

入射光照对典型光刻胶纳米结构的 光学散射测量影响分析*

董正琼¹⁾ 赵杭¹⁾ 朱金龙²⁾ 石雅婷^{2)†}

1) (湖北工业大学, 湖北省质量工程重点实验室, 武汉 430068)

2) (华中科技大学, 数字制造装备与技术国家重点实验室, 武汉 430074)

(2019年10月8日收到; 2019年11月27日收到修改稿)

作为一种快速、低成本和非接触的测量手段, 光学散射测量在半导体制造业中的纳米结构三维形貌表征方面获得了广泛关注与运用. 光学散射测量是一种基于模型的测量方法, 在纳米结构待测参数的逆向提取过程中, 为降低参数之间的耦合性, 通常需要将结构的材料光学常数作为固定的已知量, 即假设结构的材料光学常数不受光学散射仪入射光照的影响. 事实上, 这一假设对于半导体制造业中的绝大多数材料是成立的, 但某些感光材料的光学常数有可能随着入射光的照射时间增加而发生改变, 而由此产生的误差会在一定程度上传递给待测形貌参数的逆向提取值. 本文针对聚甲基丙烯酸甲酯光刻胶薄膜培片和光栅结构分别开展了光学散射测量实验与仿真研究, 结果表明该光刻胶材料的光学常数随着入射光照时间增加而变化, 进而导致光栅结构形貌参数的提取结果较大地偏离于真实值, 不容被忽视. 这一研究发现将为更进一步提高光刻胶纳米结构三维形貌参数的测量精确度提供理论依据.

关键词: 光学散射测量, 光刻胶纳米结构, 聚甲基丙烯酸甲酯, 光学常数

PACS: 06.20.-f, 07.60.Fs, 62.23.St, 79.60.Jv

DOI: 10.7498/aps.69.20191525

1 引言

纳米制造是指产品特征尺寸为纳米量级的制造技术, 是一个国家制造水平的重要标志之一^[1,2]. 纳米制造的工艺生产质量决定了纳米产业的发展前景, 而实现工艺质量监督、评估及优化的基本手段是测量. 由于具有非接触、非破坏性、低成本和易于在线集成等优点, 基于远场光学的光学散射仪测量技术^[3]除广泛应用于纳米薄膜材料的光学特性表征与膜厚测量外^[4,5], 也已成为一种周期性纳米结构关键尺寸的重要测量手段^[6-10]. 因此, 光学散射仪也被称为光学关键尺寸测量仪.

光谱椭偏仪是一种典型的光学散射仪, 其基本测量原理是通过将实际测量数据与模型仿真数据进行匹配来反演出待测纳米结构参数值^[11]. 其中, 测量数据由椭偏仪探测待测纳米结构的反射光或透射光而直接获得, 根据测量数据类型的不同, 测量仪器又可分为传统椭偏仪和 Mueller 矩阵偏振仪; 模型仿真数据的计算和待测参数值的反演提取则涉及到以下两个光学散射测量理论算法: 一是“正向”光学特性的建模; 二是“逆向”待测参数的提取. 正向光学建模是由已知的纳米结构参数、材料光学常数以及测量条件配置等, 利用电磁场理论计算出待测结构的理论数据^[12]; 逆向几何参数求取则是将实际测量数据与模型计算数据进行匹配反

* 湖北省自然科学基金 (批准号: 2018CFB290, 2018CFB559)、中国博士后科学基金 (批准号: 2016M602269, 2019M652633) 和国家科技重大专项 (批准号: 2017ZX02101006-004) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yatingshi@hust.edu.cn

演得出待测参数值^[13]. 在以计算电磁波理论为基础的光学特性建模求解方法^[12,14,15]中, 由于严格耦合波分析 (rigorous coupled-wave analysis, RCWA) 可对任意周期性结构建模, 而且具有数值求解过程比较简单、实现相对容易、精度高等优点而得到了广泛应用^[16,17]. 纳米结构待测参数的逆向求解主要包括库匹配和非线性回归这两种方法^[18], 由于前者的建库过程相当耗时, 后者的操作过程简单直接, 因而具有迭代收敛快速特点之列文伯格-麦夸特 (Levenberg-Marquardt, LM) 非线性回归优化算法目前被广泛应用于光学散射测量中的待测参数逆向求解^[19,20].

在纳米结构三维几何形貌的逆向提取过程中, 为了降低待测参数之间的耦合性, 通常需要将已知的纳米结构参数、材料光学常数、入射测量条件配置等设为固定值, 而对待测的若干形貌参数进行浮动处理^[6-10]. 考虑到纳米结构测量数据的质量完全取决于测量仪器本身, 无法轻易改变, 目前已有诸多文献通过优化入射测量条件配置以提高待测参数的测量精确度. 例如, Vagos 等^[21]基于不确定度与灵敏度分析进行了光学特性模型及方位角的优化; Littau 等^[22]针对采用不同方式进行入射角范围的选取, 从而提高了角分辨型椭偏仪的测量精度; 文献^[23, 24]中分析了不同来源的系统误差对纳米结构参数测量准确度的影响, 进而优化了测量入射角和方位角; 此外, 文献^[25]中还结合全局灵敏度分析方法实现了测量方位角的优化, 提高了纳米结构形貌参数的测量精度.

总体而言, 上述优化方法均是通过合理地选择测量条件配置, 以降低测量随机噪声或者系统误差对纳米结构待测参数逆向提取结果的影响, 进而在一定程度上提高测量准确度或精密度. 结构的材料光学常数获取方式通常为测量同一工艺中尚未制作出形貌结构的薄膜培片, 而后在纳米结构三维形貌参数的光学散射测量过程中使用测得的光学常数并假设其固定不变. 这一假设对于半导体制造业中的绝大多数材料是成立的, 但某些感光材料诸如聚甲基丙烯酸甲酯 (polymethyl methacrylate, PMMA) 光刻胶^[26,27]可能会随着椭偏仪入射光照的影响而发生改变, 该误差则可能在一定程度上传递给待测形貌参数的逆向提取值. 为此, 本文结合实验与仿真开展了椭偏仪入射光照对 PMMA 光刻胶薄膜培片和光栅结构的光学散射测量研究,

以证明 PMMA 光刻胶光学常数随入射光照的变化对于纳米结构的光学散射测量不容忽视, 从而为更进一步提高光刻胶纳米结构三维形貌参数的测量精确度提供理论依据.

2 基本原理

2.1 基于 RCWA 的正向光学特性建模

利用 RCWA 理论对周期性光栅结构进行光学特性建模的基本步骤可分为: 1) 由 Maxwell 方程组求得入射区域和透射区域的电磁场的表达式; 2) 对光栅区域内的介电常数及电磁场按 Fourier 级数展开, 并由 Maxwell 方程导出耦合微分方程组; 3) 分别在光栅区域的上下边界运用电磁场边界连续条件, 通过数学求解各级衍射波的振幅, 进而计算各级衍射波的衍射效率或衍射场的强度分布等.

以图 1 所示的光栅结构为例, 假设其周期为 P , 占空比为 f , 线高为 d , 顶部线宽和底部线宽分别为 D_{TC} 和 D_{BC} , 首先建立如图 1(a) 所示的直角坐标系, θ 为入射角, 入射波波矢 \mathbf{k}_1 所在的铅垂面与 xoz 平面夹角为方位角 φ , 电矢量 \mathbf{E} 与 \mathbf{k}_1 所在平面的夹角为偏振角 ψ . 然后, 将光栅截面进行纵向分层, 则可将图 1(b) 中的每个薄层等效为矩形光栅, 再将矩形光栅结构划分为 3 个区域, 即区域 1 (入射/反射区域, $z < 0$), 区域 2 (透射区域, $z > d$) 以及光栅区域 ($0 < z < d$). 区域 1 和区域 2 的复折射率分别记为 n_1 和 n_2 . 光栅区域包含了脊部和槽部两种介质的周期分布, 分别记其复折射率为 n_{rd} 和 n_{gr} . 由于本文所研究对象的材料为各向同性材料, 因此光栅区域的相对介电常数 ε 仅为关于 x 的周期性函数, 而与 z 无关. 将光栅区域的相对介电常数展开成 Fourier 级数形式, 有

$$\varepsilon(x) = \sum_g \varepsilon_g \exp\left(j \frac{2\pi g}{P} x\right), \quad (1)$$

其中 ε_g 表示相对介电常数的第 g 级 Fourier 展开分量.

将入射电场的振幅归一化后, 入射波的电场分量可表示成:

$$\mathbf{E}_{inc} = \mathbf{u} \exp(-j\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}), \quad (2)$$

其中, \mathbf{u} 为归一化的入射电矢量, \mathbf{k}_1 表示入射波的波矢, \mathbf{r} 为平面波波面上任一点的位置矢量.

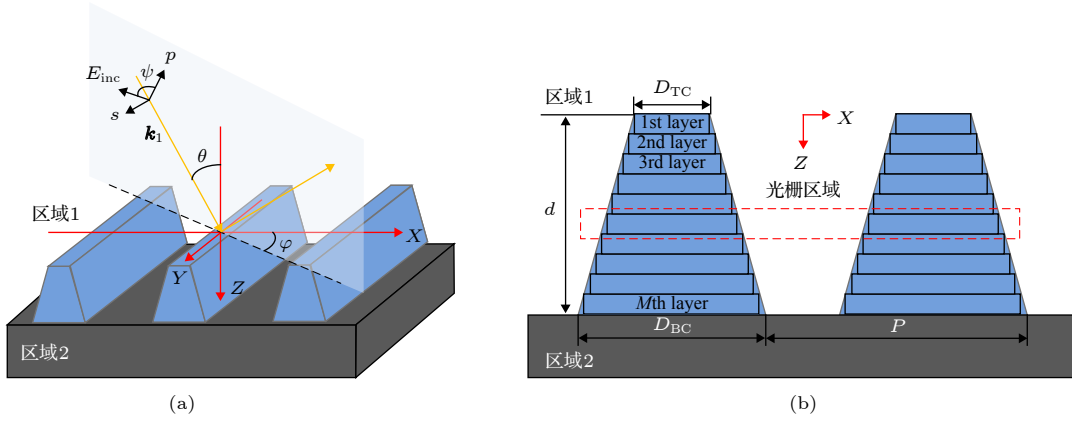


图 1 (a) 线条光栅结构的几何形貌示意图; (b) RCWA 建模的分层示意图

Fig. 1. (a) Geometry of the trapezoidal groove line grating; (b) layers division for inverse modeling based on RCWA.

由 Rayleigh 展开可分别得到区域 1 ($z < 0$) 和区域 2 ($z > d$) 电场矢量的表达式:

$$\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_{\text{inc}} + \sum_i \mathbf{R}_i \exp[-j(k_{xi}x + k_y y - k_{l,zi}z)], \quad (3a)$$

$$\mathbf{E}_2 = \sum_i \mathbf{T}_i \exp\{-j[k_{xi}x + k_y y + k_{2,zi}(z - d)]\}, \quad (3b)$$

式中, \mathbf{R}_i 和 \mathbf{T}_i 分别表示第 i 级反射波和第 i 级透射波的幅值矢量; k_{xi} , k_y 与 $k_{l,zi}$ 分别表示第 i 级衍射波波矢的 x , y 与 z 分量,

$$k_{xi} = k_0(n_1 \sin \theta \cos \varphi - i\lambda/A), \quad (4a)$$

$$k_y = k_0 n_1 \sin \theta \sin \varphi, \quad (4b)$$

$$k_{l,zi} = \begin{cases} +\sqrt{(k_0 n_l)^2 - k_{xi}^2 - k_y^2}, & (k_0 n_l)^2 \geq k_{xi}^2 + k_y^2, \\ -j\sqrt{k_{xi}^2 + k_y^2 - (k_0 n_l)^2}, & (k_0 n_l)^2 < k_{xi}^2 + k_y^2, \end{cases} \quad (4c)$$

$l = 1, 2.$

在光栅区域 ($0 < z < d$) 内, 电场 \mathbf{E}_g 和磁场 \mathbf{H}_g 可以表示为空间谐波的 Fourier 级数展开式^[12]:

$$\mathbf{E}_g = \sum_i [S_{xi}(z)\hat{x} + S_{yi}(z)\hat{y} + S_{zi}(z)\hat{z}] \times \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)], \quad (5a)$$

$$\mathbf{H}_g = -j\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_i [U_{xi}\hat{x} + U_{yi}(z)\hat{y} + U_{zi}(z)\hat{z}] \times \exp[-j(k_{xi}x + k_y y)], \quad (5b)$$

其中, $\mathbf{S}_i(z)$ 和 $\mathbf{U}_i(z)$ 分别为光栅区域内电场和磁场的幅值矢量, ε_0 和 μ_0 分别为自由空间的介电常数和磁导率.

由 Maxwell 旋度方程, \mathbf{E}_g 与 \mathbf{H}_g 有如下的耦合关系:

$$\nabla \times \mathbf{E}_g = -j\omega\mu_0 \mathbf{H}_g, \quad (6a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}_g = j\omega\varepsilon_0 \varepsilon(x, y) \mathbf{E}_g, \quad (6b)$$

将 (5) 式代入 (6) 式, 消去 E_{gz} 与 H_{gz} , 并应用逆规则^[28]后, 可得矩阵形式的耦合波方程组. 当所研究的结构具有非矩形面型 (如图 1 所示) 需要进行分层处理时, 应在光栅区域每一层中对电场 \mathbf{E}_g 和磁场 \mathbf{H}_g 进行展开, 并获得相应的耦合波方程. 最后在光栅区域内各层边界及光栅区域与反射区和投射区的分界面 ($z = 0$ 和 $z = d$) 上考虑连续性条件, 即可得出反射波 TE ($\psi = 90^\circ$) 模电场分量 R_s 和 TM ($\psi = 0^\circ$) 模磁场分量 R_p 的幅值向量.

考虑到仪器探测设备主要检测的是光强信息, 基于 RCWA 模型输出的相应为反射率、椭圆偏参数或 Mueller 矩阵等光学特性参量的计算值. 其中, 反射率的计算公式为

$$DE_i = |R_{si}|^2 \text{Re} \left(\frac{k_{1,zi}}{k_0 n_1 \cos \theta} \right) + |R_{pi}|^2 \text{Re} \left(\frac{k_{1,zi}/n_1^2}{k_0 n_1 \cos \theta} \right), \quad (7)$$

其中 R_{si} 和 R_{pi} 分别表示第 i 级反射波 TE 模电场分量和 TM 模磁场分量的幅值向量.

由偏振光学可知, 待测样品的光学特性则可以用 2×2 阶 Jones 矩阵 \mathbf{J} 或者 4×4 阶 Mueller 矩阵 \mathbf{M} 来表征. 例如, 对应于待测样品的 Jones 矩阵 \mathbf{J} 有

$$\begin{bmatrix} E'_p \\ E'_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_p \\ E_s \end{bmatrix}, \quad (8)$$

(8) 式左右两边分别表示出射和入射至样品表面的 Jones 向量, E_p 和 E_s 分别表示平行和垂直于入射面的电场分量. 由 Jones 矩阵 \mathbf{J} 可求得椭圆偏参数:

$$\rho = \tan \Psi \exp(j\Delta) = J_{11}/J_{22}, \quad (9)$$

其中, Ψ 为振幅比角, Δ 为相位差角. 当测量过程中不存在退偏效应时, 其 Jones 矩阵 \mathbf{J} 和 Mueller 矩阵 \mathbf{M} 之间存在如下关系:

$$\mathbf{M} = (M_{ij})_{4 \times 4} = \mathbf{U}(\mathbf{J} \otimes \mathbf{J}^*)\mathbf{U}^{-1}, \quad (10)$$

其中, \otimes 表示矩阵的 Kronecker 积; \mathbf{J}^* 为 Jones 矩阵 \mathbf{J} 的共轭矩阵; 矩阵 \mathbf{U} 定义为

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & j & -j & 0 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

在实际测量过程中, 通常用 Mueller 矩阵中第 1 行和第 1 列的元素 M_{11} 对其进行归一化处理. 归一化的 Mueller 矩阵定义为

$$\mathbf{M}' = (m_{ij})_{4 \times 4} = \mathbf{M}/M_{11}, \quad (12)$$

2.2 基于 LM 局部优化算法的待测参数逆向求解

对于光学散射测量中的逆问题, 采用非线性回归法中的 LM 局部搜索算法对纳米结构的待测参数进行逆向求取, 该算法结合了梯度下降法和高斯-牛顿法, 是一种采用标准数值优化的快速算法^[29]. 不失一般性, 在参数提取过程中, 利用 S 维列向量表示一组需依据评价函数值的大小进行浮动变化的参数, 并记为 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_S]^T$, 其中 x_1, x_2, \dots, x_S 可以表示光栅结构的顶部线宽、线高及侧壁角等待测参数; 将固定不变的参数组成的 L 维列向量记为 $\mathbf{a} = [a_1, a_2, \dots, a_L]^T$, 其中 a_1, a_2, \dots, a_L 可以是测量条件、材料的光学常数, 还可以是纳米结构的已知测量值的几何特征参数, 如薄膜厚度等; 数据拟合时, 采用 χ^2 形式的评价函数来衡量测量和计算得到的椭圆偏参数或者 Mueller 矩阵元素之间的拟合误差.

以 Mueller 矩阵元素为例, 其测量值 $m_{ij,k}^{\text{meas}}$ 和计算值 $m_{ij,k}^{\text{calc}}(\mathbf{x}, \mathbf{a})$ 之间的拟合误差表达式为

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^{N_\lambda} \sum_{i,j=1}^4 \left[\frac{m_{ij,k}^{\text{meas}} - m_{ij,k}^{\text{calc}}(\mathbf{x}, \mathbf{a})}{\sigma(m_{ij,k})} \right]^2, \quad (13)$$

其中下标 i 和 j 表示 Mueller 矩阵元素索引, 这里不包括元素 m_{11} ($m_{11} \equiv 1$); k 表示光谱点索引, N_λ 为总的光谱点个数; $\sigma(m_{ij,k})$ 为测量 Mueller 矩阵元素 $m_{ij,k}$ 的标准差.

为了方便起见, 将测量得到的 Mueller 矩阵元素 $m_{ij,k}^{\text{meas}}$ 记为 y_n , 而将计算得到的 Mueller 矩阵元素 $m_{ij,k}^{\text{calc}}(\mathbf{x}, \mathbf{a})$ 记为 $f_n(\mathbf{x}, \mathbf{a})$, 于是 (13) 式可以写为

$$\chi^2 = \sum_{n=1}^N w_n [y_n - f_n(\mathbf{x}, \mathbf{a})]^2, \quad (14)$$

其中, $w_n = 1/\sigma^2(y_n)$ 为权值因子, $N = 15N_\lambda$. 再将 (14) 式写成矩阵形式:

$$\chi^2 = [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a})]^T \mathbf{W} [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a})], \quad (15)$$

其中, $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_N]^T$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = [f_1(\mathbf{x}, \mathbf{a}), f_2(\mathbf{x}, \mathbf{a}), \dots, f_N(\mathbf{x}, \mathbf{a})]^T$, \mathbf{W} 为由权值因子 w_n 构成的 $N \times N$ 阶对角矩阵, 即 $\mathbf{W} = \text{diag}(1/\sigma^2(y_1), 1/\sigma^2(y_2), \dots, 1/\sigma^2(y_N))$. 因此, 纳米结构光学散射测量中的逆问题可以表述为

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \Omega} \left\{ [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a}^*)]^T \mathbf{W} [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a}^*)] \right\}, \quad (16)$$

其中, $\hat{\mathbf{x}}$ 为最终提取的待测参数值, Ω 为待测参数的取值范围, \mathbf{a}^* 为参数提取过程中向量 \mathbf{a} 的给定值.

对于 (16) 式描述的逆问题, 本文利用 LM 优化算法提取待测参数的流程为: 首先设置一组迭代参数初值 \mathbf{x}_0 , 然后利用所建正向光学特性模型计算出待测纳米结构对应的理论光谱, 通过定义某种评价函数来进行理论计算光谱与测量光谱的比对, 若评价函数值大于其预设的精度值, 则根据一定准则修改当前参数值, 重复上述过程, 直到评价函数值小于预设的精度值时则认为实现了理论计算光谱与测量光谱的最佳拟合, 即可得到待测参数的输出结果 $\hat{\mathbf{x}}$.

3 实验结果与讨论

本文采用的实验仪器是一台由武汉某公司生产的双旋转补偿器 ME-L 型 Mueller 矩阵椭圆偏仪, 其实物图与基本原理图如图 2 所示, $C_{r1}(w_1)$ 为起偏臂的补偿器, $C_{r2}(w_2)$ 为检偏臂的补偿器, 二者在测量时将同步旋转且旋转角频率之比为 5:3^[30]; 仪器测量的光谱范围为 210—1650 nm, 入射角范围为 45°—90° (加聚焦组件入射角范围为 55°—

75°), 样品台可 360° 旋转, 常规光斑直径约为 3 mm (加聚焦组件时光斑直径约为 200 μm), 单次数据测量时间为 1—8 s, 测量参数包括反射率、椭偏参数及 15 个归一化的 Mueller 矩阵元素等。

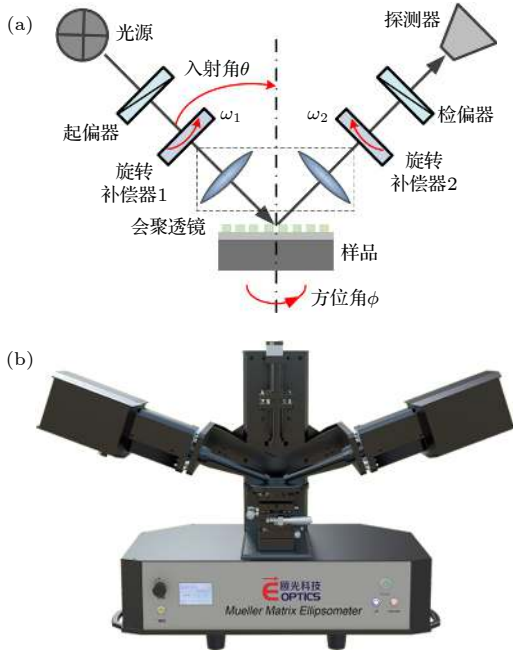


图 2 双旋转补偿器型 Mueller 矩阵椭偏仪 (a) 基本光路; (b) 仪器
Fig. 2. Principle and instrument of the dual rotating-compensator Mueller matrix ellipsometer: (a) Principle; (b) instrument.

实验样品为光栅制作前期工艺中的两个薄膜样品, 样品 1 是基底为标准硅片 (silicon, Si) 的单层二氧化硅 (silicon dioxide, SiO₂) 薄膜结构, 其 SiO₂ 薄膜厚度的名义值为 100 nm, 如图 3(a) 所示; 样品 2 为在上述 SiO₂ 薄膜结构表面旋涂了一层 PMMA 的光刻胶培片, 其 PMMA 薄膜厚度的名义值为 385 nm, 如图 3(b) 所示. 其中, 第 1 个薄膜样品的待测参数包括 SiO₂ 薄膜的厚度值 d_1 、表面粗糙度 c_1 及其光学常数折射率 n_1 和消光系数 k_1 ; 第 2 个样品的待测参数为 PMMA 薄膜的厚度值 d_2 、表面粗糙度 c_2 及其光学常数折射率 n_2 和消光系数 k_2 .

为了分析椭偏仪入射光对 PMMA 光刻胶的影响, 首先, 利用 ME-L 型 Mueller 矩阵椭偏仪在 65° 入射角下分别对图 3 所示的两个薄膜样品进行了 20 次重复性实验, 各获得 20 组椭偏参数测量数据, 由于仪器测量时间以及人工操作的时间消耗, 单次测量过程大约耗时 15 s, 因此每个样品在入射

光下的总暴露时间约为 300 s. 然后, 利用上述 LM 迭代算法分别从每组椭偏参数测量数据中提取出薄膜样品的所有待测参数。

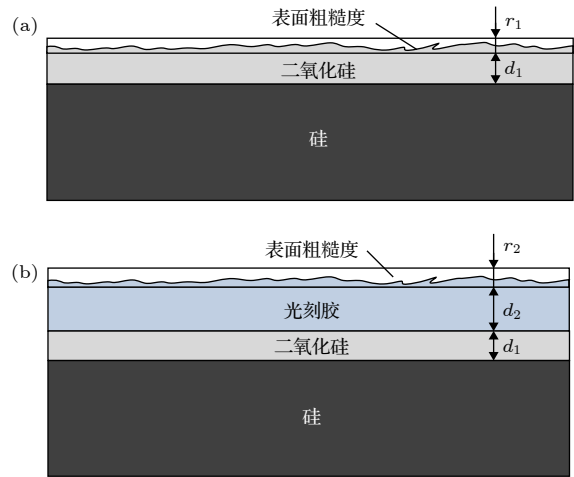


图 3 (a) SiO₂ 薄膜样品; (b) 在 SiO₂ 表面旋涂 PMMA 光刻胶后的薄膜样品
Fig. 3. (a) The SiO₂ sample; (b) the PMMA sample spinning coated on the surface of the SiO₂ film.

在样品 1 的参数提取过程中, 对于 SiO₂ 光学常数中的 n_1 和 k_1 这两个待测参数, 我们采用 Cauchy 模型^[31] 对其进行建模, 通过一个三项式来描述材料的折射率 n_1 , 如 (17a) 式所示; Urbach 尾部的指数吸收则采用 (17b) 式进行描述。

$$n_1 = A_n + 10^{-2} \frac{B_n}{\lambda^2} + 10^{-3} \frac{C_n}{\lambda^4}, \quad (17a)$$

$$k_1 = K_{\text{Amp}} \cdot e^{e_{\text{Exponent}} \cdot \left[1.24 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{\text{Bandedge}}} \right) \right]}, \quad (17b)$$

其中, A_n , B_n 和 C_n 描述折射率的色散; K_{Amp} (K 振幅) 和 e_{Exponent} (指数) 项描述消光系数色散的形状; $\lambda_{\text{Bandedge}}$ 一般设为定值 400 nm. 模型中的 A_n , B_n , C_n , K_{Amp} 和 e_{Exponent} 均为待定系数. 对于样品表面的粗糙结构, 采用麦克斯韦尔-加内特等效介质模型 (maxwell-garnett effective medium approximation, MGEMA)^[32] 将其近似为一层均匀且各项同性的薄膜进行处理. 在此基础上, 将入射条件和基底硅的光学常数等设为已知值, 利用 LM 迭代算法分别对 20 组椭偏测量数据进行待测参数逆向求取, 并采用均方根误差 (mean squared error, MSE)^[33] 来衡量测量与模型计算数据之间的拟合程度, 待测参数包括 d_1 和 r_1 , 光学常数模型参数 $n(\infty)$, E_g , A_i , B_i 和 C_i . 图 4 为 SiO₂ 厚度 d_1 及其表面粗糙层厚度 r_1 的 20 组拟合值; 图 5 分别展示

了第 1, 5, 10, 15 和 20 次所提取得到的各波长下折射率 n_1 与消光系数 k_1 值, 以及文献 [34] 中的 SiO₂ 光学常数变化曲线.

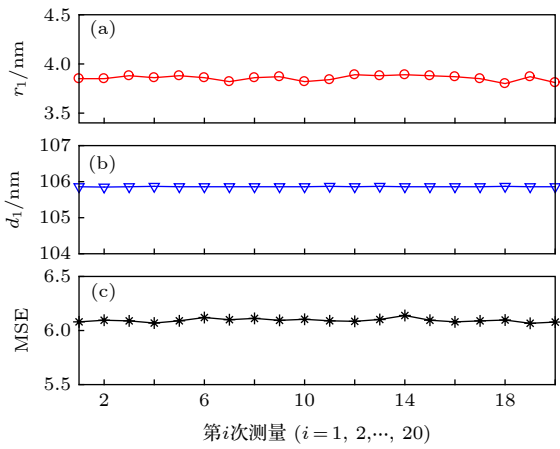


图 4 拟合得到的 20 组 SiO₂ 膜厚 d_1 及其表面粗糙度等效膜厚 r_1 (a) r_1 ; (b) d_1 ; (c) MSE

Fig. 4. Extracted results of the thicknesses of SiO₂ film h_1 and equivalent surface roughness r_1 : (a) r_1 ; (b) d_1 ; (c) MSE.

对样品 2 的待测参数进行逆向提取时, 除了将入射条件 (如入射角、入射波长等)、基底硅的光学常数等设为已知量, 还将 SiO₂ 薄膜层的厚度、光学常数及粗糙度厚度均固定为样件一中 20 组提取结果的平均值; 对于 PMMA 光刻胶光学常数中的 n_2 和 k_2 这两个待测参数, 同样采用 Cauchy 模型对其进行建模, 其表面的粗糙结构也采用 MGEMA

模型将其等效为均匀且各项同性的一层薄膜. 在此基础上, 利用 LM 迭代算法分别对 20 组椭圆偏测量数据进行待测参数逆向求取, 待测参数包括 d_2 和 r_2 , 光学常数模型参数 $n(\infty)$, E_g , A_i , B_i 和 C_i . 图 6 中的蓝色圆圈为 PMMA 光刻胶厚度 d_2 及其表面粗糙层厚度 r_2 的 20 组提取值, 图 7 分别展示了第 1, 5, 10, 15 和 20 次所提取得到的各波长下折射率 n_2 与消光系数 k_2 值. 此外, 将第 1 次提取得到的 PMMA 光学常数作为已知量后, 再从后续的 19 组测量数据中提取出待测参数 d_2 和 r_2 , 其拟合值如图 6 中的红色方形所示.

从图 4 和图 5 可以看出, SiO₂ 薄膜样品折射率 n_1 的提取值与文献 [34] 中的结果几乎保持一致, 且 k 值的差别为 10^{-5} 量级 (由于 k 很小, 可忽略不计, 故文献 [34] 中设定 $k = 0$); SiO₂ 薄膜样品在 20 次重复性测量数据中拟合得到的折射率 n_1 、消光系数 k_2 以及薄膜厚度 d_1 几乎一致, 其表面粗糙度参数 r_1 的变化幅度也不大, 均位于 3.82 nm 左右. 由图 6 和图 7 可得, 随着入射光照射时间的增加, 重复 20 次提取得到的 PMMA 光刻胶折射率 n_2 、消光系数 k_2 、膜厚 d_2 以及表面粗糙度参数 r_2 均存在明显差异, 尤其是第 20 次得到的 k_2 变化更为剧烈, 可能的原因为 PMMA 光刻胶到达一定曝光时间后, 其光学特性进入非线性变化区域 [35]. 其中, 光刻胶厚度 d_2 大约在 380—392 nm 的范围

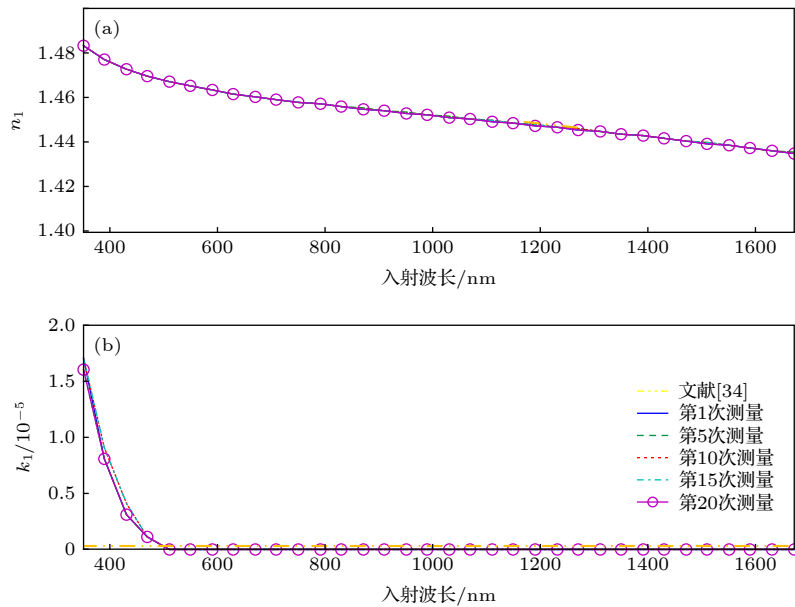


图 5 拟合得到的第 1, 5, 10, 15 和 20 组 SiO₂ 薄膜光学常数 n_1 和 k_1 的计算值, 以及文献 [34] 给出的折射率与消光系数 (a) n_1 ; (b) k_1

Fig. 5. Extracted results of the optical constants n_1 and k_1 of SiO₂ film calculated by Cauchy model and the ones from Ref. [34]: (a) n_1 ; (b) k_1 .

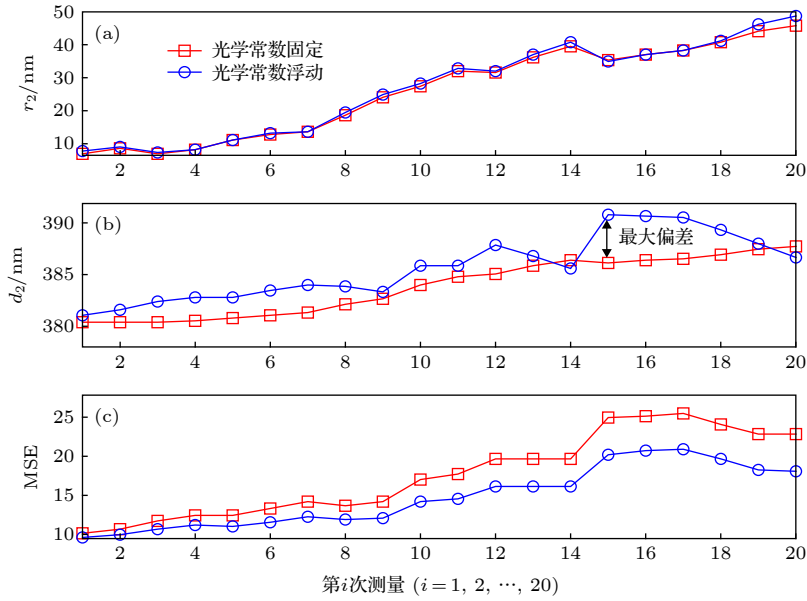


图 6 拟合得到的 20 组 PMMA 膜厚 d_2 及其表面粗糙度等效膜厚 r_2 (a) r_2 ; (b) d_2 ; (c) MSE

Fig. 6. Extracted results of the thicknesses of PMMA film d_2 and equivalent surface roughness r_2 : (a) r_2 ; (b) d_2 ; (c) MSE.

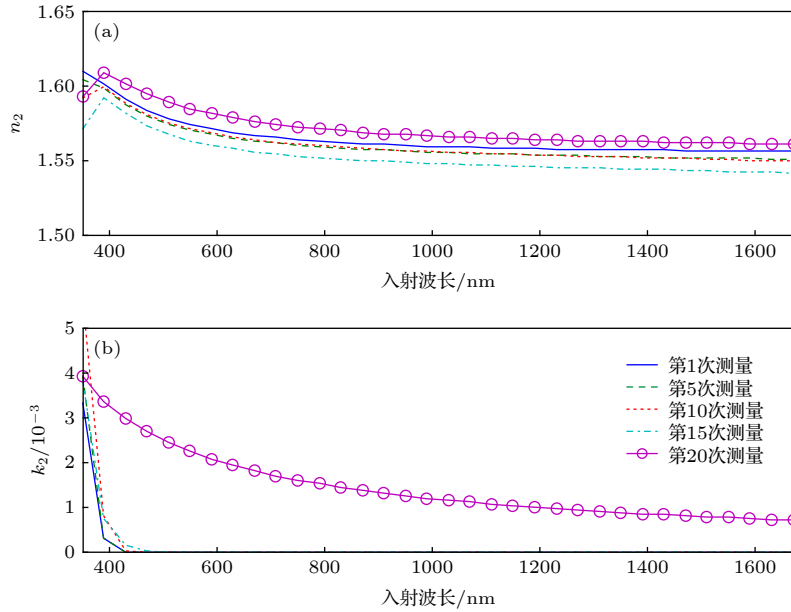


图 7 拟合得到的第 1, 5, 10, 15 和 20 组 PMMA 薄膜光学常数 n_2 和 k_2 的计算值 (a) n_2 ; (b) k_2

Fig. 7. Extracted results of the optical constants n_2 and k_2 of PMMA film calculated by Cauchy model: (a) n_2 ; (b) k_2 .

内上下波动, 而表面粗糙度 r_2 的变化幅度较大且呈现上升趋势, 其第 1 次测量的拟合值为 7.93 nm, 到第 20 次测量时为 48.43 nm, 变化幅度高达 40.5 nm. 对比图 6(a) 中光刻胶光学常数浮动 (蓝色圆圈) 与固定 (红色方形) 的提取结果可得, 光刻胶光学常数的变化对表面粗糙度 r_2 的测量结果影响较小, 而光刻胶厚度 d_2 (红色方形) 明显不同且小于在光学常数浮动时的拟合值 (蓝色圆圈), 二者之间的最大差值达到 3.5 nm. 此外, 在 20 次椭圆

光谱数据的拟合中, 光学常数固定时得到 MSE 值均大于其浮动的结果, 即在光刻胶光学常数浮动时, 达到最佳拟合所对应的模型计算椭圆光谱与仪器测量光谱之间的匹配度更高. 上述实验结果表明, SiO_2 材料不受入射光照射的影响, 而 PMMA 光刻胶薄膜样品, 尤其是其折射率 n_2 和消光系数 k_2 受到显著影响, 若在待测 PMMA 薄膜的光学散射测量中将其作为固定量, 则会较大地降低样品薄膜厚度的测量精确度.

4 仿真结果与讨论

在光栅结构三维形貌的光学散射测量中,为了极大地降低待测参数之间的耦合作用,通常需要事先测量结构刻蚀前的薄膜培片以确定光栅材料的光学常数,从而在逆向提取待测形貌参数时将其设为固定值.为分析 PMMA 光学常数的变化对光栅结构测量结果的影响,以图 8 所示的 PMMA 光刻胶光栅为仿真对象,结合上述 PMMA 薄膜样品的实验结果开展光栅结构待测形貌参数的逆向提取

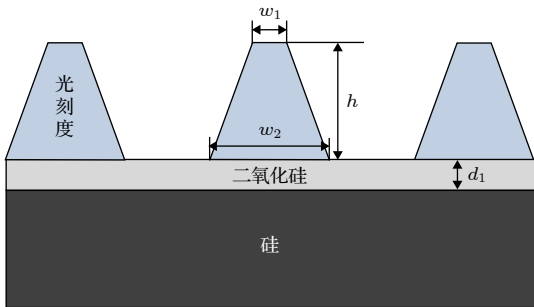


图 8 PMMA 光刻胶仿真光栅的结构示意图
Fig. 8. Geometry of the simulated PMMA grating sample.

研究.图 8 所示的 PMMA 光刻胶光栅是在薄膜样品 2 的基础上刻蚀后得到,其几何形貌参数包括周期 P 、顶部线宽 w_1 、线高 h 以及底部线宽 w_2 .

具体的仿真过程为:假设光栅结构的真实尺寸为 $P = 800 \text{ nm}$, $w_1 = 350 \text{ nm}$, $h = 387.42 \text{ nm}$, $w_2 = 365 \text{ nm}$, PMMA 的光学常数 n_2 和 k_2 均取值为图 7 中的第 20 次拟合结果,硅基底和 SiO_2 薄膜的光学常数、厚度等参数信息均与样品 2 的取值相同;在入射角 $\theta = 65^\circ$ 、方位角 $\varphi = 0^\circ$ 和入射波段为 370—870 nm (步长为 10 nm) 的入射条件下,利用所建立的基于 RCWA 的正向光学特性模型计算得到该 PMMA 光刻胶光栅的一组 Mueller 矩阵元素,并将其看作“测量”光谱数据;在其他参数保持不变的前提下,将 PMMA 光学常数 n_2 和 k_2 的取值替换为图 6 中的第 1 次拟合结果后,以顶部线宽 w_1 、线高 h 和底部线宽 w_2 为浮动的待测参数,利用 LM 迭代寻优算法不断调用正向光学特性模型,并将计算光谱与“测量”光谱进行匹配,当二者实现最佳匹配后所对应的 3 个待测形貌参数的拟合值如表 1 所列,图 9 所示为模型计算与“测量”光谱之间的拟合程度.

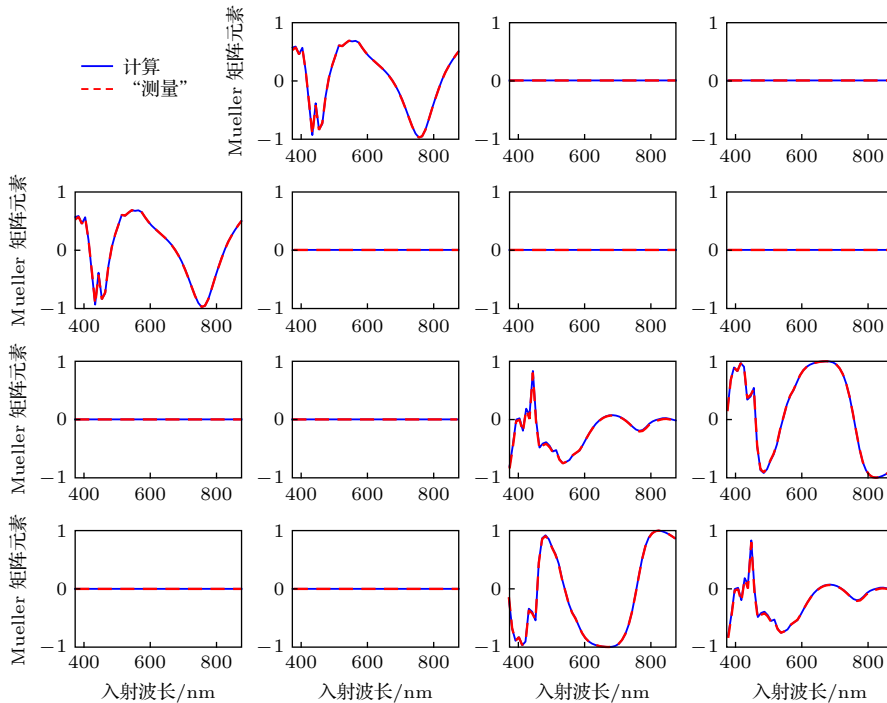


图 9 在入射角 $\theta = 65^\circ$ 、方位角 $\varphi = 0^\circ$ 的入射条件下,PMMA 光刻胶仿真光栅的模型计算 Mueller 矩阵光谱与“测量”光谱之间的拟合曲线

Fig. 9. Fitting results of the calculated and the “ellipsometer-measured” Mueller matrix elements at the incidence and azimuthal angles fixed at $\theta = 65^\circ$ and $\varphi = 0^\circ$.

表 1 对比 PMMA 仿真光栅 3 个待测形貌参数的拟合值与真实值

Table 1. Comparison of these three true dimensions and the extracted results of the simulated PMMA grating.

参数名称	真实值	拟合值	绝对误差
顶部线宽 w_1/nm	350.00	352.90	2.90
线高 h/nm	387.42	387.90	0.50
底部线宽 w_2/nm	365.00	368.50	0.35

由表 1 可得, 在对“测量”光谱进行待测参数提取时, 改变 PMMA 光刻胶光学常数 n_2 和 k_2 的取值后, 3 个结构参数顶部线宽 w_1 、线高 h 和底部线宽 w_2 的提取结果在一定程度上偏离于真实值. 其中, 引起待测形貌参数顶部线宽 w_1 的测量误差为最大, 达到了 2.90 nm. 本文第 3 节中光刻胶薄膜的测量实验研究证明了光刻胶的光学常数受到椭圆偏入射光的照射影响后会发生明显的变化, 这里光刻胶光栅的仿真结果表明了光刻胶光学常数的变化将较大地降低光栅结构几何形貌参数的测量准确度. 因此, 针对半导体制造工业中光刻胶纳米结构的光学散射测量而言, 其光学常数会随着入射光照射时间增加而发生变化这个特性将不能再被忽略, 这对于实现光刻胶纳米结构三维形貌参数的高精度测量具有较为重大的指导意义.

5 结 论

利用 Mueller 矩阵椭圆偏仪分别对 SiO_2 薄膜和 PMMA 光刻胶薄膜进行了包括光学常数、厚度和表面粗糙度的待测参数提取实验研究, 首次发现了 PMMA 光刻胶的光学常数 (折射率和消光系数) 受到入射光的照射影响会发生相应的改变. 结合实验得到的 PMMA 光学常数提取结果, 针对仿真的 PMMA 光刻胶光栅进行了几何形貌参数顶部线宽、线高和底部线宽的逆向提取研究, 结果表明光刻胶光学常数随入射光照射发生的变化对光栅形貌参数提取结果的影响较大, “材料光学常数不随入射光的照射而发生变化”这一假设条件将不再适用. 在后续的研究工作中, 我们将深入研究光刻胶材料折射率和消光系数受入射光照射的影响规律并建立相应的变化模型, 从而可进一步提高光刻胶纳米结构三维形貌参数的测量准确度.

参考文献

[1] Fang F Z, Zhang X D, Gao W, Guo Y B, Byrne G, Hansen H

- N 2017 *CIRP Ann.- Manuf. Technol.* **66** 683
- [2] Liu Y H, Luo J B 2013 *China Basic Sci.* **15** 3 (in Chinese) [刘宇宏, 雒建斌 2013 *中国基础科学* **15** 3]
- [3] Fujiwara H 2007 *Spectroscopic Ellipsometry Principles and Applications* (New York: John Wiley & Sons Inc) pp81–141
- [4] Liu J M, Lin J B, Jiang H, Gu H G, Chen X G, Zhang C W, Liao G L, Liu S Y 2019 *Phys. Scripta* **94** 085802
- [5] Sunkoju S, Schujman S, Dixit D, Diebold A, Li J, Collins R, Haldar P 2016 *Thin Solid Films* **606** 113
- [6] Matthias W, Johannes E, Jürgen P, Max S, Alexander D, Bernd B 2017 *Opt. Express* **25** 2460
- [7] Chen X G, Liu S Y, Zhang C W, Wu Y P, Ma Z C, Sun T Y, Xu Z M 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 180701 (in Chinese) [陈修国, 刘世元, 张传维, 吴懿平, 马智超, 孙堂友, 徐智谋 2014 *物理学报* **63** 180701]
- [8] Huang H T, Kong W, Terry Jr F L 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 3983
- [9] Zhang Z, Xu Z M, Sun T Y, He J, Xu H F, Zhang X M, Liu S Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 168102 (in Chinese) [张铮, 徐智谋, 孙堂友, 何健, 徐海峰, 张学明, 刘世元 2013 *物理学报* **62** 168102]
- [10] Chen X, Zhang C, and Liu S 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 151605
- [11] Liu S, Chen X, and Zhang C 2015 *Thin Solid Films* **584** 176
- [12] Moharam M G, Grann E B, Pommet D A 1995 *J. Opt. Soc. Am. A* **12** 1068
- [13] Zhu J L, Liu S Y, Zhang C W, Chen X G, Dong Z Q 2013 *J. Micro-Nanolith. Mem.* **12** 013004
- [14] Ichikawa H 1998 *J. Opt. Soc. Am. A* **15** 152
- [15] Nakata Y, Koshiha M 1990 *J. Opt. Soc. Am. A* **7** 1494
- [16] Fu K X, Wang Z H, Zhang D Y, Zhang J, Zhang Q Z 1999 *Sci. China Ser. A* **29** 356 (in Chinese) [傅克祥, 王植恒, 张大跃, 张靖, 张奇志 1999 *中国科学(A辑)* **29** 356]
- [17] Moharam M G, Pommet D A, Grann E B, Gaylord T K 1995 *J. Opt. Soc. Am. A* **12** 1077
- [18] Raymond C J, Littau M E, Chuprin A, Ward S 2004 *Proceedings of SPIE Santa Clara, California, United States, May 24, 2004* p564
- [19] Levenberg, K 1944 *Quart. Appl. Math.* **2** 164
- [20] Hanke, M 1997 *Inverse Probl.* **13** 79
- [21] Vagos P, Hu J, Liu Z, Rabello S 2009 *Proc. SPIE* **7272** 72721N
- [22] Littau M, Forman D, Bruce J, Raymond C J, Hummel S G 2006 *Proceedings of SPIE San Jose, California, United States, March 24, 2006* p615236
- [23] Chen X, Liu S, Zhang C, Jiang H, Ma Z, Sun T, Xu Z 2014 *Opt. Express* **22** 15165
- [24] Chen X, Liu S, Zhang C, Jiang H 2013 *J. Micro-Nanolith. Mem.* **12** 033013
- [25] Dong Z, Liu S, Chen X, Zhang C 2014 *Thin Solid Films* **562** 16
- [26] Li Y G, Susumu S 2007 *Microsyst. Technol.* **13** 227
- [27] Li Y G, Yan P, Huang Y, Susumu S 2016 *Infrared Laser Eng.* **45** 0620001 (in Chinese) [李以贵, 颜平, 黄远, 杉山进 2016 *红外与激光工程* **45** 0620001]
- [28] Li L 1996 *J. Opt. Soc. Am. A* **13** 1870
- [29] Marquardt D 1963 *J. Soc. Indust. Appl. Math.* **11** 431
- [30] Collins R W, Koh J 1999 *J. Opt. Soc. Am. A* **16** 1997
- [31] Shekar P V, Latha D M, Pisipati V G K M 2017 *Opt. Mater.* **64** 564
- [32] Zhang Y H, Zhou X Q, Cao K, Chen X G, Deng Z, Liu S Y, Shan B, Chen R 2015 *Thin Solid Films* **593** 144
- [33] Nidamanuri R R, Zbell B 2010 *Prog. Phys. Geog.* **34** 47
- [34] Herzinger C M, Johs B, McGahan W A, Woollam J A,

Influence of incident illumination on optical scattering measurement of typical photoresist nanostructure*

Dong Zheng-Qiong¹⁾ Zhao Hang¹⁾ Zhu Jin-Long²⁾ Shi Ya-Ting^{2)†}

1) (*Hubei Key Laboratory of Manufacture Quality Engineering, Hubei University of Technology, Wuhan 430068, China*)

2) (*State Key Laboratory for Digital Manufacturing Equipment and Technology, Huazhong University of*

Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(Received 8 October 2019; revised manuscript received 27 November 2019)

Abstract

Optical scatterometry, as a fast, low-cost, and non-contact measurement instrument, is widely used in the profile characterization of nanostructure in the semiconductor manufacturing industry. In general, it involves two procedures, i.e. the forward optical modeling of sub-wavelength nanostructures and the reconstruction of structural profiles from the measured signatures. Here, the general term signature means the scattered light information from the diffractive grating structure, which can be in the form of reflectance, ellipsometric angles, Stokes vector elements, or Mueller matrix elements. The profile reconstruction process is an inverse problem with the objective of optimizing a set of floating profile parameters (e.g., critical dimension, sidewall angle, and height) whose theoretical signatures can best match the measured ones through regression analysis or library search.

During solving the inverse problem, the refractive index and distinction coefficient of the material of nanostructure are assumed to be constants and they are generally fixed. This assumption is valid for most of the materials in semiconductor industry, but not for certain materials that are very photosensitive. That is, the optical constants of photosensitive materials may vary with the illumination time of the incident light beam in spectroscopic ellipsometer, and the error caused by the variation of optical constants propagates to the final extracted results of structural profiles, which should not be neglected, especially for high precision and accuracy metrology.

Experiments performed on SiO₂ and polymethyl methacrylate (PMMA) thin films are conducted and demonstrate that the extracted geometric parameters and optical constants of SiO₂ film do not change with illumination time increasing, while the twenty groups of values of extracted refractive index n and distinction coefficient k of PMMA resist film vary obviously, and the difference between the extracted maximum and minimum film thickness has reached 40.5 nm, which to some extent illustrates that the above assumption is not valid for PMMA resist, so that the incident light beam of spectroscopic ellipsometer has a great influence on the extracted film thickness. Further, simulations based on a three-dimensional PMMA grating also indicate that the error of optical constant has considerably transferred to the extracted profile parameters. This finding is of significance for improving the accuracy of nanostructure characterization in optical scatterometry.

Keywords: optical scatterometry, photoresist nanostructure, polymethyl methacrylate, optical constant

PACS: 06.20.-f, 07.60.Fs, 62.23.St, 79.60.Jv

DOI: 10.7498/aps.69.20191525

* Project supported by the Natural Science Foundation of Hubei Province of China (Grant Nos. 2018CFB290, 2018CFB559), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant Nos. 2016M602269, 2019M652633), and the National Science and Technology Major Project of China (Grant No. 2017ZX02101006-004).

† Corresponding author. E-mail: yatingshi@hust.edu.cn