

# 基于修正等效介质理论的微纳深沟槽结构反射率快速算法研究\*

刘世元<sup>1)†</sup> 顾华勇<sup>2)</sup> 张传维<sup>1)</sup> 沈宏伟<sup>2)</sup>

1) 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)

2) 武汉光电国家实验室光电材料与微纳制造研究部, 武汉 430074)

(2007 年 12 月 27 日收到, 2008 年 2 月 25 日收到修改稿)

利用等效介质理论和严格耦合波理论研究比较微纳米级高深宽比深沟槽结构的红外反射谱, 提出一种对等效折射率加入色散修正项的深沟槽结构反射率快速算法. 通过超越色散方程分析和大量计算发现, 加入的等效折射率色散修正项与波长的平方成反比, 并且与深沟槽结构的材料、周期和占空比有关. 这种新的计算方法可以非常精确地获得高深宽比深沟槽结构的反射率, 而且明显提高了运算速度, 在复杂深沟槽结构基于模型的红外反射谱测量中具有重要的应用价值, 可以应用于微电子和微机电系统制造过程中高深宽比微纳深沟槽结构刻蚀进度的在线实时监测.

关键词: 深沟槽结构, 严格耦合波理论, 等效介质理论, 反射率

PACC: 7865H, 0765G, 3320E

## 1. 引言

在微电子和微机电系统(microelectromechanical system, MEMS)设计与制造工艺领域, 如动态随机存储器(dynamic random access memory, DRAM)的制造过程中, 为了实现有效的工艺控制, 需对深沟槽结构的尺寸进行在线、非破坏性的精确检测. 随着关键尺寸向 65 nm 节点发展, 表面形貌仪、原子力显微镜、扫描电子显微镜和聚焦离子束等传统的测量技术, 已经很难甚至根本无法满足工艺控制和优化所需的深沟槽测量要求. 近年来有研究者提出一种基于模型的红外反射谱(model-based infrared reflectometry, MBIR)测量新方法<sup>[1-3]</sup>, 一束红外光入射到深沟槽, 在沟槽顶部和底部会分别发生反射并干涉, 通过光电探测器接受到反射的红外光并分析比较深沟槽红外反射率的测量值与理论模型值, 获得沟槽的刻蚀深度和形状结构, 从而实现一种无接触、非破坏、快速、低成本和高灵敏度的测量, 其关键技术在于深沟槽红外反射模型的精确建立及快速求解. 采用严格

耦合波理论(rigorous coupled-wave analysis, RCWA)<sup>[4,5]</sup>计算反射率虽然计算精度很高, 但计算速度慢, 无法满足在线实时测量沟槽刻蚀深度的要求, 所以目前广泛采用等效介质理论(effective medium approximation, EMA)建立深沟槽红外反射模型<sup>[6,7]</sup>, 但等效介质理论计算的反射率精度不高. 本文采用等效介质理论和严格耦合波理论分别计算和模拟了深沟槽的红外反射谱, 并在此基础上提出一种对等效折射率加入色散修正项的方法计算反射率, 我们简称为修正等效介质理论(corrected effective medium approximation, CEMA). 大量仿真计算表明, 该方法计算精度高, 速度快, 能满足对深沟槽刻蚀过程在线测量反应速度的要求, 具有重要的应用价值.

## 2. 等效介质理论分析

等效介质理论可以用来研究高深宽比深沟槽的反射率<sup>[8,9]</sup>. 如图 1 所示, 对一维深沟槽结构进行分析. 周期为  $\Lambda$ , 占空比为  $f$ , 对于光波电场矢量平行于沟槽的等效折射率( $n_{\text{eff}}^{\parallel}$ )和垂直于沟槽的等效折

\* 国家高技术研究发展计划(863)(批准号: 2006AA04Z325)国家自然科学基金(批准号: 50775090)国家重点基础研究发展计划(批准号: 2003CB716207)和新世纪优秀人才支持计划(批准号: NCET-06-0639)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: shyliu@mail.hust.edu.cn.

射率(  $n_{\text{eff}}^{\perp}$  )分别为

$$n_{\text{eff}}^{\parallel} = \sqrt{(1-f)n_1^2 + fn_2^2} \text{ , TE 波 , } \quad (1)$$

$$n_{\text{eff}}^{\perp} = \frac{n_1 n_2}{\sqrt{fn_1^2 + (1-f)n_2^2}} \text{ , TM 波 , } \quad (2)$$

其中  $n_1, n_2$  分别是两种介质的折射率.

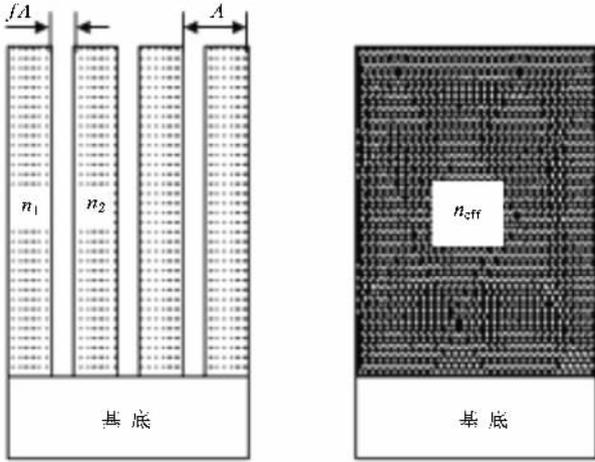


图1 深沟槽的等效模型示意图

由于入射的红外光波长远大于沟槽周期,可以运用等效介质理论计算出沟槽每层的等效折射率,将沟槽等效成均匀的层状介质,然后采用传输矩阵的方法计算反射率<sup>[10]</sup>.

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left[ \prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right] D_s, \quad (3)$$

式中,  $D_l$  是含有  $l$  层等效折射率和折射角的光学特征矩阵,  $P_l$  是含有相位变化角的矩阵,  $D_0$  和  $D_s$  是环境和基底的光学特征矩阵,则反射系数为

$$r = \frac{M_{21}}{M_{11}}, \quad (4)$$

反射率为

$$R = |r|^2. \quad (5)$$

### 3. 严格耦合波理论分析

图2为多层 DRAM 深沟槽的红外反射示意图. 沟槽由  $l$  层构成,每层由两种不同的介质周期性的交替组成. 沟槽周期为  $\Lambda$ , 占空比为  $f$ , 每层的深度为  $d_l$ . 入射空间 I 区的折射率为  $n_1$ , 透射空间 II 区的折射率为  $n_2$ . 一束偏振红外光从垂直沟槽的平面入射,入射角为  $\theta$ . 不失一般性,本文只分析 TE 偏振波入射到深沟槽的情况<sup>[11-13]</sup>.

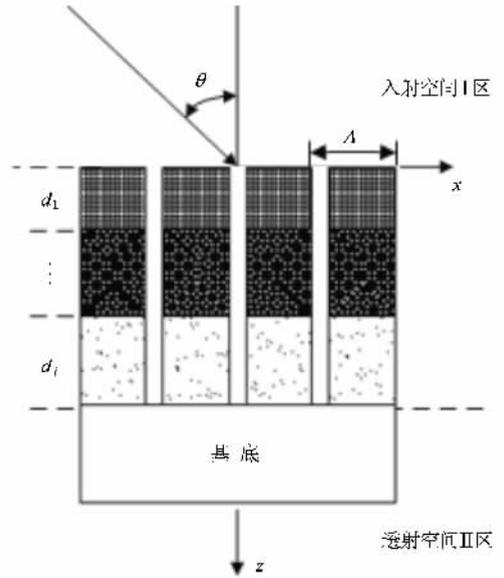


图2 深沟槽反射率计算示意图

在沟槽区,每层的介电常数  $\epsilon_l(x)$  为一周期函数,可用傅里叶级数展开:

$$\epsilon_l(x) = \sum_h \epsilon_{l,h} \exp[j(2\pi h/\Lambda)x], \quad (6)$$

式中,  $\epsilon_{l,h}$  为第  $l$  层沟槽介电常数的傅里叶级数的第  $h$  级系数( $j^2 = -1$ ). I 入射区和 II 透射区的归一化电场矢量为

$$E_{I,y} = E_{\text{inc},y} + \sum_i R_i \exp[-j(k_{xi}x - I_{,zi}z)], \quad (7)$$

$$E_{II,y} = \sum_i T_i \exp[-j(k_{xi}x - II_{,zi}(z-d))], \quad (8)$$

其中,

$$E_{\text{inc},y} = \exp[-jk_0 n_1(\sin\theta x + \cos\theta z)], \quad (9)$$

$$k_{xi} = k_0 [n_1 \sin\theta - j(\lambda_0/\Lambda)], \quad (10)$$

$$k_0 = 2\pi/\lambda, \quad (11)$$

$$k_{l,zi} = \begin{cases} +k_0 [n_l^2 - (k_{xi}/k_0)^2]^{1/2}, & k_0 n_l > k_{xi} \\ -jk_0 [(k_{xi}/k_0)^2 - n_l^2]^{1/2}, & k_0 n_l < k_{xi} \end{cases}, \quad (12)$$

$l = \text{I, II}$ ,

式中,  $R_i$  是 I 区中  $i$  级反射波的归一化电场振幅矢量,  $T_i$  是 II 区中  $i$  级透射波的归一化电场振幅矢量.

在沟槽区的第  $l$  层,归一化电场和磁场的分布(对于 TE 波,研究电场的  $y$  分量和磁场的  $x$  分量)可以分别表示为空间谐波的傅里叶级数展开

$$E_{l,y} = \sum_i S_{l,yi}(z) \exp(-jk_{xi}x), \quad (13)$$

$$H_{l,y} = -j \left( \frac{\epsilon_0}{u_0} \right)^{1/2} \sum_i U_{l,xi}(z) \exp(-jk_{xi}x) \quad (14)$$

式中  $\epsilon_0, \mu_0$  分别为真空中的介电常量和磁导率,  $S_{l,xi}(z)$  和  $U_{l,xi}(z)$  分别为  $l$  层中  $i$  级空间谐波的电场和磁场振幅, 而  $E_{l,gy}$  和  $H_{l,gy}$  在深沟槽区域满足麦克斯韦基本方程组

$$\frac{\partial E_{l,gy}}{\partial z} = j\omega\mu_0 H_{l,gx}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial H_{l,gx}}{\partial z} = j\omega\epsilon_0 \epsilon(x) E_{l,gy} + \frac{\partial H_{l,gz}}{\partial x}. \quad (16)$$

将(13)式和(14)式分别代入(15)和(16)式得

$$\frac{\partial S_{l,xi}}{\partial z} = k_0 U_{l,xi}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial U_{l,xi}}{\partial z} = \left(\frac{k_{xi}^2}{k_0}\right) S_{l,xi} - k_0 \sum_p \epsilon_l(i-p) S_{l,ip}. \quad (18)$$

将其写成矩阵形式

$$\partial^2 S_{l,ip} / \partial z^2 = A_l S_{l,ip}, \quad (19)$$

其中  $A_l = K_x^2 - E_l, K_x$  是一个对角元素为  $k_{xi}/k_0$  的对角矩阵,  $E_l$  是第  $l$  层的介电常量展开后形成的矩阵, 其元素为  $E_l(i, p) = \epsilon_l(i-p), z' = k_0 z$ .

这样, 深沟槽不同层的切向电磁场分布可以用本征值和本征矢量表示

$$S_{l,xi}(z) = \sum_{m=1}^n \omega_{l,im} \{ c_{l,m}^+ \exp[-k_0 q_{l,m}(z - D_l + d_l)] + c_{l,m}^- \exp[k_0 q_{l,m}(z - D_l)] \}, \quad (20)$$

$$U_{l,xi}(z) = \sum_{m=1}^n v_{l,im} \{ -c_{l,m}^+ \exp[-k_0 q_{l,m}(z - D_l + d_l)] + c_{l,m}^- \exp[k_0 q_{l,m}(z - D_l)] \}, \quad (21)$$

式中,  $D_l$  为到  $l$  层时沟槽的总深度,  $d_l$  为每一个薄

层的厚度, 即  $D_l = \sum_{N=1}^l d_l, \omega_{l,im}$  为对应第  $l$  层的矩阵  $A_l$  本征矢量  $W_l$  的元素,  $q_{l,m}$  为对应第  $l$  层的矩阵  $A_l$  本征值的正平方根, 构建矩阵  $V_l = W_l Q_l, v_{l,im}$  为  $V_l$  的元素,  $Q_l$  为对角元素  $q_{l,m}$  构成的矩阵,  $c_{l,m}^+$  和  $c_{l,m}^-$  为待定系数,  $m$  表示展开级数中的第  $m$  级, 然后根据边界方程就可以计算出各级衍射波的反射率  $DE_{ri}$ , 即

$$DE_{ri} = R_i R_i^* \operatorname{Re} \left( \frac{k_{l,xi}}{k_0 n_1 \cos \theta} \right). \quad (22)$$

### 4. 数值计算与讨论

假定一个两层的周期性结构的 DRAM 深沟槽模型如图 3 所示, 周期为 200 nm, 占空比为 0.2, 上层为 150 nm 厚的  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , 下层为 7  $\mu\text{m}$  厚的 Si, 基底是

Si, 中间是空气填充. 一束波长为 2—20  $\mu\text{m}$  波段的红外偏振光(TE 波)垂直入射到沟槽结构的上表面, 分别利用严格耦合波理论和等效介质理论计算得到反射谱如图 4 所示.

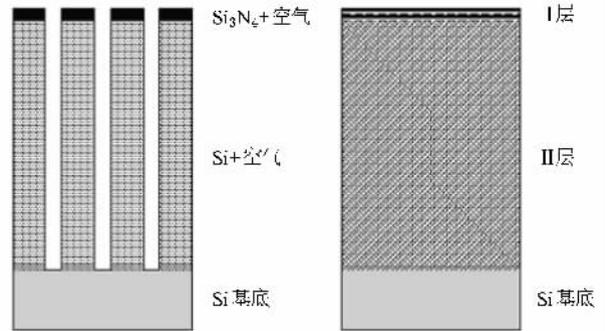


图 3 两层 DRAM 深沟槽结构的等效模型

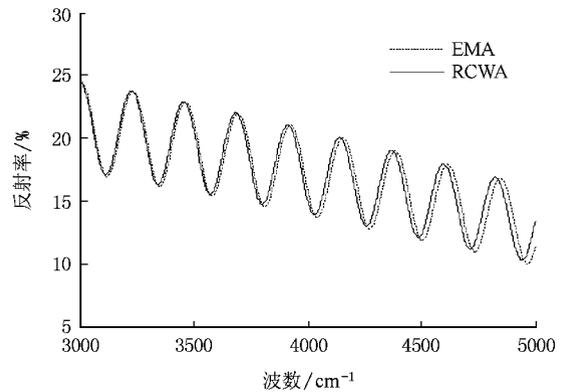


图 4 等效介质理论和严格耦合波理论计算的反射谱

从图 4 中可看出, 在波数 3000—5000  $\text{cm}^{-1}$  的范围, 运用等效介质理论计算的反射率发生了较大偏差, 误差率为 4.05%. 运用等效介质理论和严格耦合波理论计算反射率的程序运行时间分别为 79 ms 和 840 ms (Intel P4 2GHz CPU, Window XP 操作系统), 可见等效介质理论的计算要比严格耦合波快 10 倍.

### 5. 修正等效介质理论分析

深沟槽结构的等效折射率可以通过超越色散方程求解<sup>[14]</sup>. 对于光波电场矢量平行于沟槽的等效折射率  $n_{\text{eff}}^*$  可用下式计算:

$$\sqrt{n_1^2 - n_{\text{eff}}^{*2}} \tan \left[ \frac{\pi \Lambda (1 - f) \sqrt{n_1^2 - n_{\text{eff}}^{*2}}}{\lambda} \right]$$

$$= -\sqrt{n_2^2 - n_{\text{eff}}^{*2}} \tan\left[\frac{\pi \Delta f \sqrt{n_2^2 - n_{\text{eff}}^{*2}}}{\lambda}\right], \quad (23)$$

式中,  $n_1, n_2$  分别是两种介质的折射率,  $f$  为占空比,  $\Delta$  为周期,  $\lambda$  是光波波长。这是一个超越方程, 通过将正切函数化成幂级数的形式可以近似求解得

$$n_{\text{eff}}^* = \sqrt{n_{\text{eff}}^{\prime\prime 2} + \frac{B}{\lambda^2} + o\left(\frac{1}{\lambda^2}\right)}. \quad (24)$$

由于  $o\left(\frac{1}{\lambda^2}\right)$  非常小, 因此可以截断简化为

$$n_{\text{eff}}^* = \sqrt{n_{\text{eff}}^{\prime\prime 2} + \frac{B}{\lambda^2}}, \quad (25)$$

其中,  $n_{\text{eff}}^{\prime\prime}$  用 (1) 式计算,  $\frac{B}{\lambda^2}$  是一个与波长的平方成反比的色散修正项,  $B$  为修正系数, 它与沟槽的材料、周期和占空比有关, 与沟槽的深度无关。为了避免截断误差,  $B$  值可以通过严格耦合波拟合或实验的方法获得。对于光波电场矢量垂直于沟槽的等效折射率同理可用式 (25) 计算, 只需用 (2) 式中  $n_{\text{eff}}^{\perp}$  代替  $n_{\text{eff}}^{\prime\prime}$  即可。

通过大量仿真计算证明采用修正等效介质理论计算反射率即精确又快速。对图 3 中的深沟槽模型等效折射率采用提出的修正等效介质理论计算出的反射率与严格耦合波计算出的反射率基本相等, 而计算速度比严格耦合波快 10 倍左右, 如图 5 所示, 两条反射率曲线重合度为 99.98%。

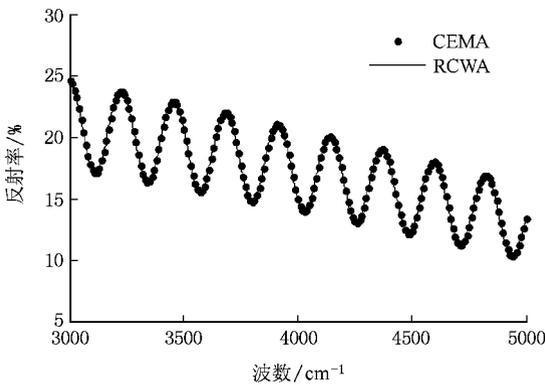


图 5 修正等效介质理论和严格耦合波理论计算的反射谱

经过大量数据的拟合计算, 表 1 中列出图 3 模型沟槽周期为 200 nm 时,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层和 Si 层在不同占空比所对应的等效折射率  $n_{\text{eff}}$  和修正系数  $B$  值。

图 6 和图 7 显示了占空比分别为 0.2 和 0.5 的深沟槽结构反射谱, 图 6 中占空比为 0.2 的深沟槽  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层和 Si 层加入的修正系数分别为 0.0477 和

0.3713, 图 7 中占空比为 0.5 的深沟槽  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层和 Si 层加入的修正系数分别为 0.1128 和 0.9143, 由两图比较可看出, 占空比越大, 其沟槽的宽度越大, 越逼近沟槽产生 1 级衍射的临界点, 因此采用等效介质理论计算的反射率误差变大, 需要加入更大的色散修正项来修正。因此, 占空比越大, 修正系数  $B$  将越大。

表 1 不同占空比的深沟槽(周期 200 nm)所对应的等效折射率  $n_{\text{eff}}$  和修正系数  $B$  值

占空比	$n_{\text{eff}}$ ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ 层)	$n_{\text{eff}}$ (Si 层)	$B$ ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ 层)	$B$ (Si 层)
0.10	1.9235	3.2410	0.0157	0.1155
0.15	1.8841	3.1585	0.0302	0.2349
0.20	1.8439	3.0738	0.0477	0.3713
0.25	1.8028	2.9866	0.0642	0.5090
0.30	1.7607	2.8969	0.0781	0.6369
0.35	1.7176	2.8043	0.0959	0.7471
0.40	1.6733	2.7085	0.0998	0.8345
0.45	1.6279	2.6092	0.1085	0.8919
0.50	1.5811	2.5060	0.1128	0.9143

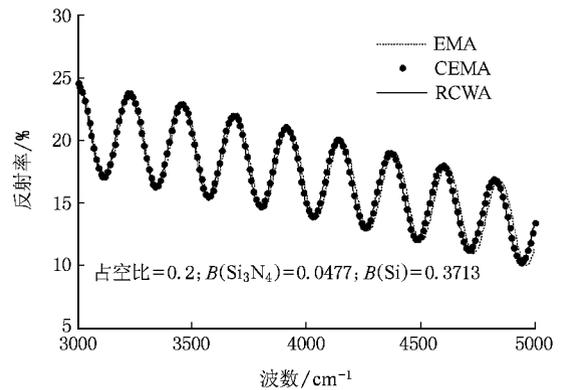


图 6 占空比为 0.2 的深沟槽结构反射谱计算曲线

在实际应用中, 很多 DRAM 深沟槽结构远非图 3 所示的深沟槽那么简单, 如瓶状深沟槽。如图 8 所示, 假定此瓶状深沟槽周期为 200 nm, 瓶颈宽度为 40 nm, 高度为 1  $\mu\text{m}$ , 瓶身宽度为 60 nm, 高度为 5  $\mu\text{m}$ , 顶部有层 150 nm 厚的  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , 中间是空气填充。一束红外偏振光垂直入射到模型的上表面, 从表 1 中查找相应的占空比所对应的修正系数, 分别利用等效介质理论、修正等效介质理论和严格耦合波理论计算模拟反射率曲线, 如图 9 所示。加入色散修正项

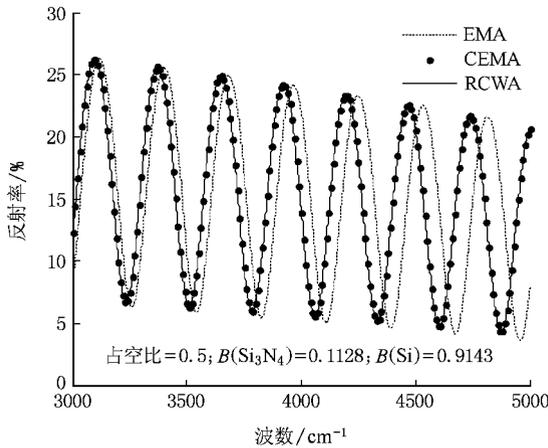


图 7 占空比为 0.5 的深沟槽结构反射谱计算曲线

信息,小周期则含有沟槽整个深度的信息<sup>[15,16]</sup>.

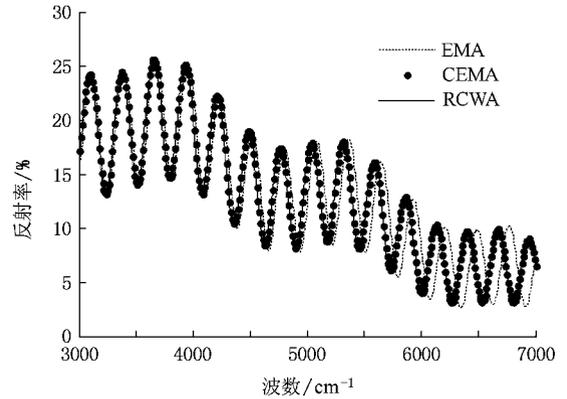


图 9 瓶状 DRAM 深沟槽结构的反射谱计算曲线

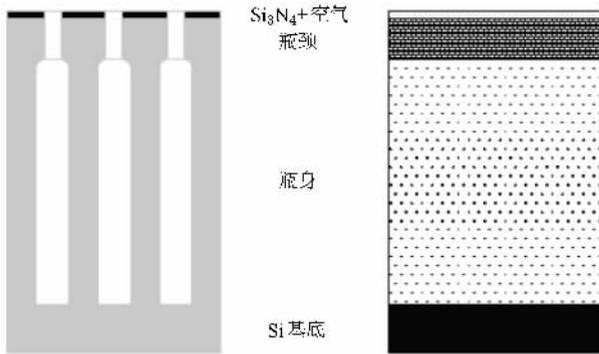


图 8 瓶状 DRAM 深沟槽结构的等效模型

## 6. 结 论

在微电子和 MEMS 制造过程中,对深沟槽刻蚀进度的在线实时监测可以采用基于红外反射谱模型的方法进行非接触测量,这要求快速而精确地建立红外反射谱模型.严格耦合波理论计算精度高,但计算速度慢.等效介质理论计算速度快,但计算精度不高.本文提出的加入色散修正项的等效介质方法,能快速而且准确的计算微纳米级的高深宽比沟槽的反射率.这种方法不仅避免了严格耦合波的复杂性,非常直观易懂,而且明显提高了运算速度,能满足测量系统快速响应能力的要求,对微电子和 MEMS 产品刻蚀过程实现快速、非接触式测量具有重要意义和实用价值.

的等效介质理论方法明显要精确,而且运算速度快,因此,修正等效介质理论的方法同样适用于瓶状深沟槽,反射率曲线中的大周期含有沟槽瓶颈的深度

[1] Gostein M, Rosenthal P A, Maznev A et al 2006 *Solid State Technology* **49** 38

[2] Weidner A, Slodowski M, Halm C et al 2004 *Proceedings of SPIE* **5375** 232

[3] Zaidi S, Stojakovic G, Gutmann A et al 2003 *Proceedings of SPIE* **5038** 185

[4] Moharam M G, Pommet D A, Grann E B 1995 *J. Opt. Soc. Am.* **A12** 1077

[5] Moharam M G, Gaylord T K 1981 *J. Opt. Soc. Am.* **71** 811

[6] Nesladek P, Wiswesser A, Loffler O 2005 *Proceedings of SPIE* **5835** 20

[7] Guittet P Y, Mantz U, Weidner P et al 2004 *Proceedings of SPIE* **5375** 771

[8] Charpenay S, Xu J, Haigis J et al 2002 *Journal of Microelectromechanical Systems* **11** 111

[9] Diebold A C 2001 *Handbook of Silicon Semiconductor Metrology* (New York: Academic) p723

[10] Pochi Y 2005 *Optical Waves in Layered Media* (New York: Wiley) p83

[11] Moharam M G, Grann E B, Pommet D A et al 1995 *J. Opt. Soc. Am.* **A12** 1068

[12] Zhou C H, Wang L, Nie Y, Wang Z H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 68 (in Chinese) [周传宏、王磊、聂娅、王植恒 2002 物理学报 **51** 68]

[13] Zheng H X, Ge D B 2000 *Acta. Phys. Sin.* **49** 1702 (in Chinese) [郑宏兴、葛德彪 2000 物理学报 **49** 1702]



- [ 14 ] Zhang C , Yang B , Wu X *et al* 2000 *Physica B* **293** 16 *IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems* 227
- [ 15 ] Kessel T , Wickramasinghe H K 1999 *Optics Letters* **24** 1702
- [ 16 ] Zhang C W , Liu S Y , Shi T L , Gu H Y 2008 *Proceedings of 3rd*

# A fast algorithm for reflectivity calculation of micro/nano deep trench structures by corrected effective medium approximation<sup>\*</sup>

Liu Shi-Yuan<sup>1)†</sup> Gu Hua-Yong<sup>2)</sup> Zhang Chuan-Wei<sup>1)</sup> Shen Hong-Wei<sup>2)</sup>

1) *State Key Laboratory of Digital Manufacturing Equipment and Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China*

2) *Division of Optoelectronic Materials and Micro-Nano Manufacture, Wuhan National Laboratory for Optoelectronics, Wuhan 430074, China*

( Received 27 December 2007 ; revised manuscript received 25 February 2008 )

## Abstract

This paper proposes a fast algorithm for reflectivity calculation of micro/nano scale high-aspect-ratio deep trench structures by the novel method of corrected effective medium approximation (CEMA). Extensive comparative investigation on the infrared reflection spectra of deep trench structures by means of effective medium approximation (EMA) and rigorous coupled-wave analysis (RCWA) reveals that the RCWA based method is accurate but time consuming while the EMA based calculation is much faster but less accurate. The proposed CEMA method is based on EMA but a dispersion corrected factor is added to calculate the refractive index of each effective medium. The dispersion corrected factor is found to be in inverse proportion to the square of the wavelength, and relates to the period, material and void fraction of trench structures. Simulations carried out on a lot of complex multi-layered trench structures, such as the bottle trench structure, demonstrate that the CEMA method is not only fast in calculation but also accurate enough in comparison with the RCWA based method. It is expected that the proposed CEMA method can be applied to deep trench measurement by model-based infrared spectroscopy (MBIR), thus has further potential applications such as real time etching process monitoring of micro/nano scale high-aspect-ratio deep trench structures in manufacturing microelectronics and microelectromechanical system (MEMS) devices.

**Keywords** : deep trench structure , rigorous coupled-wave analysis , effective medium approximation , reflectivity

**PACC** : 7865H , 0765G , 3320E

<sup>\*</sup> Project supported by Hi-Tech Research and Development Program of China ( Grant No. 2006AA04Z325 ), National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 50775090 ), National Basic Research Program of China ( Grant No. 2003CB716207 ), and Program for New Century Excellent Talents in University of China ( Grant No. NCET-06-0639 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : shyliu@mail.hust.edu.cn.