

[19] 中华人民共和国国家知识产权局

[51] Int. Cl.

G01B 11/24 (2006.01)

G01N 21/00 (2006.01)



[12] 发明专利申请公布说明书

[21] 申请号 200680041259.4

[43] 公开日 2008年12月24日

[11] 公开号 CN 101331378A

[22] 申请日 2006.9.5

[21] 申请号 200680041259.4

[30] 优先权

[32] 2005.9.2 [33] US [31] 11/218,884

[86] 国际申请 PCT/US2006/034610 2006.9.5

[87] 国际公布 WO2007/028164 英 2007.3.8

[85] 进入国家阶段日期 2008.5.4

[71] 申请人 东京毅力科创株式会社

地址 日本东京都

[72] 发明人 李世芳 施吉·科玛罗夫 宫城真

斯利韦罗·哈拜罗 鲍君威

乔格·比斯彻夫

[74] 专利代理机构 北京东方亿思知识产权代理有
限责任公司

代理人 柳春雷

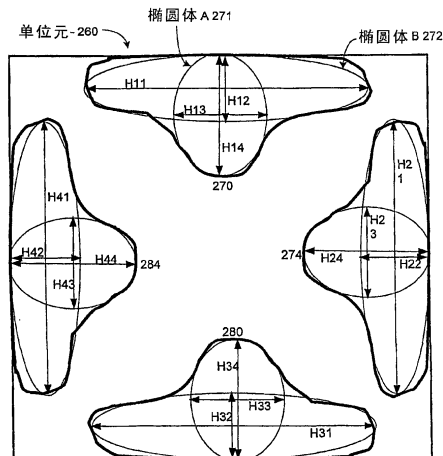
权利要求书5页 说明书25页 附图18页

[54] 发明名称

在光学计量中为重复结构选择单位元配置

[57] 摘要

为了在光学计量中选择重复结构的单位元配置，为重复结构定义多个单位元配置。每个单位元配置由一个或多个单位元参数来定义。所述多个单位元配置中的各个单位元在至少一个单位元参数方面彼此不同。使用一个或多个选择标准来选择所述多个单位元配置中的一个。然后可以利用所选择的单位元配置来表征重复结构的俯视图轮廓。



1. 一种针对光学计量而对形成于晶片上的重复结构进行建模的方法，该方法包括：

a) 定义所述重复结构的多个单位元配置，每个单位元配置由一个或多个单位元参数定义，其中，各个所述单位元配置在至少一个单位元参数方面彼此不同；

b) 基于一个或多个选择标准，从所述多个单位元配置中选择单位元配置；以及

c) 利用所选择的单位元配置来表征所述重复结构的俯视图轮廓。

2. 如权利要求 1 所述的方法，其中，所述一个或多个单位元参数包括节距、面积和节距角。

3. 如权利要求 2 所述的方法，其中，所述一个或多个选择标准包括最小节距、最小面积和/或与 90 度相差最小的节距角。

4. 如权利要求 3 所述的方法，还包括：

从所述多个单位元配置中选择具有所述最小节距的单位元配置；

如果多个单位元配置具有相同的最小节距，则选择具有所述最小面积的单位元配置；以及

如果多个单位元配置具有相同的最小面积，则选择具有所述与 90 度相差最小的节距角的单位元配置。

5. 如权利要求 1 所述的方法，其中，表征俯视图轮廓的步骤包括：

将一个或多个基本形状拟合到被包围在所选择的单位元配置中的一个或多个特征的一个或多个部分的俯视图轮廓。

6. 如权利要求 1 所述的方法，还包括：

基于衍射信号灵敏度来优化计量设备变量。

7. 如权利要求 6 所述的方法，其中，优化计量设备变量的步骤包括：

选择所述计量设备变量中的一个或多个；以及

在相应的范围上变动所选择的一个或多个计量设备变量的值，同时将任何未选择的计量设备变量保持为恒定值。

8. 如权利要求 7 所述的方法, 其中, 所述一个或多个计量设备变量包括方位角、入射角、波长范围和/或计量设备设置变量。

9. 一种利用光学计量模型来确定形成于晶片上的重复结构的轮廓参数的方法, 所述光学计量模型具有与所述结构的俯视图相关联的轮廓参数和与所述结构的横截面视图相关联的轮廓参数, 所述方法包括:

a) 定义所述重复结构的多个单位元配置, 每个单位元配置由一个或多个单位元参数定义, 其中, 各个所述单位元配置在至少一个单位元参数方面彼此不同;

b) 基于一个或多个选择标准, 从所述多个单位元配置中选择单位元配置;

c) 利用所选择的单位元配置来表征所述重复结构的俯视图轮廓;

d) 对于所选择的单位元配置, 针对衍射信号灵敏度来优化计量设备变量;

e) 选择用于表示所述结构的俯视图轮廓中与所选择的单位元配置对应的变动的轮廓参数;

f) 选择与所述结构的横截面视图轮廓相关联的轮廓数据;

g) 将所选择的表示所述结构的所述俯视图轮廓和所述横截面视图轮廓的轮廓参数集成到光学计量模型中;

h) 优化所述光学计量模型;

i) 利用经优化的光学计量模型来创建轮廓参数和仿真衍射信号的组;

j) 利用所创建的仿真衍射信号的组和一个或多个测得的衍射信号, 来提取最佳匹配仿真衍射信号;

k) 当所述最佳匹配仿真衍射信号与所述测得的衍射信号在一个或多个匹配标准内不匹配时, 修正所述表征和/或对轮廓参数的选择; 以及

l) 迭代 e)、f)、g)、h)、i)、j) 和 k), 直到所述最佳匹配仿真衍射信号与所述测得的衍射信号在所述一个或多个匹配标准内匹配。

10. 如权利要求 9 所述的方法, 其中, 选择单位元配置的步骤包括:

从所述多个单位元配置中选择具有最小节距的单位元配置;

如果多个单位元配置具有相同的最小节距, 则选择具有最小面积的单

位元配置；以及

如果多个单位元配置具有相同的最小面积，则选择具有与 90 度相差最小的节距角的单位元配置。

11. 如权利要求 9 所述的方法，其中，优化计量设备变量的步骤包括：

选择所述计量设备变量中的一个或多个；以及

在相应的范围上变动所选择的一个或多个计量设备变量的值，同时将任何未选择的计量设备变量保持为恒定值。

12. 如权利要求 11 所述的方法，其中，所述一个或多个计量设备变量包括方位角、入射角、波长范围和/或计量设备设置变量。

13. 如权利要求 11 所述的方法，其中，所述衍射信号灵敏度被表示为对于计量设备变量的单位改变而在所述仿真衍射信号中的改变。

14. 如权利要求 11 所述的方法，其中，所述衍射信号灵敏度被表示为误差平方和的量度。

15. 如权利要求 9 所述的方法，其中，所述经优化的光学计量模型用于为机器语言系统创建训练数据集，该训练数据集包括轮廓参数和相应的仿真衍射信号。

16. 如权利要求 9 所述的方法，其中，所述经优化的光学计量模型用于利用回归技术来确定与测得衍射信号相对应的轮廓参数。

17. 如权利要求 9 所述的方法，其中，所述经优化的光学计量模型用于创建轮廓参数和相应的衍射信号的库。

18. 如权利要求 17 所述的方法，其中，所述轮廓参数和相应的衍射信号的库用于从测得的衍射信号来确定轮廓参数，所述测得的衍射信号是从耦合到制造单元的计量系统所获得的。

19. 一种用于对形成于晶片上的重复结构进行建模的系统，该系统包括：

单位元配置选择器，其被配置为定义所述重复结构的多个单位元配置，并且基于一个或多个选择标准，选择所述多个单位元配置中的一个，其中，每个单位元配置由一个或多个单位元参数定义，并且其中，所述各

个所述单位元配置在至少一个单位元参数方面彼此不同；以及

与所述单位元配置选择器相连的预处理器，其中，所述预处理器被配置用于利用所选择的单位元配置来表征所述重复结构的俯视图轮廓。

20. 如权利要求 19 所述的系统，其中，所述单位元配置选择器被配置用于：

从所述多个单位元配置中选择具有最小节距的单位元配置；

如果多个单位元配置具有相同的最小节距，则选择具有最小面积的单位元配置；以及

如果多个单位元配置具有相同的最小面积，则选择具有与 90 度相差最小的节距角的单位元配置。

21. 如权利要求 19 所述的系统，还包括：

与所述单位元配置选择器相连的信号灵敏度优化器，其中，所述信号灵敏度优化器被配置为针对衍射信号灵敏度来优化计量设备变量；以及

与所述预处理器相连的模型优化器，其中，所述模型优化器被配置为优化基于对所述重复结构的所述俯视图轮廓的表征所定义的光学计量模型。

22. 如权利要求 19 所述的系统，还包括：

光学计量设备，其被配置为从所述重复结构获得测得的衍射信号；以及

比较器，其被配置为将所述测得的衍射信号与利用所述光学计量模型所生成的仿真衍射信号进行比较。

23. 一种包含计算机可执行指令的计算机可读存储介质，所述计算机可执行指令用于使得计算机针对光学计量而对形成于晶片上的重复结构进行建模，所述计算机可读存储介质包括用于以下操作的指令：

a) 定义所述重复结构的多个单位元配置，每个单位元配置由一个或多个单位元参数定义，其中，各个所述单位元配置在至少一个单位元参数方面彼此不同；

b) 基于一个或多个选择标准，从所述多个单位元配置中选择单位元配置；以及

c) 利用所选择的单位元配置来表征所述重复结构的俯视图轮廓。

24. 如权利要求 23 所述的计算机可读存储介质，其中，用于选择单位元配置的指令包括用于以下操作的指令：

从所述多个单位元配置中选择具有最小节距的单位元配置；

如果多个单位元配置具有相同的最小节距，则选择具有最小面积的单位元配置；以及

如果多个单位元配置具有相同的最小面积，则选择具有与 90 度相差最小的节距角的单位元配置。

25. 如权利要求 23 所述的计算机可读存储介质，其中，用于表征俯视图轮廓的指令包括用于以下操作的指令：

将一个或多个基本形状拟合到被包围在所选择的单位元配置中的一个或多个特征的一个或多个部分的俯视图轮廓。

26. 如权利要求 23 所述的计算机可读存储介质，还包括用于以下操作的指令：

基于衍射信号灵敏度来优化计量设备变量。

27. 如权利要求 23 所述的计算机可读存储介质，其中，用于优化计量设备变量的指令包括用于以下操作的指令：

选择所述计量设备变量中的一个或多个；以及

在相应的范围上变动所选择的一个或多个计量设备变量的值，同时将所有未选择的计量设备变量保持为恒定值。

28. 如权利要求 27 所述的计算机可读存储介质，其中，所述一个或多个计量设备变量包括方位角、入射角、波长范围和/或计量设备设置变量。

在光学计量中为重复结构选择单位元配置

相关申请的交叉引用

本申请是 2005 年 2 月 18 日递交的题为“OPTICAL METROLOGY OPTIMIZATION FOR REPETITIVE STRUCTURES”、申请号为 11/061,303 的美国专利申请的部分延续申请，该申请通过引用而被全部结合于此。

技术领域

本发明涉及光学计量，更具体地，涉及针对重复结构的光学计量模型优化。

背景技术

光学计量涉及在一种结构上引导入射光束、测量所产生的衍射光束以及分析衍射光束以确定各种特性，例如该结构的轮廓。在半导体制造中，光学计量通常用于质量保证。例如，在半导体晶片上半导体芯片附近制造周期性光栅结构之后，光学计量系统用于确定周期性光栅的轮廓。通过确定周期性光栅结构的轮廓，可以评估用于形成周期性光栅结构的制造过程的质量，并且可以扩展到评估周期性光栅结构附近的半导体芯片。

在光学计量中，通常开发光学计量模型来测量结构。光学计量模型可以用计量模型变量表示。一般而言，在开发光学计量模型中允许浮动的计量模型变量的数目越大，利用光学计量模型获得的测量结果的准确度越高。然而，增大允许浮动的计量模型变量的数目也将会增大开发光学计量模型所需要的时间量。另外，在一些情况下，允许太多的计量模型变量会产生错误测量结果。

发明内容

在一个示例性实施例中，为重复结构定义多个单位元配置。每个单位元配置由一个或多个单位元参数来定义。所述多个单位元配置中的各个单位元在至少一个单位元参数方面彼此不同。用一个或多个选择标准来选择所述多个单位元配置中的一个。所选择的单位元配置然后可以用于表征重复结构的俯视图轮廓。

附图说明

通过参考以下结合附图的描述，可以最好地理解本发明，在附图中，相似的部分可以用相似的标号来指示：

图 1 是示例性光学计量系统的框图；

图 2A-2E 是表征半导体晶片上所形成的结构的示例性横截面视图轮廓；

图 3A-3D 图示出示例性重复结构；

图 4A 和图 4B 图示出单位元的示例性正交和非正交栅格的俯视图；

图 5 图示出在重复结构中包括多于一个的特征的示例性单位元；

图 6 图示出通常用于表征示例性重复结构的角度；

图 7A 图示出重复结构的俯视图；

图 7B 图示出重复结构的横截面视图；

图 8 图示出示例性非正交重复结构的单位元中的多个特征；

图 9 图示出单位元中的特征从示例性重复结构的正交单位元的理论中心的偏移；

图 10A 图示出单位元中的特征的宽度比；

图 10B 图示出单位元中的特征的矩形性表征；

图 11 是收集重复结构的轮廓形状可变性数据的示例性过程的流程图；

图 12 是优化重复结构的光学计量模型的示例性过程的流程图；

图 13 是用于表征重复结构的单位元的俯视图的示例性技术；

图 14 是用于表征具有多个特征的重复结构的俯视图的示例性技术；

图 15 是用于优化重复结构的光学计量模型的示例性系统；

- 图 16A 和图 16B 图示出示例性单位元配置；
图 17A 和图 17B 图示出示例性单位元配置；
图 18 是用于优化重复结构的光学计量模型的示例性方法的框图；
图 19 是用于优化重复结构的光学计量模型的示例性系统。

具体实施方式

以下的描述给出了许多具体配置、参数等。然而，应当认识到，这种描述不应作为对本发明范围的限制，而是作为对示例性实施例的描述来提供。

1. 光学计量

参照图 1，光学计量系统 100 可以用于检查和分析结构。例如，光学计量系统 100 可以用于确定晶片 104 上所形成的周期性光栅（periodic grating）102 的轮廓。如前所述，周期性光栅 102 可以形成于晶片 104 上的测试区域中，例如邻近形成于晶片 104 上的器件。可替换地，周期性光栅 102 可以形成于不干扰器件操作的器件区域中或者沿着晶片 104 上的划片（scribe）线而形成。

如图 1 所图示，光学计量系统 100 可以包括具有源 106 和检测器 112 的测光（photometric）设备。周期性光栅 102 被来自源 106 的入射光束 108 照亮。在本示例性实施例中，入射光束 108 以相对于周期性光栅 102 的法线 \vec{n} 为 θ_i 的入射角和方位角 Φ （即，入射光束 108 的平面和周期性光栅 102 的周期性方向之间的角度）而被引导至周期性光栅 102 上。衍射光束 110 以相对于法线 \vec{n} 为 θ_d 的角度离开并被检测器 112 接收。检测器 112 将衍射光束 110 转换为测得的衍射信号。

为了确定周期性光栅 102 的轮廓，光学计量系统 100 包括处理模块 114，处理模块 114 被配置用于接收测得的衍射信号并分析测得的衍射信号。如下所述，然后可以利用基于库的过程或基于回归（regression）的过程来确定周期性光栅 102 的轮廓。另外，也可以其他线性或非线性的轮廓提取技术。

2. 基于库的确定结构轮廓的过程

在基于库的确定结构轮廓的过程中，将测得的衍射信号与一个仿真衍射信号库进行比较。更具体地，库中的各个仿真衍射信号与假定的结构轮廓相关联。当在测得的衍射信号和库中的一个仿真衍射信号之间作出匹配时，或者当测得的衍射信号与一个仿真衍射信号的差别在预设标准或匹配标准内时，与相匹配的仿真衍射信号相关联的假定轮廓被认定为表示结构的实际轮廓。然后可以利用相匹配的仿真衍射信号和/或假定轮廓来判断结构是否是规范制造的。

因此，再次参照图 1，在一个示例性实施例中，在获得测得的衍射信号之后，处理模块 114 就将测得的衍射信号与存储在库 116 中的仿真衍射信号进行比较。库 116 中的各个仿真衍射信号可以与假定轮廓相关联。因此，当在测得的衍射信号和库 116 中的一个仿真衍射信号之间作出匹配时，与相匹配的仿真衍射信号相关联的假定轮廓可以被认定为表示周期性光栅 102 的实际轮廓。

可以通过利用一组参数来表征假定轮廓，然后变动这组参数以生成不同形状和尺寸的假定轮廓，从而生成存储在库 116 中的假定轮廓组。利用参数组来表征轮廓的过程可以称为参数化。

例如，如图 2A 所图示，假设假定的横截面视图轮廓 200 可以用分别定义其高度和宽度的参数 h_1 和 w_1 来表征。如图 2B 至图 2E 所图示，可以通过增加参数的数目来表征假定轮廓 200 的其他形状和特征。例如，如图 2B 所图示，假定轮廓 200 可以用分别定义其高度、底部宽度和顶部宽度的参数 h_1 、 w_1 和 w_2 来表征。注意，假定轮廓 200 的宽度可以被称为临界尺寸 (CD)。例如，在图 2B 中，参数 w_1 和 w_2 可以被描述为分别定义了假定轮廓 200 的底部 CD 和顶部 CD。

如上所述，可以通过变动用于表征假定轮廓的参数来生成存储在库 116 (图 1) 中的这组假定轮廓。例如，参照图 2B，通过变动 h_1 、 w_1 和 w_2 ，可以生成不同形状和尺寸的假定轮廓。注意，一个、两个或所有三个参数可以相对于彼此而变动。

再次参照图 1，存储在库 116 中的这组假定轮廓和仿真衍射信号中假定轮廓和相应仿真衍射信号的数目 (即，库 116 的分辨率和/或范围) 部分

地取决于这组参数变动的范围和这组参数变动的增量。在一个示例性实施例中，存储在库 116 中的假定轮廓和仿真衍射信号是在从实际结构获得测得的衍射信号之前生成的。因此，在生成库 116 的过程中所使用的范围和增量（即，范围和分辨率）可以被基于对结构的制造过程和变动的可能范围的熟悉度来选择。库 116 的范围和/或分辨率也可以被基于经验措施来选择，这些经验措施例如是利用原子力显微镜（AFM）或剖面扫描电子显微镜（XSEM）、透射电子显微镜（TEM）等的测量结果。

对于基于库的过程的更详细描述，见 2001 年 7 月 16 日递交的题为“GENERATION OF A LIBRARY OF PERIODIC GRATING DIFFRACTION SIGNALS”、申请号为 09/907,488 的美国专利申请，该申请通过引用而被全部结合于此。

3. 基于回归的确定结构轮廓的过程

在基于回归的确定结构轮廓的过程中，将测得的衍射信号与仿真衍射信号（即，试凑衍射信号）进行比较。仿真衍射信号是在比较之前利用假定轮廓的一组参数（即，试凑参数）生成的。如果测得的衍射信号与仿真衍射信号不匹配，或者当测得的衍射信号与一个仿真衍射信号之间的差别不在预设标准或匹配标准内时，则利用另一个假定轮廓的另一组参数来生成另一个仿真衍射信号，然后将测得的衍射信号与新生成的仿真衍射信号进行比较。当测得的衍射信号与新生成的衍射信号相匹配，或者当测得的衍射信号与一个仿真衍射信号的差别在预设标准或匹配标准内时，与相匹配的仿真衍射信号相关联的假定轮廓被认定为表示结构的实际轮廓。然后可以利用相匹配的仿真衍射信号和/或假定轮廓来判断结构是否是根据规范制造的。

因此，再次参照图 1，在一个示例性实施例中，处理模块 114 可以生成假定轮廓的仿真衍射信号，然后将测得的衍射信号与仿真衍射信号进行比较。如上所述，如果测得的衍射信号与仿真衍射信号不匹配，或者当测得的衍射信号与一个仿真衍射信号之间的差别不在预设标准或匹配标准内时，则处理模块 114 可以迭代地生成另一个假定轮廓库的另一个仿真衍射信号。在一个示例性实施例中，随后生成的仿真衍射信号可以被利用最优

化算法生成，所述最优化算法例如是包括仿真退火（anneal）的全局优化技术和包括最速下降法的局部优化技术。

在一个示例性实施例中，仿真衍射信号和假定轮廓可以存储在库 116（即，动态库）中。存储在库 116 中的仿真衍射信号和假定轮廓于是可以随后用于匹配测得的衍射信号。

对于基于回归的过程的更详细描述，见 2001 年 8 月 6 日递交的题为“METHOD AND SYSTEM OF DYNAMIC LEARNING THROUGH A REGRESSION-BASED LIBRARY GENERATION PROCESS”、申请号为 09/923,578 的美国专利申请，该申请通过引用而被全部结合于此。

4. 确定仿真衍射信号的算法

如上所述，生成仿真衍射信号以将其与测得的衍射信号进行比较。如下面的描述，在一个示例性实施例中，可以通过应用麦克斯韦方程并且利用数值分析技术来求解麦克斯韦方程，从而生成仿真衍射信号。更具体地，在下面所述的示例性实施例中，使用严格耦合波分析（RCWA）。然而，应当注意，可以使用各种数值分析技术，包括 RCWA 的变体、模态分析、积分法、格林函数、菲涅耳方法、有限元等。

一般而言，RCWA 涉及将轮廓划分为许多节（section）、薄片或厚片（下文中简单地称为节）。对于轮廓的各个节，利用麦克斯韦方程的傅立叶展开（即，电磁场和介电常数（ ϵ ）的特征）而生成耦合微分方程组。然后利用对角化过程来求解微分方程组，所述对角化过程涉及相关微分方程组的特征矩阵的本征值和本征向量分解（即，本征分解）。最后，利用诸如散射矩阵逼近之类的递归耦合模式来耦合针对轮廓各个节的解。对于对散射矩阵逼近的描述，见 Lifeng Li 的“Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings”，美国光学学会期刊 A13，第 1024-1035 页（1996），其通过引用而被全部结合于此。特别地，对于 RCWA 的更详细描述，见 2001 年 1 月 25 日递交的题为“CACHING OF INTRA-LAYER CALCULATIONS FOR RAPID RIGOROUS COUPLED-WAVE ANALYSES”、申请号为 09/770,997 的美国专利申请，该申请通过引用而被全部结合于此。

5. 机器学习系统

在一个示例性实施例中，可以利用机器学习系统（MLS）来生成仿真衍射信号，所述机器学习系统采用机器学习算法，所述机器学习算法例如是反向传播、径向基函数、支持向量、核回归等。对于机器学习系统的更详细描述，见 Simon Haykin 的“Neural Networks”，Prentice Hall，1999，其通过引用而被全部结合于此。也可以见 2003 年 6 月 27 日递交的题为“OPTICAL METROLOGY OF STRUCTURES FORMED ON SEMICONDUCTOR WAFERS USING MACHINE LEARNING SYSTEMS”、申请号为 10/608,300 的美国专利申请，该申请通过引用而被全部结合于此。

6. 重复结构

如上所述，传统地对周期性光栅的线和间距执行了光学计量，所述周期性光栅具有仅在一个维度上变动的轮廓。特别地，再次参照图 1，周期性光栅 102 的轮廓在 x 方向上变动，而在 y 方向上不变动。因此，在对这种周期性光栅执行光学计量的过程中，仅横截面视图轮廓（例如图 2A-2E 所图示的那些）被用于表征周期性光栅的轮廓。

如图 3A-3D 所图示，可以在晶片上形成各种类型的重复结构，这些重复结构具有至少在两个维度上（例如，在根据图 3A-3D 所使用的坐标系的 x 方向和 y 方向上）变动的轮廓。特别地，图 3A 图示出穿过一层或多层材料所形成的基本为圆形的孔 230 的重复结构。图 3B 图示出穿过一层或多层材料所形成的基本为方形的孔 232 的重复结构。图 3C 图示出形成于一层或多层底层材料上的基本为方形的柱 236 的重复结构。图 3D 图示出形成于一层或多层底层材料上的基本为圆形的柱 238 的重复结构。图 3C 的方形柱和图 3D 的圆形柱可以由一层或多层材料形成。

图 4A 图示出示例性重复结构 240 的俯视图。在重复结构 240 的俯视图上，假定的线栅格被叠加在栅格线沿着周期性方向所绘制处。重复结构 240 的轮廓在两个维度（即，x 方向和 y 方向）上变动。图 4A 中的重复结构 240 具有二维的周期性（x 方向和 y 方向）。如果这两个周期性方向之间的角度是 90 度，则重复结构被称为正交重复结构；否则，重复结构被

称为非正交重复结构。

如图 4A 所图示，假定的线栅格形成被称为单位元的区域。特别地，图 4A 图示出具有特征 244 的示例性单位元 242，特征 244 是一个孔并且基本位于单位元 242 的中心。然而，应当了解，特征 244 可以位于单位元 242 中的任何地方。

图 4B 图示出示例性非正交重复结构的俯视图。特别地，图 4B 图示出示例性单位元 252，其具有平行四边形的形状以及特征 254，并且特征 254 基本位于单位元 252 的中心。

应当认识到，单位元可以具有一个或多个特征并且特征可以具有不同形状。例如，单位元可以具有复合特征，所述复合特征例如具有孔中岛的孔。

图 5 图示出具有多于一个特征的示例性单位元。特别地，图 5 图示出具有四个特征的示例性单位元 260。在图 5 中，特征 270 是饼（pie）形结构，其凸出部分在中心处、在结构的主要部分之下延伸。特征 280 是饼形结构，其凸出部分在中心处、在结构的主要部分之上延伸。特征 280 是类似于特征 270 的镜像形状。特征 284 是饼形结构，其凸出部分向主要部分的右侧延伸。特征 274 也是饼形结构，其凸出部分向主要部分的左侧延伸。特征 274 是类似于特征 284 的镜像形状。

如上所述，应当认识到，单位元中的特征可以是岛、柱、孔、过孔、槽或者上述特征的组合。此外，特征可以具有各种形状并且可以是凹形或凸形特征，或者是凹形和凸形特征的组合。

参照图 6，在一个示例性实施例中，利用一个或多个轮廓参数来表征重复结构 300 的轮廓。特别地，可以是孔、柱或岛的重复结构 300 被利用横截面视图轮廓来表征，该横截面视图轮廓表示结构在 x - z 平面中的轮廓，其中 z 轴是晶片表面的法线。

图 6 图示出在重复结构 300 的横截面视图轮廓中通常用作轮廓参数的角度。例如， δ 是入射光束 302 与 z 轴的入射极角。 ϕ 是入射光束相对于 x 轴的入射方位角（入射光束在 x - y 平面上的投影与 x 轴之间的角度）。 ψ 是入射光束 302 相对于水平线 304 的偏振角，水平线 304 表示包含入射光

束 302 的平面的边缘。图 6 的重复结构 300 中的底层材料未被示出以突出显示通常用于表征重复结构的角度。

参照图 7A，利用轮廓参数来表征重复结构的俯视图轮廓。图 7A 图示出具有特征 320 的单位元 310 的俯视图，特征 320 是尺寸从孔的顶部到孔的底部逐渐变小的椭圆孔。用于表征俯视图轮廓的轮廓参数包括 x 节距 (pitch) 312 和 y 节距 314。另外，表示特征 320 的顶部的椭圆长轴 316 和表示特征 320 的底部的椭圆长轴 318 可以用于表征特征 320。此外，也可以使用特征的顶部和底部之间的任何中间长轴，以及顶部、中间或底部椭圆的任何短轴（未示出）。

参照图 7B，利用轮廓参数来表征重复结构的横截面视图轮廓。如上所述，通常为了分析目的而定义的横截面视图轮廓表示结构在 x-z 平面中的轮廓，其中 z 轴是晶片表面的法线。可替换地或者另外地，可以在 y-z 平面中定义横截面视图轮廓。

在本实施例中，重复结构的 x 节距 312 是两个相邻子特征 368 和 370 的中心之间的距离。出于图示的目的，穿过子特征 368 的中心而绘制垂直虚线 364，并且穿过子特征 370 的中心而绘制另一垂直虚线 366。x 节距 312 是穿过子特征 368 的垂直虚线 364 和穿过子特征 370 的垂直虚线 366 之间的距离，该距离通常以纳米 (nm) 计。

包括子特征 368 和 370 在内的特征 320 被划分为多层，从第 0 层开始，然后是第 1 层、第 2 层等等。假设第 0 层是空气、第 1 层是材料 1、第 2 层是材料 3 等等。第 0 层具有空气的 n 和 k，第 1 层具有材料 1 的 n 和 k，等等。子特征 368 和 370 之间的距离 316 与图 7A 中特征 320 的顶部的长轴 316 相同。类似地，子特征 368 和 370 之间的距离 318 与图 7A 中特征 320 的底部的长轴 318 相同。特征 320 的斜率由角度 372 和 374 来表征。当特征 320 的斜率变动时，角度 372 和 374 可以沿着 z 轴变动。可替换地，可以利用诸如多项式函数之类的数学公式来表征特征 320 的斜率。

俯视图轮廓和横截面视图轮廓的轮廓参数被集成到光学计量模型中。在集成轮廓参数的过程中，任何冗余轮廓参数都被去除。例如，如上所述，俯视图轮廓的轮廓参数包括 x 节距 312、y 节距 314、长轴 316 和长轴

318。横截面视图轮廓的轮廓参数包括 x 节距 312、长轴 316、长轴 318、各层的 n 和 k 值以及特征的斜率。因此，在该示例中，光学计量模型的轮廓参数包括 x 节距 312、y 节距 314、长轴 316、长轴 318、各层的 n 和 k 值以及特征的斜率。也可以见 2002 年 10 月 17 日递交的题为“GENERATING SIMULATED DIFFRACTION SIGNALS FOR TWO-DIMENSIONAL STRUCTURES”、申请号为 10/274,252 的专利申请，该申请通过引用而被全部结合于此。

如上所提及，重复结构中的单元元可以是正交和非正交的。图 8 图示出重复结构的示例性非正交单元元 400，非正交单元元 400 包括特征 422，特征 422 是四边形孔。特征 422 具有空气的折射率 n_0 和 k_0 ，单元元 400 中的其余材料 424 具有折射率 n_1 和 k_1 。非正交性是由角度 ζ （希腊字符 ζ ）定义的，角度 ζ 是第二轴 y_2 相对于正交 y 轴的偏离的测度。角度 ζ 涉及正交性或等于 $90-\zeta$ 的节距角 α 。在下文中，将始终使用节距角来指示正交性或节距角 α 。单元元的外形由 x 方向上的副轴（secondary axis） x_1 和 y 方向上的 y_2 中的节距以及节距角 α 来描述，单元元的尺寸是 d_1 和 d_2 。应当了解，节距角可以从 -90 至 $+90$ 度变动。

与重复结构相关联的其他轮廓参数是特征在单元元中的位置。图 9 图示出特征从示例性重复结构的正交单元元的理论中心的偏移。例如，在单元元 500 中，特征 510 可以不是位于单元元 500 的中心，而是位于离中心上侧为 shy 的距离并且离右侧为 shx 的距离，所述中心由虚线位置 520 表示。

除了上述用于重复结构的参数之外，其他包括在重复结构的表征中的参数是单元元中的特征的宽度比（width ratio）和矩形性（rectangularity）。宽度比参数定义了单元元中的孔或岛的拐角的锐度量。如图 10A 所示，在单元元 550 中，宽度比可以用于定义形状的相对于 X 临界尺寸的 Y 临界尺寸。宽度比（WR）= r_y/r_x 是这样的值：该值在椭圆形孔或岛的 r_x 值大于 r_y 值情况下的小于 1 的值、针对圆形孔或岛的等于 1 的值或者孔或岛 r_y 值大于 r_x 值情况下的大于 1 的值之间变动。

矩形性定义了单元元中诸如孔、柱或岛之类的特征的锐度量。在图

10B 中, 0.0 的矩形性 R 定义了正圆形的孔或岛 560, 大于 0 且小于 1.0 的矩形性定义了方形孔或岛 562 的圆角, 1.0 的矩形性定义了方形或矩形的孔、柱或岛 564。

另一种表征单位元的特征的方法是通过利用特征的数学模型。例如, 重复结构的单位元 (例如接触孔或柱) 中的特征的外边界可以利用一个或多个方程来描述。在这种建模构造中, 孔是由空气构成的结构, 其具有特定的 N 和 K, 很像具有不同 N 和 K 的结构中的岛。因此, 诸如孔之类的单位元中的特征的边界的表征包括对特征的形状和斜率的描述, 如图 7B 的横截面视图轮廓所示。

可以通过修改椭圆的典型方程以用于更一般的定义并且通过引入指数 m 和 n 来从数学上描述单位元中的特征的俯视图形状:

$$x=a \cdot \cos^m(\phi+\phi_x), y=b \cdot \sin^n(\phi+\phi_y) \quad 1.00$$

其中, x 和 y 是恒定剖面 z 中的形状的横向坐标, ϕ 是方位角, ϕ_x 和 ϕ_y 分别是 x 轴和 y 轴的方位角, 并且 $\phi=0 \cdots 2\pi$ 。如果 $m=2/M$ 且 $n=2/N$, 则 M 和 N 对应于超椭圆的“标准”公式中的指数:

$$\left| \frac{x}{a} \right|^M + \left| \frac{y}{b} \right|^N = 1 \quad 1.10$$

通过利用傅立叶综合所获得的通用表示, 可以有更易理解的参数函数:

$$x(\varphi) = \sum_m a_m \cos^{p_m}(m \cdot \varphi + \varphi_{mx}) + x_0, y(\varphi) = \sum_n b_n \cos^{p_n}(n \cdot \varphi + \varphi_{ny}) + y_0 \quad 1.20$$

其中, x_0 和 y_0 是离心偏移或横向偏移。单位元的连续各层可以用这些离心偏移来彼此调整。在这种方式下, 可以通过接连描述结构的层来建立复杂的重复结构。

下一步是向单位元中的特征分配斜率 (第三维度)。这可以利用参数表达式来完成, 所述表达式中, 斜率 s 分别是 t 或 ϕ 的函数。可以利用以下式子来表示对特征的完整描述:

$$x=f(t); y=g(t); \text{ 且 } s=h(t) \quad 2.00$$

其中, f、g 和 h 是变量 t 的不同函数表征, 并且 t 可以是形状的方位角 ϕ 或某个其他变量。

例如, 形状像椭圆孔并且在两个相对边上具有上升 (ascending) 斜率

且在两个垂直边上具有凹角（re-entrant）斜率的特征可以由以下式子给出：

$$x=a \cdot \cos\phi; y=b \cdot \sin\phi; \text{ 且 } s=92^\circ - c \cdot \arcsin(d \cdot |\sin\phi|) \quad 2.10$$

其中， $\phi=0 \cdots 2\pi$ ， $c=2^\circ$ ， $d=0.07$ ，沿着 x 轴的斜率是 92° （即，稍微外伸），沿着 y 轴的斜率约是 88° （即，几乎垂直），并且斜率会在这些极值之间逐渐变化。在这种方式下，仅能够覆盖线性斜率（上升斜率和凹角斜率这两者）。可以通过将特征与多于两个的非均匀且无标度（non-scaling）形状组合来处理非线性斜率形状。为了描述非线性形状，引入另一参数 z ，从而产生以下式子：

$$x=f(t,z); y=g(t,z); \text{ 且 } s=h(t,z) \quad 2.00$$

其中， z 是用于表征形状非线性的表达式。

在单位元由多于一种的材料形成的情况下，以及特征包括多于一种形状的情况下，这种复合重复结构被解构成其构件块，然后被如上所述地处理。应当了解，对形状的除了上述数学表示之外的其他数学表示也可以用于表征重复结构的单位元中的特征的轮廓。

在一个示例性实施例中，轮廓数据也用于表征单位元中的特征。图 11 是收集并处理重复结构的轮廓数据的示例性方法的框图。在图 11 的步骤 600 中，可以利用过程仿真器来仿真用于产生重复结构的制造过程。过程仿真器的示例是 ProlithTM、RaphaelTM 等。在制造过程被仿真之后，过程仿真器的一个输出包括所产生的结构的轮廓。这些轮廓包括可以被针对基于过程参数的变动而产生的形状的类型和可变性来分析的轮廓。例如，如果刻蚀过程被仿真，则在变动过程条件的情况下完成过程之后，所产生的孔、柱或岛的俯视图轮廓可以被检查以确定形状的可变性。

可替换的实施例涉及利用一个或多个计量设备来测量重复结构的轮廓，如图 11 的步骤 610 所示。横截面 SEM、CDSEM、AFM、成像系统以及类似计量装置可以用于测量晶片中的重复结构的横截面视图轮廓或俯视图轮廓。类似地，诸如散射测量设备（即，反射计和/或椭偏仪）之类的光学计量系统可以用于确定重复结构的轮廓。另一可替换的实施例包括访问应用（application）的重复结构的经验形状数据或历史形状数据，如步骤

620 所示。具体处方 (recipe) 或类似的半导体制造处方可以提供关于对象结构的轮廓形状的历史数据。

在图 11 的步骤 630 中, 检查从各种源获得的单位元中的特征的俯视图轮廓以确定特征形状和轮廓参数的可变性。在图 11 的步骤 640 中, 结构的特征形状的范围可以示出一种图案, 在该图案中, 轮廓的一些方面保持恒定或者仅变动有限的量, 而轮廓的其他方面呈现宽范围的可变性。

图 12 是用于对重复结构的光学计量模型进行优化的示例性方法的框图。基于从如图 11 所图示的示例性方法中讨论的各种源所收集的数据, 在步骤 710 中, 或者通过拟合一个或多个几何形状 (即, 连续形状近似), 或者通过利用数学方法, 来表征结构的俯视图轮廓。

应当结合图 13 来讨论对连续形状近似技术的说明。假设重复结构的单位元 800 的 SEM 或 AFM 图像是特征 802, 特征 802 是从顶部看具有花生形状的岛。一种方法是利用可变数目的椭圆和多边形或者组合来近似特征 802。

进一步假设在分析特征 802 的俯视图形状的可变性之后, 确定找到了用于充分表征特征 802 的两个椭圆 (椭圆体 1 和椭圆体 2) 和两个多边形 (多边形 1 和多边形 2)。表征这两个椭圆和这两个多边形所需要的参数又包括以下九个参数: 用于椭圆体 1 的 T1 和 T2; 用于多边形 1 的 T3、T4 和 θ_1 ; 用于多边形 2 的 T4、T5 和 θ_2 ; 以及用于椭圆体 2 的 T6 和 T7。可以使用形状的许多其他组合来表征单位元 800 中的特征 802 的俯视图。

这种数学方法利用数学公式来描述单位元中的特征的形状。开始于单位元的俯视图, 选择可以最好地表示特征的形状的公式。如果特征的俯视图接近于椭圆, 则可以使用诸如式子 1.10 之类的一般椭圆公式, 或者诸如式子 1.20 之类的一般椭圆公式的傅立叶综合。可替换地, 可以使用一组用于表征所收集的重复结构轮廓的可变性的式子, 例如 2.10 和 2.20 中的这组式子。不管形状如何, 如果一个或多个数学公式或表达式充分地表征了俯视图轮廓的可变性, 则这些式子可以用于表征单位元中的特征的俯视图。参照图 13, 单位元 800 中的特征 802 的表征通常会包括一组表示两个椭圆 (椭圆体 1 和椭圆体 2) 和两个多边形 (多边形 1 和多边形 2) 的式

子。

其他实施例可以采用诸如椭圆之类的典型几何形状，但是通过利用自动绘图技术来改变旋转轴或旋转中心而变更了这些几何形状。例如，利用这种技术，椭圆可以被配置为更像花生形轮廓。甚至连利用自动技术（使用采用多个旋转轴和中心的软件）而使得可能的任意形状都可以用于表征所研究的结构的视图。

参照图 12，在步骤 720 中，选择轮廓参数来表示结构的俯视图轮廓的变动。对参数的选择可以基于历史数据，和/或基于选择参数的逐渐包括（*progressive inclusion*）或选择参数的连续排除（*successive exclusion*）。利用类似的处方或制造过程而对诸如以前的经验之类的历史数据的使用可以足够得到最少数目的俯视图轮廓参数从而获得较好的仿真结果。例如，如果用于接触孔的以前处方基本使用非常类似的处方并且利用单个椭圆体模型获得了较好的仿真结果，则对该应用的俯视图轮廓参数的最终选择可以被用作当前应用的起始选择。对新的俯视图轮廓参数的逐渐包括开始于一个或多个基于所收集的轮廓数据而示出显著可变性的轮廓参数。

例如，参照图 13，假设俯视图轮廓参数 T2（椭圆体 1 的一个尺寸）和 T7（椭圆体 2 的一个尺寸）示出大部分的可变性，而其余的俯视图轮廓参数比较恒定。于是在图 12 的步骤 720 中，将选择 T2 和 T7 来表示光学计量模型中的俯视图轮廓的变动。可替换地，如果仅椭圆体 2 的 T7 示出大部分的可变性，则可以仅 T7 被选择。

参照图 12，在步骤 730 中，选择与结构的横截面视图轮廓相关联的轮廓参数。横截面视图轮廓参数包括入射光束的入射极角、入射光束的入射方位角、入射的偏振角、X 节距、Y 节距、节距角、各层的宽度、各层的 N 和 K 或者单位元内的重复结构的各个特征的 N 和 K、特征的高度、特征在各个点处的宽度、侧壁角、特征的定位（*footing*）或顶部圆化（*rounding*）等。类似于在选择俯视图轮廓参数中所使用的过程，参数的选择可以基于历史数据和/或连续地使选择参数固定而不是可变的。利用类似的处方或制造过程而使用历史数据（例如以前的经验）可以足够得到最少数目的可变横截面视图轮廓参数从而获得较好的仿真结果。

在图 12 的步骤 740 中，所选择的俯视图和横截面视图轮廓参数被集成到光学计量模型中。如上所述，在集成所选择的轮廓参数的过程中，冗余被去除。

在图 12 的步骤 750 中，优化光学计量模型。计量模型的优化通常涉及基于回归的过程。该步骤的输出是基于所选择的轮廓参数和一个或多个终止标准的经优化的计量模型。终止标准的示例包括拟合优度（goodness）、费用函数、误差平方和（SSE）等。对于基于回归的过程的详细描述，见 2001 年 8 月 6 日递交的题为“METHOD AND SYSTEM OF DYNAMIC LEARNING THROUGH A REGRESSION-BASED LIBRARY GENERATION PROCESS”、申请号为 09/923,578 的美国专利申请，该申请通过引用而全部结合于此。

参照图 12，在步骤 760 中，利用经优化的计量模型来创建多组轮廓参数和相应的衍射信号。轮廓参数组包括步骤 720 和 730 中选择的轮廓参数。相应的衍射信号是通过利用轮廓参数组来仿真离开重复结构的衍射而创建的。例如，利用所选择的轮廓参数的范围和用于每个轮廓参数的适当分辨率来生成库。可以利用所创建的库的子集来训练机器学习系统（MLS）。回归和库生成技术的组合可以用于生成库或受过训练的 MLS，所述库或受过训练的 MLS 能够从输入的一组轮廓参数来创建新的衍射信号或者为输入的测得的衍射信号提取一组轮廓参数。

在步骤 770 中，将测得的衍射信号与利用从经优化的计量模型得出的多组轮廓参数所创建的仿真衍射信号进行匹配，以确定最佳匹配。

在步骤 780 中，利用测得的衍射信号和最佳匹配仿真衍射信号，计算一个或多个匹配标准。拟合优度、费用函数、误差平方和等可以被用作匹配标准。如果不符合匹配标准，则可以变更对单位元中的特征的特征和/或俯视图轮廓参数的选择，如步骤 790 所示。

例如，假设有一个或多个测得的衍射信号离开重复结构，该重复结构的单位元与图 13 所图示的单位元 800 类似。进一步假设选择图 13 中的特征 802 的俯视图轮廓参数 T2 和 T7。在步骤 780 中，计算匹配标准值并且将其与预设的匹配标准进行比较。假设预设的匹配标准包括至少为 95%的

拟合优度和至多为 2.50 的费用函数。如果计算出的匹配标准示出 96% 的拟合优度和 2.40 的费用函数，则符合匹配标准并且处理前进到步骤 800。

否则，在步骤 790 中，修正对结构的俯视图轮廓的表征和/或对重复结构的俯视图轮廓参数的选择。对俯视图轮廓的表征的修正可以包括利用三个而不是两个多边形来表征图 13 中的特征 802 的中间部分。如上所讨论，对轮廓参数的选择的修正取决于所使用的技术。如果使用新参数的逐渐包括，则一个或多个俯视图轮廓参数可以被加到这组所选择的俯视图轮廓参数中。参照图 13，如果仅 T2 和 T7 是两个先前选择的俯视图轮廓参数，则在 T4 和/或 T6 示出所收集的轮廓数据中的某种显著可变性的情况下，对选择的修正可以使得增加 T4 和/或 T6。

如果使用轮廓参数的连续排除，则相应地建立匹配标准。例如，预设的匹配标准可以包括至多为 94% 的拟合优度和至少为 2.30 的费用函数。如果计算出的匹配标准示出 96% 的拟合优度和 1.90 的费用函数，则不符合匹配标准并且处理前进到步骤 790。在步骤 790 中，修正对结构的俯视图轮廓的表征和/或对重复结构的俯视图轮廓参数的选择。对俯视图轮廓的表征的修正可以包括利用三个而不是两个多边形来表征图 13 中的特征 802 的中间部分。根据轮廓参数的连续排除技术，一个或多个俯视图轮廓参数被排除出这组所选择的俯视图轮廓参数。参照图 13，如果 T1 至 T7 都是先前选择的俯视图轮廓参数，则在 T3 和/或 T5 比所收集的轮廓数据中的其他俯视图参数示出较小的可变性时，对选择的修正可以使得排除 T3 和/或 T5。

重复结构的横截面视图轮廓参数被以类似的方式处理，改变用于近似横截面视图轮廓的形状类型并且逐渐固定更多的参数，直到符合匹配标准为止。对于横截面视图轮廓形状和轮廓参数选择的更详细描述，见 2002 年 7 月 25 日递交的题为“MODEL AND PARAMETER SELECTION FOR OPTICAL METROLOGY”、申请号为 10/206,491 的美国专利申请，该申请通过应用而被全部结合于此。

在任一种技术中，一旦满足匹配标准，就在图 12 的步骤 800 中，提取对应于最佳匹配衍射信号的轮廓参数并且将这些轮廓参数转换为实际轮

廓参数。例如，参照图 13，所提取的俯视图轮廓参数可以仅包括特征 802 的 T2 和 T7。该步骤通过把与 T2 和 T7 相关联的相关因子应用于俯视图轮廓参数的其余参数，将 T2 和 T7 的值转换为所有俯视图轮廓参数 T1 至 T7、 θ_1 和 θ_2 的这组值。

相同的概念和原理可应用于这样的重复结构：在该重复结构中，如图 14 所示，单位元具有多于一个的结构特征。单位元 260 具有特征 270、274、280 和 284。关于特征 270，假设针对应用所收集的轮廓数据表明特征 270 的俯视图轮廓可以利用两个椭圆（椭圆体 A 271 和椭圆体 B 272）来近似。椭圆体 A 271 的长轴和短轴分别表示为 H11 和 H12；椭圆体 B 272 的长轴和短轴分别表示为 H13 和 H14。其他特征 274、280 和 284 的各个椭圆体的长轴和短轴分别表示为 H21、H22、H23 和 H24；H31、H32、H33 和 H34；以及 H41、H42、H43 和 H44。

如上所讨论，当使用逐渐包括技术时，取决于所收集的俯视图轮廓数据的可变性，仅两个椭圆体中的较大者的长轴可以被选择以对单位元 260 中的特征进行建模。具体地，参数 H14、H24、H34 和 H44 可以被指定为所选择的用于优化的俯视图轮廓参数。如果不符合匹配标准，则优化的连续迭代可以包括单位元 260 的特征的其他俯视图轮廓参数。

当使用连续排除技术时，最初，所有椭圆体的所有轴都可以用于对单位元 260 中的特征进行建模。具体地，参数 H11 至 H14、H21 至 H24、H31 至 H34 和 H41 至 H44 可以被指定为所选择的用于优化的俯视图轮廓参数。如果不符合匹配参数，则优化的连续迭代可以排除单位元 260 的特征的其他俯视图轮廓参数。

如上所讨论，单位元可以包括孔、槽、过孔或者其他凹形形状的组合。单位元也可以包括柱、岛或者其他凸形形状的组合，或者凸型或凹型形状的组合。

图 15 是用于优化重复结构的光学计量模型的示例性系统。轮廓预处理器 900 分析重复结构（未示出）的输入的过程仿真器俯视图轮廓 912、测得的俯视图轮廓 916 和/或历史俯视图轮廓 920。轮廓预处理器 900 选择结构的特定的俯视图轮廓参数和横截面视图轮廓参数 966，并且将所选择

的俯视图轮廓参数和横截面视图轮廓参数 966 传送给计量模型优化器 930。计量模型优化器 930 处理所选择的轮廓参数 966 和从计量设备 926 输入的测得的衍射信号 964，以优化计量模型并且提取传送给比较器 908 的最佳匹配仿真衍射信号 956。计量模型优化器 930 可以可选地使用包括成对的衍射信号和轮廓参数的库或数据存储器，或者被训练为从轮廓参数中确定仿真衍射信号或者从仿真衍射信号中确定轮廓参数的机器学习系统。比较器 908 计算匹配标准的值并且将计算出的值与预先设置的匹配标准 960 进行比较，并且如果计算出的值不在匹配标准内，则比较器 908 将信号 954 传送给模型调整器 904 以确定对光学计量模型的调整 952。模型调整器 904 将这种调整或修正 952 传送给轮廓预处理器 900 并且对这种循环进行迭代。如果计算出的值在匹配标准内，则比较器 908 终止优化过程并且将所提取的轮廓参数值 958 传送给后优化处理器 910。

7. 选择单元配置

在一个示例性实施例中，针对重复结构而定义多个单元配置。每个单元配置由一个或多个单元参数来定义。多个单元配置中的各个单元在至少一个单元参数上彼此不同。在本示例性实施例中，这一个或多个单元参数可以包括节距、面积和节距角。使用一个或多个选择标准来选择多个单元配置中的一个。所选择的单元配置然后可以用于表征单元配置所包围的一个或多个特征的一个或多个部分的俯视图轮廓。

例如，图 16A 和 16B 图示出示例性重复结构 1000 的俯视图。在本示例中，重复结构 1000 包括正交布置的多个特征 1002(A)–1002(L)。在本示例中，特征 1002(A)–1002(L)是接触孔。然而应当认识到，特征 1002(A)–1002(L)可以是各种类型的特征。

图 16A 图示出具有相同面积但具有不同节距角的多个单元配置 1004(A)、1004(B)和 1004(C)。具体地，单元配置 1004(A)（在图 16A 中用实线图示）具有大约 90 度节距角 1006(A)。如图 16A 所图示，单元配置 1004(A)包围特征 1002(E)、1002(F)、1002(I)和 1002(J)的一些部分。单元配置 1004(B)（在图 16A 中用长划线定义）具有小于节距角 1006(A)的节距角 1006(B)。如图 16A 所图示，单元配置 1004(B)包围特征

1002(F)、1002(G)、1002(I)和 1002(J)的一些部分。单位元配置 1004(C)（在图 16A 中用短划线定义）具有小于节距角 1006(B)的节距角 1006(C)。如图 16A 所图示，单位元配置 1004(C)包围特征 1002(G)、1002(H)、1002(I)和 1002(J)的一些部分。

图 16B 图示出具有相同节距角但具有不同面积的多个单位元配置 1008(A)、1008(B)和 1008(C)。具体地，单位元配置 1008(A)（在图 16B 中用实线图示）具有 90 度的节距角和包围特征 1002(E)、1002(F)、1002(I)和 1002(J)的一些部分的面积。单位元配置 1008(B)（在图 16B 中用长划线定义）具有 90 的节距角并且其面积大于单位元配置 1008(A)的面积，单位元配置 1008(B)的面积包围特征 1002(A)、1002(B)、1002(E)、1002(F)、1002(I)和 1002(J)的一些部分。单位元配置 1008(C)（在图 16B 中用短划线定义）具有 90 的节距角并且其面积大于单位元配置 1008(B)的面积，单位元配置 1008(C)的面积包围特征 1002(A)、1002(B)、1002(C)、1002(E)、1002(F)、1002(I)、1002(J)和 1002(K)的一些部分以及特征 1002(F)。

单位元配置 1008(A)、1008(B)和 1008(C)还具有不同的节距。具体地，单位元配置 1008(A)（在图 16B 中用实线图示）具有 1 个周期的 x 节距 1010(A)和 1 个周期的 y 节距 1012(A)。单位元配置 1008(B)（在图 16B 中用长划线定义）具有 1 个周期的 x 节距 1010(A)和 2 个周期的 y 节距 1012(B)。单位元配置 1008(C)（在图 16B 中用短划线定义）具有 2 个周期的 x 节距 1010(B)和 2 个周期的 y 节距 1012(B)。

图 16A 和 16B 图示出具有正交布置的特征的重复结构。然而应当认识到，重复结构可以具有非正交布置的特征。另外，图 16A 和 16B 图示出包含特征的一些部分的单位元配置。特别地，图 16A 和 16B 中的单位元配置被图示为通过特征的中心来定义。然而应当认识到，单位元配置可以被定义为包含一个或多个特征的所有部分。

例如，图 17A 和 17B 图示出示例性重复结构 1100 的俯视图，重复结构 1100 具有非正交布置的特征 1102。在本示例中，特征 1102 是矩形柱。然而应当认识到，特征 1102 可以是各种类型的特征。

图 17A 图示出包围完整特征的多个单位元配置 1104(A)、1104(B)和

1104(C)。在本示例中，单位元配置 1104(A)、1104(B)和 1104(C)具有不同的面积和节距角。如图 17A 所图示，单位元配置 1104(A)具有由向下倾斜的 x 轴 X1 和朝上的 y 轴 Y1 所定义的节距角 1106(A)。单位元 1104(B)具有由向上倾斜的 x 轴 X2 和向上倾斜的 y 轴所定义的节距角 1106(B)。单位元 1104(C)具有由稍微向上倾斜的 x 轴 X3 和朝上的 y 轴 Y3 所定义的节距角 1106(C)。

图 17B 图示出包围多于一个特征的多个单位元配置 1108(A)和 1108(B)。特别地，单位元配置 1108(A)（在图 17B 中用长划线图示）包围四个特征。单位元配置 1108(A)具有由向上倾斜的 x 轴 X4 和朝上的 y 轴 Y4 所定义的节距角 1110(A)。单位元配置 1108(A)（在图 17B 中用短划线图示）包围两个特征。单位元配置 1108(B)具有由向上倾斜的 x 轴 X5 和向上倾斜的 y 轴 Y5 所定义的、大于 90 度的节距角 1110(B)。

如上所述，在一个示例性实施例中，在针对重复结构而定义多个单位元配置之后，一个或多个选择标准可以用于选择多个单位元配置中的一个。经验数据示出，在光学计量中，当节距和单位元面积被最小化并且节距角最接近 90 度时，可以用更快的处理时间来获得高准确度水平。因此，在本示例性实施例中，选择具有最小节距、最小单位元面积和/或与 90 度相差最小的节距角的单位元配置。

特别地，比较所有单位元配置的 X 和 Y 节距，并且选择具有最小节距的单位元配置。为了选择具有最小节距的单位元配置，与 Y 节距分开地确定 X 节距。包围最小数目的特征或最小数目的特征部分的单位元配置（例如，在包围全部特征的单位元配置的情况下，最小数目的特征是仅仅一个诸如接触孔或柱之类的特征）一般具有最小节距。相反，具有多于最小数目的重复特征的单位元配置具有较大的节距。

如果多个单位元配置具有相同的最小节距，则比较这些单位元配置的面积。选择具有最小面积的单位元配置。参照图 17A，可以通过应用公知的几何原理来获得单位元配置的面积。例如，将平行四边形的两个相邻边的积乘以节距角的函数。特别地，可以利用以下公式来计算单位元配置 1104(A)的面积：

$$\text{面积} = D_x1 \cdot D_y1 \cdot \text{Cos}(\text{节距角 } 1106(A)) \quad (3.10)$$

比较上面所选择的具有最小节距的单位元配置的面积，并且选择具有最小面积的单位元配置。

如果多个单位元配置具有相同的最小节距和相同的最小面积，则比较这些单位元配置的节距角。选择节距角与 90 度相差最小的单位元配置。如果多个单位元配置具有相同的最接近于 90 度的节距角，则可以选择这些单位元配置中的任何一个。

如上所提及，上面的示例中所使用的标准是基于经验数据而确定的。然而应当认识到，取决于特定应用、需要和用户偏好，可以使用各种标准在多个单位元配置中进行选择。

图 18 是用于优化重复结构的光学计量模型的示例性方法的框图。在步骤 700 中，基于一个或多个标准，从多个单位元配置中选择单位元配置。

在步骤 705 中，利用衍射信号的仿真，针对信号灵敏度来优化计量设备变量，这些计量设备变量例如是入射的方位角、入射角、波长范围和/或其他计量设备变量。如上所讨论， ϕ 是入射光束 302 相对于图 6 所图示的 X 轴的入射方位角。

例如，可以通过变动入射方位角、输入光束的入射角、波长范围和/或计量设备变量而同时保持其他变量恒定，完成针对信号灵敏度的优化。可替换地，可以单独优化所列出的变量中的每一个或者将其与上面的列表中的其他变量中的一个或多个结合地优化，从而得到最高级别的衍射信号灵敏度。

其他计量设备变量的示例是可以在测量离开重复结构的衍射信号之前变动的设备设置。例如，如果计量设备是椭偏仪，则偏振器和检偏器设置可以被优化。对于针对应用所选择的给定单位元配置，可以针对信号灵敏度来优化设备的反射系数 α 和 β 。衍射信号的四种成分包括 r_{ss} 、 r_{sp} 、 r_{ps} 和 r_{pp} 。通常，不是测量所有四种成分，而是测量作为这四种成分的组合的两个实体以加快衍射信号测量。

例如，可以测量以下实体：

$$(\alpha_1 r_{ss} + \beta_1 r_{sp}) \text{ 和 } (\alpha_2 r_{pp} + \beta_2 r_{ps}) \quad (3.20)$$

其中, (α_1, β_1) 和 (α_2, β_2) 是恒定的并且由仪器设置来确定。如上所提及, 利用仿真, 可以针对信号灵敏度来单独地优化设备的反射系数 α 和 β 或者将其与其他列出的变量结合进行优化。

在步骤 710 中, 利用所选择的单位元配置, 或者通过拟合一个或多个几何形状 (即, 连续形状近似), 或者通过利用数学方法, 来表征结构的俯视图轮廓。在步骤 720 中, 选择轮廓参数来表示结构的俯视图轮廓的变动。参数的选择可以基于历史数据和/或选择参数的逐渐包括或选择参数的连续排除。

在步骤 730 中, 选择与结构的横截面视图轮廓相关联的轮廓参数。横截面视图轮廓参数包括入射光束的入射极角、入射光束的入射方位角、入射的偏振角、X 节距、Y 节距、节距角、各层的宽度、各层的 N 和 K 或者单位元内的重复结构的各个特征的 N 和 K、特征的高度、特征在各个点处的宽度、侧壁角、特征的定位或顶部圆化等。类似于在选择俯视图轮廓参数中所使用的过程, 与横截面视图轮廓相关联的参数的选择可以基于历史数据和/或连续地使选择参数固定而不是可变的。

在步骤 740 中, 所选择的俯视图和横截面视图轮廓参数被集成到光学计量模型中。在 2002 年 10 月 17 日递交的题为 “GENERATING SIMULATED DIFFRACTION SIGNALS FOR TWO-DIMENSIONAL STRUCTURES”、申请号为 10/274,252 的美国专利申请中详细说明了俯视图和横截面视图轮廓参数的集成, 该申请通过引用而被全部结合于此。

在步骤 750 中, 优化光学计量模型。计量模型的优化通常涉及基于回归的过程。该步骤的输出是基于所选择的轮廓参数和一个或多个终止标准的经优化的计量模型。终止标准的示例包括拟合优度、费用函数、误差平方和 (SSE) 等。对于基于回归的过程的详细描述, 见 2001 年 8 月 6 日递交的题为 “METHOD AND SYSTEM OF DYNAMIC LEARNING THROUGH A REGRESSION-BASED LIBRARY GENERATION PROCESS”、申请号为 09/923,578 的美国专利申请, 该申请通过引用而全部结合于此。

在步骤 760 中，利用经优化的计量模型来创建多组轮廓参数和相应的衍射信号。轮廓参数组包括步骤 720 和 730 中选择的轮廓参数。相应的衍射信号是通过利用轮廓参数组来仿真离开重复结构的衍射而创建的。例如，利用所选择的轮廓参数的范围和用于每个轮廓参数的适当分辨率来生成库。可以利用所创建的库的子集来训练机器学习系统（MLS）。回归和库生成技术的组合可以用于生成库或受过训练的 MLS，所述库或受过训练的 MLS 能够从输入的一组轮廓参数来创建新的衍射信号或者为输入的测得的衍射信号提取轮廓参数组。

在步骤 770 中，将测得的衍射信号与利用从经优化的计量模型得出的多组轮廓参数所创建的仿真衍射信号进行匹配，以确定最佳匹配。

在步骤 780 中，利用测得的衍射信号和最佳匹配仿真衍射信号，计算一个或多个匹配标准。拟合优度、费用函数、SSE 等可以被用作匹配标准。如果符合匹配标准，则模型优化完成。否则，在步骤 790 中，修正对结构的俯视图轮廓的表征和/或对重复结构的俯视图轮廓参数的选择。

相同的概念和原理可应用于单位元具有多于一个结构特征的重复结构。此外，重复结构的单位元配置可以包括孔、槽、过孔或其他凹形形状的组合。它也可以包括柱、岛或其他凸形形状的组合，或者凸型或凹型形状的组合。对于重复结构的计量模型优化的进一步细节，参考 2005 年 2 月 18 日递交的题为“OPTICAL METROLOGY OPTIMIZATION FOR REPETITIVE STRUCTURES”、申请号为 11/061,303 的美国专利申请，该申请通过引用而被全部结合于此。

图 18 图示出用于对重复结构的光学计量模型进行优化的示例性系统。单位元配置选择器 902 基于一个或多个标准，例如最小节距、最小面积和最接近 90 度的节距角，从多个单位元配置中选择一个单位元配置。单位元配置选择器 902 将所选择的单位元配置 918 发送给信号灵敏度优化器 914。

信号灵敏度优化器 914 利用对衍射信号的仿真，针对信号灵敏度来优化入射方位角、入射角、波长范围和/或计量设备变量。可以单独优化先前列出的变量中的每一个或者将其与列表中的其他变量中的一个或多个结合

地优化，从而得到最高级别的衍射信号灵敏度。如上所讨论，计量设备变量的示例是偏振器和检偏器设置以及设备的反射系数 α 和 β 。信号灵敏度优化器 914 将所选择的单元配置以及入射方位角、入射角、波长范围和/或计量设备变量的经优化的值 924 发送给轮廓预处理器 900，并且将入射方位角、入射角、波长范围和/或计量设备变量的经优化的值 922 发送给计量设备 926。

轮廓预处理器 900 基于从经验测量、历史数据和仿真数据获得的信息来选择特定俯视图轮廓参数和横截面参数，将所选择的俯视图轮廓参数和横截面参数以及经优化的入射方位角、入射角、波长范围和/或计量设备变量 966 发送给计量模型优化器 930。

计量模型优化器 930 处理所选择的轮廓参数 966 和从计量设备 926 输入的测得的衍射信号 964，以优化计量模型并且提取最佳匹配仿真衍射信号 956。计量模型优化器 930 将最佳匹配仿真衍射信号 956 传送给比较器 908。计量模型优化器 930 可以可选地使用来自库或存储器或者机器学习系统的数据，所述库或存储器包括成对的衍射信号和轮廓参数，所述机器学习系统被训练为从轮廓参数确定仿真衍射信号或者从仿真衍射信号确定轮廓参数。

比较器 908 计算匹配标准的值并且将计算出的值与预先设置的匹配标准 960 进行比较。如果计算出的值不在匹配标准内，则比较器 908 将信号 954 传送给模型调整器 904 以确定对光学计量模型的调整 952。模型调整器 904 将这种调整或修正 952 传送给轮廓预处理器 900 并且对这种循环进行迭代。

如果计算出的值在匹配标准内，则比较器 908 终止优化过程并且将所提取的对应于衍射信号的轮廓参数值和经优化的模型 958 传送给后优化处理器 910。后优化处理器 910 将经优化的模型或信号/参数对 960 发送给库生成器 940、MLS 构造器 942 和/或实时廓线仪 944 中的至少一个。

尽管已描述了示例性实施例，但是在不脱离本发明的精神和/或范围的情况下可以做出各种修改。例如，可以在允许大量轮廓参数和其他计量变量浮动的情况下运行第一迭代。在第一迭代之后，未对衍射响应产生显著

改变的变量可以被设置为固定值。可替换地，在进一步的分析之后，可以允许最初根据以前的经验数据而被认为恒定的变量浮动。例如，X 偏移和 Y 偏移或者节距角可以最初保持为恒定，但由于所获得的其他轮廓数据而可以允许它们在后续的迭代中浮动。此外，除了椭圆和多边形之外，可以利用其他的形状，或者可以考虑形状的粗糙度以提供优化过程的更好或更快的终止。因此，本发明不应被解释为在附图中示出的和上面所描述的具体形式，而是应基于权利要求进行解释。

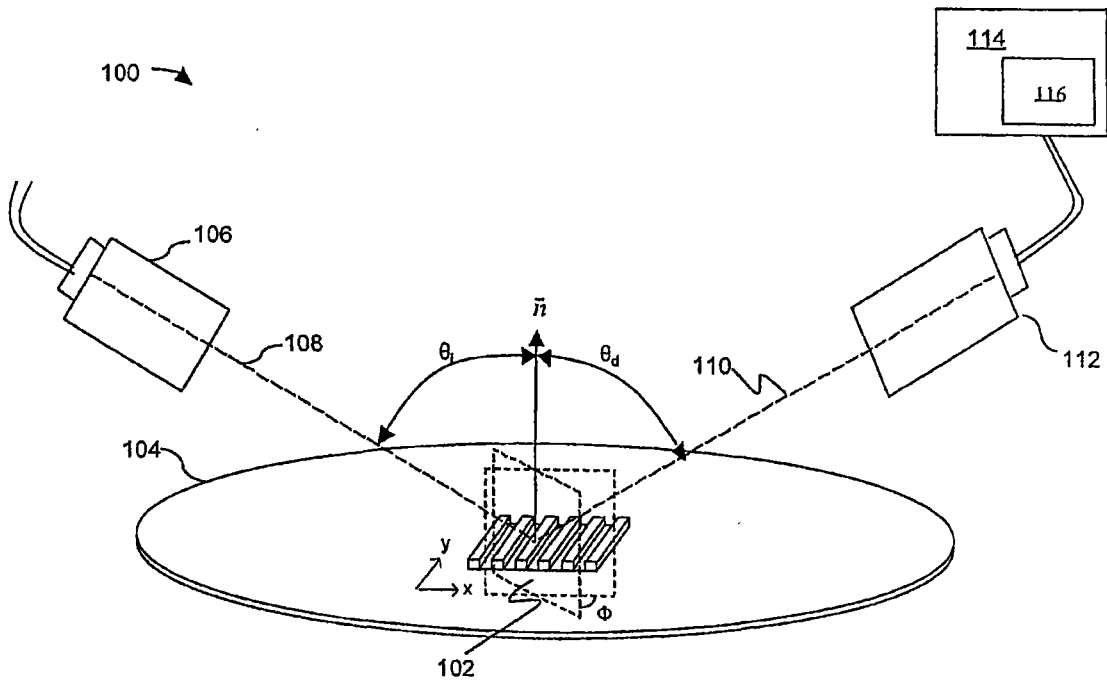


图1

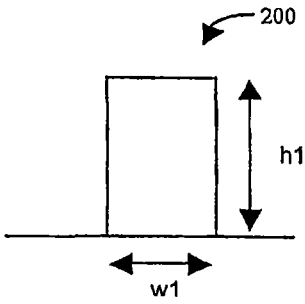


图2A

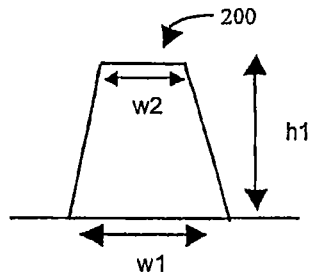


图2B

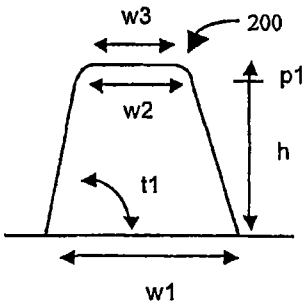


图2C

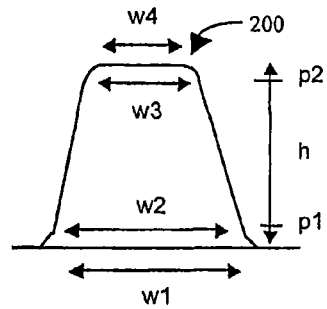


图2D

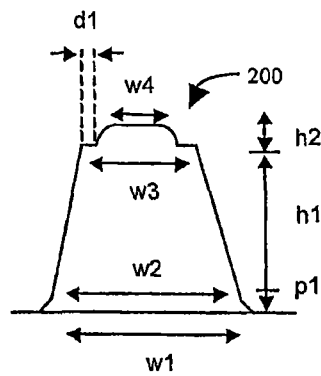


图2E

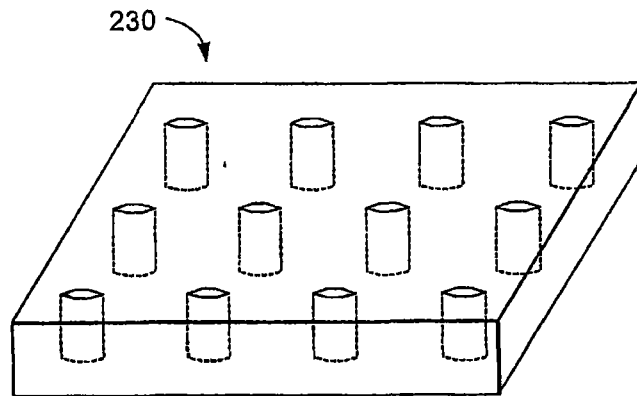


图3A

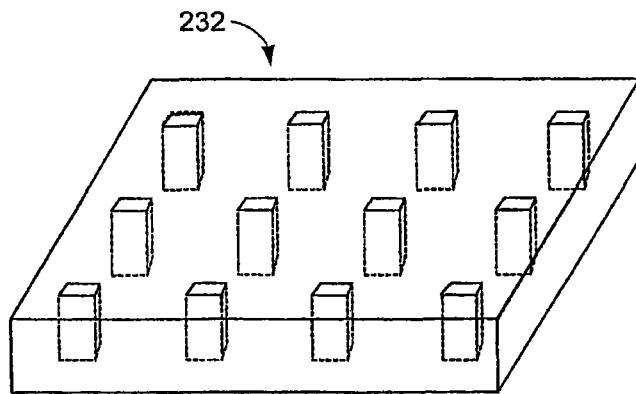


图3B

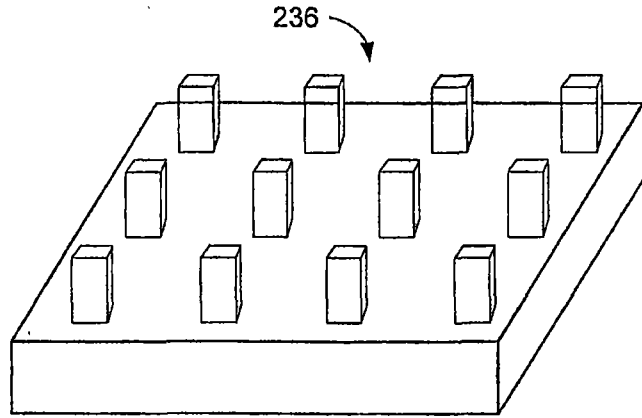


图3C

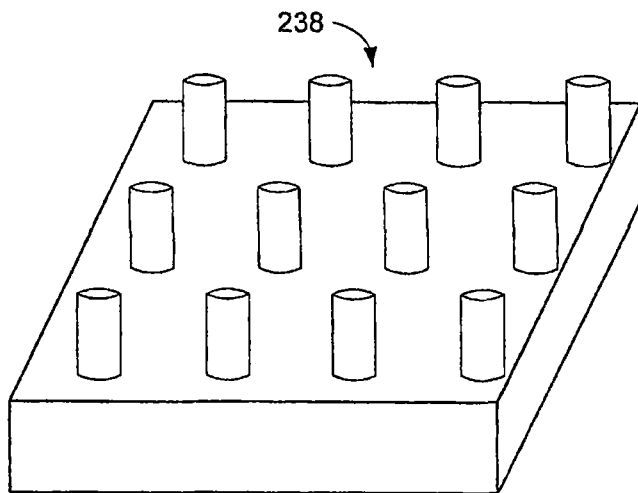


图3D

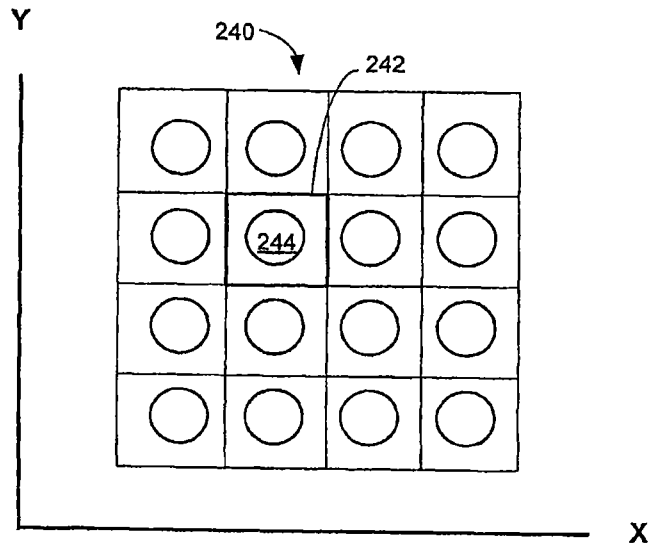


图4A

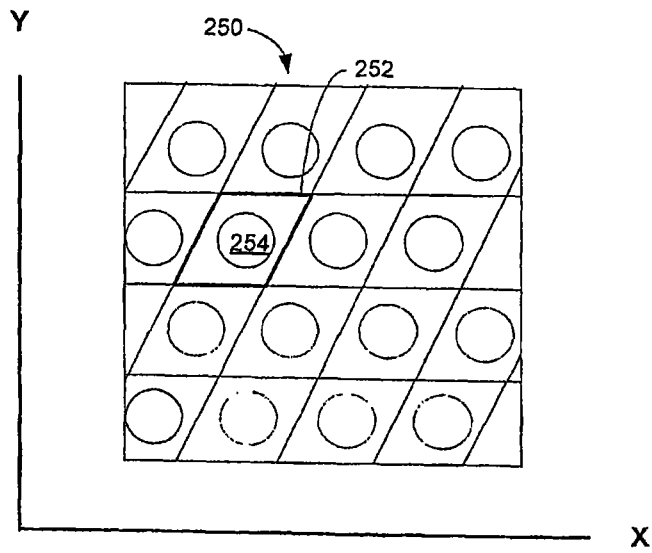


图4B

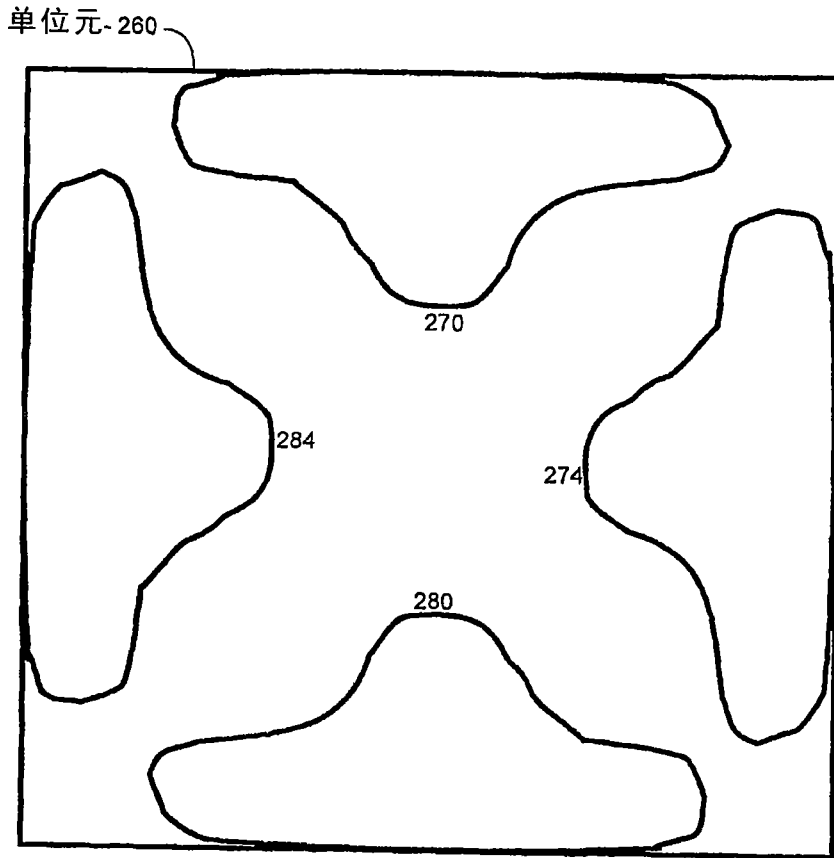


图5

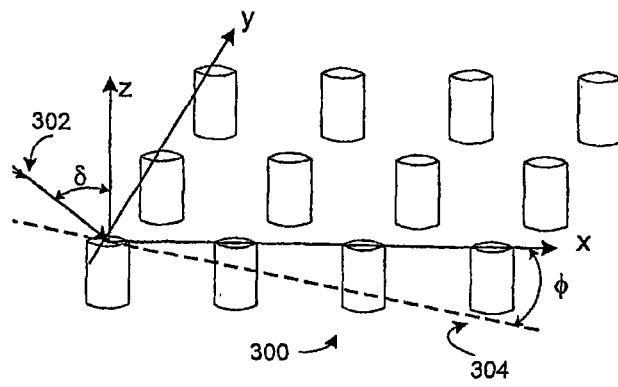


图6

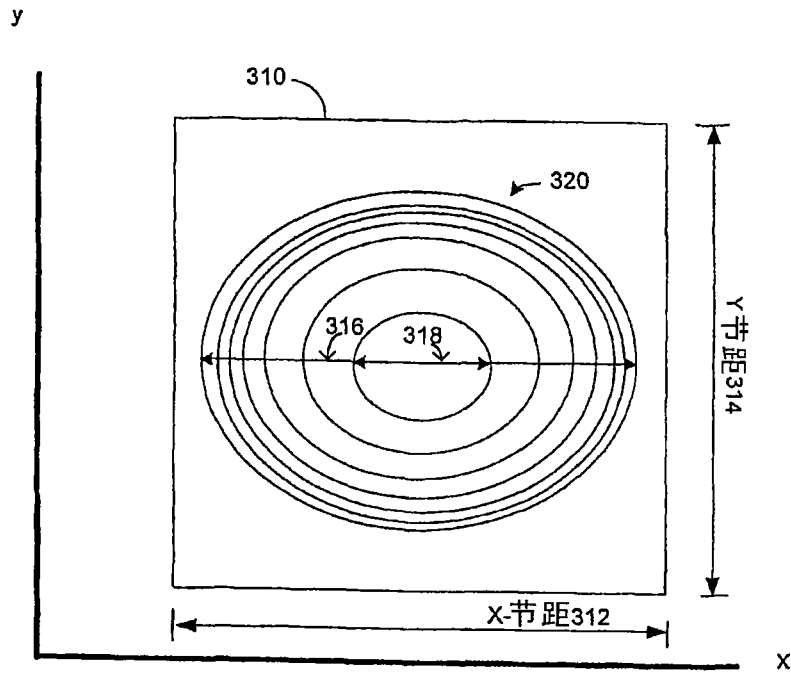


图7A

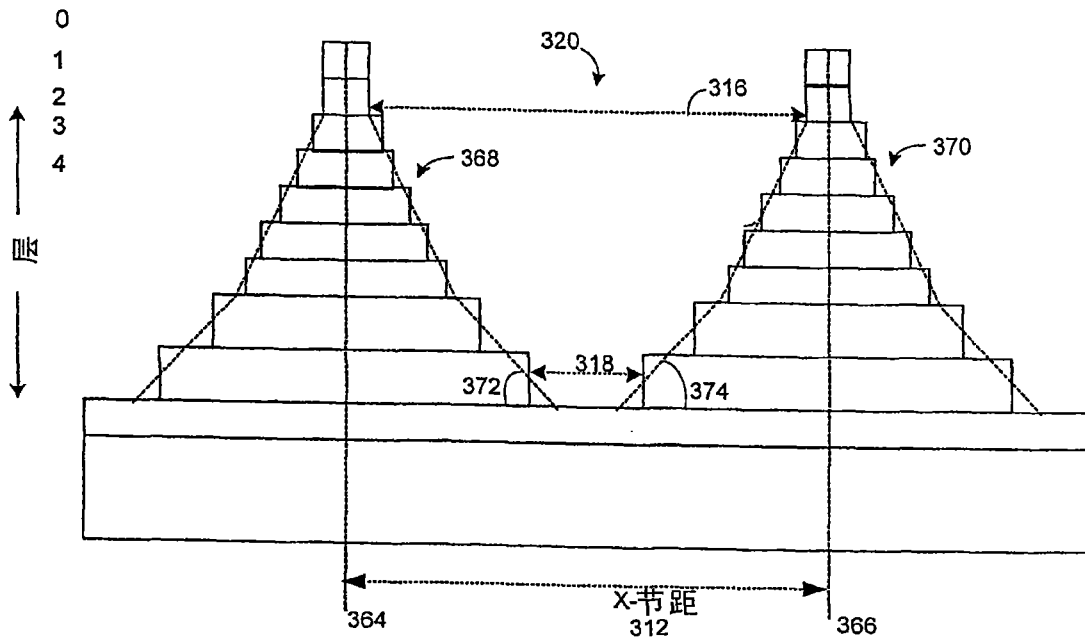


图7B

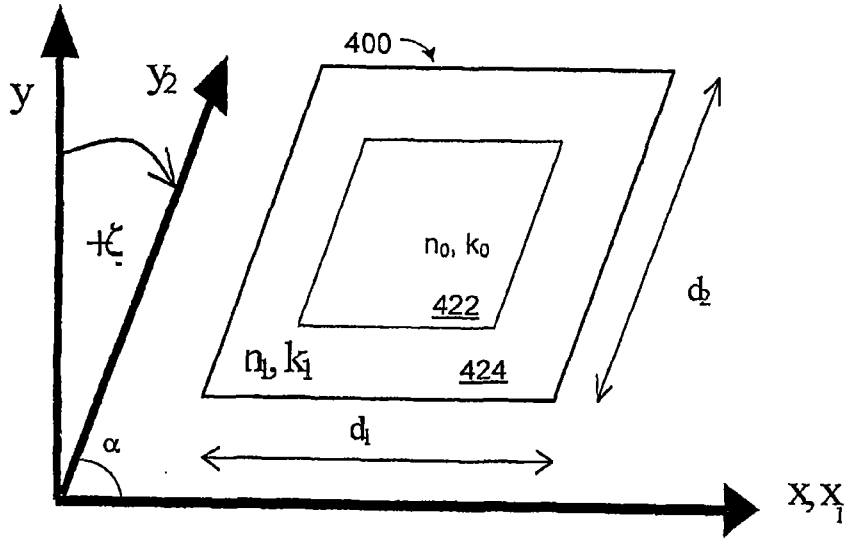


图8

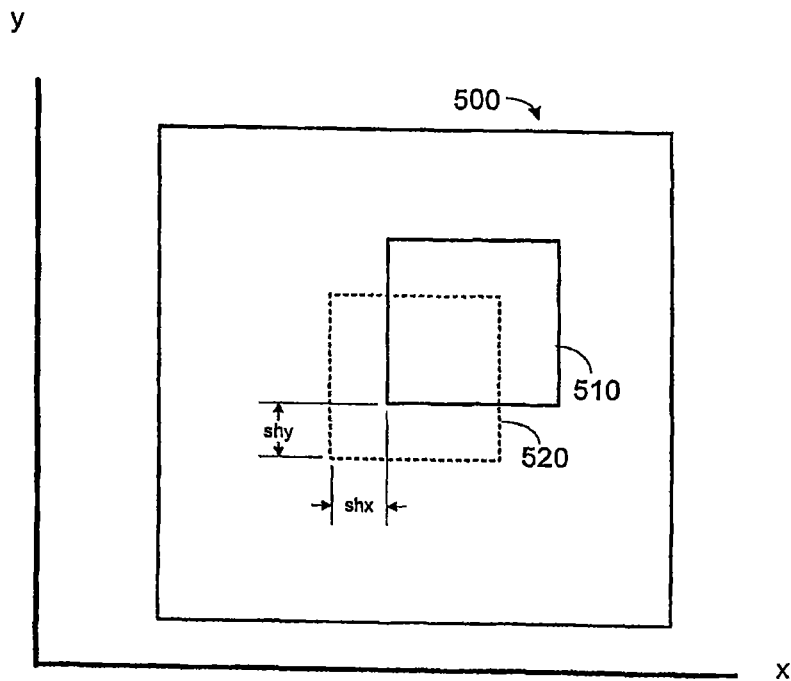


图9

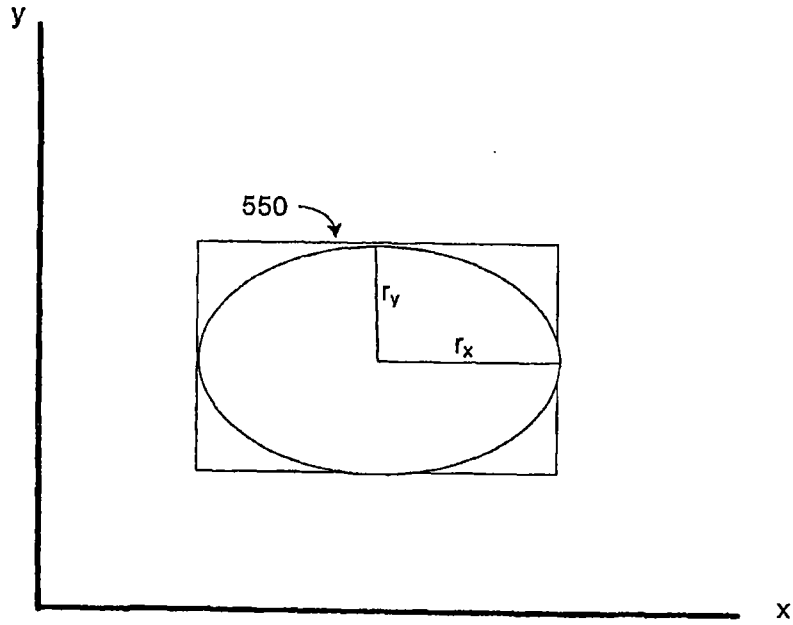


图10A

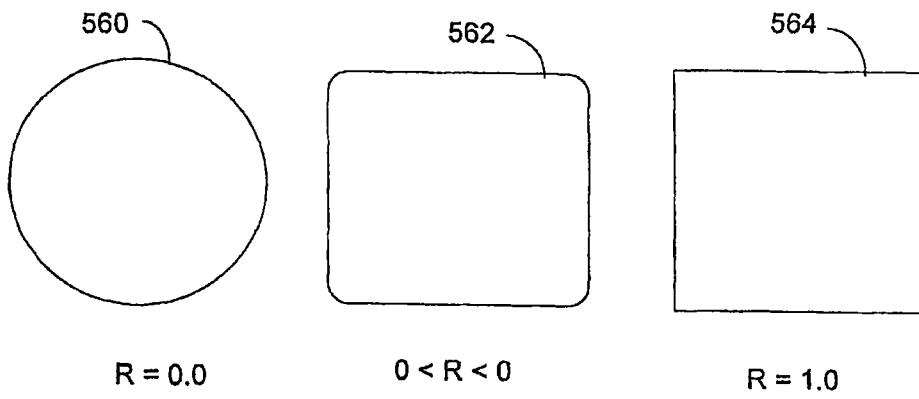


图10B

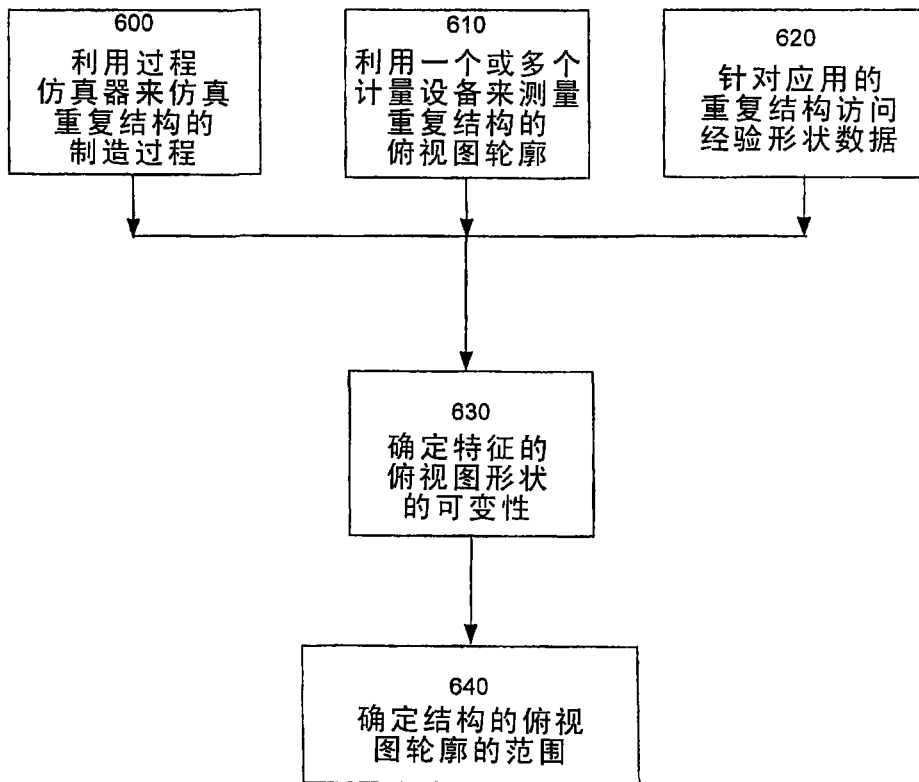


图11

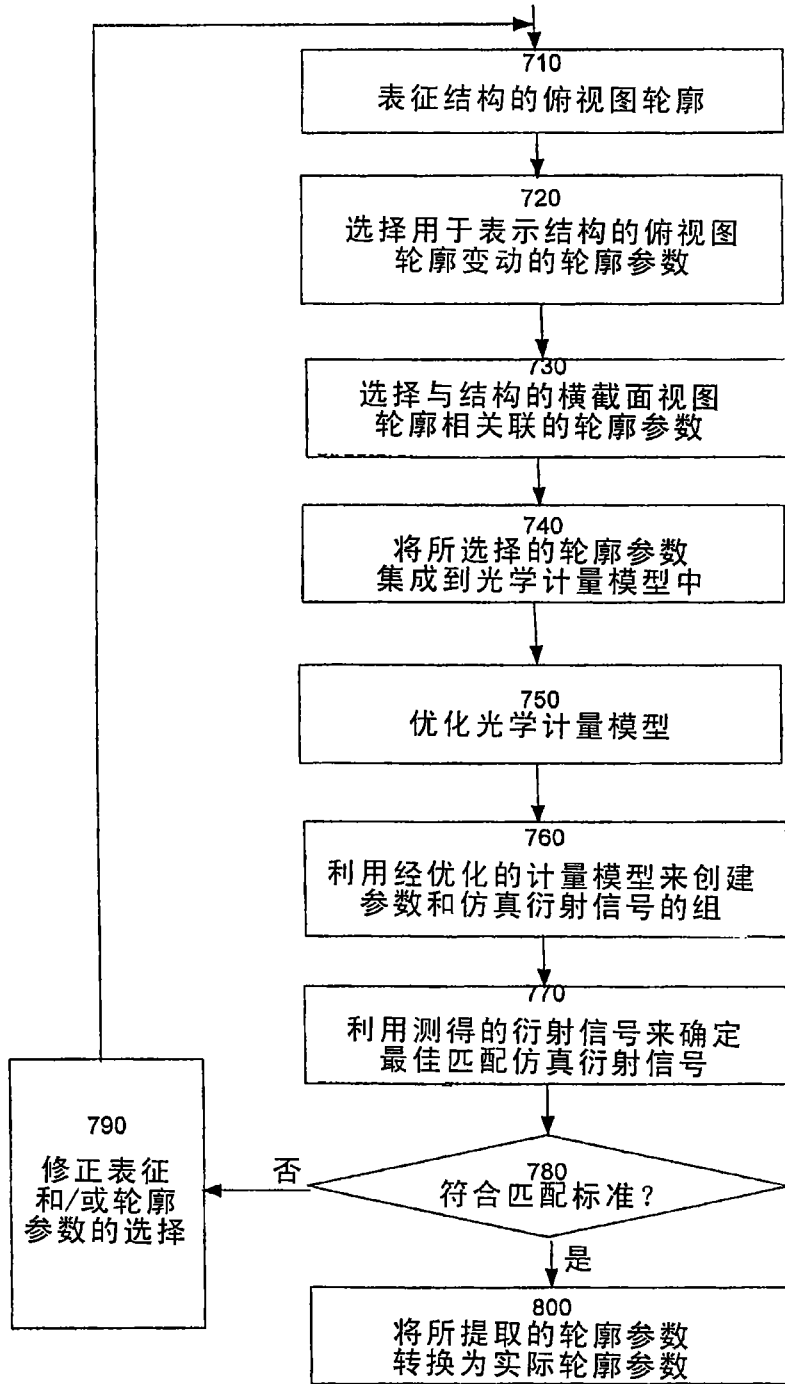


图12

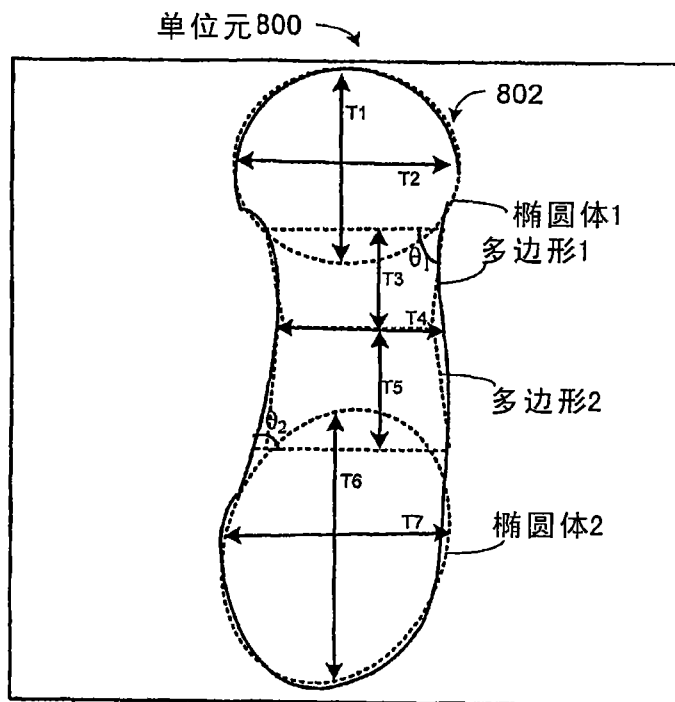


图13

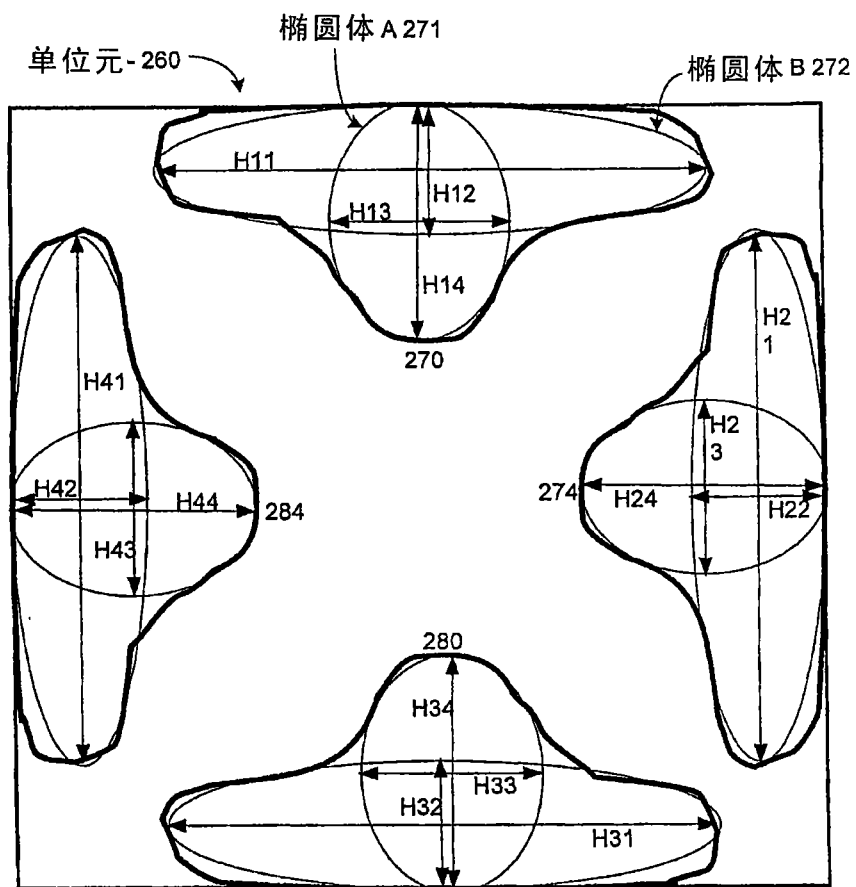


图14

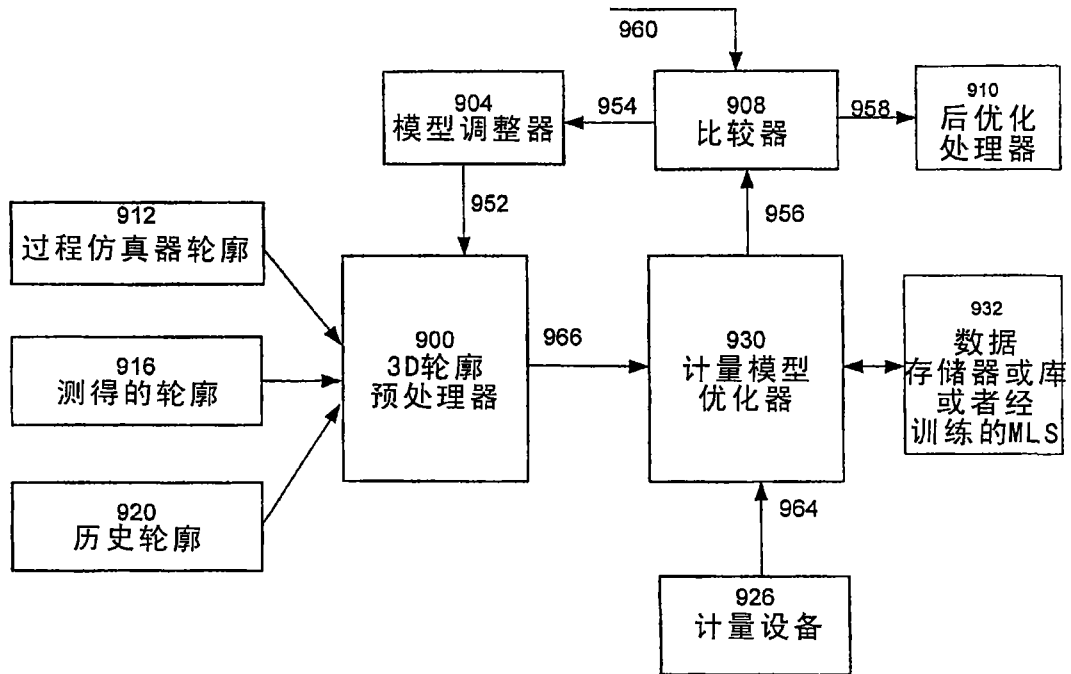


图15

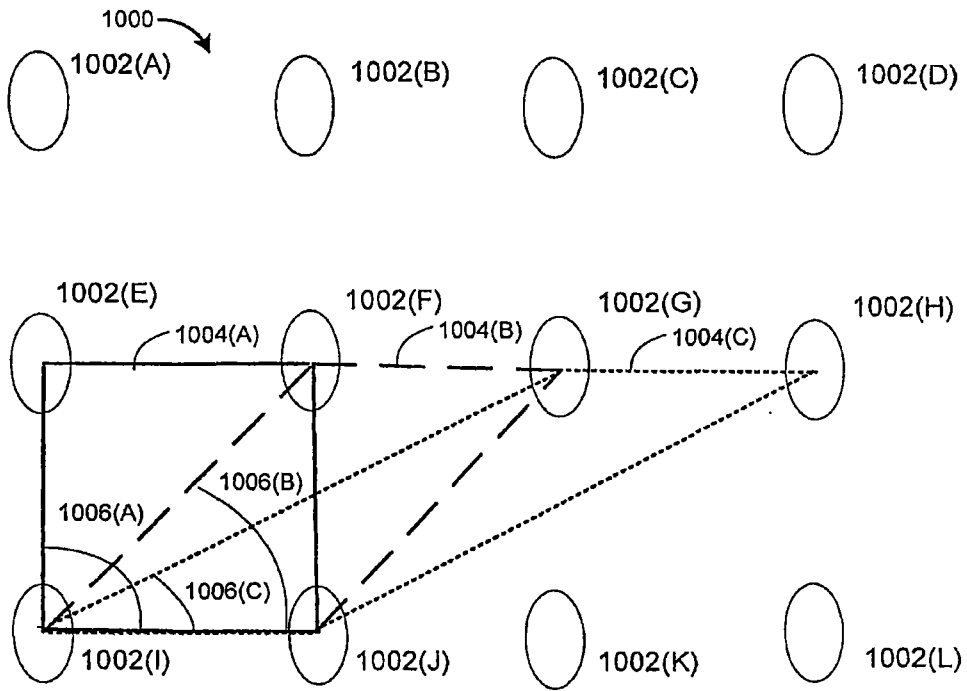


图16A

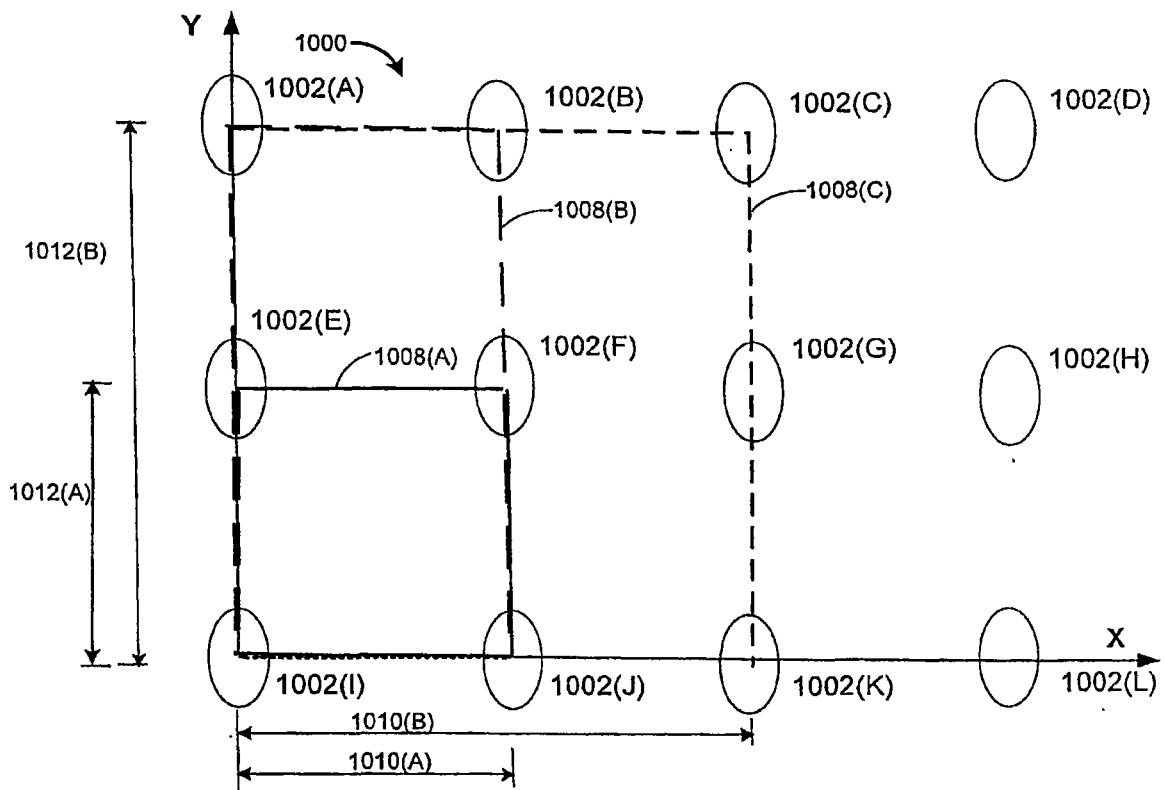


图16B

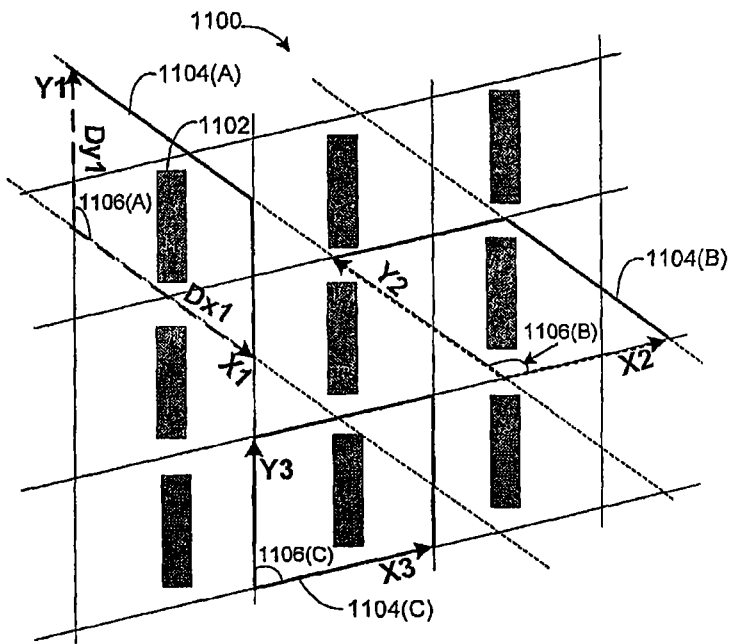


图17A

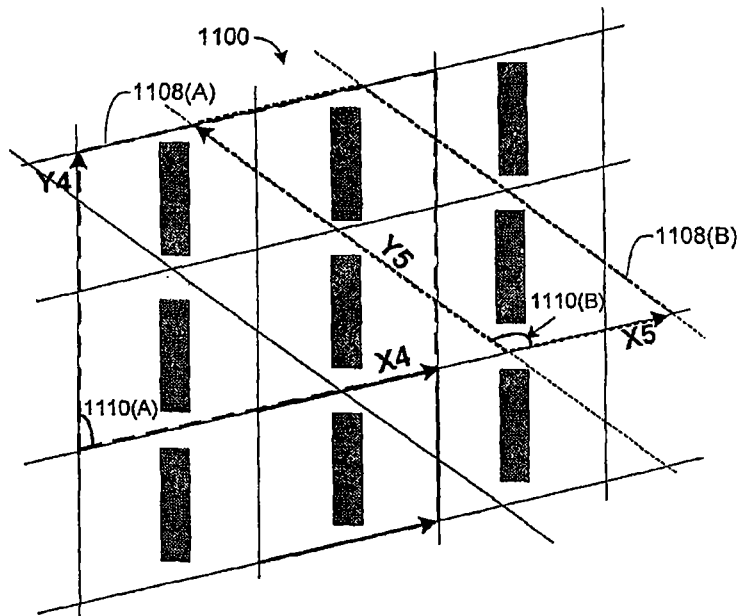


图17B

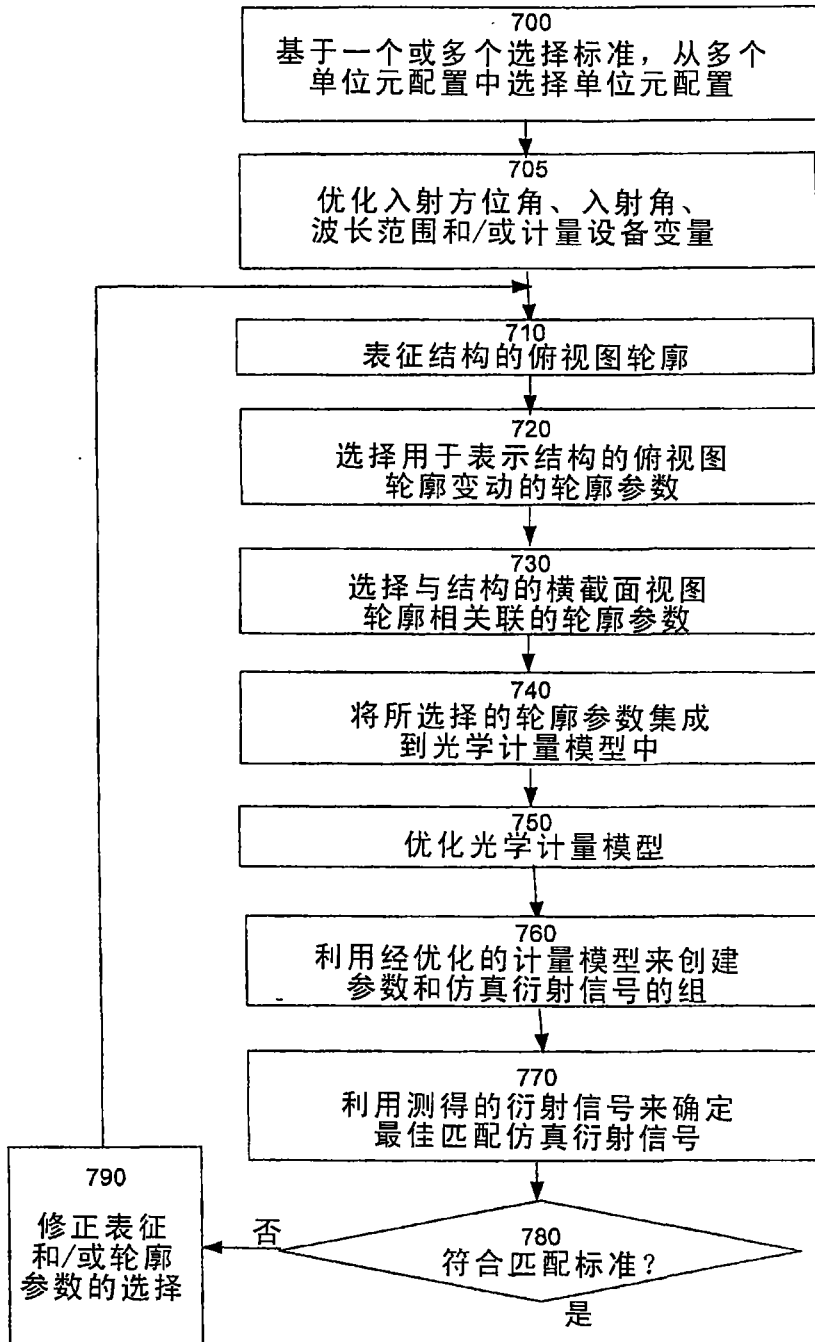


图18

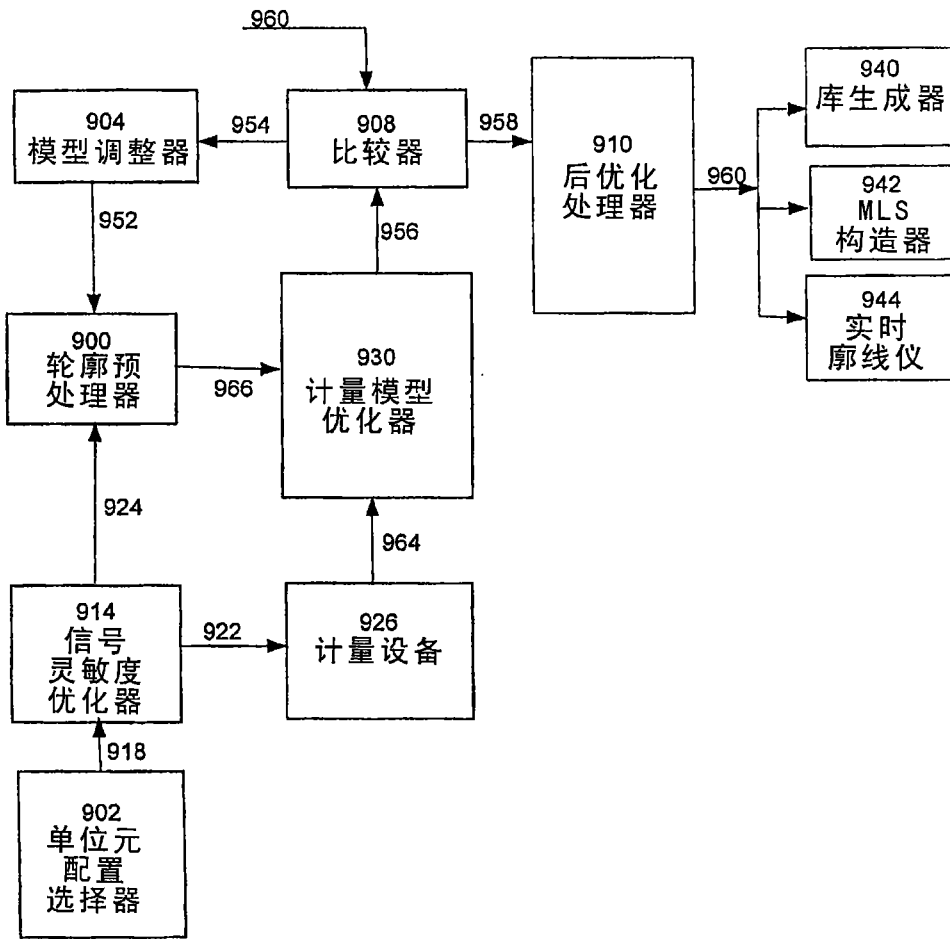


图19