



プロキシミティ像の計算法

大木 裕史

日本光学工業(株)光学部 〒140 東京都品川区西大井 1-6-3

(1986年10月4日受理)

Diffraction Calculation Method for the Proximity Image Profile

Hiroshi OOKI

Optical Designing Department, Nippon Kogaku K.K.,
1-6-3, Nishi-Ohi, Shinagawa-ku, Tokyo 140

Calculation methods of the proximity image are described. A very simple method based on the exact theory of metallic gratings is used for diffraction calculation, and the computational result is compared with that of the scalar theory. The validity of the scalar theory is also shown in the case where the period of the object structure is much longer than the wavelength.

1. はじめに

像面を物体面と近接して置き、照明を当てることによって得られる、いわゆるプロキシミティ像のシミュレーションは、通常のレンズ系による物体の結像シミュレーションと同様に興味深い問題であり、すでにこれについての報告も出ている¹⁻³⁾。このうち Lin¹⁾ は、Sommerfeld の厳密解を合成することによって金属スリットにおける回折計算を行なっているが、複数のスリットから成る周期状パターンについては解析していない。また、他の文献^{2,3)} は、いずれもスカラー理論によるものである。ここでわれわれは金属回折格子の厳密理論⁴⁾ を用いて非常に簡明な方法で周期状パターンのプロキシミティ像の計算を行なったので、その結果を報告する。また、スカラー理論による計算法にも2通りの方法を示し、これらの差異にも注目すべき点があると考え、結果を付した。

2. フラウンホーファー回折

金属回折格子の格子ピッチが照明光の波長 λ に比べて十分に大きい場合、回折波の厳密解はスカラー理論による解と一致する。ここで簡単に、この事実を定式化しよう。Fig. 1 は金属回折格子の断面図であり、入射光はいま E 偏光状態 (電気ベクトルが紙面に垂直) にある

とする。

このとき入射波 F_i 、反射波 F_r 、透過波 F_t は E ベクトルの y 成分として次のように書ける。

$$F_i = \exp(-i\beta_0 x + i\gamma_0 z) \quad (1)$$

$$F_r = \sum_{n=-\infty}^{\infty} R_n \exp(-i\beta_n x - i\gamma_n z) \quad (2)$$

$$F_t = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n \exp(-i\beta_n x + i\gamma_n z) \quad (3)$$

ただし

$$\begin{aligned} \beta_n &= \beta_0 + 2n\pi/d, \quad \beta_0 = k \sin \theta_0 \\ \gamma_n &= \sqrt{k^2 - \beta_n^2} \end{aligned} \quad (4)$$

であり、 k は波数 $2\pi/\lambda$ である。

ここで仮定より格子ピッチ d が大きいので、回折波のエネルギーはそのほとんどが有限個の進行波に分配される。 d がきわめて大きければこれら進行波の回折角も小さくなり、その結果 $2N\pi/d \ll k$ をみたす N を用いて

$$\begin{aligned} &\sum_{n=-N}^N R_n \exp(-i\beta_n x - i\gamma_n z) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} R_n \exp(-i\beta_n x - i\gamma_n z) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} &\sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x + i\gamma_n z) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n \exp(-i\beta_n x + i\gamma_n z) \end{aligned} \quad (6)$$

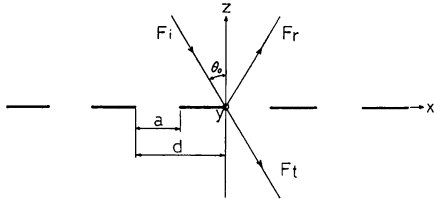


Fig. 1 The coordinate system and the definitions of the quantities a, d , and θ_0 .

と書ける。

Fig. 1 の格子面における電場と磁場の境界条件は、 $z=0$ において、E 偏光の場合

$$F_i + F_r = F_t \quad (0 \leq x < d) \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(F_i + F_r) = \frac{\partial}{\partial z} F_t \quad (0 \leq x < a) \quad (8)$$

$$0 = F_t \quad (a \leq x < d) \quad (9)$$

である。ここで入射角 θ_0 がゼロだったとすれば、(4) 式より

$$\begin{aligned} \beta_n &= 2n\pi/d \ll k \\ \gamma_n &\doteq k \end{aligned} \quad (10)$$

となり、(5)、(6)、(10)式の近似のもとに、(7)~(9) 式を書けば

$$1 + \sum_{n=-N}^N R_n \exp(-i\beta_n x) = \begin{cases} \sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x) & (0 \leq x < a) \\ 0 & (a \leq x < d) \end{cases} \quad (11)$$

$$1 - \sum_{n=-N}^N R_n \exp(-i\beta_n x) = \sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x) \quad (0 \leq x < a) \quad (13)$$

$$0 = \sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x) \quad (a \leq x < d) \quad (14)$$

よって、 $0 \leq x < a$ の区間で (11)式と (13)式を辺々たせば、(14)式と合わせて

$$\sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x) = \begin{cases} 1 & (0 \leq x < a) \\ 0 & (a \leq x < d) \end{cases} \quad (15)$$

となる。 n 次回折光の振幅 T_n は (15)式をフーリエ変換すればよく、これはまさしくスカラー理論による方法にほかならない。 R_n については (11)式に (15)式を代入すれば

$$\sum_{n=-N}^N R_n \exp(-i\beta_n x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x < a) \\ -1 & (a \leq x < d) \end{cases} \quad (16)$$

となって再びスカラー理論と一致する。 θ_0 がゼロではないが十分にゼロに近い場合、(15)、(16)式はそれぞれ

$$\sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x) = \begin{cases} \exp(-i\beta_0 x) \\ 0 \end{cases} \quad (17)$$

$$\sum_{n=-N}^N R_n \exp(-i\beta_n x) = \begin{cases} 0 \\ -\exp(-i\beta_0 x) \end{cases} \quad (18)$$

となり、スカラー理論との一致がここでも示される。ただし θ_0 が大きくなると (17)、(18)式は成り立たない。同様な結果は H 偏光状態 (磁気ベクトルが紙面に垂直) からも容易に導ける。

3. 一次元回折格子の解析

本節では主に Kalhor⁴⁾ の文献で与えられた手法を用いて回折波の計算を行なうが、計算の高速化のためさらに改良を加えた。

まず回折格子を Fig. 1 のモデルで表わす。ただし、ここでは格子ピッチ d が波長 λ に比べて十分大きいという仮定はおかない。

入射波 F_i 、反射波 F_r 、透過波 F_t はそれぞれ E (H) 偏光状態における \mathbf{E} (\mathbf{H}) ベクトルの y 成分を表わすものとする、(1)、(5)、(6)式より

$$F_i = \exp(-i\beta_0 x + i\gamma_0 z) \quad (19)$$

$$F_r = \sum_{n=-N}^N R_n \exp(-i\beta_n x - i\gamma_n z) \quad (20)$$

$$F_t = \sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x + i\gamma_n z) \quad (21)$$

と表わせる。ここで未知数 T_n, R_n の数は (20)、(21)式の N に依存する。完全な意味で「厳密解」を得るためには $N=\infty$ にしなければならないが、実際には必要となる回折波の係数 (振幅) が有限の N に対して収束するので、 $N \neq \infty$ であってもかまわない。ここではそういう意味で「厳密理論」という表現を用いるものとする。ただし、このとき、格子ピッチ d が波長 λ に近い大きさであれば、 N はすべての進行波モードといくつかの消衰波 (evanescent wave) モードを含むように決めなくてはならない。

境界条件は E 偏光の場合 $z=0$ において

$$F_i + F_r = \begin{cases} F_t & (0 \leq x < a) \\ 0 & (a \leq x < d) \end{cases} \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(F_i + F_r) = \frac{\partial}{\partial z} F_t \quad (0 \leq x < a) \quad (23)$$

$$0 = F_t \quad (a \leq x < d) \quad (24)$$

であり H 偏光の場合 $z=0$ において

$$\frac{\partial}{\partial z}(F_i + F_r) = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} F_t & (0 \leq x < a) \\ 0 & (a \leq x < d) \end{cases} \quad (25)$$

$$F_i + F_r = F_t \quad (0 \leq x < a) \quad (26)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial z} F_t \quad (a \leq x < d) \quad (27)$$

である。(22)~(24)式, または(25)~(27)式の x に適当にサンプリングした値を代入し, 未知数 T_n, R_n に対して $2(2N+1)$ 個の方程式を得るのが Kalhor⁴⁾ によるポイントマッチング法である。しかし, フーリエ基底の直交性に注目すれば, 未知数 R_n はあらかじめ消去可能であり, 方程式の数を半減させることができる。いま, (22)式が1ピッチにわたって成立することから, (22)式に(19)~(21)式を代入し, $z=0$ とおき, 両辺に $\exp(i\beta_1 x)$ を掛けて $0 \leq x \leq d$ で積分すれば, $\delta_{m,n}$ をクロネッカーの記号として,

$$\delta_{1,0} + R_1 = \frac{1}{d} \sum_{n=-N}^N T_n \int_0^a \exp(i(\beta_1 - \beta_n)x) dx \quad (28)$$

同様の操作を(25)式について行なえば

$$\begin{aligned} & i\gamma_0 \delta_{1,0} - i\gamma_1 R_1 \\ &= \frac{1}{d} \sum_{n=-N}^N i\gamma_n T_n \int_0^a \exp(i(\beta_1 - \beta_n)x) dx \quad (29) \end{aligned}$$

となり, 未知数 R_n は(28), (29)式を用いて簡単に消去できる。したがってわれわれの得る連立方程式はE偏光の場合

$$\begin{aligned} & \gamma_0 \exp(-i\beta_0 x) - \sum_{n=-N}^N \gamma_n \exp(-i\beta_n x) \\ & \cdot \left\{ \sum_{l=-N}^N T_l Q_{n,l} - \delta_{n,0} \right\} \\ &= \sum_{n=-N}^N \gamma_n T_n \exp(-i\beta_n x) \quad (0 \leq x < a) \quad (30) \end{aligned}$$

$$\sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x) = 0 \quad (a \leq x < d) \quad (31)$$

ただし

$$Q_{n,l} = \frac{1}{d} \int_0^a \exp(i(\beta_n - \beta_l)x) dx \quad (32)$$

同様にH偏光の場合は

$$\begin{aligned} & \exp(-i\beta_0 x) + \sum_{n=-N}^N \exp(-i\beta_n x) \\ & \cdot \left\{ \gamma_0 \delta_{n,0} - \sum_{l=-N}^N \gamma_l T_l Q_{n,l} \right\} / \gamma_n \\ &= \sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x) \quad (0 \leq x < a) \quad (33) \end{aligned}$$

$$\sum_{n=-N}^N \gamma_n T_n \exp(-i\beta_n x) = 0 \quad (a \leq x < d) \quad (34)$$

となる。これはいずれも, T_n のみを未知数としてっており, x に適当な間隔でサンプリングした値を代入することで, $2N+1$ 個の連立方程式を作れば, 係数 T_n は一意的に求まる。

4. プロキシミティ像の計算

前節で一次元金属回折格子の解析法を求めた。これに

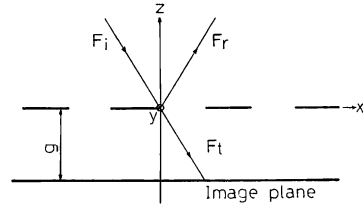


Fig. 2 The coordinate system and the definition of the quantity g used in the proximity image calculation.

よってわれわれは任意の点における透過光強度を求めることができる。いま Fig. 2 に示すような系で, 像面での強度分布を求める。

像面は $z=-g$ で表わされるから, いま E 偏光の場合を考えると \mathbf{E} ベクトルの y 成分 E_y と \mathbf{H} ベクトルの x 成分 H_x のみが像面上の強度に寄与する。これらは

$$E_y = \sum_{n=-N}^N T_n \exp(-i\beta_n x - i\gamma_n g) \quad (35)$$

$$H_x = \frac{1}{k} \sum_{n=-N}^N \gamma_n T_n \exp(-i\beta_n x - i\gamma_n g) \quad (36)$$

と書けるから, ポインティングベクトル $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ の絶対値で定義される強度 I は

$$I(x) = |E_y \cdot H_x| \quad (37)$$

である。H 偏光の場合は H_y と E_x の積となる。

ここで注意すべきことは g の値であり, これをあまり小さくとると消費波の影響が像面に伝わり始める。この場合は像面の存在により境界条件自体が変わってくるので, 得られた結果は信用できない。 g は少なくとも一波長以上の大きさが必要である。

5. スカラー理論による計算

プロキシミティ像は, スカラー理論では一般にフレネル積分の形で求められるが, 回折面に生じているのはあくまでフラウンホーファー回折であり, スカラー理論であっても像振幅分布は平面波の和の形で表わされなくてはならない。強度分布 I はこのとき

$$I(x) = \left| \sum_n T_n \exp(-i\beta_n x - i\gamma_n g) \right|^2 \quad (38)$$

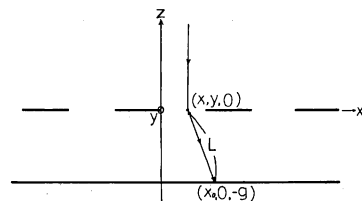


Fig. 3 The coordinate system and the definition of the quantity L .

で与えられる。ここに T_n は(15)または(17)式で与えられる係数であるが、格子ピッチが波長に比べて大きいという保証がない場合、 β_n, γ_n は、(4)式から計算した値を用いなければならない。(もちろんこの場合、厳密解とは異なる。)

一方、フレネル積分による方法は、Fig. 3 において

$$L = \sqrt{(x_0 - x)^2 + y^2 + g^2} \approx g + \{(x_0 - x)^2 + y^2\} / 2g \quad (39)$$

と近似し、開口部全域にわたって回折積分を行なうことにより得られる。すなわち inclination factor を一定として次式で与えられる⁵⁾。

$$I(x) = \left| \iint_{\text{開口部}} \exp(ikL) dx dy \right|^2 \quad (40)$$

(38)式と(40)式は、実際に計算を行なうと微妙に異なる結果を与えるが、信頼性は(38)式のほうが高いと考えるべきである。また、(38)式は周期構造をした物体のフーリエスペクトルを用いるため、積分が有限個の和ですむという利点がある。もっとも(40)式もフレネル積分の展開公式、および漸近展開公式を用いて迅速な計算をすることができるので、この点では甲乙つけがたい。

6. 計算結果

Fig. 4 は比較的ピッチの大きい ($d \approx 18\lambda$) 格子のプロキシミティ像強度分布であり、幾何光学的強度分布は点線で示した。図のA, Bはそれぞれ厳密理論によるE偏光、およびH偏光の場合の結果であり、C, Dはそれぞれ(38)式、(40)式を用いたスカラー理論の結果である。なおA, Bの計算において考慮したモードの数(すなわち連立方程式の個数 $2N+1$) は47である。

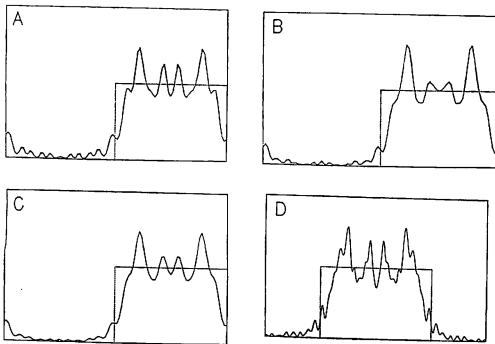


Fig. 4 Computational results where $a=5\mu\text{m}$, $d=10\mu\text{m}$, $\lambda=0.546\mu\text{m}$, $g=3\mu\text{m}$, and each profile is given by (A) the exact theory in the E-polarization case, (B) the exact theory in the H-polarization case, (C) the scalar theory using Eq. (38), (D) the scalar theory using Eq. (40).

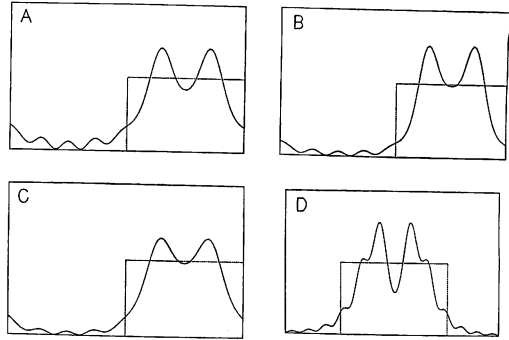


Fig. 5 Computational results where $a=1.5\mu\text{m}$, $d=3\mu\text{m}$, $\lambda=0.546\mu\text{m}$, $g=0.6\mu\text{m}$, and each profile is given by (A) the exact theory in the E-polarization case, (B) the exact theory in the H-polarization case, (C) the scalar theory using Eq. (38), (D) the scalar theory using Eq. (40).

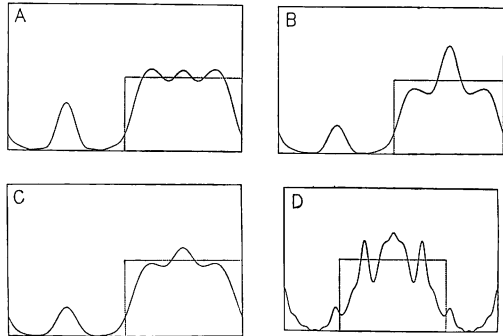


Fig. 6 Computational results where $a=1.5\mu\text{m}$, $d=3\mu\text{m}$, $\lambda=0.546\mu\text{m}$, $g=3\mu\text{m}$, and each profile is given by (A) the exact theory in the E-polarization case, (B) the exact theory in the H-polarization case, (C) the scalar theory using Eq. (38), (D) the scalar theory using Eq. (40).

1節で証明したように、厳密理論で計算した値と、スカラー理論による二つの計算結果はきわめてよく似ている。よって、この程度の格子ピッチではスカラー理論で十分まにあうといえる。

Fig. 5, 6 は、ピッチが比較的小さい ($d=5.5\lambda$) 場合の結果であり、図のA~Dは Fig. 4 と同様の計算法によるものである。ただし、A, Bにおいて考慮したモードの数は21である。

見てわかるとおり、これらの図では4種の計算例がかなりはっきりと異なるプロフィールを示しており、格子ピッチが波長オーダーに近づくと、とくに偏光した光によるプロキシミティ像は厳密理論に従って求めなければならないことがわかる。

もうひとついえることは、(40)式、すなわちフレネル積分表現による計算結果に微細なリップルが多く認めら

れるということである。これはフレネル積分が実在する進行平面波の重ね合わせに対応しないことによるもので、この点でも(38)式による算出法が正当と考えられる。また、(40)式の積分では、積分範囲を変えると計算結果に現われるリップルの形状がかなり変化することも確認された。したがってプロキシミティ領域では、観測点から遠方にある開口部からの寄与(実際は小さいはずである)が、依然として大きな影響を与えており、(39)式の近似の正当性に問題があることを示している。したがって、少なくとも周期構造を仮定できる物体による回折については、観測点がファーフィールドでなくても平面波展開を基本として考えるべきであろう。多くの場合、この回折波の数はたかだか数十個にすぎないのである。

7. おわりに

各計算法によるプロキシミティ像の差異はすでに前節で述べたが、とくにピッチの細かい場合における厳密理論の必要性が明らかとなった。これは2節で述べた内容の逆の場合であると考えれば当然であろう。われわれが本報告の中で用いた厳密理論に基づく計算法は、数学的

にも非常に簡単でわかりやすいので、回折計算手法の基礎として種々の応用が考えられる。また、スカラー理論による計算法についても考慮すべき問題が残されていることがわかった。これについては前節でも述べたとおりである。

最後に、本報告をまとめるにあたり、種々のご教示をいただいた日本光学工業(株)光学部の渋谷真人氏に感謝の意を表したい。

文 献

- 1) B. J. Lin: "Electromagnetic near-field diffraction of a medium slit," *J. Opt. Soc. Am.*, **62** (1972) 976.
- 2) J. G. Skinner: "Some relative merits of contact, near-contact, and projection-printing," *Proc. Kodak Microelectronics Seminar, Interface '73* (Kodak Publication, Eastman Kodak Co., Rochester, N. Y., 1974) p. 53.
- 3) S. C. Bottomley and E. G. Nightingale: "Illumination system for photo-processing by the proximity printing method," *Opt. Laser Technol.*, **7** (1975) 65.
- 4) H. A. Kalhor: "Diffraction of electromagnetic waves by plane metallic gratings," *J. Opt. Soc. Am.*, **68** (1978) 1202.
- 5) M. Born and E. Wolf: *Principles of Optics*, 5th ed. (Pergamon Press, Oxford, 1975) p. 428.