

Rigorese Beugungssimulation: Ein Vergleich zwischen RCWA, FDTD und der Finiten Elemente Methode

R. Berger, J. Kauffmann, N. Kerwien, W. Osten, H.J. Tiziani

Institut für Technische Optik, Universität Stuttgart

<mailto:berger@ito.uni-stuttgart.de>

Zur Berechnung der Wechselwirkung von Licht mit Nano- und Mikrostrukturen stehen eine Reihe an Berechnungsverfahren zur Verfügung. An unserem Institut werden zur Zeit drei verschiedene Methoden eingesetzt. Diese unterscheiden sich vor allem hinsichtlich Modellierungsweise und Einsatzgebiet. Hier wird ein Vergleich der einzelnen Methoden angestellt.

1 Einführung

Interessiert man sich für die Wechselwirkung des Lichts mit Strukturen, die im Bereich des 10-fachen der Wellenlänge und kleiner sind, so werden anstelle einer skalaren Betrachtung rigorose, elektromagnetische Berechnungen notwendig. Die Simulationen können dazu eingesetzt werden, um rigorose Effekte in der Metrologie zu berücksichtigen. Des weiteren können auch bei dem Design von optischen Systemen entsprechende Berechnungen verwendet werden (z.B. bei dem Einsatz diffraktiver optischer Elemente).

Im folgenden werden drei verschiedene Methoden zur Berechnung des Feldes in der Nähe von Strukturen beschrieben und anschließend verglichen.

2 FDTD

Die Finite Difference Time Domain Methode ist seit 1966 bekannt und wird für elektromagnetische Simulationen eingesetzt [1]. Kennzeichen dieser Methode ist, dass der Modellierungsraum gleichförmig vernetzt wird (meistens rechteckige Vernetzung). Die Maxwell'schen Gleichungen werden in Raum und Zeit diskretisiert. Das Verfahren erlaubt es somit auch dynamische Untersuchungen durchzuführen. Als Randbedingung wurde bei dem von uns verwendeten Programm die sogenannten *perfectly matched layers* implementiert.

3 RCWA

RCWA bedeutet Rigorous Coupled Wave Analysis. Das Programm wird zur Berechnung der Gitterbeugung eingesetzt [2]. Bei der RCWA wird die Strukturgeometrie in einzelne Schichten unterteilt. Anschließend wird die Beugung einfallender ebener Wellen an der Struktur berechnet. Mit der RCWA können auch Fernfelder berechnet werden.

4 FEM

Mit Hilfe der Finiten Elemente Methode können allgemein physikalische Prozesse, welche mit partiellen Differentialgleichungen beschreibbar sind, modelliert werden. Das Verfahren ist aus der Strukturmechanik bekannt, kann jedoch auch für elektromagnetische Simulationen eingesetzt werden. Als Simulationstool wird hierzu das kommerziell erhältliche Programm Femlab (Version 3a) verwendet. Hierbei handelt es sich um ein Programmpaket der schwedischen Firma Comsol [3]. Mit dem Grundprogramm von Femlab können Multiphysics-Aufgaben, d.h. gekoppelte, physikalische Probleme, gelöst werden. Das Programm wurde von uns ausgewählt, da es ein Interface zu Matlab enthält, welches eine gute Weiterverarbeitung der Daten erlaubt. Es sind weiterhin eine Reihe von Zusatzmodulen erhältlich. Das Modul Electromagnetics erlaubt eine einfache und schnelle Modellierung. Der Simulationsprozess gliedert sich dabei im wesentlichen in vier Anteile. Zuerst wird ein Modell des zu behandelten Problems in dem Programm erstellt. In Femlab existiert dazu ein CAD-Modus für die Generierung von 1D-, 2D- und 3D-Modellen. Weiterhin können auch CAD-Dateien wie z.B. DXF- und IGES-Formate importiert werden. Als zweiten Schritt wird das Modell vernetzt. D.h. der modellierte Raum wird mit Knoten versehen, was eine Diskretisierung des Raumes darstellt. In Femlab wird zur Diskretisierung ausschließlich ein Dreiecksraster verwendet. Entsprechend den Knoten und den gewählten Randbedingungen wird dann intern ein Satz von Differentialgleichungen aufgestellt. In einem weiteren Schritt werden diese gelöst und dann anschließend grafisch dargestellt.

Die Anzahl der Knoten ist bei Femlab lediglich durch den Rechenpeicher begrenzt. Neben beliebigen isotropen Materialien können mit Femlab auch anisotrope Medien simuliert werden.

5 Vergleich

Als erstes wurde ein Vergleich zwischen der RCWA- und der FDTD-Methode durchgeführt. Als modellierte Struktur wurde hierzu eine senkrechte Faser verwendet, welche durch eine ebene Welle beleuchtet wird. Die beiden Verfahren zeigen eine recht gute Übereinstimmung (Abb. 1).

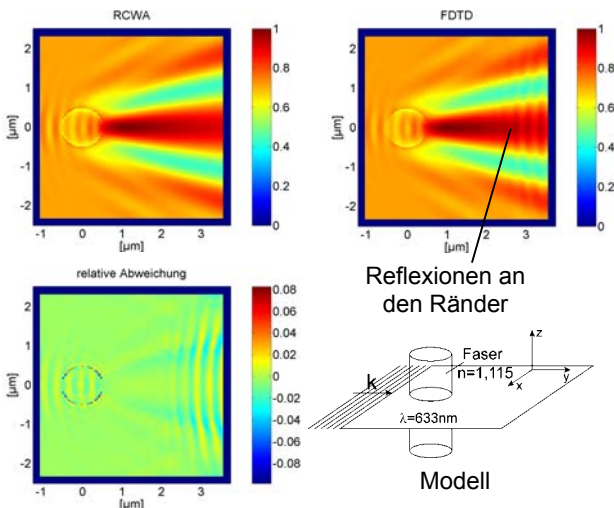


Abb. 1 Vergleich von RCWA und FDTD, Faser TM-Mode $abs(E_x)$

Charakteristisch für die FDTD-Methode ist, dass an den Rändern des modellierten Raumes Reflexionen entstehen. Dies resultiert aus der Tatsache, dass es sich um keine ideal absorbierenden Ränder handelt. Die RCWA-Methode liefert hierbei bessere Ergebnisse.

Das FDTD-Verfahren eignet sich besonders gut, wenn es um dynamische Untersuchungen geht.

Als nächstes wurde die RCWA und die Finite Elemente Methode verglichen. Simuliert wurde hier ein Silizium-Gitter mit einer Periode von $1,2\mu\text{m}$ mit einer Grabenbreite von 400nm und einer Höhe von 160nm (Abb. 2).

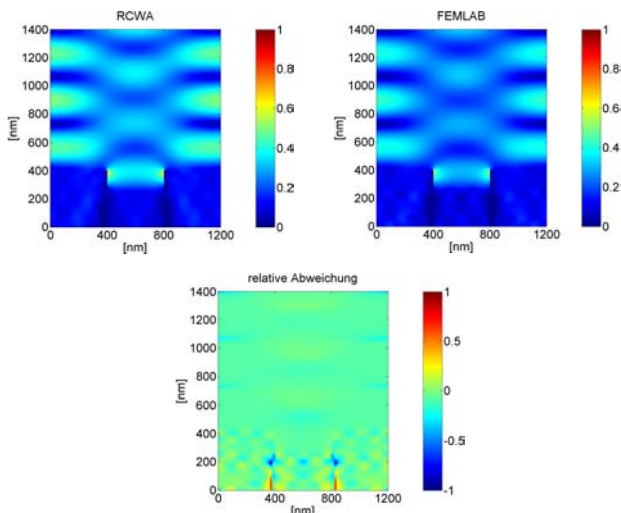


Abb. 2 Vergleich von RCWA und FEM, Silizium-Gitter TM-Mode $abs(E_x)$

Die RCWA-Simulation weist außerhalb der Struktur eine größere Modulation auf. In der Struktur tritt bei der Finiten Elemente-Methode eine höhere Modulation auf. Ansonsten sind die Ergebnisse sehr gut vergleichbar. Für die Simulation von periodischen Gittern können beide Verfahren angewandt werden. Bei der Finiten-Elemente-Methode wird die Periodizität im TM-Mode durch die Modellierung ideal leitender Ränder (*perfect electric conductor*) erzielt.

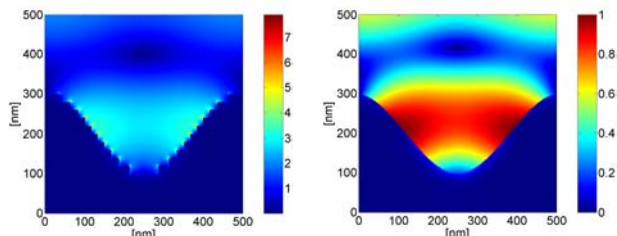


Abb. 3 Vergleich von RCWA und FEM, Kosinus-Gitter TM-Mode $norm(E)$

Abbildung 3 zeigt die Simulation eines Kosinus-Gitters. Im linken Teil wurde das Gitter durch 10 Stufen approximiert. Zu erkennen ist hierbei, dass es an den Kanten zu einer Feldüberhöhung kommt, die typisch für den TM-Mode ist (Feld an Spitzen). Auch bei einer Approximation mit mehr Stufen tritt der selbe Effekt auf. Dies wurde bereits in [4] untersucht. Problem ist hierbei, dass der Rand nicht den richtigen Winkel zum Feld hin aufweist. Dieses Problem tritt bei der FEM-Methode nicht auf. Durch die adaptive Dreiecksvernetzung kann der Verlauf des Gitters sehr gut nachempfunden werden. Die Methode der Finiten Elemente ist hierbei gegenüber des RCWA-Verfahrens zu bevorzugen. Die FEM-Methode eignet sich deshalb besonders gut für die Simulation von Gittern mit einem kontinuierlichen Verlauf.

Die Arbeit zeigt die Verwendung der verschiedenen Simulationstools auf. Es konnten einzelne Charakteristika der Programme festgestellt werden. Am Institut werden noch weitere Untersuchungen auf diesem Gebiet durchgeführt.

Die Autoren danken der Landesstiftung Baden-Württemberg für die finanzielle Unterstützung.

Literatur

- [1] A. Taflove, S. C. Hagness: "Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method", Artech House, Sec. Edition
- [2] M. G. Moharam, D. A. Pommet, E. B. Grann: "Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach", *J. Opt. Soc. Am. A*, Vol. 12 No. 5 (1995)
- [3] www.femlab.de
- [4] E. Popov, M. Nevière, B. Gralak, G. Tayeb: "Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings", *J. Opt. Soc. Am. A*, Vol. 19 No. 1 (2002)