

Beugen, Filtern, Komprimieren

Elektromagnetische Simulationen erschließen das Potenzial von Beugungsgittern

Bernd H. Kleemann und Johannes Ruoff

Optische Gitter sind seit über zweihundert Jahren die in der Physik am häufigsten verwendeten kleinen Strukturen, die das Licht beeinflussen. Die vielfältigen Anwendungen der Spektroskopie in Forschung und Technik sind ohne optische Beugungsgitter gar nicht denkbar. Inzwischen werden sie für eine Vielzahl anderer Aufgaben eingesetzt, z. B. als Polarisatoren, Monochromatoren, Strahlteiler oder als Ein- und Auskoppelgitter für Wellenleiter. Viele dieser Anwendungen sind erst dadurch möglich geworden, dass sich die Maxwell-Gleichungen durch „rigorose Methoden“ numerisch lösen lassen.

Die erste Entdeckung der Beugung von Licht an einem optischen Gitter ist einem Zufall zu verdanken. Der amerikanische Schriftsteller und Staatsmann Francis Hopkinson entdeckte 1785 beim Anblick einer Straßenlampe durch ein feines Seidentaschentuch Mehrfachbilder. Diese blieben unbeweglich, selbst wenn er das gespannte Taschentuch nach links oder rechts bewegte. Davon höchst erstaunt wandte Hopkinson sich an den Astronomen David Rittenhouse, der das Phänomen sogleich systematisch studierte. Knapp 20 Jahre später verwendete Thomas Young ein Transmissionsgitter zur Untersuchung des Sonnenlichts. Ihm gelang es erstmals, die korrekte Formel für die Ausbreitungsrichtungen der Beugungsordnungen anzugeben. Der erste Wissenschaftler jedoch, der die physikalischen Eigenschaften von Gittern ernsthaft untersuchte und diese auch kommerziell einsetzte, war Joseph von Fraunhofer. Im Jahr 1820 benutzte er noch Drähte, die er dicht nebeneinander spannte, zwei Jahre später baute er die erste Maschine, die mit einem Diamanten feine parallele Gitterlinien in ein Metallsubstrat ritzte. Es ist nicht zu vermessen, Fraunhofer als Vater der Gittertechnologie zu bezeichnen.

Mit der Verfügbarkeit von geeigneten Beugungsgittern erlebte das Feld der optischen Spektroskopie einen raschen Aufschwung und trug nicht nur zur Entdeckung von zahlreichen neuen chemischen Elementen bei, sondern insbesondere zum grundlegenden Verständnis ato-

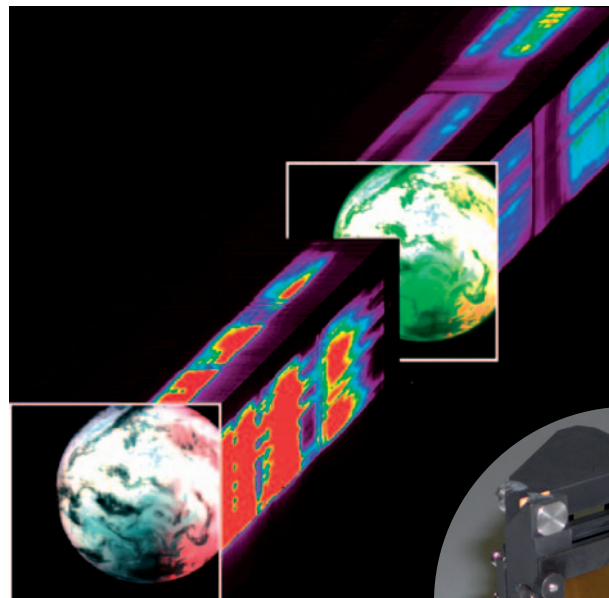


Abb. 1: Das Bild der Erde, aufgebaut aus den Daten der hochauflösenden VIR-TIS-Spektrometer der Kometensonde Rosetta. Zentrales Element der Spektrometer sind Beugungsgitter, die bei der Carl Zeiss AG mit Nanometerpräzision gefertigt wurden. (Quelle: ESA).

marer Vorgänge und zur Entwicklung der Quantenmechanik. Auch heutzutage ist die Spektroskopie eines der wichtigsten Anwendungsgebiete von Beugungsgittern.¹⁾ Diese dienen zur Strahlungsanalyse für das sichtbare Licht oder den UV-Bereich, häufig aber auch für den Infrarotbereich. Damit lassen sich z. B. Inhaltsstoffe quantitativ analysieren, sei es, um die Vermischung der Wirkstoffe in Tabletten zu überwachen oder um Feuchte und Proteingehalt von Obst und Gemüse direkt bei der Ernte zu erfassen.

KOMPAKT

- ▶ Die Gittergleichung berücksichtigt außer der Gitterperiode keine weiteren Eigenschaften von Beugungsgittern wie Profilform oder Brechzahlverteilung.
- ▶ Diese sind jedoch zentral, um die für viele moderne Anwendungen von Beugungsgittern essenziellen sog. Beugungseffizienzen zu berechnen.
- ▶ In vielen Fällen ist es dafür nötig, die je nach Fragestellung äußerst komplex ausfallenden Maxwell-Gleichungen mit Hilfe „rigoroser Methoden“ ohne weitere vereinfachende Annahmen zu lösen.

Spektrometergitter kommen auch bei Satellitenmissionen der Europäischen Weltraumagentur ESA zum Einsatz, wo mit ihrer Hilfe z. B. die Ozonveränderungen in der Strato- und Troposphäre [1] registriert oder an Bord der Rosetta-Sonde [2] (Abb. 1) die Zusammensetzung von Kern und Koma des Kometen Churyumov-Gerasimenko analysiert werden. Die gewonnenen Informationen helfen dabei, den Ursprung unseres Sonnensystems besser zu verstehen.

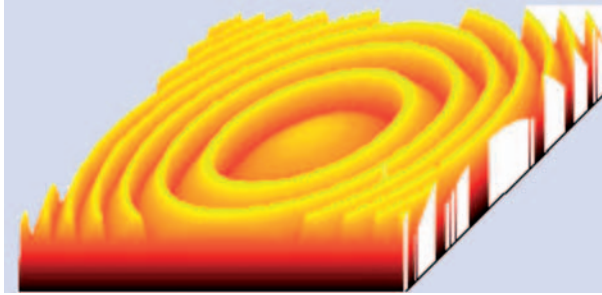
¹⁾ Weitere Informationen finden sich auf www.zeiss.de, Produktbereich „Spektralsensorik“, dort finden sich u. a. Informationen über weitere Anwendungsbereiche von Beugungsgittern sowie ein nützliches Glossar.

Dr.-Ing. Bernd H. Kleemann, Dr. Johannes Ruoff, Carl Zeiss AG, Zentrale Forschung und Technologie, 73446 Oberkochen

Grundlagen

Klassische Beugungsgitter sind meist streng periodisch angeordnet. Sie können aber durchaus auch gekrümmte Linien oder eine ortsabhängige Gitterperiode besitzen. Beispiele hierfür sind diffraktive Fresnel-Linse (auch Kinoform genannt) mit sog. Blazeprofil (Abb. 2). Auch in diesen Fällen lassen sich die Strukturen in guter Näherung durch die Theorie der optischen Gitter beschreiben, sofern die Abweichungen von einem idealen Gitter klein im Vergleich

Abb. 2: Holographisch von der Carl Zeiss AG in Jena hergestellte diffraktive Fresnel-Linse (auch Kinoform genannt) mit sog. Blazeprofil. Das Blazeprofil ist gegenüber der Ringbreite überhöht dargestellt.



zur Wellenlänge sind. Typische Gitterperioden für den optisch sichtbaren Bereich liegen zwischen hundert bis einigen tausend Linien pro mm. Bezieht man das auf die Wellenlänge, so entspricht das einem Bereich von etwa 1/10 bis zu über 100 Wellenlängen.

Die charakteristische Eigenschaft von Beugungsgittern ist das Auftreten von verschiedenen Beugungsordnungen. Ein einfallender Lichtstrahl der Wellenlänge λ wird in eine bestimmte Anzahl von Beugungsordnungen aufgefächert, deren Ausbreitungsrichtungen sich aus der eindimensionalen Gittergleichung in Transmission

$$n_2 \sin(\theta_{\text{m}^{\text{gebeugt}}}) = n_1 \sin(\theta_{\text{Einfall}}) + m \lambda / g$$

ergeben. Hierbei sind g die Gitterperiode, θ_{Einfall} der Winkel des einfallenden Strahls zur Gitternormalen, $\theta_{\text{m}^{\text{gebeugt}}}$ der Ausfallwinkel der m -ten Beugungsordnung und n_1 sowie n_2 die Brechzahlen der Luft und des Gittermaterials. Aus den Eigenschaften der trigonometrischen Funktionen folgt, dass es nur eine endliche Anzahl von Beugungsordnungen m gibt, für die die Gittergleichung mit reellen Winkeln θ_{gebeugt} erfüllt sein kann. Zusätzlich zu diesen propagierenden Beugungs-

ordnungen gibt es jedoch noch eine unendliche Anzahl von „evaneszenten“ Ordnungen, bei denen die senkrecht zum Gitter liegende Komponente des Wellenvektors imaginär ist und die Welle somit in diese Richtung exponentiell gedämpft wird. Diese Ordnungen haben daher keine weitreichende Wirkung, spielen aber für die Nahfeldeigenschaften des Gitters eine Rolle.

Bemerkenswert ist, dass die Gittergleichung außer der Gitterperiode selbst keine weitere Gittereigenschaften wie Profilform oder Brechzahlverteilung innerhalb einer Periode berücksichtigt. Diese bestimmen aber gerade die „Beugungseffizienzen“, also den Energieanteil, der in eine bestimmte Beugungsordnung gelenkt wird. Die eigentlich schwierige Aufgabe, diese Beugungseffizienzen zu bestimmen, lässt sich exakt nur durch vollständiges Lösen der Maxwell-Gleichungen bewältigen. Obwohl die Gittergleichung, die die Grundlage der gesamten Spektroskopie darstellt, schon seit Anfang des 19. Jahrhunderts bekannt war, wurde erst in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts ernsthaft damit begonnen, die Beugungseffizienzen exakt zu bestimmen. Erst damit gelang es, Polarisierungseffekte, die schon Fraunhofer beobachtet hatte, zu berechnen. Ebenso ließen sich die ebenfalls seit langem bekannten „Gitteranomalien“, d. h. sehr starke Änderungen der Beugungseffizienz innerhalb eines kleinen Winkel- oder Wellenlängenbereichs, endlich aufklären. Möglich wurde dies erst durch die Verfügbarkeit von genügend großen Rechenkapazitäten, da sich die Maxwell-Gleichungen für beliebige Profilformen nur noch numerisch lösen lassen.

Für bestimmte Grenzfälle, z. B. für sehr große oder auch für sehr kleine Gitterperioden, existieren Näherungsmethoden. Im sog. Resonanzbereich, in dem die Gitterperiode etwa von gleicher Größenordnung wie die Wellenlänge ist, versagen diese Näherungsmethoden jedoch meist, und man kommt nicht umhin, die Maxwell-Gleichungen tatsächlich zu lösen. Methoden, welche die Maxwell-Gleichungen numerisch ohne weitere vereinfachende Annahmen lösen, heißen „rigorose Methoden“ (siehe Infokasten).²⁾

Im Folgenden möchten wir einige Beispiele vorstellen, bei denen die Lösung der Maxwell-Gleichungen unabdingbar zum Verständnis bzw. zum Ergebnis ist.

Rigorose Methoden zur Lösung der Maxwell-Gleichungen

Die ersten rigorosen numerischen Methoden zur Lösung der zeitunabhängigen Maxwell-Gleichungen wurden in den 1960er- und 1970er-Jahren entwickelt. Zu den Wichtigsten zählen:

- Die *Differentialgleichungsmethode* (DGM), die von einer Fourier-Reihenentwicklung der Permittivitätsfunktion und der elektromagnetischen Felder innerhalb des strukturierten Bereichs ausgeht und auf ein gekoppeltes System gewöhnlicher Differentialgleichungen für die Fourier-Koeffizienten führt.

- Die *Integralgleichungsmethode*, welche die Maxwell-Gleichungen mithilfe der Greenschen Theoreme

in Integralgleichungen über den Profilrand umformuliert.

- Mitte der 1980er-Jahre wurde eine der heute am meisten verbreiteten, weil am leichtesten zu implementierende, Methode entwickelt, die *Rigorous Coupled Wave Method*, die auch als *Fourier Modal Method* bekannt ist, und die zunächst nur für rechteckige Gitter konzipiert war. Für solche Profilformen lassen sich die Maxwell-Gleichungen in ein Eigenwertproblem überführen. Beliebige Profile können durch ein Stufenprofil angenähert werden, wobei innerhalb jeder Stufe dann ein Eigenwertproblem gelöst werden muss.

- Einen anderen Zugang

bietet die *Finite Difference Time Domain-Methode* (FDTD), welche die zeitabhängigen Maxwell-Gleichungen löst. Diese Methode ist universell einsetzbar und nicht auf periodische Strukturen beschränkt. Gleichzeitig liefert sie jedoch keine Beugungseffizienzen, sondern nur Feldverteilungen in dem gewählten Ausschnitt. Daher müssen zusätzliche Algorithmen verwendet werden, die aus der Feldverteilung außerhalb des Gitters die Beugungseffizienzen berechnen. Ein wesentlicher Vorteil dieser Methode ist, dass man recht einfach zeitabhängige Phänomene, wie z. B. die Propagation eines Femto-

sekunden-Laserpulses durch ein Gitter, simulieren kann. Der Nachteil ist, dass man für das klassische Beugungsproblem einer ebenen Welle an einem Gitter einen verhältnismäßig hohen Rechenaufwand braucht, da man die Maxwell-Gleichungen so lange zeitlich integrieren muss, bis sich ein stationärer Zustand eingestellt hat.

- Modernere Verfahren mit besserer Konvergenz sind *Finite-Elemente-Methoden*, die ebenfalls sehr flexibel und dazu noch sehr genau sind.

Für 3D-Anwendungen mit einem großen Verhältnis von Gitterweite zur Wellenlänge sind alle bisherigen Methoden jedoch noch viel zu langsam.

2) Die Bezeichnung „rigoros“ sagt jedoch noch nichts über die Güte des numerischen Verfahrens aus.

Gitter als Filter

Alle vier Jahre verdoppelt sich derzeit die Verarbeitungsgeschwindigkeit von Computerprozessoren, alle fünf Jahre verzehnfacht sich die Kapazität der Speicherchips [3]. Dies geschieht im Wesentlichen durch eine stetige Miniaturisierung der Chipstrukturen. Die erreichbare minimale Strukturbreite hängt, neben einigen anderen Größen, im Wesentlichen von der verwendeten Lichtwellenlänge bei der Lithographie ab. Um den Leistungszuwachs auch für die Zukunft weiter aufrechtzuerhalten, geht der Trend zu immer kürzeren Wellenlängen. Derzeit arbeitet man mit 248 und 193 nm, die nächste kürzere Wellenlänge wird voraussichtlich 13,5 nm sein, also im Bereich extrem kurzer ultravioletter Strahlung (EUV) liegen. Dafür hat die Carl Zeiss SMT AG³⁾ letztes Jahr die Projektionsoptik an den niederländischen Partner ASML ausgeliefert. Dort wird der Einsatz dieser Technologie in der Massenproduktion von Mikrochips vorbereitet. Diese ermöglicht den Chipherstellern, Strukturen mit nur 32 nm Breite und darunter herzustellen.

Doch bislang existiert noch keine Strahlungsquelle, die nur die Wellenlänge 13,5 nm abstrahlt. Derzeitige Quellen strahlen ein breites Spektrum ab, das bis ins Infrarote reichen kann. Um daraus ein schmales Band, etwa von 5 nm bis 30 nm, mit 13,5 nm im Zentrum, herauszuschneiden, benötigt man einen Filter, der sich zwischen der EUV-Strahlungsquelle und der Abbildungseinrichtung zur Verkleinerung der Maske auf den Silizium-Wafer befindet.

Eine realisierbare Lösung für einen solchen *Spectral Purity Filter* (SPF) besteht aus einem hocheffizienten Gitter in Reflexion, das in streifendem Einfall verwendet wird. Nur dann ist wegen der kurzen Wellenlänge noch eine ausreichende Reflexion am Metallgitter gesichert. Dafür verwendet man so genannte Blazeprofile. Diese haben eine dreieckige Form mit einer linear ansteigenden und einer senkrecht abfallenden Flanke, die wie kleine Mikrospiegel wirken und daher im Idealfall das Licht in nur eine einzige Ordnung abbeugen. Es ist die am häufigsten verwendete und gewünschte Profilform bei Gittern.

„Geblazte“ Gitter lassen sich auf Substraten mit guter thermischer Leitfähigkeit herstellen und somit von der Rückseite aktiv kühlen, um die strahlungsinduzierte thermische Leistung der Quelle abzuleiten. Bei Einfallswinkeln zwischen 70° und 85° haben Metallbeschichtungen aus Ruthenium bei 13,5 nm Reflektivitäten zwischen 68 % und 94 %. Zur experimentellen Verifikation des Funktionsprinzips wurde ein Ausschnitt eines solchen Gitters hergestellt [4], wie es in Zukunft optional in EUV-Projektionsbelichtungsanlagen eingesetzt werden könnte. Der Gitterausschnitt wurde holographisch (durch Interferenz einer sphärischen und einer asphärischen Welle eines Lasers) hergestellt, um die geeignete variable Gitterweite sowie die vorgesehenen Blazeprofile zu erzeugen. Abb. 3 zeigt einen fertigen Gitterausschnitt.

Das Gitter beugt das Licht vom EUV-Kollektor kommend in die -1. Beugungsordnung. Dadurch wird in diese Ordnung ein Spektralbereich gebeugt, welcher der gewünschten Filterwirkung entspricht. Danach gelangt das gefilterte Licht in die Abbildungseinrichtung. Licht aus anderen Ordnungen darf nicht dorthin kommen, da sonst andere Spektralbereiche ebenfalls dorthin gelangen würden, was ja gerade verhindert werden soll.

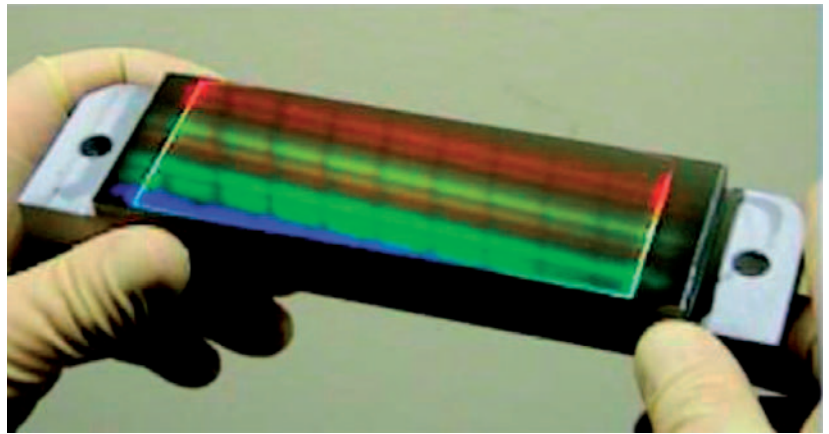


Abb. 3: Fertiger Gitterausschnitt auf metallischem Substrat mit Ruthenium-Beschichtung verwendbar für die EUV-Lithographie.

Die Simulation der Gittereigenschaften ist nicht nur entscheidend für den Entwurf des Gitterfilters, sondern insbesondere auch, um deren Leistungsfähigkeit zu testen. Denn da es derzeit weltweit nur wenige Strahlquellen für 13,5 nm Wellenlänge gibt, ließ sich die tatsächliche Effizienz der hergestellten Gitter nicht während der Herstellung überprüfen. Für eine theoretische Überprüfung wurde das Blazeprofil mittels eines Atomkraftmikroskops (AFM) vermessen und für dieses Profil mit elektromagnetischen Simulationen unter Berücksichtigung aller anderen Gitterparameter wie Einfallswinkel und den Materialdaten für Ruthenium die theoretische Effizienz bei 13,5 nm berechnet. Dazu wurde eine Implementierung der Integralgleichungsmethode verwendet. Wie gut diese Werte mit den späteren Messungen durch die Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) am Berliner Elektronensynchrotron BESSY II übereinstimmen, zeigt Abb. 4.

Ähnliche Gitter wie die für die Filterung der EUV-Strahlung sind z. B. solche für Elektronen-Synchrotrone (Elektronen-Kreisbeschleuniger mit Speicherring) wie BESSY I und II in Berlin, ESRF in Grenoble und andere.⁴⁾ Mit ihnen wird aus der breitbandigen Synchrotronstrahlung die gewünschte kurze Wellenlänge herausgefiltert [5]. Deshalb heißen die Geräte, die das leisten, Monochromatoren.

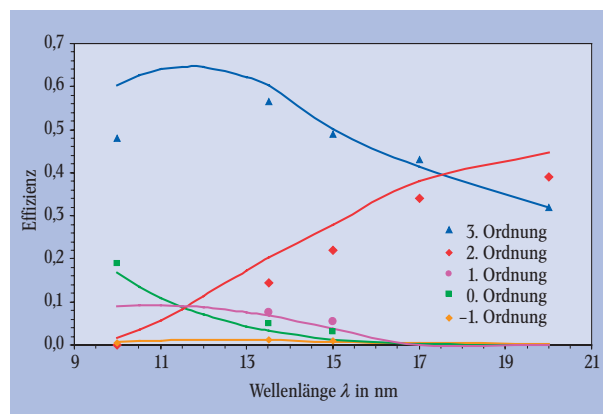


Abb. 4: Die am Berliner Synchrotron BESSY II bei 13,5 nm gemessenen Effizienzen für ein Gittersegment (Kästchen) stimmen bis auf den Wert bei 10 nm sehr gut mit den Rechnungen zu dem gemessenen Profil (durchgehende Linien) überein.

3) www.zeiss.de/semiconductor

4) siehe auch www.light-sources.org

Komprimierte Laserpulse

Ultrakurze Laserpulse (Femtosekundenpulse) haben in den letzten Jahren enorme Möglichkeiten eröffnet. So ist es damit z. B. möglich,

- ▶ ultraschnelle Prozesse in Halbleitern, Supraleitern, Nanostrukturen, Molekülen in Flüssigkeiten etc. mittels Ultrakurzzeitspektroskopie zu untersuchen,

- ▶ den Ablauf von chemischen und vor allem biologischen Reaktionen in Echtzeit zu verfolgen, zu verstehen und z. B. für neue Verbindungen, Reaktionen und Medikamente auszunutzen,

- ▶ die Dynamik an Oberflächen und deren Strukturierung zu studieren und z. B. kleinste Löcher in dünne Metallfolien zu „bohren“.

Mit Hilfe der Pulskompression lassen sich ultrakurze Lichtimpulse jedoch noch weiter verkürzen. Das Prinzip besteht darin, in einer wellenlängenabhängigen (dispersiven) Verzögerungsleitung die Vorderflanke des Pulses gegenüber der Rückflanke so stark zu verzögern, dass diese die Vorderflanke gewissermaßen einholen kann. Dafür eignet sich nach Treacy [6] ein Gitterpaar (Tandemgitter) (Abb. 5). Damit ist es z. B. möglich, Impulse von 30 fs auf 4 fs und weniger zu verkürzen. Inzwischen ließen sich sogar Impulse von unter einer fs erzeugen (Attosekundenpulse).

Die beiden zur Pulskompression eingesetzten Gitter müssen möglichst identisch sein, um keine unerwünschten Nebeneffekte auf den Puls zu übertragen, d. h. idealerweise sollten die Gitter weder Intensitäten noch Phasen des Pulses ändern. Um dies zu gewährleisten, sollten so genannte Anomaliestellen beim Beugungsverhalten vermieden werden, bei denen es in Abhängigkeit von Einfallswinkel und Wellenlänge zu starken Phasenänderungen kommt. Aus Erkenntnisgründen werden ihre Wirkungen aber im Folgenden studiert. Dazu ist es notwendig, den für die Kompression vorgesehenen Spektral- und Winkelbereich mittels Lösen der Maxwell-Gleichungen für eine ganze Reihe ebener Wellen „abzuscannen“. Abbildung 6 zeigt die berechneten spektralen Phasenänderungen mit großen Gradienten, die bei der Beugung am Gitter auftreten können. Gleichzeitig treten auch starke Effizienzvaria-

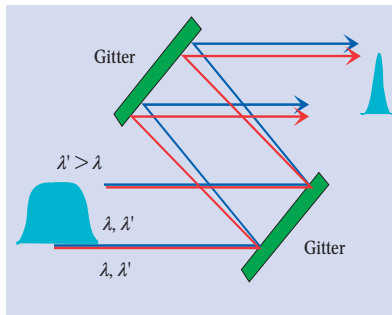


Abb. 5: Mit Hilfe eines Gitterpaars lassen sich Strahlenpulse komprimieren. Längere Wellenlängen von der Rückflanke des Pulses werden stärker gebeugt als die kürzeren der Vorderflanke. Dadurch rücken die den verschiedenen Wellenlängen zugeordneten Pulsanteile näher zusammen.

tionen auf, wie sie für Anomaliestellen, die meist durch Resonanzeffekte entstehen, charakteristisch sind.

Das Beugungsverhalten in einer Anomaliestelle (aber nicht nur dort) lässt sich nur durch exaktes Lösen der Maxwell-Gleichungen erfassen. Bei einer Zerlegung des Pulses in seine räumlichen und zeitlichen Fourier-Anteile ist die Berechnung der unterschiedlichen Amplituden- und Phaseneffekte der einzelnen ebenen Wellen des Spektrums notwendig.

Dass sich bei einer ungünstigen Wahl der Beugungsbedingungen tatsächlich die Gestalt des Pulses ändert und es sogar zu einer zeitlichen Verschiebung von Pulsen kommen

kann, ist in [7] beschrieben, wo erstmalig deren Größe mittels der Integralgleichungsmethode (s. Infokasten) berechnet wurde. Dabei war die vieltausendfache Lösung der zeitunabhängigen Maxwell-Gleichungen für die einzelnen Fourier-Komponenten nötig.

Abbildung 7 zeigt eine derartige berechnete raumzeitliche Pulsdeformation durch spektrale Phasenänderungen bei Beugung in der Nähe einer Anomaliestelle eines Reflexionsgitters. Besonders auffällig ist, dass der am Gitter gebeugte Puls (rechtes Bild) plötzlich ein Nebenmaximum besitzt – einen Satelliten –, wodurch sich sein Hauptmaximum gegenüber dem ungestörten Puls verschoben hat. Das kann aber als eine zeitliche Verschiebung des am Gitter gebeugten Pulses gegenüber einem ungestörten Puls interpretiert werden. In dem in [7] betrachteten Beispiel betrug die maximal berechnete zeitliche Verschiebung immerhin 29 fs eines Pulses von 1 ps Dauer, also etwa 1/30 der Pulsdauer.

Für ein rein räumliches Spektrum (stationärer Fall) eines Strahls steht damit in engem Zusammenhang der so genannte Goos-Hänchen-Effekt. Er besteht in der örtlichen Verschiebung eines Laserstrahls durch ebensolche spektralen Phasenänderungen. Die in [7] berechnete Verschiebung bei der Beugung an einem Gitter betrug bis zu 40 μm und war damit um ein Vielfaches größer als der bisher bekannte Effekt von etwa 1 μm . In einem Experiment im Zusammenhang mit Ultrakurzzeitpulsen wurden eine derartige Verschiebung eines Laserstrahls bei der Beugung an einem Gitter auch gemessen [8] und

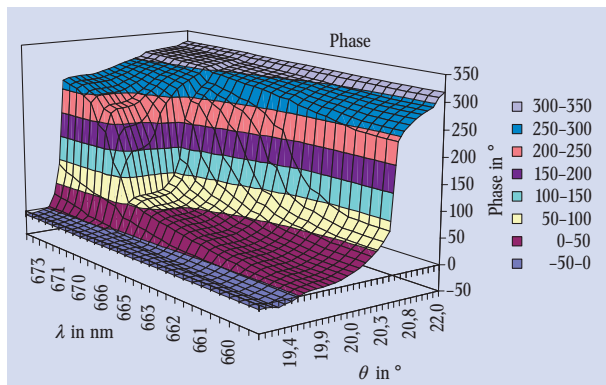


Abb. 6: Berechnete elektromagnetische Phasenänderungen in einer Gitteranomalie: Abhängig von Einfallswinkel θ und Wellenlänge λ kann es in kleinen Intervallen zu steilen Phasenänderungen von fast bis zu 2π kommen.

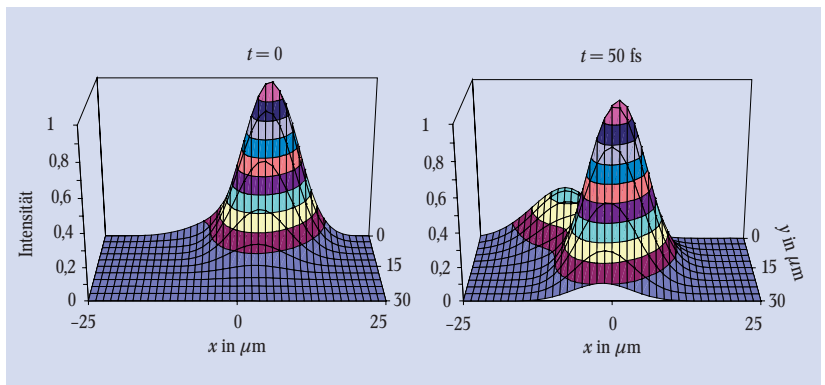


Abb. 7: Ein gaußförmiger Puls (links), der an einem Gitter in einer Anomaliestelle gebeugt wird, verändert deutlich seine

Form – erhält noch ein Nebenmaximum (rechts, das Maximum ist wieder auf 1 normiert).

somit die theoretischen Voraussagen bestätigt. Später wurden für Anomalien bei dielektrischen Gittern noch größere Verschiebungen berechnet [9, 10]. In vielen weiteren Publikationen zeigte sich, dass Effekte vom genannten Goos-Hänchen-Typ tatsächlich einen bedeutenden Einfluss bei Ort-Zeit-Manipulationstechniken in der ultraschnellen Optik haben [11]. So stehen sie im Zusammenhang mit der gemessenen Zeitverzögerung bei Totalreflexion, die sich schon Isaac Newton vorgestellt hat, und gewähren so neue Einsichten in den Übergang von der Totalreflexion zur Brechung.

Diese Beispiele zeigen, dass es sowohl für Versuche mit Kurzzeitpulsen als auch für andere Experimente wie Raman-Spektroskopie und vieles andere sinnvoll und notwendig ist, die elektromagnetischen Effekte der verwendeten Gitter zu studieren, um deren Wirkungen bei den Experimenten richtig berücksichtigen zu können. Darüber hinaus ist es aber auch möglich, die vorgestellten Effekte gezielt auszunutzen, wie z. B. bei der Pulsformung von Kurzzeitpulsen durch gezielte Phasenänderungen.

Effektive Brechung ohne Beugung

Beugungsgitter mit Gitterperioden, die kleiner als die Wellenlänge sind (Subwellenlängengitter), besitzen eine Vielzahl von Anwendungsgebieten. Aus der Gittergleichung folgt, dass bei ausreichend kleiner Gitterperiode außer der nullten Ordnung keine weitere propagierende Ordnung mehr existiert, d. h. das Gitter besitzt in diesem Fall keine Beugungswirkung im eigentlichen Sinne. Dennoch kann ein Subwellenlängengitter oder *Zero Order Grating* (ZOG) die Eigenschaften der einfallenden Welle signifikant verändern; vor allem indem es polarisierend und phasenverschiebend wirkt. Dabei lässt sich die Wirkungsweise von ZOGs anschaulich verstehen: Da das Licht die Gitterstruktur nicht mehr auflösen kann und daher über die Brechungsindexverteilung mittelt, „sieht“ es gewissermaßen ein homogenes Medium mit einem effektiven Brechungsindex n_{eff} . Diese Mittelung hängt jedoch von Polarisierung und Richtung ab, sodass das ZOG ein anisotropes Medium darstellt und daher doppelbrechend wirkt.⁵⁾ Für ein eindimensionales binäres Gitter⁶⁾ aus rechteckigen Stegen der Brechzahl n , gelten folgende einfache analytische Formeln für die effektiven Brechzahlen bei senkrechtem Einfall und im Grenzfall $g \ll \lambda$:

$$n_{\text{eff,TE}}^2 = f n^2 + 1 - f$$

$$n_{\text{eff,TM}}^2 = f n^{-2} + 1 - f$$

Dabei ist f der Füllfaktor, der das Verhältnis der Gitterstegbreite zur Gitterperiode g beschreibt. TE und TM bezeichnen die beiden Polarisationszustände: TE steht für „transversal elektrisch“, d. h. das E-Feld zeigt in Richtung der Gitterlinien, und das H-Feld senkrecht dazu. Im TM-Fall („transversal magnetisch“) ist es umgekehrt.

Durch geeignete Wahl der Profilhöhe können solche ZOGs als polarisationswirksame Elemente wie z. B. $\lambda/4$ - oder $\lambda/2$ -Plättchen fungieren. Andererseits lassen sich Füllfaktor und Gittertiefe so einstellen, dass zumindest für eine Polarisierung die Antireflexbedingung einer Einfachschicht exakt erfüllt wird. Um einen Luft-Glas-Übergang für senkrechten Lichteinfall vollständig zu entspiegeln, muss die effektive Brechzahl die Bedingung $n_{\text{eff}} = \sqrt{n_{\text{Glas}}}$ erfüllen und die Gittertiefe $d = \lambda/(4n_{\text{Glas}})$ sein. Mit eindimensionalen ZOGs lässt sich aufgrund der Formdoppelbrechung jedoch keine

komplette Entspiegelung für unpolarisiertes Licht erreichen. Ist dies gewünscht, so muss man eine weitere Strukturierung in die orthogonale Richtung aufbringen, d. h. statt parallel angeordneter binärer Stege hat man ein Kreuzgitter z. B. aus einer doppelperiodischen Anordnung von quadratischen oder runden Säulen. Ein Nachteil dieser Art von Entspiegelung ist die geringe Breitbandigkeit, da die Reflektivität beim Abweichen von der Design-Wellenlänge sowie bei schrägem Lichteinfall rasch zunimmt. Dies lässt sich mit so genannten Mottenaugenstrukturen vermeiden,⁷⁾ die aus konisch nach oben zulaufenden Säulen oder pyramidalen Strukturen bestehen und daher eine in z -Richtung variable effektive Brechzahl erzeugen. Der unetstetige Brechzahlssprung von Luft ins Material, der für das Auftreten von Reflexion sorgt, wird dadurch in einen kontinuierlichen weichen Übergang umgewandelt, was eine starke Unterdrückung der Reflexion zu Folge hat. Je tiefer die Mottenaugenstrukturen, umso sanfter der Brechzahlverlauf und desto geringer die auftretende Restreflexion.

Ein weiteres wichtiges Einsatzgebiet von ZOGs sind Gitterpolarisatoren. Hier bestehen die Gitterstege nun aus einem möglichst leitfähigen Metall. Metalle zeichnen sich durch einen komplexen Brechungsindex $n + i\kappa$ aus. Bei sehr leitfähigen Metallen ist $\kappa \gg n$, und mit den Formeln für den effektiven Brechungsindex ergibt sich näherungsweise

$$n_{\text{eff,TE}} = i\kappa \sqrt{f}$$

$$n_{\text{eff,TM}} = 1/\sqrt{1-f}$$

Im Grenzfall idealer Leitfähigkeit mit $\kappa \rightarrow \infty$ wirkt das Gitter für die TE-Polarisation als Spiegel, während es für die TM-Polarisation eine homogene dielektrische Schicht darstellt. Bei geeigneter Wahl des Füllfaktors kann zumindest für senkrechten Einfall für TM sogar die Antireflexbedingung erfüllt werden, sodass man eine perfekte Trennung der Polarisierungen erhält. Im Sichtbaren und nahen Infrarot ist die Annahme idealer Leitfähigkeit jedoch nicht gerechtfertigt, sodass ein Teil des Lichts in den Stegen absorbiert wird. Dennoch lassen sich Gitterpolarisatoren mit einem Kontrast von bis zu über 1:1000 herstellen, wobei der Kontrast mit kleiner werdender Wellenlänge abnimmt. Für das Design sind rigorose Simulationen unerlässlich.

Binärgitter

Wie schon erwähnt, lässt sich bei dielektrischen binären ZOGs durch Einstellen eines geeigneten Füllfaktors ein gewünschter effektiver Brechungsindex erzeugen. Variiert man nun den Füllfaktor entlang einer Ausdehnungsrichtung, so erhält man dadurch einen variablen Brechungsindex entlang dieser Richtung. Diese Eigenschaft kann man sich zunutze machen, um z. B. konventionelle Oberflächengitter durch Binärgitter zu ersetzen [12]. Der große Vorteil von Binärgittern ist die vergleichsweise einfache Herstellung durch lithographische Methoden, da nur ein einziger Belichtungs- und Ätzprozess erforderlich ist, um so z. B. geblazte Gitter herzustellen.

Konventionelle dielektrische Oberflächengitter erzeugen innerhalb einer Gitterperiode die lokale Phasenverschiebung über eine veränderliche optische Weglänge $\text{OPL} = n d(x)$. Dieselbe Wirkung lässt sich umgekehrt durch eine konstante Dicke d und einen veränderlichen Brechungsindex $n(x)$ erzeugen: $\text{OPL} = n(x) d$. Medien mit einem variablen Brechungsindex,

5) Diese Art von Doppelbrechung wird gemeinhin als Formdoppelbrechung bezeichnet.

6) „Binär“ deshalb, weil das Gitter nur zwei verschiedene Höhenniveaus hat.

7) s. Physik Journal, Mai 2006, S. 48, und September 2002, S. 37

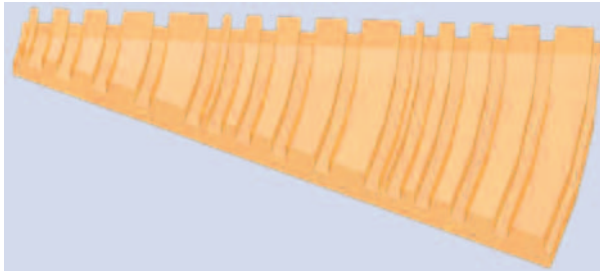


Abb. 8: Ausschnitt aus einem dielektrischen Binärgitter (Fresnel-Linse), bei dem ein wachsender Brechungsindex mittels eines variierenden Füllfaktors der binären Stege innerhalb einer Zone erzielt wird.

so genannte GRIN-Medien, lassen sich derzeit jedoch nur durch einen verhältnismäßig hohen technischen Aufwand realisieren, und es sind nicht beliebige Indexverteilungen möglich. Hier können nun binäre ZOGs eingesetzt werden, bei denen durch einen lokal veränderlichen Füllfaktor eine veränderliche Brechungsindexverteilung erzeugt werden kann.

Als Beispiel zeigt Abb. 8 ein strukturiertes Subwellenlängengitter, das innerhalb einer großen Periode einen anwachsenden Füllfaktor besitzt. Durch einen geeigneten Verlauf von f lässt sich damit innerhalb einer Periode ein linear anwachsender Brechungsindex und damit ein linear zunehmender Phasenschub generieren. Durch eine geeignete Wahl der Profiltiefe wirkt die dadurch erzeugte Struktur wie ein Blazegitter, bei dem für eine Polarisation das gesamte Licht z. B. in die erste Beugungsordnung gelenkt wird. Auf dieselbe Art und Weise lassen sich beliebige weitere Profilformen generieren, z. B. Sinus- oder Trapezgitter. Für eindimensionale Binärgitter „sieht“ die komplementäre Polarisation aufgrund der Formdoppelbrechung einen etwas anderen Brechungsindexverlauf und folglich einen etwas anderen Phasenschub, was im Allgemeinen einen Effizienzverlust zur Folge hat. Will man diese Polarisationsabhängigkeit vermeiden, so muss man auf zweidimensionale binäre Strukturen, also Säulen, ausweichen [13], die jedoch weitaus schwieriger herstellbar und sehr viel instabiler sind. Aber selbst beim eindimensionalen Binärgitter können äußerst dünne Stege auftreten, die Probleme bereiten können.

Eine neuartige Alternative ist daher, die Subwellenlängengitterstrukturierung nicht entlang der Gitterperiode g , sondern senkrecht dazu anzubringen [14]. Das resultierende Gitter (eine sog. Area-Coded Effective Medium Structure, ACES, Abb. 9, links) wird dadurch zwar ebenfalls zu einem zweidimensionalen Gitter, das aber effektiv wie ein eindimensionales Gitter wirkt, da in Richtung der Subwellenlängensperiode Λ_c keine Beugungsordnungen auftreten können.

Innerhalb jeder Stelle x innerhalb der Arbeitsperiode g mittelt das Licht nun in y -Richtung und sieht z. B. einen mit x abnehmenden Füllfaktor und damit einen abnehmenden Brechungsindex (Abb. 9, links). Wird nun der Verlauf des Füllfaktors innerhalb einer Periode so gewählt, dass der Brechungsindex für eine bestimmte Polarisation linear abfällt, so hat ein solches Gitter die Funktionsweise eines Blazegitters.

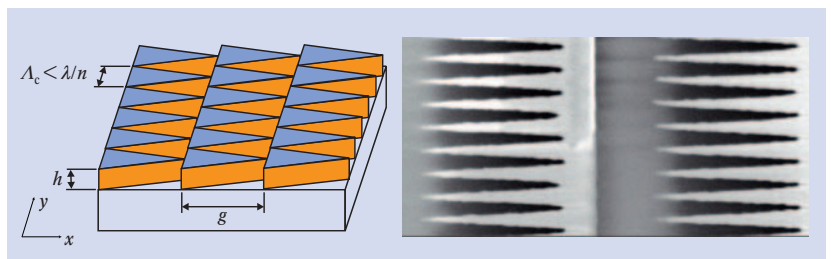


Abb. 9: Neuartige Strukturierungsmethoden ermöglichen zweidimensionale Subwellenlängengitter (ACES, mit Subwellenlängensperiode Λ_c und Gitterperiode g), die effektiv wie eindimensionale Gitter

wirken (links). Sie können als stabilere Variante zu Binärgittern dienen. Rechts ist ein solches in Lack hergestelltes ACES zu sehen.

Ebenso lassen sich auf diese Weise beliebige andere Profilverläufe simulieren. Der Vorteil dieser transversalen Subwellenlängensstrukturierung gegenüber den binär strukturierten Gittern ist das innerhalb einer Periode zusammenhängende Gebiet. Bei einzelnen Stegen oder Säulen zeigen sich im Gegensatz dazu recht große Stabilitätsprobleme. Der Nachteil ist natürlich eine inhärente Polarisationsabhängigkeit der Effizienz durch die flächig unsymmetrischen Strukturen, die bei den 2D-binär strukturierten Gittern nicht vorhanden ist. Es gibt aber Möglichkeiten, die Polarisationsabhängigkeit zu minimieren oder auch zu unterstreichen und dadurch die eine oder andere Polarisation hervorzuheben.

Die neuartigen ACES wurden inzwischen auf kleinen Flächen in Lack und in Quarz hergestellt (Abb. 9, rechts) und vermessen. Zuvor musste jedoch das Funktionsprinzip theoretisch nachgewiesen sowie ein Design der Strukturen für die Herstellung durchgeführt werden. Gegenwärtig werden die Anwendungsgebiete dieser lithographisch herstellbaren Blazegitter ausgelotet. Aufgrund ihrer interessanten Eigenschaften ergeben sich sicher noch innovative Anwendungen.

Ausblick

In denjenigen Bereichen, in denen die vom Licht durchdrungenen Strukturgrößen mit der Wellenlänge vergleichbar oder noch viel kleiner sind, wird die numerische Lösung der Maxwell-Gleichungen mit Hilfe rigoroser Methoden eine immer größere Rolle spielen.

Insbesondere in der Lithographie, mit der immer kleinere Strukturen auf dem Si-Wafer erzeugt werden, ist es notwendig, die Beugungseffekte genau zu kennen. Schließlich gilt es sicherzustellen, dass das Bild im Belichtungsleck tatsächlich der gewünschten Struktur entspricht und nicht durch Beugungsartefakte gestört ist.

Weitere Anwendungsbereiche, wo man um rigorose Modellierung nicht mehr umhin kommt, sind Laser im Mikrometerbereich (Vertical Cavity Surface Emitting Lasers, VCSEL), die (Nahfeld-)Mikroskopie von sehr kleinen Strukturen wie Viren oder die Erbsubstanz DNA, die optische Datenspeicherung, wo die Speicherdichte der heutigen DVD um den Faktor 100 gesteigert werden soll (Terabyte optical disk) oder die optische Datenübertragung und -verarbeitung. Unabdingbar ist die Lösung der Maxwell'schen Gleichungen zur Berechnung der Lichtausbreitung in Photonischen Kristallen in allen drei Raumdimensionen besonders dann, wenn die ursprünglich 3D-periodischen „Kristalle“ durch gezielte Abweichungen in der Kristallstruktur besondere Eigenschaften erhalten. Dadurch lassen sich z. B. verlustarme Wellenleiter herstellen oder das Licht verlustfrei um 90°-Ecken herum lenken. Mittels dynamischer Pho-

tonischer Kristalle können Lichtpulse sogar gestoppt und gespeichert werden. Mit neuartigen, künstlich strukturierten Metamaterialien lassen sich Materialeigenschaften erzeugen, die weder in der Natur vorkommen noch bis vor kurzem vorstellbar waren. So können geeignete Strukturen gleichzeitig eine negative effektive Permittivität und Permeabilität besitzen, was eine negative Brechzahl und damit völlig neuartige optische Phänomene zur Folge hat.⁸⁾ Die Möglichkeiten, Licht zu manipulieren, erscheinen derzeit fast unbegrenzt!

Literatur

- [1] A. Mariani et al., Proc. SPIE **2209**, 57 (1994)
- [2] P. Drossart et al., Proc. SPIE **4131**, 78 (2000)
- [3] K. Ahrens, Innovation Magazine (Carl Zeiss) **11** (2002)
- [4] H. Kierey et al., Proc. SPIE **5193**, 70 (2004)
- [5] B. Nelles, K. F. Heidemann und B. Kleemann, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A **467-468**, 260 (2001)
- [6] E. B. Treacy, IEEE J. Quantum Electronics, **QE-5**, 454 (1969)
- [7] R. Güther und B. H. Kleemann, J. Mod. Opt. **45**, 1375 (1998)
- [8] C. Bonnet et al., Opt. Lett. **26**, 666 (2001)
- [9] F. Schreier, M. Schmitz und O. Bryngdahl, Opt. Lett. **23**, 576 (1998)
- [10] F. Schreier, M. Schmitz und O. Bryngdahl, Opt. Lett. **23**, 1337 (1998)
- [11] D. M. Marom, D. Panasenko, P. C. Sun und Y. Fainman, Opt. Lett. **24**, 563 (1999)
- [12] W. Stork, N. Streibl, H. Haidner und P. Kipfer, Opt. Lett. **16**, 1921 (1991)
- [13] S. Astilean et al., Opt. Lett. **23**, 552 (1998)
- [14] B. H. Kleemann, J. Ruoff und R. Arnold, Opt. Lett. **30**, 1617 (2005)

Die Autoren

Bernd Kleemann studierte Mathematik in Rostock und begann 1977 im Weierstrass-Institut der Akademie der Wissenschaften zu Berlin, wissenschaftlich zu arbeiten. Eine Zusammenarbeit mit Zeiss führte nach einem Intermezzo am Berliner Institut für Optik 1998 in die zentrale Forschung der Carl Zeiss AG. Dort arbeitet er als Projektleiter und Mitarbeiter in unterschiedlichen Projekten im Zusammenhang mit rigorosen Beugungsmethoden. Daneben promovierte er 2002 an der TU Ilmenau. Nach der Einführung einer Fachlaufbahn bei der Carl Zeiss AG wurde er 2005 zum Staff Scientist ernannt. Neben regelmäßigen Wanderungen in der Schwäbischen Alb unternimmt er mit seiner Frau Gebirgstouren von den Rocky Mountains über die Pyrenäen und den Kaukasus bis nach Nepal.



Johannes Ruoff studierte Physik an der Universität Tübingen, wo er 2000 auch promovierte. Anschließend folgte ein zweijähriger Post-Doc-Aufenthalt in Griechenland im Rahmen des Marie-Curie-Stipendiums der EU. Seit 2002 arbeitet er in der Forschungs- und Entwicklungsabteilung der Carl Zeiss AG, wo er sich hauptsächlich mit der Simulation von diffraktiver Optik sowie mit Polarisierungsthemen bei Lithographieprojektionssystemen beschäftigt. Als Vater zweier Söhne sind die bisherigen Freizeitbeschäftigungen Bergwandern und Klavierspielen etwas in den Hintergrund gedrängt worden.