

高深寬比微結構之創新光學散射 關鍵尺寸量測技術

Novel Scatterometry Technique for Critical Dimension Metrology of High-aspect-ratio Microstructures

簡維信、楊福生、傅子英、陳亮嘉

Wei-Hsin Chein, Fu-Sheng Yang, Zi-Ying Fu, Liang-Chia Chen

本研究發展了一創新之光學關鍵尺寸量測 (OCD) 系統與技術，用以克服目前於先進封裝製程中，具高深寬比之微結構難以使用非破壞性檢測的困境。結合光譜反射術與光學散射術，並利用雷射寬頻光源的高空間同調性所設計之創新顯微光學架構，此技術可大幅提升量測之光效率，並在量測範圍上可實現單一結構的量測，避免了現存之光學量測技術限於量測多個結構之平均資訊的缺點，此為本技術的關鍵突破和特點。通過反向優化的最佳化工程，實驗驗證結果表明，本系統可同時量測線寬與線距為 $1\ \mu\text{m}$ 、深寬比為 3:1 之 RDL 結構的多項關鍵尺寸資訊。

In this study, we proposed a novel optical critical dimension (OCD) metrology system for non-destructive inspection of high-aspect-ratio (HAR) microstructures used in advanced packaging processes. The proposed system involves the integration of spectral reflectometry and scatterometry techniques, and incorporates the high spatial coherence of a broadband laser source for optimal beam shaping. The proposed technique significantly enhances the measurement light efficiency and enables single-structure measurements, addressing the limitations of existing optical metrology techniques that rely on average information from multiple structures. With the proposed model-based measurement scheme for solving an inverse problem, experimental tests demonstrate that multiple CDs of a RDL structure with a fine nominal linewidth and spacing of $1\ \mu\text{m}$ and an aspect ratio of 3:1 can be accurately measured.

一、前言

近年來，先進封裝技術為延續摩爾定律的方面上發揮了關鍵的作用。在此技術中，具高深寬比的微結構如矽穿孔 (through silicon vias, TSV) 與晶圓線路重佈 (redistribution layer, RDL) 被用於實現晶片間之垂直整合以及降低封裝體積⁽¹⁾。然而，目前於先進封裝製程中對於量測高深寬比結構之關鍵尺寸 (critical dimension, CD) 的主流方式必須採用掃描式電子顯微鏡 (scanning electron microscope, SEM) 進行破壞性的線下量測。

相較於 SEM，光學量測技術具有快速、非破壞性等優點，故較適合應用於線上量測。目前已有幾種光學量測技術被用於量測高深寬比結構之關鍵尺寸。其中，有研究使用白光干涉術 (white light interferometry, WLI) 量測矽穿孔之三維形貌⁽²⁻⁴⁾。然而，由於矽穿孔狹窄的結構幾何特性，會導致系統之光能使用效率大幅降低而降低量測訊號的強度與量測速度。另一方面，光譜反射術 (spectral reflectometry, SR) 亦可被用於量測高深寬比結構之尺寸資訊⁽⁵⁻⁸⁾。

然而，此技術限於量測結構的深度資訊，且侷限於量測大範圍照明區域內之平均尺寸資訊。此外，該技術在量測深度較深的結構時容易面臨量測訊號強度低落的問題。與光譜反射術相比，光學散射術 (scatterometry) 基於電磁理論模擬與實驗量測訊號的擬合可同時量測結構的多項尺寸資訊⁽⁹⁾。然而，同光譜反射術，此技術限於量測照明區域內多個結構的平均尺寸資訊。

為了克服上述量測技術的困境，本研究提出一結合光譜反射術與光學散射術之光學顯微量測系統與技術。利用雷射寬頻光源的高空間同調性，此技術可大幅縮小光斑尺寸，以提升量測之空間解析度並顯著提升光使用效率。另外，此技術基於電磁模擬所建立之光學系統模型，進行實驗與模擬訊號的擬合，可同時量測多項結構之關鍵尺寸。本研究成果預期對於量測緊密排列之高深寬比個體結構具有一定的應用價值。

二、量測方法

1. 高深寬比結構之量測限制

由於高深寬比結構的幾何特性，光學系統的照明數值孔径 (numerical aperture, NA) 在量測上起到了相當重要的作用。如圖 1 所示，由於結構內部的遮蔽效應，光線只能以有限的入射角度抵達結構的底部。此幾何限制可表示為：

$$\tan \theta \leq \frac{w/2}{d} \quad (1)$$

其中 θ 為照明入射角度、 w 為結構開口寬度且 d 為結構深度。實際可進入結構底部之 NA 可表示為 $NA_{lim} = \sin\theta$ 。因此，隨著結構深寬比的提升，應降低系統之照明 NA 以提高量測之光能使用效率。

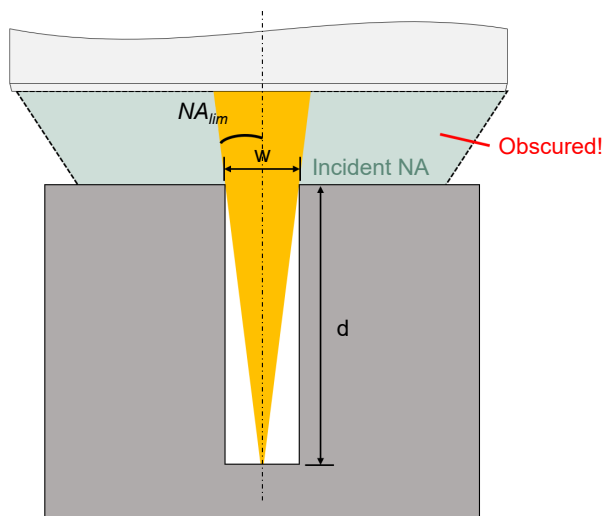


圖 1. 高深寬比結構對於照明 NA 的限制。

2. 量測原理

本研究所提出之系統的量測原理如圖 2 所示。基於光譜反射術的架構，此系統採用了寬頻的光源，並以接近準直的方式對待測結構進行照明。經照明後，從結構頂部與底部反射的光會在遠場產生干涉，並經由一光譜儀接收。此光譜干涉訊號包含了結構的尺寸資訊，並會被用於量測結構的重要尺寸參數。本研究所發展之基於模型的量測方式會於 2.3 節進行詳述。

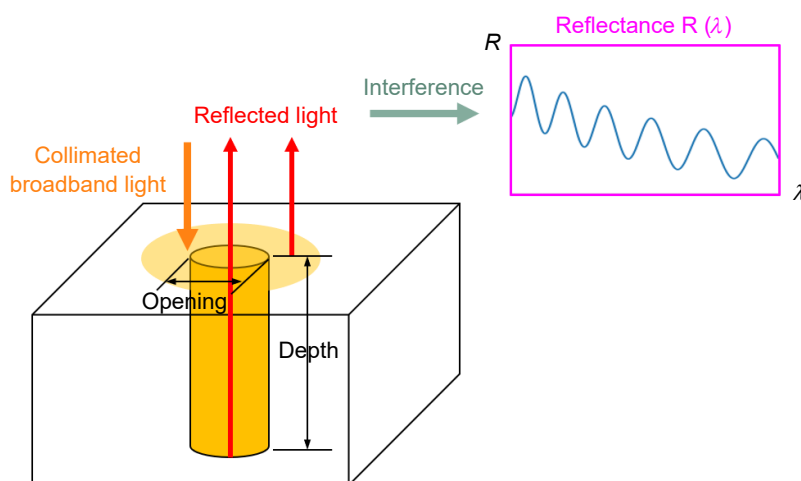


圖 2. 系統量測原理。

3. 基於模型的量測方式

本研究所發展之基於模型的量測方式乃以經由有限時域差分法 (finite difference time domain, FDTD)⁽¹⁰⁾ 所建立之光學系統的電磁模型為基礎，並透過粒子群最佳化演算法 (particle swarm optimization, PSO) 擬合實驗與模擬的訊號以逆向重建出結構的重要尺寸參數。此量測方式可由一非線性之最小平方問題的形式表示⁽¹¹⁾：

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

其中， N 為量測訊號之取樣點數。 $\mathbf{y}_i^{\text{exp}}$ 代表實驗所量測之訊號，以一陣列表示。 $\mathbf{y}^{\text{sim}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{a})$ 為模擬所量測之訊號，當中 \mathbf{x}_i 為量測條件 (如波長、偏極態等)， \mathbf{a} 則包含所模擬的結構尺寸參數 (如 TCD, BCD, Depth 等)。 σ_i 為每個量測點之不確定度，其可能由系統中的雜訊所產生。

在 PSO 中，首先會給定每個模擬之結構尺寸參數一個指定的浮動範圍 ($\pm \delta a$)，並進行迭代直到獲得 χ^2 之最小值。當 χ^2 為最小值時，可經由實驗與模擬的最佳擬合結果獲得結構尺寸參數之最佳解 \mathbf{a}_{min} 。此基於模型的量測方式的流程圖如圖 3 所示。

4. 光學系統模型的建置

在前述基於模型之量測方法中，必須先建立量測光學系統與待測結構之模型以準確模擬實際會產生的量測訊號。如圖 4 所示，在 FDTD 建模中，待測結構之幾何形貌由給定之尺寸參數所表示。此外，模型中需要提供結構組成材料之光學常數，並在模型的邊界加上合適的邊界條件 (boundary conditions, BC)。

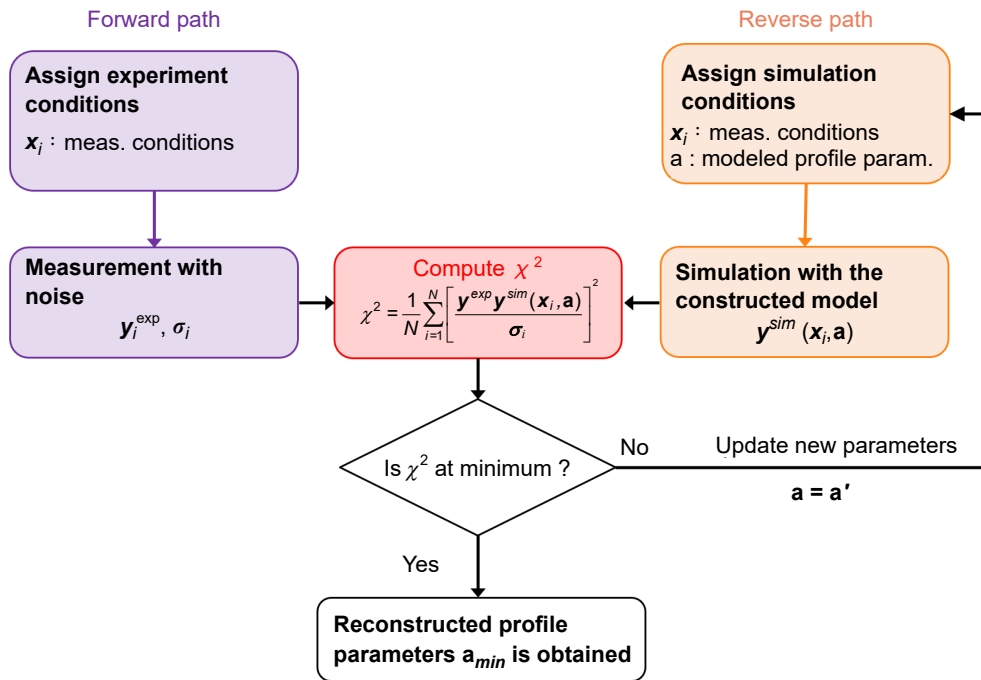


圖 3. 基於模型之量測流程圖。

由圖 4 所示之模型可模擬光與結構作用所產生之近場散射場，為了模擬真實光學系統所量測之訊號，本研究建立了一虛擬光學系統模型以模擬於遠場所接收之光學訊號⁽¹²⁾，如圖 5 所示。此虛擬光學系統模型中包含了四大部分：系統照明、光與結構作用產生散射場、散射場接收與成像。

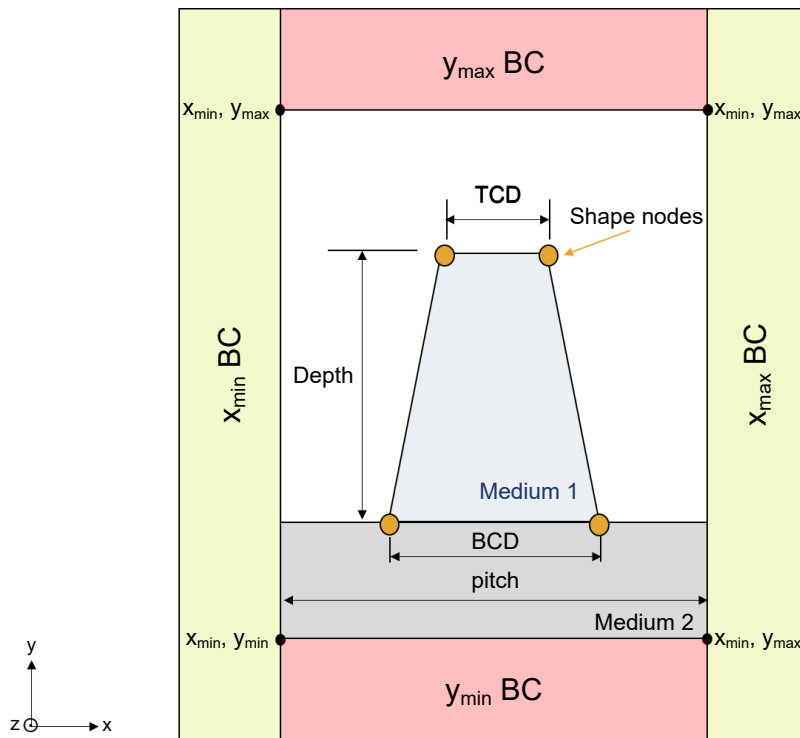


圖 4. 待測結構之模型示意圖。

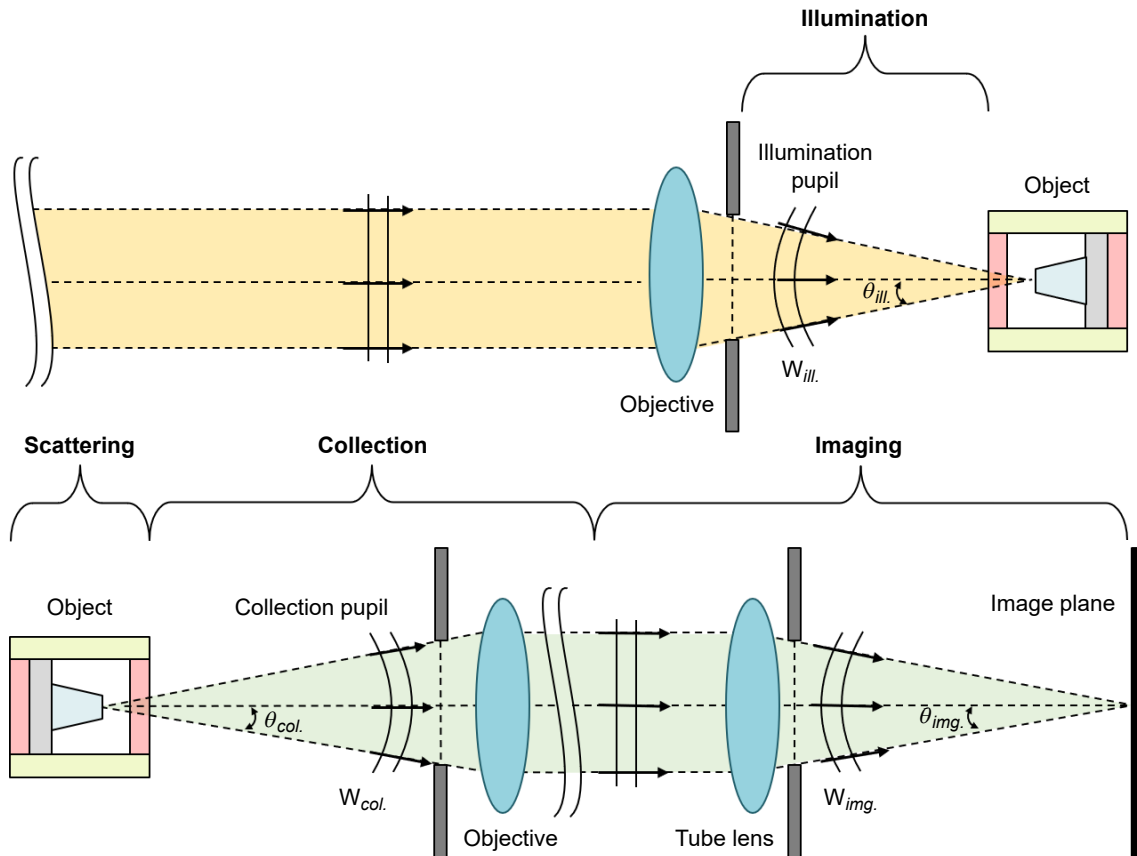


圖 5. 建立之虛擬光學系統模型示意圖。

三、光學系統設計與架構

根據光展量 (etendue) 守恆的概念，隨著結構的深寬比持續提升，將造成下游光學系統之光展量受到結構開口尺寸的限制，進而造成大量光能的損耗，如圖 6 所示。因此，要提升量測高深寬比結構之光效率，勢必要降低光源之光展量，即降低光源的尺寸與發散角。有別於非同調光源 (如氙燈)，雷射具有高空間同調性，並具有極小的發散角，故可將光聚焦至較小的光斑尺寸，同時維持高的光能使效率。基於此考量，本研究在系統中使用寬頻雷射作為光源。

本研究所提出的光學系統架構如圖 7 所示。在照明端的部分，寬頻雷射透過分光鏡導入物鏡，並於物鏡前焦處聚焦成腰部 (waist)，以藉由高斯光束在腰部所形成之平面光場對待測物表面進行照明。此外，透過在照明光路中置入一光圈來控制雷射光束進入物鏡之直徑大小，可調製出所需的照明 NA 與光斑尺寸。圖 8 為使用光學設計軟體 ZEMAX 之模擬結果，其中物鏡的 NA 設為 0.9，焦距設為 1.8 mm。表 1 為不同雷射光束直徑下所對應之有效照明 NA 與光斑尺寸。

在接收端的部分，來自樣品的回光會經物鏡所接收，並由分光鏡分為兩道。其中一道會經由鏡筒透鏡 (tube lens) 聚焦至影像感測器上，以獲得結構之二維影像，用以判斷目前的量測位置。另一道則會經鏡筒透鏡聚焦至光譜儀之光纖內，以量測結構所產生之干涉光譜訊號。本系統之實驗架設如圖 9 所示。

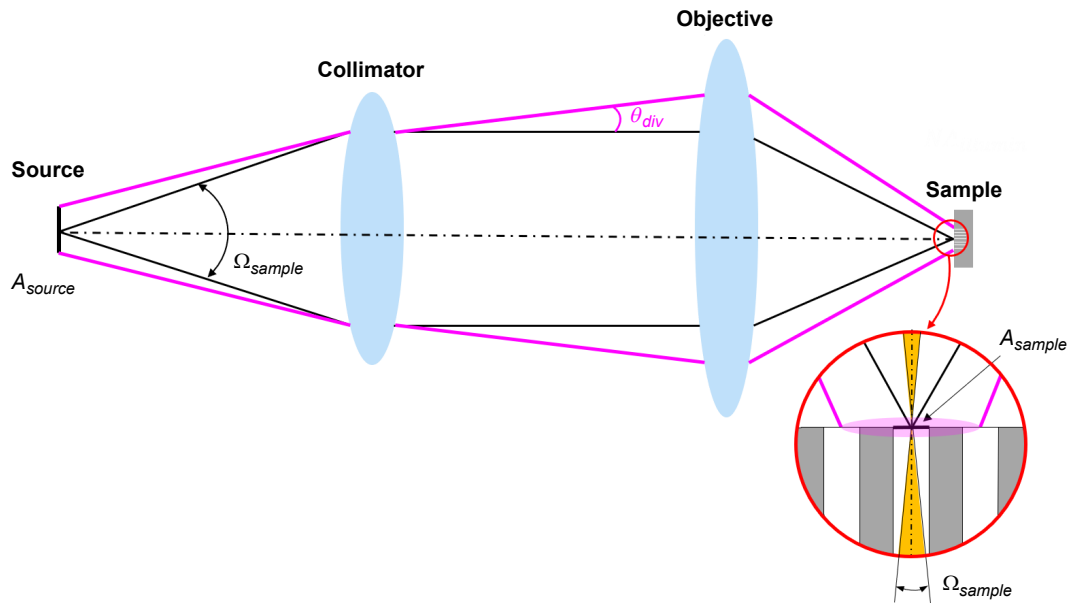


圖 6. 光展量守恆之概念。 A_{source} 與 A_{sample} 分別為光源之發光面積與結構之收光面積。 Ω_{source} 與 Ω_{sample} 分別為光源之發光立體角與結構之收光立體角。當 $A_{source}\Omega_{source}$ 遠大於 $A_{sample}\Omega_{sample}$ 時，將造成光源光能的大量損耗。為光源的發散角。

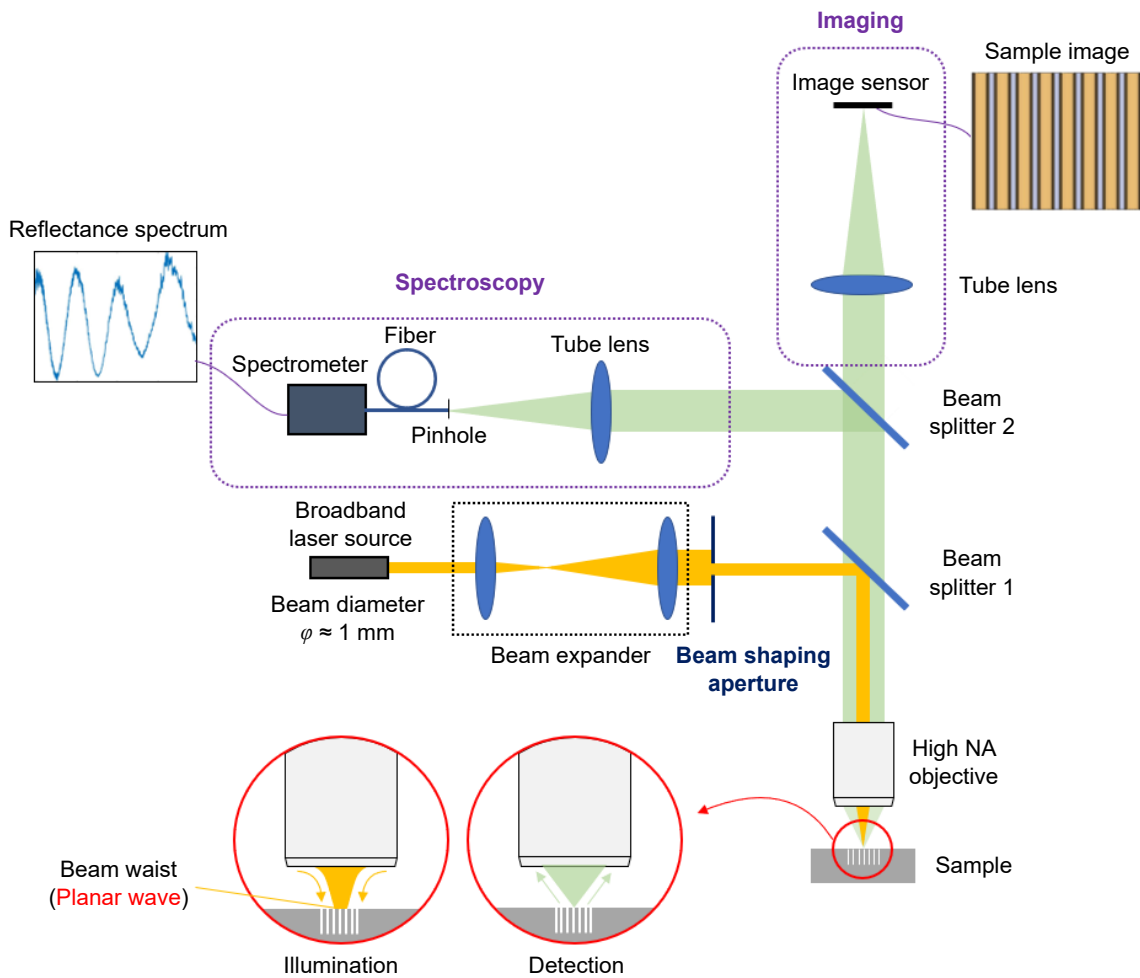


圖 7. 本研究所提出之光學系統架構圖。

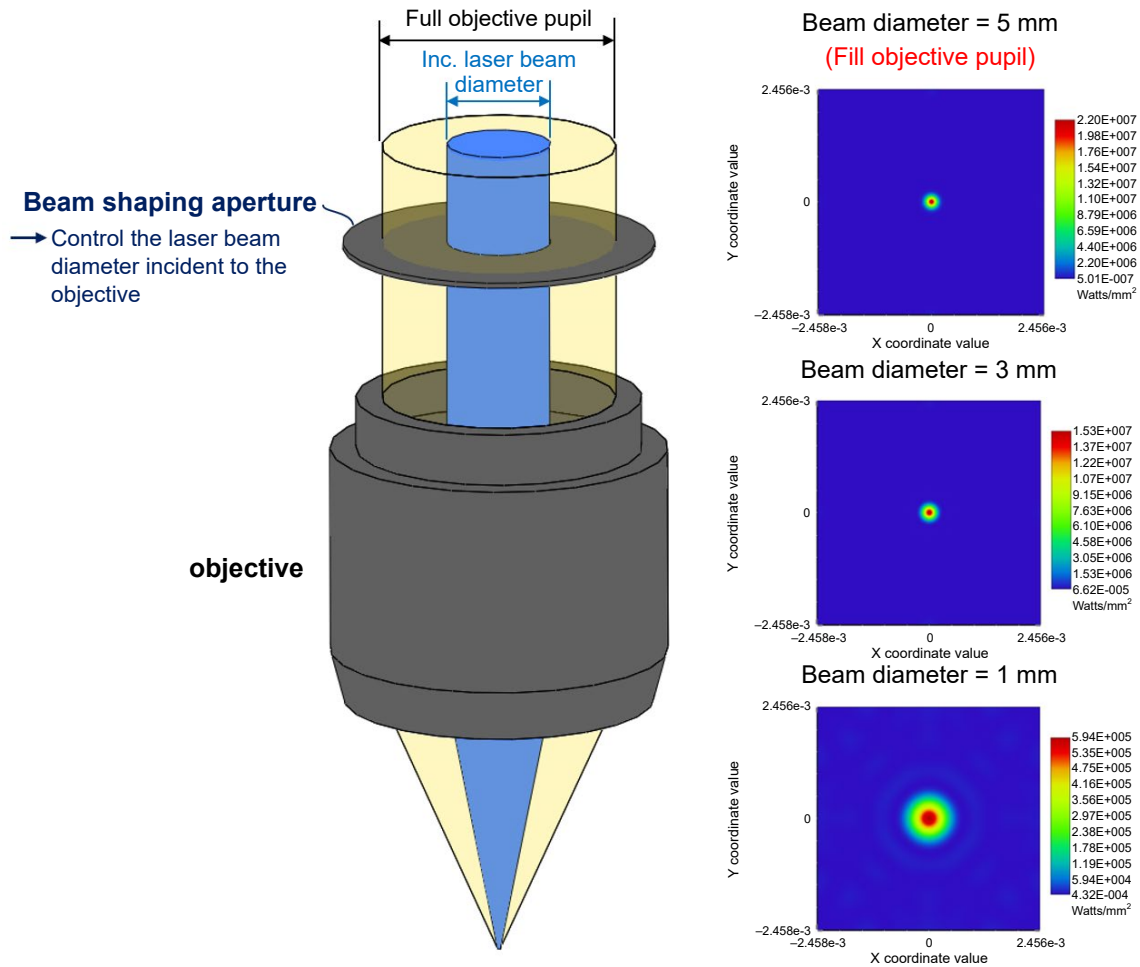


圖 8. 使用 ZEMAX 模擬照明 NA 與光斑尺寸的調製。

表 1. 不同雷射光束直徑所對應之照明 NA 與光斑尺寸。

雷射光束直徑	有效照明 NA	照明光斑尺寸
7.5 mm	0.90	0.502 μm
4.5 mm	0.78	0.533 μm
3 mm	0.64	1.379 μm
1.5 mm	0.38	4.278 μm
1 mm	0.27	5.968 μm

* 模擬所使用之波長為 $\lambda_{sim} = 500 \text{ nm}$

四、實驗結果分析

1. 多結構平均關鍵尺寸量測結果

在此節中，我們展示傳統光學散射術於量測多結構之平均關鍵尺寸的結果。量測樣品為一 RDL 結構，其公稱線寬與線距為 $1 \mu\text{m}$ 且深度為 $3 \mu\text{m}$ (深寬比為 3:1)。在此量測案例中，我們於系統內使用 5 倍物鏡並將雷射光束的直徑保持至 1 mm，以產生一較大的光斑尺寸 (直徑約 $32.3 \mu\text{m}$)，與一接近準直的照明 (有效照明 NA 為 0.01)。如圖 10 所示，由於在此條件下照明光斑約涵蓋 16 個結構，故我們在所建立的模型之邊界處施加了週期性邊界

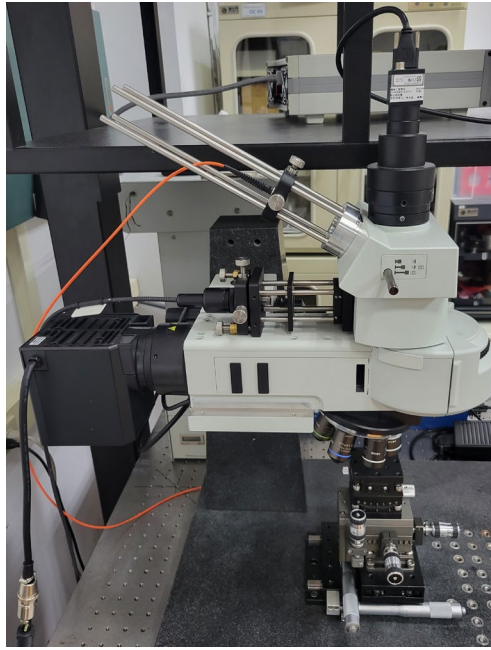


圖 9. 本系統之實驗架設。

(periodic boundary condition)。此外，根據實際量測條件，在模型中我們設置照明為一非偏振、垂直入射之平面波，其波長範圍為 $\lambda = 480 - 700 \text{ nm}$ 。而模型中之接收 NA 則依所選之物鏡設為 0.15。

如 2.3 節所述，結構之各項尺寸參數為藉由模擬與實驗訊號之最佳擬合結果而獲得。表 2 為給定各項尺寸參數之浮動空間。表 3 為此量測案例之最終量測結果，我們以原子力顯微鏡 (atomic force microscopy, AFM) 之量測值作為參考並進行偏差 (bias) 分析。實驗與模擬光譜之比較如圖 11 所示，兩者之決定係數 (R^2) 為 0.94。於表 3 中可見，系統在 5 次量測下，平均偏差為 AFM 量測值之 3.92%，且標準差 (1σ) 低於 $0.028 \mu\text{m}$ 。

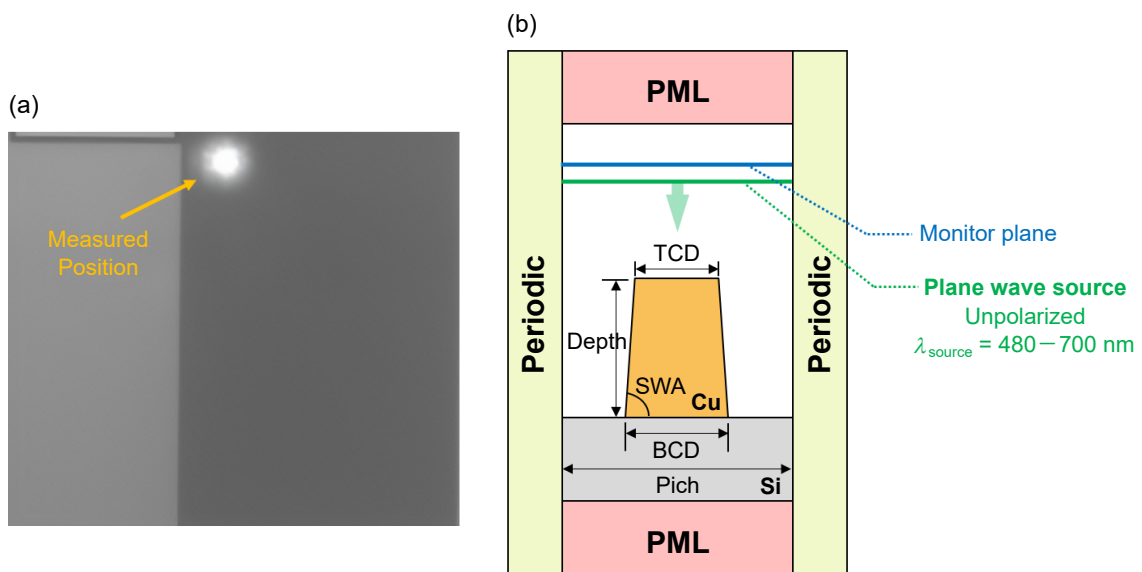


圖 10. (a) 照明光斑影像 (b) 多結構平均量測之模型示意圖。

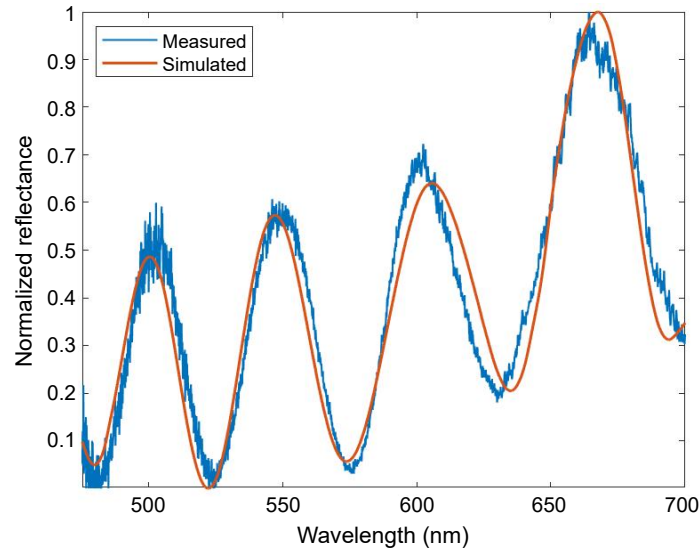


圖 11. 實驗與模擬光譜之比較。兩者之值為 0.94。

表 2. 各項結構尺寸之參數空間。

尺寸參數	參數空間
TCD (a_1)	$(1.2 \pm 0.15) \mu\text{m}$
BCD (a_2)	$(1.2 \pm 0.15) \mu\text{m}$
Depth (a_3)	$(2.9 \pm 0.15) \mu\text{m}$
Pitch (a_4)	$(2 \pm 0.15) \mu\text{m}$
SWA	$\tan^{-1}(2a_3/(a_2 - a_1))$ degrees
Grating material	Copper (Cu)
Substrate material	Silicon (Si)

表 3. 多結構平均量測結果。

尺寸參數	平均值*	標準差*	AFM	偏差
TCD (a_1)	$1.136 \mu\text{m}$	$0.027 \mu\text{m}$	$1.220 \mu\text{m}$	$-0.084 \mu\text{m}$; -6.89%
BCD (a_2)	$1.190 \mu\text{m}$	$0.028 \mu\text{m}$	$1.290 \mu\text{m}$	$-0.1 \mu\text{m}$; -7.75%
Depth (a_3)	$2.951 \mu\text{m}$	$0.005 \mu\text{m}$	$2.890 \mu\text{m}$	$0.061 \mu\text{m}$; 2.11%
Pitch (a_4)	$1.917 \mu\text{m}$	$0.015 \mu\text{m}$	$1.970 \mu\text{m}$	$-0.053 \mu\text{m}$; -2.69%
SWA	89.471°	0.416°	89.306°	0.165° ; 0.18%

* 5 次量測結果

2. 單一結構關鍵尺寸量測結果

在此量測案例中，利用同 4.1 節所述之量測樣品，我們針對單一結構進行關鍵尺寸的量測。由於此量測需要較高的空間解析，故在系統內我們使用 150 倍物鏡並將雷射光束的直徑保持至 1 mm，以產生一細小的光斑尺寸 (直徑約 $1.2 \mu\text{m}$)，以及有效照明 NA 為 0.39。如圖 12(a) 所示，在此條件下，可將照明光斑精準的定位於欲量測之結構位置上，此為本技術之

一大優勢。圖 12(b) 為對此量測案例所建立之模型。根據實際的量測條件，在模型中我們在邊界處施加了吸收邊界 (perfectly matched layer, PML)，並設置照明為一非偏振、波長範圍為 $\lambda = 480 - 700 \text{ nm}$ 之聚焦高斯光束，其束腰被置於結構頂部。模型中之接收 NA 則依據所選用的物鏡設為 0.9。

同樣利用表 2 之各尺寸的參數空間進行模擬與實驗訊號的最佳化擬合，本量測案例之最終量測結果如表 4 所示。圖 13 為實驗與模擬光譜之比較，兩者之決定係數 (R^2) 為 0.98。表 4 之量測結果顯示，系統在 5 次量測下，平均偏差為 AFM 量測值之 1.41%，且標準差 (1σ) 低於 $0.013 \mu\text{m}$ 。

由此量測案例可見，相較於 4.1 節中傳統多結構平均量測之結果，本研究對於量測單一結構關鍵尺寸的突破具有進一步提升量測準確度的潛力。

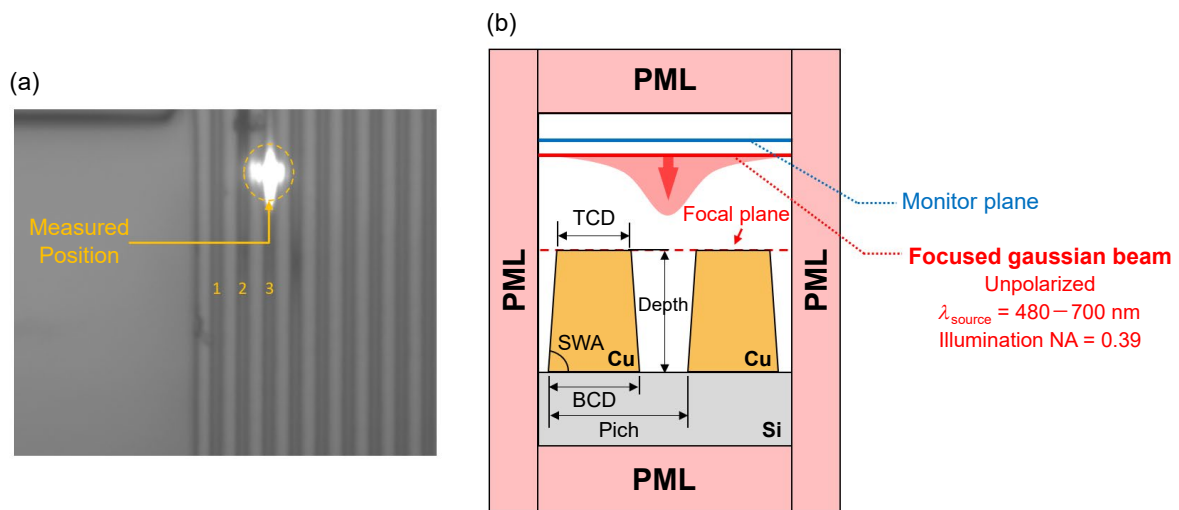


圖 12. (a) 照明光斑影像 (b) 單一結構量測之模型示意圖。

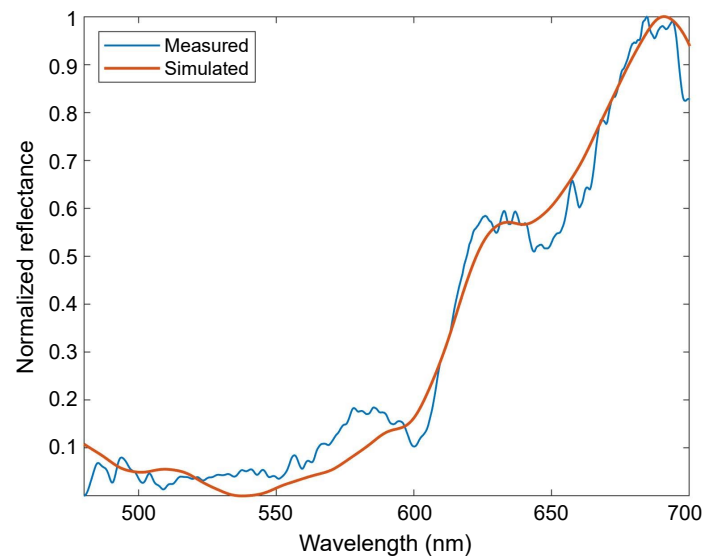


圖 13. 實驗與模擬光譜之比較。兩者之值為 0.98。

表 4. 單一結構量測結果。

尺寸參數	平均值*	標準差*	AFM	偏差
TCD (a_1)	1.214 μm	0.001 μm	1.220 μm	-0.006 μm ; -0.49%
BCD (a_2)	1.295 μm	0.013 μm	1.290 μm	0.005 μm ; 0.39%
Depth (a_3)	2.872 μm	0.012 μm	2.890 μm	-0.018 μm ; -0.62%
Pitch (a_4)	2.077 μm	0.009 μm	1.970 μm	0.107 μm ; 5.43%
SWA	89.197°	0.122°	89.306°	-0.109° ; -0.12%

* 5 次量測結果

五、結論

本研究所提出之光學量測系統基於寬頻雷射的高空間同調性，可將照明光斑尺寸降至 1.2 μm ，並同時維持高的光能使用效率。利用此系統之高空間解析，並搭配所提出之基於模型的量測方式，可實現同時量測單一結構之多項關鍵尺寸。經由量測範例證實，與傳統光學散射術之平均量測相比，本技術具有提供對欲量測結構更具代表性且更準確的量測結果的潛力。我們認為後續尚需要對局部因素 (如粗糙度、光學像差與光斑定位精度等) 如何影響量測結果進行詳細的分析，以進一步提升本技術之準確度與穩定度，用以因應未來先進封裝領域之量測需求。

參考文獻

1. Lau JH. Semiconductor Advanced Packaging: Springer; 2021.
2. Changhong Hyun, Seongryong Kim, and Heuijae Pahk, *Journal of the Optical Society of Korea*, **18** (5), 531 (2014).
3. Taeyong Jo, Seongryong Kim, and Heuijae Pahk, *Journal of the Optical Society of Korea*, **17** (4), 317 (2013).
4. Timoney P, Fisher D, Ko Y-U, Vaid A, Thangaraju S, Smith D, et al., "New interferometric measurement technique for small diameter TSV", *25th Annual SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference*, May 19-21(ASMC 2014).
5. Heulbi Ahn, Jaeseok Bae, Jungjae Park and Jonghan Jin, *Scientific reports*, **8** (1), 1 (2018).
6. Fursenko O, Bauer J, Marschmeyer S, *Microelectronic Engineering*, **139**, 70 (2015).
7. Yi-Sha Ku, *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*, **13** (1), 011209 (2014).
8. Yi-Sha Ku and Fu Shiang Yang, *Optics Express*, **18** (7), 7269 (2010).
9. Christopher Raymond, "Overview of scatterometry applications in high volume silicon manufacturing", AIP Conference Proceedings, American Institute of Physics, (2005).
10. Ansys. Lumerical FDTD solutions, please refer to the website: <https://www.lumerical.com/>.
11. Press WH, Teukolsky SA, Vetterling WT, Flannery BP. Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing: Cambridge university press; (2007).
12. Çapoğlu İR, Rogers JD, Taflove A, Backman V., *Progress in Optics*, **57**, 1 (2012).

作者簡介

簡維信先生為國立臺灣大學機械工程學系碩士，現於台大機械系擔任研究助理。

Wei-Hsin Chein received his M.S. in Mechanical Engineering from National Taiwan University. He is currently a Research Assistant in the Department of Mechanical Engineering at National Taiwan University.

楊福生先生現為國立臺灣大學機械工程學系博士生。

Fu-Sheng Yang is currently a Ph.D. student in the Department of Mechanical Engineering at National Taiwan University.

傅子英先生現為國立臺灣大學機械工程學系碩士生。

Zi-Ying Fu is currently a M.S. student in the Department of Mechanical Engineering at National Taiwan University.

陳亮嘉先生為南澳大利亞大學製造與機械系博士，現為國立臺灣大學機械工程學系特聘教授。

Liang-Chia Chen received his Ph.D. in Advanced Manufacturing and Mechanical Engineering from the University of South Australia. He is currently a Distinguished Professor in the Department of Mechanical Engineering at National Taiwan University.