

光学学报

三维掩模光刻成像快速计算模型

包涵^{1,2}, 张涌^{1*}

¹中国科学院深圳先进技术研究院, 广东 深圳 518055;

²国微集团(深圳)有限公司, 广东 深圳 518057

摘要 掩模吸收层厚度引起的散射效应会导致深紫外和极紫外光刻成像产生偏差。传统光刻模型建立在满足薄掩模近似的 Hopkins 成像理论上,但随着掩模上吸收层的高宽比增大,掩模厚度成为衍射计算中不可忽略的因素。为实现对空间像的精准预测,提出一种三维掩模成像模型,利用严格电磁学仿真生成的掩模衍射近场来修正 Hopkins 模型结果。严格电磁学仿真需要的计算开销可以通过一种基于旋转变换和仿真维度减少的快速掩模边沿近场生成方法来减少。因此,将三维掩模成像模型和快速衍射近场生成方法结合后可以快速构建精准的三维掩模光刻成像模型。

关键词 计算光刻; 光学邻近修正; 三维掩模模型; 时域有限差分法

中图分类号 O436

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS222165

1 引言

随着摩尔定律的推进,芯片尺寸不断减小,晶体管结构的最小尺寸正在逐渐接近光刻成像系统的极限。光刻时,曝光得到的成像结构相比掩模板上的设计图形存在畸变,在硅片上得到与设计目标不同的实际结果。为了修正结果,使用光学邻近修正(OPC)技术,通过调整掩模板上的图形抵消产生畸变的光学邻近效应,获得更符合预期的成像结果。而为了实现 OPC,首先要能精确计算给定掩模所成的像。

传统的光刻成像计算方法采用薄掩模近似,认为掩模是厚度无限薄、透过率取值为 0 或 1 的理想滤波器。衍射光场的分布通过 Fresnel-Kirchhoff 衍射公式得到计算。在实际应用中,结合 Hopkins 模型^[1]和 Abbe 成像理论^[2],先计算光路系统的交叉传输矩阵(TCC),再由 TCC 和掩模函数进行卷积获得空间像,能够极大提升计算效率。该方法随后被扩展为矢量形式^[3-6],计算精度得到了提升。但随着对光刻图形尺寸的进一步要求,传统光刻模型面临瓶颈,掩模本身的厚度和材质信息不能再用薄掩模近似下的理想模型计算。以 193 nm 浸没式光刻为例,典型的掩模图形半节距(half pitch)宽度为 160 nm,MoSi 吸收层厚度为 70 nm,吸收层的高宽比为 0.44;对于极紫外光刻(extreme ultra-violet)掩模,半节距宽度约 60 nm,Ta 吸收层厚度约 60 nm,高宽比可达 1。较大的高宽比使得吸收层侧边沿带来的散射效应对成像

有更大影响,Hopkins 模型在 14 nm 以下节点不再满足精度要求。

为了提升成像模型的精度,计入掩模边沿厚度带来的散射效应是一个有效的方法。严格电磁学仿真方法能够在仿真空间上的各个区域解麦克斯韦方程组实现对电磁场的精确仿真,包括时域有限差分(FDTD)法^[7]、严格耦合波(RCWA)法^[8]等。但这些严格方法需要将空间划分成细小网格,在每个网格单元内求解差分方程或是求解大型矩阵的逆矩阵,计算开销较大,无法在全版图应用。因此有研究人员提出了一种半经验的方法^[9-11],结合 Hopkins 模型与严格电磁学方法,用精确的 3D 衍射近场修正薄掩模近似,建立考虑厚掩模散射的全版图成像计算模型,这种模型称为 mask 3D(M3D)模型。

本文首先讨论光刻成像计算方法的推导,分析从薄掩模近似到 M3D 模型时计算公式上的区别,以及 TCC 无法继续直接使用的原因。之后,基于利用 M3D 模型将严格电磁学仿真结果作为修正项的思路,提出一种能够适应任意光源方向的成像计算方法。相较于已有方法,该方法在处理光源角度变化时掩模衍射近场发生变化的问题上有精度提升,但需要额外的开销用于计算各个光源方向下的衍射近场结果。最后,针对作为修正项的掩模衍射边沿近场,提出一种快速仿真方法,极大提升了多光源方向下边沿近场的生成效率,为成像计算方法应用于实际提供可行性。

收稿日期: 2022-12-21; 修回日期: 2023-02-10; 录用日期: 2023-03-08; 网络首发日期: 2023-03-19

基金项目: 国家自然科学基金(12071460)、深圳市科技计划(CJGJZD20210408092806017)

通信作者: *zhangyong@siat.ac.cn

2 Hopkins 成像模型

传统光刻成像模型是基于薄掩模近似假设建立的。薄掩模近似假设认为掩模厚度无限薄,且亮和暗区域光的透过率分别为 1 和 0。在此假设下,光由光源发出,经掩模发生的衍射现象符合 Huygens-Fresnel 原理,衍射光强分布的数学表达符合 Fresnel-Kirchhoff 衍射公式^[12-13]。如图 1 所示,点光源 P_2 发出的一条光线经狭缝上一点 P_1 传播到 P_0 , P_2 到 P_1 的距离为 r_{21} 。 P_2 发出的光传播到 P_1 的复扰动强度 $U(P_1)$ 可以表达为

$$U(P_1) = \frac{A \exp(jkr_{21})}{r_{21}}, \quad (1)$$

式中: A 是 P_2 处扰动的振幅。点 P_2 发出的光经整个狭缝传播到 P_0 的复扰动,可以由式(1)在狭缝平面上进行积分得到,表达式为

$$U(P_0) = \frac{A}{j\lambda} \iint_{\infty} \frac{\exp[jk(r_{21} + r_{01})]}{r_{21} \cdot r_{01}} \times \left[\frac{\cos(\mathbf{n}, \mathbf{n}_{01}) - \cos(\mathbf{n}, \mathbf{n}_{21})}{2} \right] ds. \quad (2)$$

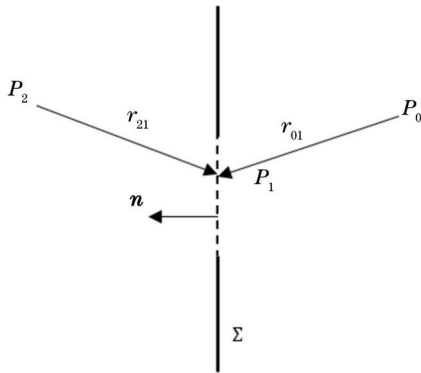


图 1 Kirchhoff 衍射公式说明

Fig. 1 Illustration of Kirchhoff diffraction formula

式(2)即所谓的 Fresnel-Kirchhoff 衍射公式,又称为 Huygens-Fresnel 原理的数学形式。在傍轴和远场条件下,衍射公式可以简化为

$$U(P_0) = \frac{1}{j\lambda} \iint_{\infty} U(P_1) \cdot \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} ds. \quad (3)$$

将式(3)展开为二维形式,定义 x 和 y 方向上的空间频率 f_x 和 f_y 分别为

$$f_x = \frac{x'}{\lambda z} = \frac{\sin \theta_x}{\lambda}, \quad (4)$$

$$f_y = \frac{y'}{\lambda z} = \frac{\sin \theta_y}{\lambda}, \quad (5)$$

式中: (x', y') 表示像面空间坐标; z 表示像面与衍射平面间的距离; θ_x 和 θ_y 表示衍射光线与原入射光线之间的夹角。用掩模透射函数来描述掩模上各区域的透过率,表达式为

$$t(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{transparent area} \\ 0, & \text{opaque area} \end{cases}. \quad (6)$$

由式(3)可以写出光透过掩模的波动函数,表达式为

$$T_m(f_x, f_y) = \iint_{\infty} t(x, y) \cdot e^{-j2\pi(xf_x + yf_y)} dx dy = \mathcal{F}[t(x, y)]. \quad (7)$$

式(7)在形式上与傅里叶变换一致,因此可以用傅里叶变换来描述光在薄掩模近似下发生的衍射行为。光经过掩模发生衍射后,按照傅里叶变换,得到具有不同空间频率的衍射级次(diffraction order)。根据 Abbe 成像原理^[2],光在透镜后焦点会聚成像。成像过程与衍射对称,可以用一次傅里叶逆变换描述,将空间频谱还原成掩模图形的像。成像透镜的作用是收集通过光瞳的衍射光线,光在透镜组的像面上会聚与相干叠加^[14-15]。要得到完美的空间像,透镜需要收集全部空间频率上的衍射信息;但受限于数值孔径(NA),只有较低频率的衍射光被收集,高频部分则被阻挡在光瞳之外。用瞳函数来描述在频域空间上光瞳对波动函数产生的作用,表示为

$$P(f_x, f_y) = \begin{cases} 1, & f_x^2 + f_y^2 \leq f_\sigma^2 \\ 0, & f_x^2 + f_y^2 > f_\sigma^2 \end{cases}, \quad (8)$$

式中: f_σ 表示光瞳的截止频率。该理想瞳函数表示截止频率以内的光可以完整保留,超出部分则完全被滤去。在实际中,由于光学系统存在的透镜表面形状等原因引起的像差和畸变,瞳函数需要乘上若干修正项,这些修正项对讨论结果不造成影响。结合波动函数和瞳函数,利用傅里叶逆变换计算光通过光瞳后的波动函数 E 。在空间频率坐标描述中,用 (f'_x, f'_y) 表示衍射前的入射光相对主光轴的方向角, (f_x, f_y) 表示衍射光线相对主光轴的方向角,则波动函数表示为

$$E(x, y, f'_x, f'_y) = \iint_{\infty} T_m(f_x - f'_x, f_y - f'_y) \cdot P(f_x, f_y) \cdot e^{j2\pi(xf_x + yf_y)} df_x df_y. \quad (9)$$

由于积分变量 f_x, f_y 的区间为 $(-\infty, +\infty)$, 进行变量代换,令 f_x, f_y 分别平移 f'_x, f'_y , 式(9)积分结果不变,表达式为

$$E(x, y, f'_x, f'_y) = \iint_{\infty} T_m(f_x, f_y) \cdot P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot e^{j2\pi[x(f_x + f'_x) + y(f_y + f'_y)]} df_x df_y. \quad (10)$$

由波动函数计算光强,得

$$I(x, y, f'_x, f'_y) = E(x, y, f'_x, f'_y) E^*(x, y, f'_x, f'_y), \quad (11)$$

将式(10)代入式(11),有

$$I(x, y, f'_x, f'_y) = \left[\iint_{-\infty}^{\infty} T_m(f_x, f_y) \cdot P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot e^{j2\pi[x(f_x + f'_x) + y(f_y + f'_y)]} df_x df_y \right] \cdot \left[\iint_{-\infty}^{\infty} T_m^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot P^*(\tilde{f}_x + f'_x, \tilde{f}_y + f'_y) \cdot e^{-j2\pi[x(\tilde{f}_x + f'_x) + y(\tilde{f}_y + f'_y)]} d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y \right], \quad (12)$$

式中: \tilde{f}_x 和 \tilde{f}_y 表示与 E^* 相对应的积分变量,由复共轭产生。化简式(12),得

$$I(x, y, f'_x, f'_y) = \iint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_m(f_x, f_y) \cdot T_m^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot P^*(\tilde{f}_x + f'_x, \tilde{f}_y + f'_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y. \quad (13)$$

式(13)描述入射方向为 (f'_x, f'_y) 的光在 (x, y) 位置产生的光强。令 $S(f'_x, f'_y)$ 为光源强度在空间频率上的分布函数,对光源空间频率进行积分,得到总光源在任意位置产生的光强:

$$I(x, y) = \iiint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_m(f_x, f_y) \cdot T_m^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot P^*(\tilde{f}_x + f'_x, \tilde{f}_y + f'_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} \cdot S(f'_x, f'_y) df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y df'_x df'_y. \quad (14)$$

式(14)计算光经过掩模和透镜组后在晶圆上成的空间像。式(14)对光源、掩模透射函数及瞳函数的变量进行各自积分,产生一个六重积分,在实际应用中对全版图进行计算时会产生极大的计算开销。为了降低工业应用中的计算复杂度, Yeung 等^[3]、Flagello 等^[4]、Adam 等^[5]、Peng 等^[6]基于 Hopkins 理论^[1],提出和发展了 Hopkins 成像模型。Hopkins 模型将掩模信息和光学系统的计算分离,提前计算并处理与光学系统相关的光源和光瞳变量,处理版图时再将计算结果与掩模信息作卷积,实现版图处理效率的极大提升。将式(14)中含有光源参数 f'_x 和 f'_y 的项与其他部分分离,组成交叉传输矩阵(TCC),再通过 TCC 结合 T_m 函数计算成像光强,表达式为

$$T_{CC}(f_x, f_y, \tilde{f}_x, \tilde{f}_y) = \iint_{-\infty}^{\infty} P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot P^*(\tilde{f}_x + f'_x, \tilde{f}_y + f'_y) \cdot S(f'_x, f'_y) df'_x df'_y, \quad (15)$$

$$I(x, y) = \iint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_m(f_x, f_y) \cdot T_m^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot T_{CC}(f_x, f_y, \tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y. \quad (16)$$

3 基于严格电磁学方法的掩模近场修正模型

对于 14 nm 以下工艺节点, Hopkins 模型不再能满足 OPC 所需的精度。Hopkins 模型中的很大一部分误差来自于薄掩模近似。薄掩模近似将掩模视为厚度为 0、且透过率为 0 或 1 的完美材料。而实际中,掩模的吸收层通常由 70~80 nm 厚的 Cr 或 MoSi 构成。实际的掩模结构一方面使得掩模挡光区域存在一定程度的漏光,另一方面具有厚度的侧边沿会对光产生复杂的散射,因此掩模上发生的衍射远比理想状态复杂。

光通过掩模后,掩模透射函数 $t(x, y)$ 不再如式(6)是 0/1 函数。光以不同角度射向掩模时,掩模边沿的散射不再相同,透射函数变成与光的入射角度相关的 $t_{3D}(x, y, f'_x, f'_y)$ 。衍射强度分布不再满足 Kirchhoff 衍射公式,掩模的波动函数 $T_{m,3D}(f_x, f_y, f'_x, f'_y)$ 使得光源参数 f'_x, f'_y 不再能够从式(14)剥离出 TCC,无法再通过 Hopkins 模型计算空间像。 $T_{m,3D}(f_x, f_y, f'_x, f'_y)$ 的表达式为

$$T_{m,3D}(f_x, f_y, f'_x, f'_y) = \iint_{-\infty}^{\infty} t_{3D}(x, y, f'_x, f'_y) \cdot e^{-j2\pi(xf_x + yf_y)} dx dy. \quad (17)$$

光强则可以通过类比式(14)得到:

$$I(x, y) = \iiint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_{m,3D}(f_x, f_y, f'_x, f'_y) \cdot T_{m,3D}^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y, f'_x, f'_y) \cdot P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot P^*(\tilde{f}_x + f'_x, \tilde{f}_y + f'_y) \cdot S(f'_x, f'_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y df'_x df'_y, \quad (18)$$

这使得厚掩模下空间像的计算复杂度回到了 Hopkins 模型简化前的状态,重新成为一个六重积分。为了提高成像模型精度,严格电磁学仿真被引入,来计算掩模厚度引起的复杂散射。以 FDTD 为例,其将空间划分成细小的 Yee 网格,在每个网格上求解麦克斯韦方程组建立的差分方程,对时间迭代方式求解电磁场随时间变化的规律。但这种严格求解的方法会带来巨大的

计算开销,在真实仿真中,对 $8 \mu\text{m} \times 8 \mu\text{m} \times 3 \mu\text{m}$ 区域求解的时间高达 30 min,远不能满足对全版图仿真的需求。

为了兼顾精度与计算效率, Adam 等^[5,9-11,16-18]提出了基于图形分解原理的 domain decomposition method (DDM) 模型,用严格仿真修正 Hopkins 模型。在直入射光照下,用 FDTD 计算掩模衍射近场并替代透射函

数 $t_{3D}(x, y)$, 并通过式 (17) 计算出波动函数 $T_{m,3D}(f_x, f_y)$ 。考虑到版图上绝大多数多边形均沿水平或竖直方向, Adam 等^[9-10]将掩模 3D 效应引起的衍射近场分解, 对应到水平和竖直方向边沿上, 之后以此在边沿区域修正 Hopkins 模型结果。Liu 等^[16-18]优化了该

方法, 提出分解波动函数 $T_{m,3D}(f_x, f_y)$ 和 TCC, 用 T_H 、 $T_{CC,H}$ 、 T_V 、 $T_{CC,V}$ 分别表示水平方向边和竖直方向边附近的近场波动函数和对应的 TCC, 相关表达式为

$$T_{m,3D}(f_x, f_y, f'_x, f'_y) = T_m(f_x, f_y) + \sum_{i=H,V} T_i(f_x, f_y), \quad (19)$$

$$I(x, y) = \iint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_m(f_x, f_y) \cdot T_m^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot T_{CC}(f_x, f_y, \tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y + \sum_{i=H,V} \iint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_i(f_x, f_y) \cdot T_i^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot T_{CC,i}(f_x, f_y, \tilde{f}_x, \tilde{f}_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y. \quad (20)$$

式 (20) 中, 第一组积是 Hopkins 模型下的求解, 第二组求和积分作为修正项, 表示水平和竖直边沿附近的修正。 $T_{CC,i}$ 各项通过梯度方法结合线性规划得到。在对全版图完成 Hopkins 模型成像计算后, 对版图上各边沿附近叠加修正项, 实现 M3D 效应下的空间像计算。除了竖直和水平方向边, 修正项 T_a 和 $T_{CC,i}$ 还可以包括顶角附近的修正。但在工业应用中, 顶角近场修正对结果的影响极小, 通常被忽略。该方法在积分中还忽略了光源参数 f'_x 、 f'_y 对掩模透射函数和波动函数的影响, 避免了多种光源条件下对掩模衍射近场仿真带来的巨大计算开销, 但也损失了入射角度对衍射近场作用的精度。

本文提出一种新的空间像计算方法, 该方法延续对水平和竖直方向边沿进行拆分修正的做法, 但在计算边沿散射修正项时, 将保留透射函数和波动函数随光源方向的变化。从式 (18) 出发, 将对成像的计算拆分为 Hopkins 模型计算部分、水平和竖直边沿修正部分, 表达式为

$$I(x, y) = I_{\text{Hopkins}}(x, y) + \sum_{i=H,V} I_{3D,i}(x, y) = I_{\text{Hopkins}}(x, y) + \sum_{i=H,V} \iint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_i(f_x, f_y, f'_x, f'_y) \cdot T_i^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y, f'_x, f'_y) \cdot P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot P^*(\tilde{f}_x + \tilde{f}_x, \tilde{f}_y + \tilde{f}_y) \cdot S(f'_x, f'_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y df'_x df'_y. \quad (21)$$

修正项中的 $T_i(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y, f'_x, f'_y)$ 保留了光源参数, 对应不同光源方向下生成的透射函数, 强度函数 $S(f'_x, f'_y)$ 通过 201×201 的采样表格提供, 其中每个元素对应特定空间频率坐标下的光源强度。以应用 FDTD 仿真 (f'_{x0}, f'_{y0}) 方向下的衍射近场为例, 获得掩模透射函数 $t_{3D}(x, y, f'_{x0}, f'_{y0})$; 之后由式 (17) 计算对应的掩模波动函数 $T_{m,3D}(f_x, f_y, f'_{x0}, f'_{y0})$; 通过求式 (22) 修正项的积分, 获得特定采样光源下的修正光强; 再对光源方向求和, 获得总光源下的 M3D 修正光强。

$$I_{3D,i}(x, y) = \sum_{f'_x, f'_y} S(f'_x, f'_y) \iint_{-\infty}^{\infty} \iint_{-\infty}^{\infty} T_i(f_x, f_y, f'_x, f'_y) \cdot T_i^*(\tilde{f}_x, \tilde{f}_y, f'_x, f'_y) \cdot P(f_x + f'_x, f_y + f'_y) \cdot P^*(\tilde{f}_x + \tilde{f}_x, \tilde{f}_y + \tilde{f}_y) \cdot e^{j2\pi x(f_x - \tilde{f}_x) + j2\pi y(f_y - \tilde{f}_y)} df_x df_y d\tilde{f}_x d\tilde{f}_y. \quad (22)$$

在工业上对真实版图的计算过程中, 可以提前完成对修正边缘的计算和保存。利用 Hopkins 模型计算近似光强分布后, 遍历版图上多边形各边, 并将修正叠加在边沿的给定范围内, 实现对全版图的 M3D 成像计算。与前述 Adam 等、Liu 等方法不同的是, 所提方法需要获得不同光源的 3D 衍射近场; 尤其应对非对称光源情况和 any angle 多边形 (多边形存在非水平、竖直方向的边) 时, 完成 3D 的电磁学仿真需要极大的计算开销。本文所讨论的方法和仿真条件, 主要针对 DUV 光刻。但结合已有研究^[19-21], 所提方法在 EUV 光刻中同样有较高的适用价值, 但需要对光源和研磨材料的设置进行相应的调整。

4 衍射边沿近场的快速计算方法

用严格电磁学方法生成掩模衍射近场时, 需要保证可接受的计算开销。如在使用 FDTD 仿真时, 将仿

真区域划分为细小 Yee 网格^[22], 在每个网格上解麦克斯韦方程组并对时间进行迭代, 计算仿真区域内电磁场随时间的变化。在面对非对称光源和 any angle 多边形时, 由于仿真区域内的图形和光源不满足任一轴线上不变性的要求, 无法直接简化到 2D。对 $8 \mu\text{m} \times 8 \mu\text{m} \times 3 \mu\text{m}$ 区域进行一次 3D FDTD 仿真, 需要建立 1.92×10^8 个单元网格, 维护电磁场的 6 个分量, 并迭代约 6000 个时间步。对单个光源采样点的仿真需要 30 min 以上。

在当前的 M3D 衍射近场生成中, 采用的方法是用至多 5 个光源采样点作为仿真点, 生成衍射近场替代其他采样点。处理光源上其他采样点时, 寻找与其最近的仿真点, 并用仿真点的透射函数作为当前点的透射函数。但衍射近场对光源方向的变化较敏感, 且采样点的选择与光源形状相关, 因此对每组新光源都需

要重新仿真,但会损失仿真精度。图 2 展示了掩模 3D 透射函数随光源角度变化而变化的情况, α 表示光源

沿边沿垂直方向的偏转角。

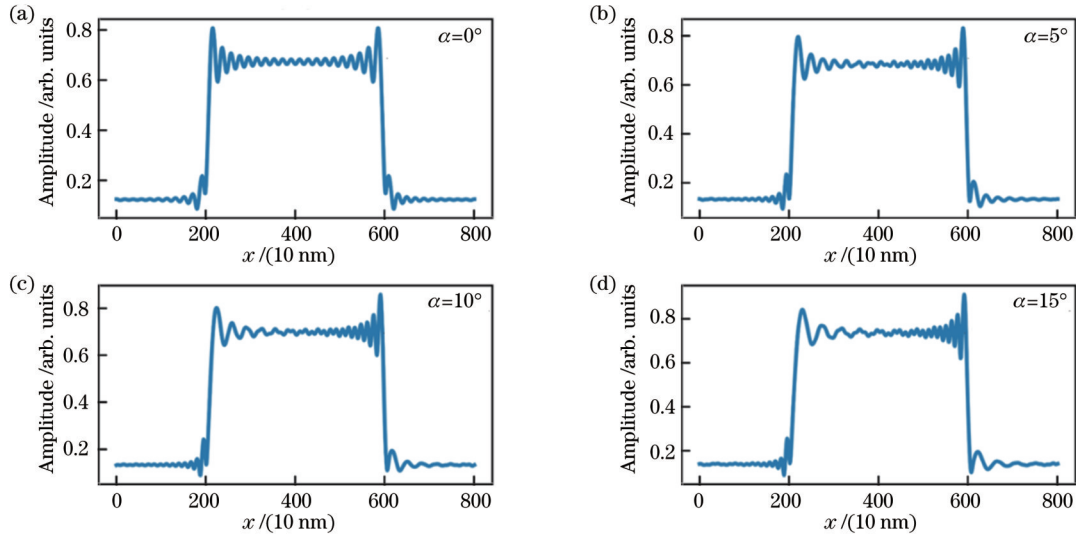


图 2 掩模 3D 透射函数随光源角度的变化。(a) 正入射; (b) 5° 偏转; (c) 10° 偏转; (d) 15° 偏转

Fig. 2 3D mask transmission function varying with the incidence of the source. (a) Normal incidence; (b) 5° incidence; (c) 10° incidence; (d) 15° incidence

本文提出一种分解和角度变换方法,将任意方向光源, any angle 多边形的情况等效为正多边形的情况,使得光源照射方向与观察边一致;之后将正多边形的仿真降到二维,大大减小需要求解的复杂度。所提方法主要针对多边形的边沿近场,能应对 M3D 仿真需求中 95% 以上问题;但在对顶角近场的求解有需求时不适用,仍需要采用更大开销的 3D 仿真方法。

在 xyz 坐标系下,设 k_0 沿 $(1, 0, 0)$ 方向作为初始方向。光的偏振方向在 yz 平面上,初始偏振方向 E_{y0} 和 E_{z0} 分别为 $(0, 1, 0)$ 和 $(0, 0, 1)$ 。为了保持传播方向与偏振方向的垂直关系,通过旋转初始方向来获得给定光源方向。

定义沿 x, y, z 轴的旋转矩阵为

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \gamma & -\sin \gamma \\ 0 & \sin \gamma & \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$R_y = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad (24)$$

$$R_z = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

给定方向 $k = (a, b, \sqrt{1 - a^2 - b^2})$ 由对初始方向依次沿 y 轴和 z 轴旋转 α 和 β 角度得到。此时旋转后的波矢 k 的方向为

$$k = R_z \cdot R_y \cdot k_0 = (\cos \alpha \cos \beta, \cos \alpha \sin \beta, -\sin \alpha), \quad (26)$$

式中: $\alpha = -\arcsin \sqrt{1 - a^2 - b^2}$, $b = \arctan(a/b)$ 。初始的 E_{y0} 和 E_{z0} 偏振方向旋转到

$$E_y = R_z \cdot R_y \cdot E_{y0} = (-\sin \beta, \cos \beta, 0), \quad (27)$$

$$E_z = R_z \cdot R_y \cdot E_{z0} = (\sin \alpha \cos \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \alpha). \quad (28)$$

假定在初始方向下 E_{y0} 和 E_{z0} 偏振的组分分别为 p 和 q 。旋转后,偏振方向为

$$P = p \cdot E_y + q \cdot E_z. \quad (29)$$

考虑多边形边沿的方向,假定待求边沿与竖直方向存在夹角 δ ,如果尝试将其旋转至竖直方向,需要沿 x 轴旋转 $-\delta$;为了保证光照方向相对于边沿保持不变,对光源也应执行一次沿 x 轴 $-\delta$ 角度的旋转。此时新的波矢 k_2 方向为

$$k_2 = R_x(-\delta) \cdot k. \quad (30)$$

同样地,旋转后偏振的实际方向为

$$P_2 = R_x(-\delta) \cdot P. \quad (31)$$

根据式(26),将新的波矢 k_2 分解成依次沿 y 轴和 z 轴旋转 α_2 和 β_2 的分量,有

$$\alpha_2 = -\arcsin(k_2 \cdot E_{z2}), \quad (32)$$

$$\beta_2 = \arcsin\left(\frac{k_2 \cdot E_{y0}}{\cos \alpha_2}\right). \quad (33)$$

新的偏振方向为

$$E_{y2} = (-\sin \beta_2, \cos \beta_2, 0), \quad (34)$$

$$E_{z2} = (\sin \alpha_2 \cos \beta_2, \sin \alpha_2 \sin \beta_2, \cos \alpha_2). \quad (35)$$

将偏振矢量 P_2 分解到 E_{y2} 和 E_{z2} 上,即得到各自偏振对应的组分:

$$q_2 = \frac{P_2 \cdot E_{z0}}{E_{z2} \cdot E_{z0}}, \quad (36)$$

$$p_2 = \frac{(P_2 - q_2 \cdot E_{z2}) \cdot E_{y0}}{E_{y2} \cdot E_{y0}} \quad (37)$$

按以上讨论,为计算在光源入射方向 k 、偏振方向为 $P = p \cdot E_y + q \cdot E_z$ 、照射在与水平方向成 δ 角度的边沿时产生的衍射近场,可以通过如下的等效方法计算:将按照沿 y 轴和 z 轴依次旋转 α_2 和 β_2 给出的方向, E_y 、 E_z 偏振按 p_2 、 q_2 的组分叠加的光源照射在正多边形边沿,产生衍射近场。用该等效方法计算能够得到与等效前相等的结果。该等效操作具有的意义在于:将待处理问题中的 any angle 边沿转换为水平或竖直方向;又由于在 FDTD 仿真时水平或竖直边在沿边沿方向上具有重复性,因此可以将 3D 的 FDTD 仿真降维到 2D,将每个光源采样点的仿真时间从 30 min 以上降低到 2~3 min。在工业应用中,光源的有效采样点数量通常约为八百至数千。通过 2D 仿真计算等效问题的边沿近场,再进行叠加得到原问题的等效结果。结合第 3 节所述方法,衍射边沿近场的快速计算方法实现更高精度且保证效率的空间像计算。

5 实验仿真

实验通过搭建 FDTD 仿真平台实现,通过多种方式计算矩形遮挡区域的边沿衍射近场,验证第 4 节所述等效方法的有效性。实验中,定义光的传播方向为 x 方向,掩模图形在 yz 平面上,图形沿 y 、 z 方向无限重复。掩模材料使用 70 nm 厚的 MoSi, 折射率 $n = 2.26$, 尝试仿真 $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ 矩形遮挡区域的衍射近场,以其中竖直方向边作为观察边。原问题中,多边形旋转角度 $\delta = 30^\circ$;光源偏振为 E_z 方向,并依次沿 y 轴、 z 轴旋转 15° 、 10° ,光源波矢 $k = (0.9512, 0.1677, -0.2588)$ 。进行 3D FDTD 仿真,得到的掩模后的近场如图 3 所示。图中直线与所求目标边沿垂直,沿线上记录的电磁场分布即该边的边沿

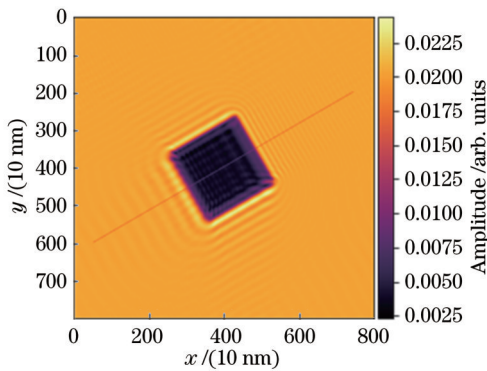


图 3 光源波矢 $k = (0.9512, 0.1677, -0.2588)$ 和 E_z 偏振条件下的 3D FDTD 掩模近场

Fig. 3 Simulated result of 3D FDTD mask near field under wave vector $k = (0.9512, 0.1677, -0.2588)$ and E_z polarization

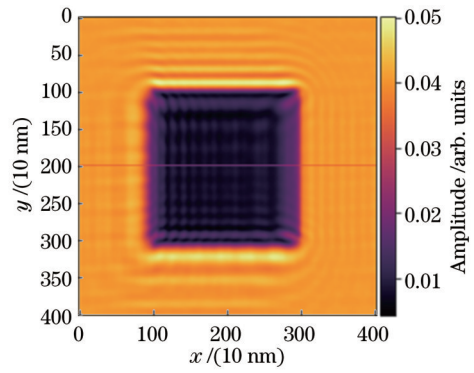


图 4 光源波矢 $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$ 和 E_y 偏振条件下的 3D FDTD 掩模近场

Fig. 4 Simulated result of 3D FDTD mask near field under wave vector $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$ and E_y polarization

近场。

第二组实验作为对照组,仅进行了角度变换和等效,未实现降维。按照第 4 节所述方法进行角度变换,将 any angle 多边形旋转至正多边形,同时求解得到对应的光源波矢 $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$,保证变换后的光源相对于观察边的照射倾角与原目标一致。分别仿真该 k_2 光源的 E_y 和 E_z 照射在正多边形上的近场,结果如图 4 和图 5 所示。

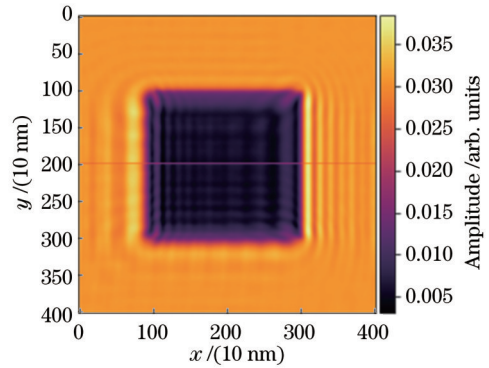


图 5 光源波矢 $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$ 和 E_z 偏振条件下的 3D FDTD 掩模近场

Fig. 5 Simulated result of 3D FDTD mask near field under wave vector $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$ and E_z polarization

按计算出的组分 p_2 、 q_2 ,将 E_y 、 E_z 对应的仿真近场叠加,结果如图 6 所示。

第三组实验同时进行了角度变换和降维。考虑到观察边的方向上重复距离足够长,因此电磁场不沿该方向发生变化,可以仅在与观察边垂直的平面上进行仿真。此时该截面上的图形成为了一个沿 z 方向的 line/space 结构。按照第 4 节所述方法进行角度变换,得到正多边形对应的光源方向 $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$,以 2D FDTD 实现仿真

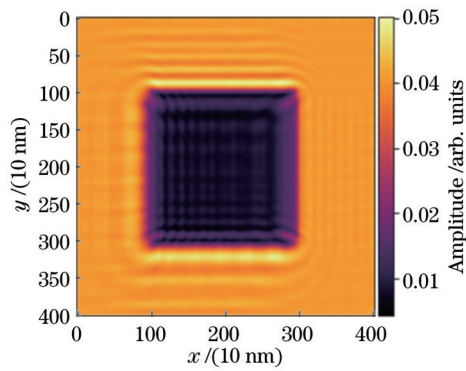


图 6 光源波矢 $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$ 和 E_y 、 E_z 偏振叠加条件下的 3D FDTD 掩模近场

Fig. 6 Simulated result of 3D FDTD mask near field under $k_2 = (0.9512, 0.0159, -0.3080)$ and E_y and E_z polarization superposition

并将近场结果叠加。仿真近场结果如图 7 中点线所示。

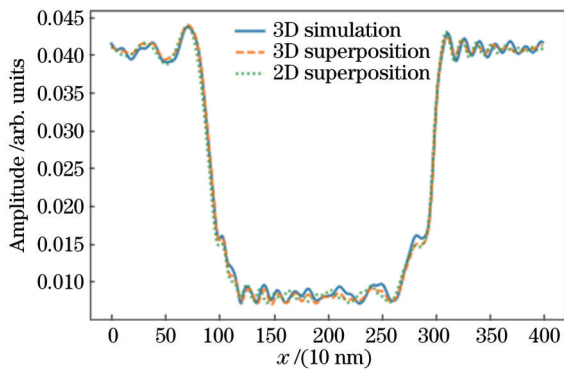


图 7 三种方法生成的边沿近场结果对比

Fig. 7 Comparison of the near fields of edges generated by the three methods

为了对比结果,从前两组实验的图 3~5 中划线区域提取出与观察边垂直的衍射近场,与 2D 方法进行对比。图 7 展示了 3D any angle 多边形直接仿真结果 (3D simulation)、3D 等效正多边形的叠加结果 (3D superposition)、2D 降维叠加结果 (2D superposition), 其中对光源强度进行了归一化。结果显示 3 种方法得到的边沿近场结果基本一致。存在的少量误差来自不同网格划分结果和仿真区域周期性重复带来的变化。因此本文用 2D 等效方法计算任意方向光源、any angle 多边形的衍射边沿近场是可行的。就计算效率而言,使用 3D 模型计算某一方向光源和偏转角度下的近场需要 30 min 以上,而 2D 方法单次仿真仅需约 2 min,实现了加速效果。

6 结 论

通过对光刻成像原理的分析,讨论了在考虑掩模真实 3D 结构带来的影响时,成像模型与传统 Hopkins

模型的异同,并依据此提出了一种用严格电磁学方法仿真来修正 Hopkins 模型的高精度 M3D 成像模型。该模型能够应对工业上对任意方向光源、any angle 多边形的复杂需求,实现对厚掩模衍射的精确计算。为解决所提模型需要在多种光源和多边形偏转角度下进行严格电磁学仿真所带来的巨大计算开销,提出了一种能够在等效实现复杂条件下快速生成掩模边沿衍射近场的方法。该方法通过角度计算和对光的偏振叠加,将对 any angle 多边形的计算等效为两个正多边形衍射近场的叠加,再将对正多边形的仿真降维到 2D,实现了加速的效果。结合衍射近场快速生成方法与前述用近场修正 Hopkins 模型的方法,实现了高精度 M3D 空间像计算模型。

参 考 文 献

- [1] Hopkins H H. On the diffraction theory of optical images[J]. Proceedings of the Royal Society of London Series A Mathematical and Physical Sciences, 1953, 217(1130): 408-432.
- [2] Abbe E. Beiträge zur theorie des mikroskops und der mikroskopischen wahrnehmung[J]. Archiv Für Mikroskopische Anatomie, 1873, 9(1): 413-468.
- [3] Yeung M S, Lee D, Lee R S, et al. Extension of the Hopkins theory of partially coherent imaging to include thin-film interference effects[J]. Proceedings of SPIE, 1993, 1927: 452-463.
- [4] Flagello D G, Milster T, Rosenbluth A E. Theory of high-NA imaging in homogeneous thin films[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1996, 13(1): 53-64.
- [5] Adam K, Granik Y, Torres A, et al. Improved modeling performance with an adapted vectorial formulation of the Hopkins imaging equation[J]. Proceedings of SPIE, 2003, 5040: 78-91.
- [6] Peng D P, Hu P, Tolani V, et al. Toward a consistent and accurate approach to modeling projection optics[J]. Proceedings of SPIE, 2010, 7640: 76402Y.
- [7] Azpiroz J T, Burr G W, Rosenbluth A E, et al. Massively-parallel FDTD simulations to address mask electromagnetic effects in hyper-NA immersion lithography[J]. Proceedings of SPIE, 2008, 6924: 69240Y.
- [8] Chateau N, Hugonin J P. Algorithm for the rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1994, 11(4): 1321-1331.
- [9] Adam K, Neureuther A R. Simplified models for edge transitions in rigorous mask modeling[J]. Proceedings of SPIE, 2001, 4346: 331-344.
- [10] Adam K. Modeling of electromagnetic effects from mask topography at full-chip scale[J]. Proceedings of SPIE, 2005, 5754: 498-505.
- [11] Tanabe H, Sato S, Takahashi A. Fast 3D lithography simulation by convolutional neural network: POC study[J]. Proceedings of SPIE, 2020, 11518: 115180L.
- [12] Goodman J W. Introduction to Fourier optics[M]. 3rd ed. Englewood: Roberts & Company Publishers, 2005.
- [13] Born M, Wolf E. Principles of optics; electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light[M]. 2nd ed. New York: Macmillan, 1964.
- [14] Song L, Lam E Y. Fast and robust phase retrieval for masked coherent diffractive imaging[J]. Photonics Research, 2022, 10(3): 758-768.
- [15] Anand V, Katkus T, Hock Ng S, et al. Review of Fresnel incoherent correlation holography with linear and non-linear

- correlations[J]. Chinese Optics Letters, 2021, 19(2): 020501.
- [16] Liu P, Cao Y, Chen L Q, et al. Fast and accurate 3D mask model for full-chip OPC and verification[J]. Proceedings of SPIE, 2007, 6520: 65200R.
- [17] Liu P. Accurate prediction of 3D mask topography induced best focus variation in full-chip photolithography applications[J]. Proceedings of SPIE, 2011, 8166: 816640.
- [18] Liu P. Mask synthesis using machine learning software and hardware platforms[J]. Proceedings of SPIE, 2020, 11327: 1132707.
- [19] 张子南, 李思坤, 王向朝, 等. 极紫外光刻快速掩模优化方法[J]. 光学学报, 2022, 42(13): 1305002.
- Zhang Z N, Li S K, Wang X Z, et al. Fast mask optimization method for extreme ultraviolet lithography[J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(13): 1305002.
- [20] 陈国栋, 张子南, 李思坤, 等. 深紫外计算光刻技术研究[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(9): 0922007.
- Chen G D, Zhang Z N, Li S K, et al. Study on deep ultraviolet computational lithography techniques[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(9): 0922007.
- [21] Zhou Z H, Liu W, He J J, et al. Far-field super-resolution imaging by nonlinearly excited evanescent waves[J]. Advanced Photonics, 2021, 3(2): 025001.
- [22] Yee K S, Ingham D, Shlager K. Time-domain extrapolation to the far field based on FDTD calculations[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1991, 39(3): 410-413.

Development of Precise 3D Mask Model with Reduced Runtime for Lithography

Bao Han^{1,2}, Zhang Yong^{1*}

¹Shenzhen Institute of Advanced Technology, Chinese Academy of Sciences, Shenzhen 518055, Guangdong, China;

²SMIT, Shenzhen 518057, Guangdong, China

Abstract

Objective Scattering caused by the thickness of the absorber layer of the mask leads to deviations in deep ultraviolet (DUV) and extreme ultraviolet (EUV) lithography. Traditional lithography models are based on Hopkins' method and the thin mask approximation, wherein diffracted waves from the mask satisfy the Fourier transform of the mask patterns. As the aspect ratio of the absorbing layer on the mask increases, the mask thickness becomes a non-negligible factor in diffraction calculation. Thick absorbers change the diffracted waves, particularly along the edges of the pattern. To accurately predict the aerial image, a 3D mask model is proposed to correct the Hopkins' model using the mask near fields generated via rigorous electromagnetic simulation, such as the finite-difference time-domain (FDTD) method. The computational cost of rigorous electromagnetic simulations can be reduced using a fast mask near-field generation method based on rotation transformation and dimension reduction. By combining a 3D mask model with a fast near-field generation method, an accurate 3D mask lithographic model can be rapidly constructed. The 3D mask model offers the advantages of less runtime and high accuracy when dealing with cases involving complex source and any-angle mask patterns.

Methods First, a rotation transformation was applied to any given case. The source was decomposed by polarization, and each component of the source was rotated with the incident edge in such a way that the incident angle of the light remained unchanged on the vertical or horizontal incident edge. Next, a 2D FDTD simulation was implemented by reducing the dimension of the simulation area along the incident edge. This 2D FDTD simulation generates a 1D accurate electromagnetic wave distribution near the mask absorbers, with the 1D accurate wave distribution describing the diffracted wave on the line perpendicular to the incident edge. Subsequently, the FDTD-generated 1D wave distribution was expanded along the incident edge and used to modify the thin mask approximated results to obtain a correct mask transmission function. Finally, the modified mask transmission function calculated the aerial images involving mask 3D effects.

Results and Discussions Rigorous electromagnetic simulations are conducted via FDTD, wherein electromagnetic wave propagation is modeled by solving Maxwell's equations on Yee's grid. A 3D FDTD simulation is conducted with oblique incidence on a square with a 30-degree rotation angle (Fig. 3). The mask absorber is set as MoSi with a 70 nm thickness and a refractive index of 2.2. The near fields after mask diffraction are calculated, with an emphasis on the fields on the marked line perpendicular to the edges. Subsequently, 3D FDTD simulations with a rotated source on Manhattan polygons are performed (Fig. 4, 5). The incident angle of the wave on the observed edge is kept equal to that of the original case. Furthermore, near fields of y and z polarization components are calculated and weighted superposition is derived (Fig. 6). Next, a series of 2D FDTD simulations with a rotated source and dimension reduction is conducted. Near fields along the line perpendicular to the observed edge are calculated, and superposition is applied. Finally, the 1D edge

near fields extracted from 2D near fields generated via 3D FDTD is compared with the results generated directly via 2D FDTD (Fig. 7). The agreement of the edge near fields demonstrates the applicability of the rotation and dimension reduction method. Furthermore, the 2D simulation shows advantages in runtime, taking 2 min, while the 3D simulation takes approximately 40 min.

Conclusions A novel mask 3D imaging model for lithography is developed in this study. The principles of the Hopkin's model are analyzed to reveal that the mask transmission function can no longer be derived directly from the Fourier transform by considering scattering caused by the thickness of the absorber layers. The FDTD method is applied to calculate the near fields of absorbers to implement rigorous electromagnetic simulation. Experimental results show that the near fields on the line perpendicular to the observed edge can be calculated quickly with high accuracy by applying rotation transformation and dimension reduction. Any incident angle on an any-angle edge can be converted to a Manhattan case, and near fields can be computed rapidly using 2D FDTD simulation. These near fields are then used to derive a correct mask transmission function, and the modified Hopkin's approach calculates aerial images on the wafer. The method used in this paper has a shorter runtime when handling complex or even freeform illumination sources and masks with any-angle polygons. Furthermore, because near fields can be generated in advance and the corrected mask transmission function can be reused in the entire layout, this method becomes more practical in 3D mask image models for full-chip prediction. This helps foundries save time in the production flow.

Key words computational lithography; optical proximity correction; three-dimensional mask model; finite-difference time-domain method