzen f_y zur Rauheit erkannt werden kann. Die PSD berechnet sich aus der Fouriertransformierten der ACF gemäß (*Wiener-Khitchine-Thorem* [108, Gl. 8.78])

$$PSD(f_y) = \int_{-\infty}^{\infty} ACF(\Delta y)e^{-2\pi i f_y \Delta y} d\Delta y. \quad (4.3)$$

Für $\alpha \neq 0.5$ gibt es keine analytische Beschreibung der spektralen Leistungsdichte selbst-affiner Rauheiten. Allerdings lässt sich die PSD durch das *ABC-Modell* [114] bzw. die sogenannte *Pala-santzas-PSD* [115] näherungsweise modellieren. Diese ist definiert durch

$$PSD(f_y) = \frac{P_0}{(1 + (2\pi\xi f_y)^2)^{H+0.5}}, \quad (4.4)$$

wobei P_0 durch

$$P_0 = 2\sigma^2\xi \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(H+0.5)}{\Gamma(H)} \approx 2\sigma^2\xi \quad (4.5)$$

gegeben ist. $\Gamma(x)$ repräsentiert dabei die Gamma-Funktion. Der Parameter H in dieser Formel wird *Hurst-Exponent* genannt und kann als Rauheitsexponent α interpretiert werden, auch wenn er nur für $H = 0.5 = \alpha$ identisch mit α ist. Die Unterschiede sind jedoch hinreichend klein für

¹Streng genommen handelt es sich bei der hier verwendeten Definition (4.1) um die *Autocovarianz* (ACV) und streng mathematisch stellt die ACF die auf ihren Maximalwert normierte Autocovarianz dar. In der Literatur werden diese Begriffe aber oft vermischt und es wird üblicherweise die Bezeichnung Autokorrelationsfunktion für (4.1) verwendet, was auch in dieser Arbeit beibehalten werden soll.

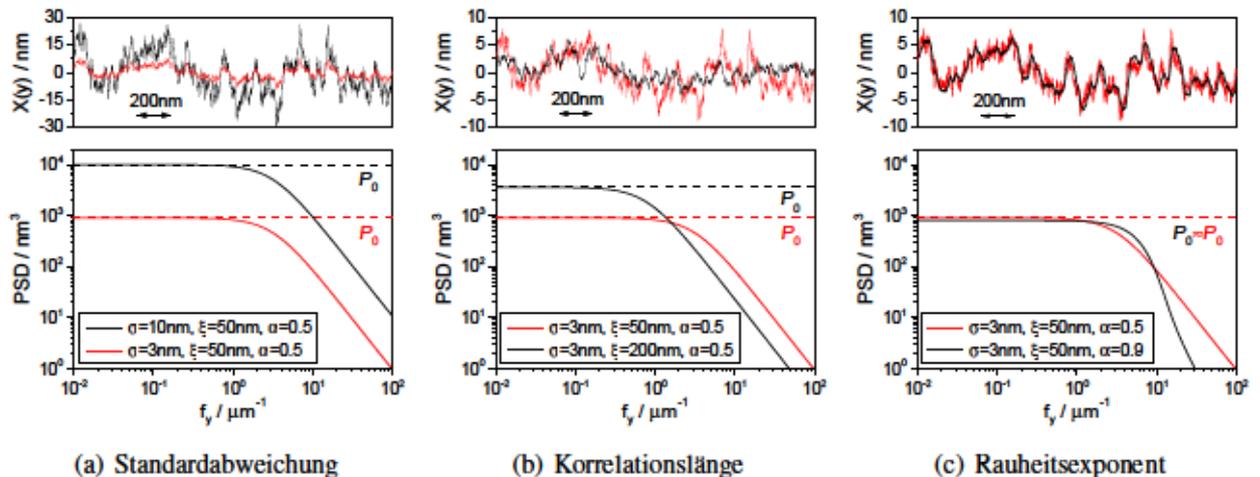


Abb. 4.1: Künstlich erzeugte Kantenrauheit und zugehörige spektrale Leistungsdichten für verschiedene Werte der Parameter σ , ξ und α .

$H = 0.5 \dots 0.9$ [115].

Abbildung 4.1 zeigt den Verlauf rauer Kanten für verschiedene Werte von σ , ξ und α und die zugehörigen spektralen Leistungsdichten. In doppelt logarithmischer Darstellung besitzt die PSD ein nahezu konstantes Niveau P_0 bei niedrigen Raumfrequenzen, bis sie schließlich einen Knick erfährt, um dann zu höheren Raumfrequenzen hin kontinuierlich abzufallen. Eine höhere Standardabweichung hat eine stärkere Kantenrauheit zur Folge und entsprechend erhöhen sich alle Raumfrequenzbeiträge in der PSD um den gleichen Faktor (vgl. Abb. 4.1(a)). Die Korrelationslänge hingegen stellt ein Maß für den Bereich dar, innerhalb dessen die Kantenposition statistisch wenig variiert. Eine Vergrößerung von ξ führt daher zu einem stärkeren Beitrag kleiner Raumfrequenzen zur Rauheit. In der PSD zeigt sich dies durch ein Anheben der kleinen Raumfrequenzen und ein Unterdrücken der hohen (vgl. Abb. 4.1(b)). Eine Erhöhung des Rauheitsexponenten führt zu einem stärkeren Abfall der PSD und damit zu einer zunehmenden Unterdrückung der höheren Raumfrequenzen bei einem etwa gleichbleibenden Beitrag des konstanten Plateaus. Dies äußert sich in einem augenscheinlich glatteren Kantenverlauf (vgl. Abb. 4.1(c)).

4.1.2 Entstehung der Kantenrauheit

Die Entstehung von Kantenrauheit wurde schon in umfangreichen Arbeiten [35, 116–121] untersucht und modelliert und die Autoren sind sich einig, dass stochastische Effekte, die insbesondere bei Belichtung kleiner Strukturen mit geringen Dosen wirksam werden, die Ursache sind. Insbesondere zur Ausbildung der LER in der Resiststruktur wurden detaillierte Untersuchungen durchgeführt und Simulationsprogramme entwickelt, die es erlauben, aus Resistseigenschaften und Belichtungseinstellungen die Kantenrauheit zu berechnen [122, 123]. Ausführliche wahrscheinliche

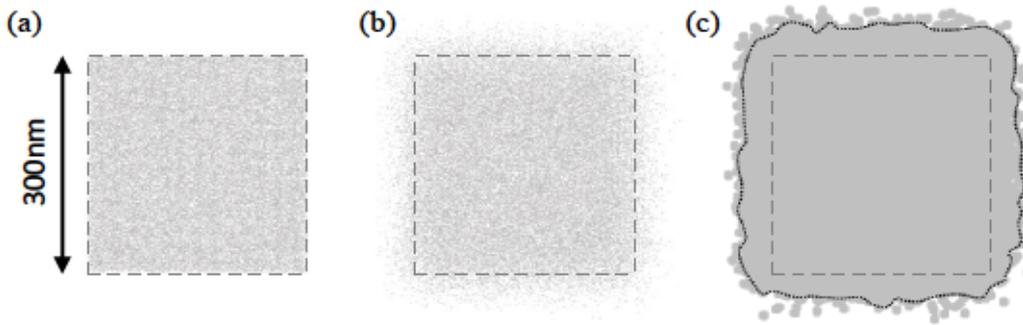


Abb. 4.2: Anschauliche Darstellung zur Entstehung der Kantenrauheit aufgrund eines stochastischen Elektroneneinschlags (a), gaußförmiger Vorverteilung (b), und Diffusion der generierten Säure (c) [124, S. 56].

keitstheoretische Beschreibungen der physikalischen Effekte, die z.B. beim statistischen Photonen-/Elektroneneinschlag, bei der Konzentration der photoaktiven Komponente, bei der Absorption der Photonen/Elektronen und bei der Diffusion der generierten Säure im chemisch verstärkten Resist eine Rolle spielen, finden sich in [36]. Eine anschauliche Interpretation dieser Effekte, welche der Ausbildung von Kantenrauheit zugrunde liegen, lassen sich z.B. in [124] nachlesen. Die folgenden Beschreibungen werden sich größtenteils an den darin veröffentlichten Ergebnissen orientieren.

Bei der elektronenstrahlolithographischen Belichtung entspricht der eingestellten Dosis eine bestimmte Anzahl an Elektronen pro Fläche. So entspricht der Dosis $D_{\text{FEP}} = 9.5 \frac{\mu\text{C}}{\text{cm}^2}$, mit welcher der Resist FEP171 belichtet wird, einer Primärelektronenzahl von $59 \frac{e^-}{100\text{nm}^2}$, wohingegen der nicht chemisch verstärkte Resist HSQ eine viel höheren Dosis von etwa $D_{\text{HSQ}} \approx 1000 \frac{\mu\text{C}}{\text{cm}^2}$ und Elektronenzahl $n_{\text{HSQ}} \approx 6000 \frac{e^-}{100\text{nm}^2}$ zur Belichtung benötigt. Der Elektroneneinschlag ist dabei stochastisch über die belichtete Fläche verteilt. Dies führt dazu, dass nur bei einer ausreichend großen Zahl an Elektronen die Fläche homogen belichtet wird, was sich unmittelbar auf die Form der Struktur nach der Belichtung auswirkt. Zusätzlich zur Elektronenstatistik muss die Verteilung der Säuregeneratoren (*Photoacid generator*, PAG) und die Wahrscheinlichkeit der Absorption eines Elektrons durch ein PAG-Molekül beachtet werden. Neben diesen stochastischen Effekten wird die Verteilung der Elektroneneinschläge durch das gaußförmige Intensitätsprofil des Elektronenstrahls bestimmt, dessen typische Halbwertsbreite etwa 30 nm beträgt. Als Folge dessen werden Randbereiche von Strukturen, deren typische Abmessungen >30 nm betragen, mit einer kleineren Elektronenzahl pro Flächeneinheit belichtet. Die beim Auftreffen der Strahlelektronen generierten Säuren diffundieren durch den Resist. Die Reichweite der Säurediffusion erstreckt sich näherungsweise über ein kreisförmiges Gebiet, dessen Mittelpunkt der Elektronenauffreffpunkt ist und dessen Radius durch die Säurediffusionslänge bestimmt wird. Anschaulich sind diese drei Schritte – Elektronenstatistik, gaußförmige Vorverteilung und Säurediffusion – für eine mit der Dosis D_{FEP} belichtete $300\text{nm} \times 300\text{nm}$ große Fläche in Abb. 4.2 dargestellt. Die nach der Entwicklung

resultierende Struktur kann als die zusammenhängende Fläche in Abb. 4.2(c) verstanden werden, welche hier durch die eingezeichnete schwarze Linie abgegrenzt wird.

Das hier in seinen Grundzügen vorgestellte Modell gibt eine ausführliche Erklärung der Kantenrauheit in der Resiststruktur. Durch die weitere Prozessierung des Gitters findet eine Übertragung der Kantenrauheit in die darunter liegende Chromschicht und schließlich in das Kieselglassubstrat statt. Die Übertragung der Kantenrauheit durch Ätzprozesse ist bisher nicht so detailliert verstanden und wurde bisher in unterschiedlichen Ansätzen untersucht [125–127]. Sicher ist allerdings, dass sich die Parameter σ , ξ und α dabei ändern. Daher soll im Folgenden die Änderung der Kantenrauheit in den verschiedenen Stadien der Herstellungskette des FLEX-Gitters quantifiziert werden, was einer Bestimmung der Rauheitsparameter σ , ξ und α entspricht.

4.1.3 Quantifizierung der Kantenrauheit

Zur Bestimmung der Rauheitsparameter war es erforderlich, den Kantenverlauf der hergestellten Gitter- bzw. Grabenstrukturen zu detektieren und daraus die spektrale Leistungsdichte (PSD) zu bestimmen. Die so erhaltene PSD kann durch Gl. (4.3) angepasst werden, woraus direkt die unbekannten Parameter σ , ξ und α hervorgehen.

Dies konnte durch Auswertung geeigneter Elektronenmikroskopaufnahmen (engl.: *Scanning Electron Microscope SEM*) realisiert werden. Ein SEM-Bild der Resiststruktur des FLEX-Gitters zeigt Abb. 4.3(a). Die Schnittfunktion senkrecht zur Grabenrichtung entlang der eingezeichneten blauen Linie ist ebenfalls dargestellt und zeigt in grober Näherung eine verrauschte Rechteckfunktion. Eine Möglichkeit zur Detektion der Kanten besteht darin, die Ableitung der Schnittfunktion zu bestimmen, was durch Faltung des SEM-Bildes mit geeigneten Filtermatrizen realisiert werden kann (sogenannten Sobel-Filtern) [128, S. 213] [129]. Die abgeleitete Schnittfunktion besitzt lokale Maxima und Minima an den Kantenpositionen, welche leicht detektiert werden können. Führt man diese Vorgehensweise für jede Bildzeile durch, so erhält man den Kantenverlauf $X(y)$ aller Kanten im SEM-Bild. Abbildung 4.3(a) zeigt zusätzlich einen vergrößerten Ausschnitt des SEM-Bildes, in welchem der detektierte Kantenverlauf durch weiß markierte Pixel kenntlich gemacht wurde.

Bei der Funktion $X(y)$ handelt es sich um ein diskretes Signal, welches aufgrund der endlichen Kantenlänge L und der Pixelgröße Δy in seinem Informationsgehalt beschränkt ist. Bei bekannten L und Δy kann das *diskrete Leistungsspektrum* aus dem Betragsquadrat der Fourierkoeffizienten \tilde{X}_n nach

$$PSD_{d,n} = L \cdot |\tilde{X}_n|^2 \quad (4.6)$$

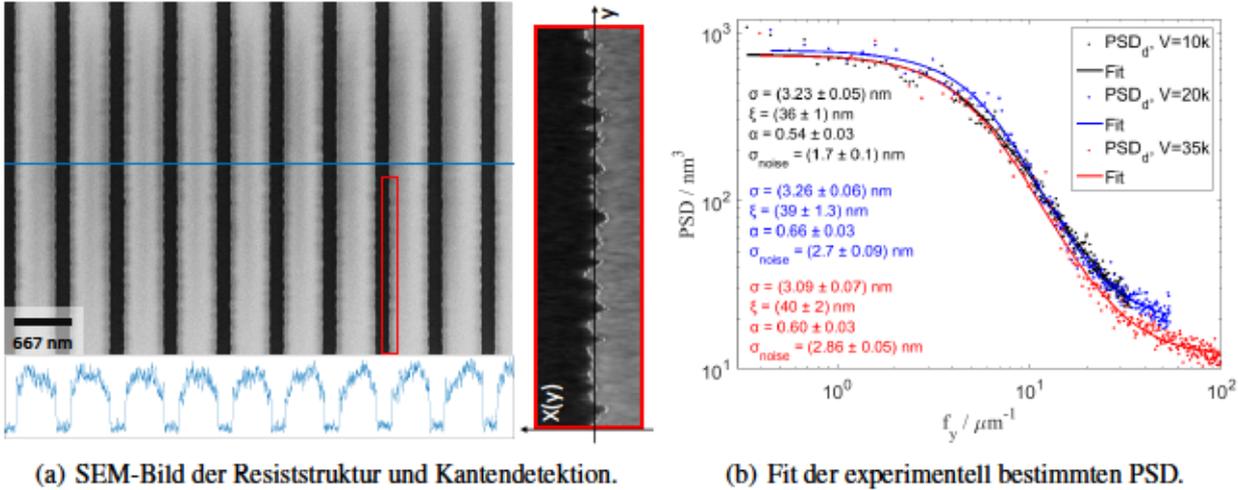


Abb. 4.3: Bestimmung der Rauheitsparameter aus SEM-Aufnahmen: (a) Im SEM-Bild werden die Kantenverläufe $X(y)$ detektiert, aus welchen mit Hilfe einer diskreten Fouriertransformation die spektrale Leistungsdichte (PSD) bestimmt werden kann. (b) Die aus etwa 100 Kanten ermittelte mittlere (und korrigierte) PSD wird anschließend durch das im Text beschriebene Modell nach Gl. (4.3) angepasst, woraus direkt die Parameter σ , ξ und α hervorgehen (und ein Parameter σ_{noise} , welcher das Rauschen beschreibt). Die schwarzen, blauen und roten Datenpunkte zeigen die PSDs, welche aus SEM-Bilder unterschiedlicher nomineller Vergrößerung V abgeleitet wurden.

berechnet werden, wobei die *diskrete Fouriertransformation* durch

$$\tilde{X}_n = \frac{1}{N_y} \sum_{l=0}^{N_y-1} (X_l - \langle X \rangle) e^{-i \frac{2\pi}{N_y} ln} \quad (4.7)$$

bestimmt ist [130, 131]. Dabei ist $n = 0, \dots, N_y - 1$ und $N_y = \frac{L}{\Delta y}$ stellt die Zahl der Kantenpixel dar. $\langle X \rangle$ bezeichnet den Mittelwert bzw. den Erwartungswert der detektierten Kante. Um eine vernünftige Anpassung von PSD_d gewährleisten und belastbare Aussagen über die Rauheitsparameter σ , ξ und α treffen zu können, sollte die Vergrößerung des SEM-Bildes so gewählt werden, dass $\Delta y \ll \xi \ll L$ gilt [132]. Da die erstellten SEM-Aufnahmen eine Pixelzahl entlang der Kanten von $N_y = 1792$ aufweisen, ist eine Erfüllung dieser Bedingung (welche streng genommen 10000 Pixel entlang einer Kante fordert) von Anfang an nicht möglich. Es kommt daher zu Abweichungen der nach Gl. (4.6) bestimmten diskreten PSD vom tatsächlichen (*kontinuierlichen*) Leistungsspektrum PSD_c . Diese Abweichungen sind unter anderem durch den *Alias-Effekt*, welcher auf eine Verletzung des Nyquist-Shannon-Abtasttheorems zurückzuführen ist, und den sogenannten *Leck-* bzw. *Fenster-Effekt*, welcher sich in einer Faltung des tatsächlichen Spektrums mit der Fouriertransformation des Rechteckfensters äußert, bedingt. Bei beiden Effekten handelt es sich um systematische Fehler, welche glücklicherweise durch recht simple Multiplikation des Erwartungswertes $\langle PSD_d \rangle$

von Gl. (4.6) mit den Korrekturfaktoren

$$\epsilon_{\text{alias}} = \left(\frac{\pi f_y \Delta y}{\sin(\pi f_y \Delta y)} \right)^2 \quad \text{und} \quad \epsilon_{\text{leak}} = 1 + \frac{\xi}{L} \cdot \frac{(2\pi f_y \xi)^2 - 1}{(2\pi f_y \xi)^2 + 1} \quad (4.8)$$

korrigierbar sind [133]. Nachteilig ist hier, dass zur Korrektur des Leck-Effekts der Parameter ξ bekannt sein muss. Daher wurde zunächst eine Bestimmung der Rauheitsparameter an der unkorrigierten PSD durchgeführt und danach mit der dort ermittelten Korrelationslänge die korrigierte PSD bestimmt. Weiterhin kommt es bei der Kantendetektion zum Phänomen des *linearen Detrendings*: Um einer unzureichenden Ausrichtung des SEM-Bildes (beispielsweise aufgrund leichter Verdrehung der Probe zur Scanrichtung des Elektronenstrahls) während der Aufnahme entgegenzuwirken, muss eine lineare Regression jeder Kante durchgeführt und die Kante um ihren mittleren Anstieg korrigiert werden. Diese Korrektur führt allerdings auch zu einer systematischen Unterdrückung sehr niedriger Ortsfrequenzen im Spektrum. Dies ist wiederum durch den Faktor

$$\epsilon_{\text{detrending}} = 1 - \frac{1}{\pi (f_y L)^2} \quad (4.9)$$

korrigierbar [134]. Als Abschätzung für das wahre (kontinuierliche) Leistungsspektrum ergibt sich schließlich die Formel

$$PSD_c = \frac{\langle PSD_d \rangle}{\epsilon_{\text{alias}} \cdot \epsilon_{\text{leak}} \cdot \epsilon_{\text{detrending}}}, \quad (4.10)$$

welche zur Bestimmung der Rauheitsparameter verwendet wird. Bevor die so bestimmte PSD durch das theoretische Modell angepasst werden kann, gilt es einen letzten Fehler, der bei experimenteller Bestimmung der PSD mittels Elektronenstrahlmikroskopie auftritt, zu korrigieren. Während des Raster-scans kann die Position des Elektronenstrahls durch hochfrequente Schwingungen externer Geräte periodisch gestört werden. Der registrierte Kantenverlauf wird dann durch ein streng periodisches Signal der Periode $p_{\text{ext}} \propto f_{\text{ext}}^{-1}$ überlagert, wobei f_{ext} die störende externe Schwingungsfrequenz bezeichnet [135]. Im Spektrum erscheint dann ein deutlicher Peak bei $f_y = 1/p_{\text{ext}}$, welcher nicht auf die Kantenrauheit zurückzuführen ist und aus dem Spektrum ausgeschnitten werden muss.

Die experimentell bestimmte PSD kann nun durch das in Gl. (4.3) gegebene Modell angepasst werden, wobei noch ein zusätzlicher Summand $\Delta y \cdot \sigma_{\text{noise}}^2$ hinzugefügt werden muss, welcher das bei der Bildaufnahme entstehende Rauschen berücksichtigt [131, 133]. Die Kurvenanpassung ist ebenfalls in Abb. 4.3(b) dargestellt und zeigt eine gute Übereinstimmung des theoretischen Modells mit der experimentell bestimmten PSD, offenbart allerdings auch die Schwierigkeiten, welche bei Bestimmung der Rauheitsparameter auftreten. Die Datenpunkte der experimentell be-

stimmten Leistungsspektren bei verschiedenen SEM-Vergrößerungen zeigen eine gute Übereinstimmung (schwarze, rote und blaue Datenpunkte in Abb. 4.3(b)), jedoch liefern die einzelnen Kurvenanpassungen Parameter, welche nicht immer innerhalb ihrer Konfidenzintervalle übereinstimmen. Um zuverlässige Ergebnisse zu bekommen müssen zur Bestimmung von $\langle PSD_d \rangle$ möglichst viele Kanten zur Mittelwertbildung einbezogen werden, zusätzlich wird über die Ergebnisse der Einzelfits gemittelt. Für die Resiststruktur ergeben sich damit Rauheitsparameter von $\sigma = 3.2 \text{ nm} \pm 0.09 \text{ nm}$, $\xi = 38 \text{ nm} \pm 2.2 \text{ nm}$ und $\alpha = 0.6 \pm 0.03$. Die für die Resiststruktur vorgestellte Untersuchung zur Quantifizierung der Kantenrauheit wurde analog für die Chrommaske und das Kieselglasgitter, welches auf die vier verschiedenen Tiefen $0.25d_{\text{max}}$, $0.5d_{\text{max}}$, $0.75d_{\text{max}}$ und d_{max} (wobei $d_{\text{max}} = 1640 \text{ nm}$ die Zieltiefe des FLEX-Gitters darstellt) geätzt wurde, durchgeführt. Die Ergebnisse der Untersuchung zeigt Abb. 4.4. Man erkennt eine zunächst stattfindende Glättung der Kanten beim Chromätzen und beim anfänglichen Tiefätzen, was durch einen Abfall der Rauheit auf etwa $\sigma = 1.9 \text{ nm} \pm 0.1 \text{ nm}$ quantifiziert werden kann. Qualitativ lässt sich dies al-

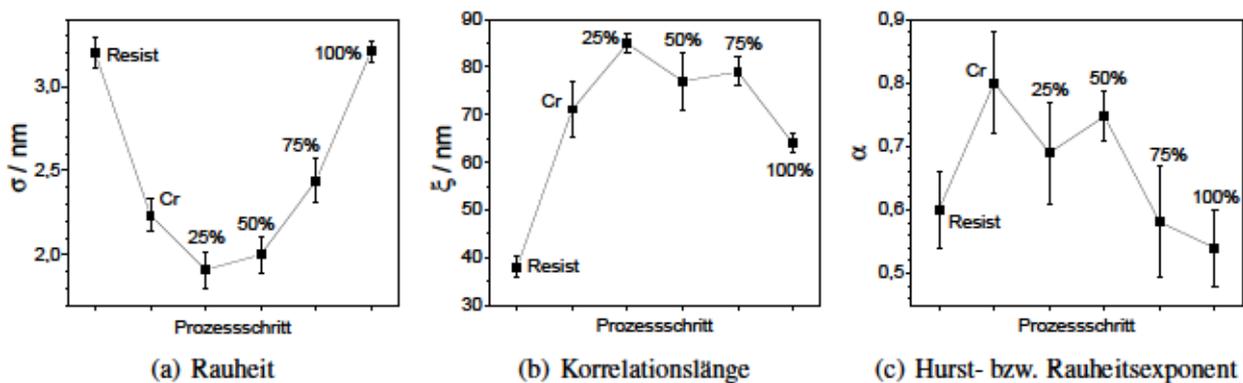


Abb. 4.4: Entwicklung der Rauheitsparameter während der Gitterprozessierung: Die Messung von σ , ξ und α erfolgte nach der Belichtung (Resist), in der Chrommaske und in der Kieselglasstruktur für verschiedene Äztiefen $d = 0.25d_{\text{max}}$, $0.5d_{\text{max}}$, $0.75d_{\text{max}}$, d_{max} (wobei $d_{\text{max}} = 1640 \text{ nm}$).

lein durch Betrachten von SEM-Aufnahmen in den unterschiedlichen Zuständen bestätigen (siehe Abb. 4.5(a)-(c)). Der Glättungseffekt kann auf eine in lateraler Richtung nicht zu vernachlässigende Ätzrate des nicht vollständig anistoropen RIE-Ätzprozesses zurückgeführt werden. Diese in lateraler Richtung isotrope Ätzrate (in x- und y-Richtung gleich große Ätzrate) führt zu einem erhöhten Abtrag hervorstehender Kantenregionen, was den RMS-Wert verringert und damit die Rauheit reduziert. Bei fortgesetztem Tiefätzen kommt es jedoch zusätzlich zu einem merklichen Ätzangriff der Chrommaske und zu einem Rückzug der Chromkante, und es wird beobachtet, dass sich der Glättungseffekt des Ätzens umkehrt und die Rauheit σ wieder zunimmt, bis sie bei der Zieltiefe d_{max} schließlich den Wert $\sigma = 3.2 \text{ nm} \pm 0.07 \text{ nm}$ erreicht (Abb. 4.4(a)). Der Rückzug der Chromkante führt außerdem zu einer Neigung der Kanten der Gitterstege, was in den in Abb. 4.5(d)-(f) gezeigten REM-Aufnahmen deutlich zu erkennen ist. Darin erkennt man eine zusätzli-

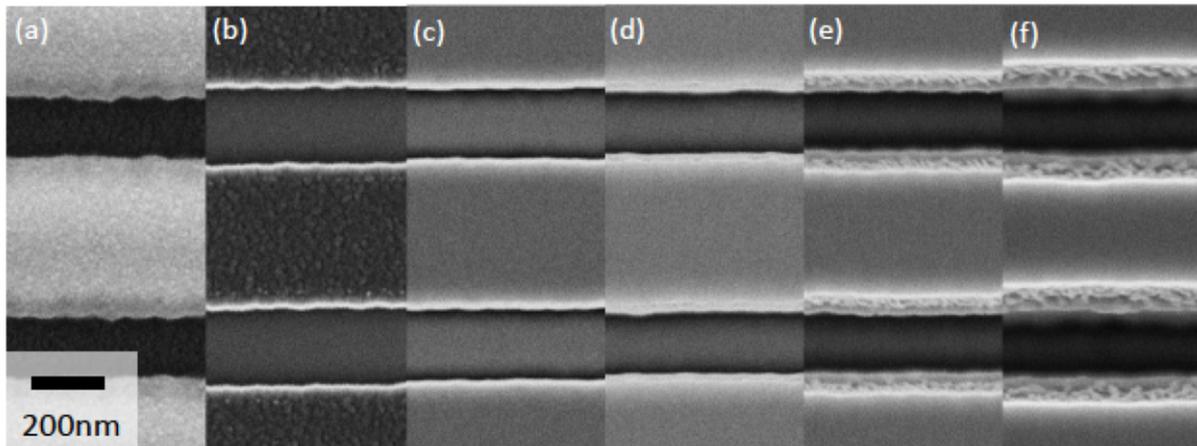


Abb. 4.5: Vergleich von SEM-Aufnahmen der Resiststruktur (a), Chromstruktur (b) und Kieselglasstruktur unterschiedlicher Tiefen $d = 410$ nm (c), $d = 820$ nm (d), $d = 1230$ nm (e), $d = 1640$ nm (f). Als Massstab kann die Periode verwendet werden, welche 667 nm beträgt.

che Seitenwandrauheit, die in der vorgestellten Analyse jedoch nicht erfasst wird. Analog zu der in Abb. 4.4(a) dargestellten Entwicklung der RMS-Raugkeit lässt sich der in Abb. 4.4(b)-(c) gezeigte Verlauf für die Korrelationslänge und den Rauheitsexponenten bestimmen. Beide Parameter steigen zunächst an, was auf einen glatter werdenden Kantenverlauf hinweist, bevor sie bei größeren Ätztiefen wieder kleiner werden, was eine Zunahme der Rauheit bedeutet (vgl. [29, S. 13 ff.]).

4.1.4 Modellierung: Erzeugung künstlicher rauer Kanten

Für die theoretische Untersuchung der Kantenrauheit und deren Auswirkungen auf das Streulichtverhalten eines Gitters wird es in späteren Kapiteln nötig sein, künstliche raue Kanten mit festgelegten Rauheitsparametern zu generieren. Dazu wird in der vorliegenden Arbeit die Methode des „gleitenden Durchschnitts“ (engl.: *moving average method*), welche erstmals 1966 von Naylor *et al.* [136, S.120] beschrieben wurde, verwendet. Bei dieser Methode wird die diskretisierte raue Kante $\bar{X} = (X_0, \dots, X_{N_y})$ als Funktion eines Vektors $\bar{\epsilon} = (\epsilon_0, \dots, \epsilon_{N_y})$ von Gaußischem weißem Rauschen mit Standardabweichung σ_ϵ entsprechend

$$X_n = \sum_{l=0}^{N_y} \delta_l \epsilon_{n-l} \quad (4.11)$$

gebildet. Der Vektor $\bar{\delta} = (\delta_0, \dots, \delta_{N_y})$ wird dabei durch die ACF von \bar{X} bestimmt, welche einerseits durch Gleichung (4.2) und die Rauheitsparameter vorgegeben ist. Andererseits kann die ACF entsprechend Gleichung (4.1) im diskreten Fall durch den Erwartungswert $\langle X_n X_{n+\tau} \rangle$ berechnet

werden. Dies führt zu einer Bestimmungsgleichung

$$ACF(\tau \cdot \Delta y) = \sigma_\varepsilon^2 \sum_{l=0}^{N_y - \tau} \delta_{l+\tau} \delta_l \quad (4.12)$$

für den Vektor $\bar{\delta}$, wobei $\tau = 0, 1, \dots, N_y$ und Δy die Pixelgröße der diskretisierten rauen Kante darstellt. Die Länge der Kante ist dann durch $P_y = N_y \Delta y$ festgelegt (vgl. Kapitel 2.2). Bei dieser Gleichung handelt es sich um ein nichtlineares Gleichungssystem, welches nur für $\alpha = 0.5$ analytisch lösbar ist. Es existieren jedoch verschiedene numerische Algorithmen, wie z.B. der *Levenberg-Marquardt* Algorithmus [137] oder die „*dogleg*“-Methode [138], welche auch eine Lösung für $\alpha \neq 0.5$ erlauben. Nach Bestimmung von $\bar{\delta}$ kann schließlich über Gleichung (4.11) der Vektor \bar{X} und damit die künstliche raue Kante generiert werden.

4.2 Modellierung der von Kantenrauheit hervorgerufenen Streuung

Auch wenn schon einige Arbeiten zur Auswirkung der Kantenrauheit auf die optische Funktion der Gitter existieren, ist die durch sie verursachte Streulichtverteilung (ARS) bisher nur ansatzweise untersucht worden. Beispielsweise wurde in [41, 139] die Finite-Elemente-Methode benutzt um die Auswirkungen von Linienpositionsschwankungen (engl.: *line position roughness*, LPR) und Linienbreitenschwankungen (engl.: *line width roughness*, LWR) auf die Effizienzen der Beugungsordnungen zu simulieren und Bergner *et al.* [140] entwickelten einen Effektive-Medien-Ansatz, um die Auswirkungen der LER auf Scatterometriemessungen zu modellieren. In einer Studie von Germer *et al.* [98, 99] wurde eine erste Untersuchung der Streulichtverteilung vorgestellt, wobei unter Anwendung des in Kap. 2.2 vorgestellten Simulationsmodells die Auswirkungen von LPR und LWR auf die Streulichtordnungen in Umgebung der 0. BO untersucht wurden. Kato *et al.* [40] wiederum konnte die von Bergner gemachten Beobachtungen analytisch erklären. In all diesen Untersuchungen wird jedoch nur der Parameter σ der Störung (sei es nun LER, LPR oder LWR) berücksichtigt. Die Zweidimensionalität des Problems, d.h. die vollständige spektrale Charakteristik, kann in 2D-Simulationen nur unter enormem numerischem Aufwand untersucht werden. Eine Methode, die diese Einschränkung umgeht und eine schnelle Berechnung der 2D-Streulichtverteilung von gestörten Gitterstrukturen erlaubt, ist der sogenannte *Fieldstitching*-Ansatz [141, 142]. Innerhalb dieser Methode wird das Nahfeld von kleinen, leicht unterschiedlichen Elementarzellen zu einem gemeinsamen Feld größerer Ausdehnung zusammengesetzt und anschließend ins Fernfeld propagiert. Jedoch zeigt diese Methode Artefakte der Elementarzellen und kann langreichweitige

Korrelationen in y -Richtung innerhalb einzelner Linien und in x -Richtung zwischen verschiedenen Linien aufgrund der kleinen Elementarzellen nicht berücksichtigen. In dieser Arbeit soll daher eine neuartige Methode vorgestellt werden, welche die exakte Berechnung der 2D-ARS innerhalb der Dispersionsebene und in einem gewissen Winkelbereich um die Dispersionsebene (konische Streuung) erlaubt. Die Methode basiert auf dem in Kap. 2.2 vorgestellten 1D-Simulationsmodell, wobei gezeigt wird, dass die Zweidimensionalität der Störung im Rahmen einer *Bornschen Näherung*¹ berücksichtigt werden kann. Daher wird in Abschnitt 4.2.1 zunächst eine analytische Beschreibung der von LER hervorgerufenen Streulichtverteilung (ARS) gegeben, auf deren Basis in Abschnitt 4.2.2 schließlich die Erweiterung des 1D-Simulationsmodell auf 2D-Störungen vorgestellt wird.

4.2.1 Skalare Beugungstheorie im Rahmen der TEA

Um die grundlegenden Mechanismen und Zusammenhänge zu verstehen, die zur diffusen Streuung aufgrund der Kantenrauheit führen, ist eine einfache analytische Beschreibung der ARS binärer Phasengitter wünschenswert. Dabei sollen die folgenden Ableitungen im Rahmen einer erweiterten dünne Elemente Approximation (TEA) durchgeführt werden, ähnlich den Ausführungen in [59, 143]. Die Erweiterung besteht darin, dass zusätzlich zum Phasenhub $\Delta\phi$ zwischen Gräben und Stegen des Gitters, die Fresnelkoeffizienten t an jeder Grenzfläche berücksichtigt werden sollen. Außerdem soll eine Abhängigkeit der Phasenverschiebung und der Fresnelkoeffizienten vom Einfallswinkel θ_i , aber auch vom Streuwinkel θ , in Betracht gezogen werden. Eine ausführliche Diskussion zu $\Delta\phi(\theta_i, \theta)$ und $t(\theta_i, \theta)$ soll in Abschnitt 4.3.1 geführt werden. Zunächst soll mit der Transmissionsfunktion eines beliebigen zweidimensionalen binären Phasengitters

$$g(x) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \Pi\left(\frac{x-np}{p-b}\right) \cdot t_{ig}t_{gt}e^{i\phi_s} + \sum_{n=0}^{N_p-1} \Pi\left(\frac{x-np+\frac{p}{2}}{b}\right) \cdot t_{is}t_{st}e^{i\phi_s} \quad (4.13)$$

begonnen werden, wobei N_p die Zahl der Gitterstege, p die Gitterperiode, b die Stegbreite und $\phi_{s/g}$ die Phasenverschiebung des Steges bzw. der Gräben bedeuten. t_{ig} und t_{is} repräsentieren die Fresnelkoeffizienten an der Grenzfläche zwischen Einfallshalbraum und Graben bzw. Steg, t_{st} und t_{gt} zwischen Steg bzw. Graben und Transmissionshalbraum. Da die Untersuchung auf monolithische Gitter beschränkt werden soll gilt $n_i = n_s$ und $n_g = n_t$ und damit $t_{is} = t_{gt} = 1$ bzw. $t_{ig} = t_{st} \stackrel{!}{=} t$. Bisher beschreibt Gl. (4.13) das ungestörte Gitter mit perfekt glatten Kanten, weshalb auch keine y -Abhängigkeit zu erkennen ist. Führt man eine Kantenrauheit ein, was sich in eine y -abhängige Störung des Stegschwerpunktes Δp_n und der Stegbreite Δb_n übersetzen lässt, so erhält man nach

¹Im Rahmen einer Bornschen Näherung werden nur Störterme erster Ordnung berücksichtigt.

einigen grundlegenden algebraischen Umformungen

$$g(x, y) = \underbrace{\sum_{n=0}^{N_p-1} \Pi\left(\frac{x-np}{p}\right) \cdot te^{i\phi_s}}_{\text{spekularer Anteil}} + \underbrace{\sum_{n=0}^{N_p-1} \Pi\left(\frac{x-np-\Delta p_n(y)}{b+\Delta b_n(y)}\right) \cdot (te^{i\phi_s} - te^{i\phi_s})}_{\text{Höhere Ordnungen und Streulicht}} \quad (4.14)$$

wobei Δp_n und Δb_n aus den linken und rechten Kanten $X_{l/r}$ des Steges nach

$$\Delta p_n(y) = \frac{X_{l,n}(y) + X_{r,n}(y)}{2} \propto \mathcal{N}\left(0, \sigma/\sqrt{2}\right) \quad (4.15)$$

$$\Delta b_n(y) = X_{l,n}(y) - X_{r,n}(y) \propto \mathcal{N}\left(0, \sigma \cdot \sqrt{2}\right) \quad (4.16)$$

abgeleitet werden können. Bei Δp_n und Δb_n handelt es sich somit auch um gaussverteilte Zufallszahlen der Standardabweichungen $\sigma/\sqrt{2}$ bzw. $\sigma \cdot \sqrt{2}$. Im Rahmen der Fourieroptik ist das Beugungsbild dieser Struktur durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten von $g(x, y)$ gegeben. Da hier nur der Streulichtanteil von Interesse ist, wird der erste Summand in Gl. (4.14), welcher nur Beiträge zur 0. Ordnung liefert, weggelassen. Unter Annahme kleiner Störungen $\sigma \ll p$ kann eine enorme Vereinfachung erreicht werden, indem man alle Störterme, welche von Δp_n und Δb_n abhängen, in einer Taylorreihe erster Ordnung (*Bornsche Näherung*) entwickelt. Da es sich bei den Störparametern um stochastische Größen handelt, muss schließlich noch der Erwartungswert gebildet werden. Das beschriebene Vorgehen kann im Detail in Anhang B nachvollzogen werden. Letztlich erhält man entsprechend der Definition winkelaufgelöster Streuung (Gleichung (2.1)) die ARS für ein durch LER gestörtes Gitter

$$ARS(\theta, \theta_y) = \frac{4n_i^3}{p\lambda^2 n_i \cos \theta_i} |t(\theta_i, \theta)|^2 [1 - \cos \Delta\phi(\theta_i, \theta)] \text{PSD}(\theta_y) \cos^2 \theta, \quad (4.17)$$

wobei θ_y der Beugungswinkel in y -Richtung ist und die Einheit der ARS in sr^{-1} gegeben ist. Für $\theta_y = 0^\circ$ erhält man die Streuung entlang der Dispersionsebene des Gitters, in welcher auch die Beugungsordnungen liegen.

In Gl. (4.17) können grundlegende Zusammenhänge zwischen generiertem Streulicht und verschiedenen Parametern erkannt werden. Neben dem Einfluss der Rauheitsparameter findet man zusätzlich einen starken Einfluss der Gittergeometrie (Periode p , Tiefe d), der optischen Konstanten n_i und n_t und der Beleuchtungsparameter λ und θ_i . Eine genaue Diskussion der Abhängigkeiten und insbesondere des Gültigkeitsbereiches der abgeleiteten Gleichung soll in Abschnitt 4.3.1 stattfinden. Dafür nötige Vergleichsdaten können beispielsweise durch rigorose Streulichtsimulationen erhalten werden. Daher soll im Folgenden zunächst ein einfaches eindimensionales rigores Modell abgeleitet werden, welches auf Simulationen im Rahmen der RCWA basiert.

4.2.2 Rigorose Simulation diffuser Streuung

Schon in Kapitel 2.2 wurde gezeigt, dass es möglich ist, Störungen der Gittergeometrie in der Simulation zu berücksichtigen und die daraus hervorgehende Streulichtverteilung zu berechnen, wenn die RCWA-Elementarzelle auf ein Vielfaches der Grundperiode erweitert wird. Dieses Prinzip wurde auch in Kapitel 3.3 bei der Untersuchung der Gittergeister auf eindimensionale Simulationen angewendet. Will man die Streulichtverteilung, welche durch die LER hervorgerufen wird, ebenso berechnen, ist es nötig zweidimensionale Berechnungen durchzuführen. Eine solche Simulation erfordert eine 2D-Elementarzelle im RCWA-Algorithmus, welche durch ihre lateralen Dimensionen $P_x \times P_y$ bestimmt ist, wobei $P_x = N_x p$ und $P_y = N_y \Delta y$ (vgl. Kapitel 2.2). Die raue Kante in y -Richtung muss entsprechend des in Abschnitt 4.1.4 beschriebenen Algorithmus künstlich generiert werden. Das Grundproblem der 2D-Simulation ist in Abb. 4.6 illustriert. Eine detaillierte und genaue Berechnung der ARS_{2D} erhält man, wenn P_x und P_y ausreichend groß im Vergleich zur Wellenlänge gewählt werden, sodass viele Streulichtordnungen propagieren. Allerdings ist man dabei aufgrund des enormen numerischen Aufwands einer 2D-Simulation deutlich beschränkt. Für das FLEX-Gitter mit $p = 667$ nm bei $\lambda = 633$ nm hat sich gezeigt, dass die Simulation einer Elementarzelle der maximalen Dimensionen von $P_x = 12p$ und $P_y = 5 \mu\text{m}$ noch mit der zur Verfügung stehenden Rechentechnik möglich ist. Die Berechnungszeit beträgt dann allerdings schon $T = 48$ h. Das Simulationsergebnis für eine LER mit $\sigma = 3$ nm, $\xi = 50$ nm und $\alpha = 0.5$ ist in Abb. 4.6(b) dargestellt.

Neben der sehr großen Rechenzeit besitzt diese Methode den Nachteil, dass auch die Zahl der Datenpunkte der simulierten ARS-Kurve eher gering ist. Eine praktikable Alternative wäre eine eindimensionale Streulichtsimulation. Qualitativ lässt sich das zweidimensionale Problem relativ einfach in die eindimensionale Ebene übertragen, indem man das Gitterprofil, welches aus dem Schnitt senkrecht zu den Gitterstegen ergibt, als Elementarzelle verwendet. Abbildung 4.6(a) zeigt skizzenhaft, wie der Schnitt durch ein LER-gestörtes Gitter aussieht. Ein Vergleich des Schnittprofils mit dem Profil eines ungestörten Gitters, was durch eine grün eingezeichnete Linie dargestellt ist, offenbart die Störung im 1D-Fall. Diese lässt sich dann wieder durch eine Schwankung der Stegschwerpunktposition Δp_n und der Stegbreite Δb_n des n -ten Gitterstegs entsprechend Gleichung (4.15) und (4.16) beschreiben. Die Größe einer solchen 1D-Elementarzelle wird dann nur noch durch den Parameter N_x bestimmt, welcher aufgrund der Eindimensionalität des Problems nun weitaus größer gewählt werden kann. Führt man entsprechende wellenoptische Simulationen auf Basis eines so gestörten 1D-Gitters aus, so findet man die in Abb. 4.6(b) rot dargestellte Kurve. Obwohl in dieser Rechnung $N_x = 100$ gesetzt wurde, beträgt die Rechenzeit nur etwa $T = 3$ min. Außerdem bietet die Kurve, aufgrund der großen Ausdehnung der Elementarzelle in x -Richtung, eine ungleich größere Winkelauflösung. Weiterhin zeigt der Vergleich der ARS_{1D} mit der ARS_{2D} in

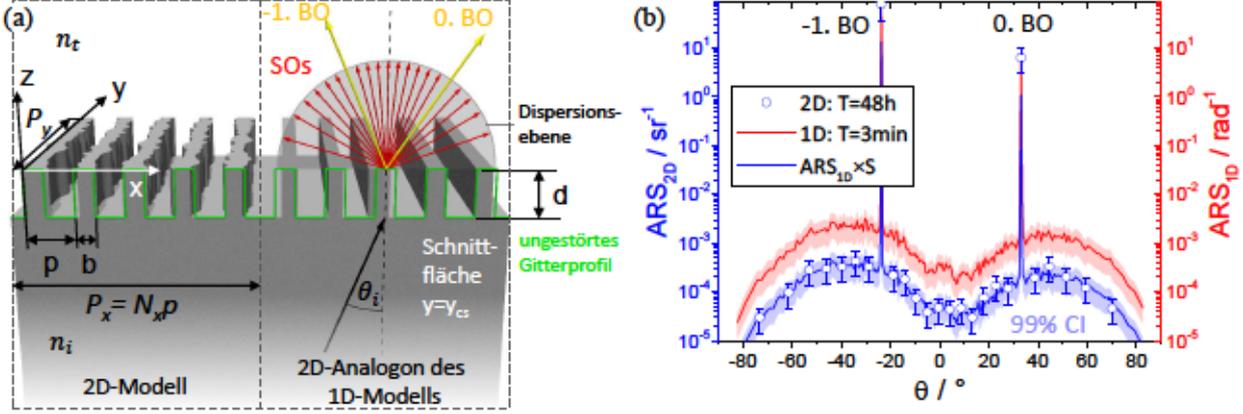


Abb. 4.6: (a) Illustration des Zusammenhangs des 1D- und 2D-Simulationsmodells. *Links:* 2D-Modell berücksichtigt volle LER-Charakteristik innerhalb eines Gebietes $P_x \times P_y$ und berechnet Streulichtordnungen (SO) im vollen Halbraum (nicht dargestellt). *Rechts:* Das 1D-Modell verwendet den Schnitt durch das LER-gestörte Gitter (entlang $y = y_{cs}$) als Elementarzelle. Im 2D-Fall entspricht dieser Schnitt wieder einem Gitter mit in ihrer Position gestörten, jedoch glatten Kanten. Die 1D-Simulation liefert nur SOs in der Dispersionsebene. (b) ARS-Simulationsergebnisse (für das FLEX-Gitter und $\lambda = 633$ nm, $\theta_i = 21.8^\circ$) des 2D- ($N_x = 12$, $P_y = 5 \mu\text{m}$) und des 1D-Modells ($N_x = 100$) und Anpassung der 1D-ARS an die 2D-Realität mittels des Skalierungsfaktors S . Das 1D-Modell erlaubt eine Reduktion der Berechnungszeit T um einen Faktor 1000. Die farbig schattierten Bereiche und die Fehlerbalken repräsentieren die 99%-Konfidenzintervalle (CI).

Abb. 4.6(b) eine qualitativ sehr gute Übereinstimmung beider Kurven. Eine quantitative Übereinstimmung ist ausgeschlossen, da schon die Einheiten beider Kurven unterschiedlich sind. Außerdem wird in der 1D-Simulation die Zweidimensionalität der LER vernachlässigt, d.h. bei Bestimmung der Störungen Δp_n und Δb_n in der 1D-Elementarzelle ist nur der Parameter σ nötig, ξ und α werden nicht beachtet. Es ist allerdings möglich, einen Skalierungsfaktor S festzulegen, der die Parameter ξ und α berücksichtigt und das 1D-Simulationsergebnis quantitativ korrigiert, d.h.

$$\text{ARS}_{2\text{D}} = S \cdot \text{ARS}_{1\text{D}} \quad \longrightarrow \quad \frac{\eta_{2\text{D}}}{\Delta\Omega} = S_{\text{LER}} \cdot S_{\text{dim}} \cdot \frac{\eta_{1\text{D}}}{\Delta\theta}. \quad (4.18)$$

In dieser Gleichung wurden schon die Definitionen der ARS entsprechend der Gleichungen (2.4) und (2.5) eingesetzt (wobei die Indizes weggelassen wurden) und der Faktor S wurde in einen Faktor S_{dim} , welcher den unterschiedlichen Dimensionen Rechnung trägt, und einen Faktor S_{LER} , welcher die Rauheitsaspekte berücksichtigen soll, aufgeteilt. Für kleine Raumwinkel $\Delta\Omega$ kann man die Näherung $\Delta\Omega \approx \Delta\theta\Delta\theta_y$ anbringen und der Dimensionsfaktor wird

$$S_{\text{dim}} = \frac{1}{\Delta\theta_y} = \frac{n_t P_y}{\lambda}, \quad (4.19)$$

wobei hier die Identität $\frac{\partial f_y}{\partial \theta_y} = \frac{n_t}{\lambda} \cos \theta_y$, welche aus der Gittergleichung (mit der Raumfrequenz $f_y = \frac{m}{P_y}$ bzw. $\partial f_y = \frac{1}{P_y}$) abgeleitet werden kann, für kleine Winkel $\theta_y \approx 0^\circ$ verwendet wurde.

Um den unbekanntem Rauheitsfaktor S_{LER} zu finden, muss man sich zunächst klar machen, was das Analogon des 1D-Simulationsprinzips im 2D-Fall ist: Die 1D-Elementarzelle ist im 2D-Fall eine Struktur mit perfekt glatten Kanten in y -Richtung, deren x -Positionen stochastisch variieren. Dieser Fall ist ebenfalls in Abb. 4.6(a) illustriert. Eine solche Störung lässt sich durch eine Kantenrauheit unendlich großer Korrelationslänge beschreiben. In Gl. (4.17) haben wir gefunden, dass die Rauheitsparameter nur über die spektrale Leistungsdichte PSD zur Streuung beitragen und insbesondere in Dispersionsrichtung (Ortsfrequenz $f_y = 0$) den Beitrag $PSD(f_y = 0) \stackrel{\alpha=0.5}{=} 2\sigma^2\xi$ liefern. Für eine wachsende Korrelationslänge ξ konzentriert sich das Leistungsspektrum zunehmend um die Raumfrequenz $f_y = 0$ (vgl. Abb. 4.1(b)) und wird schließlich für $\xi \rightarrow \infty$ zur Deltafunktion $PSD = \sigma^2\delta(f_y)$, da *Parseval's Theorem*¹ erfüllt sein muss [109, 132]. Da wir eine endliche Kantenlänge P_y betrachten, wird die zugehörige PSD diskret und besitzt die Schrittweite $\Delta f_y = 1/P_y$. Da auch eine diskrete PSD Parseval's Theorem erfüllen muss [111, 131], d.h. $PSD_{\xi=\infty}(0) \cdot \Delta f = \sigma^2$ gefordert ist, kann man für den Maximalwert der diskreten PSD schlussfolgern $PSD_{\xi=\infty}(0) = P_y\sigma^2$. Die 1D-Simulation liefert also immer eine ARS, welche auf dem von $PSD_{\xi=\infty}(0)$ vorgegebenen Niveau liegt. Für endliche Korrelationslängen sollte die ARS jedoch auf dem von $PSD(f_y)$ bestimmten Niveau liegen. Um das 1D-Simulationsergebnis dahingehend anzugleichen ist folglich der Faktor

$$S_{\text{LER}} = \frac{PSD(f_y)}{PSD_{\xi=\infty}(0)} = \frac{PSD(f_y)}{P_y\sigma^2} \quad (4.20)$$

nötig. Für den Skalierungsfaktor S in Gl. (4.18) ergibt sich dann zusammen mit Gl. (4.19)

$$S = S_{\text{dim}} \cdot S_{\text{LER}} = \frac{n_t}{\lambda\sigma^2} PSD(f_y) \stackrel{f_y=0, \alpha=0}{=} \frac{2n_t\xi}{\lambda}. \quad (4.21)$$

Der abgeleitete Faktor hängt also maßgeblich vom Verhältnis der Wellenlänge zur Korrelationslänge ab. Die Abhängigkeit von der Kantenlänge P_y , welche ausschließlich aufgrund von Analogiebetrachtungen eingeführt wurde, verschwindet bei Multiplikation der Einzelfaktoren S_{dim} und S_{LER} . Die blaue Kurve in Abb. 4.6(b) zeigt die Anpassung des 1D-Simulationsergebnisses an die 2D-Realität unter Verwendung des Skalierungsfaktors S . Die Grafik zeigt eine exzellente Übereinstimmung der auf diese Weise korrigierten 1D-Kurve mit der 2D-Simulation. Die Methode kombiniert damit die Vorteile der 1D-Streulichtsimulation, welche innerhalb einer kurzen Rechenzeit detailreiche Ergebnisse liefert, und der 2D-Simulation, welche die Zweidimensionalität der LER und insbesondere den kompletten Satz an Rauheitsparametern vollständig berücksichtigt.

¹*Parseval's Theorem* besagt, dass eine Funktion und ihre Fouriertransformierte (bzw. ihre Fourierkoeffizienten für endliche, diskrete Funktionen) die gleiche L^2 -Norm haben [144, S. 188] [145]. Dies bedeutet im vorliegenden Fall, dass das Integral über die PSD gleich der Varianz ist.

Es muss betont werden, dass Relation (4.18) exakte Ergebnisse entlang der Dispersionsrichtung des Gitters liefert. Jedoch sollte auch im Falle konischer Streuung eine gewisse Näherungslösung möglich sein. Inwieweit die Methode auf konische Streuung angewendet werden kann soll in Kap. 4.3.3 untersucht werden. Eine abstrakte Herleitung des Faktors S auf Basis sehr allgemeingültiger Betrachtungen, wie sie in [146] durchgeführt wurde, offenbart sogar eine viel weitergehendere Gültigkeit von Gleichung (4.18). Es zeigt sich dabei, dass der Zusammenhang (4.18) auf beliebige eindimensionale Liniengitter (z.B. Blazegitter, Sinusgitter, Echellegitter) und beliebige stochastische Störungen (die mit Leistungsspektren beschreibbar sind) angewendet werden kann.

Mit der Beziehung (4.18) steht uns schließlich ein (halbrigoroses) Werkzeug zur Verfügung, mit dem theoretische Modelle überprüft und die diffuse Streuung beliebiger Gitter analysiert werden kann. Aufgrund des reduzierten numerischen Aufwands können nun auch Streulichtsimulationen an großperiodischen Gittern durchgeführt werden, was im Rahmen des zweidimensionalen Modells unmöglich ist. Dies soll in den folgenden Abschnitten getan werden. Zunächst soll das in Abschnitt 4.2.1 im Rahmen der TEA hergeleitete analytische ARS-Modell (Gl. (4.17)) am Beispiel großperiodischer Gitter überprüft werden. Anschließend wird das Streulichtverhalten tiefer, kleinperiodischer Gitter untersucht. Ziel ist es, ein Gefühl für LER-induziertes Streulicht zu gewinnen und Regeln abzuleiten, die Vorhersagen zur Streulichtverteilung von Spektrometergittern erlauben.

4.3 Theoretische Untersuchung

4.3.1 Gitter im Gültigkeitsbereich der TEA

Die analytische Gl. (4.17) wurde im Rahmen der TEA hergeleitet und sollte damit für großperiodische, flache Gitter gültig sein. Dies soll unter Verwendung des im vorigen Abschnitt beschriebenen Simulationsmodells überprüft werden. Falls nicht anders vermerkt, basieren die folgenden Untersuchungen größtenteils auf einem monolithischen Kieselglasgitter ($p = 10 \mu\text{m}$, $b = 6.45 \mu\text{m}$, $d = 100 \text{nm}$, $\theta_i = 0^\circ$, $\lambda = 1 \mu\text{m}$, $\bar{P} = \text{TE}$, $n_i = 1.457$, $n_t = 1$, $\sigma = 10 \text{nm}$, $\xi = 200 \text{nm}$, $\alpha = 0.5$), dessen Streuung in Transmission untersucht wird. Die Untersuchungen sollen den Einfluss der insgesamt 11 verschiedenen freien Parameter auf das Streulichtverhalten des Gitters darlegen. Dabei sollen einzelne Parameter so variiert werden, dass der Gültigkeitsbereich von Gl. (4.17) aufgezeigt und Besonderheiten im Streulichtverhalten erläutert werden können.

Fresnelkoeffizienten und Phasenhub

Die wohl wichtigsten Terme, die in Gl. (4.17) auftreten, sind die Fresnelkoeffizienten $t(n_i, n_t, \bar{P}$,

θ_i, θ) und der Phasenversatz $\Delta\phi(n_i, n_t, d, \theta_i, \theta)$, da diese sowohl den qualitativen als auch quantitativen Streulichtverlauf essentiell beeinflussen. Beide Parameter hängen neben den optischen Konstanten und der Polarisation bzw. der Gittertiefe vom Einfallswinkel ab. Abbildung 4.7 zeigt die simulierte ARS des oben beschriebenen großperiodischen, flachen Gitters für unterschiedliche Brechzahlen des Transmissionshalbraums $n_t = 1$ und $n_t = 2$. Die Simulationen wurden jeweils für die zwei Polarisationszustände $\bar{P} = \text{TE}$ und $\bar{P} = \text{TM}$ durchgeführt und zeigen, dass das Streulichtverhalten auch für Gitter, welche vom Gültigkeitsbereich der TEA erfasst werden, keineswegs polarisationsunabhängig ist. Im Falle $n_t = 1$ sind die Unterschiede zwischen TE- und

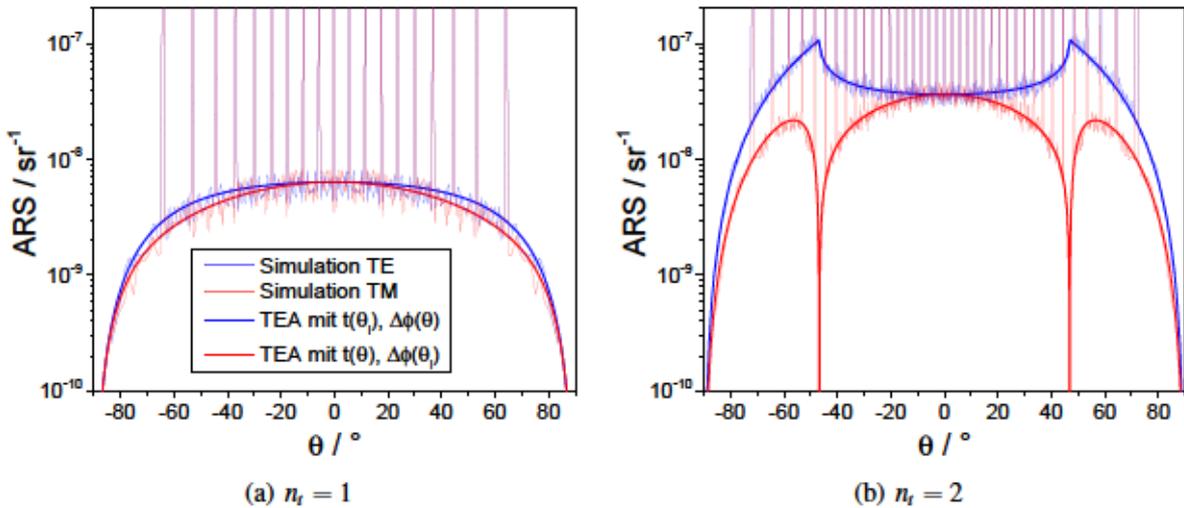


Abb. 4.7: Vergleich des TEA-Modells mit wellenoptischen Simulationen (RCWA) für ein LER-gestörtes, großperiodisches Gitter sowohl für TE- als auch TM-polarisiertes Licht und verschiedenen Brechungsindizes n_t des Transmissionshalbraums. Legende in (a) gilt auch für (b). Die deutlichen Peaks sind die vielen Beugungsordnungen des großperiodischen Gitters, welche in den Simulationen auch berechnet werden.

TM-Polarisation nur schwach, zeigen jedoch für $n_t = 2$ ein qualitativ erstaunlich unterschiedliches Verhalten. Dort findet man genau beim Grenzwinkel der Totalreflektion $\theta_{\text{TIR}} = \text{asin}(n_i/n_t) = 46.8^\circ$ ein Streulichtmaximum für TE-polarisiertes, jedoch ein scharfes Streulichtminimum, welches sogar streng auf Null abfällt, für TM-polarisiertes Licht. Allein durch die Polarisationsabhängigkeit der Fresnelkoeffizienten ist dieser markante Unterschied nicht erklärbar. Dennoch lassen sich alle vier Kurven mit dem analytischen Modell in gute Übereinstimmung bringen, wenn die Fresnelkoeffizienten und der Phasenhub für TE- bzw. TM-Polarisation eine verschiedenartige Abhängigkeit vom Einfallswinkel bzw. Streuwinkel erfahren (siehe Abb. 4.7). Es zeigt sich, dass Gl. (4.17) eine korrekte Beschreibung des Streulichtes von TE-polarisiertem Licht liefert, wenn die Fresnelkoeffizienten vom Einfallswinkel θ_i bestimmt werden, der Phasenhub jedoch als Funktion des Streuwinkels θ

aufgefasst wird, d.h.

$$t_{\text{TE}}(\theta_i) = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad \Delta\phi_{\text{TE}}(\theta) = [k_{s,z}(\theta) - k_{g,z}(\theta)] d, \quad (4.22)$$

wobei θ_t der Beugungswinkel der 0. Beugungsordnung (im Transmissionshalbraum) ist und $k_{s/g,z} = \sqrt{(n_{s/g}k_0)^2 - (n_t k_0 \sin \theta)^2}$ die Wellenvektorkomponenten der Streulichtordnungen im Steg bzw. Graben in z -Richtung sind. Für TE-polarisiertes Licht wird dieser Zusammenhang durch deutliche Parallelen zum weithin akzeptierten Rayleigh-Rice-Modell der Streuung an rauen Oberflächen [147] gestützt, was in Anhang C dargelegt ist. Für TM-polarisiertes Licht findet man genau den umgekehrten Fall: Für eine korrekte Beschreibung der simulierten Streuung werden die Fresnelkoeffizienten als Funktion des Streuwinkels aufgefasst, der Phasenhub hingegen ist konstant und wird vom Einfallswinkel bestimmt, also

$$t_{\text{TM}}(\theta) = \frac{2n_i \cos \Theta}{n_t \cos \Theta + n_i \cos \theta} \quad \Delta\phi_{\text{TM}}(\theta_i) = [k_{s,z}(\theta_i) - k_{g,z}(\theta_i)] d. \quad (4.23)$$

Hierbei bezeichnet $\Theta = \text{asin}\left(\frac{n_t}{n_i} \sin \theta\right)$ den zu den Streulichtordnungen im Transmissionshalbraum gehörigen Streuwinkel im einfallenden Medium bzw. in den Stegen, welcher über das Brechungsgesetz aus dem Streuwinkel im Transmissionshalbraum θ berechnet werden kann.

Die auf diese Weise bestimmten analytischen Kurven sind zusammen mit den Simulationen in Abb. 4.7 dargestellt. Es zeigt sich eine hervorragende Übereinstimmung beider Modelle. Allerdings stellt sich die Frage nach der Ursache für die gegensätzlichen Annahmen, welche je nach Polarisationsrichtung in Gleichung (4.22) und (4.23) für die Fresnelkoeffizienten und den Phasenhub getroffen werden müssen. Phänomenologisch anschaulich ist dabei die Folgerung, dass die Streuung von unpolarisiertem Licht im Mittel von Fresnelkoeffizienten und Phasen bestimmt ist, welche zu gleichen Teilen vom Einfalls- und Streuwinkel abhängen. Allerdings ist eine belastbare Aussage zu den Phasenverschiebungen der einzelnen Beugungsordnungen im Gitter wünschenswert. Es ist möglich, den Phasenverlauf der Beugungsordnungen im Gitter, welche ja einen ähnlichen Verlauf wie die Streulichtordnungen zeigen müssten, mittels der RCWA zu bestimmen. Dazu muss das Argument der in Gl. (1.8) auftretenden komplexen Feldamplituden T_m berechnet werden. Da keine Streuordnungen betrachtet werden sollen, kann auch ein Gitter viel größerer Periode untersucht werden, welches viele propagierende Beugungsordnungen besitzt. Zu jeder einzelnen Ordnung m wird die Phase aus den Feldamplituden extrahiert und über dem zugehörigen Beugungswinkel dargestellt. Das Ergebnis ist in Abb. 4.8 für ein Gitter mit $p = 60 \mu\text{m}$ zu sehen. Die Untersuchung zeigt, dass die Phasen bei TE-polarisiertem Licht tatsächlich den in Gl. (4.22) angenommenen Verlauf haben, wohingegen sie bei $\bar{P} = \text{TM}$ für alle Beugungsordnungen den gleichen

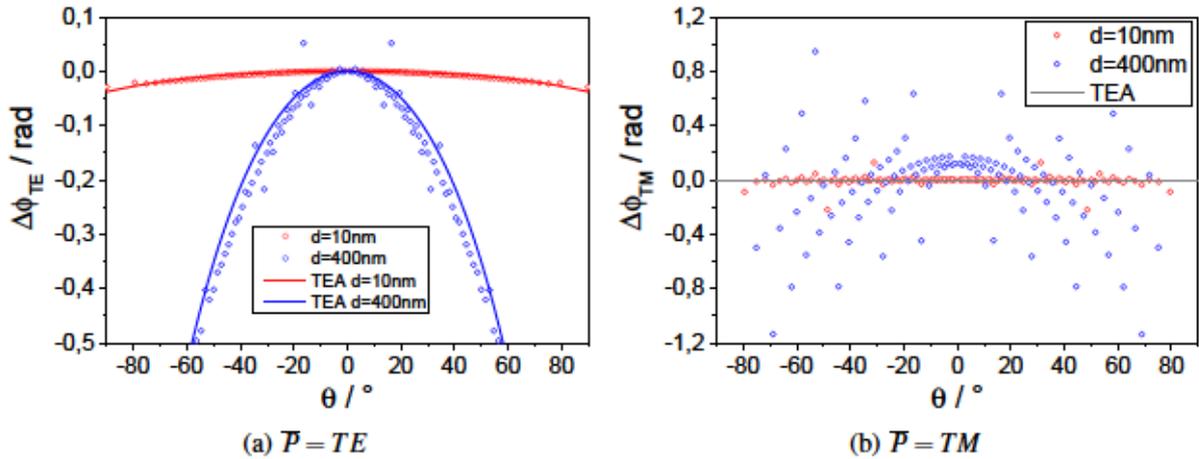


Abb. 4.8: Mittels der RCWA berechnete Phasenbeziehung zwischen den einzelnen Beugungsordnungen eines großperiodischen Gitters ($p = 60\mu\text{m}$, $FF = 0.645$, $\theta_i = 0^\circ$, $\lambda = 1\mu\text{m}$, $n_i = 1.457$, $n_t = 1$) für TE- und TM-polarisiertes Licht im Vergleich zu den im TEA-Modell verwendeten Phasenverläufen (Gleichungen (4.22) und (4.23)).

Wert haben. Man findet weiterhin, dass dieser Phasenverlauf im TE-Fall auch für zunehmende Gittertiefen zunächst stabil bleibt (siehe Kurve für $d = 400\text{nm}$ in Abb. 4.8(a)). Im TM-Fall hingegen zeigt sich, dass der Phasenverlauf für zunehmende Gittertiefe immer stärker schwankt, im Mittel aber immernoch konstant zu bleiben scheint (siehe Kurve für $d = 400\text{nm}$ in Abb. 4.8(b)). Dies deutet schon darauf hin, dass das TEA-Modell für größere Gittertiefen seine Gültigkeit verlieren wird, was im Folgenden anhand von rigorosen Vergleichssimulationen überprüft werden soll.

Gittertiefe und Brechungsindizes

Abbildung 4.9 zeigt einen Vergleich von 1D-Simulationsrechnungen für variierende Gittertiefe d und verschiedene Brechungsindizes n_i und n_t zu dem durch Gl. (4.17) beschriebenen TEA-Modell. Die Simulationen wurden lediglich für TE-polarisiertes Licht durchgeführt, da man für TM-Polarisation qualitativ ähnliche Ergebnisse erhält. Nach Gleichung (4.17) wird die Abhängigkeit der ARS von der Gittertiefe d ausschließlich über die Phasendifferenz $\Delta\phi$ zwischen Gittersteg und -graben, welche im Interferenzterm $(1 - \cos\Delta\phi)$ auftritt, bestimmt. Daher verschwindet die Streuung für $d = 0$. Für $d \ll \lambda$ steigt die ARS zunächst proportional zum Quadrat der Gittertiefe an (vgl. Gl. (C.2) in Anhang C), geht mit zunehmendem d in eine Sättigung über und erreicht entsprechend des Interferenzterms ein erstes Maximum bei $d_c = \frac{\lambda}{2\Delta n}$ (markiert durch die blaue Linie im unteren Teil von Abb. 4.9). Für $d \gtrsim d_c$ sagt das TEA-Modell sogar einen Rückgang der ARS voraus.

Obwohl das TEA-Modell seine Gültigkeit für große Gittertiefen verliert, kann dieses Verhalten teilweise in den ARS-Simulationen beobachtet werden. Einerseits zeigen die Grafiken in

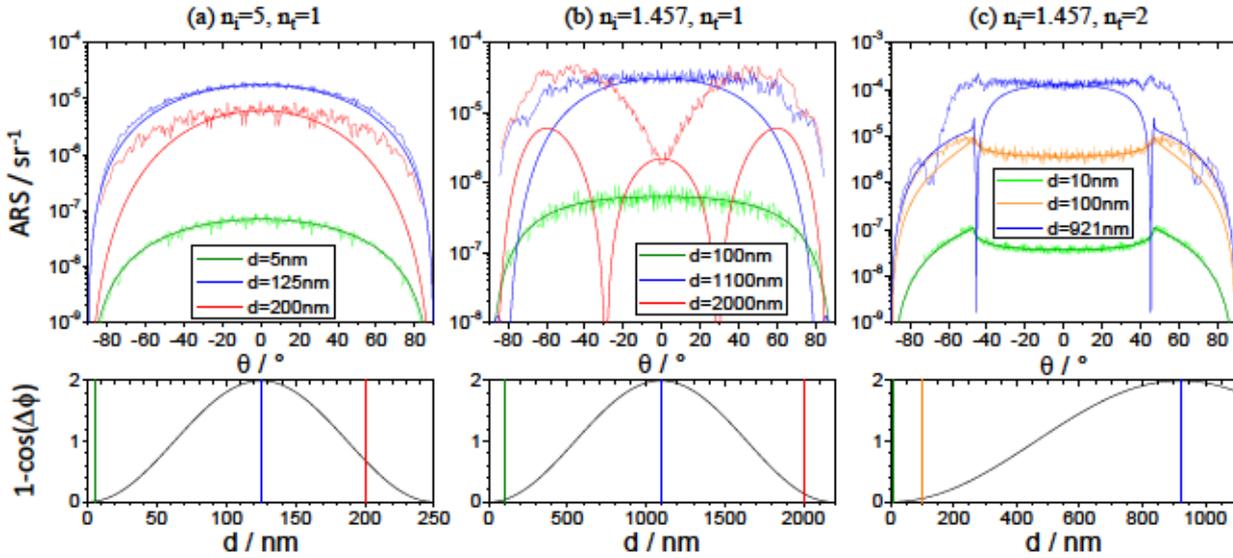


Abb. 4.9: *Oben:* Vergleich des TEA-Modells zum 1D-Simulationsmodell für ein großperiodisches Gitter mit unterschiedlichen Gittertiefen d bei verschiedenen Werten der Brechungsindizes (für $\bar{P} = \text{TE}$). Die dünne Linie repräsentiert jeweils die RCWA-Simulation, die dicke Linie das TEA-Modell. Für TM-Polarisation erhält man gleichartige Ergebnisse. Die Beugungsordnungen des Gitters, welche bei den Simulationsrechnungen auftreten, sind nicht dargestellt. *Unten:* Interferenzterm in Gl. (4.17) als Funktion der Gittertiefe d . Die Markierungen entsprechen in ihrer Farbe den ARS-Kurven, wobei der blaue Marker im Maximum der Interferenzfunktion liegt („kritische“ Tiefe d_c).

Abb. 4.9 eine perfekte Übereinstimmung zwischen TEA-Modell und Simulationskurven für kleine d (grüne Kurven). Andererseits werden die Abweichungen zwischen analytischem Modell und rigoroser Simulation mit zunehmendem d immer größer, vor allem für hohe Streuwinkel θ . Im Fall hoher Ablenkwinkel kann die Steg-Graben-Wechselwirkung nicht mehr vernachlässigt werden und das TEA-Modell verliert seine Gültigkeit (für große θ , blaue Kurven in Abb. 4.9). Für kleine Streuwinkel und beliebige Gittertiefen (sogar für $d > d_c$) stimmt das TEA-Modell jedoch nahezu perfekt mit den Simulationen überein. Beispielsweise wird der Rückgang des Streulichtniveaus für ein Kieselglasgitter mit $d = 2 \mu\text{m}$ für $\theta = 0^\circ$ noch immer gut durch Gl. (4.17) beschrieben (rote Kurve in Abb. 4.9(b)). Auch für beliebige andere Brechungsindexkombinationen wird dieses Verhalten beobachtet: Für einen sehr hohen Brechungsindex des Einfallshalbraums $n_i = 5$ und kleinen Index des Transmissionshalbraums $n_t = 1$ ist der Rückgang der ARS über das gesamte Winkelspektrum für $d > d_c$ besonders eindrucksvoll (rote Kurve in Abb. 4.9(a)). Abbildung 4.9(c) hingegen zeigt genau die umgekehrte Situation kleiner n_i und großer n_t . TEA und RCWA stimmen dort für sehr kleine $d = 10 \text{ nm}$ perfekt überein und sogar die Diskontinuität bei $\theta = 47^\circ$, welche durch den Winkel der Totalreflexion $\theta_{\text{TIR}} = \text{asin}(n_i/n_t)$ gegeben ist, wird durch das TEA-Modell beschrieben. Eine etwas größere Gittertiefe $d = 100 \text{ nm}$, welche jedoch noch viel kleiner als die kritische Tiefe $d_c = 921 \text{ nm}$ ist, führt jedoch schon zu deutlichen Abweichungen zwischen TEA und RCWA, vor allem für $|\theta| > |\theta_{\text{TIR}}|$ (orangene Kurve in Abb. 4.9(c)). Für noch größere d wird

die Abweichung schnell größer und für $d = d_c$ findet man nur noch im Bereich $\theta \approx 0^\circ \pm 10^\circ$ eine Übereinstimmung zwischen Modell und Daten.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass eine Übereinstimmung zwischen TEA-Modell und RCWA-Simulation am besten für hohe n_i und kleine n_t erreicht wird. Ein großes n_t hingegen scheint den Gültigkeitsbereich des TEA-Modells bzgl. der Gittertiefe zu reduzieren. Die Ursache für dieses Verhalten liegt in der Tatsache, dass eine potentielle transversale Ausbreitung (in x -Richtung) der Felder im Gitterbereich durch die Brechungsindizes bestimmt wird. Die maximale transversale Wellenzahl $k_0 n_t$ des propagierenden Streulichts in Transmission wird durch n_t bestimmt. Kleine n_t führen daher zu einer schwächeren Ausprägung transversaler Effekte innerhalb der Gitterstruktur (Steg-Graben-Wechselwirkungen), welche innerhalb des TEA-Ansatzes jedoch vernachlässigt werden. Wenn zusätzlich ein großes n_i auftritt, wird das Licht innerhalb eines Steges zur Vorwärtspropagation gezwungen, was vorteilhaft für die TEA-Gültigkeit ist. Abbildung 4.10 zeigt eine anschauliche Illustration dieser Interpretation.

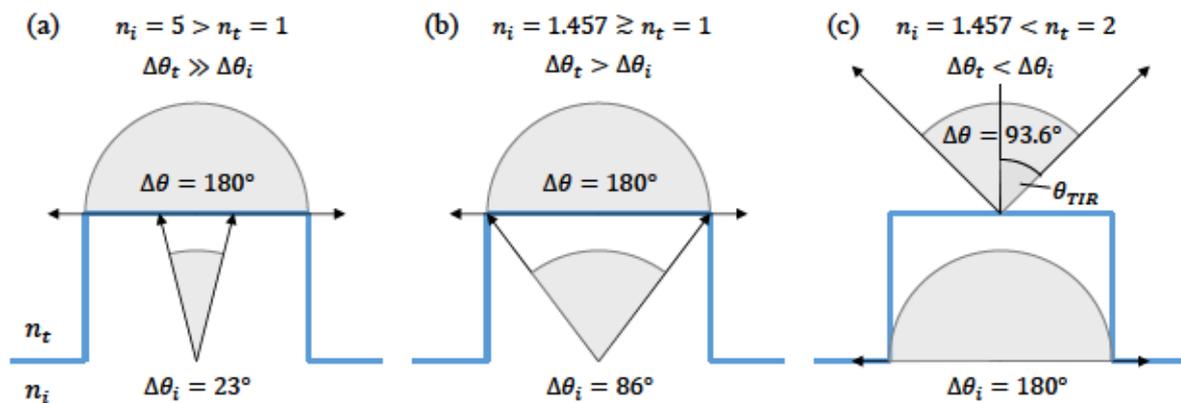


Abb. 4.10: Illustration zur Erklärung des Einflusses der Brechungsindizes auf den Gültigkeitsbereich des TEA-Modells. (a) Bei großem n_i und kleinem n_t wird das gesamte Winkelspektrum in Transmission durch einen nahezu paraxialen Winkelbereich im einfallenden Medium bzw. in den Stegen abgebildet und man erhält eine gute Übereinstimmung zwischen TEA und RCWA. (b) Bei kleinerem n_i nimmt der Anteil sich transversal ausbreitender Feldkomponenten im Gitterbereich zu und damit der Gültigkeitsbereich der TEA ab. (c) Für $n_i < n_t$ sind zur Beschreibung des kompletten Streulichtspektrums in Transmission sogar evaneszente Felder im Gitterbereich nötig (insbesondere für $|\theta| > |\theta_{TIR}|$), was eine große Verletzung des TEA-Gültigkeitsbereichs darstellt.

Dieses Bild erlaubt es nun auch, die in Abb. 4.7(b) beobachteten Unterschiede zwischen TE- und TM-polarisiertem Licht zu verstehen. In den durch die LER eingebrachten Störquellen werden die Elektronenhüllen durch das einfallende Licht zu Schwingungen angeregt, welche schließlich wieder Dipolstrahlung abgeben. Aufgrund der stochastischen Verteilung der Störquellen senden die Dipole Strahlung aus, welche im Mittel zu keiner vollständig destruktiven bzw. konstruktiven Interferenz fähig ist und daher in alle Raumrichtungen vorhanden ist (diffuses Streulicht). Für $\theta_i = 0^\circ$ regt TM-polarisiertes Licht Dipolschwingungen in x -Richtung an, welche hauptsäch-

lich in z -Richtung abstrahlen. In Schwingungsrichtung findet jedoch keinerlei Dipolabstrahlung statt. Innerhalb der Stege hat diese Richtung einen Streuwinkel von 90° , im transmissiven Medium mit $n_t > n_i$ hingegen entspricht dies dem Winkel der inneren Totalreflexion. Daher besitzt das Streulichtspektrum von TM-polarisiertem Licht in Abb. 4.7(b) ein streng auf Null abfallendes Minimum bei θ_{TIR} . TE-polarisiertes Licht hingegen regt die Elektronen in den Gitterstegen zu Dipolschwingungen in y -Richtung an, welche in alle Richtungen innerhalb der Einfallsebene (xz -Ebene) gleichmäßig abstrahlen (Nach Gleichung (4.17) nimmt die Abstrahlung sogar entsprechend des $(1 - \cos\Delta\phi)$ -Terms schwach mit θ zu). Beim Übergang vom Steg in das transmissive Medium wird die Streustrahlung, welche im Steg im Winkelbereich $\pm 180^\circ$ propagiert, in einen Winkelbereich $\theta = -\theta_{\text{TIR}} \dots \theta_{\text{TIR}}$ gebündelt (siehe Abb. 4.10(c)). Der $\cos^2\theta$ -Term in Gl. (4.17) verliert dann seine Dominanz und das Streulicht steigt mit θ zunächst an, bis es ein Maximum bei $\pm\theta_{\text{TIR}}$ erfährt. Für $|\theta| > |\theta_{\text{TIR}}|$ nimmt die Streulichtintensität schnell ab, da die evaneszenten Streulichtanteile innerhalb der Stege nur eine schwache Abstrahlung in den Transmissionshalbraum verursachen.

Periode und Füllfaktor

Die Auswirkungen einer Variation der Gitterperiode und des Füllfaktors sind in Abb. 4.11 dargestellt. Eine Änderung der Periode hat faktisch keine Auswirkung auf den qualitativen Verlauf der

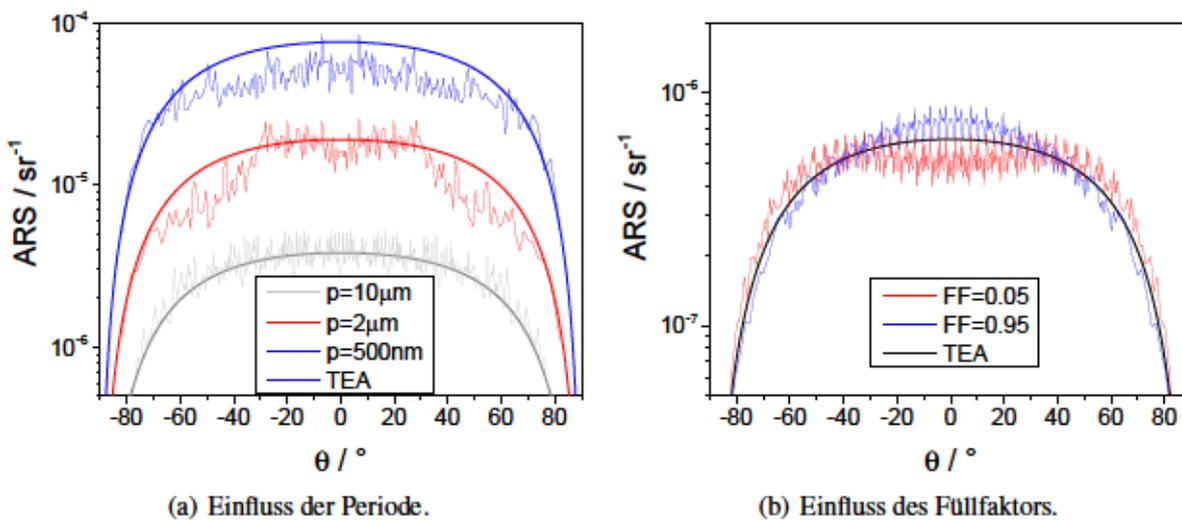


Abb. 4.11: Vergleich des TEA-Modells zum 1D-Simulationsmodell für verschiedene Perioden p (a) und Füllfaktoren FF (b). Die Beugungsordnungen des Gitters, welche bei den Simulationsrechnungen auftreten, sind nicht dargestellt.

ARS, bestimmt jedoch aufgrund der Proportionalität $ARS \propto \frac{1}{p}$ die Stärke der gestreuten Strahlung. Dies wird auch durch die Simulationrechnungen bestätigt, welche eine gute Übereinstimmung mit dem analytischen Modell zeigen. Zwar sollten für immer kleinere Perioden irgendwann Abwei-

chungen im simulierten und prognostizierten Streulichtverlauf auftreten, die Periode wurde aber - zumindest für kleine Gittertiefen ($d = 100\text{nm}$ in Abb. 4.11(a)) - nicht als kritische Größe identifiziert. Im Gegensatz zur Periode tritt der Füllfaktor in Gl. (4.17) überhaupt nicht auf und sollte weder einen qualitativen noch einen quantitativen Einfluss auf die Streulichtverteilung haben. Dies wird auch in den Simulationen bestätigt. Erst bei sehr kleinen (oder großen) Füllfaktoren weicht die simulierte ARS leicht vom analytischen Modell ab (Abb. 4.11(b)).

Einfallswinkel

Neben der Polarisation und der Wellenlänge wird die einfallende Strahlung noch durch ihren Einfallswinkel charakterisiert. Die Wellenlänge soll hier nicht untersucht werden, da diese im Prinzip das gesamte Problem lediglich skaliert und so nur eine Verschiebung der oben gefundenen Gültigkeiten bewirkt. Die Auswirkungen eines von Null abweichenden Einfallswinkels sollen jedoch näher untersucht werden. Nach Gl. (4.17) bestimmt der Einfallswinkel aufgrund der Proportionalität $ARS \propto \frac{1}{\cos\theta_i}$ die Stärke der gestreuten Strahlung. Andererseits wird diese auch durch die Abhängigkeit der Fresnelkoeffizienten vom Einfallswinkel im TE-Fall und durch die Abhängigkeit der Phase vom Einfallswinkel im TM-Fall beeinflusst. Der qualitative ARS-Verlauf sollte aber in beiden Fällen unverändert bleiben. Dies kann für TE-polarisiertes Licht für das gesamte Winkelspektrum $\theta_i = [-90^\circ, \dots, 90^\circ]$ bestätigt werden. In Abb. 4.12(a) kann man deutlich den Einfluss des Einfallswinkels auf den quantitativen Streulichtverlauf erkennen, der qualitative Verlauf bleibt jedoch unverändert. Abbildung 4.12(a) zeigt außerdem eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationsrechnungen mit dem TEA-Modell selbst für sehr große Einfallswinkel von bis zu $\theta_i = 80^\circ$. Für TM-polarisiertes Licht kann dies leider nicht bestätigt werden. Abbildung 4.12(b) zeigt, dass

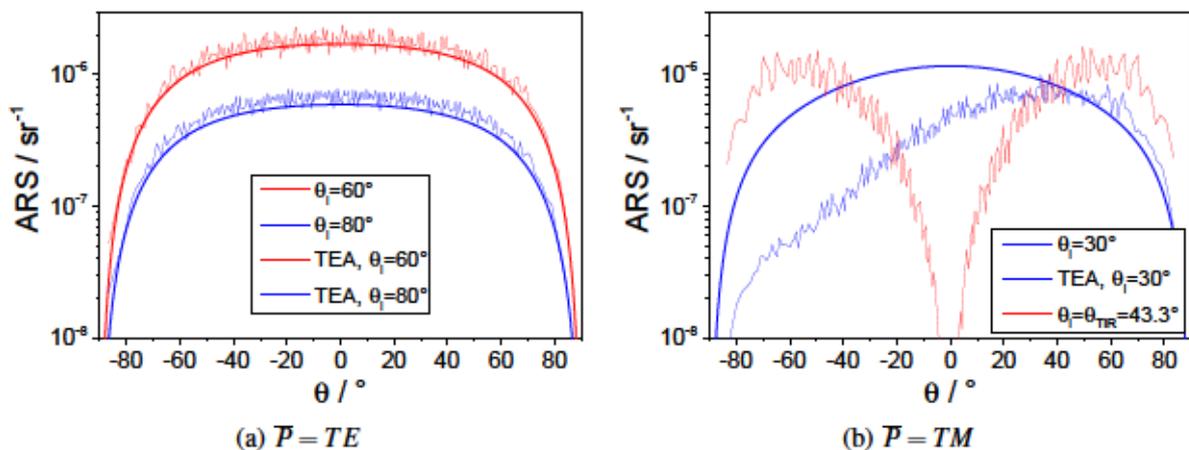


Abb. 4.12: Vergleich des TEA-Modells mit dem 1D-Simulationsmodell für verschiedene Einfallswinkel θ_i in TE- und TM-Polarisation. Die Beugungsordnungen des Gitters, welche bei den Simulationsrechnungen auftreten, sind nicht dargestellt.

schon bei kleinen Einfallswinkeln von $\theta_i = 30^\circ$ deutliche Unterschiede zwischen dem prognostizierten und simulierten ARS-Verlauf auftreten. Bemerkenswert ist vor allem, dass im Gegensatz zur TE-Polarisation die Symmetrie im Streulichtspektrum, welche von Gl. (4.17) vorhergesagt wird, verloren geht. Stattdessen ist das diffuse Streulicht nun deutlich asymmetrisch über den Beugungswinkel θ verteilt. Die Ursachen dieses Verhaltens liegen in der verschiedenartigen Anregung von Dipolschwingungen bei TE- bzw. TM-polarisiertem Licht. Im Falle TE-polarisiertem Licht schwingen die Dipole unabhängig vom Einfallswinkel immer in y -Richtung und strahlen entsprechend symmetrisch in die xz -Ebene ab. Bei TM-polarisiertem Licht werden Dipolschwingungen in der xz -Ebene angeregt. Abhängig vom Einfallswinkel ist die Schwingungsrichtung der Dipole um die y -Achse gedreht, was eine zur z -Achse asymmetrische Abstrahlung zur Folge hat. Für $\theta_i = \theta_{\text{TIR}} = \text{asin}(n_t/n_i)$ beispielsweise ist die zugehörige Schwingungsrichtung der Dipole im Transmissionshalbraum schon um 90° gedreht. Dann findet keine Abstrahlung in z -Richtung statt und es tritt ein Streulichtminimum $\text{ARS}(\theta) = 0$ für $\theta = 0^\circ$ auf (siehe Abb. 4.12(b)).

Fazit

Das im Rahmen einer erweiterten TEA abgeleitete analytische ARS-Modell nach Gl. (4.17) beschreibt die winkelaufgelöste Streuung LER-gestörter, großperiodischer, flacher Gitter in Dispersionsrichtung in weiten Bereichen in korrekter Weise. Durch geschickte Wahl der Fresnelkoeffizienten und der Phasenverschiebung kann das Modell sogar zwischen den beiden Polarisationszuständen der einfallenden Strahlung unterscheiden. Allerdings unterliegt es starken Einschränkungen, v.a. für TM-polarisiertes Licht. So findet man eine zunehmende Abweichung des analytisch berechneten Streulichts mit zunehmenden Gittertiefen, welche zunächst nur bei großen Streuwinkeln auftritt, für sehr große $d \gtrsim \frac{\lambda}{2\Delta n}$ jedoch das gesamte Spektrum umfasst. Dies ist nicht ungewöhnlich, da die Theorie nur innerhalb der Grenzen der TEA gültig ist. Es ist vielmehr erstaunlich, dass der Gültigkeitsbereich des TEA-Modells doch auch für relativ große Gittertiefen $d \approx \frac{\lambda}{2\Delta n}$ und kleine Gitterperioden $p \approx \lambda$ eine gute Übereinstimmung mit der simulierten Streulichtverteilung liefert.

Bei der Untersuchung des Einfallswinkels wurde festgestellt, dass die Streuung von TM-polarisiertem Licht für $\theta_i \neq 0^\circ$ nicht mehr mit dem TEA-Modell beschreibbar ist. Schon bei Einfallswinkeln $\theta_i > 10^\circ$ treten deutliche Abweichungen zw. prognostizierter und simulierter Streuung auf, welche im Rahmen der TEA nicht erklärt werden können. Das beobachtete Verhalten lässt sich jedoch anschaulich mit Hilfe angeregter Dipolschwingungen, welche als Streulichtquellen fungieren, verstehen. Für TE-polarisiertes Licht wird jedoch unabhängig vom Einfallswinkel eine hervorragende Übereinstimmung zu den Simulationen festgestellt.

Neben der Vorhersagekraft für Gitter im Gültigkeitsbereich der TEA kann man aus Gl. (4.17) einige grundsätzliche Abhängigkeiten herauslesen. Insbesondere haben die Rauheitsparameter kei-

nen Einfluss auf den qualitativen Verlauf der ARS in Dispersionsrichtung und tragen nur über die PSD zur Stärke der gestreuten Strahlung bei. Dabei führt σ entsprechend Gl. (4.5) zu einer quadratischen und ξ zu einer linearen Erhöhung des Streulichtniveaus, α hingegen besitzt praktisch keinen Einfluss. Eine Glättung der Kante durch Prozesse, die die Korrelationslänge erhöhen, hat demzufolge sogar einen negativen Einfluss auf die Streulichteigenschaften des Gitters.

4.3.2 Streulicht in tiefen Phasengittern

Für Gitter, deren Perioden und Tiefen im Bereich der Wellenlänge liegen, versagt die im Rahmen der TEA abgeleitete Gl. (4.17). Gerade diese Gitter sind aber für viele Anwendungen interessant. Als Beispiel wurde schon in Kap. 3 das FLEX-Gitter untersucht, welches in Littrow-Anordnung als Spektrometergitter verwendet wird. Glücklicherweise bietet der in Abschnitt 4.2.2 hergeleitete Formalsimus eine einfache und schnelle Möglichkeit, die Streulichtverteilung in der Dispersions Ebene des Gitters rigoros zu berechnen. In diesem Abschnitt soll die Streuung an solchen hocheffizienten Littrowgittern [69] näher untersucht werden. Dabei wird insbesondere die Auswirkung des Gitterdesigns auf die Streulichtverteilung analysiert und schließlich sollen reale Gitterstrukturen (deren Profile von der idealen binären Geometrie abweichen können) untersucht werden.

Gitter in Littrow-Anordnung

In den Arbeiten von Clausnitzer *et al.* [69] wurde gezeigt, dass binäre Gitter, deren Perioden im Bereich der Wellenlänge liegen, in Littrow-Anordnung eine Vielzahl an „Lösungen“ bieten, an denen eine bestimmte Kombination aus Füllfaktor und Gittertiefe eine hohe Effizienz in der -1 . BO liefert. Das FLEX-Gitter basiert auf diesem Prinzip und seine Lösungsfamilie für hocheffiziente Beugung wurde schon in Abb. 1.2(b) dargestellt. Das in Abschnitt 4.2.2 erarbeitete Simulationstool ermöglicht es nun, die Streulichtperformance des Gitters in Abhängigkeit der Gittergeometrie zu untersuchen und schließlich die Streulichtanforderungen an das gewünschte Gitter schon im Design zu berücksichtigen. Dazu wird bei vorgegebenen (konstanten) Rauheitsparametern das Streulichtverhalten des Gitters bei den in Abb. 1.2(b) farbig markierten Tiefe-Füllfaktor-Kombinationen simuliert. Die Rauheit wurde dabei durch $\sigma = 4\text{ nm}$, $\xi = 50\text{ nm}$ und $\alpha = 0.5$ festgelegt. Die Simulationsergebnisse für TM-polarisiertes Licht sind in Abb. 4.13 dargestellt. Zunächst wurde bei konstantem Füllfaktor $FF = 0.56$ die Dicke so eingestellt, dass eine Beugungseffizienz $\eta_{-1} = 98\%$ erreicht wird. Dies ist bei $d = 1628\text{ nm}$ bzw. $d = 4890\text{ nm}$ der Fall. Die Streulichtsimulationen für die so definierten Gitterdesigns zeigt Abb. 4.13(a). Beide Kurven zeigen einen qualitativ ähnlichen Kurvenverlauf, v.a. im Winkelbereich $\theta = \pm 50^\circ$. Allerdings besitzt das um einen Faktor 3 tiefere Gitter ein etwa 9 mal stärkeres Streulichtniveau. Demnach lässt sich vermu-

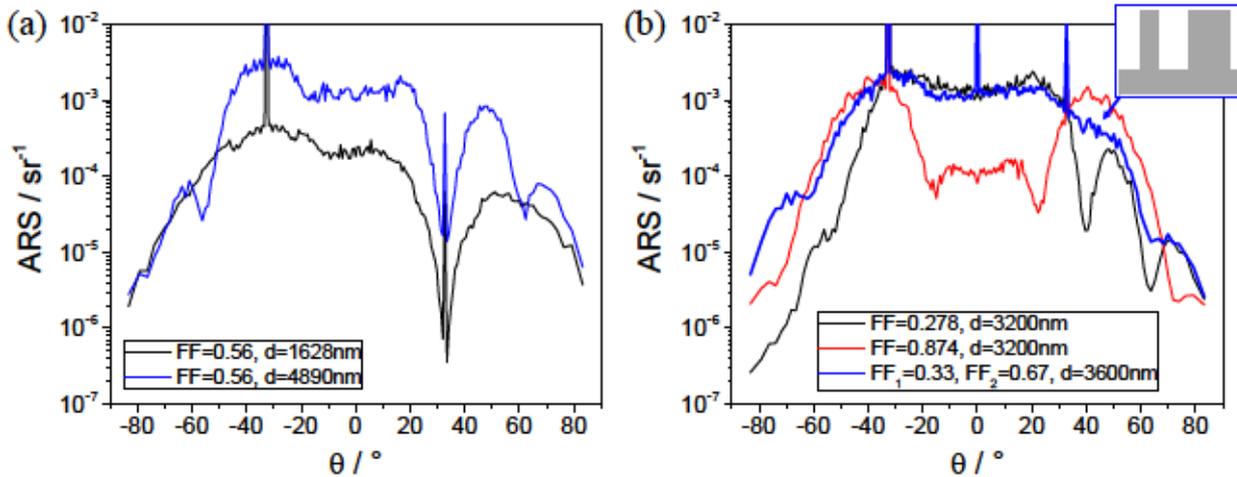


Abb. 4.13: Streulichtsimulationen zu verschiedenen Gitterdesigns (bestimmt durch Gittertiefe und Füllfaktor) des FLEX-Gitters, bei denen die TM-Beugungseffizienz der $-1.$ BO für $\lambda = 720\text{nm}$ maximal ist (entsprechend der Markierungen in Abb. 1.2(b)). (a) Variation der Gittertiefe d bei festem Füllfaktor, (b) Variation des Füllfaktors bei festem d . Die Rauheitsparameter betragen $\sigma = 4\text{nm}$, $\xi = 50\text{nm}$ und $\alpha = 0.5$.

ten, dass auch tiefe Gitter den Zusammenhang $ARS \propto d^2$ zwischen Streulichtniveau und Gittertiefe zeigen.

Weiterhin wurden die Streulichtkurven von Gittern mit sehr kleinen und sehr großen Füllfaktoren untersucht. Für eine Gittertiefe von $d = 3200\text{nm}$ findet man bei $FF = 0.278$ bzw. $FF = 0.874$ sogar eine Beugungseffizienz von jeweils mehr als 98%. Die zugehörigen Streulichtkurven sind in Abb. 4.13(b) dargestellt. Die beiden Kurven zeigen eine sehr unterschiedliche Streulichtverteilung im Halbraum. Während die Kurve für $FF = 0.278$ insbesondere im Bereich zwischen der 0. und $-1.$ BO ($\theta = [-33^\circ, \dots, 33^\circ]$) ein sehr hohes Streulichtniveau besitzt und zu größeren Streuwinkeln schnell um mehrere Größenordnungen abfällt, zeigt die Kurve für $FF = 0.874$ genau das umgekehrte Verhalten. Einem schwachen Streulichtniveau im Bereich zwischen den beiden Beugungsordnungen steht ein hohes Streulichtniveau bei höheren Streuwinkeln gegenüber. Beiden Simulationen ist gemein, dass die Beugungsordnungen des Gitters in etwa die Grenze dieses Übergangs markieren, jedoch noch immer in den Bereichen hoher Streulichtintensität liegen. Aus diesem Grund sollte überprüft werden, ob eine Kombination von großem und kleinem Füllfaktor in einem Gitter doppelter Periode auch die guten Streulichteigenschaften der Einzelgitter (also niedriges Streulichtniveau sowohl im Winkelbereich zwischen den Beugungsordnungen, als auch zu hohen Beugungswinkeln) kombiniert. Da ein solches Gitter auch eine hohe Beugungseffizienz besitzen soll, wurden nicht exakt die Füllfaktoren der Einzelgitter übernommen. Es wurde aber gefunden, dass ein Gitter mit $FF_1 = 0.33$ und $FF_2 = 1 - FF_1$ eine Beugungseffizienz¹ von

¹Da es sich jetzt um ein Gitter der Periode $p_2 = 2p = 1334\text{nm}$ handelt, tritt eine zusätzliche BO bei genau $\theta = 0^\circ$ auf und die eigentliche Nutzordnung ist nun die $-2.$ BO.

$\eta_{-2} = 94\%$ besitzt. Die entsprechende Streulichtsimulation (Abb. 4.13(b)) zeigt jedoch das genaue Gegenteil des Streulichtverhaltens, welches erwünscht war. Die resultierende Streulichtkurve scheint immer dem maximalen Streulichtverlauf der Gitter mit kleinem bzw. hohem Füllfaktor zu folgen, die schlechten Streulichteigenschaften werden also kombiniert.

Aus den Untersuchungen lässt sich eine einfache Richtlinie zum Design hocheffizienter Beugungsgitter in Littrowanordnung ableiten: Die Gittergeometrie sollte so gewählt werden, dass möglichst das Minimum der $d(FF)$ -Kurve für hocheffiziente Beugung getroffen wird (vgl. Abb. 1.2(b)). Dies impliziert, dass die Gittertiefe möglichst gering und der Füllfaktor zu etwa $FF \approx 0.5$ gewählt werden sollte. Damit lässt sich schon beginnend mit dem Gitterdesign die Streulichtperformance der Gitter optimieren.

Auswirkung realer Profilformen

Die Herstellung binärer Gitter hoher Aspektverhältnisse, also mit im Vergleich zur Periode sehr großen Gittertiefen, ist technisch höchst anspruchsvoll und insbesondere bei der Übertragung der Chromstruktur in das Kieselglassubstrat kommt es zu unvermeidlichen Abweichungen der hergestellten von der gewünschten Gitterstruktur. Insbesondere der merkliche Abtrag der Chrommaske beim Tiefätzen (sogn. „Kantenrückzug“) und die nicht 100%ige Anisotropie ($A_{\text{etch}} < 1$) führen einerseits zur Ausbildung schräger Kanten und andererseits zu einer „Köpfchenstruktur“. Abbildung 4.14(a) zeigt SEM-Aufnahmen des Profils tiefgeätzter Strukturen, in denen man diese Abweichungen deutlich erkennen kann. Die Geometrie der realen Struktur lässt sich näherungsweise durch die

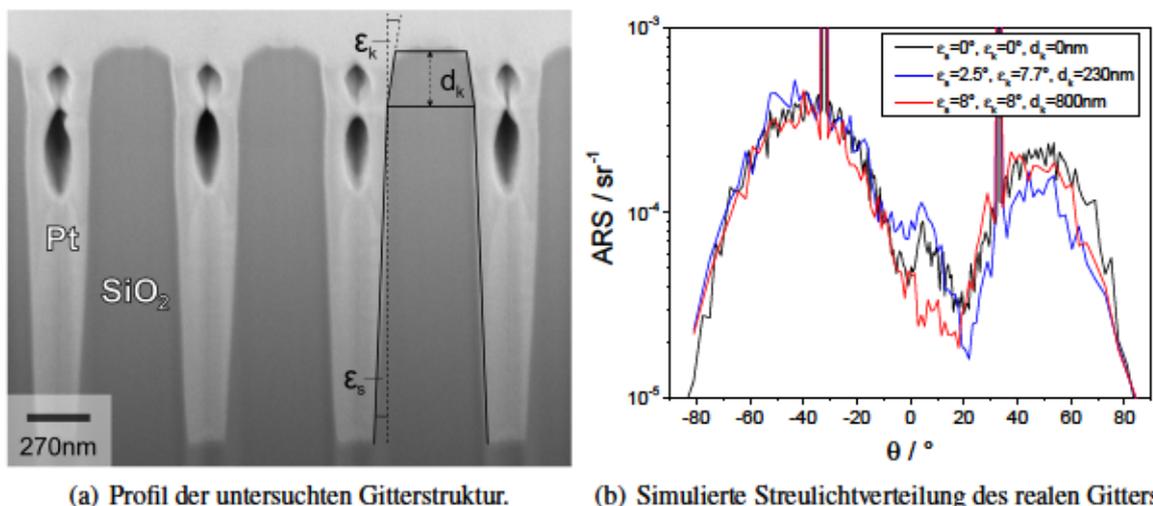


Abb. 4.14: (a) SEM-Aufnahme eines FIB-Schnittes des tiefgeätzten FLEX-Gitters und Illustration der Parametrisierung der realen Struktur. Das Platin ist für einen sauberen Schnitt durch das Gitter nötig. (b) Streulichtsimulation ($\lambda = 720\text{nm}$, $\theta_i = 21.8^\circ$, $\bar{P} = \text{TE}$) der realen Gitterstruktur für verschiedene Werte der Parameter ε_s , ε_k und d_k . Die Rauheitsparameter betragen $\sigma = 4\text{nm}$, $\xi = 50\text{nm}$ und $\alpha = 0.5$.

drei Parameter ε_s , ε_k und d_k beschreiben, welche die Kantenneigung der Stege, die Schrägstellung des Köpfchens und dessen Dicke beschreiben. Für das in Abb. 4.14 dargestellte FLEX-Gitter betragen die Werte dieser Parameter $\varepsilon_s = 2.5^\circ$, $\varepsilon_k = 7.7^\circ$ und $d_k = 230\text{nm}$. Die Auswirkungen dieser Parameter auf des Streulichtverhalten können mit Hilfe des 1D-Simulationsmodells untersucht werden, wenn das reale Profil in Schichten binärer Bausteine gleicher Dicke unterteilt wird (Treppenstufenapproximation). Die Simulationsergebnisse sind in Abb. 4.14(b) dargestellt. Es zeigt sich, dass eine solche Abweichung nur einen geringen Einfluss auf die Streulichtverteilung des Gitters besitzt. Selbst bei weiterer Erhöhung der Kantenneigung auf $\varepsilon_s = 8^\circ$, bei der das Rechteckprofil des Gitters schon eher einem Dreiecksprofil gleicht, treten nur unbedeutende Unterschiede im Streulichtverlauf auf. Ähnliches findet man für die Effizienz der Beugungsordnung. Für die reale Struktur beträgt die Effizienz der -1 . BO noch immer mehr als 90% ($\eta_{\text{rect, TM}} = 98\% \rightarrow \eta_{\text{real, TM}} = 94\%$, $\eta_{\text{rect, TE}} = 94.6\% \rightarrow \eta_{\text{real, TE}} = 91.4\%$). Für das Dreiecksprofil findet man sogar eine Erhöhung der Effizienz für TE-polarisiertes Licht ($\eta_{\Delta, TM} = 85\%$, $\eta_{\Delta, TE} = 97\%$).

4.3.3 Konische Streuung

Diese Arbeit konzentriert sich hauptsächlich auf die Beschreibung der Streuung in Dispersebene, da diese die relevante Arbeitsebene für die Funktion des Gitters ist. Aufgrund der Zweidimensionalität der LER kommt es aber selbstverständlich auch zur diffusen Streuung außerhalb der Dispersionsebene. In diesem Abschnitt soll kurz auf diese sogenannte konische Streuung eingegangen werden.

Das in Abschnitt 4.2.2 vorgestellte rigorose 2D-Simulationsprinzip liefert aufgrund seiner eingeschränkten Elementarzellengröße zwar nur eine undetaillierte Beschreibung der Streuung, erlaubt es aber, die konische Streuung außerhalb der Dispersionsebene zu untersuchen. Für das FLEX-Gitter in der Anordnung nach Abb. 1.2(a) mit Rauheitsparametern $\sigma = 4\text{nm}$, $\xi = 50\text{nm}$ und $\alpha = 0.5$ zeigt Abb. 4.15(a) die gemittelten Simulationsergebnisse, welche aus jeweils 80 Einzelsimulationen gebildet wurden. Die Farbdarstellung zeigt die ARS im Frequenzraum. Jeder Pixel steht dabei für eine Streulichtordnung, deren Nummerierung auf der x -Achse durch m_x und auf der y -Achse durch m_y gegeben ist. Die Ordnungen mit $ARS < 10^{-6}\text{sr}^{-1}$ (dunkelblau) sind evaneszent. Die Dispersionsebene entspricht allen Streuordnungen, für die $m_y = 0$ gilt. Im Farbdigramm wurden die Hauptbeugungsordnungen des Gitters bei $(m_x, m_y) = (0, 0)$ bzw. $(m_x, m_y) = (-12, 0)$ aufgrund ihrer im Vergleich zum Streulicht hohen Intensität als weiße Pixel markiert. Die simulierte Streulichtverteilung weist v.a. hohe Werte um die -1 . Beugungsordnung auf, ist sonst aber kontinuierlich im gesamten Halbraum verteilt. Führt man die gleiche Untersuchung für ein Gitter durch, welches durch eine LER größerer Korrelationslänge $\xi = 500\text{nm}$ charakterisiert ist, so erhält

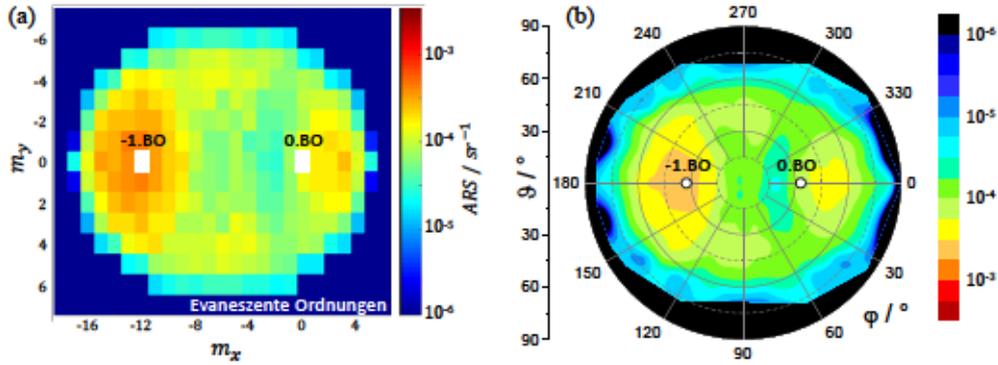


Abb. 4.15: (a) Zweidimensionale ARS-Simulation für das FLEX-Gitter für $\lambda = 720\text{ nm}$, $\theta_i = 21.8^\circ$, $\bar{P} = TE$ und Rauheitsparameter $\sigma = 4\text{ nm}$, $\xi = 50\text{ nm}$ und $\alpha = 0.5$. Die der Simulation zugrunde liegende RCWA-Elementarzelle umfasste $N_x = 12$ Gitterperioden und eine Kantenlänge von $P_y = 5\ \mu\text{m}$. Der dunkelblaue Bereich umfasst die evaneszenten Ordnungen. (b) Interpolierte Darstellung der in (a) gezeigten Streulichtverteilung im Winkelraum. Die Bezeichnung der Streuwinkel richtet sich nach Abb. 2.7.

man die in Abb. 4.16(a) dargestellte 2D-Streulichtverteilung. Im Vergleich zu Abb. 4.15(a) zeigt das Gitter mit größerer Korrelationslänge nun ein deutlich höheres Streulichtniveau für die Streuordnungen im Bereich von $m_y = (-3, \dots, 3)$ (um die Dispersionsebene). Für größere m_y hingegen ist das Streulicht gleich stark oder sogar schwächer. Insgesamt findet man für das totale Streulicht im Transmissionshalbraum (TIS, engl.: *total integrated scattering*¹) sogar eine Erhöhung um einen Faktor 4 von $TIS(\xi = 50\text{ nm}) = 0.05\%$ auf $TIS(\xi = 500\text{ nm}) = 0.2\%$. Würde man die Korrelationslänge weiter erhöhen, so findet man eine immer stärkere Lokalisierung des Streulichts um die Dispersionsebene, bis schließlich für $\xi \rightarrow \infty$ nur noch Streuung in der Dispersionsebene stattfindet. Die gesamte Streuung beträgt dann $TIS(\xi = \infty) = 0.3\%$.

Die Ursache dafür liegt in der ξ -Abhängigkeit der PSD, wobei mit wachsendem ξ ein größerer Anteil großperiodischer Störungen in der Kantenrauheit auftreten (vgl. Abb. 4.1). Diese sorgen für Streuung nahe der Dispersionsebene. Kleine Korrelationslängen hingegen erzeugen mit kleinperiodischen Störanteilen Streuung weit außerhalb der Dispersionsebene und sogar einen immer größer werdenden Anteil evaneszenter Streulichtordnungen. Diese Zunahme evaneszenter Ordnungen führt zu einer mit ξ sinkenden totalen Streuung.

Obwohl das 1D-Simulationsmodell nur für $m_y = 0$ (d.h. in Dispersionsebene) exakt ist, lässt sich auch die konische Streuung parallel zur Dispersionsebene (d.h. für konstante $m_y \neq 0$) mit Hilfe des 1D-Modells näherungsweise beschreiben, wenn im Skalierungsfaktor (4.21) $PSD(f_y)$ eingesetzt wird. Der Wert von f_y wird dabei durch den zur Streuordnung (m_x, m_y) gehörigen „kartesischen“ Beugungswinkel θ_y über die Beziehung $f_y = \frac{n_t}{\lambda} \sin \theta_y$ bestimmt, wobei θ_y den Beugungswinkel der (m_x, m_y) -ten Streulichtordnung in der yz -Ebene angibt und durch $\tan \theta_y = \frac{k_y(m_x, m_y)}{k_z(m_x, m_y)}$ ge-

¹Das TIS wird hier durch das Aufsummieren der Effizienzen aller propagierenden Streulichtordnungen berechnet.

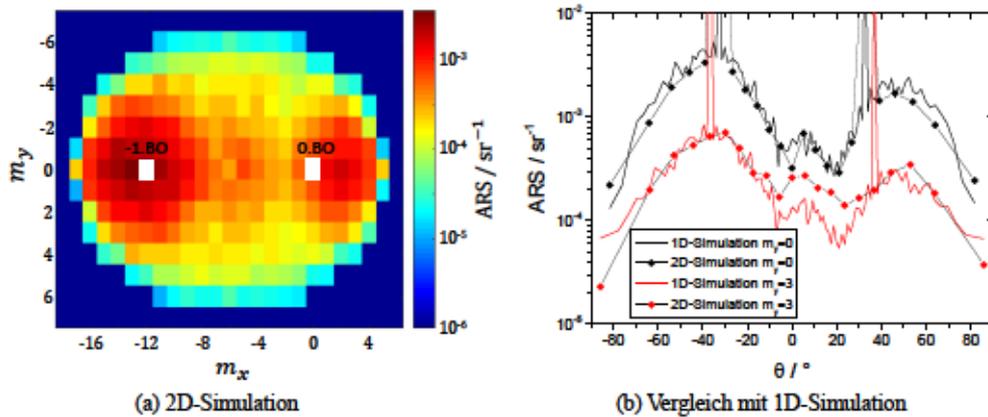


Abb. 4.16: (a) Zweidimensionale ARS-Simulation für das FLEX-Gitter für $\lambda = 720 \text{ nm}$, $\theta_i = 21.8^\circ$, $\bar{P} = TE$ und Rauheitsparameter $\sigma = 4 \text{ nm}$, $\xi = 500 \text{ nm}$ und $\alpha = 0.5$. Die der Simulation zugrunde liegende RCWA-Elementarzelle umfasste $N_x = 12$ Gitterperioden und eine Kantenlänge von $P_y = 5 \mu\text{m}$. (b) Vergleich der 2D- mit der 1D-Simulation für konische Streuung in Dispersionsrichtung ($m_y = 0$) und parallel dazu ($m_y = \pm 3$).

geben ist. k_y und k_z bezeichnen dabei die Wellenvektorkomponenten der entsprechenden Streuordnung. Abbildung 4.15(b) zeigt eine Illustration der hier verwendeten Konventionen und insbesondere die Zuordnung der sphärischen und kartesischen Beugungswinkel zu einer bestimmten Streuordnung. Die auf diese Weise angepasste 1D-Streulichtsimulation ist im Vergleich mit dem entsprechenden Auszug aus der 2D-Rechnung in Abb. 4.16(b) über dem kartesischen Beugungswinkel θ dargestellt. Es zeigt sich für das hier untersuchte Gitter eine gute Übereinstimmung der beiden Kurven für konische Streuung bis etwa $m_y = \pm 3$. Erst für größere m_y lassen sich die 2D-Simulationskurven nicht mehr durch eine 1D-Rechnung annähern. Auf diese Weise lässt sich ein weiter Bereich des gesamten Halbraums mit Hilfe des vereinfachten 1D-Simulationsmodells beschreiben.

4.4 Experimentelle Untersuchung

4.4.1 Gitter mit künstlicher Kantenrauheit

Um das Modell zur Simulation der durch LER hervorgerufenen diffusen Streuung vollständig zu verifizieren, sollen im Folgenden die Ergebnisse experimenteller Untersuchungen an Gittern mit künstlicher Kantenrauheit dargelegt werden. Diese Methode definierter Rauheit hat einerseits den Vorteil, dass die Rauheitsparameter vorgegeben werden können und damit sehr genau bestimmt sind. Andererseits können die Rauheitsparameter so groß gewählt werden, dass mögliche sekundäre Streulichtquellen vom LER-Streulicht überdeckt werden, d.h. dass die diffuse Streuung ausschließlich von Kantenrauheit bestimmt wird.

Um Gitter mit einer definierten LER herzustellen, kann die sequentielle Schreibstrategie des Elektronenstrahlschreibers vorteilhaft genutzt werden [148]. Die Shotgröße wird dabei soweit verkleinert, dass ein beliebiger Kantenverlauf realisiert werden kann. Dabei werden zunächst diskrete stochastische Funktionen entsprechend der in Abschnitt 4.1.4 erläuterten *Moving-Average*-Methode zu vorgegebenen Parametern σ , ξ und α für jede Kante des herzustellenden Gitters berechnet. Über die Differenz benachbarter Kanten wird die Grabenbreite $b(y)$ bestimmt, welche in y -Richtung stochastisch variiert und die Shotausdehnung in x -Richtung festlegt. Die Pixelgröße Δy der diskreten rauen Kante hingegen bestimmt die Shotausdehnung in y -Richtung, welche so gewählt werden sollte, dass $\Delta y \ll \xi$ gilt. Aufgrund der mit kleiner werdender Shotgröße sich deutlich erhöhenden Schreibzeit, ist diese aber auf etwa $\Delta y_{\min} = 20\text{ nm}$ beschränkt. Abbildung 4.17(a) zeigt eine SEM-Aufnahme der realisierten Resiststruktur mit den Rauheitsparametern $\sigma = 16\text{ nm}$, $\xi = 200\text{ nm}$ und $\alpha = 0.5$. Im oberen rechten Teil der Aufnahme ist die Schreibstrategie mit Shots

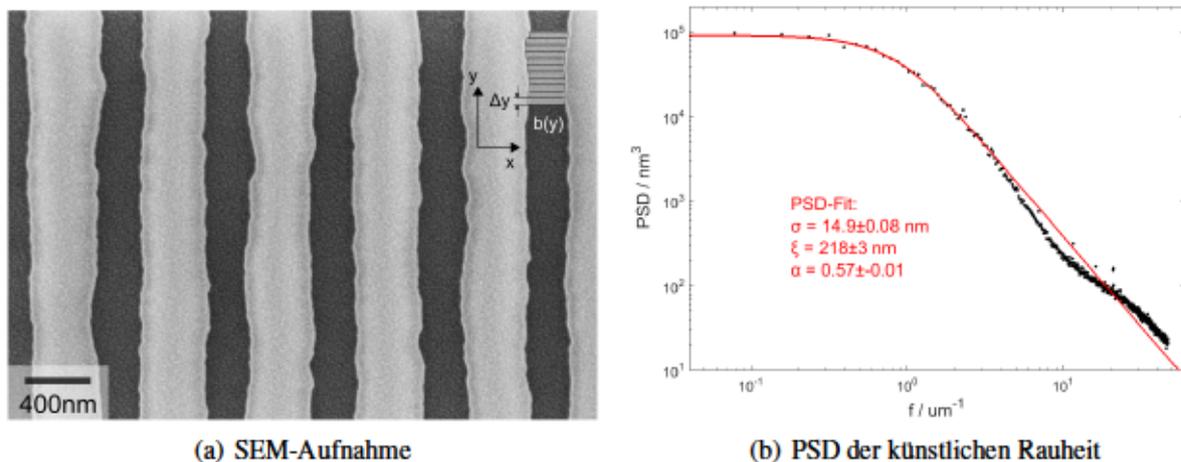


Abb. 4.17: (a) SEM-Aufnahme der Resiststruktur eines Gitters ($p = 667\text{ nm}$, $FF = 0.583$) mit künstlich erzeugter Kantenrauheit und Illustration des Belichtungsmusters (oben rechts). Die eingestellten Rauheitsparameter betragen $\sigma = 16\text{ nm}$, $\xi = 200\text{ nm}$ und $\alpha = 0.5$. (b) Aus REM-Bildern bestimmte PSD der künstlich erzeugten rauen Kanten und Bestimmung der tatsächlichen Rauheitsparameter mit Hilfe eines PSD-Fits.

der Ausdehnung $b(y) \times \Delta y_{\min}$ illustriert. Das hergestellte Gitter besitzt eine Periode $p = 667\text{ nm}$ und einen mittleren Füllfaktor $FF = 0.583$. Die Rauheit der hergestellten Gitterstruktur wurde entsprechend der in Abschnitt 4.1.3 beschriebenen Methode überprüft. Nach Detektion von etwa 200 Kanten wurde das mittlere Leistungsspektrum der Kantenrauheit bestimmt und das theoretische PSD-Modell an den Datensatz angepasst. Damit ergeben sich die in Abb. 4.17(b) gezeigten Rauheitsparameter, welche leicht von den Zielparametern abweichen aber dennoch gut getroffen wurden. Aufgrund dieser gut definierten Rauheit wurde die winkelaufgelöste Streuung schon für die Resiststruktur gemessen. Am Beispiel dieser Reflexionsmessung am Resistgitter (auf einem

chrombeschichteten Substrat) wird auch gezeigt, dass das 1D-Simulationsmodell nicht nur für die in dieser Arbeit am häufigsten diskutierten Transmissionsgitter gültig ist, sondern auf beliebige 1D-Gitterstrukturen (sogar mit beliebiger stochastischer Störung [146]) sowohl in Transmission als auch in Reflexion angewendet werden kann.

Der Vergleich der experimentell bestimmten ARS mit der entsprechenden Streulichtsimulation ist in Abb. 4.18(b) und 4.18(c) dargestellt. Die zugehörige Messanordnung der Reflexionsmessung und die Geometrie des Gitters zeigt Abb. 4.18(a). In der Simulation wurde angenommen, dass

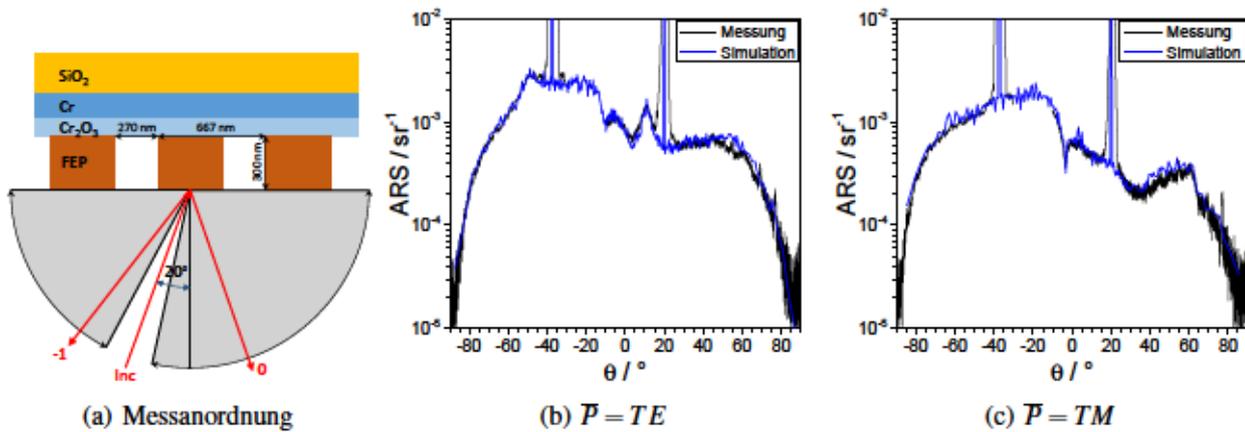


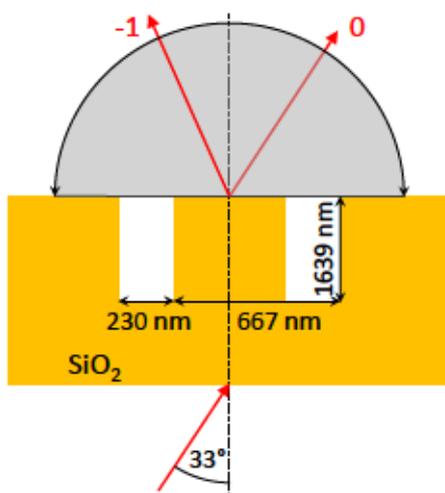
Abb. 4.18: Gittergeometrie und Strahlengang, welcher zur Messung und Simulation verwendet wurde (a), und Vergleich von Simulation und Messung für TE- (b) und TM-Polarisation (c). Die optischen Parameter der verschiedenen Materialien wurden für $\lambda = 633 \text{ nm}$ als $n_{FEP} = 1.585$, $n_{Cr_2O_3} = 2.8$, $k_{Cr_2O_3} = 0.1$, $n_{Cr} = 3.14$, $k_{Cr} = 3.32$, $n_{SiO_2} = 1.457$ angenommen.

die nur 100 nm dicke Chrommaske an ihrer Oberfläche eine etwa 20 nm dicke Chromoxidschicht ausbildet. Die optischen Konstanten dieser Schicht wurden zu $n_{Cr_2O_3} = 2.8$ und $k_{Cr_2O_3} = 0.1$ angenommen [149–151], wohingegen die Parameter des Chroms auf $n_{Cr} = 3.14$ und $k_{Cr} = 3.32$ gesetzt wurden [152]. Sowohl für TE- als auch TM-polarisiertes Licht stimmt die Streulichtsimulation hervorragend mit der Streulichtmessung überein. Selbst so markante Besonderheiten im Streulichtverlauf wie das lokale Maximum bei $\theta = 11^\circ$ für TE-polarisiertes Licht oder das scharfe Minimum bei $\theta = -3.5^\circ$ für TM-Polarisation werden korrekt wiedergegeben. Es kann also davon ausgegangen werden, dass das abgeleitete Simulationsmodell korrekt ist.

4.4.2 Interpretation des Streulichtspektrums elektronenstahlolithographisch hergestellter Gitter

In Abschnitt 4.1.3 wurden die Rauheitsparameter für das FLEX-Gitter mit Hilfe von SEM-Bildern untersucht und für das vollständig prozessierte Gitter zu $\sigma = 3.2 \text{ nm}$, $\xi = 64 \text{ nm}$ und $\alpha = 0.54$ bestimmt. Auf dieser Basis kann eine Streulichtsimulation mit einer ARS-Messung verglichen

werden. Die Messanordnung und die Gittergeometrie zeigt Abb. 4.19(a) und der Vergleich von Simulation und Messung ist in Abb. 4.19(b) dargestellt. Es stellt sich heraus, dass die durch die Simulation vorhergesagte Streuung aufgrund der im SEM gemessenen Kantenrauheit deutlich geringer ist als die experimentell bestimmte Streulichtverteilung. Insbesondere um die $-1.$ BO beträgt die Abweichung sogar mehr als eine Größenordnung. Eine genauere Betrachtung um die $0.$ BO enthüllt hingegen, dass die Messung dort nur um einen Faktor 2 von der Simulation abweicht. Bis auf diese Unterschiede stimmt die gemessene Streulichtverteilung qualitativ jedoch sehr gut mit der Simulation überein. Dies bedeutet, dass zusätzlich zur Kantenrauheit eine weitere Streu-



(a) Messanordnung

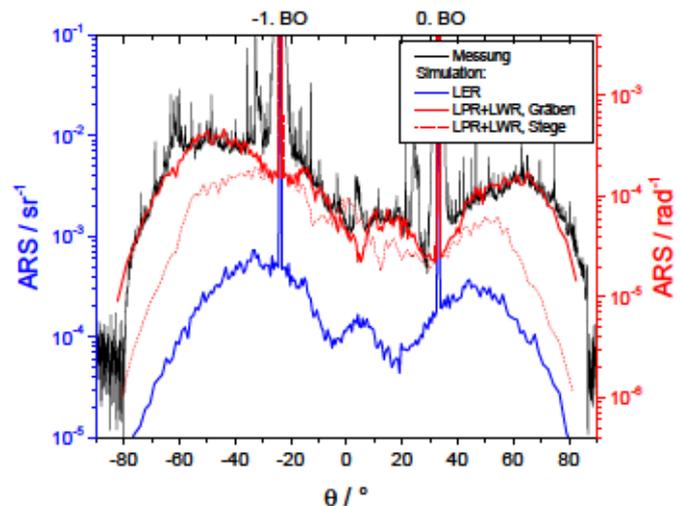
(b) Winkelaufgelöste Streuung am FLEX-Gitter für $\bar{P} = TE$

Abb. 4.19: Gittergeometrie und Strahlengang, welcher zur Messung und Simulation der ARS verwendet wurde (a), und Vergleich von Streulichtsimulation und -messung am nicht-optimierten FLEX-Gitter für TE-polarisiertes Licht (b). Die blaue Kurve zeigt die Simulation auf Basis der in Abschnitt 4.1.3 bestimmten Rauheitsparameter. Die rote Kurve zeigt die ARS-Simulation für ein durch Breiten- und Positionsschwankung (LWR mit $\sigma_{LWR,g} = 0.6 \text{ nm}$ bzw. LPR mit $\sigma_{LPR,g} = 1.3 \text{ nm}$) der Gittergräben gestörtes Gitter in den Einheiten rad^{-1} . Die rot gestrichelte Kurve zeigt die gleiche Simulation für eine Schwankung der Gitterstege. Die schwarze Messkurve kann sowohl auf die linke als auch rechte Achse bezogen werden.

lichtquelle existiert, welche den qualitativen Streulichtverlauf nur unwesentlich beeinflusst. Eine sehr naheliegende Ursache sind stochastische Positionierungs- und Formatfehler der Belichtungsshots, aus denen die Gitterstruktur während der Belichtung zusammengesetzt wird. Da es sich beim Resist FEP um einen Positivresist handelt, lassen sich die Shotpositionierungs- und Shotformatfehler in einen entsprechenden Fehler der Grabenbreite bzw. Grabenposition übersetzen. Um diesen Fehler in der Simulation berücksichtigen zu können, wird vereinfacht angenommen, dass die Gittergräben auf ihrer gesamten Länge einen stochastischen Fehler ihrer Breite und ihrer mittleren Position aufweisen. Es wird davon ausgegangen, dass solche Linienbreiten- bzw. Linieneinstellungsschwankungen (*line width roughness*, LWR, bzw. *line position roughness*, LPR) einer

Gaußverteilung unterliegen und entsprechend durch die Parameter $\sigma_{LWR,g}$ und $\sigma_{LPR,g}$ beschrieben werden können (vgl. Tab. A.2 in Anhang A, der Index g steht für die Schwankung der Gräben). Die vereinfachte Annahme einer gleichartigen Schwankung des gesamten Grabens, obwohl dieser aus mehreren Einzelshots der y -Ausdehnung $p_y = 2.5 \mu\text{m}$ (deren Positionierung und Format stochastisch unabhängig voneinander sind) zusammengesetzt wird, führt lediglich zu einer unteren Abschätzung der Werte von $\sigma_{LWR,g}$ und $\sigma_{LPR,g}$. Außerdem hat diese Herangehensweise zur Folge, dass die Streuung streng eindimensional beschrieben werden muss, die ARS also in der Einheit rad^{-1} ausgedrückt werden muss. Dies kann sowohl in der Streulichtmessung durch Verwendung des eindimensionalen Öffnungswinkels (2.2), als auch in der Simulation durch Verwendung von Gl. (2.4), berücksichtigt werden. Der Vergleich der Simulation mit der Streulichtmessung ist zusätzlich zur LER-Simulation in Abb. 4.19(b) dargestellt. Die Messkurve in diesem Graphen kann sowohl auf die linke Achse, welche die ARS in ihrer üblicher Einheit sr^{-1} skaliert, als auch auf die rechte Achse, welche die ARS eindimensional skaliert, bezogen werden. Die Simulationskurven hingegen müssen nach ihrer Farbe den entsprechenden Achsen zugeordnet werden. Es zeigt sich, dass eine Interpretation der Streulichtspektren aufgrund stochastischer Fehler der Shotpositionierung und des Shotformats eine erfolgreiche Übereinstimmung der Messkurven mit dem Simulationsmodell liefert, wenn $\sigma_{LWR,g} = 0.6 \text{ nm}$ und $\sigma_{LPR,g} = 1.3 \text{ nm}$ gesetzt wird. Die Genauigkeit des Shotformats ist also deutlich besser als die Shotpositionierung. Die Angaben der Firma Vistec zur Genauigkeit der Shotpositionierung betragen $\sigma_{LPR,g} = 2 \text{ nm}$ [153]. Der Unterschied zu den durch die Streulichtmessung ermittelten Parameter liegt an der endlichen Shotausdehnung in y -Richtung, welche in der Simulation nicht berücksichtigt wird. Auch wenn die Wellenlänge deutlich kleiner als p_y ist, kommt es im Experiment zu einem Mittelungseffekt, der umso größer sein müsste, je kleiner p_y ist. Detaillierte Untersuchungen dazu werden in Abschnitt 4.4.3 diskutiert.

Bei der Interpretation des gemessenen Streulichtspektrums durch LPR und LWR ist hervorzuheben, dass es durchaus einen Unterschied zwischen einer stochastischen Schwankung der Grabenbreiten bzw. -positionen und einer Schwankung der Stegbreiten/-positionen gibt. Beispielsweise zeigt ein Gitter mit einer reinen Störung der Grabenposition (LPR der Gräben $\sigma_{LPR,g} \neq 0$) eine konstante Grabenbreite (LWR der Gräben $\sigma_{LWR,g} = 0$), bei den Stegen findet man jedoch sowohl eine Schwankung der Stegposition (LPR der Stege $\sigma_{LPR,s} \neq 0$) als auch eine Schwankung der Stegbreite (LWR der Stege $\sigma_{LWR,s} \neq 0$, siehe Tab. A.2 in Anhang A). Versucht man entsprechend das gemessene Spektrum durch LPR und LWR der Gitterstege anzufitten, so erreicht man nur eine unbefriedigende Übereinstimmung der Messdaten mit den Simulationskurven. Um die Auswirkungen dieser Unterschiede deutlich zu machen, ist in Abb. 4.19 zusätzlich das simulierte Streulichtspektrum aufgrund von LPR und LWR der Gitterstege mit $\sigma_{LWR,s} = 0.6 \text{ nm}$ und $\sigma_{LPR,s} = 1.3 \text{ nm}$ dargestellt, welches deutlich von der Messung abweicht. Auch diese Tatsache stützt die Erkennt-

nis, dass Positionierungs- und Formatfehler der Einzelshots hauptverantwortlich für das am Gitter gemessene Streulicht sind. Auf Basis dieser Untersuchungen lassen sich gleichzeitig Ansätze ableiten, die zu einer Verbesserung der Shotpositionierung führen und entsprechend eine Reduktion der ARS-Kurven bewirken sollten. Diese Ansätze sollen im nächsten Abschnitt vorgestellt und experimentell überprüft werden.

4.4.3 Reduktion des Streulichtuntergrunds

Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, dass die LER nur einen Teilbeitrag zum am Gitter gemessenen Streulicht liefert. Der größere Anteil hat seinen Ursprung in stochastischen Positionierungsfehlern der einzelnen Shots. Daraus lassen sich unmittelbar Maßnahmen ableiten, die die Shotpositionierung verbessern können. Eine etablierte Methode, die schon bei Verbesserung der Segmentaneinanderreihung verwendet wurde, ist die sogenannte Multipass-Belichtung. Aus den Ergebnissen des vorigen Abschnitts lässt sich außerdem direkt schlussfolgern, dass eine Verringerung der Shotgröße in y -Richtung zu weniger Streulicht führen müsste. Um weitere Maßnahmen ableiten zu können, welche eine Verbesserung der Shotpositionierung erlauben und damit eine Reduktion des Streulichtuntergrunds ermöglichen, muss man auch verstehen, wie die einzelnen Shots während der Belichtung im Gitter gesetzt werden. Zunächst ist es so, dass die Einzelsegmente, aus denen das Gitter zusammengesetzt wird, nacheinander abgearbeitet werden. Die Abarbeitung der Shots innerhalb eines Segments kann jedoch in unterschiedlichen Modi ausgeführt werden. Die etablierte Standardbelichtung setzt die Shots innerhalb eines Segments in einer stochastischen Reihenfolge, d.h. zwischen den einzelnen Shots können „große“ Verfahrswege auftreten. Es ist zu vermuten, dass zufällige Verfahrswege zwischen nacheinander gesetzten Shots eine nachteilige Auswirkung auf deren Positionierungsgenauigkeit haben, da die zugehörigen Ablenssysteme nicht beliebig schnell sind und entsprechende Zeikonstanten zum Erreichen der gewünschten Position aufweisen. Eine Verbesserung sollte also erreicht werden, wenn die Abarbeitungsreihenfolge der Shots nicht zufällig geschieht, sondern systematisch entlang einer Richtung.

Im Folgenden sollen die Möglichkeiten dieser 3 Strategien im Detail untersucht und ihre Wirkung auf das Streulichtverhalten des Gitters dargelegt werden.

Multipass-Belichtung

Die Multipass-Belichtung, welche zur Reduktion der Anschlussfehler beim Zusammensetzen des großflächigen Gitters aus einer Vielzahl von Einzelsegmenten verwendet wird (siehe Abschnitt 3.1), stellt auch ein hilfreiches Werkzeug zur Verbesserung der Shotpositionierung dar. Eine Mehrfachbelichtung des Gittergrabens mit entsprechend reduzierter Belichtungsdosis führt zu einer Mit-

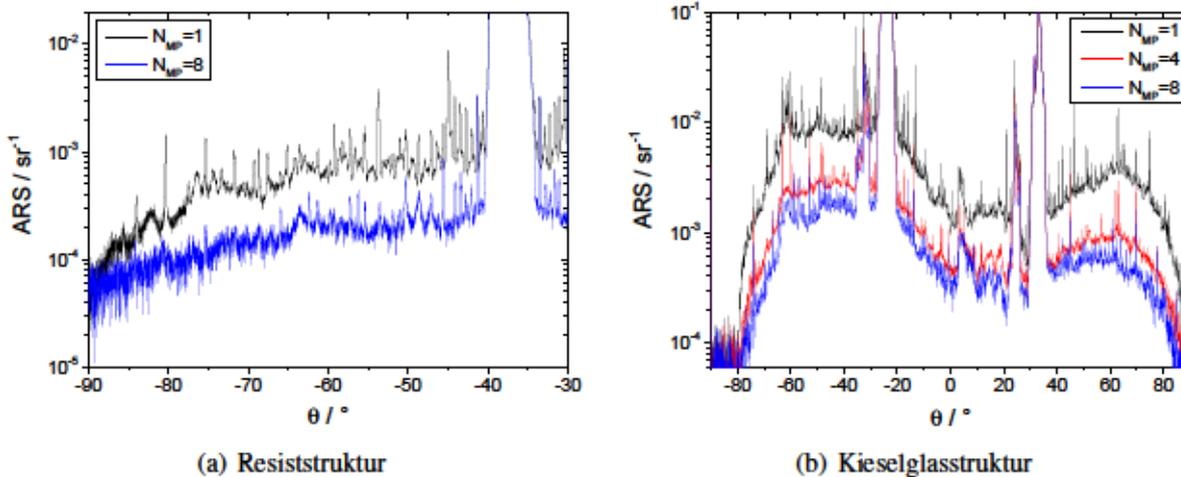


Abb. 4.20: Experimentelle Untersuchung zur Reduktion des Streulichtuntergrundes mit Hilfe der Multipass-Belichtung. (a) Für die Resiststruktur des FLEX-Gitters um die $-1.$ BO in Reflexion (Messanordnung entsprechend Abb. 4.18(a)). (b) Für das vollständig prozessierte FLEX-Gitter über die gesamte Dispersionsrichtung in Transmission (Messanordnung entsprechend Abb. 4.19(a)).

telung der einzelnen Positionierungs- und Formatfehler. Für eine unendlich große Passzahl N_{MP} würde man demnach eine perfekte Positionierung des Grabens erreichen. In der Praxis ist eine beliebige Erhöhung der Pass-Zahl allerdings nicht möglich, da dies einige andere Nachteile mit sich bringt. Neben einer deutlichen Erhöhung der Schreibzeit wird es immer schwieriger, die Belichtungs-dosis der Einzelshots korrekt zu steuern. Außerdem führt die Elektronenstrahl-anlage bei langen Schreibzeiten eine Zwischenkalibrierung durch, welche die Gitterprozessierung stört und zu zusätzlichen Fehlern führt. Die Maximale Passzahl wird daher auf $N_{MP} = 8$ nach oben beschränkt. Die Wirkung der Multipassbelichtung auf das Streulichtverhalten eines binären Gitters zeigt Abb. 4.20. Die Messung wurde sowohl an der Resiststruktur des FLEX-Gitters um die $-1.$ BO in Reflexion durchgeführt (entsprechend der Messanordnung in Abb. 4.18(a)) als auch am vollständig prozessierten Gitter über die gesamte Dispersionsebene in Transmission (siehe Abb. 4.19(a)). Es zeigt sich ein deutlicher Einfluss der Multipass-Belichtung auf das quantitative Streulichtverhalten. In beiden Fällen wird eine Absenkung des Streulichtniveaus um etwa einen Faktor 6 erreicht. Abbildung 4.20(b) zeigt außerdem eine Messung am 4-Pass-Gitter, welches nur ein geringfügig höheres Streulichtniveau als das 8-Pass-Gitter besitzt.

Variation der Shotgröße

Eine weitere Möglichkeit zur Absenkung des Streulichtuntergrundes bietet die Steuerung der Shot-ausdehnung entlang der Gittergräben, welche für die verwendete Elektronenstrahl-anlage im VSB-Modus auf einen Maximalwert von $\Delta y = 2.5 \mu\text{m}$ nach oben begrenzt ist. Der große Vorteil dieser Belichtungsstrategie ist die enorme Zeitersparnis bei der Herstellung großflächiger Gitter. Aller-

dings hat ein großer Shot nachteilige Auswirkungen auf das Streulichtniveau des Gitters. Wie schon in Abschnitt 4.4.2 angesprochen, kommt es zwar aufgrund der Wellenlänge zu einem Mittelungseffekt über die Positionierungs- und Formatfehler aneinander grenzender Shots. Dieser Effekt ist aber umso schwächer, je größer die Shotausdehnung ist. Kleine Δy hingegen begünstigen eine Mittelung über benachbarte Shots und für $\Delta y < \lambda$ sollten die Einzelshots nicht mehr aufgelöst werden können und der Mittelungseffekt somit am stärksten sein. Zur Überprüfung dieser Vermutung

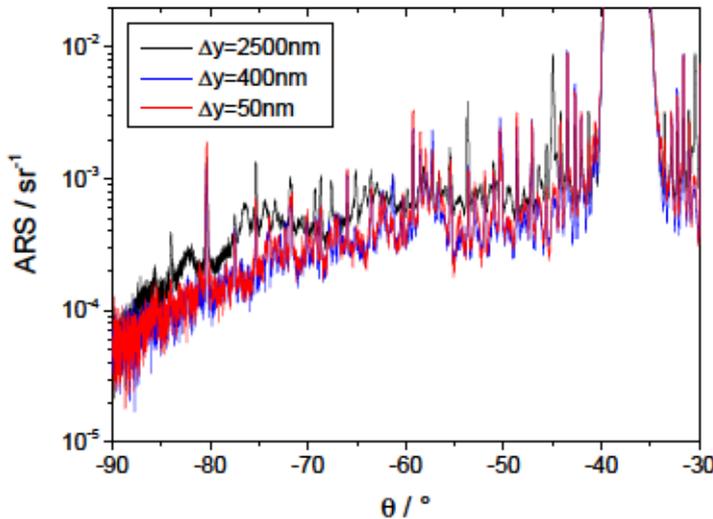


Abb. 4.21: Experimentelle Untersuchung zur Reduktion des Streulichtuntergrundes mit Hilfe verkleinerter Shotgrößen Δy . Die Messung erfolgte um die -1 . BO entsprechend der in Abb. 4.18(a) skizzierten Anordnung.

wurden 3 Gitter mit unterschiedlicher Shotgröße hergestellt und deren Streulichtspektren vermessen. Abbildung 4.21(a) zeigt die ARS-Messung an einem Standardgitter mit $\Delta y = 2.5 \mu\text{m}$ im Vergleich mit den Streulichtkurven zweier Gitter, welche mit $\Delta y = 400 \text{ nm}$ bzw. $\Delta y = 50 \text{ nm}$ gefertigt wurden. Die Messung erfolgte an der Resiststruktur entsprechend des in Abb. 4.18(a) skizzierten Messaufbaus. Demnach hat eine Verringerung der Shotgröße von $\Delta y = 2500 \text{ nm}$ auf 400 nm , welche schon kleiner als die bei der Streulichtmessung verwendete Wellenlänge $\lambda = 633 \text{ nm}$ ist, eine Reduktion des Streulichtuntergrundes um einen Faktor 2 zur Folge. Eine noch kleinere Shotgröße $\Delta y = 50 \text{ nm}$ (rote Kurve in Abb. 4.21(a)) hingegen führt zu keiner weiteren Verbesserung des Streulichtuntergrundes. Die Ursache für die im Vergleich zur Multipassbelichtung geringen Absenkung des Streulichtuntergrundes liegt in der Abarbeitungsreihenfolge der Einzelshots während der Belichtung, die zu Korrelationen benachbarter Shots führen können. Dies soll im Folgenden näher untersucht werden.

Abarbeitungsreihenfolge der Shots

Eine Verbesserung der Shotpositionierung kann auch erreicht werden, wenn die Reihenfolge, in der die Shots in einem Segment gesetzt werden, kontrolliert vorgegeben wird. Ziel ist es dabei, die Bewegung des Elektronenstrahls möglichst gering zu halten. Im Standard-Belichtungsmodus werden die Shots in einer zeilenweise stochastischen Reihenfolge gesetzt. Das heisst, dass bei

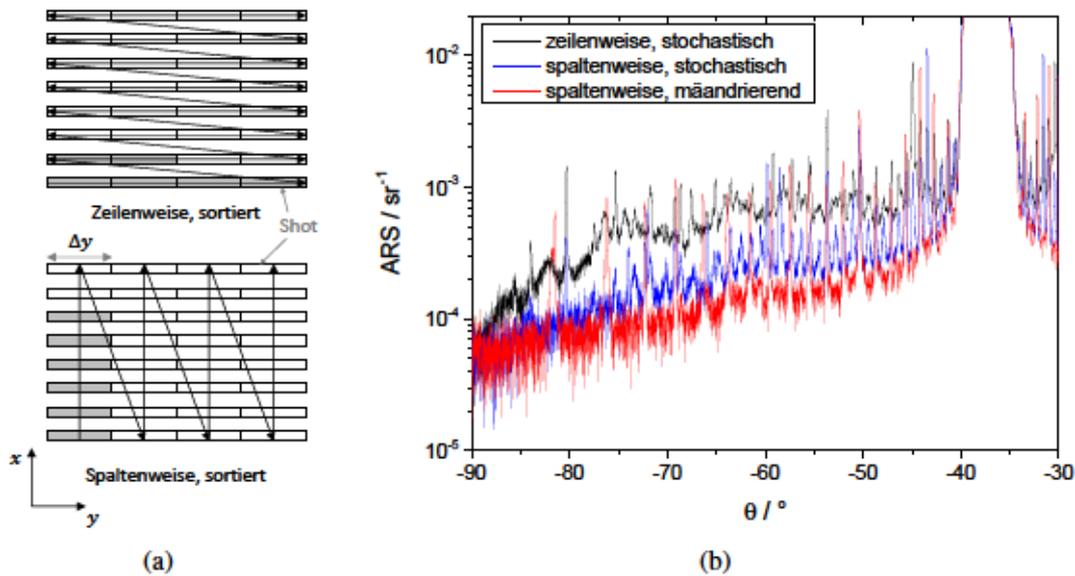


Abb. 4.22: Experimentelle Untersuchung zur Reduktion des Streulichtuntergrundes durch Abänderung der Shotreihenfolge. (a) Illustration verschiedener Abarbeitungsstrategien der Shots innerhalb eines Segments (TAFs). (b) ARS-Messung für binäre Gitter, welche mit unterschiedlichen Schreibstrategien geschrieben wurden. Die Messung erfolgte entsprechend der in Abb. 4.18(a) skizzierten Anordnung.

Beginn der Belichtung eine beliebige Zeile ausgewählt wird, diese aber der Reihe nach (beginnend beim linken äußeren Shot) abgearbeitet wird. Die darauf folgende Zeile wird wieder zufällig ausgewählt, aber ebenso vollständig abgearbeitet. Dieser Prozess setzt sich fort, bis das gesamte Segment belichtet wurde. Die Bewegung des Elektronenstrahls lässt sich dabei reduzieren, wenn die Zeilen nicht stochastisch, sondern sortiert abgearbeitet werden (Schreibmodus „zeilenweise, sortiert“, siehe Abb. 4.22(a)), beginnend bei der untersten Zeile. Entsprechend lässt sich die Abarbeitungsstrategie „spaltenweise, stochastisch“ und „spaltenweise, sortiert“ definieren. Während „spaltenweise, sortiert“ die Entsprechung der Strategie „zeilenweise, sortiert“ in dazu senkrechter Richtung bedeutet, gibt es bei der Variante „spaltenweise, stochastisch“ jedoch leichte Unterschiede. Hier werden die Spalten der Reihe nach abgearbeitet (beginnend bei der linken Spalte), innerhalb einer Spalte werden die Shots jedoch in einer zufälligen Reihenfolge gesetzt. Abbildung 4.22 zeigt die Streulichtmessungen für binäre Gitter, die mit unterschiedlichen Abarbeitungsreihenfolgen belichtet wurden. Die Messungen wurden wieder entsprechend des in Abb. 4.18(a) skizzierten Messaufbaus durchgeführt. Es zeigt sich, dass das Streulichtniveau des Standard-Gitters (zeilenweise, stochastisch) schon deutlich unterschritten werden kann, wenn die spaltenweise, stochastische Schreibstrategie benutzt wird, obwohl die Bewegung des Elektronenstrahls dabei eigentlich nicht reduziert wird. Die Ursache hierfür liegt eher am Mittelungseffekt, der schon in Abb. 4.21 bei der Variation der Shotgröße beobachtet wurde. Bei der spaltenweisen Belichtungsstrategie werden zunächst alle Shots innerhalb einer Spalte abgearbeitet, d.h., dass der Elektronenstrahl bei fester

Position in y -Richtung sehr oft in x -Richtung abgelenkt wird, bevor die nächste Spalte belichtet wird. Die Positionierungsgenauigkeit benachbarter Shots innerhalb eines Grabens kann daher als vollständig unabhängig voneinander betrachtet werden. Bei der zeilenweisen Abarbeitungsreihenfolge hingegen wird der Elektronenstrahl in x -Richtung innerhalb einer Zeile nicht mehr abgelenkt und der Positionierungsfehler aufeinander folgender Shots kann daher nicht mehr als stochastisch unabhängig angesehen werden. Dies führt zu einer gewissen Korrelation zwischen den Positionierungsgenauigkeiten benachbarter Shots. Die zugehörige Korrelationsfunktion kann mit den zur Verfügung stehenden Methoden nicht bestimmt werden. Es kann aber davon ausgegangen werden, dass die Korrelationslänge sehr groß ist, was wiederum zu einem höheren Streulichtniveau im Vergleich zu einer spaltenweisen Abarbeitungsstrategie führt.

Neben den Unterschieden zwischen der zeilen- und spaltenweisen stochastischen Belichtungsreihenfolge soll auch eine Absenkung des Streulichtniveaus durch eine Reduktion der Bewegung des Elektronenstrahls untersucht werden, d.h. durch eine Sortierung der Shotreihenfolge. Die Strategien „zeilenweise, sortiert“ bzw. „spaltenweise, sortiert“ führen dabei tatsächlich zu einer geringfügigen Verbesserung der in Abb. 4.22(b) gezeichneten schwarzen bzw. blauen Kurve, wurden aber aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht mit in den Graphen übernommen. Eine etwas deutlichere Verbesserung wird schließlich durch eine spaltenweise, mäandrierende Abarbeitungsreihenfolge erreicht, bei der die geringste Bewegung des Elektronenstrahls während der Belichtung stattfindet. Die zugehörige Streulichtmessung ist in Abb. 4.22(b) als rote Kurve dargestellt.

Kombination aller Maßnahmen

Jede der vorgestellten Maßnahmen zeigt einen deutlichen Effekt auf das Streulichtverhalten der elektronenstrahlithographisch hergestellten Testgitter. Bisher wurden die Gitter direkt nach der Belichtung vermessen und in den entsprechenden Streulichtmessungen sieht man, dass das Streulichtniveau der Gitter mit optimierter Schreibweise schon nah an der Messgrenze des Streulichtmessplatzes liegt. Um deutliche Aussagen über den Einfluss der Optimierung des Schreibregimes auf das fertige Spektrometergitter zu erhalten, werden tiefgeätzte Gitter vermessen, welche mit einer Shotgröße von 400 nm im 8-Pass-Modus mit einer mäandrierenden Schreibweise belichtet wurden. Abbildung 4.23 zeigt die zugehörige Streulichtmessung im Vergleich zu einem Multipassgitter (2.5 μm Shotgröße, 8-Pass, zeilenweise stochastisch) und zur LER-Simulationskurve. Es zeigt sich, dass durch eine Kombination aller Einzelmaßnahmen der Streulichtuntergrund soweit reduziert werden kann, dass das Limit der Kantenrauheit schon fast erreicht wird. Die Ursachen für die Abweichungen der Messung von der LER-Simulationskurve liegen in bisher nicht berücksichtigten Streulichtquellen. So wird der stochastische Positionierungsfehler der Teilarbeitsfelder, welcher in Kap. 3 untersucht wurde, bei sinkendem Streulichtniveau einen nicht mehr zu vernach-

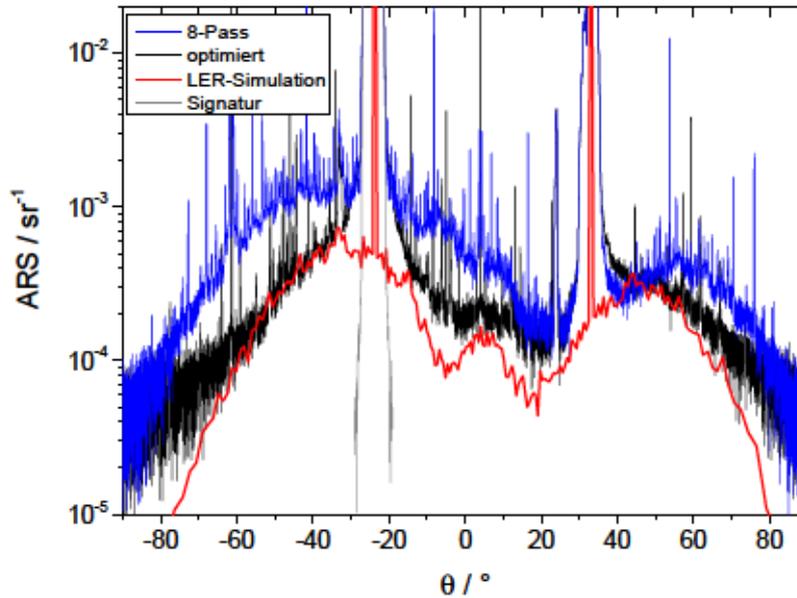


Abb. 4.23: Vergleich der ARS-Messkurven eines streulichtoptimierten Gitters (8-Pass, 400nm Shotgröße, mäandrierende Schreibstrategie) und eines 8-Pass-Gitters mit der ARS-Simulationskurve für ein LER-gestörtes Gitter. Die Messung und Simulation erfolgte entsprechend der in Abb. 4.19(a) gezeigten Anordnung für TM-polarisiertes Licht.

lässigen Beitrag zum Streulichtuntergrund liefern. Dieser Fehler kann sowohl den Anstieg der Messkurve um die $-1.$ BO als auch das im Vergleich zur Simulation erhöhte Streulichtniveau zwischen der $0.$ und $-1.$ BO erklären (vgl. Abb. 3.3(a)). Potentiell stellt auch die Oberflächenrauheit des Kieselglassubstrates eine weitere Streulichtquelle dar. Im Rahmen dieser Arbeit soll darauf allerdings nicht weiter eingegangen werden.

Die erfolgreiche Reduktion des Streulichtniveaus durch Optimierung der Schreibstrategie besitzt den Nachteil einer erhöhten Belichtungszeit ($T \approx 100 \text{ min/cm}^2$ im Vergleich zum 1-Pass-Gitter mit $T \approx 5.5 \text{ min/cm}^2$). Ein verbessertes Streulichtverhalten geht daher mit einem erhöhten Herstellungs- und Kostenaufwand einher.

5 Zusammenfassung

Ein kritischer und limitierender Faktor für die Anwendung optischer Beugungsgitter als dispersives Element in Hochleistungsspektrometern ist zweifellos deren Streulichtverhalten. Aktuelle Weltraumprojekte im Rahmen des 8. Erdbeobachtungsprogramm der ESA (z.B. das FLEX-Projekt) stellen hohe Anforderungen sowohl an deterministische Streulichtartefakte (Gittergeister) als auch an die Stärke des Streulichtuntergrunds. Gerade für Gitter fehlte bislang jedoch das genaue Verständnis für die streulichterzeugenden Prozesse, die verantwortlich für die in den Spektrometern beobachtete Streulichtverteilung sind. Das Ziel dieser Arbeit war es, die Vielzahl deterministischer und stochastischer Streulichtquellen und deren Auswirkungen auf das Streulichtverhalten des Gitters (unabhängig von der Herstellungstechnologie) zu analysieren und diese Lücke zu schließen. Darauf aufbauend sollten die für die zur Verfügung stehende Elektronenstrahlolithographie inhärenten Fehler identifiziert werden und Ansätze entwickelt werden, die eine Reduktion der Herstellungsfehler erlauben und damit das Streulichtverhalten verbessern. Gegenstand der Untersuchung war dabei hauptsächlich das binäre Phasengitter, welches im Rahmen des FLEX-Projektes entwickelt wurde.

Die Arbeit wurde dafür in zwei Schwerpunkte unterteilt. Der erste Teil (Kap. 3) beschäftigte sich mit deterministischen Abweichungen der hergestellten von der gewünschten Struktur. Hier wurden insbesondere Segmentierungsfehler untersucht, welche dem Gitter eine großperiodische Überperiode aufprägen und so zum Auftreten von Gittergeistern im Streulichtspektrum führen. Der zweite Teil (Kap. 4) hingegen befasste sich mit stochastischen Strukturabweichungen, welche diffuses Streulicht und damit einen kontinuierlich Streulichtuntergrund verursachen. In diesem Kapitel wurde der Fokus auf die Kantenrauheit der Gitterlinien gelegt, da die Auswirkungen dieser Störung von aktueller Relevanz sowohl in der wissenschaftlichen Forschung als auch bei technologischen Anwendungen sind.

Eine Herausforderung bestand darin, die theoretischen Untersuchungen möglichst allgemeingültig zu halten und unabhängig von der Herstellungstechnologie zu führen, obwohl gerade deterministische Störungen enorm von der Lithographietechnologie abhängig sind. Deterministi-

schen Streulichtartefakten in Form von Gittergeistern ist allerdings gemein, dass sie von einer streng periodischen Überstruktur stammen. Im Falle sequentieller Schreibstrategien ist dies meist auf ein fehlerhaftes Zusammensetzen des großflächigen Gitters aus vielen Teilssegmenten zurückzuführen (*Stitching*). Im Rahmen eines analytischen Modells konnte festgestellt werden, dass unterschiedliche Segmentierungsfehler eine charakteristische Verteilung der Streustrahlung auf die Gittergeister verursachen, ähnlich eines Fingerabdrucks im Streulichtspektrum. Insbesondere wurde beobachtet, dass stochastische Positionierungsfehler nicht für das Auftreten der Gittergeister verantwortlich sind, stattdessen findet man hier einen breiten Streulichtuntergrund mit deutlichen, streng auf Null abfallenden Minima an den erwarteten Geisterpositionen. Daraus kann geschlossen werden, dass Gittergeister nie durch stochastische Fehler sondern immer durch systematische Fehler verursacht werden. Die analytischen Untersuchungen konnten größtenteils im Rahmen phänomenologischer Betrachtungen erklärt und anhand rigoroser Simulationen und Streulichtmessungen an Gittern mit künstlich eingeschriebenen Fehlern verifiziert werden. Dabei zeigte sich, dass die analytischen Ergebnisse, welche streng genommen nur für großperiodische, flache Gitter gültig sind, auch auf tiefe, kleinperiodische Gitter übertragen werden können.

Auf Basis der innerhalb der theoretischen Untersuchung gewonnenen Erkenntnisse konnte schließlich festgestellt werden, dass der Elektronenstrahlschreiber einen deterministischen Positionierungsfehler einer Stärke von etwa $\Delta p_{\text{seg}} \approx 5 \text{ nm}$ aufweist. Es wurde demonstriert, dass mittels Variation der für die Segmentpositionierung verantwortlichen Kalibrierungsparameter die Stärke der Gittergeister signifikant beeinflusst werden kann. Eine auf Basis von Streulichtmessungen durchgeführte Rekalibrierung der Segmentpositionierung führte schließlich zu einer erfolgreichen Reduktion der Gittergeister. In Kombination mit der *Multipassbelichtung* konnte so eine Verbesserung des Positionierungsfehlers auf $\Delta p_{\text{seg}} < 1 \text{ nm}$ erreicht werden.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde der Fokus zunächst auf die Entwicklung eines geeigneten Modells zur Beschreibung der von Kantenrauheit verursachten Streustrahlung gelegt. Für Gitter im Gültigkeitsbereich der TEA konnte ein einfacher analytischer Ausdruck der winkelaufgelösten Streuung abgeleitet werden. Damit konnte die Streulichtverteilung sowohl für Streuwinkel als auch für Einfallswinkel bis 90 Grad korrekt wiedergegeben werden. Die abgeleitete Formel offenbarte mit einer Proportionalität der ARS zur inversen Periode und zum Quadrat der Gittertiefe einen deutlichen Einfluss der Gittergeometrie. Detaillierte Untersuchungen ergaben außerdem, dass durch eine günstige Wahl der Abhängigkeiten des Phasenhubs und der Fresnelkoeffizienten vom Einfalls- bzw. Streuwinkel sogar eine Unterscheidung der Polarisationsrichtung möglich wurde. Die Annahmen wurden durch deutliche Parallelen zum Rayleigh-Rice-Modell für Streuung an rauen Oberflächen untermauert. Jedoch sind für TM-polarisiertes Licht weitere Untersuchungen

nötig, da dieses nur für einen Einfallswinkel von 0 Grad korrekt beschrieben werden konnte, was allerdings im Rahmen phänomenologischer Betrachtungen verstanden ist.

Die analytischen Untersuchungen konnten im Rahmen einer neuartigen 1D-Simulationsmethode verifiziert werden, bei der die Zweidimensionalität der stochastischen Störung durch eine simple Multiplikation der 1D-Simulationsergebnisse mit der spektralen Leistungsdichte (PSD) und zusätzlichen Vorfaktoren berücksichtigt wird. Der Ansatz ermöglicht eine Reduktion des komplexen 2D-Problems auf ein 1D-Problem und führt damit zu einer enormen Verringerung des Rechenaufwands um mehrere Größenordnungen. Dennoch liefert das Modell exakte Ergebnisse innerhalb der Dispersionsebene des Gitters und auch in einem weiten konischen Bereich parallel zur Dispersionsebene wurden sehr gute Übereinstimmungen zu vollständigen 2D-Simulationen nachgewiesen. Mit diesem Werkzeug ist es nun erstmals möglich, rigorose Streulichtsimulationen an großperiodischen Gittern durchzuführen.

Auf Basis der abgeleiteten Modelle wurde in dieser Arbeit das LER-induzierte Streulichtverhalten binärer Gitter systematisch untersucht und beschrieben. Am Beispiel des FLEX-Gitters wurde demonstriert, dass das Streulichtverhalten der Gitter schon im Design berücksichtigt werden kann. Ein bemerkenswerter Unterschied zu großperiodischen, flachen Gittern besteht darin, dass neben der Gittertiefe nun auch der Füllfaktor einen deutlichen Einfluss auf das Streulichtverhalten besitzt. Während die Gittertiefe die Stärke des Streulichts bestimmt, so beeinflusst der Füllfaktor hauptsächlich die qualitative Verteilung und sorgt für ausgeprägte lokale Maxima und Minima im Streulichtspektrum. Die Strategie, beim Design streulichtarmer Gitter möglichst kleine Tiefen und nicht zu große bzw. zu kleine Füllfaktoren zu verwenden, konnte in den Rechnungen bestätigt werden.

Für das FLEX-Gitter wurden die Rauheitsparameter in REM-Bildern quantifiziert und die zugehörige Streulichtsimulation mit einer ARS-Messung verglichen. Es wurde festgestellt, dass die Streulichtverteilung nicht allein durch LER bestimmt wurde, sondern hauptsächlich auf stochastische Shotpositionierungsfehler zurückzuführen ist. Schließlich wurde der Einfluss der Belichtungsstrategie untersucht, bei der verschiedene Schreibstrategien, welche den Shotfehler beeinflussen, aufgefunden gemacht werden konnten. Durch Optimierung der Schreibstrategie gelang es schließlich, ein Gitter herzustellen, dessen Streulichtniveau nahezu LER-begrenzt war.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass mit der hier durchgeführten Arbeit eine Plattform zur weiterführenden Untersuchung der Streulichteigenschaften von Gittern und zur applikativen Einbeziehung von Streulichtbetrachtungen (z.B. im Gitterdesign oder Scatterometrie-messungen) geschaffen wurde. Erstmals konnten in einer systematischen und zusammenhängenden Studie die Auswirkungen verschiedenartiger Strukturfehler auf das Streulichtverhalten opti-

scher Gitter kategorisiert dargelegt werden. Eine hohe Anwendungsrelevanz ist dabei dem zu stochastischen Strukturfehlern abgeleiteten Simulationsmodell zuzusprechen, mit welchem nun auch Streulichtsimulationen an großperiodischen Gittern durchgeführt werden können. Interessant wäre beispielsweise die Untersuchung von Echellegittern, resonanten Wellenleitergittern oder Phasemasken zur Herstellung von Faser-Bragg-Gittern. Die Lücke zum bisher unverstandenem Streulichtverhalten optischer Gitter kann damit geschlossen werden. Perspektivisch wird vor allem die physikalische Beschreibung der Streuung tiefer Gitter, z.B. im Rahmen eines erweiterten Modenmodells, und die Untersuchung zusätzlicher Störquellen, z.B. Seitenwandrauheit oder Oberflächenrauheit in Gittern, im Fokus der weiteren Forschung stehen.

Literaturverzeichnis

- [1] F. Hopkinson and D. Rittenhouse. An optical problem, proposed by Mr. Hopkinson, and solved by Mr. Rittenhouse. In: *Transactions of the American Philosophical Society* **2**, pp. 201 (1786).
- [2] G. Kirchhoff and R. Bunsen. Chemische Analyse durch Spectralbeobachtungen. In: *Annalen der Physik* **186** (6), pp. 161 (1860).
- [3] G. Kirchhoff. *Untersuchungen über das Sonnenspectrum und die Spectren der chemischen Elemente*. Königlich Preußische Akademie der Wissenschaften zu Berlin (1862).
- [4] V. M. Slipher. The radial velocity of the Andromeda Nebula (1913).
- [5] V. M. Slipher. Spectrographic observations of nebulae. In: *Popular astronomy* **23**, pp. 21 (1915).
- [6] E. Hubble. A relation between distance and radial velocity among extra-galactic nebulae. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* **15** (3), pp. 168 (1929).
- [7] G. Lemaître. Un Univers homogène de masse constante et de rayon croissant rendant compte de la vitesse radiale des nébuleuses extra-galactiques. In: *Annales de la Société scientifique de Bruxelles*, volume 47, pp. 49–59 (1927).
- [8] M. Schmidt. 3C273: a star-like object with large red-shift. (1963).
- [9] V. C. Rubin and W. K. Ford Jr. Rotation of the Andromeda nebula from a spectroscopic survey of emission regions. In: *The Astrophysical Journal* **159**, p. 379 (1970).
- [10] A. A. Penzias and R. W. Wilson. A measurement of excess antenna temperature at 4080 Mc/s. In: *The Astrophysical Journal* **142**, pp. 419 (1965).
- [11] D. Fixsen, E. Cheng, J. Gales, J. C. Mather, R. Shafer, and E. Wright. The cosmic microwave background spectrum from the full COBE FIRAS data set. In: *The Astrophysical Journal* **473** (2), p. 576 (1996).
- [12] C. Cockell et al. Darwin – a mission to detect and search for life on extrasolar planets (2009).
- [13] S. Seager and W. Bains. The search for signs of life on exoplanets at the interface of chemistry and planetary science. In: *Science advances* **1** (2), p. e1500047 (2015).
- [14] M. Mayor et al. Setting new standards with HARPS. In: *The Messenger* **114**, p. 20 (2003).
- [15] C. Lovis, F. Pepe, F. Bouchy, G. L. Curto, M. Mayor, L. Pasquini, D. Queloz, G. Rupprecht, S. Udry, and S. Zucker. The exoplanet hunter HARPS: unequalled accuracy and perspectives toward 1 cm s⁻¹ precision. In: *Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy*, volume 6269, p. 62690P. International Society for Optics and Photonics (2006).

- [16] F. Pepe, A. C. Cameron, D. W. Latham, E. Molinari, S. Udry, A. S. Bonomo, L. A. Buchhave, D. Charbonneau, R. Cosentino, C. D. Dressing et al. An Earth-sized planet with an Earth-like density. In: *Nature* **503** (7476), p. 377 (2013).
- [17] S. Kraft, U. Del Bello, B. Harnisch, M. Bouvet, M. Drusch, and J.-L. Bézy. Fluorescence imaging spectrometer concepts for the earth explorer mission candidate FLEX. In: *International Conference on Space Optics – ICSO 2012*, volume 10564, p. 105641W. International Society for Optics and Photonics (2017).
- [18] J. Amos. Flex satellite will map Earth’s plant glow (2015).
- [19] M. Drusch, J. Moreno, U. Del Bello, R. Franco, Y. Goulas, A. Huth, S. Kraft, E. M. Middleton, F. Miglietta, G. Mohammed et al. The FLuorescence EXplorer Mission Concept – ESA’s Earth Explorer 8. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* **55** (3), pp. 1273 (2017).
- [20] B. Guldemann, A. Deep, and R. Vink. Overview on grating developments at ESA. In: *CEAS Space Journal* **7** (4), pp. 433 (2015).
- [21] J. Veefkind et al. TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications. In: *Remote Sensing of Environment* **120**, pp. 70 (2012).
- [22] TROPOMI web site. <http://www.tropomi.eu/>. Accessed: 2019-03-20.
- [23] A. Tokovinin, D. A. Fischer, M. Bonati, M. J. Giguere, P. Moore, C. Schwab, J. F. Spronck, and A. Szymkowiak. CHIRON – a fiber fed spectrometer for precise radial velocities. In: *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* **125** (933), p. 1336 (2013).
- [24] H. Nguyen, B. Shore, S. Bryan, J. Britten, R. Boyd, and M. Perry. High-efficiency fused-silica transmission gratings. In: *Optics letters* **22** (3), pp. 142 (1997).
- [25] T. Clausnitzer, T. Kämpfe, E.-B. Kley, A. Tünnermann, A. Tishchenko, and O. Parriaux. Investigation of the polarization-dependent diffraction of deep dielectric rectangular transmission gratings illuminated in Littrow mounting. In: *Applied optics* **46** (6), pp. 819 (2007).
- [26] U. D. Zeitner, M. Oliva, F. Fuchs, D. Michaelis, T. Benkenstein, T. Harzendorf, and E.-B. Kley. High performance diffraction gratings made by e-beam lithography. In: *Applied Physics A* **109** (4), pp. 789 (2012).
- [27] S. Schröder, D. Unglaub, M. Trost, X. Cheng, J. Zhang, and A. Duparré. Spectral angle resolved scattering of thin film coatings. In: *Applied optics* **53** (4), pp. A35 (2014).
- [28] M. D. Perry, R. D. Boyd, J. A. Britten, D. Decker, B. W. Shore, C. Shannon, and E. Shults. High-efficiency multilayer dielectric diffraction gratings. In: *Optics letters* **20** (8), pp. 940 (1995).
- [29] Y. Zhao, G.-C. Wang, and T.-M. Lu. *Characterization of Amorphous and Crystalline Rough Surface—Principles and Applications*, volume 37. Elsevier (2000).
- [30] T. M. Elfouhaily, C.-A. Guérin et al. A critical survey of approximate scattering wave theories from random rough surfaces. In: *Waves in Random Media* **14** (4), pp. R1 (2004).

- [31] S. Schröder, A. Duparré, L. Coriand, A. Tünnermann, D. H. Penalver, and J. E. Harvey. Modeling of light scattering in different regimes of surface roughness. In: *Optics Express* **19** (10), pp. 9820 (2011).
- [32] S. Schröder, T. Herffurth, H. Blaschke, and A. Duparré. Angle-resolved scattering: an effective method for characterizing thin-film coatings. In: *Applied optics* **50** (9), pp. C164 (2011).
- [33] J. E. Harvey, N. Choi, S. Schroeder, and A. Duparré. Total integrated scatter from surfaces with arbitrary roughness, correlation widths, and incident angles. In: *Optical Engineering* **51** (1), p. 013402 (2012).
- [34] S. Schröder. *Light scattering of optical components at 193 nm and 13.5 nm*. Dissertationsschrift, Friedrich-Schiller-Universität Jena (2009).
- [35] L. Leunissen, M. Ercken, and G. Patsis. Determining the impact of statistical fluctuations on resist line edge roughness. In: *Microelectronic engineering* **78**, pp. 2 (2005).
- [36] C. A. Mack. Line-edge roughness and the ultimate limits of lithography. In: *Advances in Resist Materials and Processing Technology XXVII*, volume 7639, p. 763931. International Society for Optics and Photonics (2010).
- [37] E. Gogolides, V. Constantoudis, and G. Kokkoris. Towards an integrated line edge roughness understanding: metrology, characterization, and plasma etching transfer. In: *Advanced Etch Technology for Nanopatterning II*, volume 8685, p. 868505. International Society for Optics and Photonics (2013).
- [38] T. Schuster. *Simulation von Lichtbeugung an Kreuzgitter-Strukturen und deren Anwendung in der Scatterometrie*. Dissertationsschrift, Institut für Technische Optik der Universität Stuttgart (2010).
- [39] M. H. Madsen and P.-E. Hansen. Scatterometry - fast and robust measurements of nano-textured surfaces. In: *Surface Topography: Metrology and Properties* **4** (2), p. 023003 (2016).
- [40] A. Kato and F. Scholze. Effect of line roughness on the diffraction intensities in angular resolved scatterometry. In: *Applied Optics* **49** (31), pp. 6102 (2010).
- [41] H. Gross, S. Heidenreich, and M. Bär. Impact of different stochastic line edge roughness patterns on measurements in scatterometry-A simulation study. In: *Measurement* **98**, pp. 339 (2017).
- [42] C. A. Palmer and E. G. Loewen. *Diffraction grating handbook*. Newport Corporation New York (2005).
- [43] M. Gale. Direct writing of continuous-relief micro-optics. In: *Chap 4*, pp. 87 (1997).
- [44] S. Bagheri, K. Weber, T. Gissibl, T. Weiss, F. Neubrech, and H. Giessen. Fabrication of square-centimeter plasmonic nanoantenna arrays by femtosecond direct laser writing lithography: effects of collective excitations on SEIRA enhancement. In: *ACS Photonics* **2** (6), pp. 779 (2015).

- [45] B. Schnabel and E.-B. Kley. On the influence of the e-beam writer address grid on the optical quality of high-frequency gratings. In: *Microelectronic engineering* **57**, pp. 327 (2001).
- [46] B. W. Smith. *Optical projection lithography*, chapter 1, pp. 1–41. Woodhead (2014).
- [47] G. de Zwart, M. A. van den Brink, R. A. George, D. Satriasaputra, J. Baselmans, H. Butler, J. B. van Schoot, and J. de Klerk. Performance of a step-and-scan system for DUV lithography. In: *Optical Microlithography X*, volume 3051, pp. 817–836. International Society for Optics and Photonics (1997).
- [48] C. G. Chen, P. T. Konkola, R. K. Heilmann, G. Pati, and M. L. Schattenburg. Image metrology and system controls for scanning beam interference lithography. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* **19** (6), pp. 2335 (2001).
- [49] T. Glaser. High-end spectroscopic diffraction gratings: design and manufacturing. In: *Advanced Optical Technologies* **4** (1), pp. 25 (2015).
- [50] M. Kroneberger, A. Mezger, and J.-B. Volatier. Scattering from reflective diffraction gratings: the challenges of measurement and verification. In: *Optical Fabrication, Testing, and Metrology VI*, volume 10692, p. 106920G. International Society for Optics and Photonics (2018).
- [51] T. Diehl, P. Triebel, T. Moeller, A. Gatto, D. Lehr et al. Optical gratings with low wavefront aberrations and low straylight for enhanced spectroscopical applications. In: *Optical Fabrication, Testing, and Metrology VI*, volume 10692, pp. 106920H–1. International Society for Optics and Photonics (2018).
- [52] L. Lesem, P. Hirsch, and J. Jordan. The kinoform: a new wavefront reconstruction device. In: *IBM Journal of Research and Development* **13** (2), pp. 150 (1969).
- [53] W. Demtröder. *Experimentalphysik 2 - Elektrizität und Optik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1995).
- [54] J. Goodman. Introduction to Fourier optics. In: (2008).
- [55] J. Turunen and F. Wyrowski. Diffractive optics for industrial and commercial applications. In: *Diffractive Optics for Industrial and Commercial Applications*, by Jari Turunen (Editor), Frank Wyrowski (Editor), pp. 440. ISBN 3-527-40100-8. Wiley-VCH, March 1998. p. 440 (1998).
- [56] U. Levy, E. Marom, and D. Mendlovic. Thin element approximation for the analysis of blazed gratings: simplified model and validity limits. In: *Optics communications* **229** (1-6), pp. 11 (2004).
- [57] T. Kämpfe, E.-B. Kley, A. Tünnermann, and P. Dannberg. Design and fabrication of stacked, computer generated holograms for multicolor image generation. In: *Applied optics* **46** (22), pp. 5482 (2007).
- [58] W. Freese, T. Kämpfe, E.-B. Kley, and A. Tünnermann. Design of binary subwavelength multiphase level computer generated holograms. In: *Optics letters* **35** (5), pp. 676 (2010).

- [59] D. A. Pommet, M. Moharam, and E. B. Grann. Limits of scalar diffraction theory for diffractive phase elements. In: *JOSA A* **11** (6), pp. 1827 (1994).
- [60] C. Burckhardt. Diffraction of a plane wave at a sinusoidally stratified dielectric grating. In: *Journal of the Optical Society of America* **56** (11), pp. 1502 (1966).
- [61] K. Knop. Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves. In: *Journal of the Optical Society of America* **68** (9), pp. 1206 (1978).
- [62] R. Petit. *Electromagnetic theory of gratings*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1980).
- [63] M. Moharam and T. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. In: *JOSA* **71** (7), pp. 811 (1981).
- [64] T. Gaylord and M. Moharam. Planar dielectric grating diffraction theories. In: *Applied Physics B* **28** (1), pp. 1 (1982).
- [65] M. Moharam, E. B. Grann, D. A. Pommet, and T. Gaylord. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. In: *JOSA A* **12** (5), pp. 1068 (1995).
- [66] L. Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. In: *JOSA A* **13** (9), pp. 1870 (1996).
- [67] L. Li. New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings. In: *JOSA A* **14** (10), pp. 2758 (1997).
- [68] L. Li. Fourier modal method (2014).
- [69] T. Clausnitzer. *Kontrolle der Beugungseffizienzen dielektrischer Güter*. Dissertationsschrift, Friedrich-Schiller-Universität Jena (2007).
- [70] D. Dias. *Hochfrequente Gitterstrukturen für Anwendungen in optischen Systemen*. Dissertationsschrift, Technische Universität Darmstadt (2004).
- [71] D. Maystre. *Analytic Properties of Diffraction Gratings* (2014).
- [72] E. Popov, M. Neviere, B. Gralak, and G. Tayeb. Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings. In: *JOSA A* **19** (1), pp. 33 (2002).
- [73] D. Lobb and I. Bhatti. Applications of immersed diffraction gratings in Earth observation from space. In: *International Conference on Space Optics – ICSSO 2010*, volume 10565, p. 105651M. International Society for Optics and Photonics (2017).
- [74] Copernicus web site. <http://www.esa.int/copernicus/>. Accessed: 2019-03-20.
- [75] D. Dubet. FLEX/FLORIS high spectral resolution grating procurement specification. Astrium EADS (2014).
- [76] G. R. Harrison. The Production of Diffraction Gratings I. Development of the Ruling Art. In: *JOSA* **39** (6), pp. 413 (1949).
- [77] G. R. Harrison, N. Sturgis, S. P. Davis, and Y. Yamada. Interferometrically controlled ruling of ten-inch diffraction gratings. In: *JOSA* **49** (3), pp. 205 (1959).

- [78] G. R. Harrison and G. W. Stroke. Attainment of high resolution with diffraction gratings and echelles. In: *JOSA* **50** (12), pp. 1153 (1960).
- [79] G. R. Harrison and S. W. Thompson. Large diffraction gratings ruled on a commercial measuring machine controlled interferometrically. In: *JOSA* **60** (5), pp. 591 (1970).
- [80] W. Daumann. *InP-Kurzkanal-Heterostruktur-Feldeffekttransistoren mit elektronenstrahldefinierten Gate-Kontakten*. Dissertationsschrift, Universität Duisburg (2000).
- [81] C. Mack. *Fundamental principles of optical lithography: the science of microfabrication*. John Wiley & Sons (2008).
- [82] C. Zheng. *Nanofabrication: principles, capabilities and limits*. Springer (2008).
- [83] W. Menz and J. Mohr. *Mikrosystemtechnik für Ingenieure*. VCH Wiley (1997).
- [84] M. Köhler. *Ätzverfahren für die Mikrotechnik*, volume 82. Wiley Online Library (1998).
- [85] S. Wang, C. Zhou, H. Ru, and Y. Zhang. Optimized condition for etching fused-silica phase gratings with inductively coupled plasma technology. In: *Applied optics* **44** (21), pp. 4429 (2005).
- [86] L. De Broglie. Licht und Materie: Ergebnisse der Neuen Physik. In: *Hamburg: Goverts* (1939).
- [87] R. Gross. Physik III - Optik und Quantenphänomäne. Vorlesungsskript, Walther-Meißner-Institute, Bayerische Akademie der Wissenschaften (2003).
- [88] E.-B. Kley. Continuous profile writing by electron and optical lithography. In: *Microelectronic Engineering* **34** (3-4), pp. 261 (1997).
- [89] C. Vieu, F. Carcenac, A. Pepin, Y. Chen, M. Mejias, A. Lebib, L. Manin-Ferlazzo, L. Couraud, and H. Launois. Electron beam lithography: resolution limits and applications. In: *Applied surface science* **164** (1-4), pp. 111 (2000).
- [90] P. Hahmann, L. Bettin, M. Boettcher, U. Denker, T. Elster, S. Jahr, U.-C. Kirschstein, K.-H. Kliem, and B. Schnabel. High resolution variable-shaped beam direct write. In: *Microelectronic engineering* **84** (5-8), pp. 774 (2007).
- [91] N. Jiang. On the spatial resolution limit of direct-write electron beam lithography. In: *Microelectronic Engineering* **168**, pp. 41 (2017).
- [92] P. Hahmann and O. Fortagne. 50 years of electron beam lithography: Contributions from Jena (Germany). In: *Microelectronic Engineering* **86** (4-6), pp. 438 (2009).
- [93] S. Okazaki. High resolution optical lithography or high throughput electron beam lithography: The technical struggle from the micro to the nano-fabrication evolution. In: *Microelectronic Engineering* **133**, pp. 23 (2015).
- [94] T. M. Niebauer, J. E. Faller, H. M. Godwin, J. L. Hall, and R. L. Barger. Frequency stability measurements on polarization-stabilized He-Ne lasers. In: *Appl. Opt.* **27** (7), pp. 1285 (1988).

- [95] R. Wolfson. The lock-in amplifier: A student experiment. In: *American Journal of Physics* 59 (6), pp. 569 (1991).
- [96] A. Van Oosterom and J. Strackee. The solid angle of a plane triangle. In: *IEEE transactions on Biomedical Engineering* (2), pp. 125 (1983).
- [97] O. Mazonka. Solid angle of conical surfaces, polyhedral cones, and intersecting spherical caps. In: *arXiv preprint arXiv:1205.1396* (2012).
- [98] T. A. Germer. Modeling the effect of line profile variation on optical critical dimension metrology. In: *Advanced Lithography*, pp. 65180Z–65180Z. International Society for Optics and Photonics (2007).
- [99] T. A. Germer. Effect of line and trench profile variation on specular and diffuse reflectance from a periodic structure. In: *JOSA A* 24 (3), pp. 696 (2007).
- [100] M. Heusinger, T. Flügel-Paul, and U.-D. Zeitner. Large-scale segmentation errors in optical gratings and their unique effect onto optical scattering spectra. In: *Applied Physics B* 122 (8), p. 222 (2016).
- [101] M. Heusinger, M. Banasch, and U. D. Zeitner. Rowland ghost suppression in high efficiency spectrometer gratings fabricated by e-beam lithography. In: *Optics Express* 25 (6), pp. 6182 (2017).
- [102] C. N. Berglund, J. R. Thomas, and J. T. Poreda. Multiphase printing for E-beam lithography. US Patent 5,103,101 (1992).
- [103] E. V. Clarke, W. A. Enichen, and J. G. Hartley. Hardware/software implementation for multipass E-beam mask writing. US Patent 5,621,216 (1997).
- [104] M. Eibelhuber, T. Glinsner, T. Uhrmann, P. Lindner et al. Nanoimprint lithography enables cost-effective photonics production. In: *Photonics Spectra* pp. 34–37 (2015).
- [105] A. I. Greer, B. Della-Rosa, A. Z. Khokhar, and N. Gadegaard. Step-and-Repeat Nanoimprint-, Photo-and Laser Lithography from One Customised CNC Machine. In: *Nanoscale research letters* 11 (1), p. 129 (2016).
- [106] M. Heusinger, M. Banasch, U. Zeitner, E.-B. Kley et al. High precision electron-beam-lithography for optical high performance applications. In: *Engineering for a Changing World: Proceedings; 59th IWK, Ilmenau Scientific Colloquium, Technische Universität Ilmenau, September 11-15, 2017*, volume 59 (2017).
- [107] M. Heusinger, M. Banasch, T. Flügel-Paul, and U. D. Zeitner. Investigation and optimization of Rowland ghosts in high efficiency spectrometer gratings fabricated by e-beam lithography. In: *Advanced Fabrication Technologies for Micro/Nano Optics and Photonics IX*, volume 9759, p. 97590A. International Society for Optics and Photonics (2016).
- [108] M. Meyer. *Anhang B zum Buch: Signalverarbeitung - analoge und digitale Signale, Systeme und Filter*. Springer-Verlag (2011).
- [109] M. Meyer. *Signalverarbeitung: analoge und digitale Signale, Systeme und Filter*. Springer-Verlag (2011).

- [110] E. Gogolides, V. Constantoudis, G. P. Patsis, and A. Tseripi. A review of line edge roughness and surface nanotexture resulting from patterning processes. In: *Microelectronic Engineering* **83** (4-9), pp. 1067 (2006).
- [111] V. Constantoudis, G. Patsis, L. Leunissen, and E. Gogolides. Line edge roughness and critical dimension variation: Fractal characterization and comparison using model functions. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* **22** (4), pp. 1974 (2004).
- [112] P. P. Naulleau and J. P. Cain. Experimental and model-based study of the robustness of line-edge roughness metric extraction in the presence of noise. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* **25** (5), pp. 1647 (2007).
- [113] C. A. Mack. Analytic form for the power spectral density in one, two, and three dimensions. In: *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* **10** (4), p. 040501 (2011).
- [114] M. Senthilkumar, N. Sahoo, S. Thakur, and R. Tokas. Characterization of microroughness parameters in gadolinium oxide thin films: A study based on extended power spectral density analyses. In: *Applied surface science* **252** (5), pp. 1608 (2005).
- [115] C. A. Mack. Analytical expression for impact of linewidth roughness on critical dimension uniformity. In: *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* **13** (2), p. 020501 (2014).
- [116] H. Namatsu, M. Nagase, T. Yamaguchi, K. Yamazaki, and K. Kurihara. Influence of edge roughness in resist patterns on etched patterns. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* **16** (6), pp. 3315 (1998).
- [117] T. Kozawa, H. Yamamoto, A. Saeki, and S. Tagawa. Proton and anion distribution and line edge roughness of chemically amplified electron beam resist. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* **23** (6), pp. 2716 (2005).
- [118] P. Kruit and S. Steenbrink. Local critical dimension variation from shot-noise related line edge roughness. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* **23** (6), pp. 3033 (2005).
- [119] P. Kruit and S. Steenbrink. Shot noise in electron-beam lithography and line-width measurements. In: *Scanning* **28** (1), pp. 20 (2006).
- [120] O. Noordman, A. Tychkov, J. Baselmans, J. G. Tsacoyeanes, G. Politi, M. Patra, V. Blahnik, and M. Maul. Speckle in optical lithography and its influence on linewidth roughness. In: *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* **8** (4), p. 043002 (2009).
- [121] C. A. Mack. A simple model of line-edge roughness. In: *Future Fab International* **34**, pp. 64 (2010).
- [122] C. A. Mack. Inside PROLITH: A Comprehensive Guide to Optical Lithography Simulation, Finle Technologies. In: *Inc., Austin, TX* (1997).

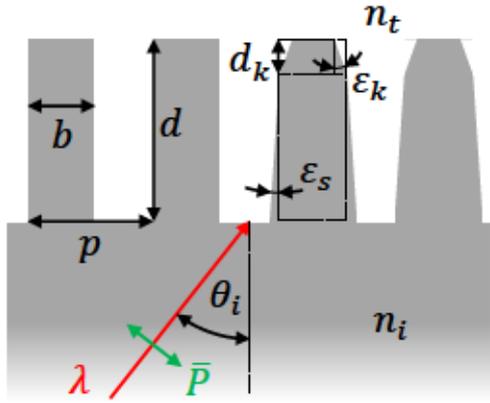
- [123] C. A. Mack. Thirty years of lithography simulation. In: *Optical Microlithography XVIII*, volume 5754, pp. 1–13. International Society for Optics and Photonics (2004).
- [124] S. Ratzsch. *Modellierung der elektronenstrahlolithographischen Strukturerzeugung in dem chemisch verstärkten Resist FEP 171*. Diplom- oder Masterarbeit, Friedrich Schiller Universität Jena (2009).
- [125] D. L. Goldfarb, A. P. Mahorowala, G. M. Gallatin, K. E. Petrillo, K. Temple, M. Angelopoulos, S. Rasgon, H. H. Sawin, S. D. Allen, M. C. Lawson et al. Effect of thin-film imaging on line edge roughness transfer to underlayers during etch processes. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* 22 (2), pp. 647 (2004).
- [126] A. R. Pawloski, A. Acheta, S. Bell, B. La Fontaine, T. Wallow, and H. J. Levinson. The transfer of photoresist LER through etch. In: *Advances in Resist Technology and Processing XXIII*, volume 6153, p. 615318. International Society for Optics and Photonics (2006).
- [127] V. Constantoudis, G. Kokkoris, P. Xydi, G. Patsis, and E. Gogolides. Modeling of line edge roughness transfer during plasma etching. In: *Microelectronic Engineering* 86 (4-6), pp. 968 (2009).
- [128] B. Jähne, H. Haussecker, and P. Geissler. *Handbook of computer vision and applications*, volume 2. Citeseer (1999).
- [129] I. Sobel. History and definition of the sobel operator. In: *Retrieved from the World Wide Web* (2014).
- [130] A. Hiraiwa and A. Nishida. Discrete power spectrum of line width roughness. In: *Journal of Applied Physics* 106 (7), p. 074905 (2009).
- [131] T. Verduin, P. Kruit, and C. W. Hagen. Determination of line edge roughness in low-dose top-down scanning electron microscopy images. In: *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* 13 (3), p. 033009 (2014).
- [132] C. A. Mack. Generating random rough edges, surfaces, and volumes. In: *Applied Optics* 52 (7), pp. 1472 (2013).
- [133] C. A. Mack. Systematic errors in the measurement of power spectral density. In: *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* 12 (3), p. 033016 (2013).
- [134] C. A. Mack. More systematic errors in the measurement of power spectral density. In: *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* 14 (3), p. 033502 (2015).
- [135] M. Heusinger. *Untersuchung elektronenstrahlolithographisch hergestellter effektiver Medien unter Berücksichtigung der Physik der Nanolithographie*. Diplom- oder Masterarbeit, Friedrich Schiller Universität Jena (2012).
- [136] T. H. Naylor, J. L. Balintfy, D. S. Burdick, and K. Chu. Computer simulation techniques. Technical report, Wiley New York (1966).
- [137] J. J. Moré. The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory. In: *Numerical analysis*, pp. 105–116. Springer (1978).

- [138] M. Powell. A Fortran subroutine for solving systems of nonlinear algebraic equations. In: *Numerical methods for nonlinear algebraic equations* pp. 150–166 (1970).
- [139] H. Gross, M.-A. Henn, S. Heidenreich, A. Rathsfeld, and M. Bär. Modeling of line roughness and its impact on the diffraction intensities and the reconstructed critical dimensions in scatterometry. In: *Applied optics* **51** (30), pp. 7384 (2012).
- [140] B. C. Bergner, T. A. Germer, and T. J. Suleski. Effective medium approximations for modeling optical reflectance from gratings with rough edges. In: *JOSA A* **27** (5), pp. 1083 (2010).
- [141] J. Bischoff and K. Hehl. Scatterometry modeling for gratings with roughness and irregularities. In: *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XXX*, volume 9778, p. 977804. International Society for Optics and Photonics (2016).
- [142] T. Schuster, S. Rafler, V. F. Paz, K. Frenner, and W. Osten. Fieldstitching with Kirchhoff-boundaries as a model based description for line edge roughness (LER) in scatterometry. In: *Microelectronic Engineering* **86** (4-6), pp. 1029 (2009).
- [143] E. N. Glytsis. Two-dimensionally-periodic diffractive optical elements: limitations of scalar analysis. In: *JOSA A* **19** (4), pp. 702 (2002).
- [144] W. Rudin. *Functional analysis. International series in pure and applied mathematics.* McGraw-Hill, Inc., New York (1991).
- [145] A. V. Oppenheim and R. W. Schaffer. *Discrete-time signal processing.* Pearson Education (1999).
- [146] M. Heusinger, D. Michaelis, T. Flügel-Paul, and U. D. Zeitner. Diffuse scattering due to stochastic disturbances of 1D-gratings on the example of line edge roughness. In: *Optics Express* **26** (21), pp. 28104 (2018).
- [147] J. C. Stover. *Optical scattering: measurement and analysis.* SPIE optical engineering (1995).
- [148] M. Heusinger, M. Banasch, D. Michaelis, T. Flügel-Paul, and U. D. Zeitner. Diffuse scattering of lamellar optical gratings due to line edge roughness. In: *Optical Fabrication, Testing, and Metrology VI*, volume 10692, p. 106920I. International Society for Optics and Photonics (2018).
- [149] P. Hones, M. Diserens, and F. Levy. Characterization of sputter-deposited chromium oxide thin films. In: *Surface and Coatings Technology* **120**, pp. 277 (1999).
- [150] A. A. Habeeb, G. A. Kazem, and Z. T. Khodair. Studying the optical properties of (Cr₂O₃:D) thin films prepared by spray pyrolysis technique. In: *Iraqi Journal of Physics* **10** (17), pp. 83 (2012).
- [151] M. Al-Kuhaili and S. Durrani. Optical properties of chromium oxide thin films deposited by electron-beam evaporation. In: *Optical Materials* **29** (6), pp. 709 (2007).
- [152] P. Johnson and R. Christy. Optical constants of transition metals: Ti, v, cr, mn, fe, co, ni, and pd. In: *Physical Review B* **9** (12), p. 5056 (1974).

- [153] M. Banasch. Persönliche Mitteilungen (2017).
- [154] H. Rigneault, F. Lemarchand, and A. Sentenac. Dipole radiation into grating structures. In: *JOSA A* **17** (6), pp. 1048 (2000).
- [155] S. Miller and D. Childers. *Probability and random processes: With applications to signal processing and communications*. Academic Press (2012).
- [156] J. Harvey, A. Krywonos, and C. L. Vernold. Modified Beckmann-Kirchhoff scattering model for rough surfaces with large incident and scattering angles. In: *Optical Engineering* **46** (7), p. 078002 (2007).
- [157] L. Rayleigh. XXXIV. On the transmission of light through an atmosphere containing small particles in suspension, and on the origin of the blue of the sky. In: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **47** (287), pp. 375 (1899).
- [158] A. T. Young. Rayleigh scattering. In: *Applied optics* **20** (4), pp. 533 (1981).

A Auflistung der Parameter zur Beschreibung gestörter Gitter

Zur vollständigen Beschreibung der gestörten Gitterstruktur ist es nötig eine Vielzahl an Parametern einzuführen. Um einen Überblick zu gewährleisten, wurden die Parameter, welche das Streulichtspektrum beeinflussen, in Tabelle A.1 und A.2 aufgelistet. Neben den Parametern zur Beschreibung der Strukturfehler finden sich darin die Designparameter und die Beleuchtungsparameter.

Parameter	Beschreibung	Einordnung	Illustration
p	Gitterperiode	Gitterdesign	
b	Stegbreite		
d	Gittertiefe		
n_i	Brechungsindex Substrat		
n_t	Brechungsindex Superstrat		
ϵ_s	Kantenneigung	reale Struktur	
ϵ_k	Neigung des Köpfchens		
d_k	Dicke des Köpfchens		
λ	Wellenlänge	Gitterbeleuchtung	
θ_i	Einfallswinkel		
\vec{P}	Polarisation		

Tab. A.1: Überblick über die in der Arbeit verwendeten Parameter zur vollständigen Beschreibung der Gitterstruktur und der Gitterbeleuchtung. Jeder dieser Parameter beeinflusst das Streulichtspektrum in unterschiedlicher Art und Weise und Stärke.

Parameter	Beschreibung	Einordnung	Illustration
p_{seg}	Segmentgröße		
Δp_{seg}	Deterministischer Segmentpositionierungsfehler		
$\sigma_{\text{seg},p}$	Stochastischer Segmentpositionierungsfehler	Segmentierungsfehler	
$\sigma_{\text{seg},b}$	Stochastischer Segmentbelichtungsfehler		
C_b	Systematischer Shotformatfehler		
C_p	Systematischer Shotpositionierungsfehler		
σ	RMS-Wert	LER-Parameter	
ξ	Korrelationslänge		
α	Rauheitsexponent		
σ_{LWR}	Stochastischer Shotformatfehler	Belichtungsfehler	
σ_{LPR}	Stochastischer Shotpositionierungsfehler		

Tab. A.2: Überblick über die in der Arbeit verwendeten Parameter zur Beschreibung des gestörten Gitters. Jeder dieser Parameter beeinflusst das Streulichtspektrum in unterschiedlicher Art und Weise und Stärke. Segmentierungsfehler sind v.a. verantwortlich für Gittergeister. Kantenrauheit (LER) verursacht einen homogenen Streulichtuntergrund. Belichtungsfehler sorgen für einen erhöhten Streulichtuntergrund entlang der Dispersionsebene des Gitters.

B Ableitung von Gleichung (4.17)

Am Beginn der Herleitung von Gleichung (4.17), welche die Streuung eines durch LER gestörten binären Gitters beschreibt, steht das Feld in der Gitterebene. Unter Anwendung der dünne Elemente Approximation lässt sich dieses als Produkt der Transmissionsfunktion des Gitters $g(x,y)$ in Form von Gleichung (4.14) mit dem einfallenden Feld E_{in} aufschreiben. Der erste Summand in dieser Gleichung trägt nur zur 0. Ordnung bei und kann daher weg gelassen werden. Die Ableitung von Gleichung (4.17) beginnt dann mit

$$g(x,y) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \Pi \left(\frac{x - np - \Delta p_n(y)}{b + \Delta b_n(y)} \right) \cdot (te^{i\phi_s} - te^{i\phi_g}). \quad (\text{B.1})$$

Im Rahmen der Fourieroptik ist die Fernfeldverteilung E_{out} durch die Fouriertransformation des Feldes in der Gitterebene gegeben, d.h.

$$E_{out}(k_x, k_y) = \mathcal{F} \{g(x,y)E_{in}\} = \mathcal{F} \{g(x,y)\} * \mathcal{F} \{E_{in}\} \stackrel{E_{in}=\text{const.}}{=} \mathcal{F} \{g(x,y)\} E_{in}, \quad (\text{B.2})$$

wobei '*' die Faltung symbolisiert. Im Falle eines konstanten einfallenden Feldes ist die Fernfeldverteilung hauptsächlich durch die Fouriertransformation der Transmissionsfunktion gegeben:

$$\mathcal{F} \{g(x,y)\} = \tilde{g}(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \iint g(x,y) e^{-ik_x x - ik_y y} dx dy. \quad (\text{B.3})$$

Einsetzen von Gleichung (B.1) und Anwenden der Substitution $\zeta = x - np - \Delta p_n(y)$ führt zu

$$\tilde{g}(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 (te^{i\phi_s} - te^{i\phi_g}) \sum_{n=0}^{N_p-1} \iint \Pi \left(\frac{\zeta(y)}{b_n(y)} \right) e^{-ik_x(\zeta + np + \Delta p_n(y)) - ik_y y} d\zeta dy. \quad (\text{B.4})$$

Die Rechteckfunktion begrenzt das ζ -Integral auf den Bereich $-\frac{b_n(y)}{2} \dots \frac{b_n(y)}{2}$, welches damit direkt ausgeführt werden kann und die Gleichung zu

$$\tilde{g}(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 (te^{i\phi_s} - te^{i\phi_g}) \int e^{-ik_y y} dy \sum_{n=0}^{N_p-1} e^{-ik_x(np + \Delta p_n(y))} \frac{1}{-ik_x} \left(e^{-ik_x \frac{b_n(y)}{2}} - e^{ik_x \frac{b_n(y)}{2}} \right) \quad (\text{B.5})$$

umformt. Ausnutzen der *Eulerschen Formel* liefert

$$\tilde{g}(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 (te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}) \int e^{-ik_y y} dy \sum_{n=0}^{N_p-1} e^{-ik_x(np+\Delta p_n(y))} \frac{2}{k_x} \sin\left(k_x \frac{b_n(y)}{2}\right). \quad (\text{B.6})$$

Mit Hilfe einer Taylorentwicklung erster Ordnung jeweils des Exponentialterms und des Sinus-Terms um $\Delta p_n(y) = 0$ bzw. $\Delta b_n(y) = 0$ lässt sich die Gleichung zu

$$\tilde{g}(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 (te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}) \int e^{-ik_y y} dy \sum_{n=0}^{N_p-1} e^{-ik_x np} [1 - ik_x \Delta p_n(y)] \frac{2}{k_x} \left[\sin\left(k_x \frac{b}{2}\right) + \frac{k_x \Delta b_n(y)}{2} \cos\left(k_x \frac{b}{2}\right) \right] \quad (\text{B.7})$$

$$= \tilde{g}_0 + \tilde{g}_s \quad (\text{B.8})$$

umformen, wobei nun ein ungestörter Term \tilde{g}_0 auftritt, welcher keinen Beitrag zur Streuung liefert und somit im Folgenden nicht mehr berücksichtigt werden muss¹. Außerdem tritt in \tilde{g}_s ein Term zweiter Ordnung auf, welcher innerhalb der Näherung erster Ordnung (*Bornsche Näherung*) vernachlässigt werden soll. \tilde{g}_s lässt sich dann wie folgt schreiben:

$$\tilde{g}_s(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 (te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}) \int e^{-ik_y y} dy \sum_{n=0}^{N_p-1} e^{-ik_x np} \left[\Delta b_n(y) \cos\left(k_x \frac{b}{2}\right) - 2i\Delta p_n(y) \sin\left(k_x \frac{b}{2}\right) \right]. \quad (\text{B.9})$$

Damit verbleiben nur noch $\Delta b_n(y)$ und $\Delta p_n(y)$ als y -abhängige Größen, welche zudem linear in der Gleichung auftreten. Die Fouriertransformation kann somit einfach ausgeführt werden und mit der Substitution $\Delta \tilde{b}_n(k_y) = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta b_n(y) e^{-ik_y y} dy$ erhält man schließlich

$$\tilde{g}_s(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 (te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}) \sum_{n=0}^{N_p-1} e^{-ik_x np} \left[\Delta \tilde{b}_n(k_y) \cos\left(k_x \frac{b}{2}\right) - 2i\Delta \tilde{p}_n(k_y) \sin\left(k_x \frac{b}{2}\right) \right]. \quad (\text{B.10})$$

Die eigentliche Messgröße ist die Strahlungsleistung P im Fernfeld bezogen auf den Öffnungswinkel Ω des Detektors, welche sich nach [154, Gl. 6b] gemäß

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{2\pi^2 k_0 n_t k_{t,z}^2}{\mu_0 \omega} \langle |E_{\text{streu}}|^2 \rangle \quad (\text{B.11})$$

¹Bei späterer Bildung des Betragsquadrates und anschließendem Erwartungswert werden die Mischterme von \tilde{g}_0 und \tilde{g}_s Null. Daher kann schon ab hier nur mit \tilde{g}_s weiter gerechnet werden.

berechnen lässt, wobei ω die Kreisfrequenz der einfallenden Strahlung, k_0 den Betrag des Wellenzahlvektors, μ_0 die magnetische Permeabilität und $\langle \dots \rangle$ den Erwartungswert symbolisiert. Daher muss zunächst der Erwartungswert des Betragsquadrates des gestreuten Feldes, welches durch $E_{\text{streu}} = \tilde{g}_s E_i$ gegeben ist, gebildet werden. Aufgrund stochastischer Unabhängigkeit der Zufallsparameter $\Delta \tilde{b}_n$ und $\Delta \tilde{p}_n$ (für verschiedene n) fallen die Mischterme zwischen verschiedenen Summanden weg und man erhält

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{2\pi^2 k_0 n_t k_{t,z}^2}{\mu_0 \omega} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^4 |te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}|^2 \sum_{n=0}^{N_p-1} \left[\langle |\Delta \tilde{b}_n(k_y)|^2 \rangle \cos^2 \left(k_x \frac{b}{2} \right) + 4 \langle |\Delta \tilde{p}_n(k_y)|^2 \rangle \sin^2 \left(k_x \frac{b}{2} \right) \right] |E_i|^2. \quad (\text{B.12})$$

Die Linienfehler lassen sich entsprechend der Gleichungen (4.15) und (4.16) direkt in Kantenrauheiten übersetzen. Die Vorfaktoren der Cosinus- bzw. Sinusterme gleichen sich dann an

$$\langle |\Delta \tilde{b}_n(k_y)|^2 \rangle = 4 \langle |\Delta \tilde{p}_n(k_y)|^2 \rangle = \langle |\tilde{X}_{l,n}|^2 \rangle + \langle |\tilde{X}_{r,n}|^2 \rangle \quad (\text{B.13})$$

und die Gleichung vereinfacht sich zu

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{2\pi^2 k_0 n_t k_{t,z}^2}{\mu_0 \omega} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^4 |te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}|^2 \sum_{n=0}^{N_p-1} \left[\langle |\tilde{X}_{l,n}(k_y)|^2 \rangle + \langle |\tilde{X}_{r,n}(k_y)|^2 \rangle \right] |E_i|^2, \quad (\text{B.14})$$

wobei $\tilde{X}_{l/r,n}$ die Fouriertransformation der linken bzw. rechten Kante des n -ten Grabens darstellt. Bei Bildung des Erwartungswertes ist diese für jede Kante gleich und die Summation kann ausgeführt werden:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{2\pi^2 k_0 n_t k_{t,z}^2}{\mu_0 \omega} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^4 |te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}|^2 2N_p \langle |\tilde{X}(k_y)|^2 \rangle |E_i|^2. \quad (\text{B.15})$$

Für stochastische Signale $X(y)$ der Länge L lässt sich die *spektrale Leistungsdichte* PSD aus der kontinuierlichen Fouriertransformation $\tilde{X}(k_y)$ mittels $PSD(k_y) = \frac{1}{L} \langle |\tilde{X}(k_y)|^2 \rangle$ ableiten [155, Gl. (10.7)] [109]. Weiterhin lässt sich die Bestrahlungsstärke mit Hilfe des *Poynting-Theorems* nach $\frac{dP_i}{dA} = \frac{\Re(k_{i,z})}{2\mu_0 \omega} |E_i|^2$ definieren. Damit wird Gleichung (B.15) zu

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{k_0 n_t k_{t,z}^2}{\Re(k_{i,z})} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 |te^{i\varphi_s} - te^{i\varphi_g}|^2 2N_p L PSD(k_y) \frac{dP_i}{dA}. \quad (\text{B.16})$$

Die gesamte eingestrahelte Leistung ist durch $P_i = \frac{dP_i}{dA} A$ gegeben, wobei $A = N_p p \cdot L$ die beleuchtete Gitterfläche darstellt. Damit erhält man für die winkelaufgelöste Streuung

$$ARS = \frac{1}{P_i} \frac{dP}{d\Omega} \quad (\text{B.17})$$

$$= \frac{k_0 n_t k_{t,z}^2}{\Re(k_{i,z})} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 |t e^{i\varphi_s} - t e^{i\varphi_s}|^2 2 \frac{PSD(k_y)}{p}, \quad (\text{B.18})$$

was mit $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ und $k_{t,z} = n_t k_0 \cos \theta$ bzw. $k_{i,z} = n_i k_0 \cos \theta_i$ direkt Gleichung (4.17) ergibt. Die PSD ist durch Gleichung (4.4) gegeben, wobei der Wellenzahlvektor über $k_y = 2\pi f_y$ auf die Ortsfrequenz f_y zurückgeführt werden kann.

C Analogie von Gleichung (4.17) zur Rayleigh-Rice-Streutheorie rauer Oberflächen

In Kap. 4.3.1 wurde festgestellt, dass Gl. (4.17) die Streulichtverteilung von durch LER gestörten Gittern für TE-polarisiertes Licht beschreibt, wenn für die Fresnelkoeffizienten und den Phasenhub die Ausdrücke (4.22) verwendet werden. Dies lässt sich durch einen Vergleich zum etablierten Rayleigh-Rice-Modell, welches die Streuung von Licht an rauen Oberflächen beschreibt [147, 156], untermauern. Demnach wird die Streuung von TE-polarisiertem Licht in Transmission durch

$$ARS_{SR} = \frac{1}{\lambda^4} n_t^3 n_i \cos^2 \theta \cos \theta_i \cdot |r(\theta_i)| |r(\theta)| \cdot PSD_{SR} \quad (C.1)$$

beschrieben, wobei r den Fresnel-Reflexionskoeffizienten an der Grenzfläche beschreibt, welcher über $r = t - 1$ aus dem Transmissionskoeffizienten abgeleitet werden kann. Die ARS wurde hierbei mit „SR“ indiziert um ihre Gültigkeit für Oberflächenrauheit (engl.: *surface roughness*, SR) hervorzuheben. Die Ähnlichkeit zw. LER- und SR-Streuung wird deutlicher, wenn Gl. (4.17) leicht umgeschrieben wird. Ersetzt man darin die Fresnel-Transmissionskoeffizienten mit den Reflexionskoeffizienten und führt eine Taylorentwicklung für kleine Gitteriefen $d \ll \lambda$ aus, so lässt sich Gl. (4.17) zu

$$ARS_{LER} = \frac{1}{\lambda^4} n_t^3 n_i \cos^2 \theta \cos \theta_i \cdot |r(\theta_i)| |\rho(\theta)| \cdot \left[d^2 \frac{PSD_{LER}}{p} \right] \quad (C.2)$$

umformen, wobei der Reflexionsparameter $\rho = \frac{[k_{i,z}(\theta) - k_{t,z}(\theta)] / (k_i - k_t)}{[k_{i,z}(\theta) - k_{t,z}(\theta)] / (k_i + k_t)}$ eingeführt wurde (mit $k_{i/t} = n_{i/t} k_0 = n_{i/t} 2\pi/\lambda$). In Gl. (C.2) wurde die ARS mit „LER“ indiziert um eine bessere Unterscheidbarkeit zu ARS_{SR} zu ermöglichen. Es sei erwähnt, dass die Umformung von Gl. (4.17) zur Darstellung (C.2) nur möglich ist wenn der Fresnelkoeffizient abhängig vom Einfallswinkel und die Phase abhängig vom Streuwinkel gemäß Gl. (4.22) angenommen wird.

Nach dieser Umformung zeigt die durch Gl. (C.2) beschriebene LER-induzierte Streuung eine hohe Analogie zu der durch Gl. (C.1) beschriebenen Rayleigh-Rice-Streuung rauer Oberflächen. Man findet in beiden Formeln den quadratischen Kosinusterm des Streuwinkels θ , den Ko-

sinus des Einfallswinkels θ_i , die zwei Reflexionskoeffizienten, welche sowohl vom Einfallswinkel als auch vom Streuwinkel abhängen, die für Rayleigh-Streuung typische Abhängigkeit zur 4. Potenz der Wellenlänge [157, 158] und die PSD, welche die stochastische Störung beschreibt. Für LER-Streuung tritt zusätzlich eine inverse Proportionalität zur Gitterperiode und eine Abhängigkeit vom Quadrat der Gittertiefe auf. Diese Unterschiede zur SR-Streuung sind auf Besonderheiten der Kantenrauheit zurückzuführen. Im Gegensatz zu Oberflächenrauheit, welche eine kontinuierliche Störung sowohl in x - als auch in y -Richtung verursacht, zeigt LER nur in y -Richtung eine kontinuierliche Störung, tritt in x -Richtung jedoch nur an den diskreten Kantenpositionen auf. Dies hat zur Folge, dass die Dichte der Streulichtquellen (und damit die Streuung) mit kleiner werdender Periode zunimmt. Weiterhin führt die z -Unabhängigkeit der LER zu mit der Gittertiefe größer werdenden totalen Störungen. Daher wird die Streulichtintensität mit der Gittertiefe zunehmen, solange Propagationseffekte innerhalb der Gitters vernachlässigt werden können. Mit sehr großen Tiefen ($d \approx \lambda$) kommt es zum Auftreten von Interferenzerscheinungen zw. Gittergräben und -stegen und die Rayleigh-typische λ^{-4} -Abhängigkeit muss durch eine λ^{-2} -Abhängigkeit und einen zusätzlichen Interferenzterm $(1 - \cos\Delta\phi)$ ersetzt werden (siehe Gl. (4.17)).

Danksagung

Die vorliegende Arbeit ist in gruppenübergreifender Arbeit zwischen der CMN-Gruppe am Fraunhofer Institut für Optik und Feinmechanik (IOF) und der Gruppe „Mikrostrukturtechnik“ am Institut für angewandte Physik (IAP) in Jena entstanden. An dieser Stelle möchte ich meinen persönlichen Dank an all jene richten, die zum erfolgreichen Gelingen beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Andreas Tünnermann, Ernst-Bernhard Kley, Andreas Bräuer und Uwe Detlef Zeitner für die Möglichkeit, meine Dissertation zu einem inhaltlich so ansprechenden Thema anfertigen zu dürfen. Ich möchte mich für das entgegengebrachte Vertrauen bedanken, für die Möglichkeit, meine Thematik weitgehend frei entwickeln zu können und in dieser offenen Arbeitssphäre eigene Ideen umsetzen zu können. An Uwe Zeitner geht mein besonderer Dank für die ausgezeichnete wissenschaftliche Betreuung und die nützlichen Diskussionen zum Thema.

Diese Arbeit hätte nicht ohne Anregungen, Kritik und Unterstützung vieler Kolleginnen und Kollegen entstehen können. Besonders hervorheben möchte ich meine Dankbarkeit gegenüber Thomas Flügel-Paul, Michael Banasch und Dirk Michaelis: Ohne euer unermüdliches Engagement für die gemeinsamen wissenschaftlichen Ziele hätte diese Arbeit nicht gelingen können. Danke!

Mein Dank spreche ich auch allen Kollegen aus, die an der Probenherstellung beteiligt waren. Dies sind insbesondere Andre Matthes, Sascha Erhardt, Tino Benkenstein, Michael Banasch, Torsten Harzendorf, Robert Kinder, Julia Kästner und Alita Tribus aus der CMN-Gruppe und Thomas Käsebier, Detlef Schelle, Natali Sergeev, Waltraud Gräf, Jörg Fuchs, Werner Rockstroh und Holger Schmidt aus der Arbeitsgruppe „Mikrostrukturtechnik“. Beiden Arbeitsgruppen möchte ich für die angenehme kollegiale Atmosphäre und die mir zuteil gewordene Hilfe danken. Hierbei will ich besonders noch Thomas Siefke, Kay Dietrich und Tina Weichelt für Diskussionen rund um etwaige Themen und Probleme danken, die mir hin und wieder einen neuen Blickwinkel öffneten.

Gedankt sei vor allem auch Holger Hartung und Reinhardt Geiß für ihre vielen Ratschläge und kritischen Kommentare beim Gegenlesen meiner Arbeit!

Nun, das Beste kommt ja bekanntlich zum Schluß: Familie und Freunde. Ich bin euch für die zahlreichen unvergesslichen Momente, die wir gemeinsam erleben durften, dankbar: Seien es gemeinsame Urlaube oder kurze Ausflüge zum Klettern, Wandern oder Paddeln, große Partys oder Abende in gemütlicher Runde, das jährliche Familientreffen oder Besuche aus/nach Spanien, zusammen zu Weihnachten zu singen oder zum Karnevalsanzug im Orchester zu spielen, Arbeiten auf der Baustelle im Steuerhaus oder die herbstliche Obst- und Gemüseernte und anschließende Weinherstellung! Die Liste ist lange nicht vollständig und hiermit möchte ich euch für die schöne Zeit neben der Arbeit und dem Studium danken!

An dieser Stelle möchte ich einem Menschen ganz besonders danken: Aitana, eres la persona más importante de mi vida y contigo no solo disfruto de las cosas buenas mucho más, sino que también es más fácil soportar las cosas malas. Quiero darte las gracias por tu paciencia conmigo mientras he trabajado en mi doctorado. Durante este tiempo siempre me has dado fuerzas con tu ánimo feliz! Pues, vamos a disfrutar de las cosas buenas!

Publikationen

Fachartikel

1. J. Bergmann, M. Heusinger, G. Andrä, F. Falk. „Temperature dependent optical properties of amorphous silicon for diode laser crystallization.“ In: *Optics Express* **20**(106), A856-A863 (2012).
2. M. Heusinger, T. Flügel-Paul, U. D. Zeitner. „Large-scale segmentation errors in optical gratings and their unique effect onto optical scattering spectra.“ In: *Applied Physics B* **122**(8), 222 (2016).
3. M. Heusinger, M. Banasch, U. D. Zeitner. „Rowland ghost suppression in high efficiency spectrometer gratings fabricated by e-beam lithography.“ In: *Optics Express* **25**(6), 6182 (2017).
4. T. Siefke, M. Heusinger, C. B. R. Hurtado, J. Dickmann, U. D. Zeitner, A. Tünnermann, S. Kroker. „Line-edge roughness as a challenge for high-performance wire grid polarizers in the far ultraviolet and beyond.“ In: *Optics Express* **26**(15), 19534-19547 (2018).
5. M. Heusinger, D. Michaelis, T. Flügel-Paul, U. D. Zeitner. „Diffuse scattering due to stochastic disturbances of 1D-gratings on the example of line edge roughness.“ In: *Optics Express* **26**(21), 28104 (2018).
6. T. P. Butler, D. Gerz, C. Hofer, J. Xu, C. Gaida, T. Heuermann, M. Gebhardt, L. Vamos, W. Schweinberger, J. A. Gessner, T. Siefke, M. Heusinger, U. D. Zeitner, A. Apolonski, N. Karpowicz, J. Limpert, F. Krausz, I. Pupeza. „Watt-scale 50-MHz source of single-cycle waveform-stable pulses in the molecular fingerprint region.“ In: *Optics Letters* **44**(7), 1730 (2019).

In Vorbereitung befindliche Fachartikel

1. M. Heusinger, M. Banasch, D. Michaelis, T. Flügel-Paul, U. D. Zeitner. „Reducing the diffuse stray light background in high efficiency spectrometer gratings fabricated by e-beam lithography.“

Konferenzbeiträge

1. M. Heusinger, M. Banasch, T. Flügel-Paul, U. D. Zeitner. „Investigation and optimization of Rowland ghosts in high efficiency spectrometer gratings fabricated by e-beam lithography.“ In: *Advanced Fabrication Technologies for Micro/Nano-Optics and Photonics IX* **9759**, 97590A. International Society for Optics and Photonics (2016).

2. T. Siefke, C. B. R. Hurtado, J. Dickmann, M. Heusinger, S. Kroker. „Simulation of the influence of line edge roughness on the performance of deep ultraviolet wire grid polarizers.“ In: *Modeling Aspects in Optical Metrology VI* 10330, 103300S. International Society for Optics and Photonics (2017).
3. M. Heusinger, M. Banasch, U. D. Zeitner, E. B. Kley (2017). „High precision electron-beam-lithography for optical high performance applications.“ In: *Engineering for a Changing World: Proceedings* 59, 59th IWK Ilmenau Scientific Colloquium (2017).
4. M. Heusinger, M. Banasch, D. Michaelis, T. Flügel-Paul, U. D. Zeitner. „Diffuse scattering of lamellar optical gratings due to line edge roughness.“ In: *Proc. of SPIE* 10692, 106920I-1, Frankfurt (2018).

Seminare und Workshops

1. M. Heusinger, T. Paul, U. D. Zeitner. „Line defects and their influence on the performance of optical gratings.“, Poster, 546th WE-Heraeus-Seminar on Light in Disordered Photonic Media, Bad Honnef (2013).
2. M. Heusinger, M. Banasch, U. D. Zeitner. „Stray light optimization of high efficiency spectrometer gratings fabricated with e-beam lithography.“, Vortrag, 4th EOS Conference on Manufacturing and Testing of Optical Components, World of Photonics Congress München (2015).
3. M. Heusinger, M. Banasch, D. Michaelis, T. Flügel-Paul, U. D. Zeitner. „Simulating scattering of lamellar optical gratings with irregularities.“, Vortrag, 16th Fraunhofer IISB Lithography Simulation Workshop, Gräfenberg (2018).

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre hiermit ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise unentgeltlich geholfen:

1. Dipl.-Ing. Michael Banasch bei der gemeinsamen Bearbeitung der in den Abschnitten 3.4 und 4.4.3 dargestellten Fragestellungen.
2. Dr. Dirk Michaelis bei der gemeinsamen Bearbeitung der in den Abschnitten 4.2.1 und 4.3.1 dargestellten Fragestellungen.
3. Prof. Dr. Uwe-Detlef Zeitner als betreuender Hochschullehrer.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die geltende Promotionsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Datum, Ort

Martin Heusinger