

文章编号: 1001-3806(2016)02-0250-04

1 维微纳米周期结构的散射测量建模

尚海, 党学明*

(合肥工业大学 仪器科学与光电工程学院, 合肥 230009)

摘要: 为了研究散射测量的正向测量依据, 采用严格耦合波分析理论, 对 1 维矩形面型周期性结构衍射建模, 在 MATLAB 环境下实现严格耦合波分析算法, 并讨论了 1 维周期结构高度、线宽和占空比的测量特性, 理论上线宽的测量可以达到纳米级分辨率。结果表明, 严格耦合波分析理论精确和高效, 对 1 维微纳米周期结构表现出了良好的测量特性。这为散射测量提供了科学性和可行性依据。

关键词: 散射; 微纳米测量; 严格耦合波分析; 光栅

中图分类号: O436.2 **文献标志码:** A **doi:** 10.7510/jgjs.issn.1001-3806.2016.02.021

Model of scattering measurement for 1-D micro- and nano-periodic structure

SHANG Hai, DANG Xueming

(School of Instrument Science and Opto-electronics Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: In order to study the forward measurement principle of scattering measurement, the diffraction model of 1-D periodic rectangular structure was made by rigorous coupled-wave analysis (RCWA) algorithm and programmed by MATLAB. Measurement characteristics of height, linewidth and duty cycle for 1-D periodic structure were thoroughly discussed. In theory, the measurement resolution of linewidth could achieve nanometer level. The results show that RCWA algorithm could achieve accurate and efficient purpose and its good measurement properties for 1-D periodic micro- and nano-structure provide a scientific and feasible basis for scattering measurement.

Key words: scattering; micro- and nano- measurement; rigorous coupled-wave analysis; grating

引言

光学散射测量具有快速、无接触、非破坏、低成本等优点, 主要解决半导体加工、机电系统等行业在线尺寸测量问题, 是目前关键尺寸测量研究热点^[1-7]。散射测量是一种基于模型的对比测量方法^[8], 其测量过程是一个典型的逆问题求解过程, 成功与否主要取决于两个关键技术: 一是“正向”光学建模及其快速求解方法; 二是“反向”几何参量求解及其快速算法。正向求解是在给定光学入射条件和几何结构参量下, 通过电磁场建模理论求取仿真光谱数据。反向几何参量求解则是在获取测量实验数据前提下, 运用光谱库匹配和非线性回归等逆求方法实现结构几何参量的提取。在这一过程中需要将实际测得的数据与正向建模得到的理论光谱数据进行对比, 若比对误差较大, 则调整正向建模的输入结构参量重新进行下一轮比对, 直到比

对误差在允许范围内, 此时正向建模的输出参量即为逆求输出参量, 实现测量。

严格耦合波分析 (rigorous coupled-wave analysis, RCWA) 是一种直接有效的电磁波矢量理论^[9-15], 其对周期性结构建模分析的基本思路是: 在光栅区域严格求解麦克斯韦方程, 将麦克斯韦方程的求解问题化为一个求特征函数的问题, 得到光栅区域由特征函数耦合起来的电磁场表达式, 再在光栅区域与其它区域的交界面上求解边界条件得到最终衍射效率值。RCWA 理论可针对任意光栅结构进行建模且精度较高, 特别适合无限周期结构的光学特性建模和光学散射测量。

1 模型的建立

如图 1 所示, 对于光栅结构, 可按图示分为 3 个区域: 入射及反射区域 I ($z < 0$), 其折射率为 n_1 ; 透射区域 II ($z > d$), 其折射率为 n_2 ; 光栅区域 G ($0 < z < d$), 无介质填充部分的折射率为 n_g , 有介质填充部分的折射率为 n_r 。光栅周期为 Λ , 占空比为 f , 线高为 d 。对于入射光线, 入射波波矢所在的铅垂面与 x - z 平面夹角形成方位角 Φ , 其取值范围为 0° 到 360° 。入射光的入射角为 θ , 它的取值范围理论上为 $-90^\circ \sim 90^\circ$, 实

基金项目: 国家科技支撑计划资助项目(2012KJZC0133)

作者简介: 尚海 (1988-), 男, 硕士研究生, 研究方向为精密测量技术与仪器、嵌入式系统。

* 通讯联系人。E-mail: dangxm@ustc.edu

收稿日期: 2015-01-07; 收到修改稿日期: 2015-03-06

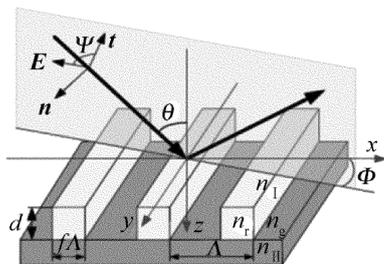


Fig. 1 Diffraction model of 1-D rectangular periodic structure

实际则根据具体情况而定。入射波电矢量与波矢间夹角为偏振角, 记为 Ψ 。当 $\Psi=0^\circ$, 即电矢量在入射平面内时, 为 TM 偏振; 而当 $\Psi=90^\circ$, 即电矢量与入射平面法向量平行时, 为 TE 偏振。

入射光束从入射媒质中射入, 入射的归一化矢量可表示为:

$$\mathbf{E}_{inc} = \mathbf{u} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) = \mathbf{u} \exp[-ik_0 n_1 \times (\sin\theta \cos\Phi x + \sin\theta \sin\Phi y + \cos\theta z)] \quad (1)$$

式中, \mathbf{u} 为归一化的入射电矢量, \mathbf{k} 为入射波波矢, \mathbf{r} 为平面波波面上任意点的矢量位置, \mathbf{k}_0 为入射光束在真空中的波矢, 其大小为 $k_0 = 2\pi/\lambda$ 。

区域 I 内的电场矢量为入射的电场加上各级反射波电场之和, 而区域 II 中的电场则为各级透射波电场之和:

$$\mathbf{E}_I = \mathbf{E}_{inc} + \sum_i \mathbf{R}_i \exp[-i(k_{xi}x + k_{yi}y - k_{1,zi}z)] \quad (2)$$

$$\mathbf{E}_{II} = \sum_i \mathbf{T}_i \exp\{-i[k_{xi}x + k_{yi}y + k_{II,zi}(z-d)]\} \quad (3)$$

式中, \mathbf{R}_i 为归一化后第 i 级反射波的复振幅矢量, 而 \mathbf{T}_i 则为归一化后第 i 级透射波的复振幅矢量; $k_{xi}, k_{yi}, k_{1,zi}$ 和 $k_{II,zi}$ 分别为第 i 级波矢分量系数值。入射区和透射区的磁场分量可由麦克斯韦方程组求得。

在光栅区域 G 内, 电场矢量和磁场矢量同样可以用傅里叶级数展开为空间谐波的叠加:

$$\mathbf{E}_G = \sum_i [S_{xi}(z)\mathbf{x} + S_{yi}(z)\mathbf{y} + S_{zi}(z)\mathbf{z}] \times \exp[-i(k_{xi}x + k_{yi}y)] \quad (4)$$

$$\mathbf{H}_G = -i \left(\frac{\epsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \sum_i [U_{xi}(z)\mathbf{x} + U_{yi}(z)\mathbf{y} + U_{zi}(z)\mathbf{z}] \exp[-i(k_{xi}x + k_{yi}y)] \quad (5)$$

式中, ϵ_0 为真空介电常数, μ_0 为真空磁导率, $S_i(z)$ 和 $U_i(z)$ 分别为归一化的第 i 级空间谐波的电场复振幅大小和磁场复振幅大小。电磁场耦合满足麦克斯韦方程:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}_G = -i\omega\mu_0\mathbf{H}_G \\ \nabla \times \mathbf{H}_G = i\omega\epsilon_0\epsilon(x)\mathbf{E}_G \end{cases} \quad (6)$$

式中, ω 为角频率。分别将(4)式和(5)式中的电场矢量和磁场矢量及介电常数代入(6)式中计算并化简得:

$$\begin{cases} \dot{S}_x = -k_0 U_y - iK_x S_z \\ \dot{S}_y = k_0 U_x - iK_y S_z \\ ES_z = i \frac{K_x}{k_0} U_y - i \frac{K_y}{k_0} U_x \\ \dot{U}_x = -k_0 ES_y - iK_x U_z \\ \dot{U}_y = k_0 ES_x - iK_y U_z \\ U_z = i \frac{K_x}{k_0} S_y - i \frac{K_y}{k_0} S_x \end{cases} \quad (7)$$

式中, 上标加“ \cdot ”表示求 1 阶偏导数; $\mathbf{K}_x, \mathbf{K}_y$ 都是 N 维对角阵, 对角线上的元素为 k_{xi} 和 k_{yi} ; \mathbf{E} 为误差矩阵。(7)式中的 6 个公式是严格而非近似的表述方式。但是在计算的过程中, 所考虑的谐波数 N 不能取无穷大, 而是一个有限大小的数值, N 的大小不仅决定了截断误差的大小, 对计算效率的影响也很大。 N 越大, 截断误差就越小, 但是计算效率就越低; 反之亦然。

将方程组化简到最简形式:

$$\ddot{S}_x = (\mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x \mathbf{E} - k_0^2 \mathbf{E} + \mathbf{K}_y^2) S_x \quad (8)$$

$$\ddot{U}_x = (\mathbf{K}_x^2 + \mathbf{K}_y^2 - k_0^2 \mathbf{E}) U_x \quad (9)$$

式中, 上标加“ $\ddot{\cdot}$ ”表示求 2 阶偏导数。求解得到 S_x 和 U_x , 从而确定光栅中电磁场的振幅大小。

用本征值法进行求解(8)式。定义矩阵: $\mathbf{A} = \mathbf{K}_x \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}_x \mathbf{E} - k_0^2 \mathbf{E}$, 则:

$$\ddot{S}_x = (\mathbf{K}_y^2 + \mathbf{A}\mathbf{E}) S_x \quad (10)$$

设 \mathbf{W}_S 为矩阵 $\mathbf{K}_y^2 + \mathbf{A}\mathbf{E}$ 的特征向量矩阵, 矩阵 $\mathbf{K}_y^2 + \mathbf{A}\mathbf{E}$ 的特征向量组成一组完备的向量基底, 那么 S_x 则可以由 $\mathbf{K}_y^2 + \mathbf{A}\mathbf{E}$ 的特征向量来表示:

$$S_x = \sum_n C_n(z) \mathbf{W}_{S,n} \quad (11)$$

式中, $C_n(z)$ 为待定系数, 而 $\mathbf{W}_{S,n}$ 为矩阵 $\mathbf{K}_y^2 + \mathbf{A}\mathbf{E}$ 的特征向量。将(11)式代入(10)式中得:

$$\sum_n \ddot{C}_n(z) \mathbf{W}_{S,n} = \sum_n C_n(z) (\mathbf{K}_y^2 + \mathbf{A}\mathbf{E}) \mathbf{W}_{S,n} = \sum_n C_n(z) \lambda_{S,n} \mathbf{W}_{S,n} \quad (12)$$

式中, $\lambda_{S,n}$ 为矩阵 $\mathbf{K}_y^2 + \mathbf{A}\mathbf{E}$ 对应特征向量 $\mathbf{W}_{S,n}$ 的特征值。在去掉求和符号后, 求解得:

$$\begin{aligned} C_n(z) &= C_{n1} \exp[\sqrt{\lambda_{S,n}}(z-d)] + \\ &C_{n2} \exp[\sqrt{\lambda_{S,n}}(-z)] \end{aligned} \quad (13)$$

将上式代入(11)式中得:

$$S_x = \sum_n \left\{ C_{n1} \exp[\sqrt{\lambda_{S,n}}(z-d)] + \right.$$

$$C_{n2} \exp[\sqrt{\lambda_{s,n}(-z)}] \} W_{s,n} \quad (14)$$

用相同方法求解 U_x , 进一步求得 U_y, S_y 。光栅区域的电场和磁场都可求出。

在区域 I 和光栅区以及光栅区与区域 II 的交界处, 结合电场矢量与磁场矢量的连续条件, 另外由电场矢量与波矢的正交条件:

$$\begin{cases} K_x R_x + K_y R_y + K_{1,z} R_z = 0 \\ K_x T_x + K_y T_y + K_{1,z} T_z = 0 \end{cases} \quad (15)$$

通过消元法求解(2)式、(3)式, 得到 R, T 。

光的衍射效率是衍射光与入射光能量的百分比。第 i 级反射光的衍射效率和透射光的衍射效率分别为:

$$E_{r,i} = \text{Re} \left(\frac{k_{1,zi}}{k_1 \cos \theta} \right) (|R_{i,x}|^2 + |R_{i,y}|^2 + |R_{i,z}|^2) \quad (16)$$

$$E_{t,i} = \text{Re} \left(\frac{k_{2,zi}}{k_2 \cos \theta} \right) (|T_{i,x}|^2 + |T_{i,y}|^2 + |T_{i,z}|^2) \quad (17)$$

2 严格耦合波分析算法程序实现

在 MATLAB 环境下, 采用面向过程的编程方法实现算法。算法的流程图如图 2 所示。

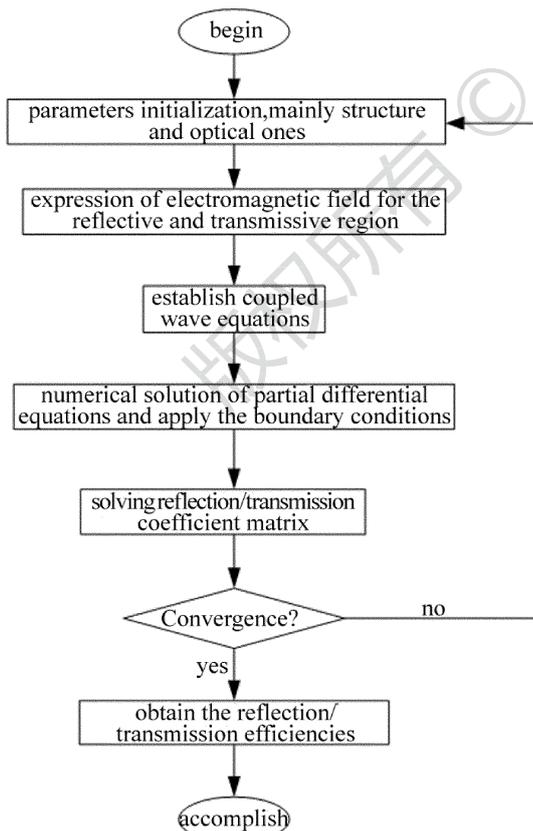


Fig. 2 Flow chart of RCWA algorithm

3 仿真结果及讨论

测量过程中入射激光波长 $\lambda = 405\text{nm}$, 方位角 $\Phi = 0^\circ$, 入射角 $\theta = [-30^\circ, 30^\circ]$; 光栅周期 $\Lambda = 0.500\mu\text{m}$, 占空比 $f = 0.5$, 线高 $d = 1.000\mu\text{m}$, $n_1 = 1$, $n_2 = 0.22 + 6.71i$, $n_g = n_1$, $n_r = n_2$ 。由散射测量的基本原理可知, 测量主要是寻求在特定的谐波数下, 反射效率与角度的函数关系。谐波数的选取要兼顾算法的精确性与快速性。通过算法评估, 选取 $N = 41$ 作为谐波数。以 TE 模为例, 针对光栅的高度、线宽和占空比, 完成对它们测量特性的评估。

3.1 高度测量特性

以光栅高度 $d = 1.000\mu\text{m}$ 为测量参照, 分别扩展到 $\pm 10\text{nm}$ 和 $\pm 1\text{nm}$, 记录每种情形下反射效率与入射角度关系, 如图 3 所示。

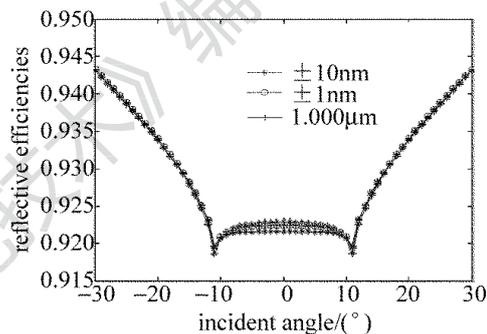


Fig. 3 Reflective efficiency vs. incident angle at different grating heights

由图 3 可知, 不同高度对应曲线都是以零度角为中心呈轴对称分布的; 衍射效率大致是从大到小, 再从小到大的分布; 不同高度对应曲线变化趋势相同且曲线高度重合, 即反射效率曲线对高度变化不敏感。

3.2 线宽测量特性

以周期为 $0.500\mu\text{m}$ 为测量参照, 分别扩展到 $\pm 10\text{nm}$ 和 $\pm 1\text{nm}$, 记录每种情形下反射效率与入射角度关系, 如图 4 所示。

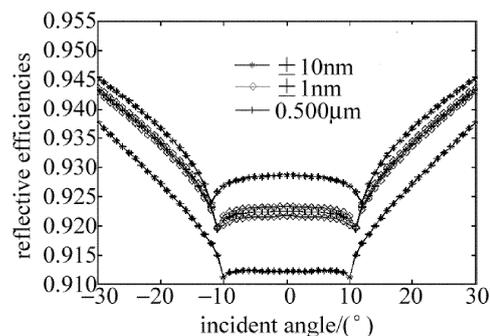


Fig. 4 Reflective efficiency vs. incident angle at different grating widths

由图 4 可知, 线宽测量曲线的特点和变化趋势与高度测量曲线类似; 线宽测量曲线对线宽变化敏感, 尤其是在角度范围为 $[-10^\circ, 10^\circ]$ 时, 理论上讲, 能达到

纳米级分辨率,但这要求实际测量装置能达到 1/1000 的分辨率。

3.3 占空比测量特性

分别取占空比为 0.4, 0.5 和 0.6, 记录每种情形下反射效率与入射角度关系, 如图 5 所示。

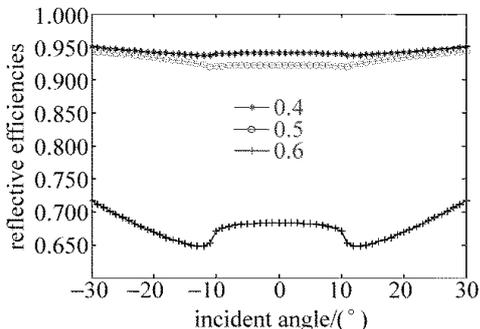


Fig. 5 Reflective efficiency vs. incident angle at different duty cycles

由图 5 可知, 占空比测量曲线的特点和变化趋势与高度的类似, 曲线对不同的占空比敏感, 具有很强的分辨能力, 尤其是占空比为 0.5 和 0.6 时, 这一点表现得特别明显。但由于反射效率之和要受到上限的影响, 故而在占空比为 0.4 和 0.5 时, 分辨能力相对较弱。占空比的不同, 本质上是线宽的不同, 故而不同占空比间相对较强的分辨能力, 是由于大线宽差异造成的, 这一点又反过来利于线宽在更小差异下的测量, 增强了其分辨能力。

4 结 论

RCWA 理论在分析周期性微纳米结构衍射效率方面, 体现出精确性与快速性。将其应用于散射场显微镜的建模上, 又体现出优异的测量特性, 主要表现在 3 个方面: (1) 高度测量曲线对高度变化不敏感, 这就避免了因为高度变化而引起线宽测量的交叉敏感; (2) 占空比曲线的分辨能力很强, 同时占空比的取值也较离散, 这样利于快速准确地判断测量对象的占空比, 为进一步确定线宽值和提提高线宽测量分辨率打下基础; (3) 线宽测量曲线对线宽变化很敏感且规律, 理论上能达到纳米级分辨率, 这就为线宽的散射测量法提供了根本保证。但系统实际测量能力不仅依赖于测量理论的参量输出, 还与测量装置的测量能力和精度有关。

参 考 文 献

- [1] SOHN Y J, QUINTANILHA R, BARNES B M, *et al.* 193nm angle-resolved scatterfield microscope for semiconductor metrology[J]. Proceedings of the SPIE, 2009, 7405: 74050R.
- [2] SOHN Y J, QUINTANILHA R, HOWARD L, *et al.* Analysis of Köhler illumination for 193nm scatterfield microscope[J]. Proceedings of the SPIE, 2009, 7272: 72723T.
- [3] QUINTANILHA R, SOHN Y, BARNES B M, *et al.* Critical dimension measurements using a 193nm scatterfield microscope [J]. Proceedings of the SPIE, 2009, 7390: 73900S.
- [4] BARNES B M, PATRICK H J, BISHOP M R, *et al.* Optical critical dimension measurement of silicon grating targets using back focal plane scatterfield microscopy[J]. Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS, 2008, 7(1): 013012.
- [5] PATRICK H J, ATTOTA R, BARNES B M, *et al.* Scatterfield microscopy using back focal plane imaging with an engineered illumination field[J]. Proceedings of the SPIE, 2006, 6152: 61520J.
- [6] SHYU D M, KU Y Sh, HSU W T. Angle-resolved scatterfield microscope for linewidth[J]. Proceedings of the SPIE, 2009, 7272: 72721L.
- [7] HSU W T, KU Y Sh, SHYU D M. A novel method for overlay measurement by Scatterometry[J]. Proceedings of the SPIE, 2009, 7432: 74320F.
- [8] MA Y. Implementation and application of rigorous coupled wave analysis in opticalscatterometry [D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2012; 8-17 (in Chinese).
- [9] CHEN D W. Rigorous coupled-wave analysis method for diffractive optics [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2004; 8-22 (in Chinese).
- [10] MOHARAM M G, POMMET D A, GRANN E B, *et al.* Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings enhanced transmittance matrix approach [J]. Journal of the Optical Society of America, 1995, 12(5): 1077-1086.
- [11] MOHARAM M G, GRANN E B, POMMET D A, *et al.* Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings [J]. Journal of the Optical Society of America, 1995, 12(5): 1068-1076.
- [12] LI L F. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures [J]. Journal of the Optical Society of America, 1996, 13(9): 1870-1876.
- [13] CAI T, SANG T, ZHAO H. Coupled-wave analysis, numerical calculation and discussion for diffraction properties of grating [J]. Opto-Electronic Engineering, 2010, 37(4): 141-146 (in Chinese).
- [14] LIU Q, WU J H. Analysis and comparison of the scalar diffraction theory and coupled-wave theory about grating [J]. Laser Journal, 2004, 25(2): 31-34 (in Chinese).
- [15] YIN Q Y, WU J H, QIAN G L, *et al.* Comparison of approximation between rigorous coupled-wave theory and Kogelnik's coupled wave theory [J]. Optics & Optoelectronic Technology, 2008, 6(4): 25-28 (in Chinese).