

X線小角散乱法を用いた半導体デバイス構造の3次元形状計測

後藤 拓実*

ハイアスペクトな深穴構造のエッチングは、近年の半導体デバイス製造におけるキーテクノロジーの一つといえる。エッチングプロセスの開発と制御において、その加工形状を高精度に評価することは非常に重要である。X線小角散乱法は、このような深穴の形状を評価するために有用な技術として注目されている。本テクニカルノートでは、形状計測法の原理およびシミュレーションの結果をもとに測定の感度について解説する。また、X線小角散乱法を用いて、300 mm ウエハの表面に形成された深穴形状を測定した結果に関して報告する。

1. はじめに

ここ数年のデジタルテクノロジーの進化はすさまじい。つい十年ほど前には、空想の存在の域でなかったAI、自動運転、メタバースに代表されるあらたな技術はすでに現実社会にも浸透しつつあり、我々の社会生活をより豊かにしていくことは確実であろう。このようなデジタル技術を実現するためには、高性能な半導体デバイスを欠かすことはできない。これまでと比較して、最先端の半導体デバイスには、莫大なデータ容量の管理や処理速度の大幅な性能アップが要求されている。半導体の技術進歩は、デバイスを微細化しその集積率を向上させることで行われてきたが、物理的な微細化の限界に到達しつつあった。

そこで、3次元的に集積させる構造が現在の半導体製造・開発において主流になっている。例えば、NAND型フラッシュメモリーの場合、約200層のメモリーセルを積層させた構造の量産化が進みつつある。このようなデバイスの製造工程の一つに、約百ナノメートルの直径に対して、深さ数マイクロメートルに達するハイアスペクトな深穴の加工がある。この深穴形状はデバイスの品質に直結するため、ハイアスペクト形状のエッチングプロセスは、近年の半導体加工技術のキーテクノロジーといえる。ハイアスペクト構造を特徴づけるパラメータとして、深穴の直径(半導体の計測業界ではCritical dimension: CDと呼ばれる)、傾き、深さなどが代表としてあげられる。これらのパラメータを精密に制御し、ウエハ全面にわたって均一なハイアスペクト形状を形成することが、現代のエッチングプロセスにとって重要である。

エッチングプロセスは加工形状の計測結果に基づき条件を最適化するため、正確な形状計測技術が要求される。半導体デバイスの形状測定方法として、光散乱法による計測(Optical CD metrology: OCD)、走査型電子顕微鏡(scanning electron microscopy: SEM)や透過型電子顕微鏡(transmission electron microscopy: TEM)などが主に利用されている。

OCDによる計測手法は、スループットの面で利点があるがそのプローブ波長の性質上ハイアスペクト構造を高い分解能で計測することが難しい。SEMやTEMによる計測は、高分解能で実像を直接観察できるがサンプルの破壊を必要とする。また、観察領域が狭いため、ウエハ全面の計測には向かない。

本稿で紹介するX線小角散乱法は、古くから形状を非破壊で計測できることが知られている。2000年頃からX線小角散乱法を半導体デバイスの形状計測に適用する研究が精力的に進められ⁽¹⁾、リガクは量産工場向けの微小角入射X線小角散乱装置(XTRAIA CD-3000G)をリリースした。微小角入射X線小角散乱装置は、パターンの深さが約百ナノメートル程度のプレーナー型メモリーデバイスやフォトリソパターンやナノインプリントパターンの形状測定に利用されてきた⁽²⁾⁻⁽⁴⁾。しかし、微小角入射配置では、X線の吸収距離の関係上、深さ数マイクロメートルの穴の底にまでX線を到達させることは不可能である。そこで、我々は深穴形状の計測が可能な透過型の小角散乱配置の装置を新たに開発し、2020年から市場への投入を開始した。本テクニカルノートでは、透過型X線小角散乱法の基本的な測定原理の紹介と300 mmのシリコンウエハの表面上に形成された1 μm の深穴構造パターンの形状計測を行い、ウエハ全面のエッチング状態の評

*株式会社リガク X線研究所

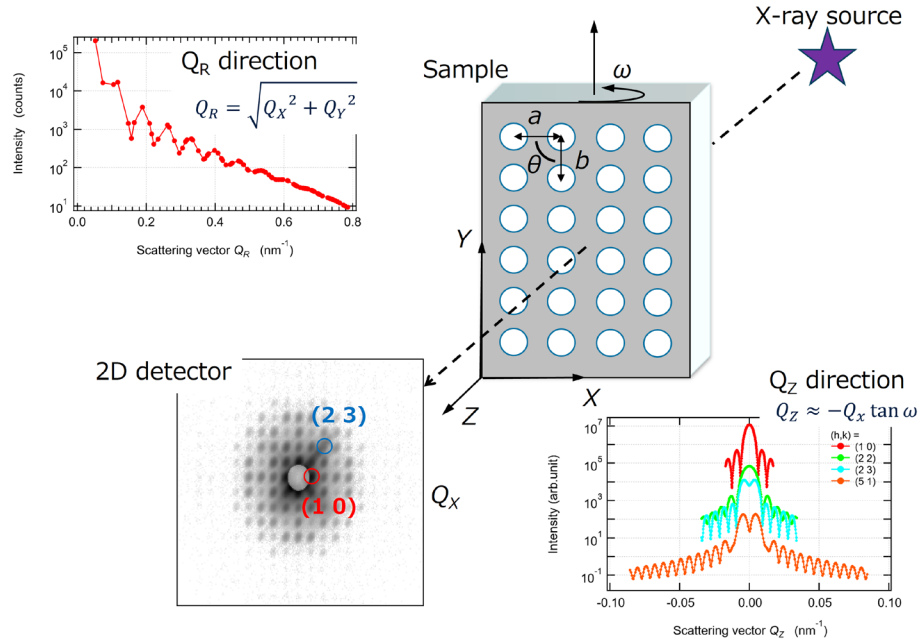


図1. 透過型X線小角散乱法の測定配置図.

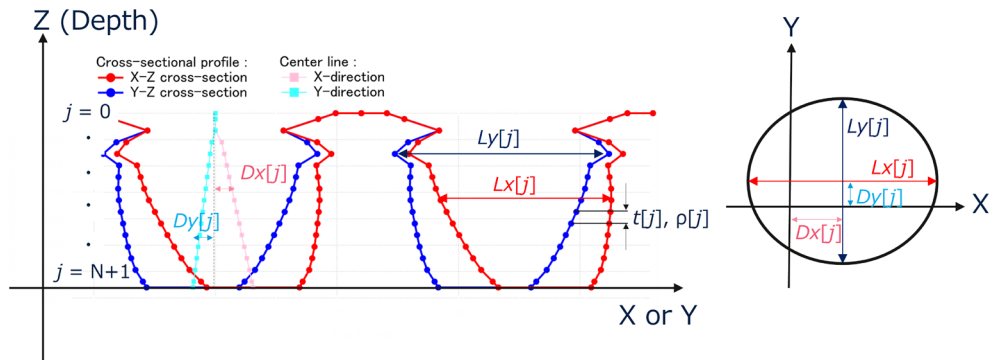


図2. 透過型X線小角散乱法解析モデルの概念図.

価をした結果について報告する。

2. 透過型X線小角散乱法の測定原理

透過配置のX線小角散乱を採用することで、深さが数マイクロメートルに達する深穴を計測することが可能となる。図1に透過型X線小角散乱法の測定配置図を示す。電子密度分布 $\rho(r)$ を持つ物体にX線を照射したときX線は散乱される。このとき散乱ベクトル $\mathbf{Q}$ を用いると観測されるX線散乱強度 $I(\mathbf{Q})$ は式(1)に記述できる。特に電子数密度分布が周期構造をもった場合、周期構造に対応したX線回折が観察される。

単位格子の軸の長さ a, b と軸間の角度 θ で表される周期構造に対して、X線を照射した場合について考える。光学系のX軸は格子の a 軸に平行であり、Y軸はX軸に垂直とする。Z軸は試料表面に対しての法線方向である。このとき、X線回折が観察される位置は、格子定数 a, b, θ , XY方向の散乱ベクトル Q_X, Q_Y および回折指数 h, k を用いて式(2)で記述される。二次元検

出器を用いることで、回折条件を満たす複数の回折点のX線強度を一度に計数することができる。

散乱ベクトル $\mathbf{Q}_R$ は $Q_R = \sqrt{Q_X^2 + Q_Y^2}$ で定義される。サンプルに対して垂直にX線を入射させた際に取得した散乱像に対して、散乱ベクトル $\mathbf{Q}_R$ を横軸にとり、各回折点の強度をプロットさせると周期的な強度プロファイルが観測される。このプロファイルからは、X線照射領域の平均的な形状の情報を取得することができる。

また、三次元的な構造取得のためには、深さ方向に対応する散乱ベクトル Q_Z の情報を取得する必要がある。サンプルを ω 回転させることで、散乱ベクトル $\mathbf{Q}_Z$ は、 $Q_Z \approx -Q_X \tan \omega$ の式に従って変化する。サンプルの回転角度に応じた回折像を複数枚撮影し、各回折点のX線強度の Q_Z 方向依存性を解析することで、深さや側壁の形状を決定することが可能となる。

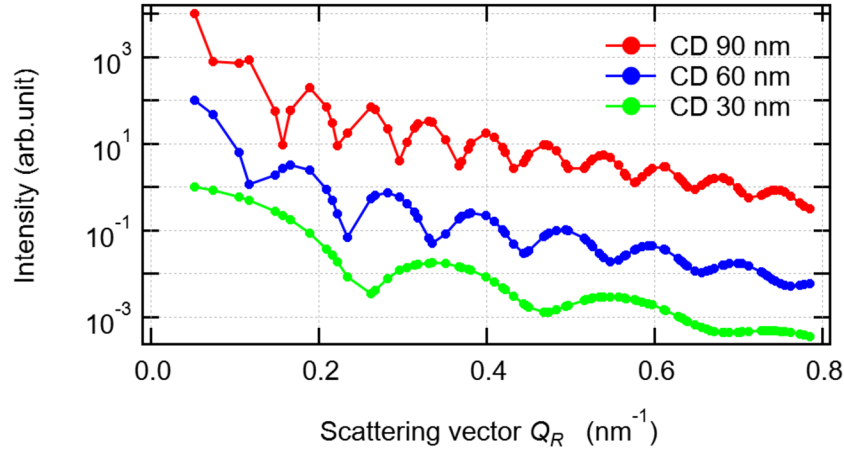


図3. 円筒形状 Q_R 方向散乱波形のCD依存性.

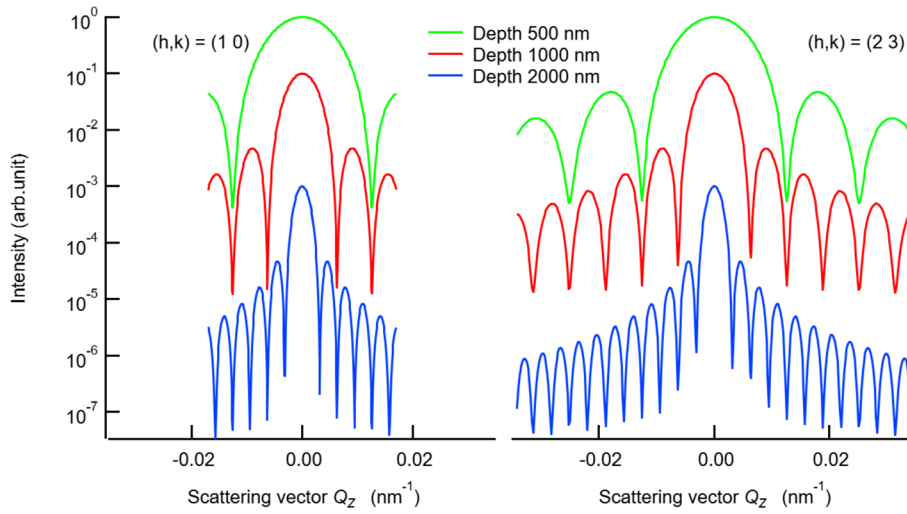


図4. 円筒形状 Q_z 方向散乱波形の深さ依存性.

$$I(Q) = \left| \int_V \rho(r) e^{-iQ \cdot r} dr \right|^2 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} Q_x &= 2\pi \frac{h}{a} \\ Q_y &= 2\pi \left(-\frac{h}{a \tan \theta} + \frac{k}{b \sin \theta} \right) \quad (h, k: \text{integer}) \end{aligned} \quad (2)$$

この観測された散乱強度を、図2の形状パラメータを用いた散乱体モデルを用いて計算する。形状モデルは、散乱体を深さ方向に(N+1)層に分割し、各層毎にXY方向のCD(L_x, L_y)、XY方向の断面形状の中心位置(D_x, D_y)、層の膜厚(t)、側壁の材料電子密度(ρ)という6つのパラメータを与えて表現される。実験で得られた散乱波形と計算波形が一致するようにモデルのパラメータを最適化することで、散乱体の形状が解析される⁽⁵⁾。

3. 散乱体の形状が小角散乱強度に与える影響

散乱体の形状変化が散乱波形に与える影響をシミュレーションで示す。散乱体をピッチ120 nmの正方格

子状に配置された深穴と設定した。シミュレーションの条件は、サンプルの回転角度を $-18^\circ \sim 18^\circ$ 、データ取得間隔を0.06°とした。また、すべてのシミュレーションにおいて形状モデルの層数を40に設定し、散乱強度を計算した。始めに、 Q_R 方向の散乱強度から得られる情報について議論する。

3.1. 散乱体形状が Q_R 方向の散乱波形に与える影響

深さ1000 nmの円筒形状の深穴に対する、 Q_R 方向散乱波形のCD依存性を比較した。図3にCDが30 nm, 60 nm, 90 nmの時の Q_R 方向散乱波形を示す。

シミュレーションの結果は、CDが大きくなるにしたがってフリンジ周期が短くなることを示している。このフリンジ間隔(ΔQ_R)と平均CD(CD_{Ave})には、 $CD_{Ave} \approx 2\pi/\Delta Q_R$ という関係がある。

3.2. 散乱体形状が Q_z 方向の散乱波形に与える影響

3.2.1. 深さ

次に Q_z 方向の散乱波形から得られるモデルパラメータについて述べる。

CD 90 nmの円筒形状に対して、深さを500 nm, 1000 nm, 2000 nmと変化させた場合の回折点数

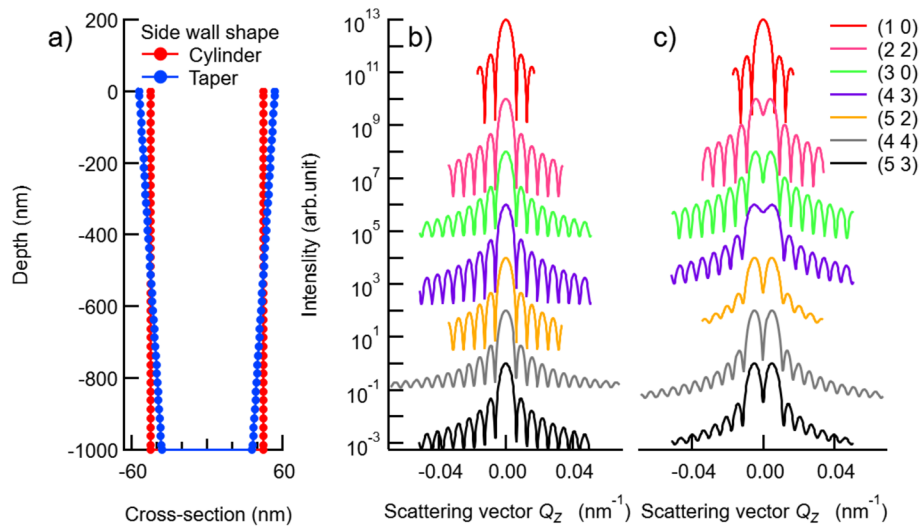


図5. Q_z 方向散乱波形の側壁角度依存性.

a) 計算モデル, b) 円筒モデルの Q_z 方向散乱波形, c) テーパーモデルの Q_z 方向散乱波形.

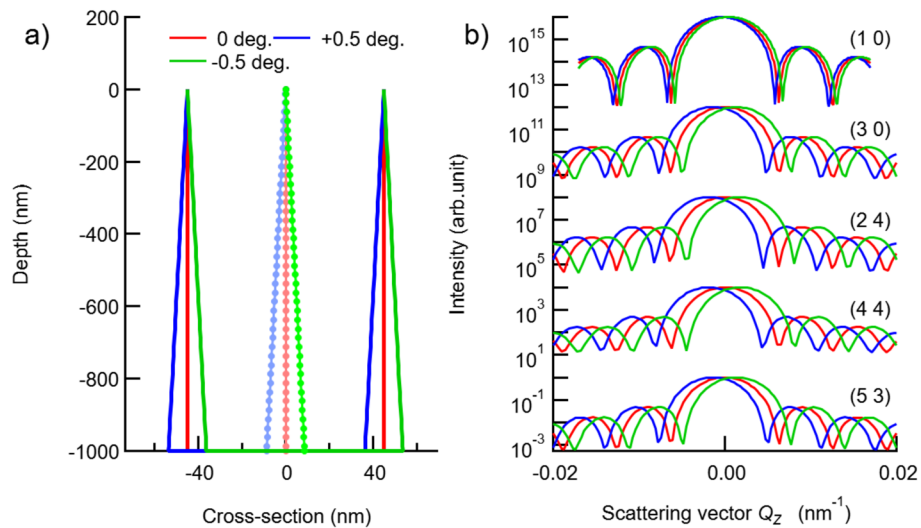


図6. 円筒形状 Q_z 方向散乱波形のチルト角度依存性.

a) 計算モデル, b) 各モデルの Q_z 方向散乱波形

(1 0), (2 3)で観測される Q_z 方向散乱波形の深さ依存性を図4に示す.

穴の深さが深くなるにつれて、各回折点の散乱強度のフリッジ周期が短くなっていくことが確認できる。 Q_z 方向の散乱波形のフリッジ間隔(ΔQ_z)と穴の深さ(Depth)には、近似的に $Depth \approx 2\pi/\Delta Q_z$ の関係がある.

3.2.2. 側壁角度

次に深穴の側壁角度が変化した場合の感度を議論する.

シミュレーションモデルとして図5 a)に示すような穴の深さ1000 nm, CD 90 nmの円筒形状と穴の深さ1000 nm, 平均CD 90 nm, 側壁のテーパー角度88°としたテーパー形状から得られる Q_z 方向の散乱強度を計算した. 円筒モデルの散乱強度を図5 b), テーパーモデルの散乱強度を図5 c)に示す.

円筒モデルで得られる散乱強度は、すべての回折点

において $Q_z=0 \text{ nm}^{-1}$ 付近で強度の最大値を示す. また、干渉縞の周期と位相はすべての回折点で一致している. 一方、テーパーモデルで得られる散乱強度は、必ずしも $Q_z=0 \text{ nm}^{-1}$ で最大強度とならない. これは、側壁角度によって散乱波形の位相が変化するためである. この各回折点の Q_z 方向波形の位相変化を解析することで、深穴の側壁角度が得られる.

3.4. チルト角度

最後に、深穴が表面に対して、傾斜した場合の Q_z 方向散乱波形のチルト角度依存性について示す. CD 90 nm, 深さ1000 nmの円筒形状に対して、X方向に $-0.5^\circ, 0^\circ, 0.5^\circ$ のチルト角度を与えたモデルを作成し、 Q_z 方向の散乱強度を計算した. 作成したモデルを図6 a), 計算結果を図6 b)に示す.

チルト角度 0° の際の Q_z 方向散乱波形と比較すると、チルト角度に応じて各回折点のピーク位置がシフトし



図7. XTRAIA CD-3000Tシリーズの外観図。

ている。ピーク位置のシフト ($Q_{Z,shift}$) と X,Y 方向のチルト角度 (θ_X, θ_Y) には $Q_{Z,shift} = -Q_X \tan \theta_X - Q_Y \tan \theta_Y$ の関係があり、 Q_Z 方向の散乱波形シフト量からチルト角度を求めることができる。

以上のシミュレーション結果から、平均CD、深さ、側壁角度、チルト角度の変化は各散乱波形に別々の影響を与えることがわかる。透過型X線小角散乱法による測定は、ハイアスペクト形状の特徴づけに重要である上記のパラメータを、観察することが可能な手法であると言える。

4. 300 mm ウエハ上に作製された深穴パターンの測定

4.1. 実験装置

図7にリガクが開発した透過型X線小角散乱装置 XTRAIA CD-3000Tシリーズの外観を示す。約800 μm

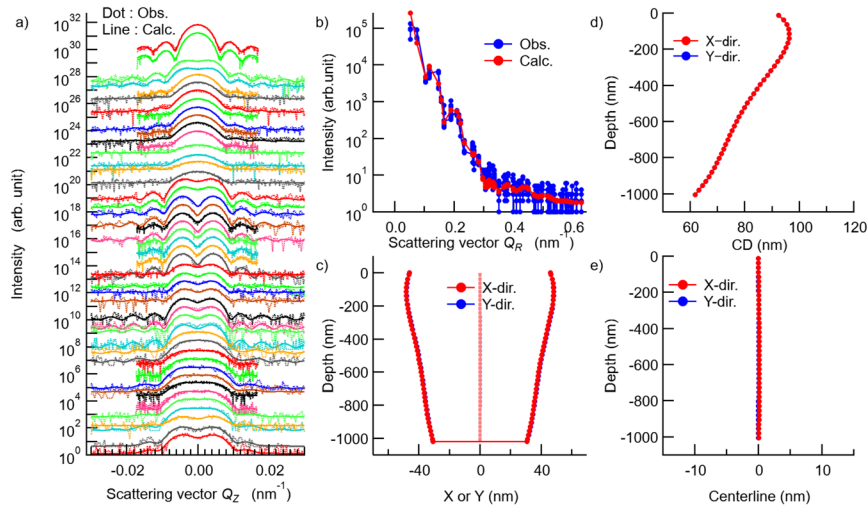


図8. ウエハ中央のチップに形成された深穴パターンの測定結果と解析結果。

a) Q_Z 方向の測定波形と計算波形, b) Q_R 方向散乱強度の測定結果と計算結果, c) 解析で得られた X-Z, Y-Z 断面図, d) CD プロファイル e) センターラインプロファイル。

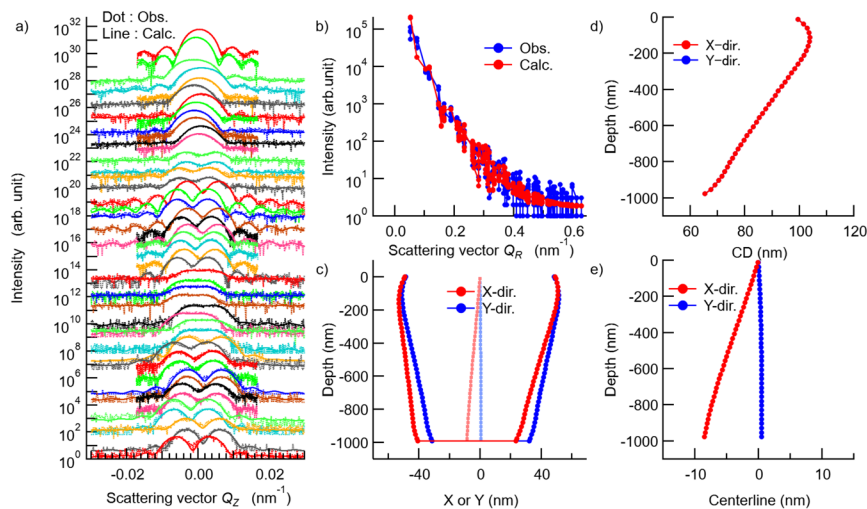


図9. ウエハ左端のチップに形成された深穴パターンの測定結果と解析結果。

a) Q_Z 方向の測定波形と計算波形, b) Q_R 方向散乱強度の測定結果と計算結果, c) 解析で得られた X-Z, Y-Z 断面図, d) CD プロファイル e) センターラインプロファイル。

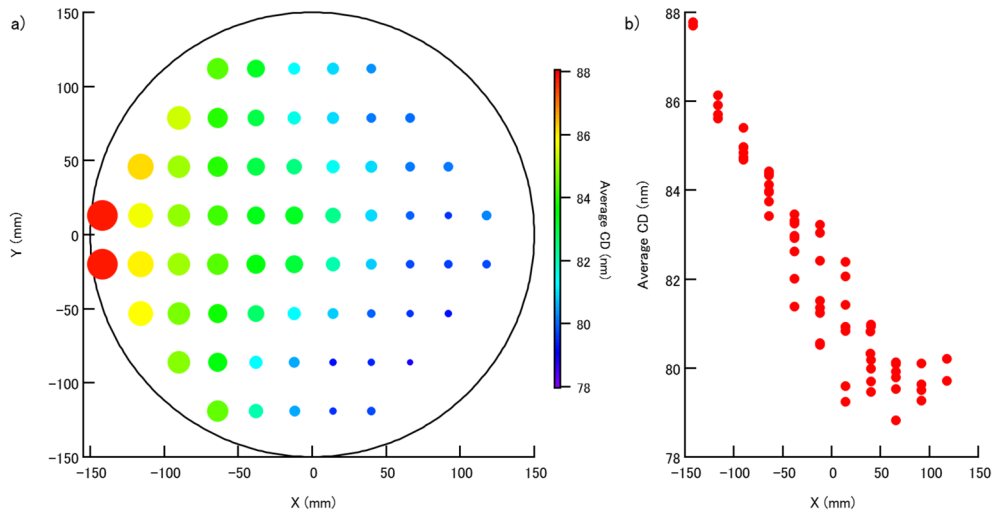


図10. ウエハ全面64チップの平均CD値分布.

a) ウエハ面内平均CD値分布のカラーマップ, b) ウエハX座標に対する平均CD値の分布.

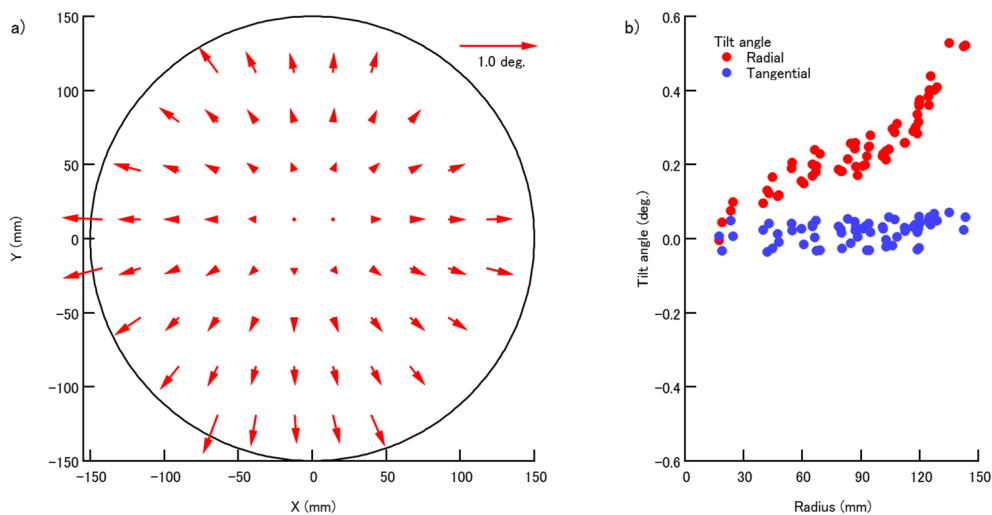


図11. ウエハ全面64チップのチルト角度分布.

a) 観測されたチルト角度のベクトルマップ, 矢印の始点がウエハ表面側, 終点が底面側を示す.

b) ウエハ全面でのウエハ動径方向と接線方向のチルト角度分布.

厚のウエハを透過する必要があることから、X線源として回転対陰極型のモリブデンターゲット (X線波長 0.071 nm) を採用し、X線ミラーで単色化とX線の収束を行っている。サンプルの裏面からX線は照射され、装置の下側から、上側へとX線が通過し、装置上部に取り付けられた大面積ハイブリット型2次元検出器 (HyPix6000 HE) で散乱X線強度を計数する。測定時にウエハ表面と入射X線が直交する基準を与えるため、オートコリメータでウエハ表面のそりを計測し、X線の入射角度を校正する機構を搭載している。

4.2. 深穴パターンの測定と3次元形状解析

300 mm ウエハ表面に深穴パターンをエッチング加工したサンプルを準備した。深穴はピッチ 120 nm の正方格子の周期パターンで、300 mm ウエハ上に 64 個のチップが作製されている。測定の際は、ウエハを $-18^{\circ} \sim 18^{\circ}$ の範囲を 3.6°/分で回転させ、0.06°間隔で

X線散乱像を取得した。1測定点あたりのX線照射時間は10分である。

図8にウエハ中央部のチップの測定で得られた散乱波形とフィッティング波形、また、フィッティングで求められた断面形状を示す。この解析では、深穴を深さ方向に40層に分割し、各層の形状パラメータを最適化した。

図8 c)–e) に深穴形状の解析結果を示す。深穴の深さ 1017 nm、平均CDは 80.9 nmであった。穴の深さが深くなるにしたがってCDが小さくなる傾向があり、このときの側壁角度は 87.9° であった。またサンプル表面から深さ 200 nm 付近でCDが大きくなる Bowing 形状を持っている。センターラインはほぼ 0 nm であることから、ウエハ中央部に形成された深穴には、チルトがないと言える。

図9にウエハ左端のチップの測定で得られた散乱波

形とフィッティング波形、また、フィッティングで求められた断面形状を示す。CDプロファイル形状の傾向は中央部に相似であるが、平均CDは87.7 nmであり、やや大きくなっていることが確認された。また、図9a)の Q_z 方向の散乱波形の位相は大きく変化しており、解析結果からウエハのX方向に 0.52° 傾いてホールが形成されていることがわかった。

4.3. ウエハ全面のエッチング状態評価

図10にウエハ面内全64チップの測定で得られた平均CDの分布を示す。ウエハ右側から左側に向かって深穴の平均CDが大きくなっていることがわかる。このような、深穴CDの面内分布を非破壊で観察する計測は、エッチング条件の最適化に有用な情報を取得できる。

最後に、ウエハ面内のチルト角度傾向を解析した。図11 a)は観測されたチルトのベクトルマップである。測定結果から、すべてのチップでホールがウエハ外側に向いて形成されていることが確認できる。図11 b)にウエハの動径方向と接線方向のチルト角度分布を示す。チルトの方向はほとんど動径方向の成分でしめられており、ウエハエッジに近づくにつれてチルト角度が徐々に大きくなっていく様子が観察された。

5. まとめ

ハイアスペクト構造の半導体デバイスの高精度な測定方法であるX線小角散乱法を用いた形状計測についての解説を行った。シミュレーションをもとにした議論から、本手法はハイアスペクト構造の特徴づけを行うために必要な形状パラメータに対して感度があることを示した。また、300 mm ウエハ上に形成された深穴構造を測定し、平均CD、チルト角度などを解析す

ることで、ウエハ全面でのエッチング状態の評価を行った例を示した。

本測定手法は、断面形状のモデリングにより複雑な3次元形状の解析^{(6),(7)}、ピラーやスリット形状の解析を行うこともできる。

ハイアスペクト構造を持つ半導体デバイスには、3DNANDのチャネルホールやスリット、DRAMのキャパシタホール、CMOSイメージングセンサーのトレンチ構造などがあげられるが、これらの構造を非破壊かつ高精度で測定可能な透過型X線小角散乱法は、3次元形状をもつ半導体デバイスの評価をするための非常に有用な手法になると考えられる。半導体デバイス構造の3次元化が進む中で、X線による計測技術が、装置開発や、デバイスの品質管理など多岐にわたり活用されていくことを期待する。

参考文献

- (1) W. Wu, R. J. Kline, R. L. Jones, H. J. Lee, E. K. Lin, D. F. Sunday, C. Wang, T. Hu and C. L. Soles: *J. Micro/Nanopattern. Mater. Metrol.*, **22** (3) (2023), 031206, 1–15.
- (2) K. Omote, Y. Ito and Y. Okazaki: *Proc. SPIE*, **7638** (2010), 763811, 1–8.
- (3) Y. Ito, A. Higuchi and K. Omote: *Proc. SPIE*, **9778** (2016), 97780 L, 1–8.
- (4) E. Yamanaka, R. Taniguchi, M. Itoh, K. Omote, Y. Ito, K. Ogata and N. Hayashi: *Proc. SPIE*, **9984** (2016), 99840 V, 1–8.
- (5) Y. Ito, T. Goto, R. Suenaga and K. Omote: *Jpn. J. Appl. Phys.*, **62** (2023), 046501, 1–6.
- (6) R. Suenaga, Y. Ito, T. Goto and K. Omote: *Jpn. J. Appl. Phys.*, **62** (2023), 096502, 1–8.
- (7) R. Suenaga, Y. Ito, T. Goto and K. Omote: *Proc. SPIE*, **12496** (2023), 12496A, 1–7.