

## Vorrichtung und Verfahren zur Vermessung eines Substrats

### B e s c h r e i b u n g

Die Erfindung betrifft eine Vorrichtung und ein Verfahren zur Vermessung eines Substrats.

Durch eine starke Reduzierung der kritischen Abmessungen (critical dimension CD) von Strukturen, die mittels Photolithographie oder Nanoimprintlithographie auf Substraten hergestellt werden, steigen die Herausforderungen für die Mess- und Inspektionstechnik im Herstellungsprozess.

Konventionelle Abbildungsverfahren wie die optische Mikroskopie sind auf Grund der Abbeschen Auflösungsgrenze – das ist die beugungslimitierte Auflösung – auf Strukturdimensionen oberhalb der halben optischen Wellenlänge limitiert, meist weit oberhalb von 100 nm. Eine dreidimensionale Charakterisierung von Strukturen mit kritischen Abmessungen ist mit der optischen Mikroskopie nur bedingt möglich. Dabei werden geometrische Parameter wie Strukturbreite, Strukturhöhe, Kantenwinkel und bei immer kleiner werdenden Strukturen auch die Rauheit der dreidimensionalen Strukturen immer wichtiger. Alternative Verfahren zur Messung von Strukturen wie Transmissionselektronenmikroskopie (TEM), Rasterelektronenmikroskopie (SEM) oder Rasterkraftmikroskopie (AFM) sind in der Halbleiterindustrie zu (zeit-)aufwendig und daher in der Prozessüberwachung sowie in der Serienfertigung nicht geeignet. Analog ist auch die Profilometrie an großen Flächen für die Bestimmung der Topographie nur bedingt geeignet.

Im Stand der Technik werden konventionelle Abbildungsverfahren wie die optische Mikroskopie mit nicht-abbildenden optischen scatterometrischen Messverfahren kombiniert.

Durch die starke Reduzierung der kritischen Abmessungen von Strukturen, die beispielsweise mittels Photolithographie oder Nanoimprintlithographie auf Substraten hergestellt werden, entfallen aber die konventionellen Abbildungsverfahren.

Die klassische Ellipsometrie wird im Stand der Technik eingesetzt um Schichtdicken und optische Materialeigenschaften wie Brechungsindex und Reflexionsgrad zu messen. Die Messung von Beschichtungen muss erfolgen, ohne dabei die Schichten zu zerstören um zu verhindern, dass das Substrat bzw. der Wafer beschädigt wird. Vor allem die spektroskopische Ellipsometrie sowie die Reflektometrie haben sich als metrologische Systeme zur Prozesskontrolle und zur Prozessoptimierung in der Halbleiterindustrie etabliert. In der Regel werden relative Änderungen oder Abweichungen detektiert. Programme, die zur Simulation und Auswertung aus der Vermessung einfacher Systeme benötigt werden, sind im Stand der Technik bekannt.

Eine ausführliche Zusammenfassung zum Thema spektroskopische Ellipsometrie und Polarimetrie für die Analyse von Materialien und Systeme im nm-Bereich, inklusive dünne Filme, ist beispielsweise in J. Nanopart. Res. (2009) 11: 1521-1554 zu finden und wird nicht näher erläutert.

In US6,912,056B2 wird beispielsweise eine Vorrichtung und ein Verfahren zum Messen einer Vielfachschicht auf einem Substrat angegeben. Die Vorrichtung enthält eine Messeinheit, um reflektiertes Licht zu messen, wobei das reflektierte Licht von dem Substrat reflektiert wurde, auf welchem die Vielfachschicht ausgebildet ist. Mit einer Eingabeeinheit werden eine Vielzahl von Rezeptdaten eingegeben, von denen jedes der Vielzahl der Rezeptdaten einer Vielzahl von hypothetischen Vielfachschichten entspricht, wobei eine der hypothetischen Vielfachschichten zu Beginn als die Vielfachschicht angenommen wird, die tatsächlich auf dem Substrat ausgebildet ist. Eine Steuereinheit berechnet eine Vielzahl an theoretischen Spektren, von denen jedes wenigstens eine Dicke von jeder Komponentenschicht der hypothetischen Vielfachschicht angibt, die als die Vielfachschicht angenommen wird, welche tatsächlich auf dem Substrat ausgebildet ist, unter Verwendung von einem Satz der Vielzahl der Rezeptdaten, wobei das gemessene Spektrum mit der Vielzahl der theoretischen Spektren verglichen wird, wodurch eine zeitweilige Dicke der Vielfachschicht bestimmt wird. Die

berechnete zeitweilige Dicke muss innerhalb eines zulässigen Bereiches liegen, ansonsten wird die Auswahl der zeitweiligen Dicke nach Änderung der Rezeptdaten wiederholt. Die physikalischen Informationen enthalten einen Brechungsindex und einen Auslöschungskoeffizienten von jeder Komponentenschicht.

Auch die US7,196,793B2 verwendet die mit spektroskopische Ellipsometrie gemessene Daten wie z.B. die Polarisationsänderung der Strahlung ( $\psi(\lambda_i)$  und  $\Delta(\lambda_i)$ ) und vergleicht diese mit simulierten Spektren um dünne Zwei-Schichtsysteme auf ein Substrat zu charakterisieren. Die simulierten Spektren werden im Modell so lange angepasst (engl: fitting) bis die geringsten Unterschiede zwischen simulierte Werte ( $\psi_M(\lambda_i)$  und  $\Delta_M(\lambda_i)$ ) und gemessene Werte ( $\psi_E(\lambda_i)$  und  $\Delta_E(\lambda_i)$ ) erhalten werden, wobei Schichtdicke(n)  $d_{(best)}$  und Einfallswinkel  $\Phi_{(best)}$  variiert werden.

In US7,289,219B2 sowie in US7,502,101B2 wird die polarimetrische Scatterometrie für die Messung von kritischen Abmessungen von periodischen Strukturen auf Wafer oder Halbleiterbauelemente eingesetzt.

In US7,268,876B1 wird ein Minimierungsalgorithmus durch nicht-lineare Regression oder nach der Levenberg-Marquardt Methode verwendet um mittels spektroskopische Ellipsometrie entweder den Abtrag oder die Deposition der äußersten Schicht einer Probe in situ zu Charakterisieren.

In Zhu, R., Brueck, S. R. J., Dawson, N., Busani, T., Joseph, P., Singhal, S., und Sreenivasan, S. V., "Scatterometry for nanoimprint lithography," Journal of Vacuum Science & Technology B, Vol. 34, Nr. 06K503, 2016, wird die variable winkelgestützte Scatterometrie zur Charakterisierung von Strukturen, die mit Nanoimprint Lithographie hergestellt worden sind, eingesetzt. Diese Strukturen sind ein Drahtgitterpolarisator (WGP) und ein Photolack-Gitter. Zur Modellherstellung wurden RCWA Algorithmen verwendet.

In Patrick, H. J., Germer, T. A., Ding, Y., Ro, H. W., Richter, L. J., Soles, C. L., „Scatterometry for in situ measurement of pattern reflow in nanoimprinted polymers,“ Applied Physics Letters, Vol. 93, Nr. 233105, 2008, wird die spektroskopische Ellipsometrie zur Charakterisierung von mit NIL hergestellten Gitterstrukturen aus Polystyren eingesetzt.

Die Methode wurde eingesetzt um Veränderungen der Strukturen nach einer thermischen Behandlung (Annealing) zu detektieren. Zur Modellherstellung wurden RCWA Algorithmen verwendet. Die Ergebnisse wurden mit AFM Messungen verglichen.

Die Reflexions-Ellipsometrie hat sich vor allem in der Vermessung dünner Schichten in der Halbleiterindustrie etabliert und wird somit kurz erläutert. Im Stand der Technik werden meist Monoschichten charakterisiert. Hier wird z.B. die Reflexion von linear polarisiertem, parallelem und monochromatischem Licht am Dreiphasensystem Substrat/Schicht/Luft gemessen. Bei einem Dreiphasensystem finden Reflexion und Brechung an zwei Grenzflächen statt. Bei der Reflexion an einem (mehr-)Schichtsystem müssen Reflexion und Brechung an jeder einzelnen Phasengrenze berücksichtigt werden. Aus den messbaren ellipsometrischen Kenngrößen – dem Verlustwinkel  $\psi$  und der Phasendifferenz  $\Delta$  – die die Polarisationsänderung beschreiben, kann entweder die materialcharakteristische komplexe Brechzahl  $\tilde{n}$  des Schichtsystems oder die Schichtdicke berechnet werden. Die Transmissions-Ellipsometrie wird zur Messung optischer Eigenschaften eingesetzt. Da die Ellipsometrie zerstörungsfrei arbeitet, eignet sich diese Methode besonders zur Prozesskontrolle.

Bei der variablen winkelgestützten spektralen Ellipsometrie (VASE) gibt es im Gegensatz zur monochromatischen Ellipsometrie eine breite Abdeckung an Wellenlängen. Durch die große Menge an Daten bzw. an Informationen können genauere Modelle berechnet werden. Mit VASE können u.a. folgende Parameter gemessen bzw. berechnet werden für organische sowie anorganische Materialien:

- Schichtdicke von Subnanometer bis mehrere Mikrometer
- Oberflächenrauigkeiten
- Brechungsindex
- elektrische Leitfähigkeit
- Absorption
- Polymerisationszustand
- Mischungs-Zusammensetzungen
- Defekte
- Optische Anisotropie
- Material Doping

- Morphologie

Im Stand der Technik werden aber meistens einzelne dünne transparente oder semitransparente Schichten oder Zweifachschicht-Systeme vermessen. Werden Mehrfachschicht-Systeme untersucht, dann kommt keine strukturierte Oberfläche vor. Wegen der Komplexität werden im Stand der Technik entweder Mehrfachschicht-Systeme oder periodische Strukturen vermessen. Für Mehrfachschicht-Systeme sind im Stand der Technik glatte Oberflächen eine Voraussetzung. Weitere Probleme im Stand der Technik sind oft eine unzureichende Genauigkeit der Simulationen aus der Vermessung komplexer Proben. Noch schwieriger ist es, wenn die Strukturen auch noch komplexere Strukturformen besitzen. Dann ist eine Angleichung von Messung und Simulation noch immer ein Problem.

Die zu lösende Aufgabe dieser Erfindung besteht darin, die Probleme des Stands der Technik zu beheben und insbesondere ein verbessertes Verfahren und eine verbesserte Vorrichtung zur Vermessung eines mehrschichtigen Substrats anzugeben.

Diese Aufgabe wird mit dem Gegenstand der nebengeordneten Ansprüche gelöst. Vorteilhafte Weiterbildungen der Erfindung sind in den Unteransprüchen angegeben. In den Rahmen der Erfindung fallen auch sämtliche Kombinationen aus zumindest zwei von in der Beschreibung, den Ansprüchen und/oder den Figuren angegebenen Merkmalen. Bei angegebenen Wertebereichen sollen auch innerhalb der genannten Grenzen liegende Werte als Grenzwerte offenbart und in beliebiger Kombination beanspruchbar sein.

Die Erfindung betrifft ein Verfahren zur Vermessung eines mehrschichtigen Substrats, insbesondere mit mindestens einer Struktur mit kritischen Dimensionen, insbesondere mit einer Oberflächenstruktur mit kritischen Dimensionen, wobei das Verfahren zumindest folgende Schritte, insbesondere den folgenden Ablauf, aufweist:

- Herstellung des Substrats mit mehreren Schichten, insbesondere mit einer Struktur, insbesondere mit einer Struktur auf einer Oberfläche einer obersten Schicht, wobei die Abmessungen der Schichten und insbesondere der Strukturen bekannt sind,
- Vermessung des Substrats, und insbesondere der Struktur, mit mindestens einer Messtechnik,

- Erstellung einer Simulation des Substrats mit den Messergebnissen aus der Vermessung des Substrats,
- Vergleich der Messergebnisse mit Simulationsergebnissen aus der Simulation des Substrats,
- Optimierung der Simulation und erneute Erstellung einer Simulation des Substrats mit den Messergebnissen aus der Vermessung des Substrats falls eine Abweichung der Messergebnisse von den Simulationsergebnissen besteht, oder Berechnung von Parametern weiterer Substrate mit der erstellten Simulation, falls die Messergebnisse den Simulationsergebnissen entsprechen.

Vorteilhaft kann die erstellte Simulation für die Optimierung von gewünschten Schichtdicken, Strukturen und Materialien verwendet werden.

Die Erfindung betrifft weiterhin eine Vorrichtung zur Vermessung eines mehrschichtigen Substrats, insbesondere mit mindestens einer Struktur mit kritischen Dimensionen, insbesondere mit einer Oberflächenstruktur mit kritischen Dimensionen, aufweisend:

- Mittel zur Vermessung des Substrats, und insbesondere der Struktur, mit mindestens einer Messtechnik,
- Mittel zur Erstellung einer Simulation des Substrats mit den Messergebnissen aus der Vermessung des Substrats,
- Mittel zum Vergleich der Messergebnisse mit Simulationsergebnissen aus der Simulation des Substrats,
- Mittel zur Optimierung der Simulation und erneuten Erstellung einer Simulation des Substrats mit den Messergebnissen aus der Vermessung des Substrats,
- Mittel zur Auswertung und Optimierung weiterer Substrate (1, 1', 1'') durch Rekonstruktion von Schicht- und/oder Strukturparametern mit Hilfe der erstellten Simulation auf Grund von Messergebnissen aus der Vermessung der weiteren Substrate (1, 1', 1'').

Vorteilhaft können dünne transparente oder semitransparente Schichten oder Zweifachschichtsysteme oder Mehrfachschicht-Systeme vermessen werden, wobei auch

strukturierte Oberflächen vermessen werden können. So können komplexe Substrate mit hoher Genauigkeit vermessen werden.

Insbesondere wird vorgeschlagen, eine gleichzeitige Rekonstruktion der Schicht- und Strukturparameter durch eine Kombination von Messung und Simulation anzubieten. Durch Hinzunahme von mehreren Messvariablen und/oder mehrere Messverfahren steigt der Informationsgehalt. Eine solche kombinierte Messmethode wird bevorzugt mit RCWA als Berechnungsverfahren eingesetzt und ermöglicht eine Charakterisierung komplexer Proben die mehrere Schichten sowie Strukturen enthalten durch Gewinnung von Informationen über Beugung und Phase sowie topographische Informationen. Die neu eingesetzten Methoden liefern Ergebnisse mit einer realistischen Rechenleistung sowie in einer im Prozess Monitoring annehmbaren kurzen Rechenzeit.

Alternative Berechnungsverfahren für elektromagnetische Simulationen sind beispielsweise die FDTD-Methode (Finite Difference Time Domain) und die FE-Methode (FEM - Finite Elemente Methode).

Bevorzugt ist die Messtechnik mindestens eine, bevorzugt genau eine, der folgenden Techniken:

- VUV-UV-Vis-NIR variable winkelgestützte spektrale Ellipsometrie (VASE) im Reflexions- oder Transmissions-Modus. Der Messbereich reicht vom Vakuumultraviolett (VUV) bis ins nahe Infrarot (NIR), von 146 nm bis 1700 nm.
- IR variable winkelgestützte spektrale Ellipsometrie (VASE) im Reflexions- oder Transmissions-Modus. Der spektrale Messbereich reicht hier von 1,7  $\mu\text{m}$  bis 30  $\mu\text{m}$ .
- (polarisierte) Reflektometrie
- (polarisierte) Scatterometrie
- UV-Vis Spektroskopie
- THz Spektroskopie

Diese Messtechniken sind im Stand der Technik bekannt und werden nicht näher erläutert. Speziell im IR- bzw. mittleren IR (MIR)-Bereich sind neben Reflexions- oder Transmissionsmessungen auch Messungen mit abgeschwächter Totalreflexion im ATR-Modus (attenuated total reflection) möglich (ATR-Spektroskopie).

Die Konfiguration mit einem spektroskopischen Ellipsometer ist die bevorzugte Konfiguration und kommt in einer ersten erfindungsgemäßen Ausführungsform als erste Messtechnik im Einsatz.

Bevorzugt wird/werden ein Einfallswinkel und/oder eine Wellenlänge und/oder ein Polarisationszustand variiert und gemessen.

Bevorzugt wird für die Erstellung der Simulation die RCWA (Rigorous coupled-wave analysis) verwendet.

Bevorzugt wird erfindungsgemäß nur eine Messtechnik eingesetzt, wobei die unabhängigen Messvariablen Einfallswinkel und Wellenlänge sowie der Polarisationszustand variiert und gemessen werden.

In einer weiteren Ausführungsform, in der die zu untersuchende Systeme weniger komplex sind, wird der Winkel nicht variiert.

In einer dritten erfindungsgemäßen Ausführungsform, in der die zu untersuchenden Systeme sehr komplex sind, wird zusätzlich zur variablen winkelgestützten spektralen Ellipsometrie eine zweite Messtechnik eingesetzt und wenn notwendig eine dritte usw. Welche und wie viele Messmethoden kombiniert werden hängt von den zu untersuchenden Substraten ab und muss fallspezifisch im Laufe der Modellherstellung ausgewählt werden. Erfindungsgemäß führen eine Kombination von wellenlängenaufgelöste und winkelaufgelöste Messmethoden wie Scatterometrie oder Ellipsometrie zu einer höheren Genauigkeit der Simulationen.

Folgende optische Eigenschaften können im breiten spektralen Bereich bestimmt werden:

- Brechungsindex ( $n$ )
- Extinktionskoeffizienten ( $k$ )
- Reeller und Imaginärer Teil der dielektrischen Funktion ( $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ )
- Absorptionskoeffizienten ( $\alpha$ )
- Reeller und Imaginärer Teil der komplexen optischen Leitfähigkeit ( $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ )

- Optische Anisotropie

Diese optischen Eigenschaften sind dem Fachmann bekannt und werden nicht näher erläutert.

Bevorzugt umfasst das Mittel zur Vermessung mindestens eine optische Einrichtung, insbesondere ein Ellipsometer und/oder Reflektometer und/oder Scatterometer und/oder Spektrometer.

Bevorzugt weist die Vorrichtung mindestens eine Datenverarbeitungseinheit und mindestens ein Datenverarbeitungssystem zum Verarbeiten und Speichern der Daten auf, die von dem Mittel zur Vermessung des Substrats gewonnen werden.

Bevorzugt weisen die Mittel zur Vermessung mindestens eine Strahlungsquelle, insbesondere Laser oder Breitband-Strahlungsquelle, mindestens ein Monochromator, mindestens ein Polarisator, mindestens ein Kompensator, mindestens einen Substrathalter, mindestens einen Analysator, und mindestens einen Detektor auf, wobei der mindestens eine Polarisator das Einstellen ausgewählter elliptischer Polarisationszustände, insbesondere linear oder zirkular, ermöglicht.

Bevorzugt sind alle Mittel zur Vermessung des Substrates in der Vorrichtung angeordnet.

### **Verfahrensschritte**

Die Erfindung beschreibt insbesondere ein Verfahren zur Charakterisierung von Mehrschichtsystemen mit einer (Oberflächen)-Strukturierung mit mehreren Schritten:

In einem ersten Schritt wird für ein ausgewähltes, bekanntes, System (im Folgenden auch Substrat genannt), i.e. eine hergestellte Probe, eine genügend große Anzahl an Messungen durchgeführt. Die Proben können Mehrschichtsysteme mit oder ohne Strukturen bzw. Oberflächenstrukturierung sein. Erfindungsgemäß werden insbesondere wellenlängenaufgelöste und/oder winkelaufgelöste Messungen durchgeführt, wobei der Polarisationszustand gemessen und variiert wird.

Die ausgewählte(n) Probe(n) wird je nach Komplexität mit mindestens einer Messtechnik vermessen, wobei bevorzugt in der erfindungsgemäßen Vorrichtung alle Komponenten zur Durchführung der unterschiedlichen Messtechniken vorhanden sind. Bei Bedarf können einzelne Geräte-Komponenten ausgetauscht, hinzugefügt oder entfernt werden. Durch Hinzunahme von mehreren Messverfahren steigt der Informationsgehalt der aufgenommenen Referenzsignaturen. In einer alternativen weniger bevorzugten Ausführungsform wird die zu vermessende Probe in eine weiteren Messvorrichtung transferiert, sodass weitere Messungen mit unterschiedlichen Messtechniken durchgeführt werden können.

Die geeigneten Messtechniken zur Informationsgewinnung sind erfindungsgemäß insbesondere Scatterometrie, Ellipsometrie, Reflektometrie, Spektroskopie und/oder Diffraktometrie. Die Messungen können beispielsweise bei variabler Polarisation des Meßstrahls, bei Änderung des Einfallswinkels und bei Änderung der Wellenlänge durchgeführt werden. Erfindungsgemäß führen insbesondere eine Kombination von wellenlängenaufgelöste und winkelaufgelöste Messmethoden zu einer höheren Genauigkeit der Simulationen. Weiter können je nach Probenart und Messmethode die Messungen nicht nur im Reflexions-Modus, sondern auch im Transmissions-Modus durchgeführt werden, um zusätzliche Informationen und Daten zu erhalten.

Die Messtechniken werden auch anhand der optischen Eigenschaften der einzelnen Schichten eines Schichtsystems ausgewählt. Bei bestimmten Wellenlängenbereichen kann beispielsweise eine Schicht weitgehend transparent sein während eine oder mehrere weitere Schichten stärker absorbieren oder reflektieren.

In einem weiteren Schritt wird anhand der aufgenommenen Daten bevorzugt mit RCWA (Rigorous coupled-wave analysis) als Berechnungsverfahren ein geeignetes Modell erstellt. Dabei werden neu entwickelte komplexe Simulationsalgorithmen zur Modellherstellung eingesetzt. Die Simulationen ermöglichen diverse Effekte in der Metrologie zu berücksichtigen, indem für bekannte Proben ein Abgleich zwischen Messergebnis und Simulationsergebnis durchgeführt wird. Dafür werden modellgestützte Messungen durchgeführt. Besteht die gemessene Probe aus mehreren Schichten und (Oberflächen-)

Strukturen, erhöht sich die Komplexität des Systems und die Anzahl der zu bestimmenden Parameter.

Erfindungsgemäß sind die wiederkehrenden Schritte der Messung, Modellherstellung bzw. Modelloptimierung und Simulation notwendig. Stimmen Messergebnisse und Simulationsergebnisse nicht innerhalb eines zulässigen Bereiches überein, muss das Modell weiter optimiert werden. Stimmen Messergebnisse und Simulationsergebnisse innerhalb eines zulässigen Bereiches überein, kann die Simulation für die Analyse weiterer Proben eingesetzt werden.

Die Konfiguration mit einem spektroskopischen Ellipsometer, beispielsweise VASE, ist erfindungsgemäß die bevorzugte Konfiguration und kommt in einer ersten erfindungsgemäßen Ausführungsform als erste Messtechnik im Einsatz. Welche und wie viele Messmethoden eingesetzt werden, muss für jedes zu charakterisierende System einzeln bestimmt werden. Die Messmethoden müssen experimentelle Messdaten liefern, die für viele der interessierenden Parameter sensitiv sind, ohne dass eine zu hohe Korrelation der Parameter besteht. Beispiele für Parameter sind beispielsweise für Oberflächenstrukturen die Höhe und die Breite und für eine n-te Schicht die Schichtdicke.

RCWA wird zur Berechnung der Gitterbeugung verwendet, wobei die Probe in mehrere einzelne Schichten unterteilt wird. Die RCWA Algorithmen ermöglichen erfindungsgemäß das Bestimmen der kritischen Abmessungen der untersuchten Strukturen. Diese sind z.B. die Höhe oder Tiefe der Strukturen, die Breite so wie die Länge der Strukturen, Winkel (z.B. Seitenwandwinkel), Restschichtdicke(n) und Oberflächenrauigkeit. Die Messungen können für positive und/oder für negative periodische Strukturen durchgeführt werden.

Werden in dem zu charakterisierenden Substrat bestimmte Parameter verändert, müssen diese Veränderungen eine Änderung in den spektralen Aufnahmen bewirken. Bewirken unterschiedliche Parameter eine gleiche Veränderung der experimentellen Aufnahmen, sind die Korrelationen zu hoch und eine eindeutige Zuweisung ist nicht oder schlecht möglich. Dann muss die Auswahl der Messtechnik(en) noch weiter optimiert werden. Eine mögliche Korrelation mit unbekannten Parametern ist eine weitere Herausforderung in der

Modellherstellung. Eine hohe Wiederholgenauigkeit im Herstellungsprozess der zu untersuchenden Proben ist dabei eine Voraussetzung.

Erfindungsgemäß werden insbesondere Korrelationsanalysen und Sensitivitätsanalysen durchgeführt um die Qualität der Rekonstruktion anhand der durchgeführten Messungen zu beurteilen.

In einem weiteren Schritt wird das optimierte Modell für die Charakterisierung unbekannter Proben verwendet, wobei die Probe bereits bekannten Proben-Systeme zugeordnet werden muss. Durch einen Abgleich zwischen gemessenen und simulierten Spektren erfolgt die Rekonstruktion von Schichten und Strukturdimensionen. Die simulierten Spektren werden als Datensatz zur Rekonstruktion der gesuchten Parameter herangezogen.

Diese Parameter sind beispielsweise:

- Schichtdicken von Subnanometer bis mehrere Mikrometer
- Oberflächenrauigkeiten
- Brechungsindex
- elektrische Leitfähigkeit
- Absorption
- Polymerisationszustand
- Mischungs-Zusammensetzungen
- Defekte
- Optische Anisotropie
- Material Doping
- Morphologie
- kritischen Abmessungen der untersuchten Strukturen. Diese sind z.B. die Höhe oder Tiefe der Strukturen, die Breite so wie die Länge der Strukturen, Winkel (z.B. Seitenwandwinkel), Restschichtdicke(n) und Oberflächenrauigkeit.

Das entwickelte, optimierte Modell wird nicht nur für die Berechnung von gewünschten Parametern weiterer analoger Substrate und analoger (Schicht-)Materialien verwendet, sondern auch für die Optimierung von gewünschten Schichtdicken, Strukturen und

Materialien. So kann beispielsweise eine Schichtdicke oder eine Strukturdimension anhand der gewünschten Parametergröße mit dem erfindungsgemäßen Modell optimiert werden.

### **Substrat mit Mehrschicht-Systemen und/oder (Oberflächen-) Strukturierung**

Als Probe werden Substrate bezeichnet, die mit den in der Halbleiterindustrie bekannten Verfahren bearbeitet oder behandelt wurden, insbesondere beschichtet und/oder geprägt und/oder gebondet und/oder geätzt und/oder mit Plasma behandelt, und/oder mit Licht beispielsweise Laser behandelt, usw. Master-Stempel, Arbeits-Stempel sowie mikrofluidische Baugruppen werden auch als Probe verstanden.

Unter einem Substrat bzw. Halbleitersubstrat wird ein noch nicht vereinzelt, insbesondere rundes, Halbzeug der Halbleiterindustrie verstanden. Unter einem Substrat wird auch ein Wafer verstanden. Obwohl das Substrat jeden beliebigen Durchmesser besitzen kann, ist der Substrat Durchmesser insbesondere 1 Zoll, 2 Zoll, 3 Zoll, 4 Zoll, 5 Zoll, 6 Zoll, 8 Zoll, 12 Zoll, 18 Zoll oder größer als 18 Zoll. In besonderen Ausführungsformen kann ein Substrat auch eine rechteckige, oder zumindest von der kreisförmigen Gestalt abweichende Form besitzen.

Die zu charakterisierenden Proben enthalten insbesondere eine oder mehrere der folgenden Komponenten und/oder Beschichtungen:

- Lacke, insbesondere Photolacke
- Antihafschichten (engl.: anti-sticking layer ASL)
- Erstsichten wie beispielsweise Haftvermittler-Schichten (engl.: primer)
- Polymer-Schichten
- Arbeits-Stempel Materialien für Imprint- und Nanoimprint-Verfahren (Weichstempel- oder Hartstempel-Materialien)
- Masterstempel Materialien
- Strukturierte Masterstempel oder Hartstempel sowie strukturierte harte Materialien die durch Elektronenstrahlolithographie und/oder chemische Ätzprozesse hergestellt worden sind
- Schichten mit geprägten Strukturen
- Strukturierte Beschichtungen

- Halbleiter-Schichten
- Oxid-Schichten

Die erfindungsgemäße Methode ist nicht auf die oben genannten Proben beschränkt und eignet sich allgemein für Mehrschichtsysteme mit oder ohne Strukturierung mit kritischen Dimensionen, solange die Probe mit mindestens einer der erfindungsgemäßen Messtechniken (Ellipsometrie, Scatterometrie, Spektroskopie, Diffraktometrie und Reflektometrie) gemessen werden kann.

### **Bevorzugte Anwendungen**

Die Analysenmethoden (insbesondere RCWA) können, zusätzlich zur Bestimmung von Schichtdicken und Strukturen mit kritischen Abmessungen, für folgende Anwendungen eingesetzt werden:

- Charakterisierung von Mehrfachsicht-Systemen
- Fehler-Analyse und Fehler-Erkennung (Ausfall-Analyse)
- Charakterisierung von Antihafschichten und Erstsichten
- Monitoring der chemischen Stabilität von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Monitoring der Abnutzung bzw. Zersetzung von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Monitoring der Umweltbedingten Abnutzung von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Monitoring von Oxidations- oder Reduktions-Prozesse von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Charakterisierung der chemischen Zusammensetzung von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.

- Charakterisierung der Bestrahlungsstabilität von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Charakterisierung der thermischen Stabilität von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Charakterisierung der Beständigkeit von Materialien (Alterung) beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Charakterisierung der elektrischen Leitfähigkeit von Materialien beispielsweise Lacke, Arbeitsstempel-Materialien, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafmaterialien, usw.
- Charakterisierung des Aushärtegrades von Lacken, Arbeitsstempel-Materialien, und Prägemassen allgemein
- Charakterisierung der Mischbarkeit von Materialien beispielsweise Lacke und Arbeitsstempel-Materialien
- Charakterisierung von Mischungen und Monitoring von Entmischung
- Charakterisierung der Isotropie von Materialien
- Überwachung des Beschichtungsprozesses und der Schichtbildung und/oder Filmbildung von beispielsweise Lackbeschichtungen, Arbeitsstempel-Material-Schichten, Masterstempel-Materialien, Erstsichten, Antihafbeschichtungen, usw.
- Charakterisierung von 1D, 2D, 3D diffraktiven optischen Elementen (DOE) (direkt auf transparente Substrate gedruckt oder ein Polymer-Master), von geprägten NIL-Strukturen, von Arbeitsstempeln, von heißgeprägten Nanostrukturen, von lithographischen Strukturen, von mikrofluidischen Baugruppen mit kritischen Abmessungen
- Charakterisierung und Prüfung von strukturierten Masterstempeln, strukturierten Hartstempeln und strukturierten harten Materialien, die durch Elektronenstrahlolithographie und/oder chemische Ätzprozesse hergestellt worden sind
- Charakterisierung der räumlichen Homogenität von Strukturen mit kritischen Abmessungen
- Charakterisierung von Schichtbildung und Schicht-Wachstumsmechanismen (beispielsweise Volmer-Weber-Wachstum usw.)

- Charakterisierung des Schrumpfverhaltens von 1D-, 2D-, und/oder 3D-diffraktive optische Elemente (DOE), von geprägten NIL-Strukturen, von Arbeitsstempeln, von heißgeprägten Nanostrukturen, von lithographischen Strukturen, von mikrofluidischen Baugruppen mit kritischen Abmessungen
- Charakterisierung von zusätzlichen Beschichtungen auf 1D-, 2D-, und/oder 3D-diffraktiven optischen Elementen (DOE), geprägten NIL-Strukturen, Arbeitsstempeln, Masterstempeln, heißgeprägten Nanostrukturen, lithographischen Strukturen, mikrofluidischen Baugruppen mit kritischen Abmessungen
- Überwachung bzw. Charakterisierung von Reinigungsprozesse für 1D-, 2D-, und/oder 3D-diffraktive optische Elemente (DOE), geprägte NIL-Strukturen, Arbeitsstempeln, Masterstempeln, heißgeprägte Nanostrukturen, lithographische Strukturen, mikrofluidischen Baugruppen mit kritischen Abmessungen
- Erkennung von Defekten (beispielsweise Lufteinschlüsse) bei 1D-, 2D-, und/oder 3D-diffraktive optische Elemente (DOE), geprägte NIL-Strukturen, Arbeitsstempeln, Masterstempeln, heißgeprägte Nanostrukturen, lithographische Strukturen, mikrofluidischen Baugruppen mit kritischen Abmessungen und weitere Mehrschichtsysteme
- Charakterisierung von Ätzprozesse in-situ

Die erfindungsgemäße Methode kann allgemeiner formuliert zur Qualitätskontrolle der hergestellten Proben mit Mehrfachschicht-Systemen und/oder einer Strukturierung eingesetzt werden. Beispielsweise wird die Qualität von Arbeitsstempeln für die Nanoimprintlithographie charakterisiert. Diese Arbeitsstempel können aus mehreren Schichten mit unterschiedlichen Dicken und Materialien bestehen. Eine der Schichten ist strukturiert (z.B. Weichstempel-Materialschicht). Dabei können jeweils mehrere Parameter für die Qualität relevant sein. Die Qualitätskontrolle kann unmittelbar nach der Herstellung durchgeführt werden und/oder nach bestimmten Zeitabständen zur Kontrolle der Abnutzung oder Alterung z.B. im Einsatz.

Die erfindungsgemäße Methode kann zur Optimierung eines Herstellungs-Prozesses eingesetzt werden zur Überwachung der hergestellten Produkte bis die gewünschten

Eigenschaften i.e. Parameter reproduzierbar erreicht werden. Die räumliche Homogenität von ausgewählten Parametern kann beispielsweise auch mit der erfindungsgemäßen Methode bestimmt werden und als Auswahlkriterium herangezogen werden.

Die erfindungsgemäßen Anwendungen sind nicht auf die oben genannten Mehrschichtsysteme (mit oder ohne Strukturierung) beschränkt.

### **Vorrichtung**

Die Vorrichtung umfasst optische Einrichtungen wie ein Ellipsometer und/oder Reflektometer und/oder Scatterometer und/oder Spektrometer, und eine Datenverarbeitungseinheit bzw. ein Datenverarbeitungssystem zum Verarbeiten und Speichern der Daten, die von den optischen Einrichtungen gewonnen werden.

Die wesentlichen Komponenten der optischen Einrichtungen sind: mindestens eine Strahlungsquelle (z.B. Laser oder Breitband-Strahlungsquelle), mindestens ein Monochromator, mindestens ein Polarisator, mindestens ein Kompensator, ein Probenhalter, mindestens ein Analysator, und mindestens ein Detektor. Die Polarisationsoptik ermöglicht das Einstellen ausgewählter elliptischer Polarisationszustände (linear, zirkular usw.). Die Messungen sind nicht auf Reflexion eingeschränkt und können auch in Transmission oder im ATR-Modus durchgeführt werden. Für ATR-Messungen kommen eine entsprechende ATR-Halterung für Substrat und/oder ATR-Kristall und ATR-Optiken als zusätzliche oder alternative Komponenten hinzu.

Erfindungsgemäß werden insbesondere wellenlängenaufgelöste und winkelaufgelöste Messungen durchgeführt wobei der Polarisationszustand variiert werden kann. Sind die zu untersuchende Systeme weniger komplex, wird der Winkel nicht variiert da Wellenlängen und Polarisationszustand als Information ausreichend sind.

Die Konfiguration mit einem spektroskopischen Ellipsometer, wobei bevorzugt die variable winkelgestützte spektrale Ellipsometrie ausgewählt wird, ist erfindungsgemäß die bevorzugte Konfiguration und kommt in einer ersten erfindungsgemäßen Ausführungsform als erste Messtechnik im Einsatz.

Die ausgewählten Proben können je nach Komplexität mit mehreren Messtechniken vermessen werden, wobei bevorzugt in der erfindungsgemäßen Vorrichtung alle Komponenten zur Durchführung der unterschiedlichen Messtechniken vorhanden sind. Bei Bedarf können einzelne Geräte-Komponenten ausgetauscht, hinzugefügt oder entfernt werden. Durch Hinzunahme von mehreren Messverfahren steigt erfindungsgemäß der Informationsgehalt der aufgenommenen Referenzsignaturen. In einer alternativen Ausführungsform wird die zu vermessende Probe in einer weiteren Messvorrichtung transferiert sodass weitere Messungen mit unterschiedlichen Messtechniken durchgeführt werden können.

Typische Komponenten von Ellipsometern sind beispielsweise eine Lichtquelle, ein Polarisator, eventuell ein Kompensator (beispielsweise eine  $\lambda/4$ -Platte), ein Probenhalter, ein Analysator, wenn benötigt ein Monochromator, und ein Detektor.

Weitere Vorteile, Merkmale und Einzelheiten der Erfindung ergeben sich aus der nachfolgenden Beschreibung bevorzugter Ausführungsbeispiele sowie anhand der Zeichnungen. Diese zeigen in:

- Fig. 1a: Flussdiagramm mit Verfahrensschritten einer beispielhaften Ausführungsform eines erfindungsgemäßen Verfahrens,
- Fig. 1b: Flussdiagramm mit Verfahrensschritten eines beispielhaften erfindungsgemäßen Verfahrens,
- Fig. 2a: Querschnittsansicht eines Substrats mit Mehrschicht-System und einer Oberflächenstrukturierung mit positiven periodischen Strukturen,
- Fig. 2b: Querschnittsansicht eines zweiten Substrats mit Mehrschicht-System und einer Oberflächenstrukturierung mit negativen periodischen Strukturen,

- Fig. 2c: Querschnittsansicht eines dritten Substrats mit Mehrschicht-System und einer Oberflächenstrukturierung mit positiven periodischen trapezförmigen Strukturen,
- Fig. 2d: Draufsicht auf vier beispielhafte Ausführungsformen von periodischen Strukturen (7<sup>II</sup> rechteckig, 7<sup>III</sup> linienförmig, 7<sup>IV</sup> kreisförmig und 7<sup>V</sup> eine nicht regelmäßige Form),
- Fig. 3: Eine schematische Darstellung der optischen Komponenten einer erfindungsgemäßen Vorrichtung in einer beispielhaften Ausführungsform.

In den Figuren sind gleiche Bauteile oder Bauteile mit der gleichen Funktion mit den gleichen Bezugszeichen gekennzeichnet. Die Figuren 2 und 3 sind nicht maßstabsgetreu dargestellt, um die Darstellung zu verbessern.

Figur 1a zeigt ein Flussdiagramm der erfindungsgemäßen Methode. Für bekannte Proben (Mehrschichtsysteme mit Strukturierung) wird ein Abgleich zwischen Messergebnis und Simulationsergebnis durchgeführt. Dabei sind die wiederkehrenden Verfahrensschritte der Messung 120, Modellherstellung 130 bzw. Modelloptimierung 140 und erneute Simulation notwendig.

In einem ersten Verfahrensschritt 110 wird ein Substrat (im Folgenden auch Probe genannt) mit mehreren dünnen Schichten sowie einer (Oberflächen-)Strukturierung hergestellt. Das zu untersuchende System ist somit bekannt und wird zur Modellherstellung und -optimierung verwendet. Bei Bedarf werden mehrere genau bekannte Referenzsubstrate hergestellt und die Messergebnisse dienen der Validierung und Optimierung des entwickelten Simulationsmodells.

In einem zweiten Verfahrensschritt 120 wird das Substrat mit einem definierten Einfallswinkel mit elektromagnetischer Strahlung bestrahlt und die reflektierte Strahlung beispielsweise in Abhängigkeit der Wellenzahl und/oder des Winkels gemessen. Die Messungen sind nicht auf Reflexion eingeschränkt und können auch in Transmission

durchgeführt werden. Mehrere Messtechniken können zur Erhöhung der Zuverlässigkeit und/oder der Genauigkeit des Berechnungsverfahrens eingesetzt werden. Die geeigneten Messtechniken zur Informationsgewinnung sind insbesondere Scatterometrie, Ellipsometrie, Reflektometrie, Spektroskopie und/oder Diffraktometrie. Diese verschiedenen Messtechniken beruhen unter anderem auf der Vermessung von an mikro- und/oder (sub)-nanostrukturierten Proben reflektiertem oder gebeugtem Licht als Funktion eines Geräteparameters wie beispielsweise Einfallswinkel oder Lichtwellenlänge, wobei die Polarisationsabhängigkeit der gemessenen Größen ausgenutzt wird. Analog werden auch die einzelnen Schichten eines Mehrschichtsystems direkt oder indirekt durch Reflexion und/oder Beugung und/oder Streuung des Lichts an den Grenzflächen erfasst.

In Abhängigkeit der Schichtdicken und des Brechungsindex der einzelnen Schichten der bekannten, definierten Probe wird für die Entwicklung des Simulationsmodells entweder das gesamte Mehrschichtsystem nach fertiger Herstellung gemessen oder es wird Schritt für Schritt jede einzelne Schicht hergestellt und nacheinander gemessen.

In einer ersten Ausführungsform haben die einzelnen Schichten des Mehrschichtsystems eine Schichtdicke von mehr als 20 nm (größer oder gleich 20 nm) und der Brechungsindex der einzelnen Schichten ist bekannt. In dieser Ausführungsform wird das gesamte Mehrschichtsystem nach fertiger Herstellung vermessen. Beispielsweise ein Imprintstempel für die Imprint- oder Nanoimprint- Lithographie mit einer strukturierten Imprintschicht.

In einer zweiten Ausführungsform beinhaltet die Probe sehr dünne Schichten mit einer Schichtdicke unterhalb von 20 nm mit bekanntem Brechungsindex. Für sehr dünne Schichten, insbesondere Schichten mit einer Schichtdicke im unteren nm-Bereich bis sub-nm-Bereich, wird jede einzelne Schicht hergestellt und gemessen, bevor die nächste Schicht darauf hergestellt wird. In dieser Ausführungsform wird nach jeder Schichtauftragung, beispielsweise einer ASL-Schicht, die Probe gemessen. Alle gemessenen Daten der Probe, die Schicht für Schicht gemessen worden ist, werden für die Modellherstellung berücksichtigt.

Bei Bedarf können auch während des Herstellungsprozesses der Probe Schichten mit einer Schichtdicke mit mehr als 20 nm einzeln gemessen werden, abhängig vom Brechungsindex und der vorhandenen Materialinformation.

In einer dritten Ausführungsform beinhaltet eine Probe eine Zwischenschicht mit mehr als 20 nm Schichtdicke aber mit unbekanntem Brechungsindex. In dieser Ausführungsform werden nach Auftragen einzelner Schichten mit einer Schichtdicke von mehr als 20 nm jeweils Messungen durchgeführt sowie für das gesamte Mehrschichtsystem nach fertiger Herstellung.

In der Ellipsometrie wird die Polarisationsänderung mit Hilfe der messbaren ellipsometrischen Kenngrößen – dem Verlustwinkel  $\psi$  und der Phasendifferenz  $\Delta$  – beschrieben. Da die optischen Parameter mit  $\psi$  und  $\Delta$  nicht direkt bestimmt werden können, muss für ein zu untersuchendes Proben-System ein parametrisiertes Modell entwickelt werden. Zur Berechnung der Wechselwirkung von Licht mit Mehrschichtsysteme sowie Nanostrukturen und Mikrostrukturen wird erfindungsgemäß als Berechnungsverfahren bevorzugt RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis) eingesetzt. RCWA wird zur Berechnung der Gitterbeugung eingesetzt, wobei die Probe in mehrere einzelne Schichten unterteilt wird. Dieses Modellkonzept wurde erfindungsgemäß weiterentwickelt und ergänzt.

Die erfindungsgemäße Weiterentwicklung ermöglicht vorteilhaft mit dem Simulationsmodell aus Verfahrensschritt 130 die gleichzeitige Auswertung der Beugung einfallender (ebener) Wellen am Mehrschicht-System sowie an den Strukturen. Vorteilhaft werden Mehrschichtsysteme und nicht-planare Schichten i.e. Strukturen mit sehr hoher Zuverlässigkeit und Genauigkeit durch die Verwendung von polarisiertem Licht mit Ellipsometrie ermittelt.

In einem dritten Verfahrensschritt 130 werden die Datensätze der ausgewählten Messvariablen für die Modellherstellung eingesetzt, so dass eine Simulation eines Mehrschichtsystems mit (Oberflächen-)Strukturierung berechnet werden kann. Dabei soll die Abweichung zwischen den experimentellen Daten und den simulierten Daten möglichst gering sein (140). Für ein erfindungsgemäßes komplexes System wie beispielsweise in Figur 2a dargestellt mit mehreren Schichten und einer Oberflächenstrukturierung kann das in der

erfindungsgemäßen Methode entwickelte Modell die Probe korrekt physikalisch beschreiben. Somit wird eine Simulation mit hoher Zuverlässigkeit ermöglicht.

Für bekannte Proben, die in Schritt 110 hergestellt wurden, wird in einem vierten Verfahrensschritt 140 ein Abgleich zwischen Messergebnis und Simulationsergebnis durchgeführt. Dabei sind die wiederkehrenden Schritte der Messung, Modellherstellung bzw. Modelloptimierung (Modell Fitting) und erneute Simulation notwendig. Ziel der Ausgleichung ist, dass sich das Modell i.e. die generierten Datensätze den gemessenen Datensätzen (i.e. experimentelle Daten) bestmöglich anpassen. Ist dies (noch) nicht der Fall, wird das Modell im Verfahrensschritt 130 weiter optimiert. Ist dies der Fall, kann das entwickelte Modell im Verfahrensschritt 150 für die Ermittlung der gewünschten Parameter eingesetzt werden.

Eine mathematische Analyse der entwickelten Modellsysteme kann bei Bedarf speziell bei der Entwicklung von generischen Modellsystemen zusätzlich herangezogen werden.

Figur 1b zeigt ein Flussdiagramm der erfindungsgemäßen Methode bei Anwendung eines fertigen erfindungsgemäßen Simulationsmodells für ein Mehrschichtsystem mit (Oberflächen-)Strukturierung. Hier steht nach Systemoptimierung ein entwickeltes Modell für routinemäßige Simulationen zur Verfügung. Die Systemparameter sind festgelegt. Eine bekannte Probe – d.h. die Anzahl der planaren und/oder nicht-planaren (i.e. Strukturierten) Schichten und die Schichtmaterialien sind bekannt – wird erfindungsgemäß im Verfahrensschritt 120 gemessen und nach dem Vergleich von experimentellen und generierten Datensätzen (140) werden die gewünschten Parameter ermittelt (150).

Figur 2a zeigt eine Querschnittsansicht eines erfindungsgemäßen Substrats 2 mit mehreren dünnen Beschichtungen 3-6 sowie einer Oberflächenstrukturierung 7. Die Anzahl sowie die Dicke der Beschichtungen ist nicht auf die Ausführungsformen aus den Figuren 2a bis 2c eingeschränkt. Die Dicke der Beschichtungen ist nicht maßstabsgetreu dargestellt, um die Darstellung zu verbessern. Die Figuren 2a bis 2c zeigen ähnliche Ausführungsformen mit unterschiedlichen Oberflächenstrukturierungen 7, 7', 7''. Die letzte Beschichtung 6, 6', 6'' kann beispielweise aus einem Photolack oder einer Prägemasse bestehen, die mittels

Lithographie oder Nanoimprint Lithographie strukturiert wurde. Die Strukturen 7, 7', 7'' haben Abmessungen im Nanometer Bereich. Die Oberfläche 6o, 6'o, 6''o der strukturierten Beschichtung definiert die Restschichtdicke.

Figur 2a zeigt ein Mehrschichtsystem 1 mit einer Oberflächenstrukturierung mit positiven periodischen Strukturen 7.

Figur 2b zeigt eine weitere Ausführungsform eines Mehrschichtsystems 1' mit einer Oberflächenstrukturierung mit negativen periodischen Strukturen 7'.

Figur 2c zeigt eine dritte Ausführungsform eines Mehrschichtsystems 1'' mit einer Oberflächenstrukturierung mit positiven periodischen trapezförmigen Strukturen 7''.

Ist die Oberfläche mit Miko- und/oder Nanostrukturen und/oder Subnanometer-Strukturen strukturiert, trifft das einfallende Licht auf diese (meistens) periodischen, flächendeckenden Strukturen, die ein optisches Beugungsgitter darstellen können. Zu den kritischen Abmessungen der untersuchten Strukturen 7, 7', 7'' zählen die Höhe oder Tiefe der Strukturen, die Breite so wie die Länge der Strukturen, die Winkel beispielsweise der Seitenwandwinkel, Restschichtdicke(n) und die Oberflächenrauigkeit.

Figur 2d zeigt in einer Draufsicht von mehreren Ausschnitten im Vergleich weitere mögliche erfindungsgemäße Oberflächenstrukturierungen 7, 7'', 7<sup>IV</sup> und 7<sup>V</sup> einer Probe.

Erfindungsgemäß werden Modelle entwickelt, die eine zuverlässige Charakterisierung komplexer Mehrschichtsysteme mit einer (Oberflächen-)Strukturierung gemäß den Strukturen aus Figuren 2a bis 2d ermöglichen. Die Strukturen 7 sind Vierecke, insbesondere Quadrate. Die Strukturen 7'' sind periodische flächendeckende lineare Strukturen. In einer weiteren erfindungsgemäßen Ausführungsform sind die Strukturen 7<sup>IV</sup> kreisförmig. Auch Strukturen mit komplexeren oder unregelmäßigen Strukturformen wie beispielsweise die Strukturen 7<sup>V</sup> aus Figur 2d stellen für die erfindungsgemäße Methode kein Problem dar und werden in der Modellherstellung erfasst und korrekt wiedergegeben. Die Strukturierung ist nicht auf die gezeigten Ausführungsformen beschränkt.

Die nicht-planare Schicht mit einer Strukturierung ist erfindungsgemäß die oberste Schicht 6, 6', 6'' eines Mehrschichtsystems 1, 1', 1''. In einer alternativen Ausführungsform befindet sich die nicht-planare Schicht mit einer Strukturierung zwischen zwei Schichten im Mehrschichtsystem. Beispielsweise wird eine strukturierte Prägemasse nach Prägung mit einer ASL Beschichtung beschichtet für eine Anwendung als Arbeitsstempel. In einer weiteren alternativen Ausführungsform beinhaltet ein Mehrschichtsystem mehr als eine nicht-planare Schicht mit einer Strukturierung.

Figur 3 zeigt die optischen Komponenten einer ersten erfindungsgemäßen Ausführungsform einer Vorrichtung 13. Ein Polarisator (P) 9 wandelt das nicht polarisierte Licht einer Strahlungsquelle 8 in linear polarisiertes Licht um. Nach der Reflexion an der Probe 1 durchläuft die Strahlung einen Analysator (A) 10. Die elektromagnetische Strahlung wird bei der Reflexion an der Probe 1 elliptisch polarisiert. Der Analysator 10 ändert wieder die Polarisation der reflektierten elektromagnetischen Strahlung, die dann auf einem Detektor (D) 11 trifft. In einer ersten bevorzugten Ausführungsform wird eine polychromatische Strahlungsquelle eingesetzt, sodass ein ausgewähltes Wellenlängenbereich im Messverfahren verwendet wird. In einer alternativen Ausführungsform wird eine monochromatische Strahlung verwendet, wobei bevorzugt ein Laser als Strahlungsquelle eingesetzt wird. Mehrere Strahlungsquellen können in der Vorrichtung gleichzeitig vorhanden sein und/oder bei Bedarf ausgetauscht werden.

Weitere optische Komponenten sind beispielsweise optische Filter, Kompensator (z.B. eine  $\lambda/2$  Platte), Monochromator, und unterschiedliche optische variable Abschwächer die bei Bedarf je nach Messtechnik und/oder Wellenlängenbereich eingesetzt werden können. Diese Komponenten sind dem Fachmann bekannt und werden nicht näher beschrieben.

Die erfindungsgemäßen Messtechniken unterscheiden sich durch die Anordnung und die Art der optischen Komponenten. Der Analysator 10 kann beispielsweise rotierend ausgebildet sein.

Bei der variablen winkelgestützte spektrale Ellipsometrie (VASE) gibt es im Gegensatz zur monochromatischen Ellipsometrie eine breite Abdeckung an Wellenlängen. Dadurch steigen

der Informationsgehalt der gemessenen Daten und die Genauigkeit der Simulationen. Ein Goniometer ermöglicht variable Winkelmessungen. Die Kombination von wellenlängenaufgelösten und winkelaufgelösten Messungen ist die bevorzugte Ausführungsform und führt erfindungsgemäß zu einer höheren Zuverlässigkeit der Simulationen. Diese Kombination wird erfindungsgemäß mit VASE als bevorzugte Messtechnik durchgeführt.

Weiter können je nach Probenart und Messmethode die Messungen nicht nur im Reflexions-Modus, sondern auch im Transmissions-Modus durchgeführt werden, um bei Bedarf zusätzliche Informationen und Daten zu erhalten.

Die erfindungsgemäße Vorrichtung 13 umfasst optische Einrichtungen und eine Datenverarbeitungseinheit 12 zum Verarbeiten und speichern der Daten, die von den optischen Einrichtungen gewonnen werden.

Eine Aufnahmevorrichtung (nicht dargestellt) dient zur Aufnahme und Fixierung der Probe bzw. des Substrats. Die Aufnahmevorrichtung kann in einer besonderen Ausführungsform in einer Z-Richtung je nach Bedarf bewegt werden. Weiter ist eine Rotation und/oder ein Kippen der Aufnahmevorrichtung möglich.

Die Aufnahmevorrichtung kann in einem Temperaturbereich zwischen 0°C und 1000°C, vorzugsweise zwischen 0°C und 500°C, noch bevorzugter zwischen 0°C und 400°C, am bevorzugtesten zwischen 0°C und 350°C beheizt und temperiert werden. Die Aufnahmevorrichtung kann alternativ auch mit einer Kühlvorrichtung gekühlt werden. Beispielsweise kann in einer ersten Ausführungsform die Aufnahmevorrichtung in einem Temperaturbereich zwischen -196°C und 0°C gekühlt werden. Die Temperatur der Aufnahmevorrichtung kann mit einer Temperaturregelanordnung eingestellt werden. Die Aufnahmevorrichtung kann zusätzlich über Sensoren verfügen (nicht dargestellt), mit deren Hilfe physikalische und/oder chemische Eigenschaften vermessen werden können. Diese Sensoren können beispielsweise Temperatursensoren sein.

In einer weiteren bevorzugten oder auch eigenständigen Ausführungsform der Aufnahmevorrichtung beinhaltet die Aufnahmevorrichtung eine Flüssigkeitszelle, die

Messungen unter Flüssigkeiten erlaubt. In einer speziellen Ausführungsform ist die Flüssigkeitszelle eine Durchflusszelle. Somit können Mehrschichtsysteme mit oder ohne (Oberflächen-)Strukturierung in flüssiger Umgebung gemessen werden. Erfindungsgemäß kann mit der Flüssigkeitszelle in einer speziellen Anwendung die elektrochemische Rückantwort eines Mehrschichtsystems charakterisiert werden. Die Flüssigkeitszelle kann dafür auch als elektrochemische Zelle konstruiert sein mit Referenzelektrode, Gegenelektrode und optischen Fenstern für die spektroskopisch ellipsometrischen Messungen.

Die erfindungsgemäße Vorrichtung 13 kann vorteilhaft auch im Vakuum oder bei Umgebungsdruck unter einer Gasatmosphäre betrieben werden. Bevorzugt ist die Gasatmosphäre eine Inertgasatmosphäre, beispielsweise Stickstoff ( $N_2$ ). Somit können Mehrschichtsysteme mit Strukturierung untersucht werden, die beispielsweise gegen Feuchtigkeit oder gegen Sauerstoff empfindlich sind.

Die erfindungsgemäße Vorrichtung 13 kann bevorzugt evakuiert und beheizt werden. Die Vorrichtung weist Mittel zur Einleitung einer oder mehrerer gasförmigen Komponenten auf. Eine Beladevorrichtung, bevorzugt eine Schleuse, erlaubt die Beladung der Proben. In einer alternativen Ausführungsform kann die Vorrichtung so aufgebaut werden, dass in situ Messungen durchgeführt werden können.

Anstelle der in Figur 3 gezeigten Ausführungsform sind alternative Ausführungsformen denkbar, die u.a. Kombinationen von spektrometrischen und/oder ellipsometrischen bzw. scatterometrischen Messverfahren ermöglichen. Denkbar sind alle erfindungsgemäß bereits genannten Messtechniken.

Ein computergestütztes Datenverarbeitungssystem 12 speichert und verarbeitet die Daten, die von den optischen Einrichtungen gewonnen werden, zur Simulation der erfindungsgemäßen Mehrschichtsysteme (mit oder gegeben falls ohne Strukturierung) mit den erfindungsgemäß weiter entwickelten Simulationsalgorithmen. Die erfindungsgemäßen Simulationsmodelle ermöglichen erstmals mit der vorgeschlagenen Methode mehrere dünne Schichten sowie eine (Oberflächen-)Strukturierung gleichzeitig und mit einer hohen Zuverlässigkeit zu erfassen und zu charakterisieren.

## Bezugszeichenliste

|                                                    |                                                                        |
|----------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| 1, 1', 1''                                         | Substrat/Mehrschichtsystem mit (Oberflächen-)Strukturierung            |
| 2                                                  | Substrat-Grundmaterial mit Brechungsindex $n_s$                        |
| 3                                                  | Erste Schicht mit Brechungsindex $n_1$                                 |
| 4                                                  | Zweite Schicht mit Brechungsindex $n_2$                                |
| 5                                                  | Dritte Schicht (n-te Schicht) mit Brechungsindex $n_3$ bzw. $n_n$      |
| 6, 6', 6''                                         | Oberste Schicht mit Oberflächenstrukturierung und Brechungsindex $n_o$ |
| 6o, 6'o, 6''o                                      | Oberfläche der obersten Schicht                                        |
| 7, 7', 7'', 7''', 7 <sup>IV</sup> , 7 <sup>V</sup> | Struktur                                                               |
| 8                                                  | Strahlungsquelle                                                       |
| 9                                                  | Polarisator                                                            |
| 10                                                 | Analysator                                                             |
| 11                                                 | Detektor                                                               |
| 12                                                 | Steuer- und Rechen-Einheit                                             |
| 13                                                 | Erfindungsgemäße optische Vorrichtung                                  |
| 110                                                | Verfahrensschritt                                                      |
| 120                                                | Verfahrensschritt                                                      |
| 130                                                | Verfahrensschritt                                                      |
| 140                                                | Verfahrensschritt                                                      |
| 150                                                | Verfahrensschritt                                                      |