



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I589836 B

(45)公告日：中華民國 106 (2017) 年 07 月 01 日

(21)申請案號：102111257

(22)申請日：中華民國 102 (2013) 年 03 月 28 日

(51)Int. Cl. : G01B11/06 (2006.01)

G01B11/24 (2006.01)

H01L21/67 (2006.01)

(30)優先權：2012/03/28 美國

61/616,971

2013/02/28 美國

13/781,474

(71)申請人：克萊譚克公司(美國) KLA-TENCOR CORPORATION (US)

美國

(72)發明人：潘戴夫 史帝藍 伊凡渥夫 PANDEV, STILIAN IVANOV (US)；佐拉 陶德斯

傑拉德 DZIURA, THADDEUS GERARD (US)；徐 孟 福 SHIH, MENG-FU

(US)；李列泉 LEE, LIE-QUAN (CN)

(74)代理人：陳長文

(56)參考文獻：

TW I270005

US 2004/0017575A1

US 2008/0068616A1

審查人員：林秀峰

申請專利範圍項數：35 項 圖式數：19 共 56 頁

(54)名稱

用於半導體結構分析之方法、系統及非暫時性機器可存取儲存媒體

METHODS, SYSTEMS AND NON-TRANSITORY MACHINE-ACCESSIBLE STORAGE MEDIA FOR SEMICONDUCTOR STRUCTURAL ANALYSIS

(57)摘要

本發明描述基於光譜靈敏度之模型優化方法。舉例而言，一種方法包括判定一結構之一第一模型。該第一模型係基於參數之一第一集合。針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之一集合。光譜靈敏度係藉由光譜關於參數之該第一集合的導數而判定。基於光譜靈敏度變化資料之該集合來修改該結構之該第一模型以提供該結構之一第二模型。該結構之該第二模型係基於不同於參數之該第一集合的參數之一第二集合。接著提供自該結構之該第二模型導出的一模擬光譜。

Model optimization approaches based on spectral sensitivity is described. For example, a method includes determining a first model of a structure. The first model is based on a first set of parameters. A set of spectral sensitivity variations data is determined for the structure. Spectral sensitivity is determined by derivatives of the spectra with respect to the first set of parameters. The first model of the structure is modified to provide a second model of the structure based on the set of spectral sensitivity variations data. The second model of the structure is based on a second set of parameters different from the first set of parameters. A simulated spectrum derived from the second model of the structure is then provided.

指定代表圖：

符號簡單說明：

100 . . . 說明判定新  
參數化之方法中的代  
表性操作之流程圖

流程圖 100

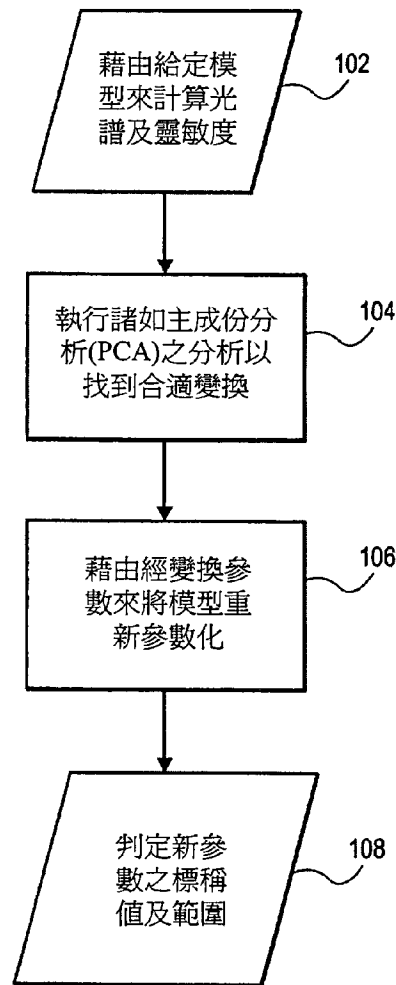


圖1A



申請日：

IPC分類：

## 發明摘要

※ 申請案號： 102111257

※ 申請日： 102年3月28日

G01B11/06 (2006.01)  
G01B11/06 (2006.01)  
※IPC 分類： H01L 21/67 (2006.01)

## 【發明名稱】

用於半導體結構分析之方法、系統及非暫時性機器可存取儲存  
媒體

METHODS, SYSTEMS AND NON-TRANSITORY MACHINE-  
ACCESSIBLE STORAGE MEDIA FOR SEMICONDUCTOR  
STRUCTURAL ANALYSIS

## 【中文】

本發明描述基於光譜靈敏度之模型優化方法。舉例而言，一種方法包括判定一結構之一第一模型。該第一模型係基於參數之一第一集合。針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之一集合。光譜靈敏度係藉由光譜關於參數之該第一集合的導數而判定。基於光譜靈敏度變化資料之該集合來修改該結構之該第一模型以提供該結構之一第二模型。該結構之該第二模型係基於不同於參數之該第一集合的參數之一第二集合。接著提供自該結構之該第二模型導出的一模擬光譜。

## 【英文】

Model optimization approaches based on spectral sensitivity is described. For example, a method includes determining a first model of a structure. The first model is based on a first set of parameters. A set of spectral sensitivity variations data is determined for the structure. Spectral sensitivity is determined by derivatives of the spectra with respect to the first set of parameters. The first model of the structure is modified to provide a second model of the structure based on the set of spectral sensitivity variations data. The second model of the structure is based on a second set of parameters different from the first set of parameters. A simulated spectrum derived from the second model of the structure is then provided.

**【代表圖】**

**【本案指定代表圖】**：第(1A)圖。

**【本代表圖之符號簡單說明】**：

100            說明判定新參數化之方法中的代表性操作之流程圖

**【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】**：

(無)

# 發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

## 【發明名稱】

用於半導體結構分析之方法、系統及非暫時性機器可存取儲存  
媒體

METHODS, SYSTEMS AND NON-TRANSITORY MACHINE-  
ACCESSIBLE STORAGE MEDIA FOR SEMICONDUCTOR  
STRUCTURAL ANALYSIS

## 相關申請案之交叉參考

本申請案主張 2012 年 3 月 28 日申請之美國臨時申請案第 61/616,971 號之權利，該臨時申請案之全部內容以引用之方式併入本文中。

## 【技術領域】

本發明之實施例係在計量領域中，且更特定言之，係關於基於光譜靈敏度之模型優化方法。

## 【先前技術】

在過去若干年，嚴格耦合波方法(RCWA)及類似演算法已廣泛用於繞射結構之研究及設計。在RCWA方法中，藉由給定數目個充分薄之平面光柵板片來近似週期性結構之輪廓。具體言之，RCWA涉及三個主要操作，亦即，光柵內部之場的傅立葉(Fourier)展開、特性化繞射信號之恆定係數矩陣之本徵值及本徵向量的計算，及自邊界匹配條件推導出之線性系統的解。RCWA將問題劃分成三個相異空間區：(1)支援入射平面波場及對所有反射繞射階數之求和之環境區；(2)將波場處理為與每一繞射階數相關聯之模式的疊加之光柵結構及下伏未經圖案化層；及(3)含有透射波場之基板。

RCWA解之準確度部分地取決於波場之空間諧波展開中保留的項之數目，其中一般滿足能量守恆。所保留之項的數目隨在計算期間考慮之繞射階數之數目而變。給定假想輪廓之模擬繞射信號的有效產生涉及針對繞射信號之橫向磁(TM)分量及/或橫向電(TE)分量兩者選擇每一波長下之繞射階數的最優集合。數學上，選擇之繞射階數愈多，模擬之準確度愈高。然而，繞射階數之數目愈高，計算模擬繞射信號所需要之計算愈多。此外，計算時間為所使用之階數之數目的非線性函數。

至RCWA計算之輸入為週期性結構之輪廓或模型。在一些狀況下，橫截電子顯微照片為可用的(例如，來自掃描電子顯微鏡或透射電子顯微鏡)。在可用時，此等影像可用以導引模型之建構。然而，直至已完成所有所要處理操作方能橫截晶圓，所有處理操作的完成取決於後續處理操作之數目可花費許多天或週。甚至在完成所有所要處理操作之後，用以產生橫截影像之程序仍可花費許多小時至幾天，此係因為樣本製備及找到正確位置來成像涉及許多操作。此外，橫截程序由於需要時間、熟練工及複雜設備而昂貴，且該橫截程序會破壞晶圓。

因此，需要一種用於在給定關於週期性結構之有限資訊的情況下有效地產生彼結構之準確模型之方法、一種用於優化彼結構之參數化的方法及一種優化彼結構之量測的方法。

### 【發明內容】

本發明之實施例包括基於光譜靈敏度之模型優化方法。

在一實施例中，一種使用半導體基板或晶圓上之重複結構的計量來優化參數模型以用於結構分析的方法包括判定結構之第一模型。該第一模型係基於參數之第一集合。針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之集合。光譜靈敏度係藉由光譜相關於參數之第一集合的導數而

判定。基於光譜靈敏度變化資料之該集合來修改結構之第一模型以提供結構之第二模型。結構之第二模型係基於不同於參數之第一集合的參數之第二集合。接著提供自結構之第二模型導出的模擬光譜。

在另一實施例中，一種機器可存取儲存媒體具有儲存於其上之指令，該等指令使資料處理系統執行使用半導體基板或晶圓上之重複結構的計量來優化參數模型以用於結構分析的方法。該方法包括判定結構之第一模型。該第一模型係基於參數之第一集合。針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之集合。光譜靈敏度係藉由光譜相關於參數之第一集合的導數而判定。基於光譜靈敏度變化資料之該集合來修改結構之第一模型以提供結構之第二模型。結構之第二模型係基於不同於參數之第一集合的參數之第二集合。接著提供自結構之第二模型導出的模擬光譜。

在另一實施例中，一種用以產生模擬繞射信號以使用光學計量來判定用以在晶圓上製造結構之晶圓應用程式之程序參數的系統包括製造叢集，該製造叢集經組態以執行用以在晶圓上製造結構之晶圓應用程式。一或多個程序參數特性化在結構經歷在使用製造叢集所執行之晶圓應用程式中的處理操作時結構形狀或層厚度之行為。亦包括光學計量系統，其經組態以判定晶圓應用程式之一或多個程序參數。該光學計量系統包括光束源及經組態以量測結構之繞射信號的偵測器。該光學計量系統亦包括處理器，該處理器經組態以判定結構之第一模型，該第一模型係基於參數之第一集合；經組態以針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之集合，其中光譜靈敏度係藉由光譜相關於參數之第一集合的導數而判定；經組態以基於光譜靈敏度變化資料之該集合來修改結構之第一模型以提供結構之第二模型，該結構之第二模型係基於不同於參數之第一集合的參數之第二集合；及經組態以提供自結構之第二模型導出的模擬光譜。

**【圖式簡單說明】**

圖1A為說明根據本發明之一實施例的判定新參數化之方法中的代表性操作之流程圖。

圖1B為說明根據本發明之一實施例的主成份分析(PCA)應用程式中之考慮事項的流程圖。

圖2為說明根據本發明之一實施例的判定新參數化(例如，用於判定優化模型)之方法中的代表性操作之流程圖。

圖3為說明根據本發明之一實施例的判定新參數化之另一方法中的代表性操作之流程圖。

圖4為根據本發明之一實施例的依據裝置1至7之相關性範圍的曲線圖，其展示PCAMin及PCAMax範圍以及相關聯之最小/最大範圍。

圖5為根據本發明之一實施例的依據主成份分析(PCA)之自由度(DOF)之主成份的曲線圖，其展示奇異值與累積比例兩者。

圖6說明根據本發明之一實施例的具有浮動參數HT1及HT2之模型。

圖7說明根據本發明之一實施例的藉由程序方法製造之半導體結構之雙橫截面的成角度視圖。

圖8說明根據本發明之一實施例的半導體結構模型之雙橫截面的成角度視圖，該半導體結構模型可用以將圖7之結構模型化。

圖9為根據本發明之一實施例的沿第一軸線之模型DOF、沿第二正交軸線之程序DOF及位於第一軸線與第二軸線之間的最優擬合軸線的曲線圖。

圖10描繪表示根據本發明之一實施例的用於判定及利用結構參數以用於自動化程序及設備控制的一系列例示性操作之流程圖。

圖11為根據本發明之一實施例的用於判定及利用結構參數以用於自動化程序及設備控制的系統之例示性方塊圖。



圖12A描繪根據本發明之一實施例的具有在x-y平面中變化之輪廓的週期性光柵。

圖12B描繪根據本發明之一實施例的具有在x方向上變化但不在y方向上變化之輪廓的週期性光柵。

圖13表示根據本發明之一實施例的具有二維組件及三維組件兩者之結構之橫截面圖。

圖14為說明根據本發明之實施例的利用光學計量以判定半導體晶圓上之結構之參數的第一架構圖。

圖15為說明根據本發明之實施例的利用光學計量以判定半導體晶圓上之結構之參數的第二架構圖。

圖16說明根據本發明之一實施例的例示性電腦系統之方塊圖。

圖17為表示根據本發明之一實施例的用於建置參數化模型及以樣本光譜開始之光譜庫的方法中之操作的流程圖。

圖18為表示根據本發明之一實施例的用於建置光譜庫以用於進行結構之生產量測的方法中之操作的說明性流程圖。

圖19為表示根據本發明之一實施例的用於建置即時迴歸量測配方以用於進行結構之生產量測的方法中之操作的說明性流程圖。

### 【實施方式】

本文中描述基於光譜靈敏度之模型優化方法。在以下描述中，闡述了眾多特定細節(諸如用以執行靈敏度分析之特定方法)，以便提供對本發明之實施例的透徹理解。熟習此項技術者應顯而易見，可在無此等特定細節的情況下實踐本發明之實施例。在其他例子中，未詳細描述諸如製造經圖案化材料層之堆疊的熟知處理操作，以便不會不必要地混淆本發明之實施例。此外，應理解，諸圖中所展示之各種實施例為說明性表示且未必按比例繪製。

本文中所描述之一或多項實施例係有關基於光譜靈敏度之模型

優化方法。此等方法之用途可包括(例如)用於計量(諸如，光學計量)之應用程式。

本發明之一或多項實施例提供用以使用半導體基板或晶圓上之重複結構的光學計量來判定優化參數模型以用於結構分析的新方法。舉例而言，可顯著降低模型參數之相關性。結果，模型更穩定且可在不顯著地損害模型擬合的情況下系統地減少浮動參數之數目。

為提供上下文，習知地，藉由參數模型之幾何參數及材料參數來定義該等參數模型。經由模擬來評估參數靈敏度。執行固定誤差分析以判定待浮動之參數的合適集合。在許多狀況下，此等參數係高度相關的，此可使模型不穩定且可引入諸如切換(toggling)之效應。固定相關參數中之一或多者可使模型更穩定，但此固定可在最終結果中引入顯著誤差。

相比之下，圖1A為說明根據本發明之一實施例的判定新參數化之方法中的代表性操作之流程圖100。參看流程圖100，在操作102處，相對於模型參數來執行光譜之靈敏度分析。在操作104及106處，使用光譜資訊來判定藉由變換而最小化參數相關性之新參數化。一般而言，此等操作涉及對依據波長、偏光、角度及相干狀態等量測之信號起作用。在一特定實施例中，使用主成份分析(PCA)，如下文中更詳細描述。在操作108處，定義新模型參數標稱值及範圍，且依據新參數約束舊參數。

如上文所提及，流程圖100之方法可包括使用PCA參數化。對於參數空間之每一點而言，用於靈敏度分析之PCA的使用可不同。第一例示性狀況涉及對標稱值執行PCA，且忽略參數空間中之不同點的誤差/相關性。第二例示性狀況涉及使用來自參數空間中之所有多個點的資料(例如，使用來自AcuShape之標準或詳細分析)來執行PCA。對該等值求平均值，且接著自所有點收集靈敏度並將PCA應用於整個資

料集上。第三例示性狀況涉及在迴歸及光譜庫搜尋期間如即時計算般來執行PCA。在此方法中，在迴歸之每一步驟期間對區域空間進行取樣。接著依據幾何參數產生參數化之全域模型。

在一實施例中，藉由針對參數空間中之每一樣本點計算PCA參數化來獲得參數化模型。針對參數化方程式中之每一係數而產生模型，其中每一係數係依據幾何參數。在迴歸之每一操作期間，使用參數化模型來建構參數化。在一項此實施例中，使用神經網路模型實施(例如，(GP1, GP2, GP3, ... ) -> (cm1)，或(GP1, GP2, GP3, ... ) -> (cm1, cm2, cm3, ...))。

圖1B為說明根據本發明之一實施例的PCA應用程式中之考慮事項的流程圖150。參看流程圖150，PCA 152涉及使用非相關主成份(PC)參數154。使用非相關PC參數154可產生較好且較快速光譜庫訓練156，及/或在光譜庫中無切換之穩定模型158。PCA 152亦可涉及將大部分光譜變化集中於前幾個參數中(160)。此可產生減小之DOF(162)(例如，提供較小光譜庫164及/或較快速迴歸及光譜庫產生166)。又，針對相同DOF而有效地使用更多GP(168)可導致(例如)提供較好擬合(低chi2)(170)。此外，可估計最優DOF(172)，可評估不同子系統(174)，可評估多個子系統及目標之使用(176)，及/或可執行自動波長選擇(178)。PCA方法亦可涉及或啟用新應用程式(180)，諸如形狀探索(182)及/或程序變化參數化方法(184)。

在另一實施例中，本文中所描述之方法涉及對將特定結構模型化所需之DOF的預測。在一項此實施例中，定義用於非幾何參數化之兩種方法：PCA及函數+差量(Function+Delta)。可將函數+差量型參數化應用於線性及非線性參數相關。可以此方式針對線性及非線性參數空間而達成模型化之參數空間減小(例如，光譜庫大小減小)。結果，可使用本文中所描述之方法中之一或多者來改良對應靈敏度及相關性

分析結果。

可以更複雜之程序來實施上述方法。舉例而言，圖2為說明根據本發明之一實施例的判定新參數化(例如，用於判定優化模型)之方法中的代表性操作之流程圖200。參看流程圖200，在操作202處，使用給定模型來計算光譜及對應靈敏度。在操作204處，執行諸如PCA之分析以判定合適變換。在操作206處，藉由經變換參數來重新參數化模型，且在操作208處，判定新參數之標稱值及範圍。在操作210處，作出關於參數之哪一集合將浮動且哪一集合將固定的決策。在操作212處，在新模型上執行迴歸。在操作214處，若達成良好擬合，則在216處獲得優化模型。否則，反覆執行操作210及212直至找到良好擬合為止。

上文所描述之方法之優點可包括(但不限於)參數相關性之消除或顯著降低，如下文結合圖4更詳細描述。舉例而言，存在降低模型中之參數相關性所得的數個益處，諸如(1)消除冗餘參數，藉此降低問題之維度，及准許較小光譜庫大小及較快速光譜庫及迴歸計算；及(2)降低數值不穩定性，此可幫助縮減找到具有大致相同之擬合品質之若干競爭形狀解決方案的模型擬合演算法(例如，縮減包括正確形狀以及不正確形狀之可能性)。另一優點在於，藉由減小靈敏度來自然地對新參數排序，從而允許直接應用現有最好已知方法(BKM)。另一優點包括提供用於估計自由度(DOF)之最小數目之改良方法的能力，如下文結合圖5更詳細描述。

額外優點可包括提供針對相同數目個模型參數來改良模型擬合之更有效方法的能力。又；可提供優化模型之更強健方式，例如，如下文更詳細描述，圖6展示浮動參數HT1及HT2高度相關且具有高靈敏度之模型。其他優點可包括有效地浮動原始模型之更多參數以建立用於較好模型擬合之機會的能力。舉例而言，自10 DOF幾何參數模型

建構之5 DOF PCA參數模型可具有好於5 DOF幾何參數模型之擬合。此可改良模型穩定性。另一優點可包括減小光譜庫大小及迴歸切換效應。本質上，改良了光譜庫至迴歸匹配。上述方法之其他優點可包括減小光譜庫大小(例如，藉由減小DOF)從而改良光譜庫建構(例如，歸因於非相關參數之使用)的能力。此外，可減少分析、迴歸及光譜庫產生時間(例如，藉由減小DOF)，且可改良對程序變化之特性化。應理解，在一實施例中，將光譜庫定義為原始函數或數學模型之縮減模型，使得根據光譜庫對函數/數學模型進行評估為快速的，但所得值緊密近似原始值。

在一實施例中，使用上述方法進行模型化，使得能夠使用高DOF離散化模型以用於形狀探索。此情形允許藉由使用高度離散化但簡單之初始模型來判定複雜形狀。作為一實例，圖3為說明根據本發明之一實施例的判定新參數化之另一方法中的代表性操作之流程圖300。參看流程圖300，在操作302處，建構高度離散化模型。在操作304處，計算光譜及射線靈敏度，且接著在操作306處執行PCA。在操作308及310處執行新PCA參數化。接著在操作312處減小自由度(DOF)。在操作314處執行迴歸以在程序空間上探索形狀及形狀改變。若為良好擬合316，則在操作318及370處，照現狀使用或藉由使用適當特徵(例如，弓形、頂部或圓形特徵)簡化所得模型。若不為良好擬合，則可反覆執行操作312及314直至找到良好擬合為止。

圖4為根據本發明之一實施例的依據裝置1至7之相關性範圍的曲線圖400，其展示PC Amin及PC Amax範圍以及相關聯之最小/最大範圍。參看曲線圖400，可在PCA計算期間使用光譜靈敏度分析來達成參數相關性之消除或顯著降低。

圖5為根據本發明之一實施例的依據主成份分析(PCA)之自由度(DOF)的主成份之曲線圖500，其中展示奇異值與累積比例兩者。參

看曲線圖500，在此實例中需要大約8 DOF。使用更多DOF將有可能導致模型不穩定性，而使用更少DOF將不能俘獲到所有光譜靈敏度。因此，可估計達成良好模型擬合之自由度(DOF)的最小數目。

圖6說明根據本發明之一實施例的具有浮動參數HT1及HT2之模型600。參看模型600，浮動參數HT1及HT2高度相關且具有高靈敏度。最初，該模型將歸因於數值不穩定性而失敗。然而，在改變參數化之後，新模型允許兩個高度經由新參數P1而以受控方式變化。因此，提供了優化模型之更強健方式。

總體且更一般而言，在一實施例中，可按以下方式中之一或多者來執行判定基於新光譜靈敏度之參數化及舊/新模型參數關係：(1)執行PCA、獨立成份分析(ICA)或降趨對應分析(DCA)；(2)執行非線性方法，諸如自相聯神經網路(AANN)、PCA-ANN或核心PCA；(3)使用遺傳演算法及遺傳程式化在參數化空間中進行搜尋以找到約束方程式；(4)執行以上方法及添加/修改自訂使用者定義方程式；(5)藉由使用自參數空間中之多個點獲得的經組合光譜靈敏度資料來執行以上方法；(6)藉由使用自多個射線獲得之經組合光譜靈敏度資料(例如，方位角(Az)、入射角(AOI)及偏光狀態)來執行以上方法；(7)基於程序變化範圍之參數空間中的當前點而適應性地改變參數化；(8)擬合/優化變換係數使得相關性得以最小化或接近最小化；及/或(9)當應用於靈敏度矩陣、其緊密近似或靈敏度矩陣之函數(諸如，靈敏度矩陣之對角線定標)時，執行上文所提及之技術中之一者。

在一實施例中，可實施上述方法中之一或多者以用於選擇最有能力的計量子系統或子系統之組合。作為一實例，可以大約70度之AOI來執行分光橢圓量測(SE)，或可使用SE與角度解析反射量測之組合或諸如SAXS之X射線計量或電子束方法。該方法涉及在不同子系統上執行PCA及評估可藉由不同計量子系統或子系統之組合可靠地量

測的數目或PCA參數。

在一實施例中，可使用幾何模型(例如，使用臨界尺寸(CD)或膜厚度值)、材料參數(例如，使用 $n$ 及 $k$ 、組合物或密度值)、系統參數(例如，使用AOI、方位角、波長、繞射角、偏光器角度值)或其組合來執行上述方法中之一或多者。參數 $n$ 係複折射指數(complex refractive index)之實部且參數 $k$ 係複折射指數之虛部，例如 $n$ 係折射指數(refractive index)而 $k$ 係消光係數(extinction coefficient)。亦可使用本文中所描述之方法以藉由多個目標(及/或藉由多個工具)來優化計量，諸如在KLA-Tencor之「Multiple tool and structure analysis」的美國專利7,478,019中所描述之彼等目標，該案以引用之方式併入本文中。另外，可使用前饋及側饋以及同時分析來對資料之多個集合使用本文中所描述之方法。在一特定實施例中，對起作用之參數之子集應用以上方法中之一或多者。

上述光譜靈敏度方法之一般優點包括藉由自高自由度模型消除多參數相關性來顯著簡化應用工程師之決策程序。又，提供了更緊密之參數化。此外，提供了更穩定之迴歸及光譜庫效能，從而產生高品質及快速應用程式解決方案。

如上文所描述，本發明之一或多項實施例可有關於改良模型(諸如，光學模型)。作為涵蓋於本發明之實施例之精神及範疇內的許多可能之重新參數化中之一者的實例，可出於模型化目的選擇三維結構之參數。圖7說明根據本發明之一實施例的半導體結構700之雙橫截面的成角度視圖，該半導體結構700係藉由程序方法而製造。作為一實例，半導體結構具有蝕刻特徵702及在蝕刻特徵702內之內部構形704。由於用以製造半導體結構700之程序(諸如，蝕刻製程)的結果，實際上僅存在關於結構之總體形狀及詳細特徵之選項的子集。

因此，並非需要將每一可能組合用於將此結構模型化。舉例而

言，圖8說明根據本發明之一實施例的半導體結構模型800之雙橫截面的成角度視圖，該半導體結構模型800可用以將圖7之結構模型化。參看圖8，由於存在關於製造結構700之有限可能的結果，所以模型800關注參數之子集。作為一特定但非限制性實例，將結構高度(HT)802、結構寬度(804)、頂部臨界尺寸(TCD)806及底部臨界尺寸(BCD)808展示為可在模型化程序中分析之可能參數。因此，雖然程序變化將不可避免地改變所得結構之幾何形狀，但多個特徵可以類似方式受影響。亦即，可將參數視為相關的。程序DOF為獨立變化之數目。使用者決定多少參數將浮動。模型DOF為使用者選擇浮動之幾何參數的數目。

為進一步說明程序DOF與模型DOF之間的關係，圖9為根據本發明之一實施例的沿第一軸線902之模型DOF、沿第二正交軸線904之程序DOF及位於第一軸線與第二軸線之間的最優擬合軸線906的曲線圖900。參看曲線圖900，在過度接近程序DOF軸線904之空間中，達成不良模型化擬合。舉例而言，某些特徵可能未模型化或定義不足。相比之下，在過度接近模型DOF軸線902之空間中，可產生切換。舉例而言，可存在可在此空間中過度定義之多個最小值或特徵參數。因此，最優擬合906並不過度接近軸線902或904中之任一者。

應理解，上文所描述之方法可涉及提供自結構之優化模型導出的模擬光譜。在一實施例中，此外，該等方法可進一步包括比較模擬光譜與自結構導出之樣本光譜。描述執行此等操作之方法的實施例在下文更詳細地描述。

一般而言，可將繞射信號之階數模擬成自週期性結構導出。第零階數表示相對於週期性結構之法線N成等於假想入射光束之入射角之角度的繞射信號。將較高繞射階數指定為+1、+2、+3、-1、-2、-3等。亦可考慮稱為衰減階數之其他階數。根據本發明之一實施例，產



生模擬繞射信號以用於光學計量。舉例而言，可將諸如結構形狀及膜厚度之輪廓參數模型化以用於光學計量。亦可將結構中之材料的光學性質(諸如，折射率及消光係數( $n$ 及 $k$ ))模型化以用於光學計量。

基於計算之模擬繞射階數可指示針對經圖案化膜(諸如，基於膜堆疊之經圖案化半導體膜或結構)之輪廓參數，且可用於校準自動化程序或設備控制。圖10描繪表示根據本發明之一實施例的用於判定及利用結構參數以用於自動化程序及設備控制的一系列例示性操作之流程圖1000。

參看流程圖1000之操作1002，開發光譜庫或受訓練機器學習系統(MLS)以自經量測繞射信號之集合提取參數。在操作1004中，使用光譜庫或受訓練MLS來判定結構之至少一參數。在操作1006中，將該至少一參數傳輸至經組態以執行處理操作之製造叢集，其中可在進行量測操作1004之前抑或之後在半導體製造程序流程中執行該處理操作。在操作1008中，使用該至少一所傳輸之參數來修改程序變數或設備設定以用於由製造叢集執行之處理操作。

對於機器學習系統及演算法之更詳細描述，參見2003年6月27日申請之題為「OPTICAL METROLOGY OF STRUCTURES FORMED ON SEMICONDUCTOR WAFERS USING MACHINE LEARNING SYSTEMS」之美國專利第7,831,528號，該案之全文以引用的方式併入本文中。對於二維重複結構之繞射階數優化之描述，參見2006年3月24日申請之題為「OPTIMIZATION OF DIFFRACTION ORDER SELECTION FOR TWO-DIMENSIONAL STRUCTURES」之美國專利第7,428,060號，該專利之全文以引用的方式併入本文中。

圖11為根據本發明之一實施例的用於判定及利用結構參數(諸如，輪廓或膜厚度參數)以用於自動化程序及設備控制之系統1100的例示性方塊圖。系統1100包括第一製造叢集1102及光學計量系統

1104。系統1100亦包括第二製造叢集1106。雖然圖11中將第二製造叢集1106描繪為在第一製造叢集1102之後，但應認識到，第二製造叢集1106在系統1100中(及(例如)在製造程序流程中)可位於第一製造叢集1102之前。

在一例示性實施例中，光學計量系統1104包括光學計量工具1108及處理器1110。光學計量工具1108經組態以量測自結構獲得之繞射信號。若經量測繞射信號及模擬繞射信號匹配，則將輪廓或膜厚度參數之一或多個值判定為與模擬繞射信號相關聯之輪廓或膜厚度參數之一或多個值。

在一例示性實施例中，光學計量系統1104亦可包括光譜庫1112，該光譜庫1112具有複數個模擬繞射信號及(例如)與該複數個模擬繞射信號相關聯之一或多個輪廓或膜厚度參數的複數個值。如上文所描述，可預先產生光譜庫。可使用計量處理器1110比較自結構獲得之經量測繞射信號與光譜庫中之複數個模擬繞射信號。在找到匹配之模擬繞射信號時，將與光譜庫中匹配之模擬繞射信號相關聯的輪廓或膜厚度參數之一或多個值假定為在晶圓應用程式中使用以製造結構之輪廓或膜厚度參數之一或多個值。

系統1100亦包括計量處理器1116。在一例示性實施例中，處理器1110可將(例如)一或多個輪廓或膜厚度參數之一或多個值傳輸至計量處理器1116。計量處理器1116可接著基於使用光學計量系統1104判定之一或多個輪廓或膜厚度參數之一或多個值來調整第一製造叢集1102之一或多個程序參數或設備設定。計量處理器1116亦可基於使用光學計量系統1104所判定之一或多個輪廓或膜厚度參數之一或多個值來調整第二製造叢集1106之一或多個程序參數或設備設定。如上文所提到，製造叢集1106可在製造叢集1102之前或之後處理晶圓。在另一例示性實施例中，處理器1110經組態以使用經量測繞射信號之集合作為

至機器學習系統1114之輸入及使用輪廓或膜厚度參數作為機器學習系統1114之預期輸出來訓練機器學習系統1114。

在一實施例中，優化結構之模型包括使用三維光柵結構。術語「三維光柵結構」在本文中用以指代除具有在z方向上之深度之外亦具有在兩個水平維度上變化之x-y輪廓之結構。舉例而言，圖12A描繪根據本發明之一實施例的具有在x-y平面中變化之輪廓的週期性光柵1200。該週期性光柵之輪廓在z方向上依據x-y輪廓而變化。

在一實施例中，優化結構之模型包括使用二維光柵結構。術語「二維光柵結構」在本文中用以指代除具有在z方向上之深度之外亦具有僅在一水平維度上變化之x-y輪廓之結構。舉例而言，圖12B描繪根據本發明之一實施例的具有在x方向上變化但不在y方向上變化之輪廓的週期性光柵1202。該週期性光柵之輪廓在z方向上依據x輪廓而變化。應理解，二維結構在y方向上缺少變化無需為無限的，而是圖案中之任何斷裂被視為遠程的，例如，在y方向上圖案中之任何斷裂比在x方向上圖案中之斷裂實質上間隔得遠。

本發明之實施例可適合於多種膜堆疊。舉例而言，在一實施例中，針對形成於基板上之包括絕緣膜、半導體膜及金屬膜之膜堆疊來執行用於優化臨界尺寸(CD)輪廓或結構之參數的方法。在一實施例中，該膜堆疊包括單一層或多個層。又，在本發明之一實施例中，經分析或經量測光柵結構包括三維組件及二維組件兩者。舉例而言，可藉由利用二維組件對整個結構及該結構之繞射資料的較簡單貢獻來優化基於模擬繞射資料之計算的效率。

圖13表示根據本發明之一實施例的具有二維組件及三維組件兩者之結構之橫截面圖。參看圖13，結構1300具有在基板1306上方之二維組件1302及三維組件1304。二維組件之光柵沿方向2延行，而三維組件之光柵沿方向1及方向2兩者延行。在一實施例中，方向1與方向2

正交，如圖13中所描繪。在另一實施例中，方向1不與方向2正交。

可在諸如「Acushape」之光學臨界尺寸(OCD)產品中將以上方法實施為應用工程師在已測試初始或初步模型之後使用的公用程式。又，諸如「COMSOL Multiphysics」之市售軟體可用以識別用於變更之OCD模型的區。來自此軟體應用程式之模擬結果可用以預測用於成功模型改良之區。

在一實施例中，優化結構之模型的方法進一步包括基於優化參數來變更程序工具之參數。可藉由使用諸如(但不限於)回饋技術、前饋技術及就地控制技術之技術來執行程序工具之協同變更。

根據本發明之一實施例，優化結構之模型的方法進一步包括比較模擬光譜與樣本光譜。在一實施例中，對繞射階數之集合進行模擬以表示來自由橢圓量測光學計量系統(諸如，下文分別結合圖14及圖15而描述之光學計量系統1400或1550)產生之二維或三維光柵結構的繞射信號。然而，應理解，相同概念及原理同等地適用於其他光學計量系統，諸如反射量測系統。所表示之繞射信號可考量二維及三維光柵結構之特徵，諸如(但不限於)輪廓、尺寸、材料組合物或膜厚度。

圖14為根據本發明之實施例的說明利用光學計量來判定半導體晶圓上之結構之參數的架構圖。光學計量系統1400包括將計量光束1404投射於晶圓1408之目標結構1406處的計量光束源1402。計量光束1404係以入射角 $\theta$ 朝向目標結構1406投射( $\theta$ 為入射光束1404與目標結構1406之法線之間的角度)。在一實施例中，橢偏儀可使用大約 $60^\circ$ 至 $70^\circ$ 之入射角，或可使用較低角度(可能接近 $0^\circ$ 或近法線入射)或大於 $70^\circ$ 之角度(掠入射)。繞射光束1410係藉由計量光束接收器1412來量測。繞射光束資料1414係傳輸至輪廓應用程式伺服器1416。輪廓應用程式伺服器1416可比較經量測繞射光束資料1414與模擬繞射光束資料之光譜庫1418，該光譜庫1418表示目標結構之臨界尺寸與解析度之變

化組合。

在一例示性實施例中，選擇最好地匹配經量測繞射光束資料1414之光譜庫1418執行個體。應理解，雖然頻繁地使用繞射光譜或信號及相關聯之假想輪廓或其他參數的光譜庫來說明概念及原理，但本發明之實施例可同等地適用於包括模擬繞射信號及相關聯之輪廓參數集合的資料空間(諸如，在迴歸、神經網路及用於輪廓提取之類似方法中)。假定選定光譜庫1418執行個體之假想輪廓及相關聯之臨界尺寸對應於目標結構1206之特徵的實際橫截面輪廓及臨界尺寸。光學計量系統1400可利用反射計、橢偏儀或其他光學計量裝置來量測繞射光束或信號。

為促進本發明之實施例之描述，使用橢圓量測光學計量系統來說明以上概念及原理。應理解，相同概念及原理同等地適用於其他光學計量系統，諸如反射量測系統。在一實施例中，光學散射量測為諸如(但不限於)光學分光橢圓量測(SE)、光束輪廓反射量測(BPR)、光束輪廓橢圓量測(BPE)及紫外線反射量測(UVR)的技術。以類似方式，可利用半導體晶圓以說明概念之應用。再次，該等方法及程序同等地適用於具有重複結構之其他工件。

圖15為根據本發明之實施例的說明利用光束輪廓反射量測及/或光束輪廓橢圓量測來判定半導體晶圓上之結構之參數的架構圖。光學計量系統1550包括產生經偏光計量光束1554之計量光束源1552。較佳地，此計量光束具有10奈米或更少之窄頻寬。在一些實施例中，源1552能夠藉由切換濾光片或藉由在不同雷射或超亮發光二極體之間切換而輸出不同波長之光束。此光束之部分自光束分光器1555反射且藉由接物鏡1558聚焦至晶圓1508之目標結構1506上，該接物鏡1558具有高數值孔徑(NA)，較佳為大約0.9或0.95之NA。光束1554之未自光束分光器反射的部分經引導至光束強度監視器1557。計量光束可視情況

在通過接物鏡1558之前穿過四分之一波片1556。

在自目標反射之後，反射光束1560往回穿過接物鏡且引導至一或多個偵測器。若存在可選的四分之一波片1556，則光束將在透射穿過光束分光器1555之前往回穿過四分之一波片。在光束分光器之後，反射光束1560可視情況在位置1559(作為位置1556之替代例)處穿過四分之一波片。若四分之一波片存在於位置1556處，則其將修改入射光束及反射光束兩者。若該四分之一波片存在於位置1559處，則其將僅修改反射光束。在一些實施例中，在任一位置處可能不存在波片，或可取決於待進行之量測而接入及斷開波片。應理解，在一些實施例中，可能需要波片具有實質上不同於四分之一波的延遲，亦即，延遲值可實質上大於或實質上小於 $90^\circ$ 。

偏光器或偏光光束分光器1562將反射光束1560之一偏光狀態引導至偵測器1564，且視情況將不同偏光狀態引導至可選的第二偵測器1566。偵測器1564及1566可為一維(線)或二維(陣列)偵測器。偵測器之每一元件對應於自目標反射之對應射線的AOI及方位角之不同組合。來自偵測器之繞射光束資料1514連同光束強度資料1570一起傳輸至輪廓應用程式伺服器1516。輪廓應用程式伺服器1516可比較在藉由光束強度資料1570進行正規化或校正之後的經量測繞射光束資料1514與模擬繞射光束資料之光譜庫1518，該光譜庫1518表示目標結構之臨界尺寸與解析度的變化組合。

對於可用以量測繞射光束資料或信號以供本發明使用之系統的更多詳細描述，參見1999年2月11日申請之題為「FOCUSED BEAM SPECTROSCOPIC ELLIPSOMETRY METHOD AND SYSTEM」的美國專利第6,734,967號及1998年1月29日申請之題為「APPARATUS FOR ANALYZING MULTI-LAYER THIN FILM STACKS ON SEMICONDUCTORS」的美國專利第6,278,519號，該兩個專利之全文

以引用的方式併入本文中。此等兩個專利描述計量系統，該等計量系統可組態有多個量測子系統，包括分光橢偏儀、單波長橢偏儀、寬頻反射計、DUV反射計、光束輪廓反射計及光束輪廓橢偏儀中之一或多者。可個別地或組合地使用此等量測子系統來量測來自膜及經圖案化結構之反射或繞射光束。根據本發明之實施例，可分析此等量測中收集之信號以判定半導體晶圓上之結構的參數。

本發明之實施例可提供作為電腦程式產品或軟體，其可包括具有儲存於其上之指令的機器可讀媒體，該等指令可用以程式化電腦系統(或其他電子裝置)以執行根據本發明之程序。機器可讀媒體包括用於以可由機器(例如，電腦)讀取之形式來儲存或傳輸資訊的任何機構。舉例而言，機器可讀(例如，電腦可讀)媒體包括機器(例如，電腦)可讀儲存媒體(例如，唯讀記憶體(「ROM」)、隨機存取記憶體(「RAM」)、磁碟儲存媒體、光學儲存媒體、快閃記憶體裝置等)、機器(例如，電腦)可讀傳輸媒體(電、光學、聲學或其他形式之傳播信號(例如，紅外線信號、數位信號等))等。

圖16說明呈電腦系統1600之例示性形式的機器之圖解表示，在電腦系統1600內可執行用於使機器執行本文中所論述之方法中之任何一或多者的指令之集合。在替代性實施例中，機器可連接(例如，網路連接)至區域網路(LAN)、企業內部網路、企業間網路或網際網路中之其他機器。機器可作為用戶端-伺服器網路環境中之伺服器或用戶端機器而操作，或作為同級間(或分散式)網路環境中之同級機器而操作。機器可為個人電腦(PC)、平板PC、機上盒(STB)、個人數位助理(PDA)、蜂巢式電話、網頁設備、伺服器、網路路由器、交換器或橋接器，或能夠執行指定將由彼機器採取之動作的指令之集合(順序地或以其他方式)的任何機器。另外，雖然僅說明單一機器，但術語「機器」亦應理解為包括個別地或聯合地執行指令之一集合(多個集

合)以執行本文中所論述之方法中之任何一或多者的機器(例如，電腦)之任何集合體。

例示性電腦系統1600包括經由匯流排1630彼此通信之處理器1602、主記憶體1604(例如，唯讀記憶體(ROM)、快閃記憶體、諸如同步DRAM(SDRAM)或Rambus DRAM(RDRAM)之動態隨機存取記憶體(DRAM)等)、靜態記憶體1606(例如，快閃記憶體、靜態隨機存取記憶體(SRAM)等)，及次要記憶體1618(例如，資料儲存裝置)。

處理器1602表示一或多個通用處理裝置，諸如微處理器、中央處理單元或其類似者。更特定言之，處理器1602可為複雜指令集計算(CISC)微處理器、精簡指令集計算(RISC)微處理器、超長指令字(VLIW)微處理器、實施其他指令集之處理器或實施指令集之組合的處理器。處理器1602亦可為一或多個專用處理裝置，諸如特殊應用積體電路(ASIC)、場可程式化閘陣列(FPGA)、數位信號處理器(DSP)、網路處理器或其類似者。處理器1602經組態以執行用於執行本文中所論述之操作的處理邏輯1626。

電腦系統1600可進一步包括網路介面裝置1608。電腦系統1600亦可包括視訊顯示單元1610(例如，液晶顯示器(LCD)或陰極射線管(CRT))、文數字輸入裝置1612(例如，鍵盤)、游標控制裝置1614(例如，滑鼠)及信號產生裝置1616(例如，揚聲器)。

次要記憶體1618可包括機器可存取儲存媒體(或更具體言之，電腦可讀儲存媒體)1631，機器可存取儲存媒體1631上儲存有體現本文中所描述之方法或功能中之任何一或多者的指令之一或多個集合(例如，軟體1622)。軟體1622亦可在其由電腦系統1600執行期間完全地或至少部分地駐留於主記憶體1604及/或處理器1602內，主記憶體1604及處理器1602亦構成機器可讀儲存媒體。可進一步經由網路介面裝置1608在網路1620上傳輸或接收軟體1622。



雖然在一例示性實施例中將機器可存取儲存媒體1631展示為單一媒體，但術語「機器可讀儲存媒體」應視為包括儲存指令之一或多個集合的單一媒體或多個媒體(例如，集中式資料庫或分散式資料庫，及/或相關聯之快取記憶體及伺服器)。術語「機器可讀儲存媒體」亦應理解為包括能夠儲存或編碼用於由機器執行且使機器執行本發明之方法中之任何一或多者的指令之集合的任何媒體。因此，術語「機器可讀儲存媒體」應視為包括(但不限於)固態記憶體以及光學及磁性媒體。

根據本發明之一實施例，機器可存取儲存媒體具有儲存於其上之指令，該等指令使資料處理系統執行使用半導體基板或晶圓上之重複結構的計量來優化參數模型以用於結構分析的方法。該方法包括判定結構之第一模型。該第一模型係基於參數之第一集合。針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之集合。光譜靈敏度係藉由光譜相關於參數之第一集合的導數來判定。基於光譜靈敏度變化資料之集合來修改結構之第一模型以提供結構之第二模型。結構之第二模型係基於不同於參數之第一集合的參數之第二集合。接著提供自結構之第二模型導出的模擬光譜。

應理解，在本發明之實施例之精神及範疇內，可在多種情形下應用以上方法。舉例而言，在一實施例中，在存在或不存在背景光之情況下執行上文所描述之量測。在一實施例中，在半導體、太陽能、發光二極體(LED)或相關製造程序中執行上文所描述之方法。在一實施例中，在單獨或整合式計量工具中使用上文所描述之方法。

經量測光譜之分析一般涉及比較經量測樣本光譜與模擬光譜以推導出最好地描述經量測樣本之模型的參數值。圖17為表示根據本發明之一實施例的用於建置參數化模型及以樣本光譜(例如，源自一或多個工件)開始之光譜庫之方法中的操作之流程圖1700。

在操作1702處，藉由使用者定義材料檔案之集合以指定供形成經量測樣本特徵之材料的特性(例如，折射率或 $n$ 、 $k$ 值)。

在操作1704處，散射量測使用者藉由選擇該等材料檔案中之一或多者以裝配對應於待量測之週期性光柵特徵中所存在之材料的材料之堆疊來定義預期樣本結構之標稱模型。可經由定義特性化所量測之特徵之形狀的模型參數(諸如，厚度、臨界尺寸(CD)、側壁角(SWA)、高度(HT)、邊緣粗糙度、角部修圓半徑等)之標稱值來進一步參數化此使用者定義之模型。取決於定義二維模型(亦即，輪廓)抑或三維模型，具有30至50個或更多此等模型參數並不罕見。

自參數化模型，可使用諸如嚴格耦合波分析(RCWA)之嚴格繞射模型化演算法來計算針對給定光柵參數值之給定集合的模擬光譜。接著在操作1706處執行迴歸分析，直至參數化模型收斂於參數值之集合上為止，該等參數值特性化對應於模擬光譜之最終輪廓模型(針對二維)，該模擬光譜根據預定義匹配準則而匹配經量測繞射光譜。假設與匹配之模擬繞射信號相關聯的最終輪廓模型表示供產生該模型之結構的實際輪廓。

可接著在操作1708處利用匹配之模擬光譜及/或相關聯之優化輪廓模型，以藉由擾動參數化之最終輪廓模型之值來建置模擬繞射光譜之光譜庫。可接著由在生產環境中操作之散射量測系統來使用模擬繞射光譜之所得光譜庫以判定是否已根據規格製造隨後量測之光柵結構。光譜庫產生1708可包括針對數個輪廓中之每一者產生模擬光譜資訊的機器學習系統(諸如，神經網路)，每一輪廓包括一或多個模型化輪廓參數之集合。為產生光譜庫，機器學習系統自身可必須經受基於光譜資訊之訓練資料集的某一訓練。此訓練可為計算密集型的及/或可必須針對不同模型及/或輪廓參數域來重複。可能由關於訓練資料集之大小的使用者決策而引入產生光譜庫之計算負荷的顯著低效率。

舉例而言，選擇過大訓練資料集可導致針對訓練之不必要計算，而採用具有不足大小之訓練資料集的訓練可需要再訓練以產生光譜庫。

對於一些應用而言，可不必建置光譜庫。在已建立且優化結構之參數模型之後，可即時使用類似於上文所描述之迴歸分析的迴歸分析以在收集繞射光束資料時針對每一目標判定最好擬合參數值。若該結構相對簡單(例如，2D結構)，或若僅需要量測少量參數，則即使迴歸可比使用光譜庫慢，迴歸仍可足夠快。在其他狀況下，相比使用光譜庫，使用迴歸之額外靈活性可證明量測時間之某一增加。對於能夠即時迴歸供本發明使用之OCD資料之方法及系統的更詳細描述，參見2005年7月8日申請之題為「REAL TIME ANALYSIS OF PERIODIC STRUCTURES ON SEMICONDUCTORS」的美國專利第7,031,848號，該專利之全文以引用之方式併入本文中。

圖18描繪表示根據本發明之一實施例的使用光學參數模型建構及優化光譜庫之方法中的操作之流程圖1800。並非始終需要每一所展示之操作。可使用所展示之操作之子集來優化一些光譜庫。應理解，可以不同序列來執行此等操作中之一些，或可將額外操作插入至該序列中而不脫離本發明之範疇。

參看操作1801，使用參數模型建立光譜庫。可已使用諸如結合流程圖100、200或300而描述之程序中的一者的程序來建立及優化彼參數模型。較佳針對可用波長及角度之子集來建立光譜庫，以便使光譜庫大小保持為小的且加速光譜庫匹配或搜尋。接著使用彼光譜庫來匹配動態精確度信號資料，如在操作1802處所展示，且因此判定使用彼光譜庫之量測之精確度或可重複性。若所得精確度不滿足要求(操作1804)，則所使用之波長及/或角度及/或偏光狀態之數目需要增加，如在操作1803處所展示，且該程序重複。應理解，若動態精確度顯著好於所需精確度，則可需要減小波長及/或角度及/或偏光狀態之數目

以便產生較小、較快速光譜庫。本發明之實施例可用以判定哪些額外波長、入射角、方位角及/或偏光狀態將包括於光譜庫中。

當已針對精確度優化了光譜庫時，可使用彼光譜庫來匹配可用之任何額外資料，如操作1805處所展示。可比較來自資料之較大集合的結果與參考資料(諸如，橫截面電子顯微照片)，且亦檢查該等結果以查驗晶圓之間的一致性(例如，在同一設備上處理之兩個晶圓通常將展示類似的跨晶圓變化)，如操作1806處所展示。若該等結果滿足預期結果，則光譜庫準備好用於生產晶圓之散射量測(操作1809)。若該等結果不滿足預期結果，則需要更新該光譜庫及/或參數模型且重新測試所得新光譜庫(操作1808)。本發明之一或多項實施例可用以判定必須對光譜庫或參數模型進行何些改變以改良結果。

圖19描繪表示根據本發明之一實施例的使用光學參數模型建構及優化即時迴歸量測配方之方法中的操作之流程圖1900。並非始終需要每一所展示之操作。可使用所展示之操作之子集來優化一些即時迴歸量測配方。應理解，可以不同序列來執行此等操作中之一些，或可將額外操作插入至該序列中而不脫離本發明之範疇。

參看操作1901，使用參數模型來建立即時迴歸量測配方。可已使用諸如結合流程圖100、200或300中之一或多者而描述之方法的程序來建立及優化彼參數模型。較佳針對可用波長及角度之子集而建立配方，以便將計算時間保持為儘可能短。接著使用該配方來對動態精確度信號資料進行迴歸，如在操作1902處所展示，且因此判定使用彼光譜庫之量測之精確度或可重複性。若所得精確度不滿足要求(操作1904)，則所使用之波長及/或角度及/或偏光狀態之數目需要增加，如在操作1903處所展示，且該程序重複。應理解，若動態精確度顯著好於所需精確度，則可需要減小波長及/或角度及/或偏光狀態之數目以便產生較快速配方。本發明之實施例可用以判定哪些額外波長、入射

角、方位角及/或偏光狀態將包括於配方中。

當已針對精確度優化了配方時，可使用彼配方來對可用之任何額外資料進行迴歸，如操作1905處所展示。可比較來自資料之較大集合的結果與參考資料(諸如，橫截面電子顯微照片)，且亦檢查該等結果以查驗晶圓之間的一致性(例如，在同一設備上處理之兩個晶圓通常將展示類似的跨晶圓變化)，如操作1906處所展示。若該等結果滿足預期結果，則配方準備好用於生產晶圓之散射量測(操作1909)。若該等結果不滿足預期結果，則需要更新配方及/或參數模型且重新測試所得新配方(操作1908)。本發明之一或多項實施例可用以判定必須對配方或參數模型進行何些改變以改良結果。

如上文實例中所說明，開發參數模型以及使用彼等參數模型之光譜庫及即時迴歸配方之程序常常為反覆程序。與試誤方法相比較，本發明可顯著減少達到參數模型及使用彼模型之光譜庫或即時迴歸配方所需之反覆的數目。本發明亦顯著改良所得參數模型、光譜庫及即時迴歸配方之量測效能，此係因為模型參數、波長、入射角、方位角及偏光狀態全部可基於優化靈敏度及降低相關性而選擇。

亦應理解，本發明之實施例亦包括使用與機器學習系統(諸如，神經網路及支援向量機)有關的技術來產生模擬繞射信號。

因此，已揭示基於光譜靈敏度之模型優化方法。根據本發明之一實施例，一種方法包括判定結構之第一模型。該第一模型係基於參數之第一集合。針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之集合。光譜靈敏度係藉由光譜相關於參數之第一集合的導數而判定。基於光譜靈敏度變化資料之集合來修改結構之第一模型以提供結構之第二模型。結構之第二模型係基於不同於參數之第一集合的參數之第二集合。接著提供自結構之第二模型導出的模擬光譜。在一實施例中，該方法進一步涉及比較模擬光譜與自結構導出之樣本光譜。

**【符號說明】**

100	說明判定新參數化之方法中的代表性操作之流程圖
150	說明PAC應用程式中之考慮事項的流程圖
200	說明判定新參數化之方法中的代表性操作之流程圖
300	說明判定新參數化之另一方法中的代表性操作之流 程圖
600	模型
700	半導體結構
702	蝕刻特徵
704	內部構形
800	半導體結構模型
802	結構高度(HT)
804	結構寬度
806	頂部臨界尺寸(TCD)
808	底部臨界尺寸(BCD)
900	曲線圖
902	第一軸線
904	第二正交軸線
906	最優擬合軸線
1000	表示用於判定及利用結構參數以用於自動化程序及 設備控制的一系列例示性操作之流程圖
1100	用於判定及利用結構參數以用於自動化程序及設備 控制的系統
1102	第一製造叢集
1104	光學計量系統
1106	第二製造叢集

1108	光學計量工具
1110	處理器
1112	光譜庫
1114	機器學習系統
1116	計量處理器
1200	週期性光柵
1202	週期性光柵
1300	結構
1302	二維組件
1304	三維組件
1306	基板
1400	光學計量系統
1402	計量光束源
1404	計量光束
1406	目標結構
1408	晶圓
1410	繞射光束
1412	計量光束接收器
1414	繞射光束資料
1416	輪廓應用程式伺服器
1418	光譜庫
1506	目標結構
1508	晶圓
1514	繞射光束資料
1516	輪廓應用程式伺服器
1518	光譜庫
1550	光學計量系統

1552	計量光束源
1554	經偏光計量光束
1555	光束分光器
1556	四分之一波片
1557	光束強度監視器
1558	接物鏡
1559	位置
1560	反射光束
1562	光束分光器
1564	偵測器
1566	第二偵測器
1570	光束強度資料
1600	電腦系統
1602	處理器
1604	主記憶體
1606	靜態記憶體
1608	網路介面裝置
1610	視訊顯示單元
1612	文數字輸入裝置
1614	游標控制裝置
1616	信號產生裝置
1618	次要記憶體
1620	網路
1622	軟體
1626	處理邏輯
1630	匯流排



- 1631 機器可存取儲存媒體
- 1700 表示用於建置參數化模型及以樣本光譜開始之光譜庫之方法中的操作之流程圖
- 1800 表示使用光學參數模型建構及優化光譜庫之方法中的操作之流程圖
- 1900 表示使用光學參數模型建構及優化即時迴歸量測配方之方法中的操作之流程圖
- P1 新參數
- HT1 浮動參數
- HT2 浮動參數

## 申請專利範圍

1. 一種使用一半導體基板或晶圓上之重複結構的計量來優化參數模型以用於結構分析的方法，該方法包含：

於一半導體基板或晶圓上判定一結構之一第一模型，該第一模型係基於參數之一第一集合；

計算針對該結構之該第一模型之光譜；

針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之一集合以用於相關於該第一模型之該等參數之該光譜之變化，其中針對該結構之光譜靈敏度係藉由相關於參數之該第一集合之該光譜的導數之計算而判定；

基於針對該結構之該光譜靈敏度變化資料執行一光譜靈敏度分析；

基於針對該結構及該光譜靈敏度分析之光譜靈敏度變化資料之該集合來修改該結構之該第一模型以提供該結構之一第二模型，該結構之該第二模型係基於不同於參數之該第一集合的參數之一第二集合；及

計算並提供自該結構之該第二模型導出的一模擬光譜。

2. 如請求項1之方法，該方法進一步包含：

比較該模擬光譜與自該結構導出之一樣本光譜。

3. 如請求項1之方法，其中修改該結構之該第一模型以提供該結構之該第二模型進一步包含：減小參數之該第一集合的自由度(DOF)以提供參數之該第二集合。

4. 如請求項3之方法，其中減小參數之該第一集合的該DOF包含：

產生光譜靈敏度資料；

選擇一適當參數化；及

固定具有一最小光譜靈敏度之參數。

5. 如請求項1之方法，其中修改該結構之該第一模型以提供該結構之該第二模型包含：重新參數化幾何參數或材料參數或兩者以提供參數之該第二集合。
6. 如請求項1之方法，其中修改該結構之該第一模型以提供該結構之該第二模型包含：重新參數化非幾何參數以提供參數之該第二集合，該等非幾何參數係選自由自訂函數參數及主成份分析(PCA)參數組成之群。
7. 如請求項6之方法，其中該重新參數化包含：使用呈線性或非線性參數相關性之自訂函數參數。
8. 如請求項6之方法，其中該重新參數化包含：使用具有不同數目個參數之自訂函數。
9. 如請求項6之方法，其中該重新參數化包含：相對於參數之該第一集合減小參數之該第二集合的一光譜庫大小。
10. 如請求項6之方法，其中該重新參數化包含：使用具有大量參數之一離散化模型。
11. 如請求項4之方法，其中針對該結構之該光譜靈敏度資料係針對參數空間中之多個點而計算。
12. 如請求項11之方法，其中針對該結構該光譜靈敏度資料係針對多個入射角(AOI)及方位角而計算。
13. 如請求項1之方法，其中該等重複結構包含位於晶圓劃線區域或裝置區域中之平面膜堆疊結構，且該計量包含一厚度量測。
14. 如請求項1之方法，其中該等重複結構包含用於該晶圓劃線區域或該裝置區域中之臨界尺寸(CD)之量測的重複結構。
15. 如請求項1之方法，其中該等重複結構包含用於作為多個目標而進行單獨量測且用於一起模型化之結構的一組合。

16. 如請求項1之方法，其中執行該光譜靈敏度分析包括主成份分析(PCA)之執行。
17. 一種非暫時性機器可存取儲存媒體，其具有儲存於其上之指令，該等指令使一資料處理系統執行使用一半導體基板或晶圓上之重複結構的計量來優化參數模型以用於結構分析的一方法，該方法包含：
  - 於一半導體基板或晶圓上判定一結構之一第一模型，該第一模型係基於參數之一第一集合；
  - 計算針對該結構之該第一模型之光譜；
  - 針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之一集合以用於相關於該第一模型之該等參數之該光譜之變化，其中光譜靈敏度係藉由相關於參數之該第一集合之該光譜的導數之計算而判定；
  - 執行針對該結構之光譜靈敏度變化資料之該集合的一光譜靈敏度分析；
  - 基於針對該結構及該光譜靈敏度分析之光譜靈敏度變化資料之該集合來修改該結構之該第一模型以提供該結構之一第二模型，該結構之該第二模型係基於不同於參數之該第一集合的參數之一第二集合；及
  - 計算並提供自該結構之該第二模型導出的一模擬光譜。
18. 如請求項17之儲存媒體，該方法進一步包含：
  - 比較該模擬光譜與自該結構導出之一樣本光譜。
19. 如請求項17之儲存媒體，其中修改該結構之該第一模型以提供該結構之該第二模型包含：減小參數之該第一集合的自由度(DOF)以提供參數之該第二集合。
20. 如請求項19之儲存媒體，其中減小參數之該第一集合的該DOF包含：

產生針對該結構之光譜靈敏度資料；

選擇一適當參數化；及

固定具有一最小靈敏度之參數。

21. 如請求項17之儲存媒體，其中修改該結構之該第一模型以提供該結構之該第二模型包含：重新參數化幾何參數或材料參數或兩者以提供參數之該第二集合。
22. 如請求項17之儲存媒體，其中修改該結構之該第一模型以提供該結構之該第二模型包含：重新參數化非幾何參數以提供參數之該第二集合，該等非幾何參數係選自由自訂函數參數及主成份分析(PCA)參數組成之群。
23. 如請求項22之儲存媒體，其中該重新參數化包含：使用呈線性或非線性參數相關性之自訂函數參數。
24. 如請求項22之儲存媒體，其中該重新參數化包含：使用具有不同數目個參數之自訂函數。
25. 如請求項22之儲存媒體，其中該重新參數化包含：相對於參數之該第一集合減小參數之該第二集合的一光譜庫大小。
26. 如請求項22之儲存媒體，其中該重新參數化包含：使用具有大量參數之一離散化模型。
27. 如請求項20之儲存媒體，其中針對該結構之該光譜靈敏度資料係針對參數空間中之多個點而計算。
28. 如請求項27之儲存媒體，其中針對該結構之該光譜靈敏度資料係針對多個人射角(AOI)及方位角而計算。
29. 如請求項17之儲存媒體，其中該等重複結構包含位於晶圓劃線區域或裝置區域中之平面膜堆疊結構，且該計量包含一厚度量測。
30. 如請求項17之儲存媒體，其中該等重複結構包含用於該晶圓劃

線區域或該裝置區域中之臨界尺寸(CD)之量測的重複結構。

31. 如請求項17之儲存媒體，其中該等重複結構包含用於作為多個目標而進行單獨量測且用於一起模型化之結構的一組合。
32. 如請求項17之儲存媒體，其中執行該光譜靈敏度分析包括主成份分析(PCA)之執行。
33. 一種用以產生一模擬繞射信號以使用光學計量來判定用以在一半導體基板或晶圓上製造一結構之一晶圓應用程式之程序參數的系統，該系統包含：

一製造叢集，其經組態以執行用以在一半導體基板一晶圓上製造一結構之一晶圓應用程式，其中一或多個程序參數特性化在該結構經歷在使用該製造叢集所執行之該晶圓應用程式中的處理操作時結構形狀或層厚度之行為；及

一光學計量系統，其經組態以判定該晶圓應用程式之該一或多個程序參數，該光學計量系統包含：

一光束源及經組態以量測該結構之一繞射信號的偵測器；及

一處理器，其：經組態以於一半導體基板或晶圓上判定一結構之一第一模型，該第一模型係基於參數之一第一集合；經組態以計算針對該結構之該第一模型之光譜；經組態以針對該結構判定光譜靈敏度變化資料之一集合以用於相關於該第一模型之該等參數之該光譜之變化，其中針對該結構之光譜靈敏度係藉由相關於參數之該第一集合之光譜的導數之計算而判定；經組態以執行光譜靈敏度變化資料之該集合之一光譜靈敏度分析；經組態以基於針對該結構及該光譜靈敏度分析之光譜靈敏度變化資料之該集合來修改該結構之該第一模型以提供該結構之一第二模型，該結構之該第二模型係基於不同於參數之該第一集合的參數之一第二集合；且經組態

以計算並提供自該結構之該第二模型導出的一模擬光譜。

34. 如請求項33之系統，其進一步包含：

模擬繞射信號及與該等模擬繞射信號相關聯之一或多個程序參數之值的一光譜庫，其中該等模擬繞射信號係使用一或多個形狀或膜厚度參數之值而產生，且其中用以產生該等模擬繞射信號之該一或多個形狀或膜厚度參數的該等值係自與該等模擬繞射信號相關聯之該一或多個程序參數之該等值而導出。

35. 如請求項33之系統，其中執行該光譜靈敏度分析包括主成份分析(PCA)之執行。

# 圖式

流程圖 100

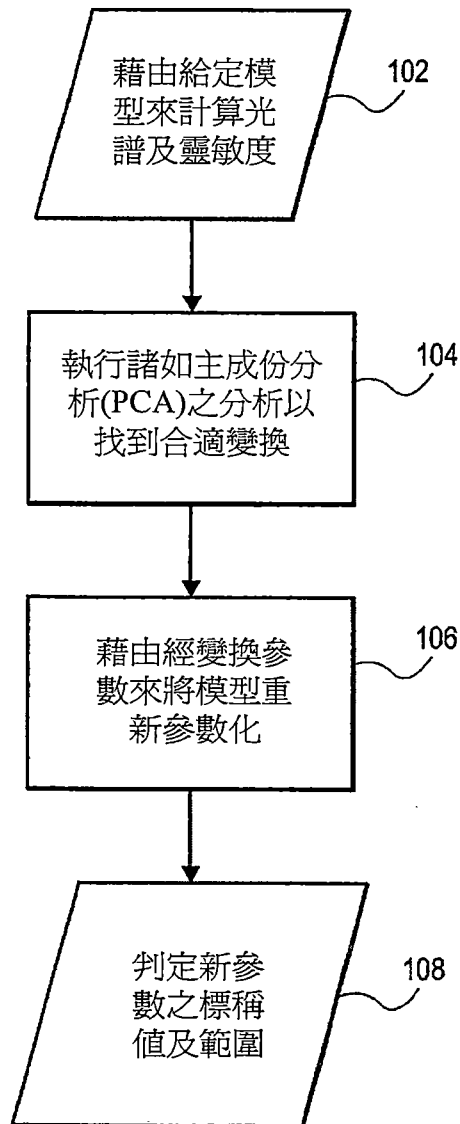


圖1A



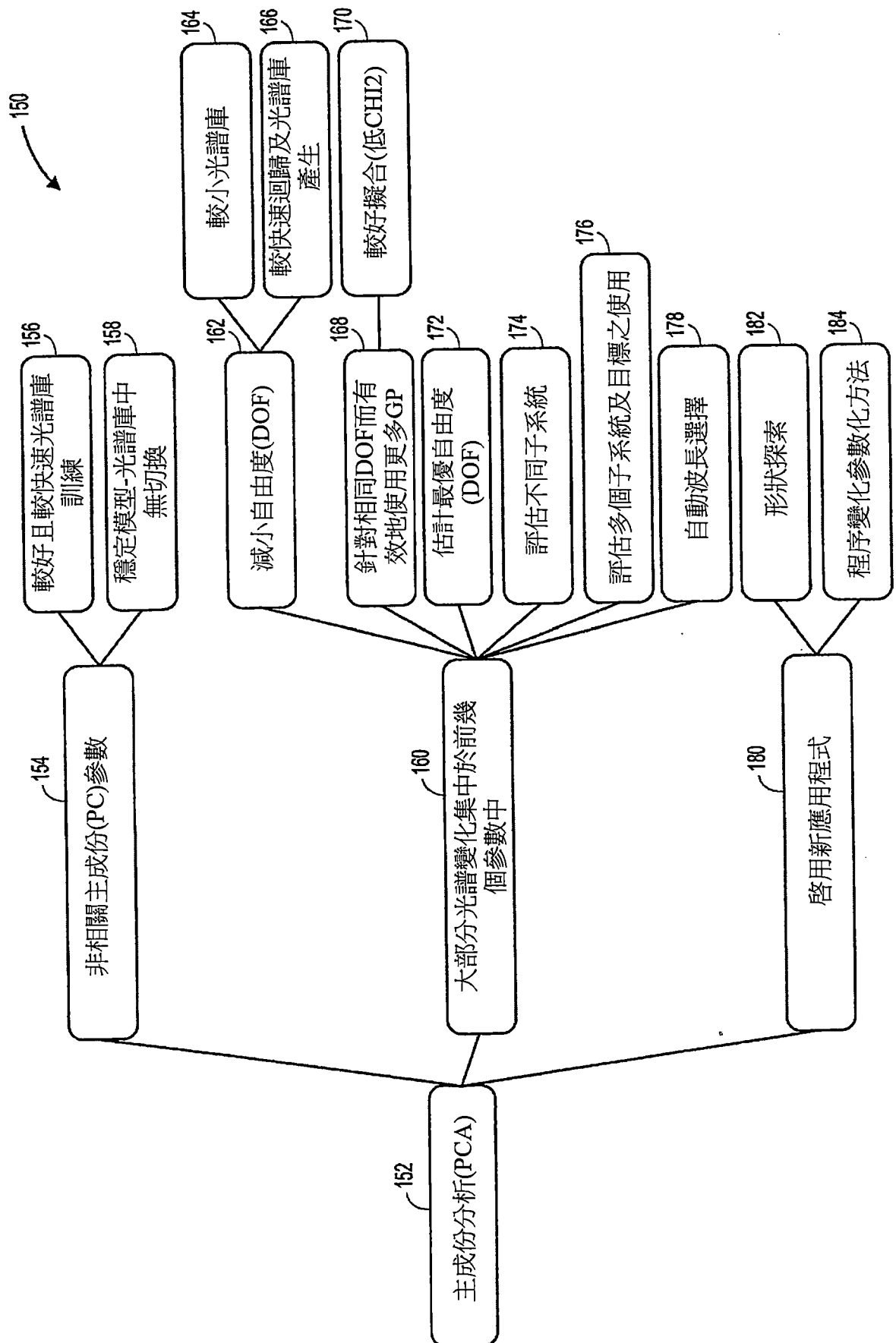


圖1B

流程圖 200

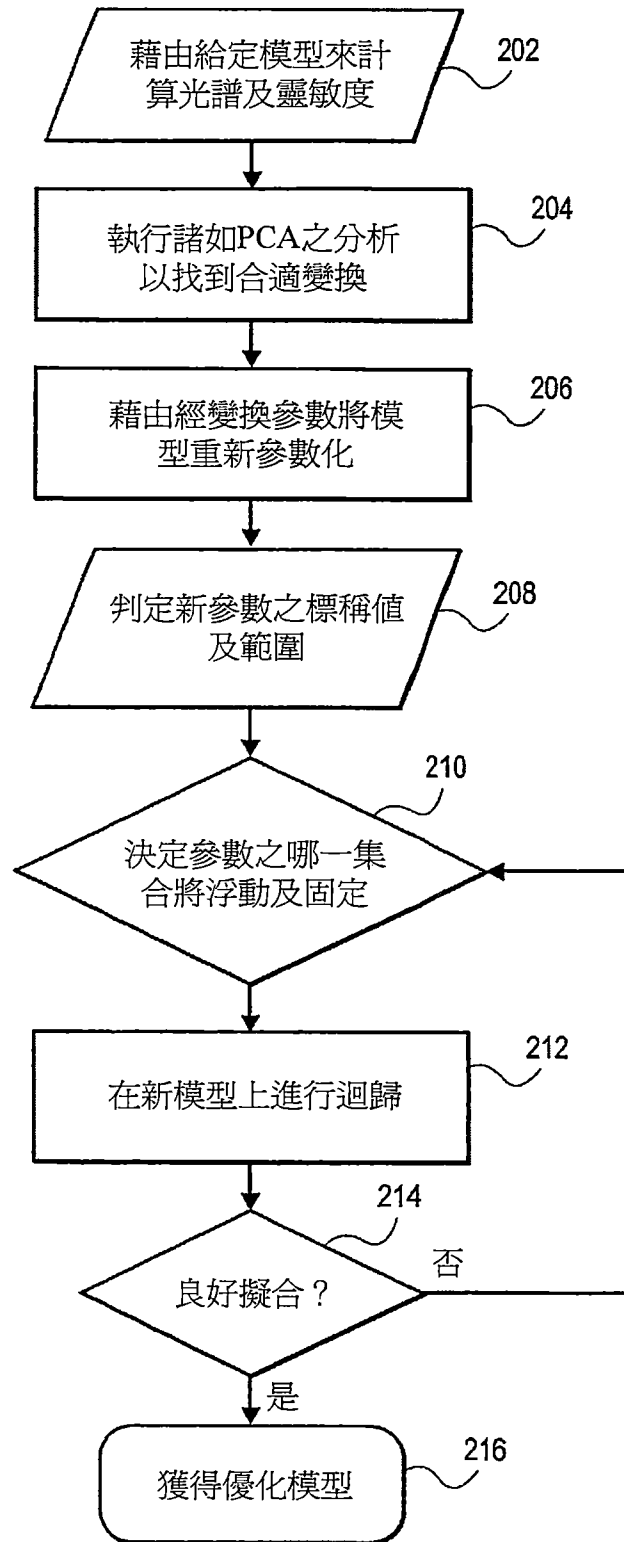


圖2

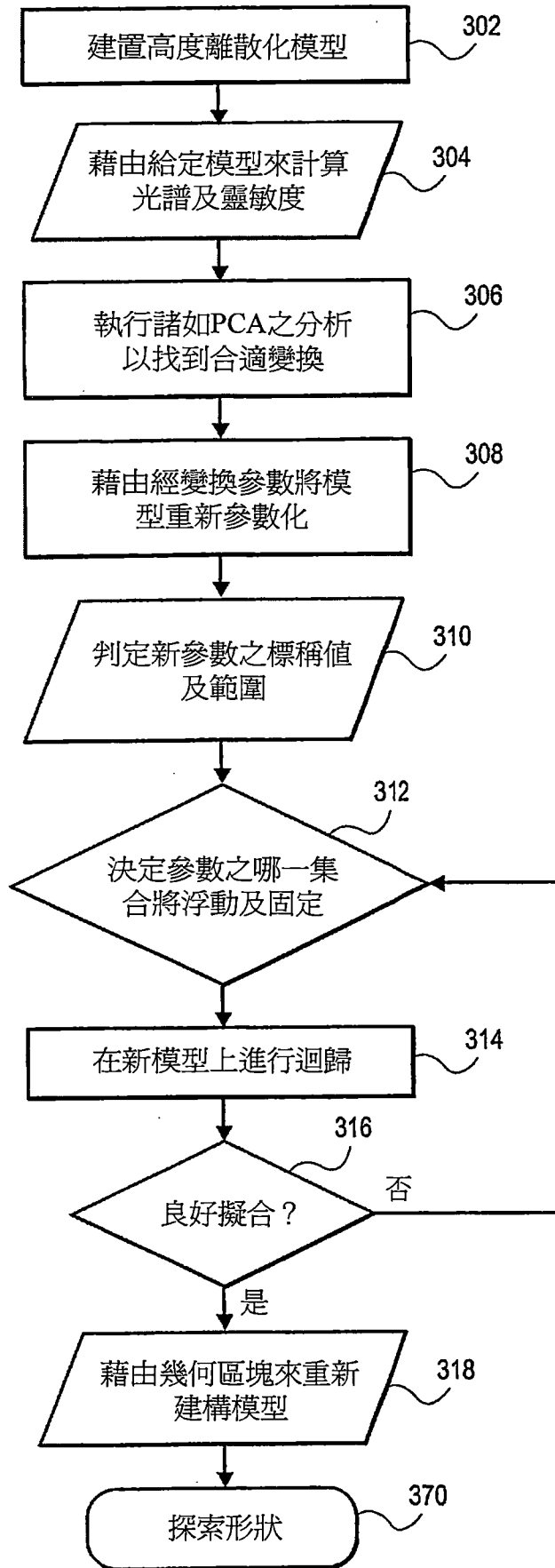


圖3

400

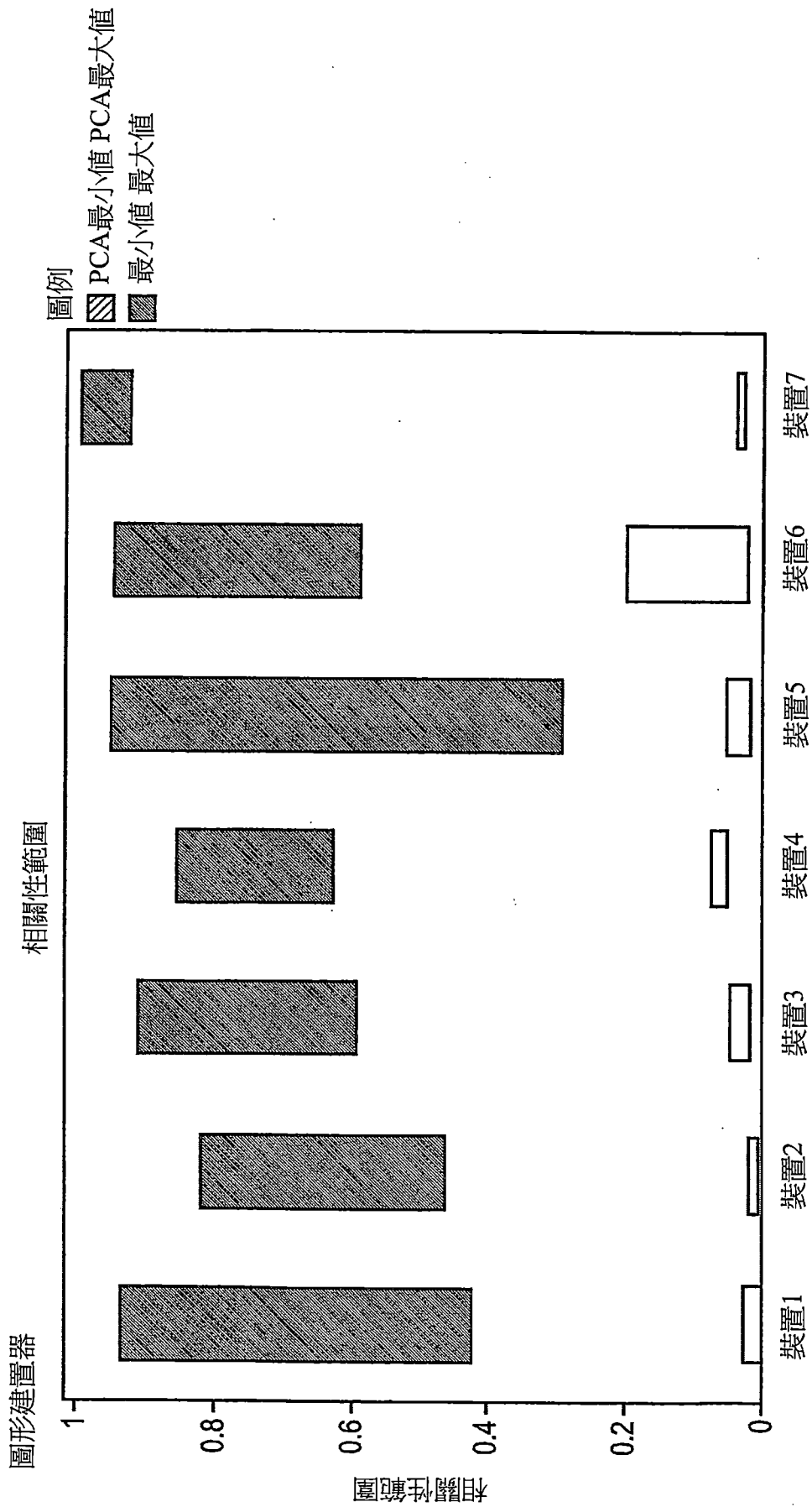


圖4

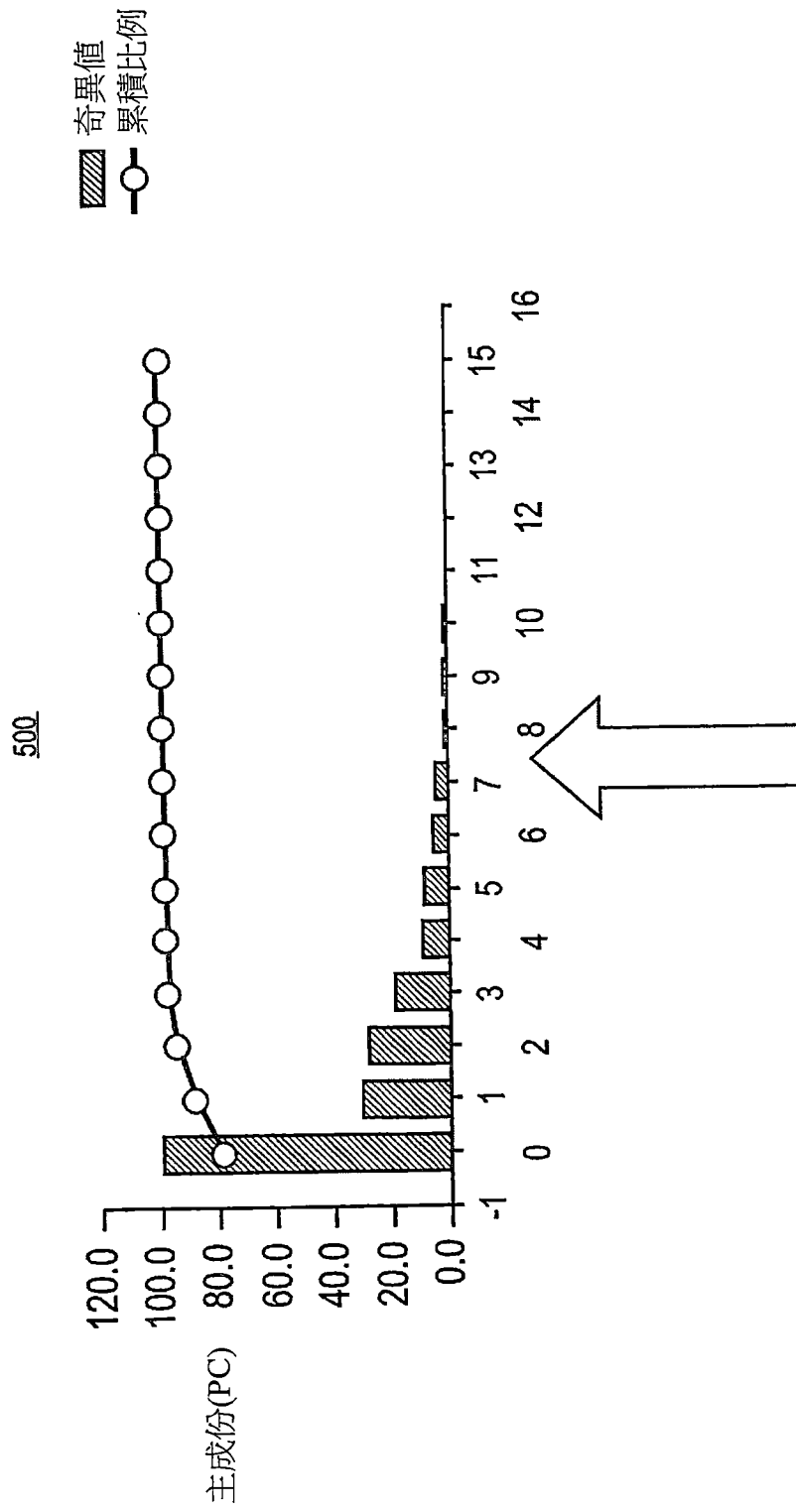


圖5

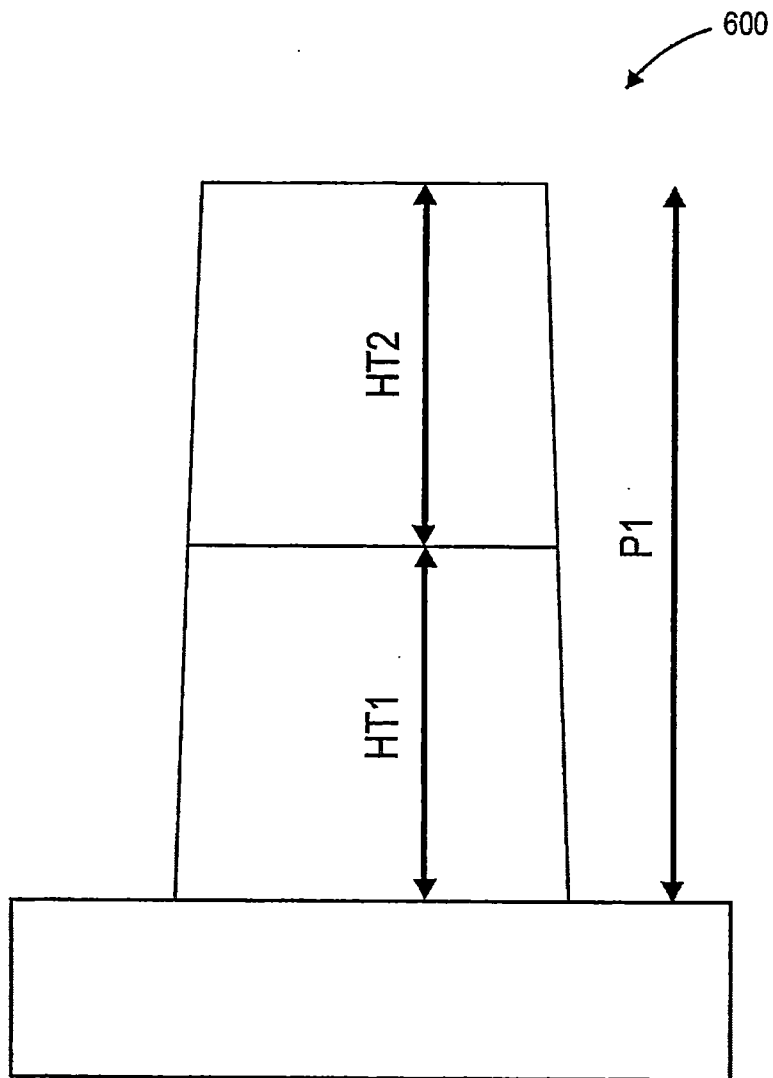


圖6

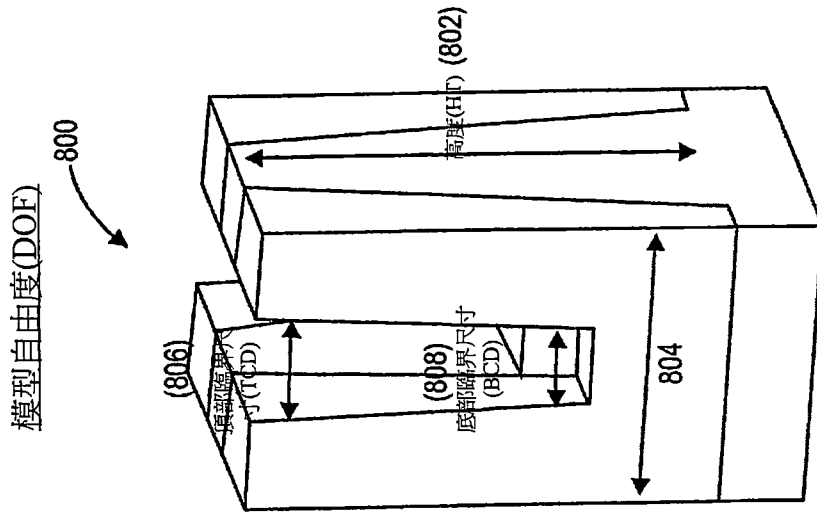


圖8

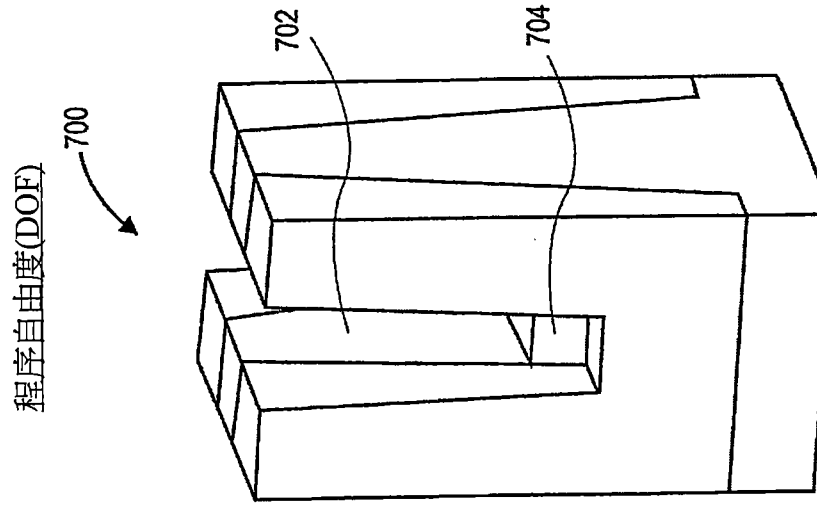


圖7

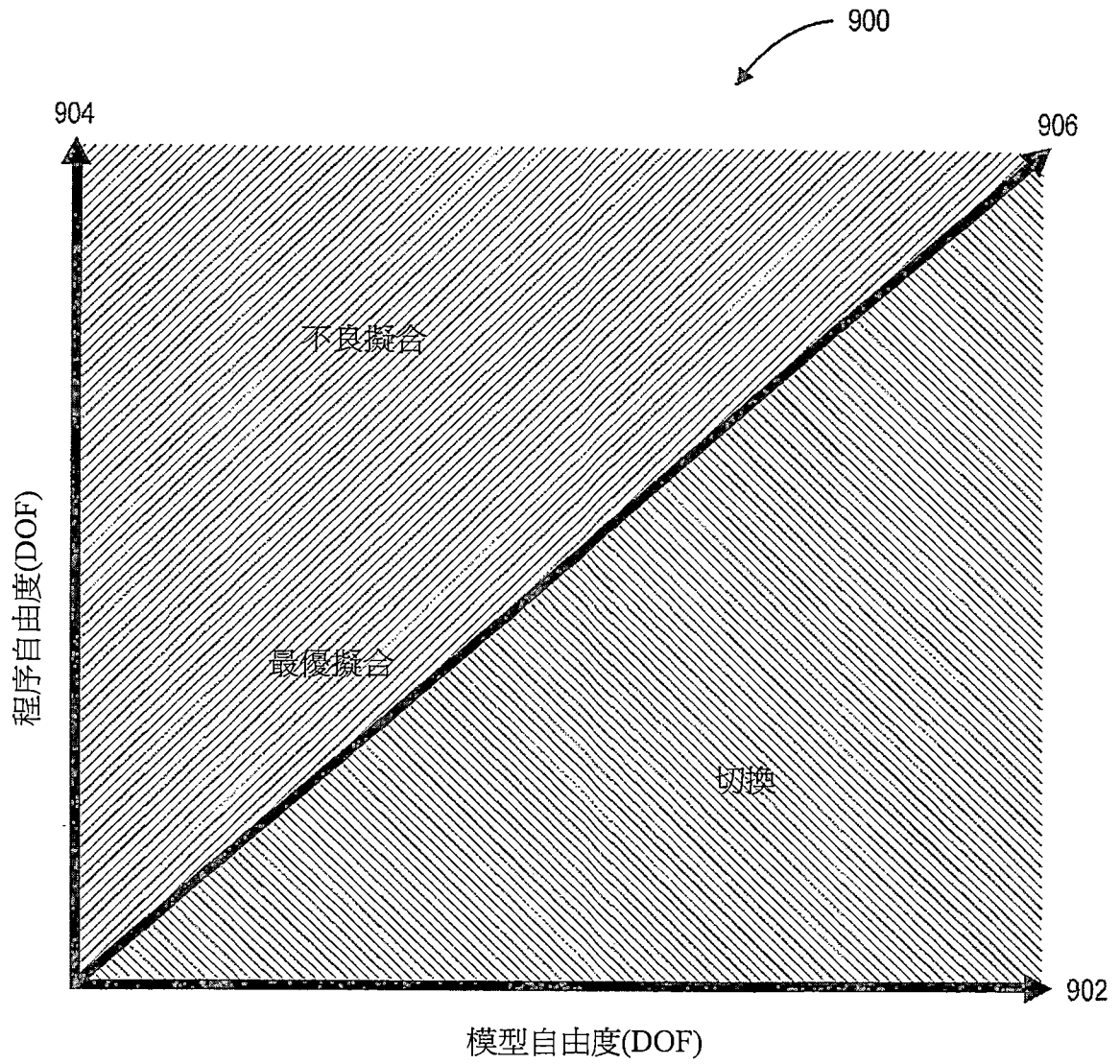


圖9



流程圖 1000

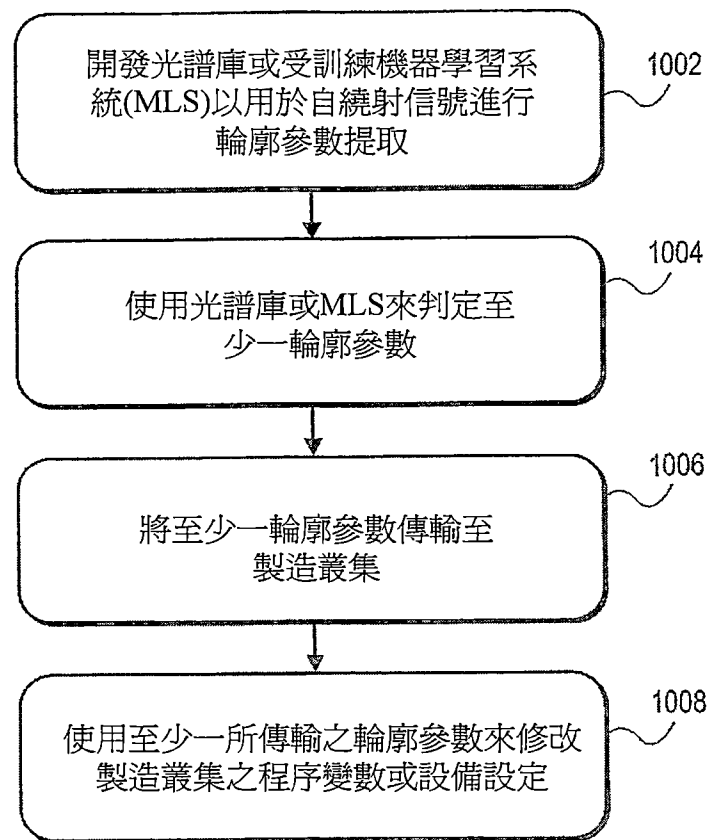


圖10

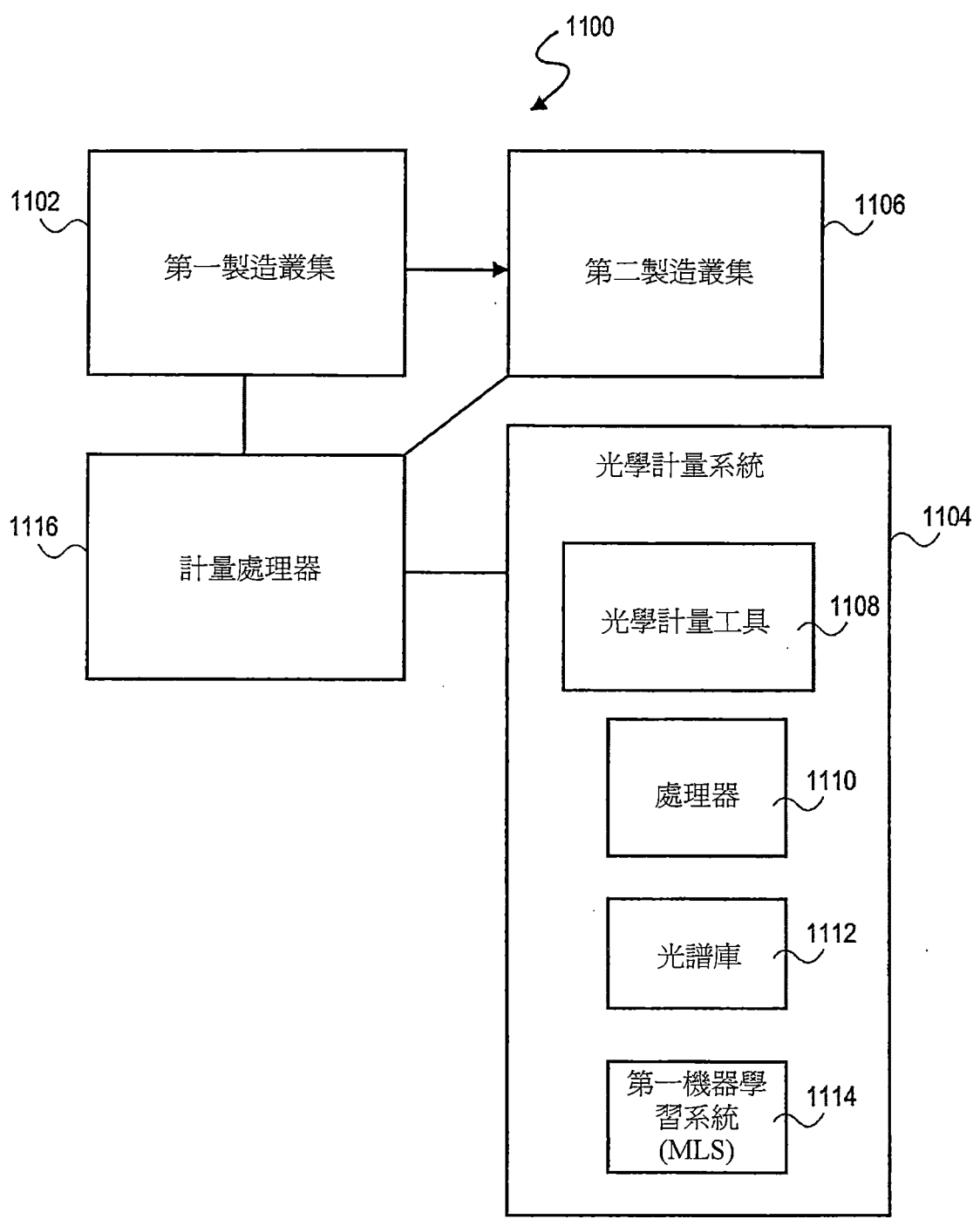


圖11

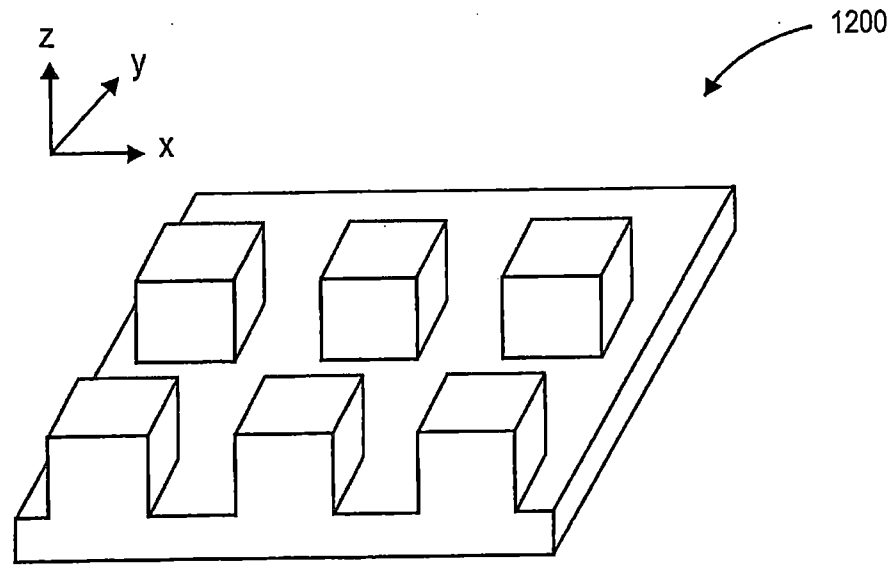


圖12A

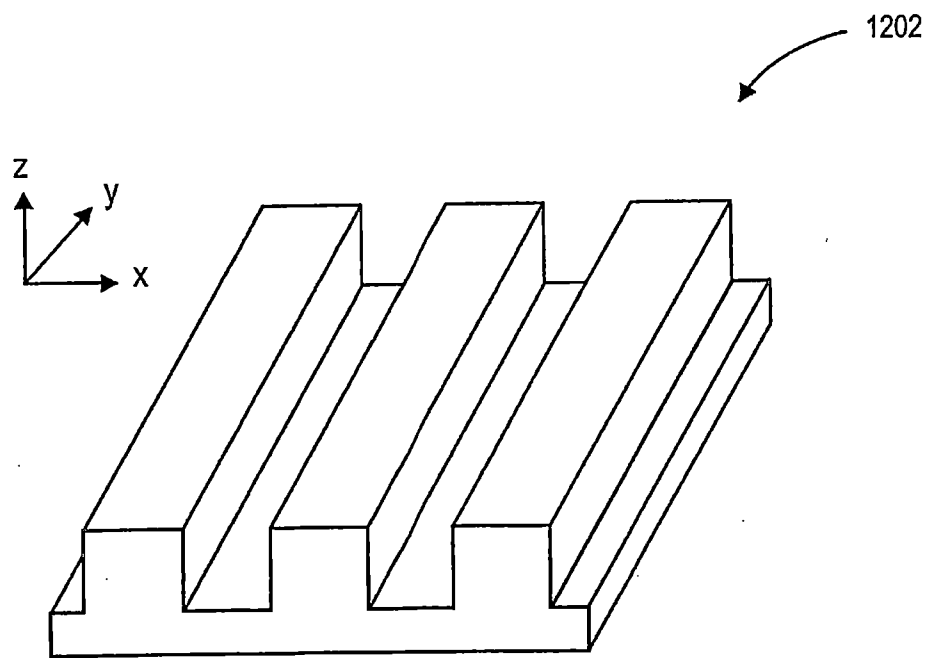


圖12B

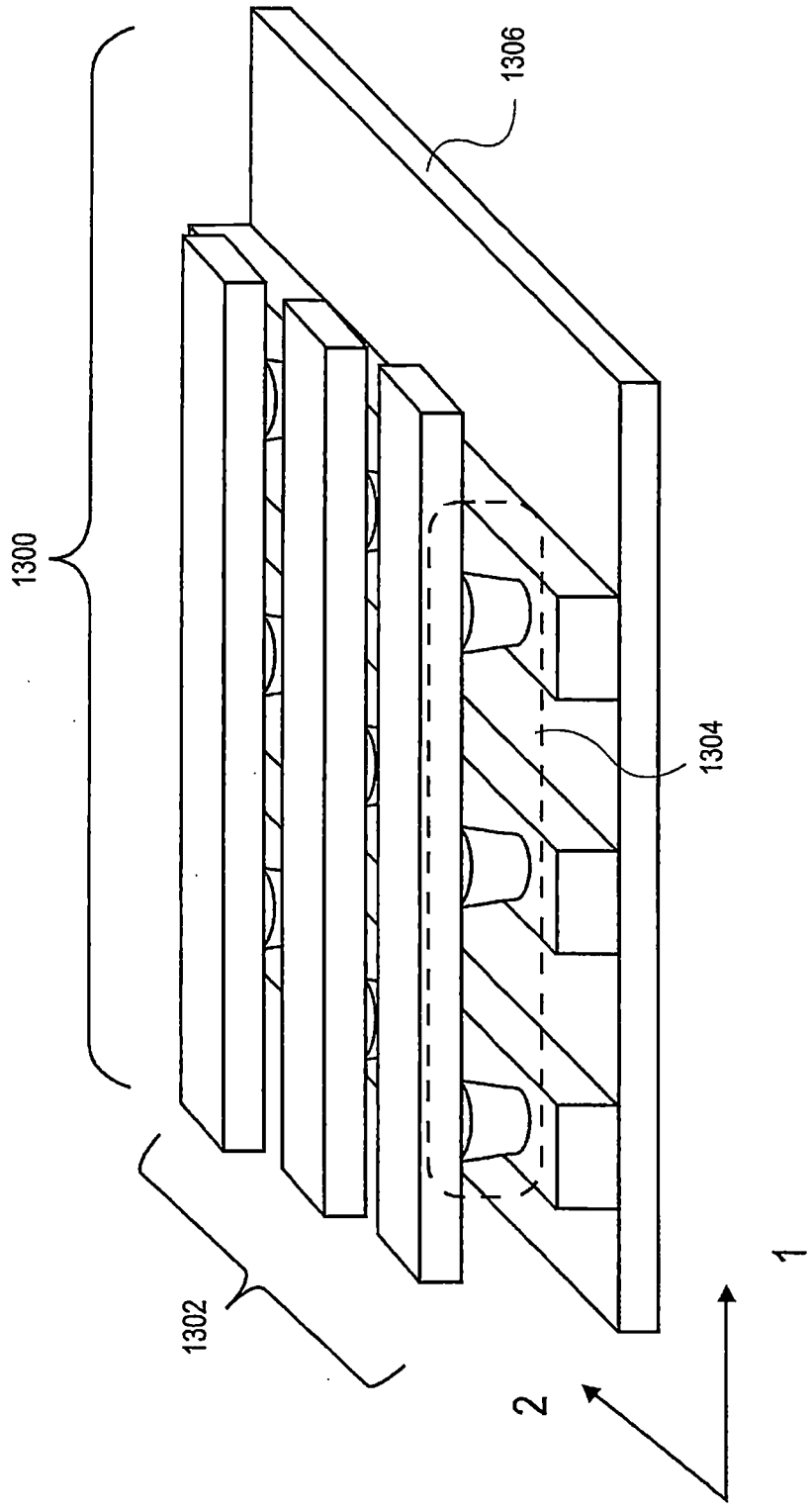


圖13

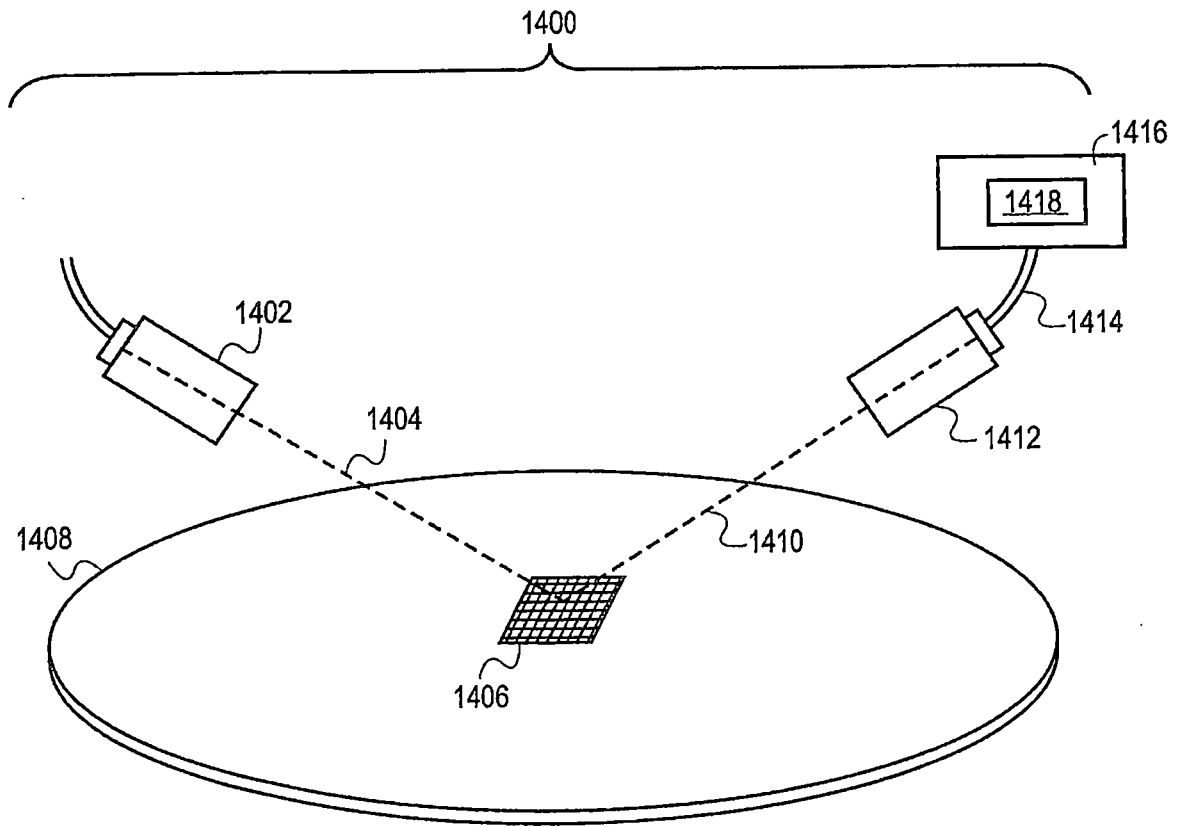


圖14

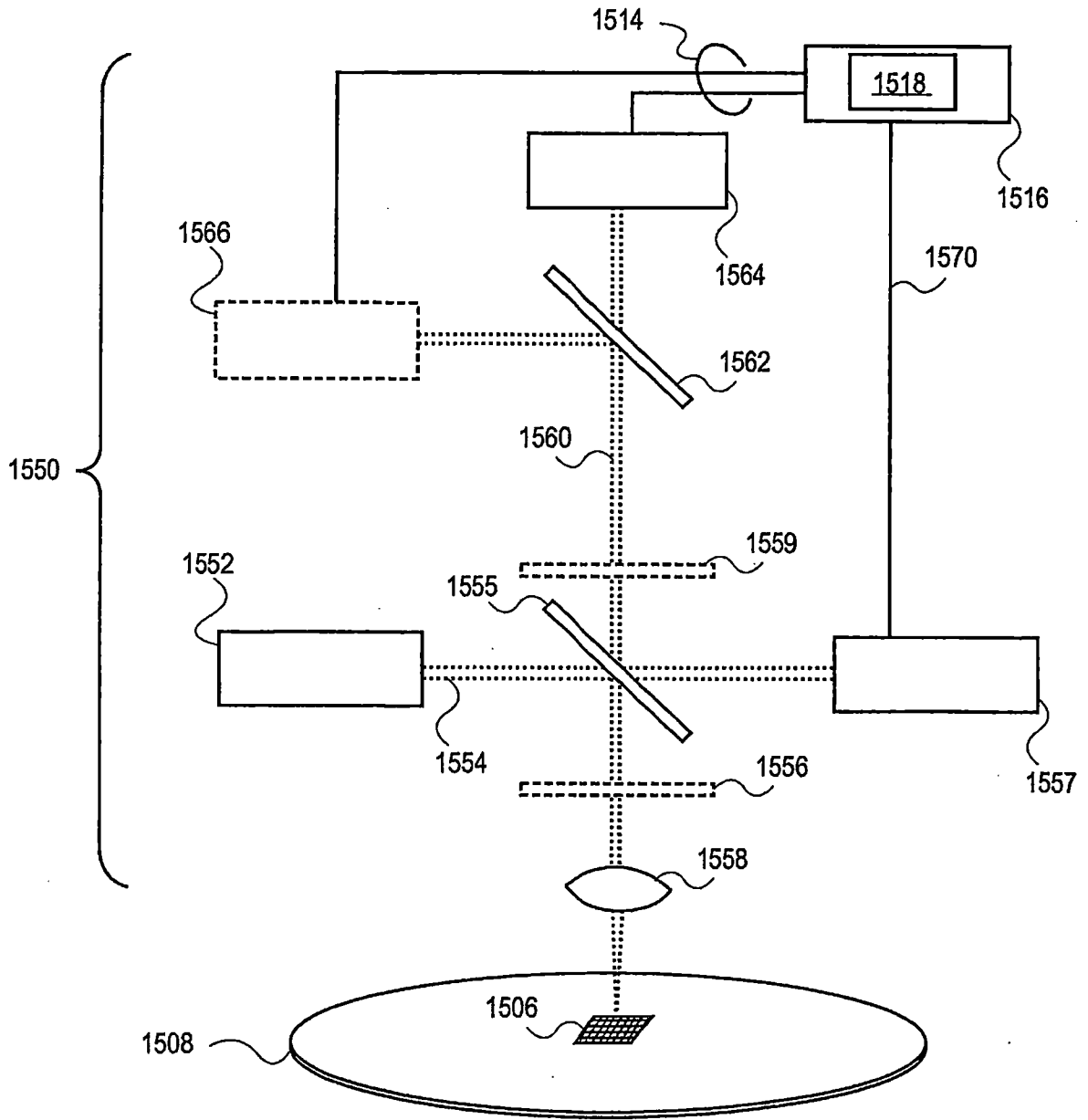


圖15

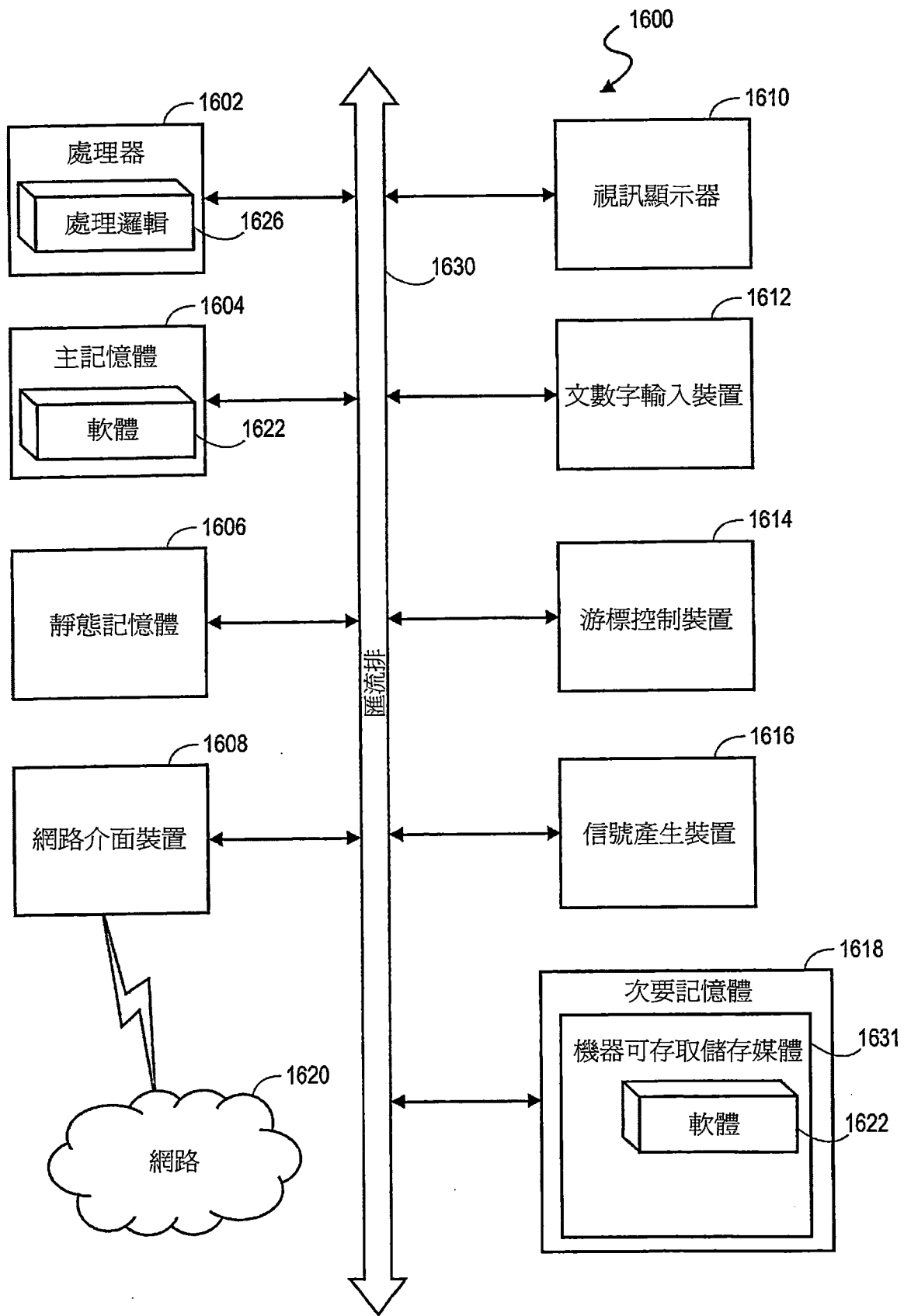


圖16

流程圖 1700

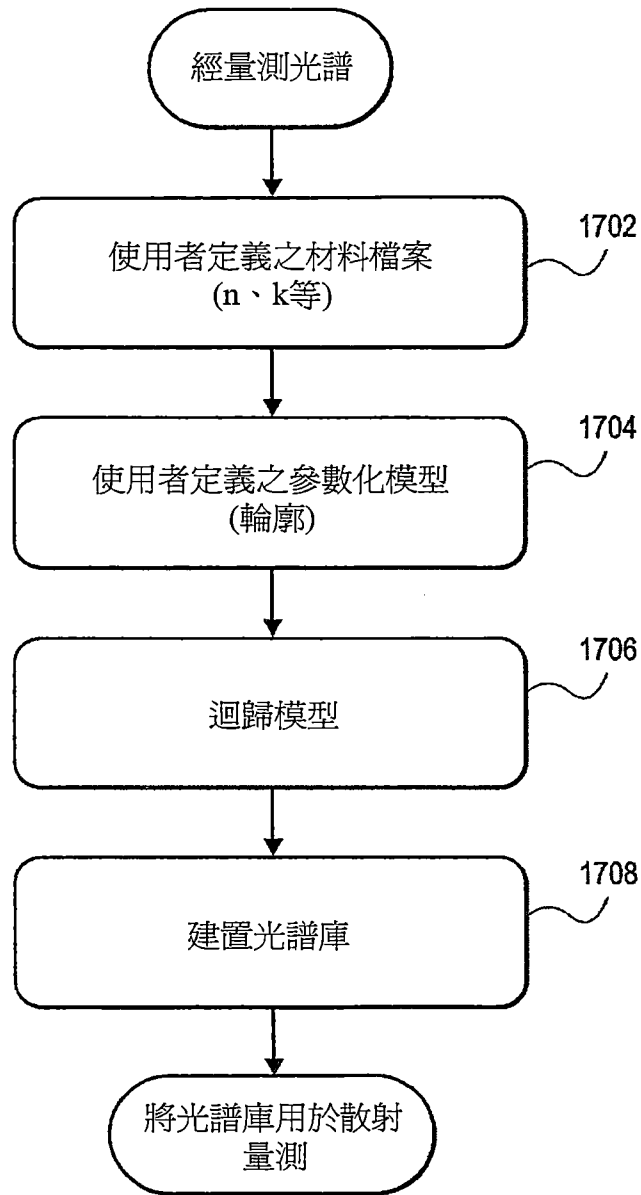


圖17



流程圖 1800

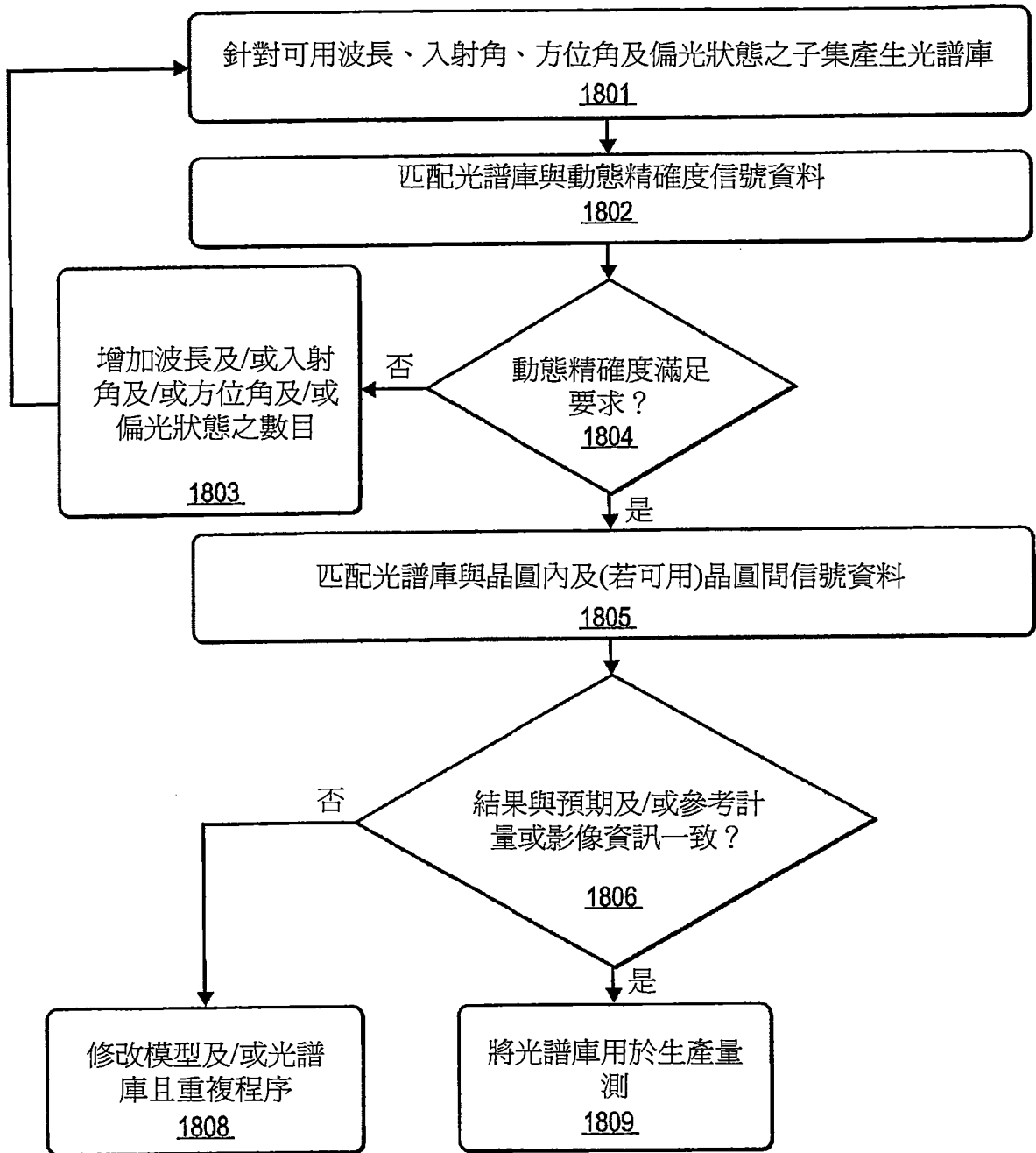


圖18

流程圖 1900

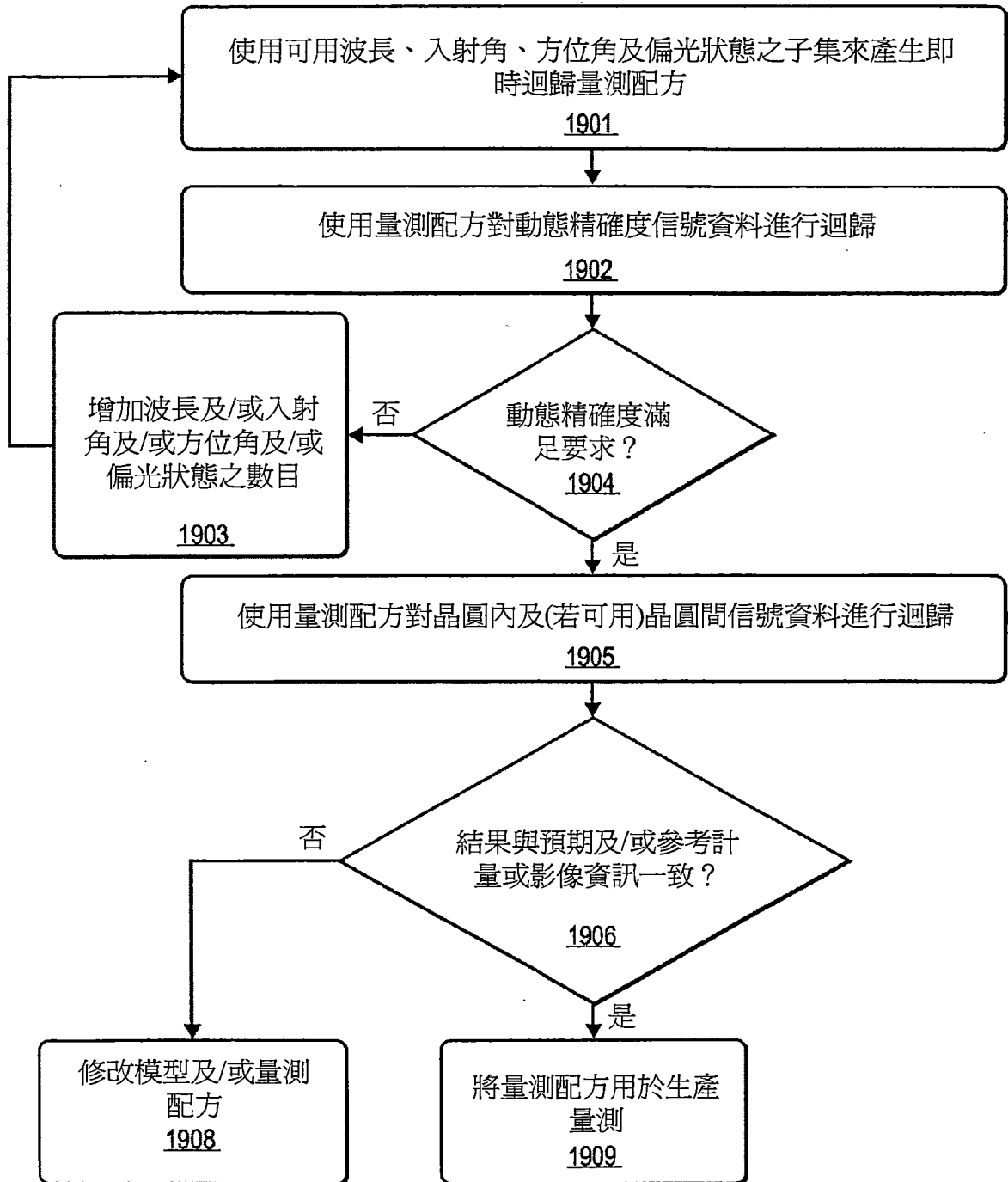


圖19