

# 基于灵敏度分析的一维纳米结构光学散射 测量条件优化配置

董正琼, 刘世元, 陈修国\*, 石雅婷, 张传维, 江 浩

(华中科技大学 机械科学与工程学院数字制造装备与技术国家重点实验室, 湖北 武汉 430074)

**摘要:** 在光学散射测量中,除了实际测量光谱的质量外,模型的输出光谱对待测纳米结构参数的灵敏度也对最终测量结果的精度具有重大影响。由于不同的测量配置(入射波长、入射角和方位角的组合)下,纳米结构参数的灵敏度会不同,因此提出了一种基于灵敏度分析的测量条件优化配置方法来改善待测参数的灵敏度,以实现更高精度的纳米结构测量。实验表明,在理论预估的最优测量配置下,一维纳米结构所有待测参数的测量精确最优,验证了其有效性。

**关 键 词:** 光学散射测量; 灵敏度; 测量配置; 精度

**中图分类号:** O433.1    **文献标识码:** A

## Optimization of measurement configuration in optical scatterometry for one-dimensional nanostructures based on sensitivity analysis

DONG Zheng-Qiong, LIU Shi-Yuan, CHEN Xiu-Guo\*, SHI Ya-Ting, ZHANG Chuan-Wei, JIANG Hao  
(Huazhong University of Science and Technology, School of Mechanical Science and Engineering State Key Laboratory  
of Digital Manufacturing Equipment and Technology, Wuhan 430074, China)

**Abstract:** In optical scatterometry, the sensitivity has a significant impact on the precision of the extracted structural parameters in addition to the quality of the measured signatures. As the sensitivity of structural parameters can be improved with the proper selection of measurement configuration (a combination of wavelengths, incidence, and azimuthal angles), we proposed a method to determine an optimal one for optical scatterometry based on sensitivity analysis. Experiments performed on a one-dimensional periodic grating show agreement between the theoretically predicted and experimentally obtained optimal measurement configurations, which demonstrates the validity of the proposed optimization method.

**Key words:** optical scatterometry, sensitivity analysis, measurement configuration, precision

**PACS:** 42.25.Fx, 06.20.Dk

## 引言

纳米制造是指产品特征尺寸为纳米量级的制造技术,即特征尺寸在 100 nm 以内的制造技术。为了实现纳米制造工艺的可操纵性、可预测性、可重复性和可扩展性,保证基于纳米科技的产品满足可靠性、

一致性、经济性及规模化生产等多方面的要求,在纳米制造过程中对纳米结构的几何特征参数进行快速、低成本、非破坏性的精确测量具有十分重要的意义<sup>[1-2]</sup>。以集成电路(IC)制造工艺为例,目前纳米级关键尺寸的测量主要采用关键尺寸扫描电镜(CD-SEM)和关键尺寸原子力显微镜(CD-AFM)<sup>[3]</sup>。尽管

收稿日期:2015-03-17,修回日期:2015-07-17

Received date: 2015-03-17, revised date: 2015-07-17

基金项目:国家自然科学基金(51475191 和 51405172);国家重大科学仪器设备开发专项(2011YQ160002);中国博士后科学基金(2014M560607 和 2015T80791);教育部长江学者创新团队(IRT13017)

**Foundation items:** Supported by National Natural Science Foundation of China (51475191 and 51405172); National Instrument Development Specific Project of China (2011YQ160002); China Postdoctoral Science Foundation (2014M560607 and 2015T80791); and Program for Changjiang Scholars and Innovative Research Team in University of Ministry of Education of China (IRT13017)

**作者简介(Biography):** 董正琼(1987-),女,湖北潜江人,讲师,博士,主要研究领域为纳米光波测量及仪器开发。E-mail: zhqdong@hust.edu.cn

\* 通讯作者(Corresponding author): E-mail: xiuguochen@hust.edu.cn

这些手段可以突破到纳米量级的测量,但其显著缺点是速度慢、成本高,特别是难以集成到工艺线。与之相反,光学散射测量方法具有速度快、成本低、无接触、非破坏和易于集成等优点,因而在先进工艺监测与优化控制领域获得了广泛应用,如 IC 制造中用于关键尺寸测量的光学散射仪(Optical Scatterometry)技术<sup>[4]</sup>。

基于光学散射仪的纳米结构测量并不是一种“所见即所得”的测量方法,其本质上是一种基于模型的测量方法<sup>[5]</sup>。因此,待测纳米结构参数的测量精度不仅取决于实际测量光谱的质量,还取决于理论模型的输出光谱对纳米结构待测参数的灵敏度<sup>[6]</sup>。实际测量光谱中的噪声越小,模型中纳米结构参数的灵敏度越高,则待测结构参数的提取精度越好。由于测量光谱的质量基本取决于测量仪器本身,一般无法轻易改变;而纳米结构参数的灵敏度可以通过改变测量条件配置(测量条件入射波长、入射角和方位角的组合)得到改善<sup>[7-8]</sup>。因此,分析模型中输出光谱对纳米结构参数的灵敏度,并结合实际的光谱数据测量误差进行测量条件的优化配置,对实现纳米结构的高精度测量具有重要意义。

灵敏度分析是一种定性或定量地评价模型参数不确定性对模型输出影响的方法。其中,定性灵敏度法只是定性地评估模型各参数的不确定性对模型输出影响的相对大小,而定量灵敏度法则是定量地给出了各参数的不确定性对模型输出结果不确定性的影响值。近年来,已经有很多学者基于灵敏度分析开展了纳米结构光学散射测量中的测量条件优化配置方法研究。例如,2002 年 Logofătu 提出了一种灵敏度分析方法(SAF, Sensitivity Analysis for Fitting)用于优化旋转起偏器型角分辨椭偏仪和相位调制型角分辨椭偏仪的测量配置<sup>[9]</sup>;2006 年,顾逸霞等基于定性灵敏度法观察选取了角分辨椭偏仪的入射角范围,使得所选范围内的输出光谱对纳米结构参数的微小变化均比较灵敏,与采用全入射角范围测量相比,不仅提高了待测结构参数的测量精确度并且缩短了测量时间<sup>[10]</sup>;2009 年,Vagos 等人开发了一种不确定度与灵敏度分析(U&SA)软件包可以用于优化光学特性模型及方位角<sup>[11]</sup>。总体来看,目前现有的优化方法中大多数都是基于定性灵敏度分析,而且只能单独地针对每个待测结构参数进行优化,无法实现纳米结构所有待测参数的统一最优测量配置。鉴于此,提出了一种基于定量灵敏度分析的测量条件优化配置方法,通过结合实际的测量误差与灵

敏度分析结果定量地给出了各待测结构参数的不确定度估计值,在此基础上以所有待测参数的相对不确定度之和作为优化目标函数,从而实现纳米结构不同待测参数的综合最优化测量配置。

## 1 理论与方法

### 1.1 光学散射测量基本原理

如图 1 所示,光学散射测量的基本原理是通过测量待测纳米结构的零级衍射光在反射前后偏振状态的变化(包括振幅比和相位差),并与光学特性模型计算的振幅比和相位差进行比较,从而反演并提取出待测纳米结构的关键尺寸等参数<sup>[12]</sup>。光学散射测量主要包括以下两个方面的关键技术:一是“正向”光学特性建模及其快速求解方法;二是“反向”几何特征参数求解及其快速算法<sup>[13]</sup>。正向求解是依据已知的光学入射条件和几何参数尺寸,采用电磁场建模理论获得待测纳米结构的仿真光谱数据,对于周期性纳米结构,如光栅结构的光学特性可以采用严格耦合波分析(rigorous coupled-wave analysis, RCWA)方法进行建模求解<sup>[14-15]</sup>;反向几何参数求解则通过运用库匹配或非线性回归等逆求算法将实际测量光谱与模型计算光谱进行拟合,二者实现最佳匹配时即可反演得出纳米结构的待测参数值<sup>[16-17]</sup>。光学散射测量的本质是一种基于模型的测量方法,其正向模型是一个输入与输出间的传递特性为高度复杂且非线性变化的数学模型,对于这类复杂非线性测量系统,待测参数一般无法通过某种显式表达直接从测量数据中提取,只能通过逆问题求解方法进行待测参数提取。由此可见,光学散射测量中往往涉及到大量复杂的科学计算特别是数值计算问题,为了突出这一点,我们通常又将这类基于模型的测量方法称之为“计算测量”<sup>[18-19]</sup>。

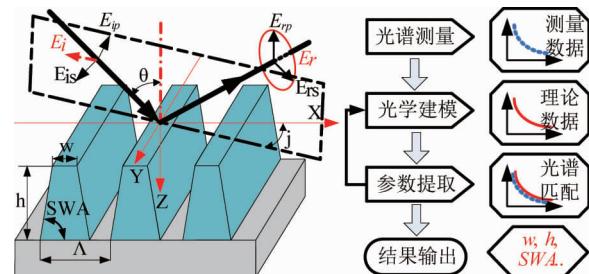


图 1 光学散射测量基本原理

Fig. 1 Basic principle of optical scatterometry

## 1.2 测量条件优化配置方法

不失一般性,将光学散射测量中的纳米结构待测参数和测量条件配置分别记为向量  $\mathbf{x}$  和  $\mathbf{a}$ ,则正向光学特性模型可以简写为:

$$y_i = f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i) \quad , \quad (1)$$

其中,  $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_M]^T$  为纳米结构的待测参数,例如顶部线宽、线高、底部线宽等;  $\mathbf{a}_i = [\lambda_i, \theta, \varphi]^T$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) 表示第  $i$  组测量条件配置,一般而言,测量条件入射波长  $\lambda$  为向量,入射角  $\theta$  和方位角  $\varphi$  均为固定值;  $y_i$  为在测量配置  $\mathbf{a}_i$  下,结构参数  $\mathbf{x}$  对应的模型输出光谱,一般为反射率、椭偏参数、Stokes 向量或 Mueller 矩阵.

在实际的测量过程中,由于受噪声等因素的影响而导致测量数据  $y_i$  具有一定的不确定度,这里假定为  $\sigma_i^2$ . 如果测量仪器不受低频噪声和漂移的影响,我们可以近似认为测量数据  $y_i$  服从均值为  $f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)$ , 方差为  $\sigma_i^2$  的正态分布,且不同测量数据之间相互独立. 在参数的逆向提取过程中,将测量条件以及已知测量值的纳米结构参数等设为固定值,而使得纳米结构的待测参数根据评价函数值的大小进行浮动变化,并采用  $\chi^2$  形式的评价函数来衡量测量和计算光谱之间的拟合误差:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)}{\sigma_i} \right]^2 \quad , \quad (2)$$

当式(2)中的拟合误差达到最小值时,该计算光谱对应的纳米结构参数值即为待测参数的提取值  $\hat{\mathbf{x}}$ :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)}{\sigma_i} \right]^2 \quad (3)$$

假设函数  $f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)$  在提取值  $\hat{\mathbf{x}}$  附近光滑,将其在  $\hat{\mathbf{x}}$  附近做一阶 Taylor 展开得:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i) \approx f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i) + \sum_{j=1}^M \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\partial x_j} \delta x_j \quad (4)$$

其中,将式(2)在附近做一阶 Taylor 展开,并代入式(4)可得:

$$\begin{aligned} \chi_j &\approx \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\sigma_i} \right]^2 \\ &\quad \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{\delta x_j \delta x_k}{\sigma_i^2} \left[ \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\partial x_j} \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\partial x_k} \right] \end{aligned} \quad , \quad (5)$$

式(5)可简写为:

$$\chi^2 \approx \chi_{\min}^2 + \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^M \delta x_j \alpha_{jk} \delta x_k \quad , \quad (6)$$

其中,

$$\chi_{\min}^2 \approx \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\sigma_i} \right]^2 \quad , \quad (7a)$$

$$\alpha_{jk} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\partial x_j} \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^N \frac{h_{jk}}{\sigma_i^2} \quad , \quad (7b)$$

这里,  $h_{jk}$  为  $f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)$  在处的 Hessian 矩阵  $\mathbf{H}$  中的元素,其中 Hessian 矩阵可由  $f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)$  的 Jacobian 矩阵  $\mathbf{J}$  计算得到:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_i)}{\partial x_M} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_N)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{a}_N)}{\partial x_M} \end{bmatrix} \quad , \quad (8)$$

而  $f(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)$  的 Hessian 矩阵为:

$$\mathbf{H} = \mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad , \quad (9)$$

对于任意的结构参数  $x_j$  和  $x_k$ ,其协方差矩阵可表示为:

$$C_{ij} = ([\alpha_{jk}]^{-1})_{jk} \quad , \quad (10)$$

式(9)中的对角线元素即为每个结构参数的方差,故结构参数  $x_j$  的不确定度(99.7% 的置信区间)估计公式为:

$$\sigma_{x_j} = 3 \sqrt{C_{jj}} \quad (11)$$

在式(11)的基础上,以纳米结构所有待测参数的相对不确定度之和作为测量条件配置的优化目标函数,则最优配置的表达式为:

$$(\theta_{\text{opt}}, \varphi_{\text{opt}}) = \arg \min_{\theta \in \Theta, \varphi \in \Phi} \left[ \max_{x \in \Omega} \left( \sum_{j=1}^M \left( \frac{\sigma_{x_j}(\theta, \varphi)}{\hat{x}_j} \right) \times 100\% \right) \right] \quad , \quad (12)$$

式(12)所述优化过程是一个包括内外两层循环的优化过程. 其中,内层循环用于对每一种测量条件配置,在给定的待测参数范围  $\Omega$  内进行遍历以找出对应的最大相对不确定度之和,外层循环用于在给定的入射角和方位角的变化范围  $\Theta$  和  $\Phi$  内,遍历内层循环所找到的最大相对不确定度值和,其中在所有最大中的最小者所对应的入射角和方位角的组合即为最优的测量条件配置. 内层循环保证所找到的最优测量条件配置对应待测参数值的变化是稳定的,而外层循环则用于保证所找到的测量条件配置是全局最优的.

## 2 实验与讨论

### 2.1 实验设备及样品

在实验中采用的测量仪器是课题组自主研制的

双旋转补偿器型 Mueller 矩阵椭偏仪,其基本光路如图 2 所示,其中旋转补偿器 1 和旋转补偿器 2 分别按照  $\omega_1 = 5\omega$  和  $\omega_2 = 3\omega$  的转速比同步旋转( $\omega$  为基频). 出射光束对应的 Stokes 向量  $S_{out}$  可以表示为<sup>[19]</sup>:

$$\begin{aligned} S_{out} &= [\mathbf{M}_A \mathbf{R}(A)] \cdot [\mathbf{R}(-C_2) \mathbf{M}_{C2} \mathbf{M}_{C2}(\delta_2) \mathbf{R}(C_2)] \cdot \\ &\quad \mathbf{M}_S \cdot [\mathbf{R}(-C_1) \mathbf{M}_{C1}(\delta_1) \mathbf{R}(C_1)] \cdot [\mathbf{R}(-P) \mathbf{M}_P] \cdot S_{in} \end{aligned}, \quad (13)$$

其中  $\mathbf{M}_P, \mathbf{M}_A, \mathbf{M}_{C1}(\delta_1), \mathbf{M}_{C2}(\delta_2)$  和  $\mathbf{M}_S$  分别为起偏器、检偏器、旋转补偿器 1、旋转补偿器 2 和样品对应的 Mueller 矩阵.  $\mathbf{R}(\alpha)$  为对应光学元件的旋转矩阵,这里  $\alpha$  可以表示起偏器和检偏器的透光轴方向与入射面的夹角  $P$  和  $A$ ,以及旋转补偿器 1 和旋转补偿器 2 的快轴方向与入射面的夹角  $C_1$  和  $C_2$ ,其中  $C_1 = 5(\omega t - C_{S1})$ ,  $C_2 = 3(\omega t - C_{S2})$ .  $\delta_1$  和  $\delta_2$  分别表示旋转补偿器 1 和旋转补偿器 2 对应的相位延迟量. 将式(13)展开可以得到出射光束对应的光强表达式为:

$$\begin{aligned} I(t) &= I_{00} M_{11} \left\{ a_0 + \sum_{n=1}^{16} [a_{2n} \cos(2n\omega t - \phi_{2n}) + b_{2n} \sin(2n\omega t - \phi_{2n})] \right\} \\ &= I_0 \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{16} [\alpha_{2n} \cos(2n\omega t - \phi_{2n}) + \beta_{2n} \sin(2n\omega t - \phi_{2n})] \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

其中  $I_{00}$  是探测器的光谱响应函数,  $M_{11}$  为样品 Mueller 矩阵中对应第一行和第一列的元素,为相位并且是  $C_{S1}$  和  $C_{S2}$  的函数.  $I_0 = I_{00} M_{11} a_0$ ,  $\alpha_{2n} = a_{2n}/a_0$  和  $\beta_{2n} = b_{2n}/b_0$  分别表示直流分量和归一化后的交流分量. 由于待测样品对应的 Mueller 矩阵元素( $i, j = 1, 2, 3, 4$ )为谐波系数  $\alpha_{2n}$  和  $\beta_{2n}$  的线性组合,利用 Fourier 分析便可以从谐波系数  $\{I_0, \alpha_{2n}, \beta_{2n}\}$  中获得待测样品的 Mueller 矩阵元素. 课题组研制的双旋转补偿器型 Mueller 矩阵椭偏仪的原理样机如图 2 所示,其波长范围为 200 ~ 1 000 nm,不加会聚透镜时的光束直径约为 3 mm,加上之后光束直径可以达到 200  $\mu\text{m}$ ,仪器的起偏臂、检偏臂以及样品台均可旋转,用以改变测量的入射角和方位角.

实验样品为一维周期性光刻胶光栅纳米结构,硅基底上还涂有一层防反薄膜层(Bottom Anti-Reflective Coating, BARC). 该光栅结构的 SEM 测试结果如图 3 所示,其中顶部线宽  $w_1 = 198.7 \text{ nm}$ ,线高  $h = 308.7 \text{ nm}$ ,底部线宽  $w_2 = 208.2 \text{ nm}$ ,周期 pitch = 400 nm,防反层薄膜厚度  $d = 115.7 \text{ nm}$ . 在后续的仿真和实验过程中,我们事先确定了组成样品的每一种材料的光学常数并将其固定,同时将周期 pitch 固定在 400 nm,仅针对光栅样品的顶部线宽  $w_1$ 、线高

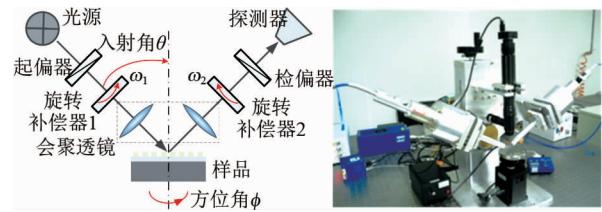


图 2 双旋转补偿器型 Mueller 矩阵椭偏仪基本光路与原理样机

Fig. 2 Principle (left) and prototype (right) of the dual rotating-compensator Mueller matrix polarimetry

$h$ 、底部线宽  $w_2$  和膜厚  $d$  这四个结构参数进行分析. 对于光刻胶光栅结构中硅基底的光学常数,由于其相对稳定,我们直接采用文献[21]中给出的测量数据;对于 BARC 薄膜层的光学常数,首先利用椭偏仪测量硅基上仅有 BARC 薄膜层的椭偏光谱,然后利用薄膜传输矩阵理论计算硅基 BARC 层薄膜的椭偏光谱<sup>[22]</sup>,并将其与实际测得的椭偏光谱进行拟合. 在拟合过程中,我们采用 Forouhi-Bloomer 模型对其进行建模,待定参数包括模型参数  $A_i, B_i, C_i, n(\infty)$  和  $E_g$  以及薄膜厚度. 根据上述拟合结果,我们得到 Forouhi-Bloomer 模型的系数为:  $A_1 = 0.006\ 029, A_2 = 0.020\ 598, B_1 = 14.195\ 303 \text{ eV}, B_2 = 14.196\ 431 \text{ eV}, C_1 = 50.523\ 937 \text{ eV}^2, C_2 = 50.537\ 878 \text{ eV}^2, n(\infty) = 1.436\ 087, E_g = 4.774\ 050 \text{ eV}$ , BARC 层材料的光学常数(折射率  $n$  和消光系数  $k$ )如图 4 所示. 类似地,对于光刻胶材料的光学常数,我们利用椭偏仪测量硅基上有一层 BARC 薄膜且表面还有一层光刻胶薄膜的椭偏光谱,采用 Tauc-Lorentz 模型对光刻胶薄膜进行建模<sup>[23]</sup>,待定参数包括模型参数  $\varepsilon_1(\infty), E_g, A, E_0$  和  $C$  以及薄膜厚度. 由上述拟合过程得到得到 Tauc-Lorentz 模型的系数为:  $\varepsilon_1(\infty) = 1.426\ 80, E_g = 3.459\ 71 \text{ eV}, A = 21.149\ 55, E_0 = 9.949\ 21, C = 0.987\ 67$ , 光刻胶材料的光学常数如图 4 所示.

## 2.2 测量结果与讨论

基于自主开发的 RCWA 光学特性正向模型,采用本文所提方法对上述一维纳米结构样品进行测量条件的优化配置. 将入射波长固定设为 300 ~ 900 nm,本文仅针对测量入射角和方位角进行优化,其中入射角的变化范围为 55°~60°(间隔 5°),方位角的范围为 0°~90°(间隔 5°). 以 Mueller 矩阵为模型的输出量,由式(12)分别在每个测量配置下估算得出了四个待测结构参数顶部线宽  $w_1$ ,线高  $h$ 、底部线宽  $w_2$  和膜厚  $d$  的相对不确定度之和,如图 5 所示.

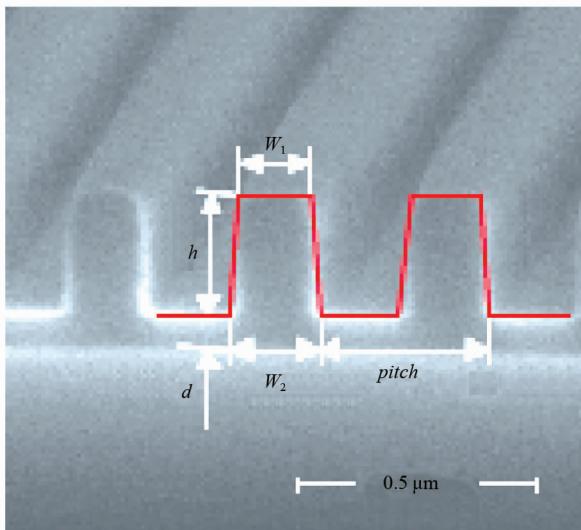


图3 一维周期性纳米光栅样品的SEM测量图  
Fig. 3 SEM cross-section of the one-dimensional periodic grating sample

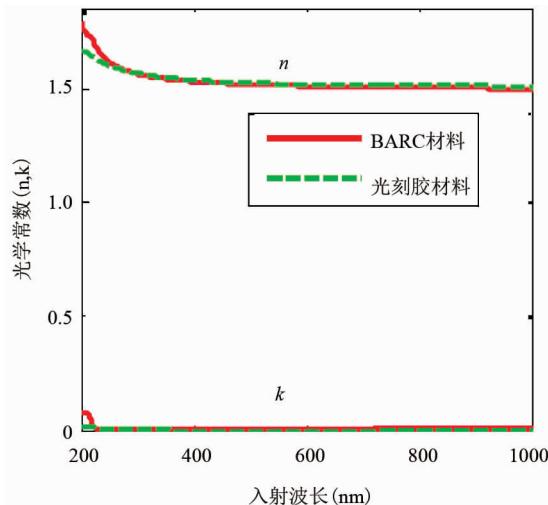


图4 光栅样品中的 BARC 和光刻胶材料的光学常数(折射率  $n$  和消光系数  $k$ )  
Fig. 4 Optical properties (refractive index  $n$  and extinction coefficient  $k$ ) of the BARC and resist for the grating sample

由图5可得,在相同的测量方位角下,当入射角为55°时,四个待测参数的相对不确定之和远大于其他两个入射角下;当测量入射角为65°,方位角为35°时,四个待测参数的相对不确定之和最小,故预测该光栅结构的最优测量条件配置应该为入射角和方位角分别为65°和35°。

为了验证上述预测的最优测量条件配置,我们利用图2中所示的双旋转补偿器型Mueller矩阵椭偏仪对上述纳米光栅样品展开了测量实验研究。分别在每个测量配置下,重复性测量30组该光栅样品

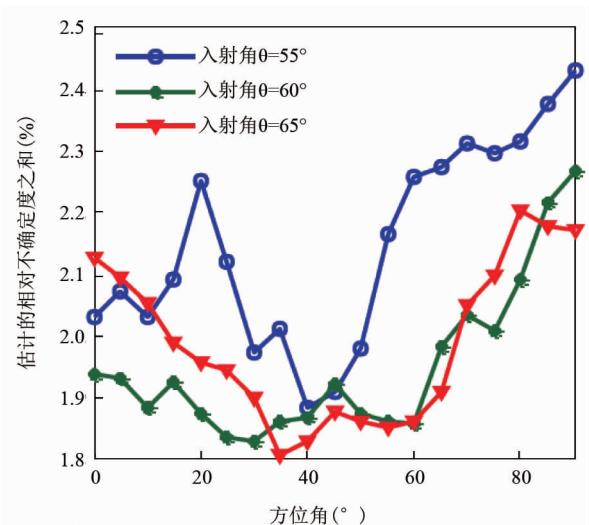


图5 基于所提方法得到的四个待测参数相对不确定度之和的预估值  
Fig. 5 Sum of relative uncertainty of the four structure parameters estimated by the proposed method

的Mueller矩阵光谱数据,针对每组测量光谱数据采用非线性回归逆求算法得到四个结构参数顶部线宽、线高、底部线宽和膜厚的提取值。同样选择99.7%的置信水平,在不同测量配置下,由实验得到的四个待测结构参数的相对不确定度之和如图6所示。由图6可得,在相同的测量方位角下,当入射角为55°时,4个待测结构参数的综合测量精度最差;当测量入射角为65°,方位角为35°时,4个待测结构参数的综合提取精度最优,故实验得到该光栅结构的最优测量条件配置应该为入射角和方位角分别为65°和35°。

对比图5和图6,在不同的入射角下,4个待测参数相对不确定度之和的估计值与实验值随方位角的变化趋势基本一致;入射角分别为55°和65°时,理论预估的最优测量方位角分别为40°和35°,与实验得到的最优测量方位角相同;入射角为60°时,预估的最优测量方位角为30°,与实验得到的60°存在一定偏差,其可能的影响因素为光栅结构的不均匀性、正向模型的简化(例如没有考虑光栅表面粗糙度、圆角等)、以及聚焦透镜的数值孔径等;在所有可能的入射角和方位角中,基于本文所提方法得到的最优测量条件配置为入射角和方位角分别为65°和35°,与实验得到的最优测量配置完全吻合,在很大程度上验证该方法的有效性。在该最优测量条件配置下,4个结构参数顶部线宽 $w_1$ 、线高 $h$ 、底部线宽 $w_2$ 和膜厚 $d$ 的提取值与SEM测量值基本相当,如表1所示;该光栅结构样品的测量Mueller矩阵光

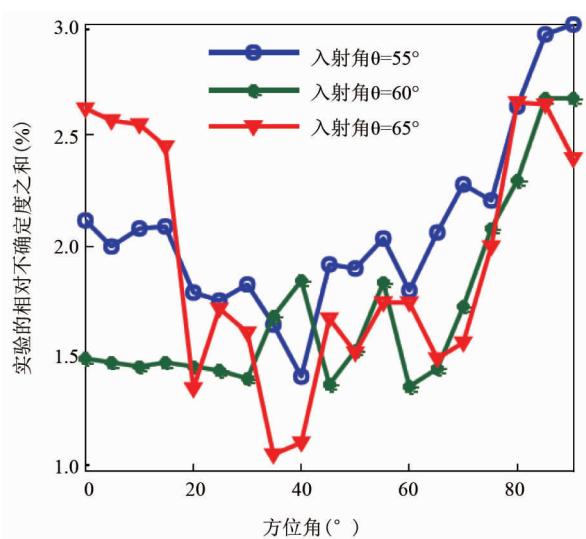


图 6 实验得到的四个待测参数的相对不确定度之和  
Fig. 6 Sum of relative uncertainty of the four structure parameters obtained by experiment  
谱及其计算光谱如图 7 所示,两条光谱曲线的拟合程度非常高.

表 1 最优测量配置下,四个结构参数提取值与 SEM 值的比较

Tabel 1 Comparison of the extracted results of the four structure parameters at the optimum measurement configuration and the ones obtained by SEM

结构参数	提取值 / nm	SEM 值 / nm
顶部线宽 $w_1$	$202.3 \pm 0.22$	198.7
线高 $h$	$310.8 \pm 0.76$	308.7
底部线宽 $w_2$	$205.1 \pm 0.28$	208.2
膜厚 $d$	$114.4 \pm 0.45$	115.7

### 3 结论

基于定量灵敏度分析计算模型输出光谱对待测纳米结构参数的 Hessian 矩阵,在此基础上求得包含所有待测参数的方差以及参数间相关系数的协方差矩阵,并根据该协方差矩阵给出了各待测结构参数的测量不确定度估计公式,进一步地提出了一种以纳米结构所有待测参数的相对不确定度之和作为目标函数的测量条件优化配置方法. 该方法的核心

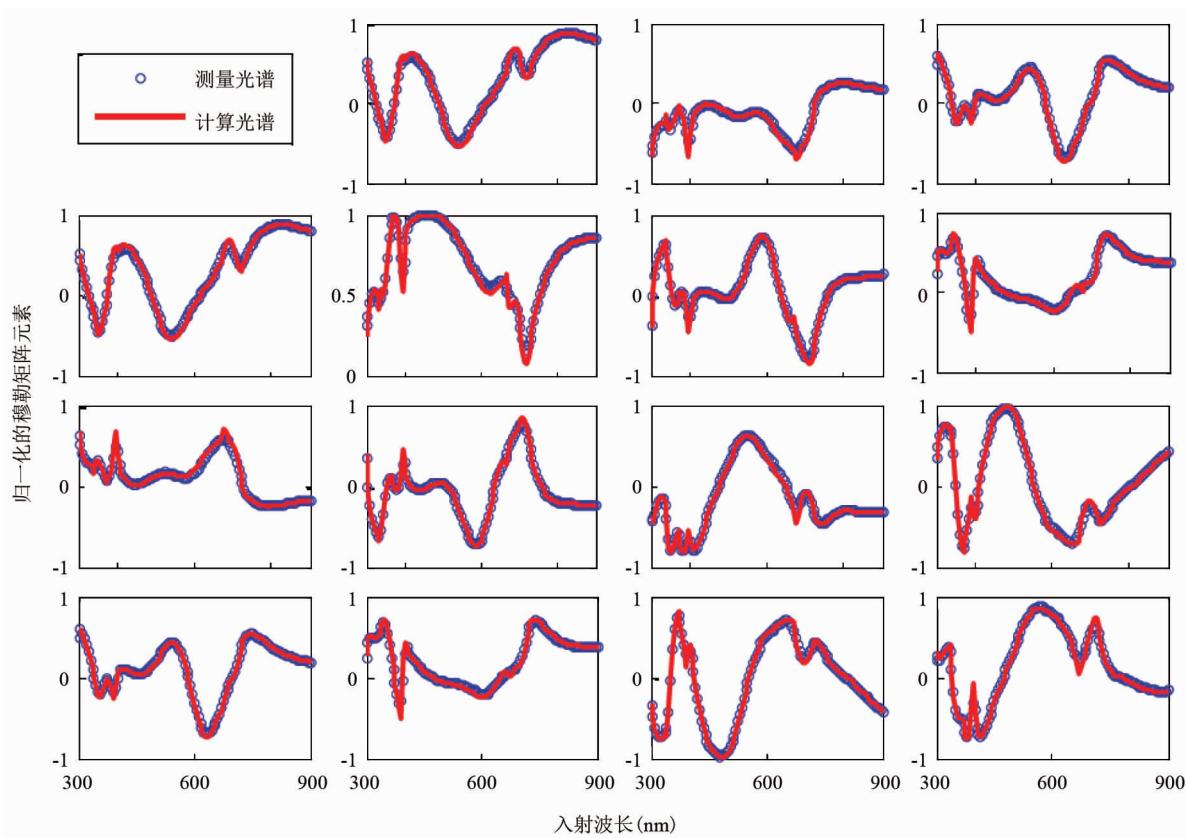


图 7 最优测量配置(入射角为  $65^\circ$ , 方位角为  $35^\circ$ )下,一维周期性光刻胶光栅的计算与测量 Mueller 矩阵光谱的拟合结果  
Fig. 7 Fitting results of the calculated and the measured Mueller matrices of the one-dimensional periodic grating at the optimum measurement configuration (the incidence angle of  $65^\circ$  and the azimuthal angle of  $35^\circ$ )

在于分析不同测量条件配置下的模型输出对输入结构参数的灵敏度,仅以一维周期性纳米光栅结构为例开展了测量实验研究,在基于该方法预估得到的最优测量条件配置下,实验得到的所有待测结构参数的综合测量精度也最优,从而在一定程度上对其有效性进行了验证。在后续的研究工作中,将针对二维以及三维纳米结构展开测量实验研究,以更全面地验证本文所提出的测量条件配置优化方法。

## References

- [1] POSTEK M T, LYONS K W. Instrumentation, metrology, and standards: key elements for the future of nanomanufacturing, *Instrumentation, Metrology, and Standards for Nanomanufacturing* [C]. California, USA: Proceedings of SPIE, 2007, **6648**: 664802.
- [2] POSTEK M T, LYONS K W. Metrology at the nanoscale: what are the grand challenges? *Instrumentation, Metrology, and Standards for Nanomanufacturing II* [C]. California, USA: Proceedings of SPIE, 2008, **7042**: 704202.
- [3] HANSEN H N, CARNEIRO K, HAITJEMA H, et al. Dimensional micro and nanometrology [J]. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 2006, **55**(2): 721–743.
- [4] RAYMOND C. Overview of scatterometry applications in high volume silicon manufacturing, *Characterization and Metrology for ULSI Technology* [C]. Texas, USA: AIP Conference Proceedings, 2005, **788**: 394–402.
- [5] WEIDNER P, KASIC A, HINGST T, et al. Model-free and model-based methods for dimensional metrology during the lifetime of a product, *Ninth International Symposium on Laser Metrology* [C]. Singapore, Proceedings of SPIE, 2008, **7155**: 71550Y.
- [6] FOLDYNA M, MARTINO A D, CAUREL E G, et al. Critical dimension of biperiodic gratings determined by spectral ellipsometry and Mueller matrix polarimetry [J]. *European Physics Journal Applied Physics*, 2008, **42** (3): 351–359.
- [7] DONG Zheng-Qiong, LIU Shi-Yuan, CHEN Xiu-Guo et al. Determination of an optimal measurement configuration in optical scatterometry using global sensitivity analysis [J]. *Thin Solid Films*, 2014, **562**: 16–23.
- [8] CHEN Xiu-Guo, LIU Shi-Yuan, ZHANG Chuan-Wei, et al. Measurement configuration optimization for accurate grating reconstruction by Mueller matrix polarimetry [J]. *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*, 2013, **12**(3): 033013.
- [9] LOGOFATU P C. Sensitivity analysis of grating parameter estimation [J]. *Applied Optics*, 2002, **41**(34): 7179–7186.
- [10] KU Yi-Sha, WANG Shih-Chun, SHYU Deh-Ming, et al. Scatterometry-based metrology with feature region signature matching [J]. *Optics Express*, 2006, **14**(9): 8482–8491.
- [11] VAGOS P, HU Jiang-Tao, LIU Zhuan, et al. Uncertainty and sensitivity analysis and its applications in OCD measurement, *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XXIII* [C], California, USA: Proceedings of SPIE, 2009, **7272**: 72721N.
- [12] HUANG Hsu-Ting, KONG Wei, TERRY F L. Normal-incidence spectroscopic ellipsometry for critical dimension monitoring [J]. *Applied Physics Letters*, 2001, **78**(25): 3983–3985.
- [13] NIU Xin-Hui, JAKATDAR N, BAO Jun-Wei, et al. Spectral scatterometric scatterometry [J]. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, 2001, **14**(2): 97–111.
- [14] MOHARAM M G, GRANN E B, POMMET D A. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1995, **12**(5): 1068–1076.
- [15] LIU Shi-Yuan, MA Yuan, CHEN Xiu-Guo, et al. Estimation of the convergence order of rigorous coupled-wave analysis for binary gratings in optical critical dimension metrology [J]. *Optical Engineering*, 2012, **51**(8): 081504.
- [16] ZHU Jin-Long, LIU Shi-Yuan, ZHANG Chuan-Wei, et al. Identification and reconstruction of diffraction structures in optical scatterometry using support vector machine method [J]. *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*, 2013, **12**(1): 013004.
- [17] ZHANG Chuan-Wei, LIU Shi-Yuan, SHI Tie-Lin, et al. Fitting-determined formulation of effective medium approximation for 3D trench structures in model-based infrared reflectrometry [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2011, **28**(2): 263–271.
- [18] Shiyuan Liu, Computational metrology: Problems and Solution Methods [J]. *Journal of Mechanical Engineering(刘世元·计算测量问题与求解方法初探·机械工程学报)*, 2014, **50**(4): 1–10.
- [19] LIU Shi-Yuan, CHEN Xiu-Guo, ZHANG Chuan-Wei. Development of a broadband Mueller matrix ellipsometer as a powerful tool for nanostructure metrology [J]. *Thin Solid Films*, 2015, **584**: 176–185.
- [20] CHEN Xiu-Guo, ZHANG Chuan-Wei, LIU Shi-Yuan, et al. Mueller matrix ellipsometric detection of profile asymmetry in nanoimprinted grating structures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, **116**(19): 194305.
- [21] HERZINGER C M, JOHS B, MCGAHAN W A, et al. Ellipsometric determination of optical constants for silicon and thermally grown silicon dioxide via a multi-sample, multi-wavelength, multi-angle investigation [J]. *Journal of Applied Physics*, 1998, **83**(6): 3323–3336.
- [22] FOROUHI A R, BLOOMER I. Optical properties of crystalline semiconductors and dielectrics [J]. *Physical Review B*, 1988, **38**(3): 1865–1874.
- [23] JELLISON JR G E, MODINE F A. Parameterization of the optical functions of amorphous materials in the interband region [J]. *Applied Physics Letters*, 1996, **69**(3): 371–373.