

电子束光刻的邻近效应及其模拟^{*}

孙 霞 尤四方 肖 沛 丁泽军

(中国科学技术大学 结构分析重点实验室 物理系 合肥 230026)

(2004 年 12 月 14 日收到 2005 年 3 月 8 日收到修改稿)

用 Monte Carlo 方法模拟和分析了电子束光刻中限制其分辨率的主要因素——邻近效应的影响。分析了入射电子束的形状、入射电子的能量、衬底材料和厚度对邻近效应大小的影响，并与实验结果进行了比较，发现模拟结果与实验结果符合得很好。分析表明高斯分布的电子束比理想电子束的邻近效应大；衬底原子序数越大，衬底越厚，入射电子束能量越低，邻近效应越大。

关键词：电子束光刻，邻近效应，Monte Carlo

PACC : 3480, 7450, 7115Q

1. 引言

半导体微电子工业正按 Moore 定律，即单位面积硅片上的晶体管集成度以每三年翻两番的速度迅速发展。集成度的不断提高使器件的特征尺寸越来越细，美国 1997 年国家半导体技术指南^[1]指出，到 2009 年最小线宽要达到 50nm 的水平。纳米器件的研制成为当前世界科学研究急需解决的问题。光刻技术是人类迄今所能达到的精度最高的加工技术，常规光学光刻技术对微电子工业的迅速发展作出了巨大的贡献，每一代集成电路都对应着一代特定的光刻技术。尽管如此，常规光学光刻技术由于受瑞利公式的限制目前正面临严重挑战。

与光学光刻相比，电子束光刻的优势是十分明显的。这是由于电子的波长很短，只有 nm 量级，不受衍射效应的限制。因此电子束光刻具有极高的分辨率，甚至可以达到原子量级。多年来电子束光刻一直被看成是器件尺寸缩小到光学曝光不满足要求时的最佳方案^[2-4]，由电子束曝光制作的器件最小尺寸可以达到 10—20nm。电子束光刻由于是无掩模直写型的，因此具有一定的灵活性，可直接制作各种图形。另外电子束光刻还具有聚焦容易、可控性强、剂量大等特点。

电子束光刻的分辨率虽然不受衍射效应的限

制，但由于电子在抗蚀剂和衬底中遭受散射，改变了其运动方向，将会引起另外一个影响分辨率的效应——邻近效应。邻近效应与入射电子束条件、抗蚀剂和衬底条件都有关联。本文通过 Monte Carlo 方法模拟了电子在抗蚀剂和衬底中的散射过程，以及抗蚀剂中电子沉积能量的分布，得到了电子曝光后抗蚀剂的剖面图，分析了各种初始条件包括入射电子束形状、能量、抗蚀剂厚度、衬底类型等对电子曝光的影响，并与实验结果进行了比较，发现入射电子能量相同时，具有高斯分布的电子束远比理想电子束的曝光范围大，入射电子束能量越低、衬底越厚、衬底的原子序数越大。

2. 邻近效应

邻近效应指的是由于电子在抗蚀剂和衬底中受到散射使电子偏离原来入射方向，于是原来不想曝光的近邻地方被曝光了，而有些想曝光的区域得不到足够的曝光，引起图形的改变，影响分辨率^[5-10]。

电子在抗蚀剂和衬底中的散射可以按照其散射的角度分为两类：前散射和背散射。散射后的电子与入射电子方向的夹角小于 90° 时是前散射，反之大于 90° 时属于背散射，示意图如图 1(a) 所示。前散射由于散射角度小，产生的影响范围比较小，结果是加宽原来入射电子束的束流分布。背散射由于散射角度

* 国家自然科学基金(批准号 50306006, 10025420, 90206009)资助的课题。

大于 90°, 影响范围大, 能达到几微米。另外, 来自衬底中的背散射电子会返回到抗蚀剂中, 引起抗蚀剂

额外的曝光。结果, 显影后的抗蚀剂图形尺寸比原来预期的要宽, 即引起了邻近效应。

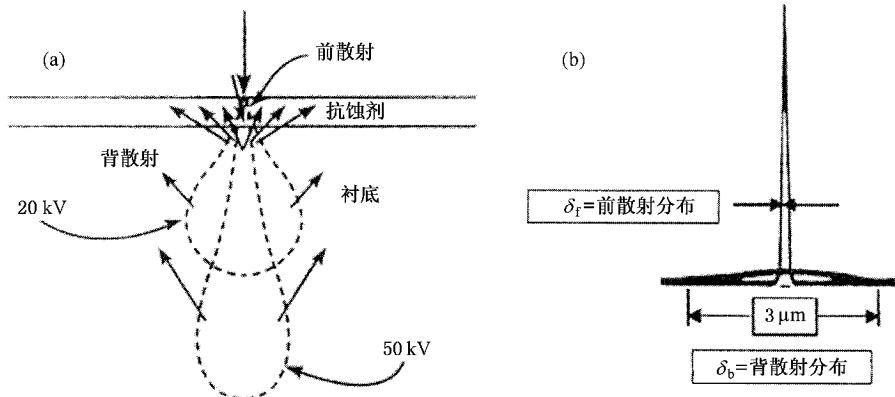


图 1 (a) 抗蚀剂中电子的散射示意图 (b) 前散射和背散射电子在抗蚀剂中沉积能量分布示意图

Chang^[11]认为前散射电子和背散射电子在抗蚀剂中沉积的能量都呈高斯分布, 如图 1(b), 前散射电子在抗蚀剂中形成一个很窄的高斯分布 δ_f , 而背散射电子形成一个很宽的高斯分布 δ_b 。他在实验数据的基础上, 提出了一个由两个高斯分布组成的经验表达式来描述前散射和背散射电子所引起的沉积能量:

$$F(r) = \frac{F(E)}{\pi(1+\eta)} \cdot \left\{ \left(\frac{1}{\beta_f^2} \right) \exp\left(-\frac{r^2}{\beta_f^2}\right) + \frac{\eta}{\beta_b^2} \exp\left(-\frac{r^2}{\beta_b^2}\right) \right\}, \quad (1)$$

其中 β_f 和 β_b 分别是前散射电子和背散射电子的覆盖范围, η 是背散射电子引起的沉积能量与前散射电子引起的沉积能量的比例, $F(r)$ 是在 r 处沉积的能量, $F(E)$ 是沉积的全部能量。由于表达式中的参数依赖于很多具体的实验因素, 比如抗蚀剂厚度, 显影液, 显影条件, 初始电压, 很难建立有效的理论来得到这些参数。因此邻近效应的大小还无法由理论直接求得, 有必要用数值模拟的方法进行研究。本文采用 Monte Carlo 方法模拟分析各初始条件对邻近效应大小的影响。

3. 模拟模型

电子在固体中的散射可以分为弹性散射和非弹性散射, 发生弹性散射时入射电子的方向发生改变, 但能量保持不变, 发生非弹性散射时入射电子既改变方向, 又损失能量。

模拟中对于弹性散射, 我们采用 Rutherford 微分

弹性散射截面公式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4E^2(1 - \cos\theta + 2\xi)^3}, \quad (2)$$

其中 σ 为散射截面, Ω 为空间立体角, e 为电子电量, E 为入射电子能量, Z 为原子序数, ξ 为屏蔽参数, θ 为散射角。

对于非弹性散射, 散射电子将损失能量, 损失的能量沉积在抗蚀剂中, 使抗蚀剂分子链断裂或连接。这里采用的是扩展的 Monte Carlo 模型, 它与传统的连续慢化近似的区别在于这里将非弹性散射分成两部分: 内壳层电子激发和价电子激发。

对内壳层电子激发采用 Gryzinski 激发函数描述:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E} &= \frac{n_i \pi e^4}{\Delta E^3} \frac{E_i}{E} \left(\frac{E}{E+E_i} \right) \left(1 - \frac{\Delta E}{E} \right)^{\Delta E/E_i + \Delta E} \\ &\times \left\{ \frac{\Delta E}{E_i} \left(1 - \frac{E_i}{E} \right) \right. \\ &\left. + \frac{4}{3} \ln \left[2.7 + \left(\frac{E - \Delta E}{E_i} \right)^{1/2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中, n_i , E_i , ΔE , 分别为内壳层电子数, 束缚能及损失能量。

对于非弹性散射的价电子部分用阻止本领来描述。阻止本领是电子走过的单位路程上损失的能量。电子在固体中散射的阻止本领通常近似取为 Bethe 阻止本领 (dE/dx)_{Bethe}。由于内壳层激发已经由 Gryzinski 激发函数描述, 这部分电子对于阻止本领的贡献 (dE/dx)_{core} 应减去, 从而得到价电子部分的阻止本领

$$\left(\frac{dE}{dS} \right)_{valence} = \left(\frac{dE}{dS} \right)_{Bethe} - \left(\frac{dE}{dS} \right)_{core}, \quad (4)$$

其中

$$\left(\frac{dE}{dS}\right)_{\text{Bethe}} = 2\pi e^4 Z \frac{N_{AV} \rho}{A} \frac{1}{E} \ln\left(1.166 \frac{E}{J}\right), \quad (5)$$

内壳层阻止本领是所有壳层阻止本领的总和

$$\left(\frac{dE}{dS}\right)_{\text{core}} = \sum_i \left(\frac{dE}{dS}\right)_i. \quad (6)$$

每一壳层的阻止本领可由下面的表达式求得：

$$\begin{aligned} \left(\frac{dE}{dS}\right)_i &= n_i \pi e^4 \frac{1}{E} \left(\frac{E - E_i}{E + E_i}\right)^{3/2} \\ &\times \left\{ \ln\left(\frac{E}{E_i}\right) + \frac{4}{3} \right. \\ &\left. \times \ln\left[2.7 + \left(\frac{E}{E_i} - 1\right)^{1/2}\right]\right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

由价电子阻止本领可以得到价电子激发损失的能量

$$\Delta E = S \frac{dE}{dS}. \quad (8)$$

4. 结果和讨论

理想的电子束具有无限小线宽,即点入射,图2(a)是理想电子束在抗蚀剂中的沉积能量密度分布图,横坐标是离入射点的半径r,纵坐标是深度z,不

同的灰度代表不同的沉积能量密度,大小如右边的标尺所示。这里电子能量为100keV,抗蚀剂是1000nm厚的PMMA,衬底为5000nm厚的Si。从图中可见,不仅在r=0处有能量沉积,r>0处也有很大的能量沉积,从而表现出明显的邻近效应,并且随着抗蚀剂深度的增加,能量沉积的范围越来越大,邻近效应也越来越大。

但实际中不可能得到理想的点入射电子束,电子束会有一定的宽度,也会按一定的分布。高斯电子束是最简单也最普遍使用的一种电子束。图2(b)是半高宽为40nm的高斯电子束在抗蚀剂中的电子沉积能量密度分布图,抗蚀剂和衬底的条件与图2(a)中理想电子束相同。与理想电子束入射相比较,发现一方面中心附近高斯电子束的沉积能量比理想电子束的沉积能量低,理想电子束在中心的沉积能量密度是 $10^{18.5}$ eV/cm³,高斯电子束在中心的沉积能量只有 $10^{17.5}$ eV/cm³,低了一个量级;另一方面,高斯电子束沉积能量的范围分散得更开。因此,高斯分布的电子束远比理想电子束的邻近效应大。考虑到实际情况,后面的模拟中采用的都是高斯电子束。

为了验证模拟结果的正确性,将模拟结果与实

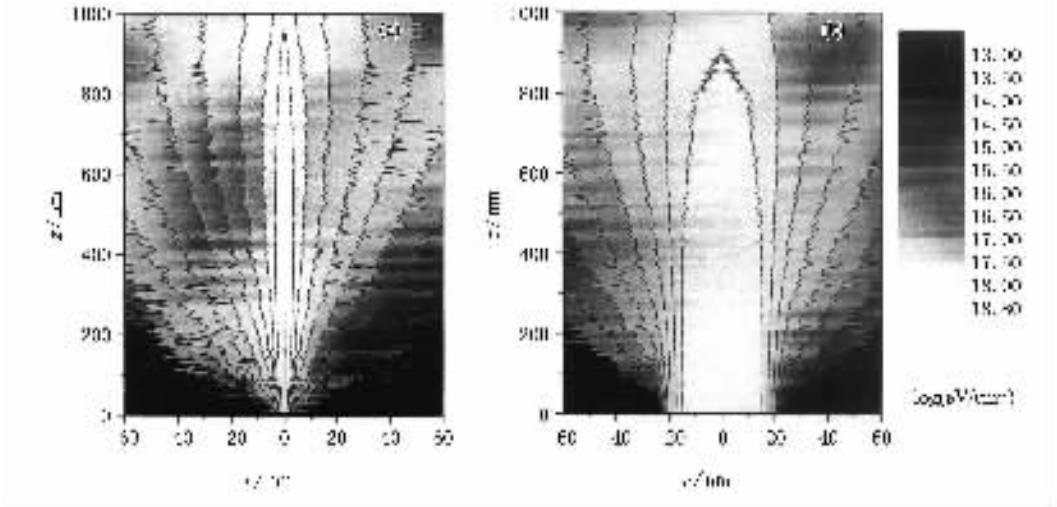


图2 PMMA 中的沉积能量密度分布图 (a)理想电子束,(b)高斯电子束

验结果^[12]进行了比较,图3是半高宽为25nm、能量为20keV的高斯电子束,在PMMA/Si上沿y方向线扫描显影后得到的横截面xz的轮廓,其中衬底厚度为5000nm,PMMA的厚度为400nm,图中虚线是实验得到的抗蚀剂显影后的轮廓线,实线是模拟的能量密度为 $10^{30.8}$ eV/C·cm²的分界线,这里能量密度的单位是由单位体积中沉积的能量eV/cm³除以入射电

子的剂量,线扫描时剂量单位为C/cm。实验中的电子剂量为 $b = 0.3 \times 10^{-8}$ C/cm。比较图中两线可以看出,在深度100nm以下,模拟的轮廓线与实验轮廓线非常接近,并且都随着深度的加深,沉积能量的分布逐渐展宽,有明显的邻近效应。但在抗蚀剂的表面附近,实验的轮廓线比模拟的轮廓线宽得多,Greenreich和Duzer^[13]认为表面的增宽不是由于电子的散射引

起的,而是归因于另两个方面的原因:1)抗蚀剂在显影之前有收缩,引起表面扭曲;2)显影液会清洗掉表面一部分曝光不足的部分。我们的模拟中只考虑了电子由于发生非弹性散射引起的能量沉积,而没有涉及到抗蚀剂显影过程中的相关问题,因此没有能够再现实验上的抗蚀剂表面处轮廓线的加宽现象。

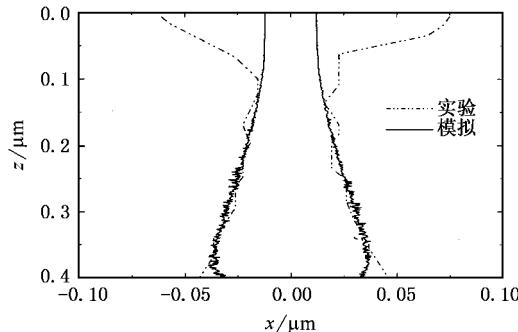


图3 抗蚀剂显影后的轮廓(实线为模拟轮廓,虚线为实验轮廓^[4])

图4还画出了线扫描沉积能量横向分布曲线 $E(x, z)$,实验条件同图3。抗蚀剂深度 z 分别为 0.2, 0.3 和 0.4 μm , 图中曲线是模拟结果, 符号是实验结果^[12]。从图中可以看出模拟结果与实验结果符合得很好, 沉积能量随横向距离的增加而下降, 虽然沉积能量大部分集中在电子束附近, 但即使是离入射电子束横向距离达 1 μm 处, 仍有能量沉积且沉积的能量密度达 $10^{29} \text{ eV/C} \cdot \text{cm}^2$, 表明邻近效应是不可忽略的。比较不同的深度, 可以看出越深的地方, 沉积能量随 x 的增加下降得越慢, 说明越深的地方邻近效应越大。

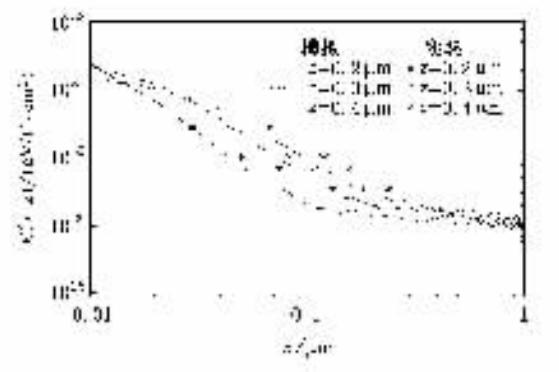


图4 线扫描沉积能量横向分布曲线

上面的分析表明, 模拟结果与实验结果是一致的, 这说明我们模拟中采用的模型是合理的, 模拟的方法是正确的, 因此完全可以借助于模拟的方法研究不同条件对邻近效应的影响。

电子与固体相互作用时, 入射电子的能量不一样, 电子受到的散射也不一样, 因此不同能量的电子束引起的邻近效应大小也不一样。图5中分别画出了入射电子能量为 20keV 和 50keV 时在 100nm 抗蚀剂 PMMA 中电子沉积能量密度的分布。这里衬底为 540nm 的 Si, 电子束线宽为 25nm。比较一下可以看出, 入射电子束能量较高时在相同区域沉积的能量密度反而低, 比如在中心区域, 入射能是 20keV 时, 沉积能量密度是 $10^{31.75} \text{ eV/C} \cdot \text{cm}^2$, 而入射能量是 50keV 时只有 $10^{31.50} \text{ eV/C} \cdot \text{cm}^2$ 。若以相同的能量密度阈值来划分, 入射能越低得到的范围越宽, 如入射能量是 20keV 时沉积能量密度的对数高于 31.50 的区域比入射能量是 50keV 时宽很多, 表明邻近效应大

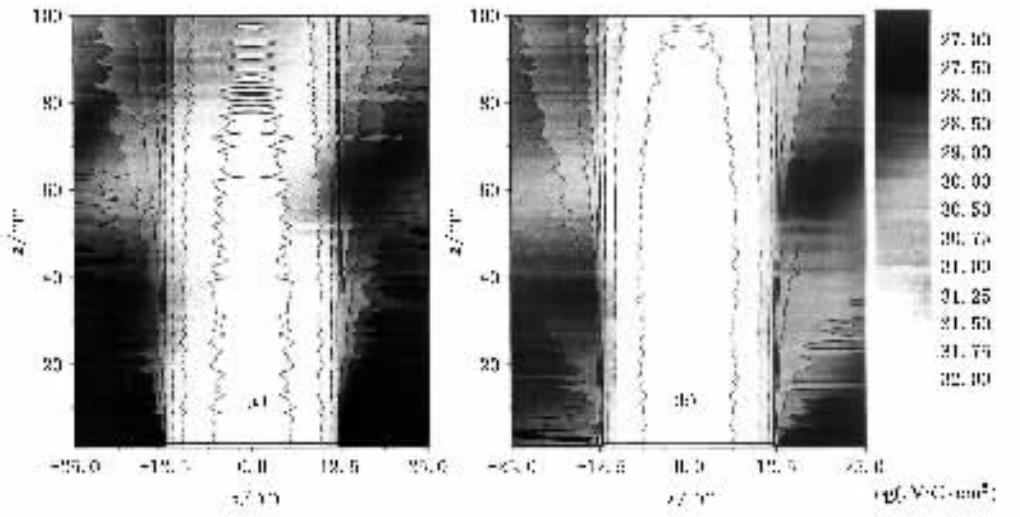


图5 线扫描剖面图(不同入射电子能量比较)

很多,可以从以下两个方面来解释邻近效应随能量的增大而减小。第一,根据 Rutherford 弹性散射截面,能量的增加使散射到大角度的概率减小,从而在大角度处沉积的能量也小,减小了邻近效应;第二,能量大时 Bethe 阻止本领小,从而单位路程上损失沉积的能量小,因此邻近效应小。所以,入射电子能量越低,散射角度越大,沉积的能量越大,邻近效应越大。

电子在衬底中部分被背散射回到抗蚀剂中引起抗蚀剂的额外曝光是邻近效应的主要因素。因此衬底的性质包括组成衬底的材料、衬底的厚度等非常重要。下面分析它们对邻近效应的影响。

图 6 分别是以 Si 和 Au 为衬底得到的扫描线横截面的能量密度分布图,入射电子能量为 20keV,电子束束宽为 25nm,抗蚀剂的厚度是 100nm,衬底厚度都是 540nm。从图中可以看出,以 Au 为衬底时邻近效应要显著得多,尤其是在抗蚀剂与衬底的边界附近,比如能量密度为 $10^{30.75}$ eV/C·cm³ 对应的轮廓线,在 $z = 100$ nm 的深度,Si 为衬底时小于 35nm 而 Au 为衬底时从图中可以看出远大于 50nm。这是由于背散射系数和原子序数 Z 有明显的依赖关系。原子序数是 79 的 Au 的背散射系数大约为 50%,而原子序数为 14 的 Si 的背散射系数只有 17%^[14]。这也从 Rutherford 散射公式来理解,Z 愈大,散射角

愈大,多次散射后背散射的概率也增大。因此可以得出结论:衬底材料的原子序数越大,邻近效应越大。实际的电子束光刻中一般不以 Au 为衬底,一方面因为 Au 成本高,另一方面它会引起高的邻近效应也是重要原因之一。

值得一提的是,图 6 中对能量密度较大的轮廓线,以 Au 为衬底时刻蚀线宽反而小于 Si 为衬底时的刻蚀线宽,如能量密度为 $10^{31.25}$ eV/C·cm³,在抗蚀剂深度为 100nm 处,Au 为衬底时,刻蚀线宽仅约为 15nm,而 Si 为衬底时约为 25nm;对能量密度更高的轮廓线,如 $10^{31.75}$ eV/C·cm³,以 Au 为衬底时甚至达不到抗蚀剂的底部。这是由于背散射电子所引起的沉积能量 $F(r)$ 也呈高斯分布^[11],原子序数较高的 Au 衬底,虽然其背散射系数大,沉积能量 $F(r)$ 的半高宽远比原子序数较低的 Si 衬底的宽,但在 $r \rightarrow 0$ 处,高斯分布的峰值在以 Si 为衬底时比 Au 为衬底时大,也就是 Si 为衬底时在电子束附近沉积的能量更多更大些,导致了能量密度大的轮廓线向外扩展得多,轮廓线比 Au 为衬底时还宽些。由于实际显影过程中抗蚀剂的曝光有一定的能量密度阈值,该值一般不会很高,因此实验上得到的显影后的轮廓更接近于模拟中的能量密度较低的轮廓线,表现出原子序数大的衬底邻近效应也大的现象。

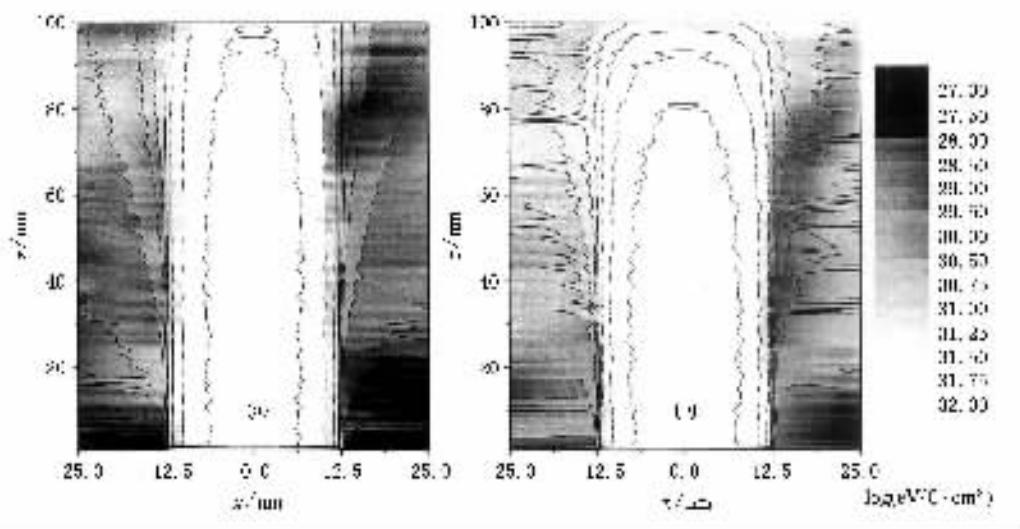


图 6 线扫描剖面图(不同衬底材料比较)

衬底厚度对邻近效应也有影响。图 7 是不同厚度的衬底得到的扫描线横截面的能量密度分布图,入射电子束条件与图 6 中一样,这里都以 Si 为衬底,图 6(b)衬底厚度为 540nm,(a)厚度为 60nm。可以看出,对于相同的沉积能量,(b)展得比较宽,比如

图中画出的沉积能量密度最大的区域(b)比(a)要宽得多。因此,衬底越厚,邻近效应越大。这其实很容易理解,因为衬底越厚,电子在透射出去之前走的步数越多,被散射回抗蚀剂的概率越大,邻近效应也就越大。因此,为了减小邻近效应,一个可行的办法是

尽量减小衬底厚度.

前面这三个对邻近效应的影响因素中, 影响最

大的是衬底材料, 其次是电子能量, 影响最小的是衬底厚度.

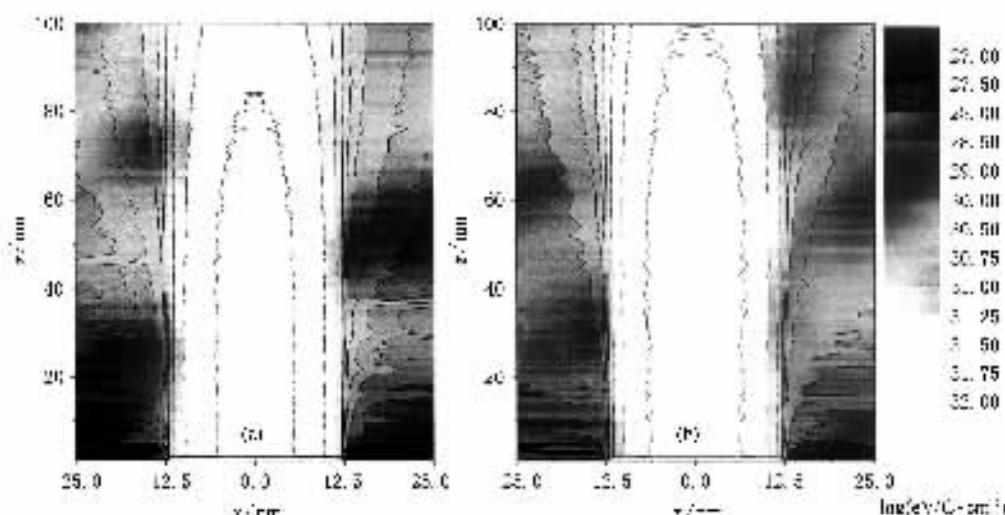


图 7 线扫描剖面图(不同衬底厚度比较)

5. 结 论

总之, 本文用 Monte Carlo 方法模拟了电子束光

刻各初始条件对邻近效应的影响, 结果表明高斯分布的电子束比理想电子束的邻近效应大, 入射电子束能量越低, 衬底原子序数越大, 衬底越厚, 邻近效应越大.

- [1] Gargini P, Glaze J, Williams O 1998 *Solid State Technology* **41** 73
- [2] Yoshino H, Matsumoto H 1992 *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1* **31** 4283
- [3] Krasnoperova A A, Khan M, Rhyner S, Cerrina F 1994 *J. Vac. Sci. Technol. B* **12** 3900
- [4] Fedynyshyn T H, Thackeray J W, George J H, Denison M D 1994 *J. Vac. Sci. Technol. B* **12** 3888
- [5] Parikh M, Kyser D F 1979 *J. Appl. Phys.* **50** 1104
- [6] Broers A N 1988 *IBM J. RES. Develop.* **32** 502
- [7] Rishton S A, Kern D P 1987 *J. Vac. Sci. Technol. B* **5** 135.
- [8] Wind S J, Gerber P D, Rothuizen H 1998 *J. Vac. Sci. Technol. B* **16** 3262
- [9] Yamashita H, Nomura E, Manako S, Kobinata H, Nakajima K, Nozue H 1999 *J. Vac. Sci. Technol. B* **17** 2860
- [10] Ea C S, Brown A D 1999 *J. Vac. Sci. Technol. B* **17** 323
- [11] Chang T H P 1975 *J. Vac. Sci. Technol.* **12** 1271
- [12] Wolf E D, Ozdemir F S, Perkins W E, Coane P J, *Proceedings of the 11th Symposium On Electron, Ion, and Laser Beam Technology*
- [13] Greeneich J S, Van Duzer T 1973 *J. Vac. Sci. Technol.* **10** 1056
- [14] McCord M A, Rooks M J 1997 *Electron beam lithography* (SPIE Optical Engineering Press, London)

Simulation of the proximity effect of electron beam lithography *

Sun Xia You Si-Fang Xiao Pei Ding Ze-Jun

(*Structure Research Laboratory and Department of Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 ,China*)

(Received 14 December 2004 ; revised manuscript received 8 March 2005)

Abstract

Electron beam lithography has high sensitivity since it is free from limitation from diffraction effect. It will be the most common technique of the next generation lithography to replace the conventional optical lithography. The proximity effect is the most important limitation of the sensitivity of lithography, which is simulated with Monte Carlo method in this paper. The influence on proximity effect of the shape and energy of electron beam and the material and depth of substrate is analyzed. The simulation results are compared with the experimental data and are found to fit well. It is found that, the proximity effect shown by Gaussian shaped electron beam is much larger than that by ideal electron beam, and larger atomic number, thicker substrate and lower energy of the electron beam will cause larger proximity effect independently.

Keywords : electron scattering , proximity effect , Monte Carlo simulation

PACC : 3480 , 7450 , 7115Q

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60306006 ,10025420 90206009).