

Monte Carlo 方法研究低能电子束 曝光沉积能分布规律*

任黎明 陈宝钦

(中国科学院微电子中心, 北京 100029)

谭震宇

(山东大学电气工程学院, 济南 250061)

(2001 年 8 月 24 日收到, 2001 年 9 月 19 日收到修改稿)

建立一个描述低能电子在多元多层介质中散射的物理模型, 运用 Monte Carlo 方法模拟低能电子在靶体胶衬底中的复杂散射过程, 在此基础上通过大量计算研究入射束能、胶层厚度、衬底材料等不同曝光条件对抗蚀剂沉积能密度分布的影响, 获得沉积能分布规律. 适量的低束能、薄胶层、低原子序数衬底可以使前散射电子对胶中沉积能密度分布的贡献增大、背散射电子的贡献减小, 从而提高曝光分辨率.

关键词: 电子束曝光, Monte Carlo 方法, 低能电子散射, 能量沉积

PACC: 3480, 8220R, 8220W, 0250

1 引 言

电子束曝光具有高分辨率的特点, 一直是大规模、超大规模集成电路研制的重要手段. 近年来, 低能电子束曝光(入射束能为几个千电子伏或更低)的研究日益活跃. 文献 [1, 2] 的实验结果表明: 与高能电子束相比, 低能电子束具有曝光效率高、邻近效应低等优点. 然而, 他们却没有从理论上充分论证其结论. 另外, 关于低能电子散射机理、能量沉积等许多理论问题尚待进一步深入研究.

电子束曝光技术中, 电子入射到固体后并不是沿直线运动, 而是按某种规律随机运动, 这种现象称为散射. 入射电子束的散射、能量沉积过程及其在抗蚀剂中的沉积能密度分布是影响曝光分辨率的关键因素. Monte Carlo 方法是人们对随机事件的一种数学模拟方法, 在物理学研究中应用广泛^[3-5]. 电子束曝光的 Monte Carlo 模拟对深入了解电子束曝光邻近效应产生的原因, 探讨邻近效应的修正途径可以起到理论指导的先行作用. 为此, 本文运用 Monte Carlo 方法对低能电子在靶体胶衬底中的复杂散射进行模拟, 并在此基础上通过大量计算, 研究不同曝光条件

对抗蚀剂沉积能密度分布的影响, 获得沉积能分布规律, 旨在为电子束曝光技术的定量研究提供一定的理论依据.

2 电子散射过程的 Monte Carlo 模拟

2.1 物理模型的建立

电子在固体中的散射可归结为两类散射事件: 弹性散射和非弹性散射. Monte Carlo 模拟计算的准确度取决于所选用的物理模型, 当入射电子能量为几十个千电子伏以上数量级时, 弹性散射和非弹性散射可分别用 Rutherford 散射截面^[6]和 Bethe 连续能量损失公式^[7]计算. 然而, 当入射电子能量降到几个千电子伏或更低时, 由 Born 近似^[8]导出的 Rutherford 散射截面和 Bethe 公式均不适用, 且能量越低, 固体原子序数越高, 偏差越大. 因此, 有必要建立一个更为严格的物理模型处理低能电子散射问题.

对于低能电子在固体中的弹性散射过程, 本文采用量子力学分波法求解相对论 Dirac 方程获得的 Mott 截面描述, 这里仅给出 Mott 微分截面的简写形式^[9]:

* 国家“九五”科技攻关项目(批准号: 97-762-03-02)和国家重点基础研究项目(批准号: G2000036504)资助的课题.

$$\frac{d\alpha(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \quad (1)$$

其中 $f(\theta)$ 和 $g(\theta)$ 为利用量子力学分波法求解相对论 Dirac 方程获得的入射波和散射波函数。

低能电子非弹性散射平均能量损失率的计算, 采用 Joy 修正的 Bethe 公式^[10]:

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \times 10^4 \frac{\rho Z}{AE} \ln \left[\frac{1.16(E + kJ)}{J} \right] \quad (\text{keV/cm}), \quad (2)$$

其中 ρ 为介质密度, Z 为原子序数, A 为原子量, k 为修正系数. 对于模拟中所用到的光刻胶 PMMA、衬底 Si 和 Au, 本文将 k 值分别取为 0.757, 0.822 和 0.851.

2.2 Monte Carlo 模拟方法

电子入射固体后, 要发生多次散射. 电子每次散射行为由 4 个变量决定: 前次散射终点处的能量 E_n 、散射角 θ_n 、散射方位角 ϕ_n 、散射步长 Δ_n . 电子在多元介质中散射, 本文采用概率随机抽样方法^[11]确定散射中心. 确定散射中心后, 计算弹性散射总截面 σ_1 , 则电子散射步长 Δ 、散射角 θ 、散射方位角 ϕ 均可由随机抽样方法产生:

$$\Delta = -A \ln R_1 / (\rho N_0 \sigma_1), \quad (3)$$

$$R_2 = \int_0^\theta \frac{d\alpha(\theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta / \int_0^\pi \frac{d\alpha(\theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta, \quad (4)$$

$$\phi = 2\pi R_3, \quad (5)$$

其中 R_1, R_2, R_3 均为 $[0, 1]$ 内均匀分布的随机数, A 为原子量, ρ 为介质密度, N_0 为阿伏伽德罗常数, σ_1 为弹性散射总截面.

电子第 n 次散射终点处的能量 E_{n+1} 通过下式计算:

$$E_{n+1} = E_n - \left. \frac{dE}{ds} \right|_{E_n} \Delta_n, \quad (6)$$

其中 E_n 为电子第 $n-1$ 次散射终点处的能量, Δ_n 为第 n 次的散射步长, $dE/ds|_{E_n}$ 为第 n 次非弹性散射平均能量损失率, 由(2)式计算.

Monte Carlo 方法模拟电子散射过程就是依据一定的物理模型, 通过计算上述各量, 对每个电子的每次散射行为进行模拟, 进而模拟出大量电子在固体中的运动轨迹. 图 1 为模拟得到的不同入射束能的低能电子在靶体 PMMA-Si 中的散射轨迹图. 其中 PMMA 厚度取为 66nm (这是实验中已制成的较小厚度) 模拟电子数为 20000.

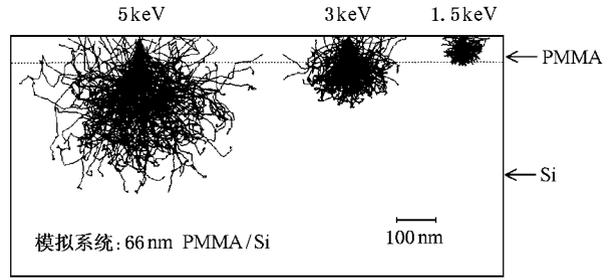


图 1 不同入射束能电子束在 PMMA-Si 中的散射轨迹图

3 沉积能密度计算

电子束曝光技术中, 胶中沉积能密度是研究沉积能分布规律的一个重要参数. 一般而言, 沉积能密度分布越陡峭, 邻近效应越低, 线条分辨率越高.

研究沉积能密度分布, 通常将电子散射效应简化为两种: 前(向)散射与背(向)散射, 如图 2 所示. 相应地, 将发生前散射和背散射的电子分别称为前散射电子和背散射电子. 由图 2 可以看出, 背散射使电子束变宽的程度比前散射大得多. 返回胶中的背散射电子将参与对胶层的曝光作用, 致使不需要曝光的区域被曝光, 从而使显影出来的图形比预期的要宽, 导致邻近效应加重. 在分辨率要求较高的情况下, 背散射是曝光精度的最大限制. 由于前散射电子与背散射电子均会引起能量沉积, 通常将其沉积于胶中的能量分别加以记录.

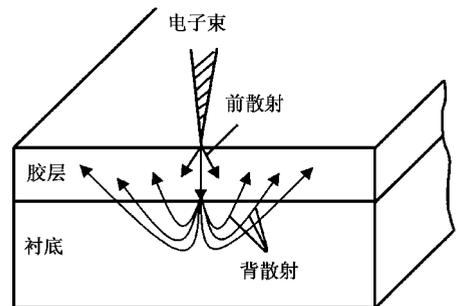


图 2 电子的散射效应

对垂直入射的电子束, 由于电子在胶中的散射关于入射中心轴对称, 为了计算胶中的能量沉积, 可做如下划分: 如图 3 所示, 将胶层沿电子束入射中心方向分为若干非常薄的子层, 子层的厚度记为 ΔZ . 在每一子层上, 以 z 轴为中心, 将胶层沿径向分为若干同心圆环, 圆环半径增量记为 Δr . ΔZ 和 Δr 足够

小. 这样, 就将胶层划分为若干个小单元.

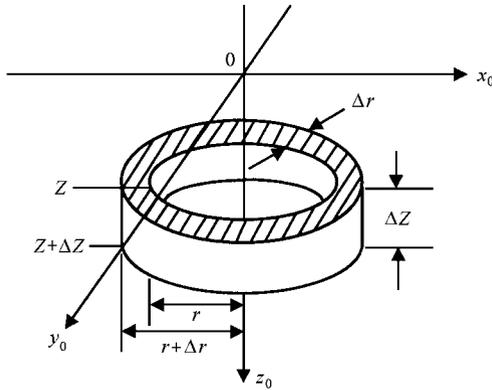


图3 能量沉积单元示意图

利用 Monte Carlo 方法模拟每个电子在胶中散射过程的同时, 记录沉积在任一单元 Ω 中的能量. 对大量电子进行模拟, 并将所有入射电子在 Ω 中沉积的能量相加, 便可计算出任一单元中沉积的能量.

沉积能分布主要受入射束能、胶层厚度、衬底材料等曝光条件影响. 由于低能电子束曝光工艺中使用薄胶层, 为便于比较不同曝光条件对胶中沉积能密度的影响, 可以用沉积能面密度(即每个电子单位面积上沉积的能量)代替沉积能体密度来表示横向沉积能密度分布. 按照上述能量沉积单元划分方法, 沉积能面密度 $A(r)$ 等于沿深度方向, 胶层中对应于同一半径圆环的所有子层沉积能总和 $E(r)$ 与该圆环面积及入射电子总数之比为

$$A(r) = E(r) / (\Delta S \cdot N_0), \quad (7)$$

其中 N_0 为入射电子总数, ΔS 为圆环面积,

$$\Delta S = \pi(r + \Delta r)^2 - \pi r^2.$$

3.1 入射束能的影响

入射束能 E_0 的大小直接影响电子散射过程, 对沉积能密度分布的作用较大. 图4为不同入射束能电子束在 Si 衬底上 PMMA 胶中横向沉积能密度分布. 可见入射束能越低, 电子在胶中作用范围越小, 沉积能密度分布曲线越陡峭, 从而邻近效应越低. 这正是低能电子束曝光具有极高分辨率的主要原因.

表1为不同入射束能的电子在 Si 衬底上 66nm PMMA 胶中的纵向沉积能密度分布, 其中 E_p/E_T 为胶中沉积的能量 E_p 占沉积在胶和衬底中的总能量 E_T 的百分比, 可以看出: 电子束入射束能越低, 沉积于胶中的能量占总沉积能的比例越大. 因此, 适量的

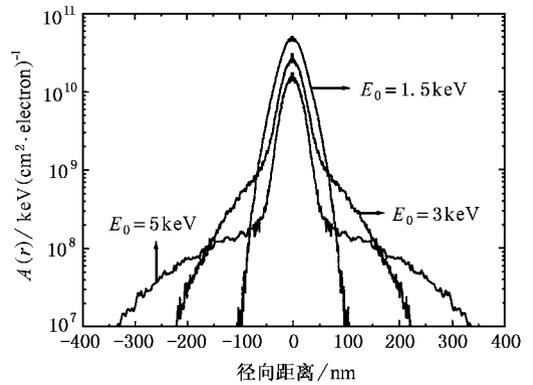


图4 不同入射束能电子束在 Si 衬底上 PMMA 胶中的横向沉积能密度分布

低能电子束曝光可以将大部分能量沉积于胶中, 使用较小的曝光剂量即可达到充分曝光的目的, 这就使低能电子束曝光具有曝光效率高的优点. 另外, 胶层厚度一定, 电子作用深度大于胶层厚度时, 入射束能 E_0 越低, 电子与衬底的最大作用深度(Z_{max})越小, 对衬底的损伤越轻.

表1 不同入射束能电子在 Si 衬底上 PMMA 胶中的纵向沉积能密度分布

E_0/keV	5	4	3	2	1.5
Z_{max}/nm	429	306	204	120	84
$(E_p/E_T)\%$	10.25	15.93	28.82	61.14	93.41

为比较前散射电子和背散射电子对胶中沉积能的影响, 本文进一步计算了不同入射束能下前散射电子与背散射电子对胶中沉积能密度分布的贡献, 如图5(a)和(b)所示.

由图5可见: 当 $E_0 = 5\text{keV}$ 时, 除了入射点附近, 背散射电子的贡献比前散射电子大得多, 而且背散射电子较前散射电子作用范围大得多, 胶中沉积能密度分布主要由背散射电子决定; 而当 $E_0 = 1.5\text{keV}$ 时, 背散射电子对胶中沉积能的贡献远较前散射电子的贡献小(约低两个数量级), 作用范围也小, 胶中沉积能密度分布取决于前散射电子.

对此本文作如下分析: 由能量损失率公式(2)可知, 入射束能较高时, 电子能量损失率较低, 在胶中损失的能量较少, 电子散射行程较长, 因而大量电子穿越界面进入衬底, 这就使得返回胶中的背散射电子数目较多, 且能量较高, 从而在胶中沉积较多的能量, 作用范围也较宽, 因此, 背散射电子对胶中沉积能密度分布起决定作用. 但在入射点附近, 背散射电子经过的概率却较小, 对沉积能密度分布贡献不大;

当入射电子束能量较低时,由于能量损失率较高,电子行程短,许多电子未进入衬底就已经耗尽能量,终止在胶中,这样由衬底返回胶中的背散射电子较少,且能量较低,对胶中沉积能的贡献较小.由此可以得

出一个结论:适量的低能电子束曝光,可以使前散射电子比背散射电子的贡献大得多,对胶中沉积能密度分布起主导作用,从而降低邻近效应,提高分辨率.

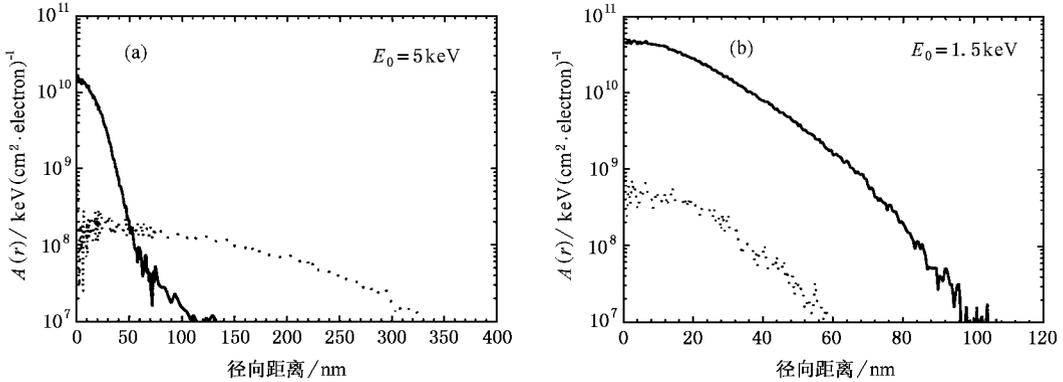


图5 不同入射束能下前散射电子与背散射电子对胶中沉积能密度分布的贡献 ——为前散射电子,.....为背散射电子

3.2 胶层厚度的影响

胶膜的厚度 T_f 对沉积能密度分布也有重要影响.图6为入射束能为3keV的电子在三种厚度胶层中的沉积能密度分布.可见胶层越薄,胶中沉积能密度分布范围越小,沉积能密度分布越陡峭.这就说明低能电子束曝光中,薄胶层有利于降低邻近效应,提高曝光分辨率.

明显,沉积能密度分布曲线几乎重合;2)入射点附近前散射电子对胶中沉积能的贡献较背散射电子的贡献大一个数量级,沉积能密度主要取决于前散射电子.

对此本文分析如下:对前散射电子而言,由于胶层越薄,入射电子进入衬底前在胶中散射的次数越少,因而前散射电子的分布范围越小,且能量主要集中在入射点附近;而对背散射电子而言,由于低能电子在胶层中能量损失率较低,因而胶层厚度的小范围变化(由于低能电子束曝光工艺中使用薄胶层,模拟计算中胶层厚度不可能变化很大)对进入衬底的电子能量影响不大,从而对背散射电子的数量及其对沉积能密度分布的贡献影响较小.

3.3 衬底材料的影响

衬底材料的性质可以决定从衬底返回胶中背散射电子的数量、能谱分布等,因此对胶中沉积能密度分布也有重要影响.衬底材料对胶中沉积能密度分布的影响与入射束能有关,图8(a)和(b)给出不同束能的电子在Si衬底和Au衬底上66nm PMMA胶中的横向沉积能密度分布.

由图8可见,当 $E_0 = 3\text{keV}$ 时,两种衬底上胶中沉积能密度分布在入射点附近表现出明显差异,原子序数较低的Si衬底,沉积能密度分布略微陡峭一些,而当 $E_0 = 1.5\text{keV}$ 时,不同衬底上胶中沉积能密度分布曲线几乎重合.从而表明:一定胶层厚度,入射束能较低时,衬底材料对胶中沉积能密度分布影响不大.

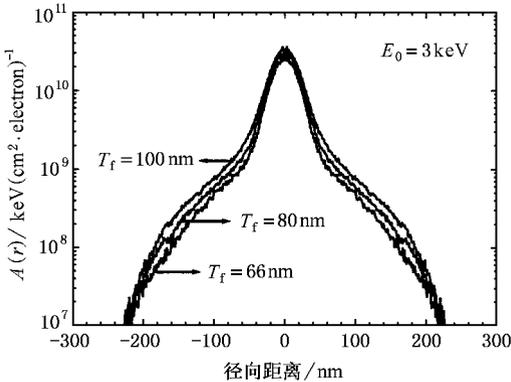


图6 不同厚度胶膜中沉积能密度分布

另外,为了比较不同厚度胶膜情况下,前散射电子和背散射电子对胶中沉积能密度分布的影响,本文进一步计算了 $E_0 = 3\text{keV}$ 时,前散射电子与背散射电子在4种不同厚度胶膜中的沉积能密度分布,如图7(a)和(b)所示.可以看出:1)胶厚越薄,前散射电子与背散射电子的沉积能密度分布范围越小,但主要影响前散射电子,对于背散射电子,此趋势不

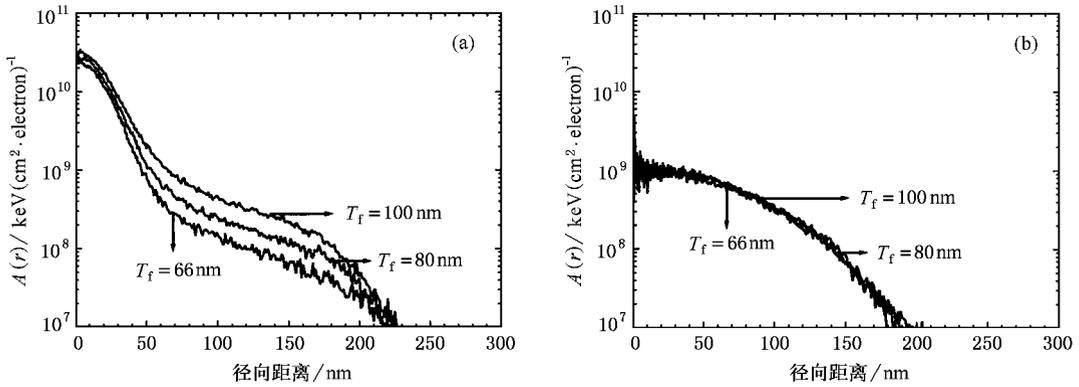


图 7 $E_0 = 3\text{keV}$ 时前散射电子 (a) 与背散射电子 (b) 对不同厚度 PMMA 胶中沉积能密度分布的贡献

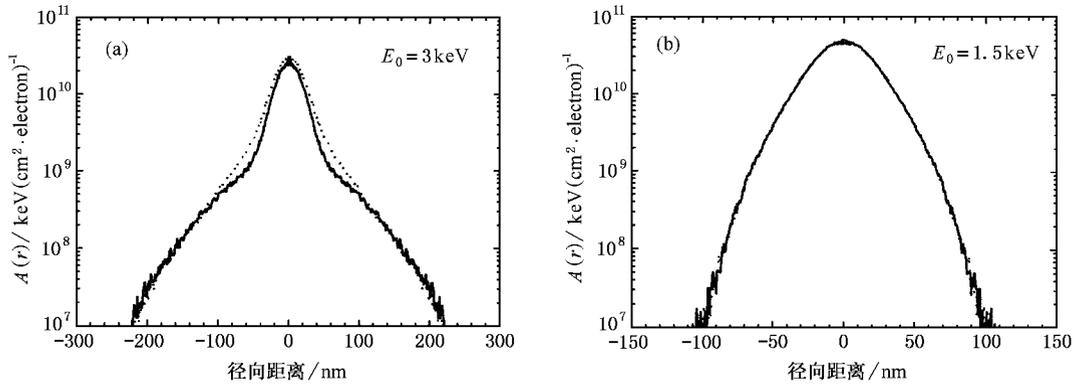


图 8 不同衬底胶中沉积能密度分布 ——为 Si 衬底为 Au 衬底

为研究不同衬底材料对前散射电子与背散射电子在胶中沉积能密度分布的影响,本文进一步计算了上述两种入射束能下, Si 衬底和 Au 衬底上前散射电子与背散射电子在 66nm 胶中的沉积能密度分布,如图 9(a)和(b)和图 10(a)和(b)所示。

由图 9 和图 10 可以看出,前散射电子的沉积能密度分布几乎不受衬底材料影响,衬底材料主要影响背散射电子的沉积能密度分布,而且入射束能越高,对背散射电子沉积能密度分布的影响越大。当 $E_0 = 3\text{keV}$ 时,由图 9(a)和(b)可知,在入射点附近,对 Si 衬底而言,胶中沉积能密度主要由前散射电子决定,背散射电子对沉积能的贡献比前散射电子的贡献小得多,而对 Au 衬底而言,背散射电子对胶中沉积能的贡献与前散射电子的贡献差别不大(具有相同的数量级)。因此,在入射点附近,Au 衬底上胶中沉积能密度要大一些。但在离入射点较远处,两种衬底上胶中背散射电子对沉积能的贡献相差不大,因而沉积能密度分布差别较小。这样就出现了图 8(a)所示结果;当 $E_0 = 1.5\text{keV}$ 时,由图 10(a)和(b)

可知,背散射电子对 Au 和 Si 两种衬底上胶中沉积能贡献虽然稍有差异,但由于两种衬底上前散射电子对胶中沉积能的贡献相当,而前散射电子较背散射电子的贡献大得多(几乎大两个数量级),因此总而言之,两种衬底上胶中沉积能密度分布差别较小,出现了图 8(b)所示结果。

对此本文分析如下:由于前散射电子几乎不受衬底影响,因此无论入射束能如何变化,不同衬底几乎不影响前散射电子的沉积能密度分布,但是,入射束能 E_0 的大小却影响背散射电子的沉积能密度分布。当 E_0 较高时,进入衬底的电子数量及能量均较大,由能量损失公式(2)知,原子序数较高的衬底,其能量损失率相对较低,电子在衬底中散射所损失的能量较少,由衬底返回胶中的背散射电子数量及能量均较大;而当入射束能 E_0 较低时,由于进入衬底的电子的数量及能量均较小,不同衬底材料所产生的背散射电子的数目及能量差别不大,因此入射束能较低时,衬底材料变化对背散射电子沉积能密度分布的影响较小。

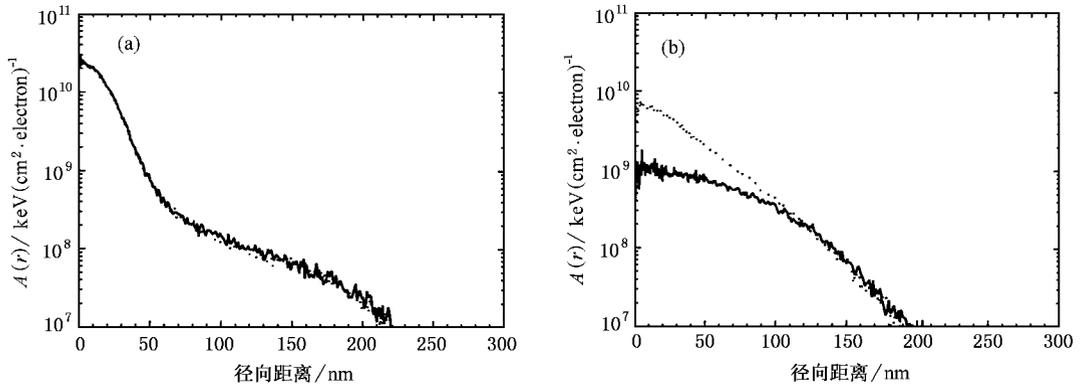


图9 $E_0 = 3\text{keV}$ 时前散射电子 (a) 与背散射电子 (b) 对不同衬底胶中沉积能密度分布的贡献 图注同图 8

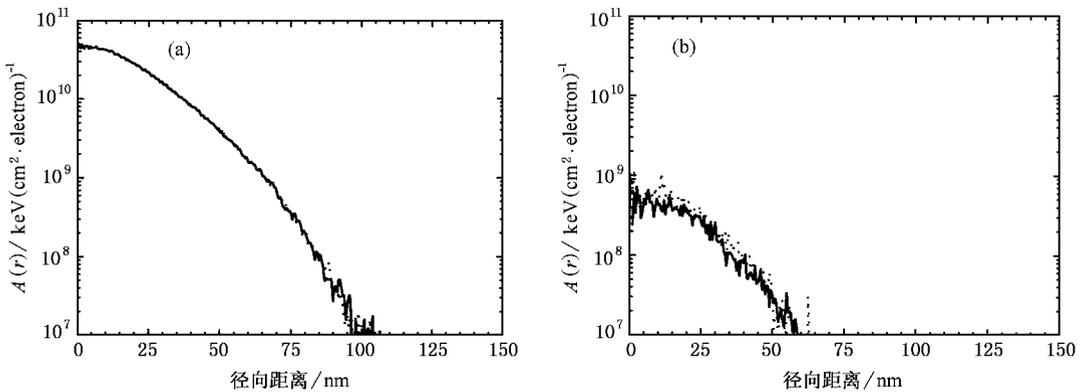


图10 $E_0 = 1.5\text{keV}$ 时前散射电子 (a) 与背散射电子 (b) 对不同衬底胶中沉积能密度分布的贡献 图注同图 8

4 结 语

由沉积能密度分布的 Monte Carlo 模拟计算结果, 本文通过分析和归纳, 总结出沉积能的分布规律。适量的低束能、薄胶层、低原子序数衬底, 可以使前散射电子对胶中沉积能密度分布的贡献增大、背

散射电子的贡献减小, 从而提高曝光分辨率。当然, 实际电子束曝光中, 还应该兼顾其他因素, 合理地选用曝光条件。例如, 低束能可以提高曝光效率、降低邻近效应、减轻对衬底的损伤程度。但是, 受工艺中所能达到的胶膜厚度的限制, 入射束能也不可太低, 否则部分光刻胶将得不到充分曝光, 显影后在胶与衬底界面残留下胶膜, 从而影响刻蚀精度。

- [1] Lee Y H, Browning R, Maluf N, Owen G and Pease R F W 1992 *J. Vac. Sci. Technol. B* **10** 3094
- [2] Stark T J, Edenfeld K M, Griffis D P, Radzinski Z J and Russell P E 1993 *J. Vac. Sci. Technol. B* **11** 2367
- [3] Mu W B, Chen P X 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 189 (in Chinese) [牟维兵、陈盘训 2001 物理学报 **50** 189]
- [4] Wei H L, Liu Z L and Yao K L 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 791 (in Chinese) [魏合林、刘祖黎、姚凯伦 2000 物理学报 **49** 791]

- [5] Zhao H, Wang Y S, Xu Z and Xu X R 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 533 (in Chinese) [赵辉、王永生、徐征、徐叙 1999 物理学报 **48** 533]
- [6] Murata R 1974 *J. Appl. Phys.* **45** 4410
- [7] Bethe H A 1933 *Handbook of Physics* (Berlin: Springer) vol 24 p273
- [8] Murata K, Kawata H and Nagami K 1987 *J. Vac. Sci. Technol. B* **5** 124

- [9] Mott N F and Massey H S W 1949 *The Theory of Atomic Collision* (Oxford : Clarendon) p243
- [10] Joy D C and Luo S 1989 *Scanning* **11** 176
- [11] Chen Y Q and Mao Y J 1984 *Acta Phys. Sin.* **33** 621(in Chinese)
[陈永祺、毛允静 1984 物理学报 **33** 621]

Studies of energy dissipation distribution in low-energy electron beam lithography by Monte Carlo method *

Ren Li-Ming Chen Bao-Qin

(*Microelectronics R and D Center , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100029 , China*)

Tan Zhen-Yu

(*Electric Engineering College , Shandong University , Jinan 250061 , China*)

(Received 24 August 2001 ; revised manuscript received 19 September 2001)

Abstract

A physical model describing the scattering processes of low-energy electrons is proposed. The Monte Carlo method was applied to simulate the complex scattering processes of Gaussian-distribution low-energy electrons in the resist substrate target. And on this basis , the influences of different exposure conditions such as incident beam energy , resist thickness and substrate material on energy dissipation density were investigated to obtain the regularity of energy dissipation distribution. It is indicated that appropriately low beam energy , thin resist and low atomic number substrate can increase the contribution of forward scattering electrons to energy dissipation density distribution in the resist and reduce the contribution of backscattering electrons and thus improve the exposure resolution.

Keywords : electron beam lithography , Monte Carlo method , low-energy electron scattering , energy dissipation distribution

PACC : 3480 , 8220R , 8220W , 0250

* Project supported by the Special Funds for National Ninth Five-Year Science and Technology Program of China(Grant No. 97-762-03-02) , and the State Key Program of Basic Research of China(Grant No. G2000036504).