



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I706120 B

(45)公告日：中華民國 109 (2020) 年 10 月 01 日

(21)申請案號：106103883

(22)申請日：中華民國 106 (2017) 年 02 月 07 日

(51)Int. Cl. : **G01B11/00 (2006.01)****G01N21/55 (2014.01)**

(30)優先權：2016/02/08 美國

15/018,708

(71)申請人：美商蘭姆研究公司 (美國) LAM RESEARCH CORPORATION (US)
美國

(72)發明人：泰蒂凱爾 穆罕默德 德里亞 TETIKER, MEHMET DERYA (TR)；斯里拉曼 沙拉維納布里恩 SRIRAMAN, SARAVANAPRIYAN (IN)；貝利三世 安祖 D BAILEY III, ANDREW D. (US)；派特森 艾立克斯 PATERSON, ALEX (GB)；古思喬 理查 A GOTTSCHO, RICHARD A. (US)

(74)代理人：許峻榮

(56)參考文獻：

TW 201415003A

US 2003/0113766A1

審查人員：邱元玠

申請專利範圍項數：29 項 圖式數：10 共 82 頁

(54)名稱

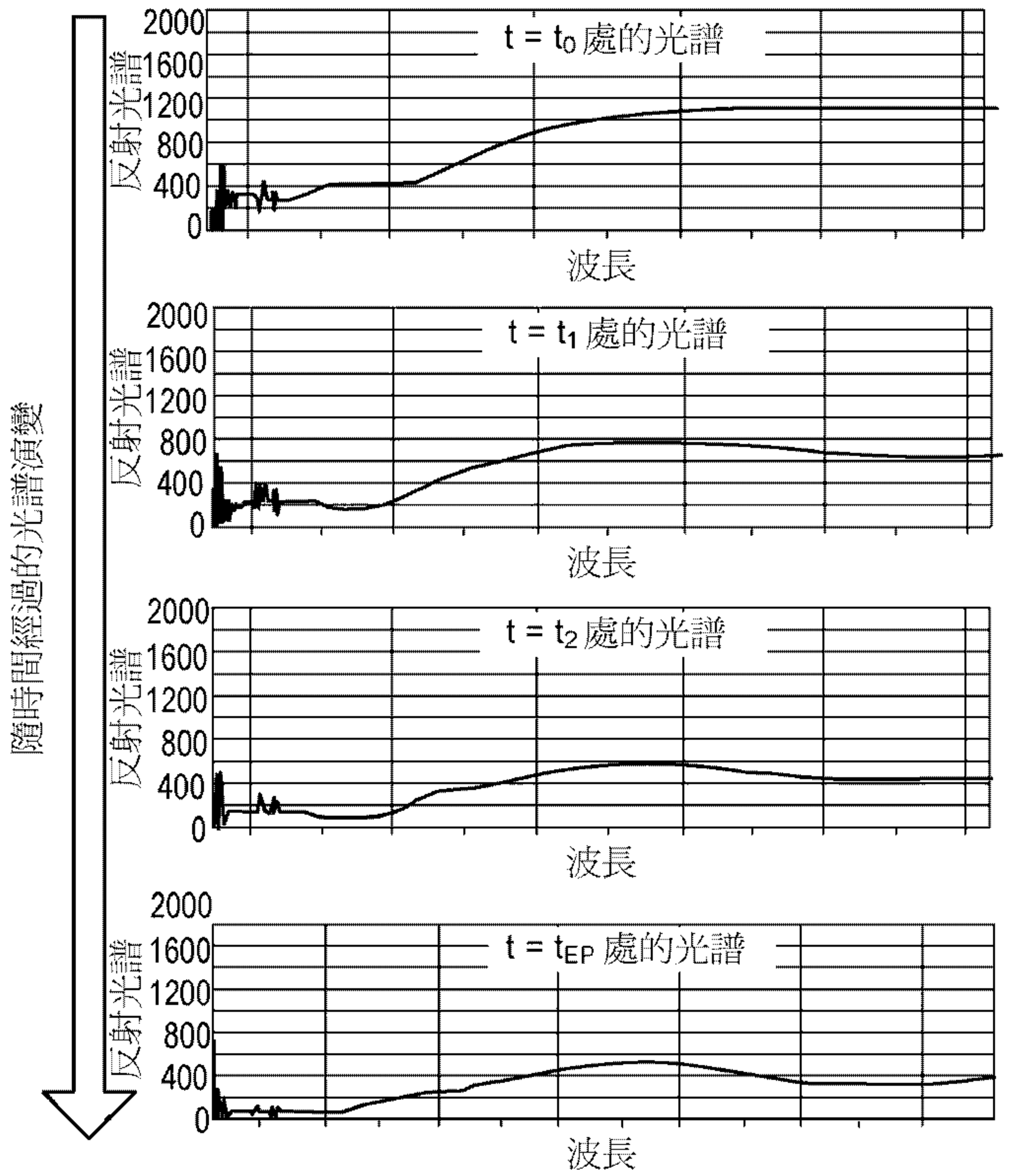
藉由反射光譜匹配與表面動力模型最佳化之蝕刻輪廓最佳化方法及設備

(57)摘要

本說明書所揭露的係為使電腦模型最佳化的方法，其經由使用複數模型參數(B)而使半導體基板上之特徵部的蝕刻輪廓與一組獨立輸入參數(A)相關聯。在若干實施例中，該方法可包含修改 B 的一或更多數值，以降低計量，該計量表示：依據 A 的一或更多組數值，自該模型所產生之計算出的反射光譜與對應之實驗反射光譜間的差異。在若干實施例中，計算該計量之步驟可包含以下之操作：將計算出的及對應之實驗反射光譜投影至經降維的子空間上，並計算投影至子空間上之反射光譜間的差異。本說明書亦揭露實行如此的最佳化之電腦模型的蝕刻系統。

Disclosed are methods of optimizing a computer model which relates the etch profile of a feature on a semiconductor substrate to a set of independent input parameters (A), via the use of a plurality of model parameters (B). In some embodiments, the methods may include modifying one or more values of B so as to reduce a metric indicative of the differences between computed reflectance spectra generated from the model and corresponding experimental reflectance spectra with respect to one or more sets of values of A. In some embodiments, calculating the metric may include an operation of projecting the computed and corresponding experimental reflectance spectra onto a reduced-dimensional subspace and calculating the difference between the reflectance spectra as projected onto the subspace. Also disclosed are etch systems implementing such optimized computer models.

指定代表圖：



正交成分的迴歸 vs 最終特徵部

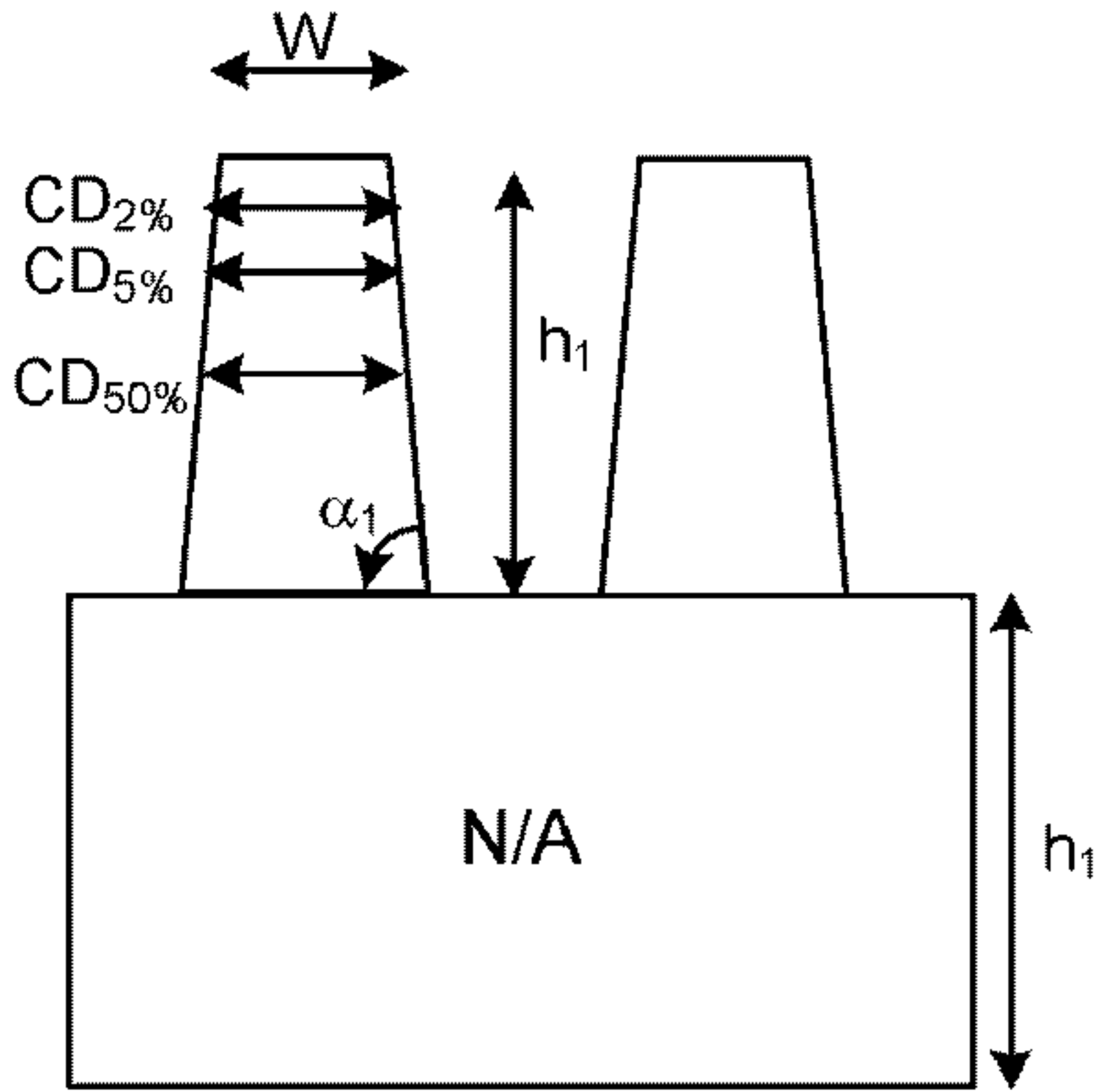


圖 7A



I706120

【發明摘要】

公告本

【中文發明名稱】 藉由反射光譜匹配與表面動力模型最佳化之蝕刻輪廓最佳化方法及設備

【英文發明名稱】 METHODS AND APPARATUSES FOR ETCH PROFILE OPTIMIZATION BY REFLECTANCE SPECTRA MATCHING AND SURFACE KINETIC MODEL OPTIMIZATION

【中文】

本說明書所揭露的係為使電腦模型最佳化的方法，其經由使用複數模型參數(B)而使半導體基板上之特徵部的蝕刻輪廓與一組獨立輸入參數(A)相關聯。在若干實施例中，該方法可包含修改B的一或更多數值，以降低計量，該計量表示：依據A的一或更多組數值，自該模型所產生之計算出的反射光譜與對應之實驗反射光譜間的差異。在若干實施例中，計算該計量之步驟可包含以下之操作：將計算出的及對應之實驗反射光譜投影至經降維的子空間上，並計算投影至子空間上之反射光譜間的差異。本說明書亦揭露實行如此的最佳化之電腦模型的蝕刻系統。

【英文】

Disclosed are methods of optimizing a computer model which relates the etch profile of a feature on a semiconductor substrate to a set of independent input parameters (A), via the use of a plurality of model parameters (B). In some embodiments, the methods may include modifying one or more values of B so as to

reduce a metric indicative of the differences between computed reflectance spectra generated from the model and corresponding experimental reflectance spectra with respect to one or more sets of values of A . In some embodiments, calculating the metric may include an operation of projecting the computed and corresponding experimental reflectance spectra onto a reduced-dimensional subspace and calculating the difference between the reflectance spectra as projected onto the subspace. Also disclosed are etch systems implementing such optimized computer models.

【指定代表圖】 圖 7A

【代表圖之符號簡單說明】 無

【發明說明書】

【中文發明名稱】 藉由反射光譜匹配與表面動力模型最佳化之蝕刻輪廓最佳化方法及設備

【英文發明名稱】 METHODS AND APPARATUSES FOR ETCH PROFILE OPTIMIZATION BY REFLECTANCE SPECTRA MATCHING AND SURFACE KINETIC MODEL OPTIMIZATION

【技術領域】

【0001】 本揭露內容係關於藉由反射光譜匹配與表面動力模型最佳化之蝕刻輪廓最佳化方法及設備。

【先前技術】

【0002】 電漿輔助蝕刻製程的效能對於半導體處理流程的成功與否而言常常是關鍵性的。然而，使蝕刻製程最佳化可能是困難且耗時的，且往往涉及製程工程師隨意手動調整蝕刻製程參數以試著產生所欲的目標特徵部輪廓。對於判定製程參數的數值以獲得特定的所欲蝕刻輪廓而言，目前沒有製程工程師可仰賴之具有充分準確度的自動程序。

【0003】 某些模型試著模擬在蝕刻期間發生於半導體基板表面上的物理化學過程。範例包含M. Kushner等人的蝕刻輪廓模型及Cooperberg等人的蝕刻輪廓模型。前者係記載於Y. Zhang, “Low Temperature Plasma Etching Control through Ion Energy Angular Distribution and 3-Dimensional Profile Simulation,” Chapter 3, dissertation, University of Michigan (2015)中，而後者係記載於Cooperberg, Vahedi,

and Gottscho, "Semiempirical profile simulation of aluminum etching in a Cl₂/BCl₃ plasma," J. Vac. Sci. Technol. A 20(5), 1536 (2002)中，上述各者係整體併入本說明書中作為所有目的以供參照。M. Kushner等人之蝕刻輪廓模型的額外說明亦可在下列文獻中尋得：J. Vac. Sci. Technol. A 15(4), 1913 (1997)、J. Vac. Sci. Technol. B 16(4), 2102 (1998)、J. Vac. Sci. Technol. A 16(6), 3274 (1998)、J. Vac. Sci. Technol. A 19(2), 524 (2001)、J. Vac. Sci. Technol. A 22(4), 1242 (2004)、J. Appl. Phys. 97, 023307 (2005)，上述各者亦整體併入本說明書中作為所有目的以供參照。雖然已有大量研究致力於發展此等模型，但其尚未具有期望程度的準確度與可靠度以實質上用於半導體處理工業領域內。

【發明內容】

【0004】 本說明書中所揭露的係為使電腦模型最佳化的方法，該電腦模型經由使用複數模型參數(B)而使半導體基板上之特徵部的蝕刻輪廓與一組獨立輸入參數(A)相關聯。該方法可包含針對一選定組之待最佳化的該等模型參數(B)，識別出一組數值；針對一選定組之用以最佳化的該等獨立輸入參數(A)，識別出複數組數值。然後，針對(A)的各組數值，該方法更可包含獲得由使用(A)的所指定之該組數值所執行的實驗蝕刻製程之光學量測所產生的實驗反射光譜，且亦使用(A)及(B)的該組數值自該模型產生計算出的反射光譜。在某些如此的實施例中，該方法更可包含修改(B)的該一或更多數值，且重複自該模型產生該計算出的反射光譜，但此時係利用(B)之經修改的數值組，俾降低計量，該計量表示：關於(A)的一或更多組數值，該實驗反射光譜與對應之該計算出的反射光譜間的差異。

【0005】 在若干實施例中，計算該計量可包含計算該計算出的反射光譜與對應之該實驗反射光譜間的差異，並將該差異投影至經降維的子空間上的操作，及/或將該計算出的反射光譜及對應之該實驗反射光譜投影至經降維的子空間上，並計算被投影至該子空間上之該等反射光譜間的差異。

【0006】 在若干實施例中，該計算出的反射光譜其中至少若干係由包含下列各者的製程所產生：使用該模型來產生計算出的蝕刻輪廓，該計算出的蝕刻輪廓係由一系列蝕刻輪廓座標所表示；以及從該計算出的蝕刻輪廓，藉由模擬由該計算出的蝕刻輪廓所反射的電磁輻射而產生計算出的反射光譜。

【0007】 在若干實施例中，該實驗反射光譜包含對應至一系列蝕刻時間的反射光譜，該系列蝕刻時間表示蝕刻製程之不同的持續時間，而該計算出的反射光譜包含自該模型所計算出的反射光譜，俾對應至該相同系列的蝕刻時間。在某些如此的實施例中，該實驗反射光譜係自於進行中的蝕刻製程期間在該系列蝕刻時間所執行的光學量測而產生，在若干情況下，在該系列蝕刻時間其中至少部分上的連續之蝕刻時間係以0.01秒至1秒來分隔。

【0008】 本說明書中亦揭露的係為用於產生計算出之蝕刻輪廓的電腦模型，其已依據前述方法來最佳化。本說明書中亦揭露的係為在蝕刻製程蝕刻半導體基板上之特徵部後近似判定該特徵部之輪廓的方法。此等方法可包含針對對應至該蝕刻製程的一組獨立輸入參數，指定一組數值，以及使用前述經最佳化的電腦模型並利用針對該等獨立輸入參數所指定的該組數值來產生蝕刻輪廓。本說明書中亦揭露的係為使用前述經最佳化的模型來判定用於蝕刻製程的一組獨立輸入參數之一組數值的方法，該蝕刻製程蝕刻半導體基板上之特徵部後大致上產生該特徵部之期望的蝕刻輪廓。

【0009】 本說明書中亦揭露的係為用於處理半導體基板的系統。此等系統可包含蝕刻設備，其用於蝕刻半導體基板，該蝕刻設備的操作係藉由一組獨立輸入參數來調整；以及控制器，其用於控制該蝕刻設備的該操作。該控制器通常包含處理器及記憶體。該記憶體可儲存經蝕刻之特徵部的輪廓模型，該經蝕刻之特徵部的輪廓模型係藉由前述模型最佳化方法其中任一者來最佳化。該處理器可配置以使用儲存於該記憶體中的經最佳化的該經蝕刻之特徵部的輪廓模型，以自針對該組獨立輸入參數的一組數值來計算出經蝕刻之特徵部的輪廓。

【0010】 本揭露內容之此等及其他特徵將參照相關圖式呈現於下。

【圖式簡單說明】

【0011】 圖1顯示自蝕刻製程之表面動力模型計算產生之蝕刻輪廓的範例。

【0012】 圖2顯示類似於圖1中所示的蝕刻輪廓之蝕刻輪廓的範例，但在此圖中，蝕刻輪廓係自利用一或更多光學量測工具所測得之實驗量測值所計算而得。

【0013】 圖3係為流程圖，其顯示關於蝕刻輪廓座標空間之用於使蝕刻輪廓模型最佳化的程序。

【0014】 圖4A係為流程圖，其顯示用於使蝕刻輪廓模型(尤其是如此的模型中所使用之某些模型參數)最佳化的程序。

【0015】 圖4B係為流程圖，其顯示用於使蝕刻輪廓模型(尤其是如此的模型中所使用之某些模型參數)最佳化的程序。

【0016】 圖5依據本揭露內容，描繪可使用最佳化的模型來識別之典範蝕刻輪廓的範例組。

【0017】圖6係為流程圖，其顯示關於反射光譜空間之用於使蝕刻輪廓模型最佳化的程序。

【0018】圖7A係為在蝕刻製程期間演變的蝕刻輪廓之反射光譜歷史的圖式說明。

【0019】圖7B示意性地顯示一組反射光譜數據，該組反射光譜數據為3-D數據區塊(該數據區塊的3個指數對應至晶圓數目(i)、光譜波長(j)、及蝕刻製程時間(k))的形式，且其收集範圍遍及許多晶圓；以及，該3-D數據區塊展開為2-D數據區塊，其可作為用於PLS光譜歷史分析的獨立數據，該圖中亦指示相依數據係為蝕刻輪廓座標。

【0020】圖8係為流程圖，其繪示用於最佳化PLS模型的迭代程序，該PLS模型使蝕刻光譜反射歷史與蝕刻製程過程期間的蝕刻輪廓相關聯，且同時最佳化EPM，該EPM係用於產生待於PLS模型之最佳化中使用的計算出之反射光譜。

【0021】圖9A-9C繪示間隙可調整之電容耦合電漿(CCP, capacitively-coupled plasma)反應器的實施例。

【0022】圖10繪示感應耦合電漿(ICP, inductively-coupled plasma)反應器的實施例。

【實施方式】

【0023】本說明書中所揭露的係為上述(及其他類似模型)蝕刻輪廓模型(EPM, etch profile model)的實用改善程序，俾使該等模型可用以產生半導體特徵部蝕刻輪廓的充分準確表示圖樣，該等表示圖樣係為可供半導體處理工業仰賴之足夠良好的近似。一般而言，該新穎程序改善了此等模型的預測能力。

【0024】一般而言，EPM及類似的模型試著藉由計算在特徵部表面上各空間位置處與蝕刻製程相關聯的反應速率，在整個模擬的蝕刻製程期間模擬基板特徵部隨時間的蝕刻輪廓演變(亦即，特徵部形狀在特徵部表面上各空間位置處的時間相依變化)，其中該反應速率係由反應腔室中所設定之電漿條件的入射通量與沉積物種特性所造成。輸出係為由離散的數據點組(亦即，輪廓座標)所表示之模擬的蝕刻輪廓，該等數據點係在空間上映射出輪廓的形狀。如此的模擬之蝕刻輪廓的範例係顯示於圖1中；模擬的輪廓可對應至圖2中所示之實際量測到的蝕刻輪廓。模擬的蝕刻輪廓隨時間的演變取決於理論模型化之空間解析的局部蝕刻反應速率，其當然取決於蝕刻製程潛在的化學與物理特性。就此而言，蝕刻輪廓模擬取決於與蝕刻製程潛在之化學反應機制相關的各種物理及化學參數、以及可特徵化腔室環境的任何物理及化學參數(溫度、壓力、電漿功率、反應物流率等)，該等參數大致上係受到製程工程師的控制。

【0025】關於前者，蝕刻輪廓模型因此需要一組「基本的」化學及物理輸入參數(例如：反應機率、黏附係數、離子及中性物種通量等)，其一般不受製程工程師獨立控制及/或甚至無法為製程工程師直接知悉，但儘管如此，其必須被指定為模擬的輸入。因此，此等組「基本的」或「機械的」輸入參數係假定具有某些數值(一般取自文獻)，且其使用隱含受到模型化之蝕刻製程潛在的物理與化學機制之某程度的簡化(及近似)。

【0026】本揭露內容呈現結合實驗技術及數據分析方法的程序，其用以改善基板蝕刻製程之此等EPM的實際工業應用性。應注意，「基板蝕刻製程」之用語包含蝕刻遮罩層的製程、或更普遍而言，包含蝕刻已沉積於基板表面上及/或位於基板表面上之任何材料層的製程。此等技術聚焦於此等模型所利用之「基本的」化學與物理輸入參數，並藉由使用用以判定何者可被視為是針對此等參數之更有效的(有效在某種意義上係指其可改善蝕刻模型的準確度)複數組數值

之程序來改善此等模型，即使針對此等「基本的」參數所判定的最佳數值係不同於文獻(或其他實驗)針對此等參數所決定的「真實的」物理/化學數值。

【0027】 以下將更詳細討論的圖3與4顯示用於產生經改善的蝕刻輪廓模型之範例製程的流程圖。例如在圖3中，所描述的流程圖具有兩個輸入分支，一分支係來自實驗量測值，而另一分支則來自尚未被最佳化之現行版本的模型。實驗分支與預測性模型分支兩者皆產生蝕刻輪廓結果。比較此等結果，且比較結果係用以改善模型，俾減少結果之間的偏差。

【0028】 EPM所輸出之在二維或三維中詳細特徵化蝕刻輪廓的數據，呈現了最佳化模型所遭遇的特定挑戰。在本說明書中所揭露的各種實施例中，輪廓數據被表示為一系列高度切片，各高度切片具有一厚度。在其他實施例中，輪廓被表示為一系列源自相同原點的向量、或一系列幾何形狀(例如梯形)。當使用輪廓的許多此等高度切片或其他成分時，使實驗輪廓與EPM輪廓間之誤差最小化的最佳化問題可能需要很多計算。為了減少所需的計算，使用降維技術(如主成分分析)來識別各種輪廓成分對最佳化中所用之整體物理輪廓的相關貢獻。以經降維之空間中的少量主成分或其他向量來呈現蝕刻輪廓可大幅簡化蝕刻輪廓模型之預測能力的改善程序。此外，如此的主成分係彼此呈正交，此情況確保可以分離的方式最佳化獨立的輪廓貢獻。

【0029】 本說明書中使用下列用語。

【0030】 獨立變數—如一般所理解，獨立變數為可造成回應的任何變數。蝕刻輪廓模型可包含各種類型的獨立變數，例如反應器製程條件(如溫度、壓力、氣體組成、流率、電漿功率等)、局部電漿條件、局部反應條件。

【0031】 結果變數—如一般所理解，結果變數為獨立變數所造成的變數。通常結果變數係由模型所輸出。在某些背景下，結果變數與相依變數一詞同義。在本揭露內容中，蝕刻輪廓為一種結果變數。

【0032】 輸入變數— 輸入變數係類似於獨立變數，但可能為更特定的，此係由於某些獨立變數在多次運作中可能會維持固定，因此對於如此的運作而言，其在技術上並非「輸入」變數。對於受到考量的運作而言，將輸入變數提供為一輸入。

【0033】 機械參數— 機械參數為一種獨立變數，其表示在反應器或受到蝕刻的基板中之一或更多特定位置處的物理及/或化學條件。

【0034】 電漿參數— 電漿參數為描述局部電漿條件(如基板上特定位置處之電漿密度及電漿溫度)的一種機械參數。

【0035】 反應參數— 反應參數為描述局部化學或物理-化學條件的一種機械參數。

【0036】 製程參數— 製程參數為反應器的參數，製程工程師能控制該反應器的參數(如腔室壓力與基座溫度)。製程參數與基板特性可控制蝕刻反應器中之機械參數的數值。

【0037】 模型參數— 模型參數為受到最佳化的一種獨立變數。其通常為機械參數，例如為化學反應參數。模型參數的初始數值並未受到最佳化。

蝕刻輪廓

【0038】 在探究蝕刻輪廓模型的細節及其改善程序之前，描述特徵部蝕刻輪廓的概念係有用的。一般而言，蝕刻輪廓(EP, etch profile)指涉可用以特徵化半導體基板上經蝕刻之特徵部的形狀之一組一或更多幾何座標的任何組數值。在簡單的情況下，可使蝕刻輪廓近似為透過橫跨特徵部之二維垂直橫剖面切片所見、往特徵部的基部半途(在基板表面上特徵部的基部(或底部)與特徵部的頂部開口之間的中點)所決定之特徵部的寬度。在較複雜的範例中，蝕刻輪廓可為透過相同二維垂直橫剖面切片所見的特徵部基部之上的各種高度處所決定之一系

列特徵部寬度。圖2提供此情況的圖示。應注意，取決於實施例，該寬度可為凹陷特徵部之一側壁與另一側壁之間的距離(亦即，被蝕刻掉之區域的寬度)，或為該寬度可指涉任一側已被蝕刻之柱狀物的寬度。後者係示意性地繪示於圖2中。應注意，在某些情況下，將如此的寬度稱為「關鍵尺寸」(圖2中標示為「CD」)，且可將自特徵部基部起算的高度稱為所謂關鍵尺寸的高度或z-座標(圖2中標示為百分比)。如所提及，蝕刻輪廓可以其他幾何參考值來表示，例如源自相同原點的一組向量、或形狀(如梯形或三角形)的堆疊、或定義典型蝕刻輪廓(如弓形、直線、或漸縮的側壁、圓化的底部、刻面等)的一組特徵形狀參數。

【0039】以此方式，一系列幾何座標(如不同高度處的特徵部寬度)映射出特徵部輪廓的離散化描繪。應注意，有許多方式可表達能表示不同高度處之特徵部寬度的一系列座標。例如，各座標可具有能表示自某基線特徵部寬度(如平均特徵部寬度、或垂直平均特徵部寬度)偏離之部分偏離的數值、或各座標可表示自垂直相鄰座標的變化等。在任何情況下，從背景與使用情況可清楚明白，被稱為「寬度」者及一般針對用以表示蝕刻輪廓之該組輪廓座標所使用的方案。概念為使用一組座標來表示特徵部經蝕刻之輪廓的形狀。亦應注意，一系列幾何座標亦可用以描述特徵部經蝕刻之輪廓的完整三維形狀或其他幾何特性，例如基板表面上經蝕刻之圓柱或溝槽的形狀。因此，在若干實施例中，蝕刻輪廓模型可提供受到模型化之特徵部的完整三維蝕刻形狀。

蝕刻輪廓模型

【0040】蝕刻輪廓模型(EPM, etch profile model)自一組輸入蝕刻反應參數(獨立變數)計算理論上決定的蝕刻輪廓，該組輸入蝕刻反應參數將潛在的物理與化學蝕刻製程及反應機制特徵化。將此等製程模型化為時間及網格中之位置的函數，而表示受到蝕刻的特徵部與其周遭環境。輸入參數的範例包含電漿參數(如

離子通量)、及化學反應參數(如特定化學反應將發生的機率)。此等參數(以及尤其在若干實施例中,電漿參數)可從各種來源獲得,此等來源包含自一般反應器結構及製程條件(如壓力、基板溫度、電漿源參數(如提供至電漿源之功率、頻率、工作週期)、反應物、及其流率等)計算此等參數的其他模型。在若干實施例中,如此的模型可為EPM的部分。

【0041】 如所解釋,EPM以反應參數作為獨立變數並函數地產生蝕刻輪廓作為回應變數。換言之,一組獨立變數為用以作為模型之輸入的物理/化學製程參數,而回應變數為模型所計算出的蝕刻輪廓特徵部。EPM使用反應參數與蝕刻輪廓間的一或更多關係。該等關係可包含例如以經定義之方式應用至獨立變數以產生相對於蝕刻輪廓之回應變數的係數、權重、及/或其他模型參數(以及反應參數及/或其他模型參數的線性函數、二階及更高階多項式函數等)。如此的權重、係數等可表示上述反應參數其中一或更多者。在本說明書中所述的最佳化技術期間,調節或調整此等模型參數。在若干實施例中,反應參數其中若干者係為待最佳化的模型參數,而其他者則被用來作為獨立輸入變數。例如,化學反應參數可為可最佳化的模型參數,而電漿參數可為獨立變數。

【0042】 一般而言,「回應變數」表示輸出及/或效應,且/或受測試以察看其是否為效應。「獨立變數」表示輸入及/或原因,且/或受測試以察看其是否為原因。因此,可研究回應變數以察看其是否隨獨立變數而變化、及其變化量。獨立變數亦可被認為係「預測變數」、「迴歸因子」、「控制變數」、「操控變數」、「解釋變數」、或「輸入變數」。

【0043】 如所解釋,某些EPM使用可被特徵化為基本反應機械參數的輸入變數(一種獨立變數),此等輸入變數可被視為是潛在化學與物理的基本特性,因此實驗製程工程師通常無法控制此等量。在蝕刻輪廓模型中,此等變數係應用於網格之各位置處,並應用於由經定義之時步(time step)所分離的時間。在若干

實施例中，網格的解析度可在約數埃至約一微米間變化。在若干實施例中，該時步可在約 $1\text{e-}15$ 秒至 $1\text{e-}10$ 秒之間變化。在某些實施例中，最佳化使用兩種機械獨立變數：(1)局部電漿參數；及(2)局部化學反應參數。此等參數在某種意義上為「局部」，其可變化位置的函數，在某些情況下可變化小至網格的解析度。電漿參數的範例包含局部電漿特性，例如粒子(如離子、自由基、光子、電子、經激發之物種、沉積物種)的通量及能量、以及其能量與角分布等。化學及物理-化學反應參數的範例包含速率常數(例如特定化學反應在特定時間將發生的機率)、黏附係數、蝕刻之能量閾值、參考能量、定義濺射產率之能量的指數、角產率函數及其參數等。再者，參數化的化學反應包含其中反應物包含受到蝕刻之材料及蝕刻劑的反應。應瞭解，化學反應參數可包含除了直接蝕刻基板的反應外之各種類型的反應。如此的反應之範例包含副反應，該副反應包含寄生反應、沉積反應、副產物的反應等。此等反應其中任一者皆可能影響整體蝕刻速率。亦應瞭解，模型除了上述的電漿及化學反應輸入參數外可能需要其他輸入參數。如此的其他參數之範例包含反應位置處的溫度、分壓、或反應物等。在某些情況下，可將此等及/或其他非機械參數輸入至可輸出機械參數其中若干者的模組。

【0044】 在若干實施例中，針對在最佳化期間維持固定之EPM模型變數以及獨立變數(例如在若干實施例中為電漿參數)的初始(未最佳化的)數值，可從各種來源(例如文獻)獲得、可由其他計算模組或模型等而計算獲得。在若干實施例中，獨立輸入變數(如電漿參數)可使用模型來決定，例如，在電漿參數的情況下，可自蝕刻腔室電漿模型所決定。如此的模型可自製程工程師無法控制(例如藉由轉動旋鈕)的各種製程參數來計算可應用的輸入EPM參數—該等製程參數例如為腔室環境參數，如壓力、流率、電漿功率、晶圓溫度、ICP線圈電流、偏壓電壓/功率、脈衝頻率、脈衝工作週期等。

【0045】 當運作EPM時，將獨立變數其中若干者設定為用以進行實驗之已知或預期的參數數值。例如，可在模型化範圍中的位置處將電漿參數固定為已知或預期數值。其他獨立變數(在本說明書中被描述為模型的參數或模型參數)係為以下所述被選定為受到最佳化程序調整的該等獨立變數。例如，化學反應參數可為經調整的模型參數。因此，在對應至特定之量測到的實驗蝕刻輪廓的一系列運作中，變化模型參數以說明如何選擇此等參數的數值以最有效地使模型最佳化。

【0046】 EPM可具有許多不同形式的其中任一者。最終，其會提供獨立變數與回應變數間的關係。該關係可為線性的或非線性的。一般而言，EPM在此領域中被稱為基於單元的蒙地卡羅(cell-based Monte Carlo)表面反應模型。具有各種形式的此等模型操作以在半導體晶圓製造的背景模擬晶圓特徵部之形貌隨時間的演變。模型發射具有能量及角分佈的假性粒子，此等假性粒子係由電漿模型或實驗診斷針對晶圓上任意徑向位置而產生。該等假性粒子在統計上具有權重以表示朝向表面之自由基及離子的通量。模型會應付造成表面上之蝕刻、濺射、混合、及沉積的各種表面反應機制以預測輪廓演變。在蒙地卡羅整合期間，追蹤各種離子與中性假性粒子在晶圓特徵部內的軌跡直至其反應或離開計算範圍為止。EPM已發展出預測在各種材料上蝕刻、剝除、原子層蝕刻、離子化金屬物理氣相沉積、及電漿輔助化學氣相沉積的能力。在若干實施例中，EPM利用二維或三維的直線性網目，此網目具有足夠精細的解析度以適當地應付/模型化晶圓特徵部的維度(然而，原則上網目(無論係二維或三維)亦可利用非直線性的座標)。可將網目視為係二維或三維中網格點的陣列。亦可將其視為單元的陣列，該等單元表示與各網格點相關(置中)之二維中的局部面積或三維中的體積。網目內的各單元可表示不同的固體材料或材料的混合物。要選擇二維或三維網目作為模型化的基礎，可取決於受到模型化之晶圓特徵部的類別/類型。

例如，可使用二維網目來模型化長溝槽特徵部(例如在多晶矽基板中)，二維網目在下列假設情況下描繪溝槽的橫剖面形狀：溝槽之末端的幾何特徵與遠離其末端而沿溝槽大部分長度部分往下發生的反應性製程不太相關(亦即，對於此橫剖面二維模型的目的而言，假設溝槽是無限的，再次強調，此情況對於遠離其末端的溝槽特徵部而言係為合理假設)。另一方面，使用三維網目來使圓形的通孔特徵部(貫矽通孔(TSV, through-silicon via))模型化係為適當的(由於特徵部的x, y 水平維度彼此相等)。

【0047】 網目間距的範圍可自次奈米(例如自1埃)上至數微米(例如10微米)。一般而言，對各網目單元指定在輪廓演變期間可能會變化的材料身份，例如光阻、多晶矽、電漿(例如在空間區域中未被該特徵部所佔據的部分)。固態物種係由計算單元的身份來表示；氣態物種則以計算的假性粒子來表示。以此方式，網目提供當晶圓特徵部的幾何特徵/形貌在反應性蝕刻製程中隨時間演變時，晶圓特徵部與周遭氣體環境(如電漿)的合理詳細表示(例如以計算之目的而言)。

蝕刻實驗及輪廓量測

【0048】 為了訓練且最佳化在先前段落中所呈現的EPM，可進行各種實驗以判定(以實驗所能允許的最大準確程度)在各種蝕刻製程參數組所指定之各種製程條件下所進行的實際蝕刻製程所造成之實際蝕刻輪廓。因此，例如，吾人針對一組蝕刻製程參數來指定第一組數值(如：蝕刻劑流率、電漿功率、溫度、壓力等)，據此設定蝕刻腔室設備、使蝕刻劑流至腔室中、引燃電漿等，然後蝕刻第一半導體基板以產生第一蝕刻輪廓。接著吾人針對相同組的蝕刻製程參數來指定第二組數值、蝕刻第二基板以產生第二蝕刻輪廓等。

【0049】可使用製程參數的各種組合來視情況表示廣泛或聚焦的製程空間以訓練EPM。接著使用製程參數的相同組合來計算輸入至EPM的(獨立)輸入參數(如機械參數)，以提供可與實驗結果比較的蝕刻輪廓輸出(回應變數)。由於實驗可能係昂貴且耗時的，因此可使用技術來設計實驗，俾減少為了提供用於最佳化EPM之穩健訓練設定所需進行的實驗次數。針對此目的，可使用例如實驗設計(DOE, design of experiments)的技術。一般而言，如此的技術會判定在各種實驗中要使用哪些組的製程參數。其藉由考量製程參數間的統計交互作用、隨機化等，而選擇製程參數的組合。例如，DOE可識別出涵蓋已定案的製程之中心點附近有限參數範圍的少量實驗。

【0050】通常於模型最佳化程序的初期，研究者將會進行所有實驗，且於最佳化常規性迭代中僅使用該等實驗直至收斂。或者，實驗設計者可針對初期迭代進行某些實驗，且後續隨著最佳化的進行而進行額外的實驗。最佳化程序可告訴實驗設計者待評估的特定參數，以及因此而推斷出的用於後續迭代之待運作之特定實驗。

【0051】可使用一或更多現地或離線的量測工具來量測由此等實驗蝕刻製程操作所造成的實驗蝕刻輪廓。可在下列各時間點進行量測：蝕刻製程結束時、蝕刻製程期間、或蝕刻製程期間的一或更多時間點。在蝕刻製程結束時進行量測的情況下，量測方法可能為破壞性的，而在蝕刻製程期間的區間處進行量測的情況下，量測方法通常為非破壞性的(因此不會中斷蝕刻)。適當的量測技術之範例包含但不限於：LSR、OCD、及橫剖面SEM。應注意，量測工具可直接量測特徵部的輪廓，例如使用SEM的情況(其中實驗基本上會反映出特徵部之蝕刻輪廓的影像)；或量測工具可間接判定特徵部的蝕刻輪廓，例如使用OCD量測的情況(其中進行某些後處理，以自實際量測數據逆序操作得出特徵部的蝕刻輪廓)。

【0052】 在任何情況下，蝕刻實驗與量測程序的結果係為一組量測到的蝕刻輪廓，各量測到的蝕刻輪廓一般包含如上所述表示特徵部輪廓形狀之一系列座標的一系列數值或一組網格數值。一範例係顯示於圖2中。接著可如下所述使用蝕刻輪廓作為輸入，以訓練、最佳化、及改善電腦化的蝕刻輪廓模型。

模型參數調整/最佳化

【0053】 各量測到的實驗蝕刻輪廓會提供用於調整該電腦化蝕刻輪廓模型的基準。因此，藉由施加實驗蝕刻輪廓並利用蝕刻輪廓模型來執行一系列的計算，以察看模型在其所預測的蝕刻輪廓方面如何偏離現實。模型可藉由此資訊而達到改善。

【0054】 圖3呈現流程圖，其繪示用於調整及/或最佳化例如上述者之蝕刻輪廓模型的一組操作300。在若干實施例中，如此的經調整及/或最佳化之模型會降低(且在某些情況下實質上最小化)一計量，該計量係關於(指示、量化等)下列兩者間的總和差異：進行蝕刻實驗所獲得之量測到的蝕刻輪廓、與自模型所產生的對應之計算出的蝕刻輪廓。換言之，經改善的模型可降低不同實驗製程條件(藉由所選之製程參數的不同組指定數值所表示—其係用以計算輸入至EPM的獨立輸入參數)上的總和誤差。

【0055】 如圖3中所示，最佳化程序300始於操作310，該操作為選擇一組待最佳化之模型參數。再次強調，可將此等模型參數選擇為能使製程工程師無法控制之潛在化學與物理製程特徵化的參數。此等參數其中若干者或全部係將基於實驗數據來調整，以改善模型。在若干實施例中，此等模型參數可為反應參數，且包含反應機率及/或(熱)速率常數、反應物黏附係數、物理或化學濺射之蝕刻能量閾值、對能量之指數相依性、蝕刻角產率相依性、及與角產率曲線相關的參數等。應注意，一般而言，最佳化係針對流至蝕刻腔室中之給定/特定

混合的化學物種(然而應瞭解，蝕刻腔室的化學組成會隨著蝕刻製程的進行而改變)來進行。在若干實施例中，以不同於其他輸入參數(例如電漿參數)的相異輸入檔案來將反應參數饋入EPM中。

【0056】 在若干實施例中，模型參數可包含蝕刻製程待模型化之特定化學反應的規格。本領域中具通常知識者應察知，對於給定的蝕刻製程而言，在蝕刻腔室中於任何時間點可能有許多反應進行。此等反應包含主蝕刻反應本身，但其亦可包含主蝕刻製程的副反應、涉及主蝕刻反應之副產物的反應、副產物間的反應、涉及副產物之副產物的反應等。因此，在若干實施例中，模型參數的選擇涉及選擇哪些反應要包含於模型中。假定上，包含越多反應，則模型越準確，且對應之所計算出的蝕刻輪廓越準確。然而，包含更多反應會增加模型的複雜度，更因而增加模擬的計算成本。此亦會造成有更多欲最佳化的反應參數。若所加入的特定反應對於整體蝕刻動力學而言係為重要的，則此情況可為優良的。然而，若額外加入之反應並非關鍵的，則加入另一組反應參數可能會使最佳化程序更難以收斂。再次強調，選擇要包含哪些反應、以及與此等反應相關聯的速率常數或反應機率，可以其自有的輸入檔案(例如：有別於電漿參數)饋入EPM中。在某些實施例中，針對給定組的反應物物種，各物種的各種替代性/競爭性之反應路徑的機率總和應為1。並且，再次強調，應察知，欲包含之反應、反應機率等的規格(例如在輸入檔案中)將大致上針對流至蝕刻腔室中以執行蝕刻製程/反應之給定/特定混合的化學物種來進行(且最佳化將大致上針對此給定的混合物來進行，然而在若干實施例中可發現，針對一化學物混合物所習得之知識可應用於其類似的/相關的化學物混合物)。

【0057】 在任何情況下，為了使圖3之流程圖中所示的最佳化程序開始，通常必須針對各種待最佳化的模型參數(例如：反應機率、黏附係數等)選擇初始

數值。此係於操作310中完成。初始數值可為文獻中所找到的數值、基於其他模擬所計算出的數值、自實驗所決定的數值、或自先前最佳化程序已知的數值等。

【0058】 在操作310中所選擇及初始化的模型參數係於一組獨立輸入參數上進行最佳化，且在操作320中對該組獨立輸入參數提供複數組數值。如此的獨立輸入參數可包含能使反應腔室中之電漿特徵化的參數。在若干實施例中，經由有別於用於上述反應參數的輸入檔案來將此等電漿參數饋入EPM中。針對該等獨立輸入參數(例如電漿參數)之該複數組數值因此能在所選之獨立輸入參數的空間中指定不同點。例如，若選擇待最佳化的輸入參數為溫度、蝕刻劑通量、及電漿密度，並針對此等所選的輸入參數來選擇5組數值，則會在溫度、蝕刻劑通量、及電漿密度之所選的三維輸入參數空間中識別出5個獨特的點—此空間中該5點其中各點係對應至溫度、蝕刻劑通量、及電漿密度的不同組合。如所提及，可使用例如DOE的實驗設計程序來選擇複數組輸入參數。

【0059】 一旦選定後，針對輸入參數的各組合，在操作330中進行蝕刻實驗以量測實驗蝕刻輪廓。(例如，在若干實施例中，針對輸入參數之數值的相同組合、以及平均所得之蝕刻輪廓量測值(可能在捨棄離群值後等)，共同進行複數蝕刻實驗)接著使用此組基準以下列方式來調整及最佳化模型：在操作335中，針對輸入參數其中各組合的數值來計算蝕刻輪廓，然後在操作340中於該等輸入參數之所有不同組的數值上計算誤差計量，該誤差計量指示(關於、量化等)下列兩者間的差異：實驗所得之蝕刻輪廓、與計算出之蝕刻輪廓。

【0060】 應注意，此組計算出之蝕刻輪廓(誤差計量係自其所計算出)係對應至在操作310中所指定之一組先前所選的模型參數。最佳化程序的目的係在於針對此等模型參數來判定出更有效的選擇。因此，在操作350中判定現行指定的模型參數是否使操作340中所計算出的誤差計量為局部最小值(就模型參數的空間而言)，而若判定為否，則在操作360中修改該組模型參數其中一或更多數值，

然後使用該經修改的數值來產生新的一組蝕刻輪廓(重複圖3之流程圖中示意性指示的操作335)，而之後在操作340的重複中計算新的誤差計量。接著流程再次進行至操作350，其中判定此新的模型參數之組合是否在誤差計量所評估之所有組輸入參數上呈現局部最小值。若判定為是，則如圖中所指示，結束最佳化程序。若判定為否，則再次於操作360中修改該等模型參數並重複循環。

【0061】 圖4A呈現用於精鍊蝕刻輪廓模型中的模型參數之方法470的流程圖。如所描述，方法470始於收集針對一系列受控制之蝕刻腔室參數組所產生的實驗蝕刻輪廓。在較後續的階段，該方法比較此等實驗所產生的蝕刻輪廓與使用蝕刻輪廓模型所產生之理論產生的蝕刻輪廓。藉由比較實驗產生的蝕刻輪廓與理論產生的蝕刻輪廓，可精鍊蝕刻輪廓模型所用的一組模型參數，以改善模型預測蝕刻輪廓的能力。

【0062】 在所描述的方法中，程序始於操作472，其中針對在計算及實驗階段兩者中使用的情況而選擇複數組製程參數。此等製程參數定義欲進行比較的條件範圍。各組製程參數表示用於操作蝕刻腔室的一批設定。如所提及，製程參數的範例包含腔室壓力、基座溫度、及蝕刻腔室內可被選擇及/或可被量測到的其他參數。或者，或此外，各組製程參數表示受到蝕刻之工作件的條件(例如，透過蝕刻所形成的線寬與線節距)。

【0063】 在針對實驗運作選擇複數組製程參數之後(應注意，EPM最佳化的一組獨立輸入參數將對應至各組製程參數(及/或自各組製程參數而計算出))，開始實驗。此係由複數參數組的一循環所描述，且包含操作474、476、478、及480。操作474簡明地表示針對運作新的實驗，前進至下一製程參數組(參數組(i))。一旦參數組被更新，則方法使用現行參數組的參數來運作新的蝕刻實驗(方塊476)。接著，在利用現行參數組運作蝕刻實驗後，方法產生並儲存在工作件上所

量測到的實驗蝕刻輪廓(方塊478)。如上所說明，「產生並儲存蝕刻輪廓」的操作提供在經降維的空間中之蝕刻輪廓，如蝕刻輪廓的主成分表徵。

【0064】如繪示於決策方塊480處，每次在一實驗中使用一個新的製程參數組，方法決定是否有任何更多的參數組需考量。如繪示於方塊474處，若有額外的參數組，開始下一參數組。最終，在考量過所有起初定義的製程參數組後，決策方塊480判定已無更多參數需考量。在此時點，程序係交接至程序流程的模型最佳化部分。

【0065】如繪示於方塊482處，起初在流程的模型最佳化部分中，初始化一組模型參數(模型參數(j))。如所說明，此等模型參數為模型用來預測蝕刻輪廓的參數。在此程序流程的背景下，修改此等模型參數以改善EPM的預測能力。在若干實施例中，模型參數為表示發生於蝕刻腔室中之一或更多反應的反應參數。在一範例中，模型參數為反應速率常數或特定反應將發生的機率。又，如本說明書中其他處所說明，蝕刻輪廓模型可使用在最佳化常規作業期間維持固定的其他參數。如此的參數之範例包含物理參數，例如電漿條件。

【0066】在操作482處初始化模型參數後，方法進入最佳化循環，在此最佳化循環中產生理論蝕刻輪廓，該等理論蝕刻輪廓係對應於用以在實驗循環中產生實驗蝕刻輪廓的製程參數組其中各者。換言之，方法使用EPM來預測對應於製程參數組其中各者的蝕刻輪廓(亦即，針對所有不同的參數組(i)的蝕刻輪廓)。應注意，然而，對於此等製程參數組其中各者而言，實際輸入至EPM中(以運作EPM)的係為對應於給定之製程參數的一組獨立輸入參數。對於某些參數而言，獨立輸入參數可與製程參數相同；但對於某些參數而言，獨立輸入參數(實際饋入EPM中的)可自物理性製程參數而導出/計算出；因此其彼此相互對應，但其可能不為相同的。因此應理解，在圖4A(操作482-496)中此最佳化循環的背景下，EPM係(要非常精確而言)針對對應於「參數組(i)」的一組獨立輸入參數來運

作，而在實驗循環(操作472-480)中，實驗係利用對應於「參數組(i)」的製程參數來運作。

【0067】 在任何情況下，起初在此循環中，方法前進至在操作472中初始設定之參數組其中下一參數組。見方塊484。利用此所選的參數組，方法使用現行組的模型參數運作蝕刻輪廓模型。見方塊486。之後，方法針對一參數組與複數模型參數的現行組合(參數組(i)與模型參數(j))來產生並儲存理論蝕刻輪廓。見方塊488。「產生並儲存蝕刻輪廓」的操作提供在經降維之空間中的蝕刻輪廓，例如蝕刻輪廓的主成分表徵。

【0068】 最終在此循環中考量所有參數組。在該點之前，決策方塊490判定仍有額外參數組，並使控制返回方塊484，在方塊484處，參數組行進至下一參數組。針對參數組(參數組(i))其中各者重複運作模型及產生且儲存理論蝕刻輪廓的程序。

【0069】 在針對目前考慮的模型參數(模型參數(j))已無剩餘參數組需考量的情況下，程序離開此循環並計算理論蝕刻輪廓與實驗蝕刻輪廓間的誤差。見方塊492。在某些實施例中，該誤差係針對製程參數的所有參數組(i)來決定，而非只針對其中一參數組來決定。

【0070】 方法使用方塊492中所決定的誤差來決定模型參數的最佳化常規作業是否收斂。見方塊494。如下所述，可使用各種收斂標準。假設最佳化常規作業尚未收斂，程序控制將被導向方塊496，在方塊496處，方法產生可改善模型預測能力之新的一組模型參數(模型參數(j))。利用新的一組模型參數，程序控制返回由方塊484、486、488、及490所定義的循環。當在此循環中時，重複地前進參數組(i)，且每次模型皆運作以產生新的理論蝕刻輪廓。在考量過所有的參數組後，在方塊492處再次決定理論蝕刻輪廓與實驗蝕刻輪廓間的誤差，並在方塊494處再次運用收斂標準。假設尚未符合收斂標準，方法以上述方式產生用

於測試的再另一組模型參數。最終，選定一組符合收斂標準的模型參數。然後完成程序。換言之，圖4中所示的方法產出了一組能改善蝕刻輪廓模型之預測能力的模型參數。

【0071】圖4B中描述相關的程序。如所示，針對不同的基板特徵部結構而非不同製程條件來產生實驗蝕刻輪廓與理論蝕刻輪廓。除此之外，基本的程序流程為相同的。在若干實施例中，針對實驗操作及理論操作而變化特徵部結構及製程條件兩者。

【0072】不同的特徵部可包含不同的「線」與「節距」幾何特徵。見圖4B-1。節距指涉能涵蓋重複多次的受到蝕刻之特徵部的最小單位單元寬度。線指涉在假設對稱情況下兩相鄰側壁間的總厚度。例如，方法可運作重複L50P100、L100P200、L100P300、L75P150等幾何特徵，其中數目係以奈米作為單位來表示線寬與節距。

【0073】在所描述的實施例中，程序471始於選擇蝕刻輪廓模型的固定及變動參數(模型參數)。在若干實施例中，此等參數可為物理及化學反應參數。此外，選擇基板特徵部。見操作473。

【0074】針對各特徵部幾何特徵(如繪示於操作475及481中之進行的特徵部組(k))，方法運作使用現行特徵部幾何特徵的蝕刻製程，而產生實驗蝕刻輪廓(實驗蝕刻輪廓(k))，並儲存蝕刻輪廓。見操作477及479。如之前所述，各實驗蝕刻輪廓皆被儲存為經降低的維度表徵。

【0075】之後，方法初始化用於調整的模型參數(模型參數(j))。見操作483。針對各特徵部幾何特徵(以操作485及491中的特徵部組(k)來進行)，方法運作蝕刻輪廓模型，而產生理論蝕刻輪廓(理論蝕刻輪廓(k))，並儲存蝕刻輪廓。見操作487及489。如前所述，各理論蝕刻輪廓皆被儲存為經降低的維度表徵。

【0076】 針對在包含操作487及489之循環中所考量的各組模型參數(j)，方法比較理論蝕刻輪廓與實驗蝕刻輪廓以判定在所有基板特徵部組上之蝕刻輪廓間的誤差。見操作493。若如操作495處所判定，程序已收斂，則程序完成並選定目前的模型參數。若程序尚未收斂，方法產生新的一組模型參數(j)，並返回由操作485、487、489、及491所定義的循環。

【0077】 在若干實施例中，針對各特徵部組選擇分別的模型參數。在如此的情況下，方法可標繪或以其他方式決定線/節距比例(或特徵部另外的特性)與最終收斂之模型參數間的關係。若已收斂之模型參數的數值為合理常數(可能具有一些雜訊)，方法針對經改善的邊緣輪廓模型而使用平均模型參數數值。若已收斂之模型參數的數值呈現趨勢，方法可使用多項式擬合建立函數，該函數可用以針對各特徵部組(例如，線及節距幾何特徵)來選擇模型參數數值。

【0078】 應理解，使用特徵部組、製程參數組、或其他變數來進行複數實驗，而因此產生複數實驗決定的蝕刻輪廓。在若干實施例中，如以上流程圖所繪示，此等蝕刻輪廓(及相關的參數組)的一半或某其他比例部分係用於訓練，而剩餘的蝕刻輪廓係用於驗證。訓練用的蝕刻輪廓會產生經調整的模型參數，其係用於蝕刻輪廓模型中，且其係藉由針對驗證組應用經調整的模型來預測蝕刻輪廓而驗證。若針對驗證組之實驗蝕刻輪廓與理論蝕刻輪廓間的誤差在統計上高於使用訓練組在收斂處所得到的誤差，則如之前的情況，使用不同的訓練組來調整模型。

關於迭代式非線性最佳化程序的細節

【0079】 圖3背景下所描述的模型參數最佳化程序通常為迭代式非線性最佳化程序(例如其使誤差計量最佳化且該誤差計量通常為輸入參數的非線性函數)，且就此而言，可使用本領域中用於非線性最佳化的各種已知技術。見例如

以下文獻：Biggs, M.C., “Constrained Minimization Using Recursive Quadratic Programming,” Towards Global Optimization (L.C.W. Dixon and G.P. Szergo, eds.), North-Holland, pp 341–349, (1975)；Conn, N.R., N.I.M. Gould, and Ph.L. Toint, “Trust-Region Methods,” MPS/SIAM Series on Optimization, SIAM and MPS (2000)；Moré, J.J. and D.C. Sorensen, “Computing a Trust Region Step,” SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, Vol. 3, pp 553–572, (1983)；Byrd, R.H., R.B. Schnabel, and G.A. Shultz, “Approximate Solution of the Trust Region Problem by Minimization over Two-Dimensional Subspaces,” Mathematical Programming, Vol. 40, pp 247–263 (1988)；Dennis, J.E., Jr., “Nonlinear least-squares,” State of the Art in Numerical Analysis ed. D. Jacobs, Academic Press, pp 269–312 (1977)；Moré, J.J., “The Levenberg-Marquardt Algorithm: Implementation and Theory,” Numerical Analysis, ed. G. A. Watson, Lecture Notes in Mathematics 630, Springer Verlag, pp 105–116 (1977)；Powell, M.J.D., “A Fast Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization Calculations,” Numerical Analysis, G.A.Watson ed., Lecture Notes in Mathematics, Springer Verlag, Vol. 630 (1978)；上述各者係整體併入本說明書中作為所有目的以供參照。在若干實施例中，此等技術在某些可能被加諸於輸入參數及/或誤差計量的限制下使目標函數(在本說明書為誤差函數/計量)最佳化。在某些如此的實施例中，限制函數本身可能係非線性的。例如，在所計算出的蝕刻輪廓係以EPM所輸出的一組經堆疊之梯形來表示的實施例中，可將誤差計量定義為此等經堆疊之梯形的邊界所表示之面積與量測到的實驗蝕刻輪廓之面積間的差異。在此情況下，誤差計量為EPM所輸出之回應變數的非線性函數，因此可自以上所述(及/或自所併入的文獻)的可容許規格化之非線性限制的技術中選擇受限制的最佳化技術。應注意，在圖3中所示之流程圖的背景下，此等各種程序係對應至在操作360中如何修改

一或更多模型參數，以及在操作350中如何偵測及處理誤差的一或更多潛在局部最小值。

【0080】 在若干實施例中，用以如圖3中所示判定經改善/經調整之模型參數的迭代式非線性最佳化程序可被分成複數階段，且在某些如此的實施例中，不同的最佳化階段可對應至半導體基板表面上受到蝕刻之材料的不同層。此方案亦可藉由減少受到變化之輸入參數的數目來降低計算負擔，並簡化被計算的誤差計量。例如，若待蝕刻的基板包含依序沉積之不同材料的多層堆疊，由於不同層通常具有不同的材料組成，因此通常不同的化學性質會使各層中所發生的局部蝕刻製程特徵化—例如不同蝕刻反應(單或複數)、不同副反應、副產物之間的不同反應、或甚至若發生相同(或相似)的化學反應，該等化學反應可以大致上不同的速率、不同的化學計量比等發生。因此，為了設定對應至整個多層堆疊之蝕刻的蝕刻輪廓模型(EPM, etch profile model)，所饋入模型的輸入參數大致上包含對應至不同堆疊層的不同組參數。如上所述，此等設定可包含指示蝕刻製程的模型化中欲包含之化學反應的參數、以及使反應本身特徵化的參數—反應機率、黏附係數等。

【0081】 然而應體認，最佳化協定不一定需要同時使各參數最佳化，例如圖3之操作360中可使某些參數維持固定，而在如圖中所示意地繪示之最佳化的一或更多特定循環/回合中可允許其他參數「浮動」及受到修改。因此，基於觀察到各層中發生之化學程序僅到達該層的某局部程度，在若干實施例中，可藉由下列方式加速最佳化：單獨調整與一層相關的模型參數同時使與其他層相關的參數維持固定，之後選定另一層，允許其參數「浮動」同時使其他層的參數維持固定，以此類推，直至所有層皆已被獨立調整為止。接著可重複此逐層調整程序複數次，每次循環過所有層，直至達到某程度的最佳化為止，而在此時點，可基於利用已經獨立最佳化之與各層相關的參數將更有效率地收斂(且可能

收斂至誤差計量的較佳局部最小值)的體認，而在所有層上進行完整最佳化—亦即，允許所有層之模型參數變化/「浮動」。更進一步，可重複整個逐層程序以進一步改善結果—亦即，藉由徹底循環該等層一或更多次以執行層特定的最佳化，接著執行總體最佳化，其使所有層的模型參數能浮動。應注意，在圖3的背景，選定某些模型參數使其能「浮動」(因此針對特定層而被獨立最佳化)同時使其他參數維持固定的操作，可作為圖3(在此等及類似類別的實施例中)之參數修改操作360的部分。

【0082】 作為繪示前述獨立逐層最佳化程序的特定範例，考量使蝕刻遮罩底下之層模型化的情況，其中蝕刻遮罩層與其底下的層兩者皆會受到某程度的蝕刻。因此，此構成兩層蝕刻模型，其中在對應至該兩層之模型參數完全同時最佳化之前，可獨立最佳化用於該兩層其中各者的參數。

【0083】 因此，開始可針對所有模型參數指定數值、運作模型，以在輸入參數之所有組數值(表示不同的實驗蝕刻條件)上產生計算出的蝕刻輪廓，然後在對應至獨立輸入參數之複數組數值的所有輪廓上，計算指示實驗蝕刻輪廓與計算出的蝕刻輪廓間之差異的誤差計量。接著針對獨立的層特定最佳化，可選擇蝕刻遮罩底下的層(例如介電層)，針對最佳化修改與此(介電)層相關之一或更多模型參數，在獨立輸入參數的所有組數值上再次運作模型，計算新的誤差計量，再次修改與介電層相關的一或更多模型參數，再次運作模型，再次計算誤差，以此類推，直至針對介電層獲得誤差的局部最小值為止。

【0084】 接著將介電層的模型參數維持固定於此等數值，針對獨立最佳化選擇遮罩層的模型參數，修改其(蝕刻遮罩層之模型參數的)一或更多數值，再次運作模型，計算誤差，以此類推，直至針對蝕刻遮罩層獲得誤差的局部最小值為止。在此時點，可在兩層的所有模型參數上執行完全最佳化，或在若干實施例中，在執行完全最佳化之前，可執行獨立介電層及遮罩層最佳化的一或更多

額外循環，以使完全最佳化更有效(例如更快收斂、或收斂至總誤差計量的較佳所得局部最小值)。

【0085】亦應瞭解，在某些情況下，前述的逐層最佳化程序不需被限制於一次僅調整一單一獨立層。例如，若模型化6層堆疊的蝕刻，前述逐層最佳化程序的一變化為選擇一對層同時調整(亦即，同時使對應至一對相鄰層的模型參數浮動)，並依序對3對層進行此步驟，可能在接著針對所有層的模型參數上進行完全同時最佳化之前重複該3步驟循環多次；如前，可選擇性地重複整個逐層程序(或在此情況下為逐兩層程序)直至識別出整個堆疊上之誤差的局部最小值為止。

【0086】數值最佳化程序(無論是在完全最佳化前進行逐層最佳化、或直接在所有層上進行完全最佳化)取決於最佳化的起始點(亦即，取決於針對模型參數所選擇的初始數值)以及其他因素亦可能造成蝕刻輪廓計量的複數局部最小值，而因此可能存在最佳化程序可潛在地識別出的許多局部最小值，其用來表示經改善(及/或經最佳化)的模型。在有許多誤差局部最小值的情況下，可藉由定義模型參數的物理實際上及下邊界來考量而消除此等模型參數的許多潛在組。在若干實施例中，可針對複數起始點選擇(模型參數的初始數值)執行前述數值最佳化，以潛在地識別複數局部最小值，而因此可自模型參數之複數候選組中選擇最佳者(在若干實施例中，可能因為其具有滿足之前提及的物理實際上及下邊界之所有候選者中之最低計算出的誤差計量)。

降維及主成分分析

【0087】在若干實施例中，蝕刻輪廓模型在計算出的蝕刻輪廓演進期間於各時間步驟在大量網格/網目點(單元)處輸出數值。對應至各單元或網格點的此等數值映射出所計算出之蝕刻輪廓的形狀。表示所計算出之蝕刻輪廓的網格/網目點之如此的範例係繪示於圖1中，其中各網格/網目點具有一數值，該數值指示

在蝕刻製程期間該時間該空間區域是否為該特徵部所佔據。在若干實施例中，表示蝕刻輪廓之網目的垂直尺寸至少約為5或至少約為10或至少約為20。取決於實施例，可將垂直相鄰之網目點間之垂直距離的最小值選為1 Å且可大至數埃如5 Å、或10 Å、或甚至20 Å。

【0088】實際上，吾人可能欲將相鄰網目/網格點間的距離選擇成夠小以提供特徵部隨時間演進時特徵部形狀的合理準確表示圖(其可能取決於輪廓的複雜度)，但又不會遠小於欲得到該合理表示圖所需者(因為更多網格點需要更多計算時間)。可基於相同考量而選擇相鄰網目/網格點間的水平分隔(在晶圓平面上)，但通常可將水平與垂直分隔選擇成相同的(即均勻網格)或大略上相當的。然而，此情況並不表示水平與垂直網格的尺寸必須要相同，此係由於被模型化之特徵部的寬度未必與被模型化之特徵部的高度相同。因此，水平尺寸(橫跨一給定方向之水平點的數目、在二維中的x尺寸、在三維中的x與y尺寸)可取決於是否僅有特徵部的一側壁被模型化、是否是整個特徵部被模型化(橫跨自一輪廓邊緣至另一邊緣)、是否有複數相鄰特徵部被模型化等。

【0089】如所述，蝕刻輪廓模型所輸出之網目的數值提供在物理空間中特徵部輪廓之邊緣係位於不同垂直高度何處的估計。由此資訊(由網目點處的此等數值)，吾人可計算在不同高度處的特徵部寬度、或從另一觀點來看，可計算各高度之邊緣的水平座標(相對於某基線)。此情況係繪示於圖2中。接著可將此組座標視為係在多維空間中表示特定特徵部輪廓的一點。此向量空間可為正交空間，或其可為非正交空間，然而，可將此表示線性轉換至正交空間。若為如此，則經轉換之點的座標為在該空間中相對於一組正交軸的距離。在任何情況下，本文中的「輪廓座標」係大致上指涉輪廓形狀的任何適當(近似的)的數學表徵。

【0090】在任何情況下，由於蝕刻輪廓模型可輸出大量「輪廓座標」(在本說明書中以下包含前述的網格/網目點)，且目標為使此等輪廓座標準確匹配所量

測到的實驗蝕刻輪廓，減少蝕刻輪廓模型的誤差(如針對以上圖3所述，迭代地減少在不同實驗製程條件上的總和誤差)可能為需要大量的計算能力的任務。例如，若使一組 m 個量測到的實驗蝕刻輪廓以點對點方式匹配由 n 個輪廓座標所構成之計算出的蝕刻輪廓，則此會達成使模型最佳化以擬合數據組 $m \times n$ 數據點。

【0091】 然而，結果為，蝕刻輪廓(無論係量測到的或計算出的)中存在潛在的統計相關性，且吾人可善用此等相關性而將最佳化問題重整為在數值上較易處理得多的形式。例如，儘管輪廓座標的一精細網格可由許多數據點所構成，但以統計觀點來看，此等座標之特定組合的數值係彼此相關聯。提供一容易但具例示性的範例，垂直相鄰的座標會傾向於彼此相關聯—單純地由於經蝕刻之特徵部的寬度在與相鄰網格點相關聯的短長度規模上(當在輪廓上上移或下移時)並不會大幅變化。輪廓座標間之關聯性的更複雜範例係關於複數類型之輪廓形狀，其一般可藉由變化製程座標的特定組合而達成。圖5中顯示數個範例。例如，可調整特定製程參數(單獨調整或彼此組合來調整)以使如圖5中所示之經蝕刻的輪廓向內或向外彎曲，而映射出輪廓之此弓形的輪廓座標(或網格點)因此在統計上係彼此相關。類似地，亦如圖5中所示，經由單獨或組合調整各種製程參數所獲得的蝕刻輪廓可呈現向內或向外漸縮，而因此在變化一或更多製程參數以造成此漸縮效應的情況下，輪廓座標可為相關聯的。潛在輪廓關聯結構的兩其他範例係為如圖5中所繪示的頂部漸縮與底部漸縮。又，此等潛在輪廓結構係為下列事實的表現：製程參數的變化傾向於造成輪廓之整體形狀的變化，而非局部地影響輪廓上的特定點而不影響其他點。這當然係與蝕刻製程相關之潛在物理及化學作用的結果。

【0092】 如所提及，由於此等潛在統計相關性，可將上述(針對圖3中之流程圖所述)的最佳化問題重整為更適合迭代最佳化技術的形式。達到此目的一方式為：識別數種類型的典範輪廓形狀，並以此等典範形狀來表達量測到及/或計

算出的蝕刻輪廓—例如藉由將整體輪廓(在各輪廓座標處的)寫成該組典範輪廓形狀(在各輪廓座標處的)之加權平均。亦即，一組向量表示該等典範輪廓形狀，且可將整體輪廓近似表達為此等向量的線性組合。以此方式，吾人可善用潛在統計相關性、以及模型在表示輪廓之線性組合的係數/權重中的變化(而非在所有獨立輪廓座標中的變化)。例如，若欲選擇弓形與漸縮(見圖5)作為典範形狀，則模型化 $m = 100$ 之輪廓座標的問題可被縮減為模型化在線性組合中針對弓形與漸縮之兩個係數的變化—亦即，建構自100降至2的降維操作。何種典範形狀有用可取決於製程/層的類型。所描述的方法提供自實驗數據或自利用EPM進行模擬而擷取該等形狀的數值方法。

【0093】 為了使此策略有效，典範形狀必須提供分析中所涉及之不同輪廓形狀的良好但非確切之表徵。在表徵中包含越多獨立之典範形狀，則表徵(在典範形狀的向量空間中的表徵)越準確。因此，在體認到包含越多典範形狀會使分析越準確但亦會使分析的計算更昂貴且在迭代最佳化的背景下可能會影響最佳化收斂或收斂至期望的局部最小值的能力之情況下，問題變成要用什麼典範形狀、及要包含多少典範形狀。

【0094】 達到此目的一方式為：製程工程師基於其過去的觀察經驗識別出常出現在其蝕刻實驗中的數種典範形狀。此方案的優點為其係簡單的。潛在的缺點為其隨意性(僅基於製程工程師的經驗與直覺)且無法提供任何判定方式來判定分析中何時已包含了充分數目的輪廓形狀。實際上，製程工程師識別出的任何輪廓形狀皆會被包含，但當然此情況可能不足以提供準確表徵。更重要地，此類型的方法無法識別輪廓數據中過去尚未被識別的新相關性，可能係由於在先前的工作中該形狀並不顯著或由於其為利用不同潛在物理及化學程序之新蝕刻製程的結果。

【0095】 另一方案為基於統計方法上的降維程序，其可自動識別重要的典範輪廓形狀並提供需要包含多少種形狀才能提供充分準確表徵的估計。可達到此目的一數據分析技術為主成分分析(PCA, principle component analysis)，其利用奇異值分解(SVD, singular value decomposition)，奇異值分解為來自數值線性代數的矩陣分解技術。PCA技術及其各種應用的說明可在例如下列文獻中尋得：Jackson, J. E., “A User's Guide to Principal Components,” John Wiley and Sons, p. 592. [2] (1991)；Jolliffe, I. T., “Principal Component Analysis,” 2nd edition, Springer (2002)；Krzanowski, W. J., “Principles of Multivariate Analysis: A User's Perspective,” New York: Oxford University Press (1988)，上述各者係整體併入本說明書中作為所有目的以供參照。

【0096】 如前述文獻所說明，PCA取一組向量作為其輸入(在此情況中各向量為表示單一輪廓的一組 n 個蝕刻輪廓座標)，並回應被稱為主成分(PC, principal components)之新的一組 n 個正交向量，其可被儲存以使PC 1- i (其中 $i \leq n$)構成用於表示輸入輪廓向量之「最佳的」第 i 維度子空間；「最佳的」在統計上係指在最小平方之意義上的最佳者—亦即，自PCA所決定之PC的第 i 維度子空間最小化各輸入向量與在所選PC之子空間中的其線性表徵間的總和均方根(RMS, root mean square)誤差。當然，包含越多PC則子空間的維度越大而越能較佳地表示輸入輪廓數據；然而，由於藉由PCA所建構之子空間係為最佳化的，因此預期並不需要許多PC—且可透過潛在SVD的奇異值評估藉由添加額外PC所獲取的潛在數據之統計變異的量。因此，藉由使用PCA來識別蝕刻輪廓數據組下的典範輪廓形狀，吾人可建構用於表示蝕刻輪廓之經降維的線性模型、可以自動化的方式來進行(不依賴製程工程師的專長)、可具有能識別出輪廓數據中之新相關性的能力、且以能提供需要多少形狀/維度才能提供良好表徵之統計估計的方式來進行。

【0097】 前述方法的結果為，可在不需大幅犧牲統計誤差的情況下達到大幅降維且可實質上大幅減少在上述數值最佳化程序中擬合所需之數據點的數目。亦應注意，存在有不同的可行策略可在圖3中所示之最佳化程序內實行降維的PCA程序。例如，在圖3之操作340中計算誤差計量之方式的背景下，進行降維程序的一方式為：將計算出之蝕刻輪廓及對應之實驗蝕刻輪廓分別投影至經降維的子空間(其可藉由PCA建構)，然後計算被投影至子空間上之輪廓間的差異。另一方式為：取得計算出之蝕刻輪廓與對應之實驗蝕刻輪廓間的差異，將該差異投影至經降維的子空間(該子空間表示實驗蝕刻輪廓與計算出之蝕刻輪廓間的潛在差異)上，然後將總誤差計量視為係差異子空間中之此等向量的總和長度。

【0098】 額外注意到，亦可使用PCA以在維度上減少獨立輸入參數的空間中之獨立變數的數目，提供與前述類似的優點。在若干實施例中，例如藉由在輸入參數及對應之量測到的蝕刻輪廓之串接向量(concatenated vector)上進行PCA，可將降維程序同時應用至輪廓座標空間與輸入參數空間兩者。

最佳化之電腦化蝕刻模型的應用

【0099】 本說明書中所揭露之最佳化的電腦化蝕刻模型在期望獲得蝕刻製程之詳細評估與特徵化的半導體處理流程中係可為有用的。例如，若正在開發新蝕刻製程，可使用模型來判定製程參數之眾多組合的蝕刻輪廓特性而不需進入實驗室單獨地進行各實驗。以此方式，經最佳化的蝕刻輪廓模型可達成更快的製程研發循環，且在若干實施例中可大幅地縮減微調目標輪廓所需的工作量。

【0100】 由於在微影工作中估算邊緣配置誤差通常係重要的，且輪廓形狀的準確計算能提供該資訊，因此微影操作及光罩建立亦可大幅受益於準確的蝕刻輪廓模型化。

【0101】 本說明書中所揭露的最佳化模型對於解決相反的問題亦可為有用的：在此問題中吾人期望特定目標蝕刻輪廓且希望能找到用於達到該目標蝕刻輪廓之製程參數(或EPM 輸入參數)的一或更多特定組合。再次強調，此情況可藉由實驗試誤法來達成，但自特定組之製程參數(或EPM 輸入參數)及條件所得到之蝕刻輪廓的準確模型化可取代實驗需求或至少在探索製程/輸入參數空間的初始階段中可取代實驗需求，直至針對完整實驗研究找到良好候選者為止。在若干實施例中，實際上可以全自動的方式使模型數值上地反轉(亦即，迭代地找出可產生特定蝕刻輪廓的一組參數)。再次強調，蝕刻輪廓座標空間之降維(藉由PCA)，以及將期望的蝕刻輪廓投影至此空間上，可使此數值上的反轉更可行。

【0102】 在某些實施例中，經最佳化的EPM可與蝕刻設備整合或整合至配有一或更多蝕刻設備之半導體製造設施的基礎設施中。經最佳化的EPM可用以判定對製程參數的適當調整，以提供期望的蝕刻輪廓或瞭解製程參數之改變對蝕刻輪廓的影響。因此例如，用於在製造設施內處理半導體基板的系統可包含用於蝕刻半導體基板且在操作上受到一組獨立輸入參數調整的蝕刻設備，此組獨立輸入參數係受到實行經最佳化之EPM的控制器所控制。如以下說明，適用於控制蝕刻設備之操作的控制器通常包含處理器及記憶體，該記憶體儲存經最佳化的EPM而該處理器使用經儲存的EPM以針對一組製程參數之一特定組數值計算經蝕刻的特徵部輪廓。在若干實施例中，在計算輪廓後，控制器可藉由改變該組獨立輸入參數的一或更多數值而調整蝕刻設備的操作(回應計算出之輪廓的形狀)。

【0103】一般而言，可與所揭露之經最佳化之**EPM**一起使用的蝕刻設備可為適用於藉由自半導體基板移除材料而蝕刻半導體基板的任何類型的半導體處理設備。在若干實施例中，蝕刻設備可構成感應耦合電漿(ICP, inductively-coupled plasma)反應器；在若干實施例中，蝕刻設備可構成電容耦合電漿(CCP, capacitively-coupled plasma)反應器。因此，與所揭露之此等經最佳化之**EPM**一起使用的蝕刻設備可具有處理腔室、用於在處理腔室內支撐基板的基板固持器、及用於在處理腔室內產生電漿的電漿產生器。蝕刻設備更可包含使一或更多製程氣體流至處理腔室中之一或更多閥控制的製程氣體入口、流體連接至用以自處理腔室排空氣體之一或更多真空泵浦的一或更多氣體出口等。以下提供與蝕刻設備(通常亦被稱為蝕刻反應器、或電漿蝕刻反應器等)相關的細節。

利用反射光譜匹配技術之蝕刻輪廓模型的最佳化

【0104】本說明書中所揭露的蝕刻輪廓(EP, etch profile)模型(**EPM**, etch profile model)最佳化技術亦可於反射光譜空間中、或衍生自光譜反射空間的降維子空間(RDS, reduced dimensional subspace)中執行。換言之，**EPM**最佳化係藉由將所計算出的反射光譜(利用**EPM**所產生)匹配至實驗量測到的反射光譜來達成，各光譜表示自基板表面上經蝕刻之特徵部所反射之電磁輻射在一系列波長處的強度。用於最佳化的該組反射光譜(經由**EPM**所產生之光譜及實驗量測到的光譜兩者)亦可對應至一系列的蝕刻時間步驟(亦即，表示蝕刻製程(單或複數)之不同時間的快照)。如以上詳細討論，**EPM**通常計算在蝕刻製程期間隨時間演變的理論蝕刻輪廓，所以藉由包含來自最佳化中不同蝕刻時間步驟的反射光譜，在最佳化中所使用之該系列蝕刻時間上，經最佳化的模型在統計上係為有效的。

【0105】光譜匹配(SM, spectral matching)最佳化程序依循上述一般**EPM**最佳化架構，例如參照圖3，差異在於**SM**最佳化操作係依據光譜反射，而非蝕刻

輪廓座標。為進行此程序(由於EPM的典型輸出係為計算出的蝕刻輪廓，其係以一系列蝕刻輪廓座標來表示)，吾人可藉由模擬由該計算出的蝕刻輪廓所反射的電磁輻射(EM, electromagnetic radiation)而產生計算出的反射光譜。本領域中所知悉的「嚴格耦合波分析(RCWA, rigorous coupled wave analysis)」會構成可用於此目的的一計算程序，但在考量下可使用用於模擬EM輻射與基板特徵部間之交互作用的任何合適程序。

【0106】 在能夠自EPM產生反射光譜的任何情況下，可實行一般程序以依據光譜反射而使該EPM最佳化。此情況現參照圖6來描述，圖6呈現流程圖，其繪示用於調整及/或最佳化蝕刻輪廓模型的一組操作601。

【0107】 如前，及在若干實施例中，如此的經調整及/或最佳化之模型會降低(且在某些情況下實質上最小化)一計量，該計量係關於(指示、量化等)下列兩者間的總和差異：進行蝕刻實驗所獲得之量測到的蝕刻輪廓、與自模型所產生的對應之計算出的蝕刻輪廓。換言之，經改善的模型可降低不同實驗製程條件(藉由所選之製程參數的不同組指定數值所表示—其係用以計算輸入至EPM的獨立輸入參數)上的總和誤差。

【0108】 如圖6中所示，基於反射光譜的最佳化程序601始於操作610，該操作為選擇一組待最佳化之模型參數及其初始數值的規格—再次強調，可將此等模型參數選擇為能使潛在化學與物理製程特徵化的參數(反應機率、黏附係數等)，此等參數其中若干者或全部係將基於實驗數據來調整，以改善模型。初始數值可為文獻中所找到的數值，其可基於其他模擬而計算出、自實驗來決定、或自先前最佳化程序而知悉等。

【0109】 在操作610中所選擇及初始化的模型參數係接著於一組獨立輸入參數上進行最佳化，且在操作620中選擇該組獨立輸入參數並對該組獨立輸入參數提供複數組數值。如此的獨立輸入參數可包含例如能使反應腔室中之電漿特

徵化的參數：溫度、蝕刻劑通量、電漿密度等。在操作630中，針對獨立輸入參數其中各組合的數值，進行蝕刻實驗以量測實驗蝕刻反射光譜。(例如，在若干實施例中，針對輸入參數之數值的相同組合、以及平均所得之反射光譜量測值(可能在捨棄離群值、雜訊光譜後等)，共同進行複數蝕刻實驗。)接著使用此組基準以下列方式來調整及最佳化模型：在操作635中，藉由下列方式來產生一組計算出的反射光譜(該計算出的反射光譜對應至自操作630所量測到的光譜，且因此該計算出的反射光譜係針對輸入參數其中各組合的數值而產生):運作EP模型以產生蝕刻輪廓，並接著如上所述(例如藉由使用RCWA)將所計算出之蝕刻輪廓轉換為光譜反射。在此時點，存在自各組獨立輸入參數的所選數值所產生的對應之實驗所得的及計算出的反射光譜，而因此適用於進行比較。在操作640中完成該比較，其中於該等輸入參數之所有不同組的數值上計算誤差計量，該誤差計量指示(關於、量化等)下列兩者間的差異：實驗所得之反射光譜、與計算出之反射光譜。

【0110】類似於以上參照圖6所述，此組計算出之反射光譜(誤差計量係自其所計算出)係對應至在操作610中所指定之一組先前所選的模型參數。最佳化程序的目的係在於針對此等模型參數來判定出更有效的選擇。因此，在操作650中判定現行指定的模型參數是否使操作640中所計算出的誤差計量為局部最小值(就模型參數的空間而言)，而若判定為否，則在操作660中修改該組模型參數其中一或更多數值，然後使用該經修改的數值來產生新的一組反射光譜(重複圖6之流程圖中示意性指示的操作635)，而之後在操作640的重複中計算新的誤差計量。接著流程再次進行至操作650，其中判定此新的模型參數之組合是否在誤差計量所評估之所有組輸入參數上呈現局部最小值。若判定為是，則如圖中所指示，結束最佳化程序。若判定為否，則再次於操作660中修改該等模型參數並重複循環。

【0111】 若期望針對不同的持續時間的蝕刻製程來使EPM最佳化(以前述方式)，或針對計算在蝕刻製程的過程上之時間次序處的反射光譜來使EPM最佳化，則其中需考量可在蝕刻製程的過程上自光學量測準確地判定出用以最佳化EPM的實驗反射光譜的程度。相關問題為在蝕刻製程的過程上可進行此等量測的速率。

【0112】 廣泛而言，可*現地*或*離地*進行光譜反射的量測。由於使用外部(蝕刻腔室的外部)專用的量測工具，*離地*量測通常更為準確，但如此的量測需要將晶圓自蝕刻腔室移出，以及因此需要停止蝕刻製程以使用該工具。由於相較於持續使用的蝕刻製程，使蝕刻製程停止及再啟動可能會導致所有類型的系統誤差，因此在*離地*情況下針對一系列不同蝕刻時間而累積反射光譜一般而言會涉及各自針對不同所需持續時間而蝕刻一系列不同的晶圓，然後各自分別量測反射形式。另一方面，可持續(或實質上持續地，或至少非常快速地)進行*現地*光譜反射量測而不中斷進行中的蝕刻製程，且因此可使用單一晶圓來產生對應至一系列蝕刻時間的反射光譜(此情況亦會消除(或至少減少)晶圓與晶圓間的差異被視為是表示反射光譜之蝕刻時間相依性的機率)。然而，若不談晶圓與晶圓間的差異，針對各種理由，*現地*光譜反射量測傾向為較使用專用之外部量測工具的情況更不準確。

【0113】 然而，本說明書所揭露的係為達到(至少達到某程度)*離地*及*現地*光譜反射量測兩者之優點且不含其各自缺點的方法。尤其，策略係為：使用用於使EPM最佳化之實驗所得的反射光譜，該實驗所得的反射光譜已從在進行中之蝕刻製程期間(於最佳化EPM所需的該系列蝕刻時間)所進行的快速*現地*光譜反射(光學)量測而產生，且使用*離地*量測來對其進行校正，該*離地*量測係利用專用的量測工具來進行。

【0114】此步驟可以下列方式來進行：蝕刻一或更多晶圓達涵蓋所需系列之蝕刻時間的一段持續時間，且於進行中的蝕刻製程自始至終*現地*進行光譜反射光學量測。量測速率可為相當快速的，例如利用1 Hz、2 Hz、5 Hz、10 Hz、15 Hz、20 Hz、50 Hz、或甚至100 Hz的頻率。在若干實施例中，在一系列蝕刻時間的至少部分上的該系列的蝕刻時間所進行之光學量測係以0.01秒至1秒來分隔(亦即，利用100 Hz 至1 Hz的頻率)，或以0.05秒至0.5秒來分隔(亦即，利用20 Hz 至2 Hz的頻率)。分別地，針對不同特定的蝕刻持續時間來蝕刻一組晶圓，而在各蝕刻製程結束後，將該等晶圓自處理腔室(該等晶圓在該等處理腔室中被蝕刻)移出，然後利用專用的外部量測工具以光學方式*離地*量測反射光譜。不同蝕刻時間的*現地*量測值接著係藉由將其與對應之持續時間的*離地*量測值進行比較來校正，並相應地調整*現地*反射光譜強度。從利用離地光學量測所校正的*現地*光學量測所產生的此等反射光譜接著可在參照圖3所述的EPM最佳化中使用。

【0115】最佳化程序亦可針對降維子空間(RDS, reduced-dimensional subspace)來進行(類似於針對蝕刻輪廓空間所進行的程序，但在此情況下係關於光譜空間的降維)，其涉及使用RDS來計算誤差計量，在最佳化中使該誤差計量最小化(通常局部地，或近似地)。建構RDS的一方式係為藉由PCA，可在光譜反射的全空間上進行PCA，而非如上所述在蝕刻輪廓座標之空間中進行PCA。如此一來，可在不需大幅犧牲數值最佳化中之統計誤差的情況下達到光譜空間之大幅降維。在此，PCA可識別重要的典範光譜形狀，且PCA亦(如上述)提供應包含多少種形狀才能達到某程度之期望統計準確度的估計。以此方式，如在蝕刻輪廓座標空間中進行PCA的情況，可大幅減少數值最佳化程序中擬合所需之數據點的數目，且可更快速地達到數值最佳化之收斂。

【0116】同樣地，且類似於蝕刻輪廓座標空間中最佳化的情況，亦應注意，例如在圖6中所呈現之最佳化程序內，存在有不同的可行策略用於實行

RDS，無論RDS係經由PCA、或偏最小平方法(PLS, partial least squares) (如以下說明)、或其他方法來建構。因此，例如，在圖6之操作640中計算誤差計量之方式的背景下，進行降維程序的一方式為：將計算出之光譜反射及對應之實驗光譜反射分別投影至RDS，然後計算被投影至子空間上之反射光譜間的差異。另一方式為：取得計算出之反射光譜與對應之實驗反射光譜間的差異，將該差異投影至經降維的子空間(該子空間表示實驗蝕刻輪廓與計算出之蝕刻輪廓間的潛在差異)上，然後將總誤差計量視為係(反射光譜的)差異子空間中之此等向量的總和長度。

【0117】 除了執行PCA以外，建構RDS的另一方式係為單純選擇特定組的光譜波長，且將此等所選的波長視為該RDS的基準組。為達到此目的，將兩反射光譜投影至RDS上，並計算其差異(在該RDS中的)量，以計算在該等特定波長處的反射光譜之強度的差異，且例如，總計該等差異，其接著會使誤差計量成為與均方根(RMS, root mean square)誤差(在該等波長上)成比例的數目。歸納此情況，可將誤差計量指定為量的加權總合，其與在特定所選波長處的對應之實驗反射光譜與計算出之反射光譜間的差異量成單調相關。

【0118】 再者，若待於最佳化程序中比較的實驗所得之反射光譜與計算出之反射光譜對應至一系列不同的蝕刻時間，則定義RDS之額外的標準可選擇此等特定蝕刻時間。因此，在如此的實施例中，基於選擇特定光譜波長及識別特定蝕刻時間(在該蝕刻時間考量該等波長)來決定RDS。再者，在某些如此的實施例中，在誤差計量的計算中，可將不同波長及蝕刻時間相異地加權。因此，例如，若在某蝕刻時間的光譜數據係比在其他時間的光譜數據更具指標性，則該前者(之部分)的權重可較重(亦即，可將在特定蝕刻時間的特定波長的權重設定成大於對應至在其他蝕刻時間的之相同波長的權重(之部分))。額外地(或替代

地)，在分析中，可將反射光譜的不同波長(甚至是在相同蝕刻時間的不同波長)相異地加權。

【0119】 建構RDS的另一替代方式係為：進行偏最小平方法(PLS, partial least squares)分析。PLS分析善用以下原則：在蝕刻製程期間演變的蝕刻輪廓之(反射)光譜歷史可預測蝕刻製程中稍後的及/或在蝕刻製程結束時的蝕刻輪廓。圖7A中提供圖式說明，該圖顯示對應至蝕刻製程期間4個序列之時間(t_0 、 t_1 、 t_2 、及 t_{EP} (「EP」表示特徵部的最終蝕刻輪廓))的4個反射光譜，其係關於受到向下蝕刻之情況下的特徵部(顯示於該圖式的右側)。自該圖式，可明顯看出在蝕刻過程上，反射光譜隨著特徵部輪廓改變而改變，且因此可經由PLS分析產生統計模型，其中PLS分析使在蝕刻製程結束時之特徵部蝕刻輪廓的幾何座標與蝕刻製程中較早期的特定時間之特定波長的各種反射數值相關聯。PLS分析可識別哪些光譜波長以及在蝕刻製程中的哪些時間最能預測最終蝕刻輪廓，且該模型亦可評估最終蝕刻輪廓相對於此等波長及/或時間的靈敏度。接著可將在特定時間的此等光譜波長表示為該RDS的基準組，EPM係參照該基準組而進行最佳化。再者，PLS分析對於在特定時間之此等所表示的波長之相對統計顯著性的判定提供了用於在EPM之數值最佳化中使此等所表示的波長加權更重的基準，例如，藉由定義誤差計量的統計權重。

【0120】 以另一方式說明，來自蝕刻製程中較早期之幾何蝕刻輪廓座標相對於反射光譜的PLS分析可用以識別蝕刻製程過程(可由此建構有效RDS)上的靈敏光譜區域，且被賦予至在所識別之先前蝕刻製程時間的此等所識別出之波長的相對統計權重可用於誤差計量之計算中，EPM參數最佳化係參照該誤差計量之計算而進行。應注意，使用EPM最佳化之如此的RDS假定上為有效的，此係由於該RDS係以光譜空間之統計顯著區域(作為蝕刻時間的函數)為目標。

【0121】 若前述PLS分析及所獲得的PLS模型(其提供用於將特定光譜波長、蝕刻時間等相異地加權的策略)係由蝕刻製程數據(針對不同蝕刻時間的複數組反射光譜及對應的蝕刻輪廓座標)來建構，則該PLS分析及該PLS模型在統計上會較為穩健，該蝕刻製程數據的收集範圍遍及許多經受一範圍之蝕刻製程條件(其可大致上對應至一範圍之製程條件，EPM的模型參數將於該範圍之製程條件下(使用RDS)進行最佳化)的不同晶圓。圖7B示意性地顯示如此的一組反射光譜數據，該組反射光譜數據為3-D數據區塊的形式，且其收集範圍遍及許多晶圓，其中該數據區塊的3個指數對應至晶圓數目(i)、光譜波長(j)、及蝕刻製程時間(k)。如該圖中所指示，可將此3-D數據區塊「展開」為2-D的「X」數據區塊，其尺寸為K乘以J，其中K為時間點的數目，而J為波長的數目。(串接數據向量的跨幅係為波長數目J。)此等係為代入PLS分析的獨立變數。用於PLS分析的獨立變數係位於2-D「Y」的數據區塊中，如該圖中所示，該數據區塊包含針對數目I的晶圓其中各者的最終N個幾何蝕刻輪廓座標，如該圖中所指示。由此過完備(over-complete)組的訓練數據，PLS分析建立了迴歸模型來預測最終蝕刻輪廓座標對於在蝕刻製程期間的中間時間之反射光譜數據的相依性。

【0122】 應注意，可藉由在一系列不同的晶圓上進行蝕刻製程(以及量測反射率)而在實驗上量測如此的蝕刻輪廓及光譜反射數據(將用以作為PLS模型的訓練組)，如此的實驗可能係昂貴且耗時的。然而，若吾人已獲得具有充分準確度的EPM(例如藉由上述程序而最佳化的EPM)，則更有效的程序將可使用該EPM來產生蝕刻數據組，且使用該等蝕刻數據組來建構/訓練PLS模型。原則上，亦可使用實驗所產生的蝕刻輪廓與光譜反射數據以及計算所產生的蝕刻輪廓與光譜反射數據兩者的組合。

【0123】 在任何情況下，使用計算所產生的反射光譜來建立PLS模型建議迭代程序，藉此吾人使用(潛在地)未最佳化的EPM來產生訓練組的反射光譜以用

於PLS分析，而所獲得的PLS模型接著可用以識別RDS(有統計加權)以用於回應初始EPM並使其最佳化。新的經最佳化之EPM接著可(依次)用以產生新的組的蝕刻數據以建構新的(且更佳的)PLS模型，其會識別出新的RDS以用於進一步最佳化EPM，以此類推。可以此方式(在EPM最佳化與PLS最佳化間反復)繼續該程序達某預定數目的迭代，或直至於利用後續迭代的情況下再也觀察不到PLS及/或EP模型有顯著改善為止。一變型係為始於藉由上述任何最佳化技術(例如，不涉及PLS程序)來最佳化的EPM，且由此開始。另一變型係為使用少量實驗上所量測到的蝕刻製程數據組來建構獨立於EPM的初始PLS模型，然後開始識別RDS以最佳化初始EPM。此等一般主題上的其他變型及其組合對於熟習本領域技術者在考量前述討論的情況下將變得清楚明瞭。

【0124】 前述迭代方案係示意性地繪示於圖8中。如圖8中所示，產生經最佳化之PLS模型的程序801始於獲得初始組之反射光譜及對應組的蝕刻輪廓(該兩者皆對應至一系列蝕刻製程持續時間)的操作810。該系列蝕刻時間可代表在蝕刻製程過程上的不同時間，或該系列蝕刻時間可代表蝕刻製程之不同的總蝕刻持續時間(換言之，執行至完成的蝕刻製程，但在不同基板上進行了不同的總蝕刻時間)。在任何情況下，此初始訓練組反射光譜(對應至該系列蝕刻時間)可在實驗上量測到、可利用未最佳化之EPM來產生、或可使用藉由如上述該等程序另一程序(例如不涉及PLS者)來最佳化的EPM來產生。在獲得該訓練組後，在操作820中執行PLS分析以產生初始的PLS模型。該PLS模型使蝕刻輪廓之座標(在操作810中獲得)與反射光譜(亦在操作810中獲得)相關聯。在特定實施例中，PLS分析會產生迴歸模型，其表示在之後的蝕刻時間或甚至在蝕刻製程結束時的蝕刻輪廓座標對於蝕刻製程中較早期的特定時間之某些反射光譜波長的相依性(如上所述)，以及此相依性的統計靈敏度。

【0125】 此初始PLS模型對於某些目的而言可為充分準確的，且在操作830中判定其係充分準確的，則最佳化程序結束。然而，若在操作830中該PLS模型被視為不具充分準確度，則程序801繼續至操作840，其中目前的PLS模型(在操作820中所建構的)係與用於定義有效誤差計量的統計權重(如上所述)一起用以決定(統計顯著)降維子空間(RDS, reduced dimensional subspace)。新的經統計加權之光譜誤差計量接著係用於操作850中，以依據(舉例而言)參照圖6所述的EPM最佳化程序來使EPM模型最佳化。如此的經統計加權之誤差計量可用以(在最佳化(例如圖6的)中)作為在(全光譜空間的)光譜子空間(其被PLS程序視為統計顯著)中EPM計算出之反射光譜與對應的量測到之反射光譜間的誤差之實際上的估算法。

【0126】 此EPM最佳化程序可使用與操作820中所使用之光譜數據相同的光譜數據，或此EPM最佳化程序可使用不同光譜數據(但再次強調，此EPM最佳化程序係利用操作840中所定義的新光譜誤差計量來最佳化)。在任何情況下，一旦EPM被最佳化(在操作850中)，其可用以產生新的(及可能非常廣泛的)組的計算出之反射光譜。此係由下列步驟來進行：在操作860中產生一組計算出的蝕刻輪廓，然後在操作865中使用此等計算出的蝕刻輪廓來產生一組計算出的反射光譜(例如，藉由使用如上所述且指示於圖式中的RCWA)。接著可將此等光譜(作為光譜訓練組)回饋至操作820中，其中新的PLS模型係基於此新的(可能相當廣泛的)訓練組而產生。在操作830中估計該新的PLS模型之統計準確度；然後可持續重複操作(840、850、860、865、820、及830)的循環，直至在操作830其中一重複中該PLS模型被視為具有充分統計準確度為止。

【0127】 應注意，當此類型PLS模型對於最佳化EPM模型(經由識別出「良好的」RDS)係為有用的時，獨立地，其對於蝕刻端點偵測程序亦為有用的，例如代理人案號為LAMRP230之共同審理中的美國專利申請案(其內容整體係針對

所有目的併入本說明書中以供參照)中所述的情況。例如如上所述，可將PLS模型視為下列的統計判定：在蝕刻製程過程上哪些光譜區域係更具/最具預測自蝕刻製程所獲得之最終蝕刻輪廓的能力。就此而言，PLS模型的建構實際上係為靈敏度分析，其識別在蝕刻製程過程上哪些光譜區域可被監測到，以判定特徵部輪廓何時已被充分蝕刻(亦即，用於端點偵測)。因此亦應注意，經由最佳化之統計加權(偏重在PLS模型中為重要的該等光譜區域(作為蝕刻時間的函數))的EPM模型之最佳化，除了潛在地達成更有效的EPM最佳化以外，對增進靈敏度分析的統計準確度係有益的，因為PLS模型係藉此由自EPM模型所產生之蝕刻輪廓數據組所建構，其中該EPM模型最佳化係受到統計加權(偏重被PLS分析視為係重要的光譜空間之相同區域(在蝕刻製程上))。

用於蝕刻操作中的電容耦合電漿(CCP, Capacitively Coupled Plasma)反應器

【0128】 電容耦合電漿(CCP, Capacitively coupled plasma)反應器係描述於2009年2月9日所申請(作為美國專利申請案第12/367754號)之發明名稱為「ADJUSTABLE GAP CAPACITIVELY COUPLED RF PLASMA REACTOR INCLUDING LATERAL BELLOWS AND NON-CONTACT PARTICLE SEAL」的美國專利第8552334號、以及2014年11月12日所申請之發明名稱為「ADJUSTMENT OF VUV EMISSION OF A PLASMA VIA COLLISIONAL RESONANT ENERGY TRANSFER TO AN ENERGY ABSORBER GAS」的美國專利申請案第14/539121號中，上述各者之內容整體係針對所有目的併入本說明書中以供參照。

【0129】 舉例而言，圖9A-9C繪示可調間隙之電容耦合式限制RF電漿反應器900的實施例。如所描繪，真空處理腔室902包含腔室外罩904，其圍繞出罩住下電極906的內部空間。在腔室902的上部中，上電極908與下電極906垂直隔開。

上電極908及下電極906之平面表面(配置以用於電漿產生)實質上平行，並與電極間的垂直方向正交。上電極908及下電極906較佳為圓形且共軸於一垂直軸。上電極908之下表面面對下電極906之上表面。隔開之面對電極的表面界定介於其間的可調間隙910。在電漿產生期間，由RF電源(匹配器)920將RF功率供應給下電極906。RF功率係透過RF供應導管922、RF帶924、及RF功率構件926而供應至下電極906。接地護罩936可圍繞RF功率構件926，以將更均勻之RF場提供至下電極906。如美國專利公開案第2008/0171444號中所說明，該案之內容整體係針對所有目的併入本說明書中以供參照，晶圓係透過晶圓埠口982而嵌入，並支撐於下電極906上之間隙910中以進行處理，製程氣體係供應至間隙910並藉由RF功率使其激發為電漿狀態。可對上電極908供電或使其接地。

【0130】 在圖9A-9C所示的實施例中，下電極906係支撐於下電極支撐板916上。插入下電極906與下電極支撐板916間的絕緣環914使下電極906與支撐板916絕緣。RF偏壓外罩930將下電極906支撐於RF偏壓外罩槽932上。藉由RF偏壓外罩930之臂934，槽932係透過在腔室壁板918中之開口連接至導管支撐板938。在較佳實施例中，RF偏壓外罩槽932與RF偏壓外罩臂934結合形成為一個元件，然而，臂934及槽932亦可為被栓綁或連結在一起的兩獨立元件。

【0131】 RF偏壓外罩臂934包含一或更多中空通路，其用於使RF功率及設施(例如：氣體冷卻劑、液體冷卻劑、RF能量、用於升降銷控制之纜線、電力監控或驅動信號)，自真空腔室902外部通過至真空腔室902內部之位於下電極906背側上的空間。RF供應導管922與RF偏壓外罩臂934絕緣，RF偏壓外罩臂934將RF功率之返回路徑提供至RF電源920。設施導管940提供針對設施元件之通道。該設施元件之進一步細節係描述於美國專利第5,948,704號及美國專利公開案第2008/0171444號中，該等案兩者之內容整體係針對所有目的併入本說明書中以供參照，而為了說明之簡要在此將不顯示。間隙910較佳地以限制環組件圍繞(未顯

示)，其細節可在美國專利公開案第2007/0284045號中尋得，該案之內容整體係針對所有目的併入本說明書中以供參照。

【0132】 導管支撐板938係附接至驅動機構942。驅動機構之細節係描述於美國專利公開案第2008/0171444號中，該案之內容整體係針對所有目的併入本說明書中以供參照。藉由例如滾珠螺桿之螺旋齒輪946及用以轉動滾珠螺桿之馬達，將驅動機構942(例如伺服機械馬達、步進馬達等)附接至垂直線性軸承944。在調整間隙910之尺寸期間，驅動機構942沿垂直線性軸承944而移動。圖9A繪示當驅動機構942位於線性軸承944上之高位置（其造成小間隙910a）時之配置。圖9B繪示當驅動機構942位於線性軸承944上之中間位置時之配置。如所示，下電極906、RF偏壓外罩930、導管支撐板938、RF電源920皆移動至相對於腔室外罩904及上電極908更低之位置，造成中等尺寸間隙910b。

【0133】 圖9C繪示當驅動機構942位於線性軸承上之低位置時的大間隙910c。較佳地，在間隙調整期間，上電極908及下電極906維持共軸，且該上電極及下電極橫越間隙之相對表面維持平行。

【0134】 此實施例容許在多步驟蝕刻製程期間調整CCP腔室902的下電極906與上電極908間之間隙910，例如，為了維持橫越大直徑基板(例如300 mm晶圓或平面顯示器)的均勻蝕刻。尤其，此實施例係關於機械配置，其用以促進提供下電極906及上電極908間之可調間隙所需的線性移動。

【0135】 圖9A繪示橫向偏斜伸縮囊950，其在近端密封至導管支撐板938且在遠端密封至腔室壁板918之階梯凸緣928。該階梯凸緣之內徑界定腔室壁板918中之開口912，而RF偏壓外罩臂934通過開口912。當允許RF偏壓外罩930、導管支撐板938、及驅動機構942之垂直移動時，橫向偏斜伸縮囊950提供真空密封件。可將RF偏壓外罩930、導管支撐板938、及驅動機構942稱為懸臂組件。較佳地，RF電源920與懸臂組件一起移動並可附接至導管支撐板938。圖9B顯示當

懸臂組件位於中央位置時，伸縮囊950位於中間位置。圖9C顯示當懸臂組件位於低位置時，伸縮囊950橫向偏斜。

【0136】 曲徑軸封948於伸縮囊950與電漿處理室外罩904之內部間提供粒子阻隔。固定護罩956不可移動地在腔室壁板918上附接至腔室外罩904之內側內壁，以提供曲徑溝槽960(槽口)，在該曲徑溝槽中，可移動護罩板958垂直移動以適應懸臂組件之垂直移動。可移動護罩板958之外部部分在下電極906之所有垂直位置皆保持在該槽口中。

【0137】 在所示的實施例中，曲徑軸封948包含固定護罩956，其於腔室壁板918中之開口912之周緣附接至腔室壁板918之內部表面，而界定曲徑溝槽960。可移動護罩板958附接並自RF偏壓外罩臂934徑向延伸，在該處該臂934通過在腔室壁板918中之開口912。可移動護罩板958延伸至曲徑溝槽960中，而以第一間隙與固定護罩956相間隔，且以第二間隙與腔室壁板918之內部表面相間隔，因而允許懸臂組件垂直移動。曲徑軸封948阻擋自伸縮囊950剝落之粒子遷移進入真空腔室內部，並阻擋來自製程氣體電漿之自由基遷移至伸縮囊950，在該處該自由基會形成隨後剝落之沉積物。

【0138】 圖9A顯示當懸臂組件在高位置時(小間隙910a)，可移動護罩板958位於RF偏壓外罩臂934之上的曲徑溝槽960中之高位置。圖9C顯示當懸臂組件在低位置時(大間隙910c)，可移動護罩板958位於RF偏壓外罩臂934之上的曲徑溝槽960中之低位置。圖9B顯示當懸臂組件在中間位置時(中等間隙910b)，可移動護罩板958位於曲徑溝槽960內之中間或中央位置。儘管曲徑軸封948顯示為對稱於RF偏壓護罩臂934，然而在其他實施例中曲徑軸封948可不對稱於RF偏壓護罩臂934。

用於蝕刻操作中的感應耦合電漿反應器

第 46 頁，共 61 頁(發明說明書)

【0139】感應耦合電漿(ICP, Inductively coupled plasma)反應器係描述於2013年12月10日所申請之發明名稱為「IMAGE REVERSAL WITH AHM GAP FILL FOR MULTIPLE PATTERNING」的美國專利公開案第2014/0170853號、以及2014年11月12日所申請之發明名稱為「ADJUSTMENT OF VUV EMISSION OF A PLASMA VIA COLLISIONAL RESONANT ENERGY TRANSFER TO AN ENERGY ABSORBER GAS」的美國專利申請案第14/539121號中，上述各者之內容整體係針對所有目的併入本說明書中以供參照。

【0140】舉例而言，圖10示意性地顯示感應耦合式電漿蝕刻設備1000的剖面圖，該設備適用於執行本說明書中的某些實施例，其範例為由加州Fremont之Lam Research Corp.所製造的Kiyo™反應器。感應耦合式電漿蝕刻設備1000包含結構上由腔室壁1001及窗口1011所界定之整體蝕刻腔室。腔室壁1001可由不鏽鋼或鋁來製造。窗口1011可由石英或其他介電材料來製造。選用性之內部電漿柵1050將整體蝕刻腔室分隔成上部子腔室1002及下部子腔室1003。在大部份的實施例中可移除電漿柵1050，藉此利用由子腔室1002及1003所形成的腔室空間。卡盤1017定位於下部子腔室1003內接近底部內表面處。卡盤1017配置以接收並固持蝕刻製程在其上執行之半導體晶圓1019。卡盤1017可為當晶圓1019存在時用於支撐晶圓1019的靜電卡盤。在若干實施例中，邊緣環(未顯示)環繞卡盤1017，且具有近乎平坦於晶圓1019(當存在於卡盤1017上時)之頂表面的上表面。卡盤1017亦包含用於固緊及釋放晶圓之靜電電極。可針對此目的設置濾波器及DC固緊電源(未顯示)。亦可設置用於使晶圓1019升離卡盤1017的其他控制系統。可使用RF電源1023將卡盤1017電性地充電。RF電源1023係透過連接部1027而連接至匹配電路1021。匹配電路1021係透過連接部1025而連接至卡盤1017。以此方式，RF電源1023係連接至卡盤1017。

【0141】 用於電漿產生之元件包含定位於窗口1011上方的線圈1033。線圈1033係由導電材料所製造且包含至少完整一圈。圖10中所示之範例線圈1033包含三圈。線圈1033之剖面係以符號顯示，且具有「X」的線圈旋轉地延伸進入頁面，而具有「•」的線圈旋轉地延伸出頁面。用於電漿產生之元件亦包含RF電源1041，其配置以將RF功率供應至線圈1033。大致上，RF電源1041係透過連接部1045而連接至匹配電路1039。匹配電路1039係透過連接部1043而連接至線圈1033。以此方式，RF電源1041係連接至線圈1033。選用性之法拉第屏蔽部1049定位於線圈1033與窗口1011之間。法拉第屏蔽部1049係以相對於線圈1033的間隔關係而維持。法拉第屏蔽部1049設置於窗口1011的正上方。線圈1033、法拉第屏蔽部1049、及窗口1011各者以實質上彼此平行的方式配置。法拉第屏蔽部可防止金屬或其他物種沉積在電漿腔室的介電窗上。

【0142】 可透過定位於上腔室之一或更多主要氣流入口1060及/或透過一或更多側氣流入口1070來使製程氣體(例如：氮、氬、蝕刻劑等)流入處理腔室。同樣地，儘管未明確顯示，仍可使用相似的氣流入口來將製程氣體供應至圖9A-9C中所示之電容耦合電漿處理腔室。可使用例如一或二階段機械乾式泵及/或渦輪分子泵之真空泵1040以將製程氣體吸出處理腔室並於處理腔室內維持一壓力。可使用閥控制導管來將真空泵流體連接至處理腔室以選擇性地控制由真空泵所提供之真空環境的運用。此可藉由在電漿操作處理期間利用閉迴路控制式流動限制裝置(例如節流閥(未顯示)或擺閥(未顯示))來完成。同樣地，亦可利用連至圖9A-9C中之電容耦合電漿處理腔室的真空泵及閥控制流體連接部。

【0143】 在設備操作期間，可透過氣流入口1060及/或1070來供應一或更多製程氣體。在某些實施例中，可僅透過主要氣流入口1060、或僅透過側氣流入口1070來供應製程氣體。在某些情況下，可以例如更複雜的氣流入口或一或更多噴淋頭來替代該圖中的氣流入口。法拉第屏蔽部1049及/或選用性之柵1050可

包含容許製程氣體輸送至腔室的內部通道及孔洞。法拉第屏蔽部1049及選用性之柵1050其中任一者或兩者皆可作為用於輸送製程氣體的噴淋頭。

【0144】 射頻功率係自RF電源1041供應至線圈1033，以使RF電流流過線圈1033。流過線圈1033之RF電流會產生環繞線圈1033之電磁場。電磁場在上部子腔室1002內產生感應電流。各種所產生之離子及自由基與晶圓1019的物理及化學交互作用會選擇性地蝕刻出晶圓的特徵部。

【0145】 若使用電漿柵而使得存在有上部子腔室1002及下部子腔室1003兩者，則感應電流對存在於上部子腔室1002中之氣體作用，以在上部子腔室1002中產生電子-離子電漿。選用性之內部電漿柵1050限制下部子腔室1003中的熱電子量。在若干實施例中，將設備設計及操作成使存在於下部子腔室1003中的電漿為離子-離子電漿。

【0146】 上部之電子-離子電漿與下部之離子-離子電漿兩者皆可包含正離子與負離子，然而離子-離子電漿會具有較高的負離子對正離子之比例。揮發性蝕刻副產物可透過埠口1022而自下部子腔室1003移除。

【0147】 可在範圍介於約10°C與約250°C間的升高溫度下操作本說明書中所揭露之卡盤1017。該溫度將取決於蝕刻製程操作及特定配方。在若干實施例中，腔室1001亦可在介於約1 mTorr及約95 mTorr間之範圍中的壓力下操作。在若干實施例中，壓力可高於以上所揭露的壓力。

【0148】 當腔室1001安裝於無塵室或製造設施中時，腔室1001可耦接至設施(未顯示)。設施包含提供製程氣體、真空、溫度控制、及環境微粒控制的管路。當腔室1001安裝於目標製造設施中時，此等設施耦接至腔室1001。此外，腔室1001可耦接至使用典型自動化而使機器人將半導體晶圓傳送進出腔室1001的傳送腔室。

【0149】圖10中亦顯示系統控制器1051。如以下進一步描述，如此的系統控制器1051可控制蝕刻設備之部分或所有操作，其包含調整蝕刻設備之操作以回應使用本說明書中所述經最佳化之EMP來產生計算出的蝕刻輪廓。

系統控制器

【0150】系統控制器可用以控制上述處理設備之任一者(如圖9A-9C中所示之CCP蝕刻設備及/或圖10中所示之ICP蝕刻設備)中的蝕刻操作(或其他製程操作)。尤其，系統控制器可實行上述經最佳化的EPM並調整蝕刻設備之操作以回應利用(如上述之)經最佳化的EMP所產生之計算出的蝕刻輪廓。

【0151】圖10中示意性地繪示與蝕刻設備通訊之系統控制器的範例。如圖10中所示，系統控制器1051包含一或更多記憶體裝置1056、一或更多大量儲存裝置1054、及一或更多處理器1052。處理器1052可包含一或更多CPU、ASIC、通用電腦(單或複數)及/或專用電腦(單或複數)、一或更多類比及/或數位輸入/輸出連接部(單或複數)、一或更多步進馬達控制器板(單或複數)等。

【0152】在若干實施例中，系統控制器(如圖10之1051)控制處理工具(如圖10之蝕刻設備1000)的部分或所有操作，包含各別處理站的操作。可提供機器可讀之系統控制指令1058以實行/執行本說明書中所述之膜沉積及/或蝕刻製程。可在機器可讀之非暫態媒體上提供指令，機器可讀之非暫態媒體可耦接至系統控制器及/或被系統控制器所讀取。可在處理器1052上執行系統控制指令，在若干實施例中系統控制指令係自大量儲存裝置1054載入至記憶體裝置1056中。系統控制指令可包含用於控制下列各者的指令：時序、氣態與液態反應物的混合物、腔室及/或站的壓力、腔室及/或站的溫度、晶圓溫度、目標功率位準、RF功率位準(如DC功率位準、RF偏壓功率位準)、RF暴露時間、基板基座、卡盤及/或承受器的位置、及由處理工具所執行之特定製程的其他參數。

【0153】半導體基板處理操作可使用各種類型的製程，其包含但不限於關於蝕刻基板上之膜的製程(例如藉由涉及表面吸附的蝕刻劑之電漿活化的原子層蝕刻(ALE, atomic layer etch)操作，見例如2014年11月12日所申請之發明名稱為「ADJUSTMENT OF VUV EMISSION OF A PLASMA VIA COLLISIONAL RESONANT ENERGY TRANSFER TO AN ENERGY ABSORBER GAS」的美國專利申請案第14/539121號，其內容整體係針對所有目的併入本說明書中以供參照)、沉積製程(例如藉由電漿活化表面吸附之膜前驅物的原子層沉積(ALD, atomic layer deposition))、以及其他類型的基板處理操作。

【0154】因此，舉例而言，針對用於執行基於電漿之蝕刻製程的處理設備而言，系統控制器所執行的機器可讀指令可包含用於自經最佳化之EPM產生計算出的蝕刻輪廓並調整電漿產生器之操作以回應計算出之蝕刻輪廓的指令。

【0155】可以任何適當的方式來配置系統控制指令1058。例如，可寫入各種處理工具元件的子程序或控制目標，以控制執行各種處理工具製程所需之該處理工具元件的操作。可以任何適當的電腦可讀程式語言將系統控制指令編碼。在若干實施例中，以軟體來執行系統控制指令，在其他實施例中，以硬體來執行該等指令，舉例而言，如硬編碼成特殊應用積體電路 (ASIC, application specific integrated circuit)中的邏輯，或者，在其他實施例中被實施成軟體與硬體之結合。

【0156】在若干實施例中，系統控制指令1058可包含用於控制上述各種參數的輸入/輸出控制(IOC, input/output control)定序指令。舉例而言，沉積及/或蝕刻製程(單或複數)之每一階段可包含用以藉由系統控制器所執行的一或更多指令。舉例而言，可將用於針對膜沉積及/或蝕刻製程階段而設定製程條件的該等指令包含在相對應的沉積及/或蝕刻配方階段中。在若干實施例中，可依序安排該等配方階段，以使一製程階段的所有指令係與該製程階段同時執行。

【0157】 在若干實施例中，可使用儲存於與系統控制器1051相關聯之大量儲存裝置1054及/或記憶體裝置1056上的其他電腦可讀指令及/或程式。程式或程式部份之範例包含基板定位程式、製程氣體控制程式、壓力控制程式、加熱器控制程式、及電漿控制程式。

【0158】 基板定位程式可包含針對處理工具元件的指令，該等處理工具元件係用以將基板裝載至基座上，並控制基板與處理工具之其他部件間間距。定位程式可包含用於如在基板上沉積及/或蝕刻膜所需而將基板適當地移進及移出反應腔室的指令。

【0159】 製程氣體控制程式可包含用於控制氣體組成及流率、及選擇性地用於在沉積及/或蝕刻之前使氣體流入圍繞一或更多處理站的體積以穩定此等體積中之壓力的指令。在若干實施例中，製程氣體控制程式可包含用於在於基板上沉積及/或蝕刻膜的期間將某些氣體導入圍繞處理腔室內的一或更多處理站之體積(單或複數)的指令。製程氣體控制程式亦可包含依據所沉積之膜的組成及/或所涉及之蝕刻製程的性質，以相同速率、相同持續時間，或以不同速率及/或不同持續時間來輸送此等氣體的指令。製程氣體控制程序亦可包含用於在氮或若干其他載氣存在的情況下，於加熱之注射模組中使液態反應物霧化/汽化的指令。

【0160】 壓力控制程式可包含用於藉由調節例如處理站之排放系統中的節流閥、進入處理站之氣流等而控制處理站內之壓力的指令。壓力控制程式可包含用於在於基板上沉積各種膜類型及/或蝕刻基板的期間維持相同或不同之壓力的指令。

【0161】 加熱器控制程式可包含用於控制送往加熱基板用之加熱單元的電流之指令。替代地或額外地，加熱器控制程式可控制熱傳氣體(如：氮)至基板

的輸送。加熱器控制程式可包含用於在於基板上沉積各種膜類型及/或蝕刻基板的期間於反應腔室及/或圍繞處理站之體積中維持相同或不同溫度的指令。

【0162】電漿控制程式可包含用於依據本說明書中之實施例設定一或更多處理站中的RF功率位準、頻率、及暴露時間的指令。在若干實施例中，電漿控制程式可包含用於在於基板上沉積膜及/或蝕刻基板的期間使用相同或不同的RF功率位準及/或頻率及/或暴露時間的指令。

【0163】在若干實施例中，可存在有與系統控制器相連之使用者介面。使用者介面可包含顯示螢幕、設備及/或製程條件之圖形化軟體顯示器、及使用者輸入裝置(例如指向裝置、鍵盤、觸控螢幕、麥克風等)。

【0164】在若干實施例中，由系統控制器所調整之參數可與製程條件相關。非限制性之範例包含製程氣體組成物及流率、溫度(基板固持器及噴淋頭之溫度)、壓力、電漿條件(如RF偏壓功率位準及暴露時間)等。可以配方(可利用使用者介面來輸入)的形式將該等參數提供給使用者。

【0165】可藉由系統控制器之類比及/或數位輸入連接部，而自各種處理工具感測器提供用於監測製程的信號。可於處理工具之類比及數位輸出連接部上輸出用於控制製程之信號。可受監測之處理工具感測器的非限制性範例包含質量流量控制器(MFCs, mass flow controllers)、壓力感測器(如壓力計)、溫度感測器(如熱電偶)等。適當程式化之反饋及控制演算法可與來自該等感測器的數據一起使用以維持製程條件。

【0166】上述各種設備及方法可與例如用於製造或生產半導體裝置、顯示器、LED、光伏面板等的微影圖案化工具及/或製程結合使用，儘管非必要，但通常會在共同的製造設施中一起及/或同時使用如此的工具或進行如此的製程。

【0167】在若干實施例中，控制器係為系統的部分，其可為上述範例的部分。如此的系統可包含半導體處理設備，含一或複數處理工具、一或複數腔室、

用於處理的一或複數工作台、及/或特定處理元件(晶圓基座、氣流系統等)。該等系統可與電子裝置整合，以於半導體晶圓或基板之處理前、處理期間、及處理後控制其操作。可將該等電子裝置稱為「控制器」，其可控制一或複數系統的各種元件或子部件。依據處理之需求及/或系統之類型，可將控制器程式化以控制本說明書中所揭露之製程的任一者，包含處理氣體之輸送、溫度設定(如：加熱及/或冷卻)、壓力設定、真空設定、功率設定、射頻(RF, radio frequency)產生器設定、RF匹配電路設定、頻率設定、流率設定、流體輸送設定、位置及操作設定、進出工具及連接至特定系統或與特定系統介面接合的其他傳送工具及/或負載鎖室之晶圓傳送。

【0168】 廣泛而言，可將控制器定義為具有接收指令、發送指令、控制操作、允許清潔操作、允許端點量測等之各種積體電路、邏輯、記憶體、及/或軟體的電子設備。該積體電路可包含儲存程式指令的韌體形式之晶片、數位信號處理器(DSPs, digital signal processors)、定義為特殊應用積體電路(ASICs, application specific integrated circuits)之晶片、及/或執行程式指令(如：軟體)之一或更多的微處理器或微控制器。程式指令可為以各種個別設定(或程式檔案)之形式傳送到控制器的指令，其定義用以在半導體晶圓上、或針對半導體晶圓、或對系統執行特定製程的操作參數。在若干實施例中，該操作參數可為由製程工程師所定義之配方的部分，該配方係用以在晶圓之一或更多的層、材料、金屬、氧化物、矽、二氧化矽、表面、電路、及/或晶粒的製造期間，完成一或更多的處理步驟。

【0169】 在若干實施中，控制器可為電腦的部分或耦接至電腦，該電腦係與系統整合、耦接至系統、或透過網路連接至系統、或上述之組合。例如，控制器係可位於「雲端」、或為晶圓廠主機電腦系統的全部或部分，其可允許晶圓處理之遠端存取。該電腦能達成對該系統之遠端存取，以監測製造操作之目

前製程、查看過去製造操作之歷史、查看來自許多製造操作之趨勢或性能指標，來改變目前處理之參數，以設定處理步驟來接續目前的處理、或開始新的製程。在若干範例中，遠端電腦(如：伺服器)可透過網路將製程配方提供給系統，該網路可包含區域網路或網際網路。該遠端電腦可包含可達成參數及/或設定之輸入或編程的使用者介面，該等參數或設定接著自該遠端電腦傳送至該系統。在若干範例中，控制器接收資料形式之指令，在一或更多的操作期間，其針對該待執行的處理步驟之各者而指定參數。應瞭解，該等參數可特定於待執行之製程的類型、及工具(控制器係配置成與該工具介面接合或控制該工具)的類型。因此，如上所述，控制器可分散，例如藉由包含一或更多的分離的控制器，其透過網路連接在一起並朝共同的目標而作業，例如本說明書中所敘述之製程及控制。用於如此的目的之分開的控制器之範例可為腔室上之一或更多的積體電路，其與位於遠端(例如為平台等級、或為遠端電腦的部分)之一或更多的積體電路連通，其結合以控制該腔室上的製程。

【0170】 範例系統可包含(但不限於)電漿蝕刻腔室或模組(使用感應或電容耦合電漿)、沉積腔室或模組、旋轉沖洗腔室或模組、金屬電鍍腔室或模組、潔淨腔室或模組、斜邊蝕刻腔室或模組、物理氣相沉積(PVD, physical vapor deposition)腔室或模組、化學氣相沉積(CVD, chemical vapor deposition)腔室或模組、原子層沉積(ALD, atomic layer deposition)腔室或模組、原子層蝕刻(ALE, atomic layer etch)腔室或模組、離子植入腔室或模組、徑跡腔室或模組、及可與半導體晶圓之製造及/或生產有關或用於其中的任何其他半導體處理系統。

【0171】 如上所述，依據待由工具執行之製程步驟(或複數製程步驟)，控制器可與下列一或多者通訊：其他工具電路或模組、其他工具元件、群集工具、其他工具介面、鄰接工具、附近工具、位於整個工廠的工具、主要電腦、另一

控制器、或將晶圓之容器帶往或帶離半導體製造廠中的工具位置及/或載入埠的用於材料傳送之工具。

其他實施例

【0172】 儘管為了清楚與理解之目的，已詳細描述特定實施例之背景下的前述所揭露之技術、操作、製程、方法、系統、設備、工具、膜、化學物、及組成，但本領域中具通常知識者應明白，在本揭露內容的精神及範疇內有許多能施行前述實施例的替代性方案。因此，本說明書中所述之實施例應被視為說明性地(而非限制性地)說明文中所揭露之發明概念，且不應用來作為不適當地限制最終指向本揭露內容之標的的任何申請專利範圍之範疇的依據。

【符號說明】

【0173】

- 300 程序
- 310 操作
- 320 操作
- 330 操作
- 335 操作
- 340 操作
- 350 操作
- 360 操作
- 470 方法
- 472 操作

474	操作/方塊
476	操作/方塊
478	操作/方塊
480	操作/方塊
482	操作/方塊
484	操作/方塊
486	操作/方塊
488	操作/方塊
490	操作/方塊
492	操作/方塊
494	操作/方塊
496	操作/方塊
471	程序
473	操作
475	操作
477	操作
479	操作
481	操作
483	操作
485	操作
487	操作
489	操作

491	操作
493	操作
495	操作
497	操作
601	程序
610	操作
620	操作
630	操作
635	操作
636	操作
640	操作
650	操作
660	操作
801	程序
810	操作
820	操作
830	操作
840	操作
850	操作
860	操作
865	操作
900	可調間隙之電容耦合式限制射頻電漿反應器

902	腔室
904	腔室外罩
906	下電極
908	上電極
910	間隙
910a	小間隙
910b	中等間隙
910c	大間隙
912	開口
914	絕緣環
916	支撐板
918	腔室壁板
920	射頻電源
922	射頻供應導管
924	射頻帶
926	射頻功率構件
928	階梯凸緣
930	射頻偏壓外罩
932	射頻偏壓外罩槽
934	射頻偏壓外罩臂
936	接地護罩
938	導管支撐板

940	設施導
942	驅動機構
944	垂直線性軸承/線性軸承
946	螺旋齒輪
948	曲徑軸封
950	橫向偏斜伸縮囊/伸縮囊
956	固定護罩
958	可移動護罩板
960	曲徑溝槽
982	晶圓埠口
1000	感應耦合式電漿蝕刻設備
1001	腔室壁/腔室
1002	上部子腔室
1003	下部子腔室
1011	窗口
1017	卡盤
1019	晶圓
1021	匹配電路
1022	埠口
1023	射頻電源
1025	連接部
1027	連接部

1033	線圈
1039	匹配電路
1040	真空泵
1041	射頻電源
1043	連接部
1045	連接部
1049	法拉第屏蔽部
1050	內部電漿柵
1051	系統控制器
1052	處理器
1054	大量儲存裝置
1056	記憶體裝置
1058	系統控制指令
1060	主要氣流入口
1070	側氣流入口

【發明申請專利範圍】

【第1項】一種使電腦模型最佳化的電腦實現方法，該電腦模型，該電腦實現方法包含：

(a) 針對待最佳化的一或更多模型參數，識別出數值，其中該等模型參數係用於執行該電腦模型；

(b) 獲得由使用以該組獨立輸入參數的數值所執行的實驗蝕刻製程所蝕刻的一或多片半導體基板之光學量測所產生的實驗反射光譜；

(c) 藉由使用一電腦處理器，藉由使用步驟(b)中所指定之該組獨立輸入參數的數值及在步驟(a)中所識別的該等模型參數的數值來執行該電腦模型，產生計算出的反射光譜；及

(d) 藉由使用一電腦處理器，修改在步驟(a)中所識別的該一或更多模型參數的數值，且利用經修改的該一或更多模型參數的數值重複步驟(c)，俾降低計量，該計量表示：關於該組獨立輸入參數的數值，在步驟(b)中所獲得之該實驗反射光譜與在步驟(c)中所產生的對應之計算出的反射光譜間的差異，藉此針對用於使半導體基板上之特徵部的蝕刻輪廓與該組獨立輸入參數相關聯的該電腦模型的該一或更多模型參數，產生修改的數值。

【第2項】如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中該計算出的反射光譜其中至少若干係由包含下列各者的製程所產生：

(i) 使用該模型來產生計算出的蝕刻輪廓，該計算出的蝕刻輪廓係由一系列蝕刻輪廓座標所表示；

(ii) 從在步驟(i)中所產生之該計算出的蝕刻輪廓，藉由模擬由該計算出的蝕刻輪廓所反射的電磁輻射而產生計算出的反射光譜。

【第3項】 如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中：

在步驟(b)中所獲得之該實驗反射光譜包含對應至一系列蝕刻時間的反射光譜，該系列蝕刻時間表示蝕刻製程之不同的持續時間；且

在步驟(c)中所產生之該計算出的反射光譜包含自該模型所計算出的反射光譜，俾對應至步驟(b)中的該系列蝕刻時間。

【第4項】 如申請專利範圍第3項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中該實驗反射光譜係在步驟(b)中自於進行中的蝕刻製程期間在該系列蝕刻時間所執行的光學量測而獲得。

【第5項】 如申請專利範圍第4項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中在該系列蝕刻時間其中至少部分上的連續之蝕刻時間係以0.01秒至1秒來分隔。

【第6項】 如申請專利範圍第4項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中在步驟(b)中所獲得之該實驗反射光譜其中至少若干已基於利用針對各種持續時間的基板蝕刻製程及在各種持續時間的基板蝕刻製程結束後所執行的光學量測之比較而調整。

【第7項】 如申請專利範圍第6項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中對應至該已結束之各種持續時間的蝕刻製程之該光學量測係於對應之經蝕刻的基板已自在其中蝕刻該基板的處理腔室移出後執行。

【第8項】 如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，更包含重複步驟(d)。

【第9項】 如申請專利範圍第8項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，更包含重複步驟(d)直至針對該一或更多模型參數獲得誤差的實質上局部最小值為止。

【第10項】 如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中該電腦模型計算在一網格的點處之局部蝕刻速率作為時間的函數，該網格的點代表該半導體基板上之該特徵部的該蝕刻輪廓。

【第11項】 如申請專利範圍第10項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中該一或更多模型參數包含反應速率常數、反應物及產物的黏附係數、及/或反應物及產物的擴散常數。

【第12項】 如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，更包含藉由執行PCA來識別該組獨立輸入參數。

【第13項】 如申請專利範圍第12項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中該PCA係針對該等獨立輸入參數之串接向量及對應之量測到的蝕刻輪廓而進行。

【第14項】 如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，更包含以該一或更多模型參數的該修改的數值，使用或調整一組使用該電腦模型所決定的蝕刻條件而蝕刻一半導體基板。

【第15項】 如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中該電腦模型，其中該電腦模型允許蝕刻製程參數的建立，其中，該電腦模型係以針對該一或更多模型參數在步驟(d)中產生的該修改的數值加以最佳化。

【第16項】 如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法，其中該電腦模型，其中該電腦模型允許針對蝕刻製程的微影遮罩的建立，其中，該電腦模型係以針對該一或更多模型參數在步驟(d)中產生的該修改的數值加以最佳化。

【第17項】 一種經最佳化的電腦模型，包含非暫態電腦可讀媒體，該非暫態電腦可讀媒體上提供有對電腦模型製碼的電腦可執行指令，該電腦模型使半導體基板上之特徵部的蝕刻輪廓與一組獨立輸入參數相關聯，以一或更多模型參

數之修改的數值加以設定，其中該電腦模型係已藉由如申請專利範圍第1項之步驟(a)-(d)來最佳化。

【第18項】 如申請專利範圍第17項之經最佳化的電腦模型，其中該等電腦可執行指令更包含用於針對蝕刻製程建立微影遮罩的指令。

【第19項】 如申請專利範圍第17項之經最佳化的電腦模型，其中該等電腦可執行指令更包含用於建立蝕刻製程參數的指令。

【第20項】 一種在蝕刻製程蝕刻半導體基板上之特徵部後近似判定該特徵部之輪廓的電腦實現方法，該電腦實現方法包含：

(a) 針對對應至該蝕刻製程的一組獨立輸入參數，指定測試數值；及

(b) 藉由一電腦處理器，使用如申請專利範圍第17項之經最佳化的電腦模型並利用針對該組獨立輸入參數所指定的該等測試數值來產生蝕刻輪廓。

【第21項】 一種判定用於蝕刻製程的一組獨立輸入參數之一組數值的方法，該蝕刻製程蝕刻半導體基板上之特徵部後大致上產生該特徵部之期望的蝕刻輪廓，該方法包含：

(a) 針對對應至該蝕刻製程之該組獨立輸入參數，指定測試數值；

(b) 使用如申請專利範圍第17項之經最佳化之電腦模型並利用針對該等獨立輸入參數所指定之該等測試數值來產生計算出的蝕刻輪廓；

(c) 計算表示該期望的蝕刻輪廓與該計算出的蝕刻輪廓間的差異的計量；及

(d) 修改步驟(a)中針對該組獨立輸入參數所指定的一或更多數值，以藉由重複步驟(b)至步驟(c)來確定降低該期望的蝕刻輪廓與該計算出的蝕刻輪廓間的該差異。

【第22項】 如申請專利範圍第21項之判定用於蝕刻製程的一組獨立輸入參數之一組數值的方法，更包含：

(e) 重複步驟(d)直至針對在步驟(d)中所選定的針對該組獨立輸入參數之該等數值獲得誤差的實質上局部最小值為止。

【第23項】一種用於處理半導體基板的系統，該系統包含：

蝕刻設備，其用於蝕刻半導體基板，該蝕刻設備的操作係藉由一組獨立輸入參數來調整；及

控制器，其用於控制該蝕刻設備的該操作，該控制器包含處理器及記憶體；

其中：

該記憶體儲存經蝕刻之特徵部的輪廓模型，該經蝕刻之特徵部的輪廓模型係藉由如申請專利範圍第1項之使電腦模型最佳化的電腦實現方法的步驟(a)-(d)來最佳化；且

該處理器係配置以使用儲存於該記憶體中的該經蝕刻之特徵部的輪廓模型，以自針對該組獨立輸入參數的一組數值來計算出經蝕刻之特徵部的輪廓。

【第24項】如申請專利範圍第23項之用於處理半導體基板的系統，其中該控制器回應該計算出的經蝕刻之特徵部的輪廓而變化該組獨立輸入參數的一或更多數值，以調整該蝕刻設備的該操作。

【第25項】如申請專利範圍第24項之用於處理半導體基板的系統，其中回應該計算出的經蝕刻之特徵部的輪廓而變化其數值的該組獨立輸入參數包含選自下列各者的一或更多參數：射頻(RF)電漿的頻率及RF電漿的功率位準。

【第26項】如申請專利範圍第23項之用於處理半導體基板的系統，其中該蝕刻設備包含：

處理腔室；

基板固持器，其用於在該處理腔室內固持基板；

電漿產生器，其用於在該處理腔室內產生電漿，該電漿產生器包含RF電源；

第 5 頁，共 6 頁(發明申請專利範圍)

一或更多閥控制的製程氣體入口，其用於使一或更多製程氣體流至該處理腔室中；及

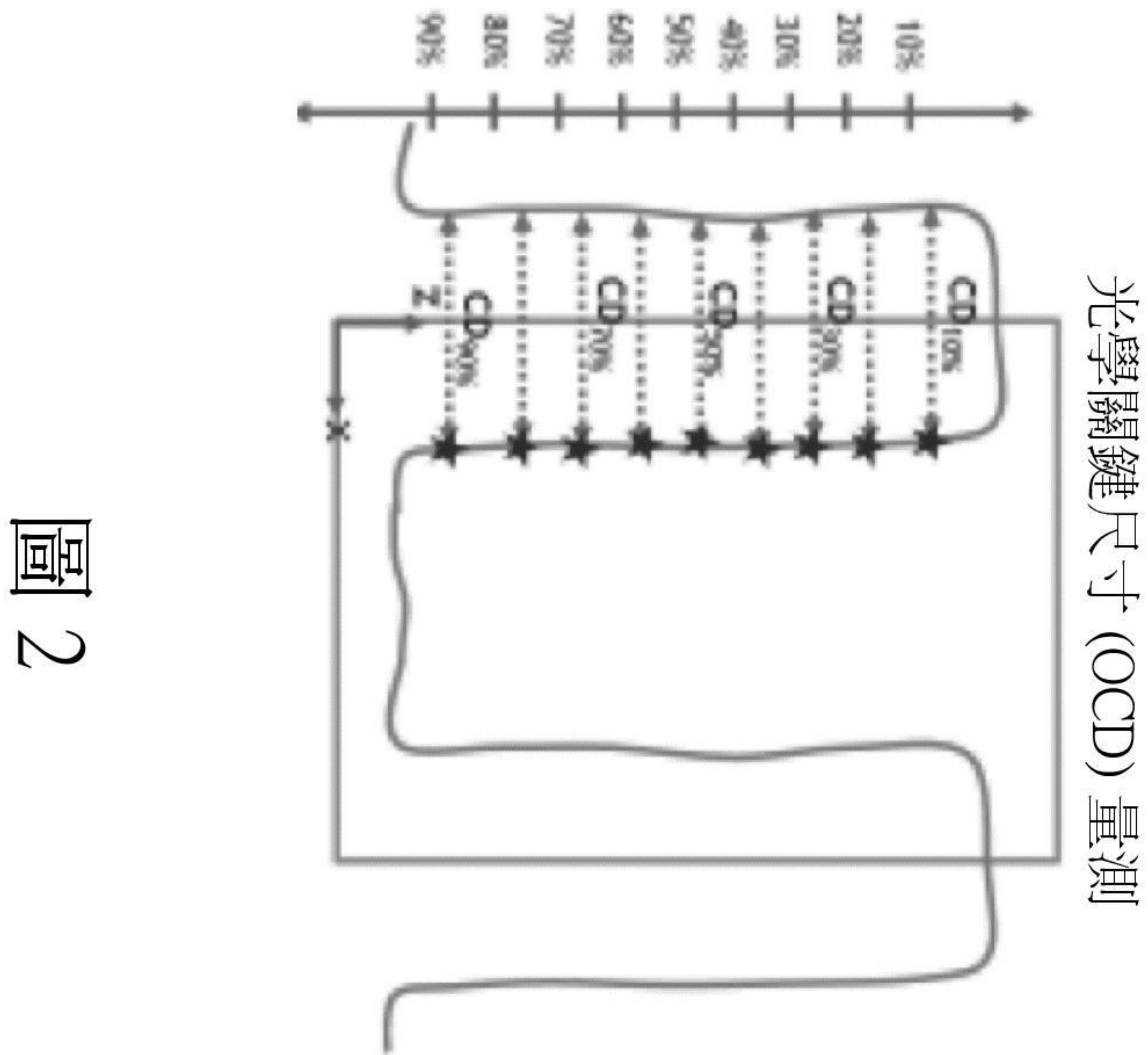
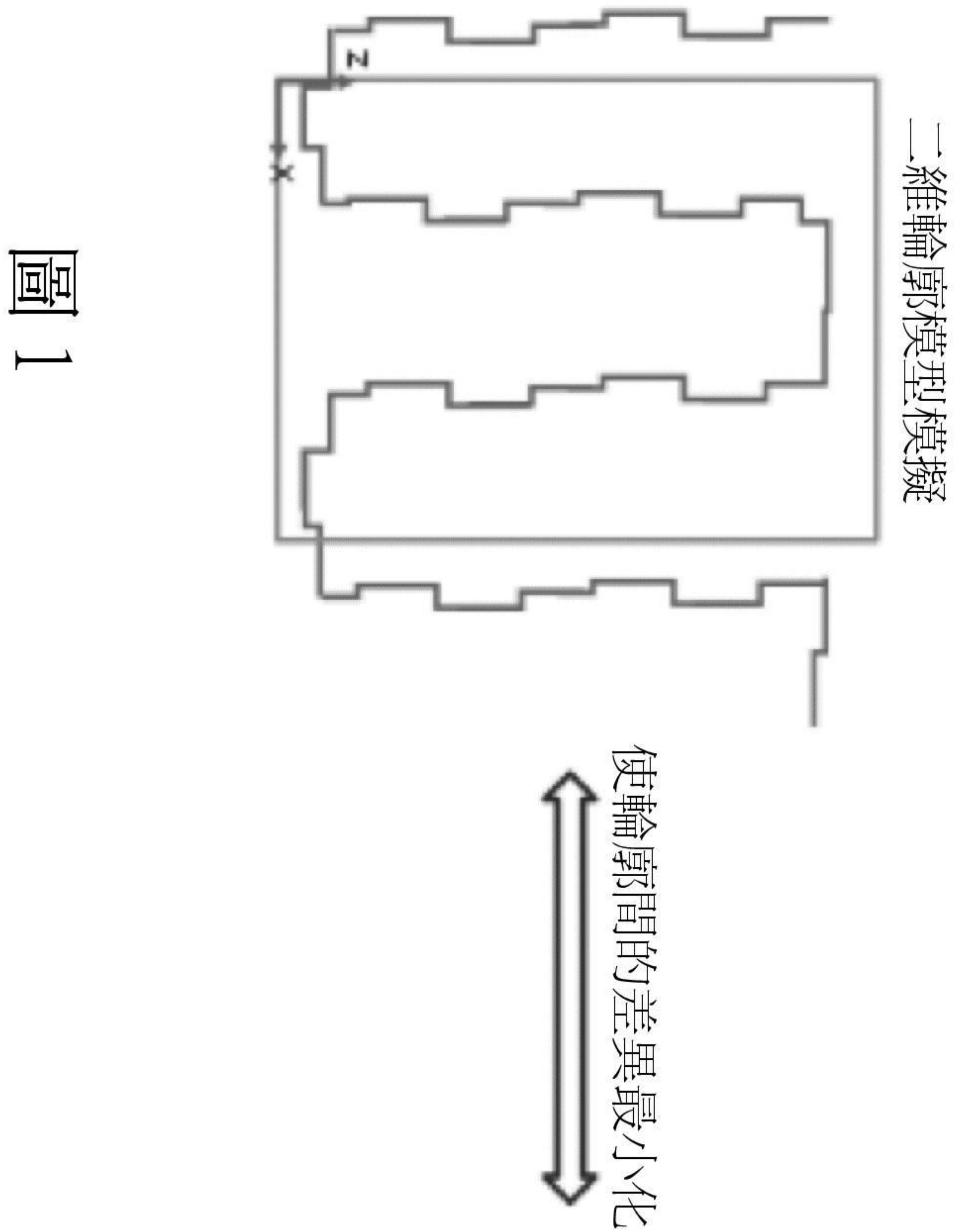
一或更多氣體出口，其流體連接至用於自該處理腔室排空氣體的一或更多真空泵浦。

【第27項】 如申請專利範圍第26項之用於處理半導體基板的系統，其中該控制器回應該計算出的經蝕刻之特徵部的輪廓而調整RF電源的頻率及/或功率位準，以改變該處理腔室中之該電漿的特性。

【第28項】 如申請專利範圍第26項之用於處理半導體基板的系統，其中該控制器回應該計算出的經蝕刻之特徵部的輪廓而操作該一或更多閥控制的製程氣體入口，以調整該一或更多製程氣體流至該處理腔室中的流率。

【第29項】 如申請專利範圍第26項之用於處理半導體基板的系統，其中該控制器回應該計算出的經蝕刻之特徵部的輪廓而調整該處理腔室內的溫度及/或壓力。

【發明圖式】



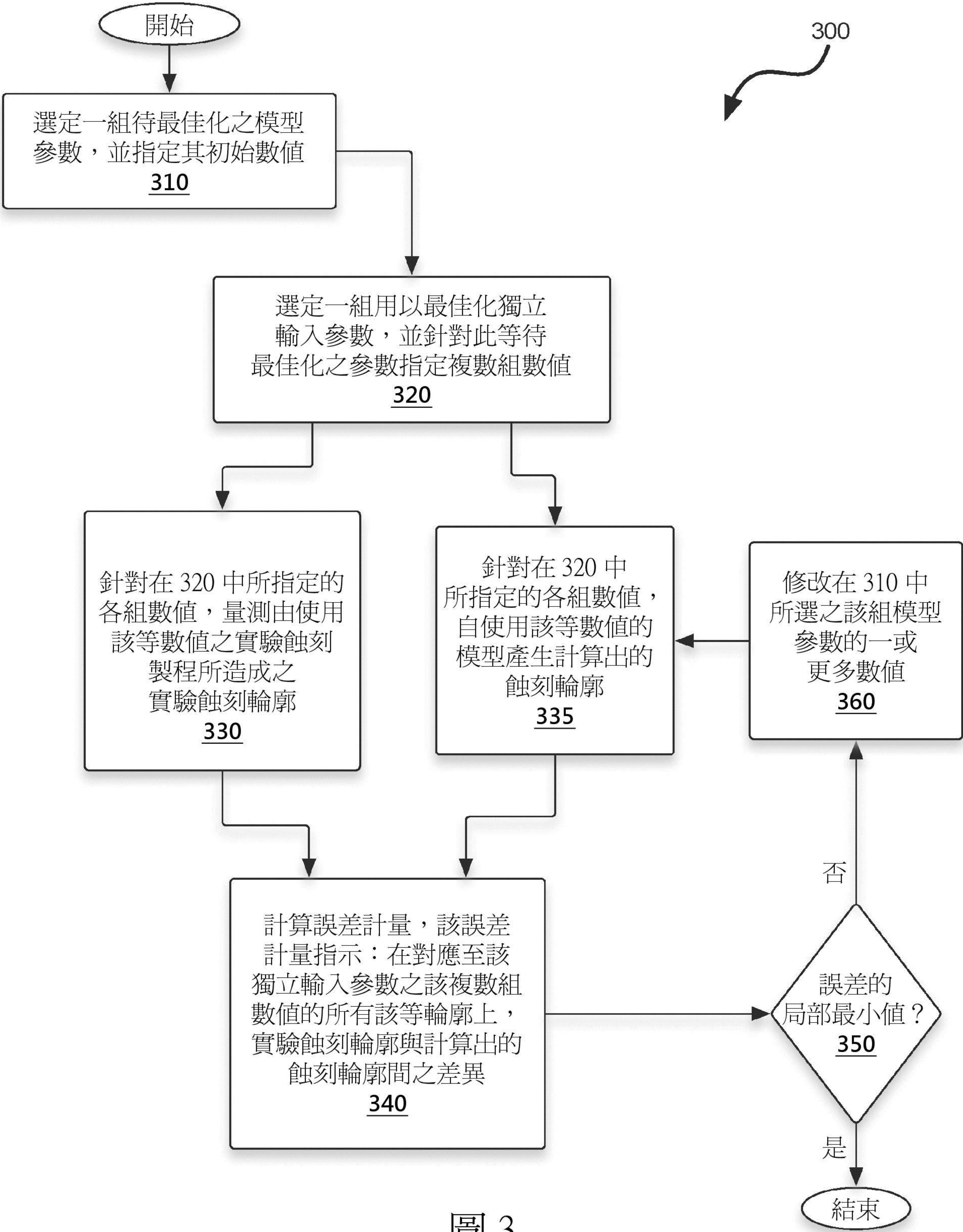


圖 3

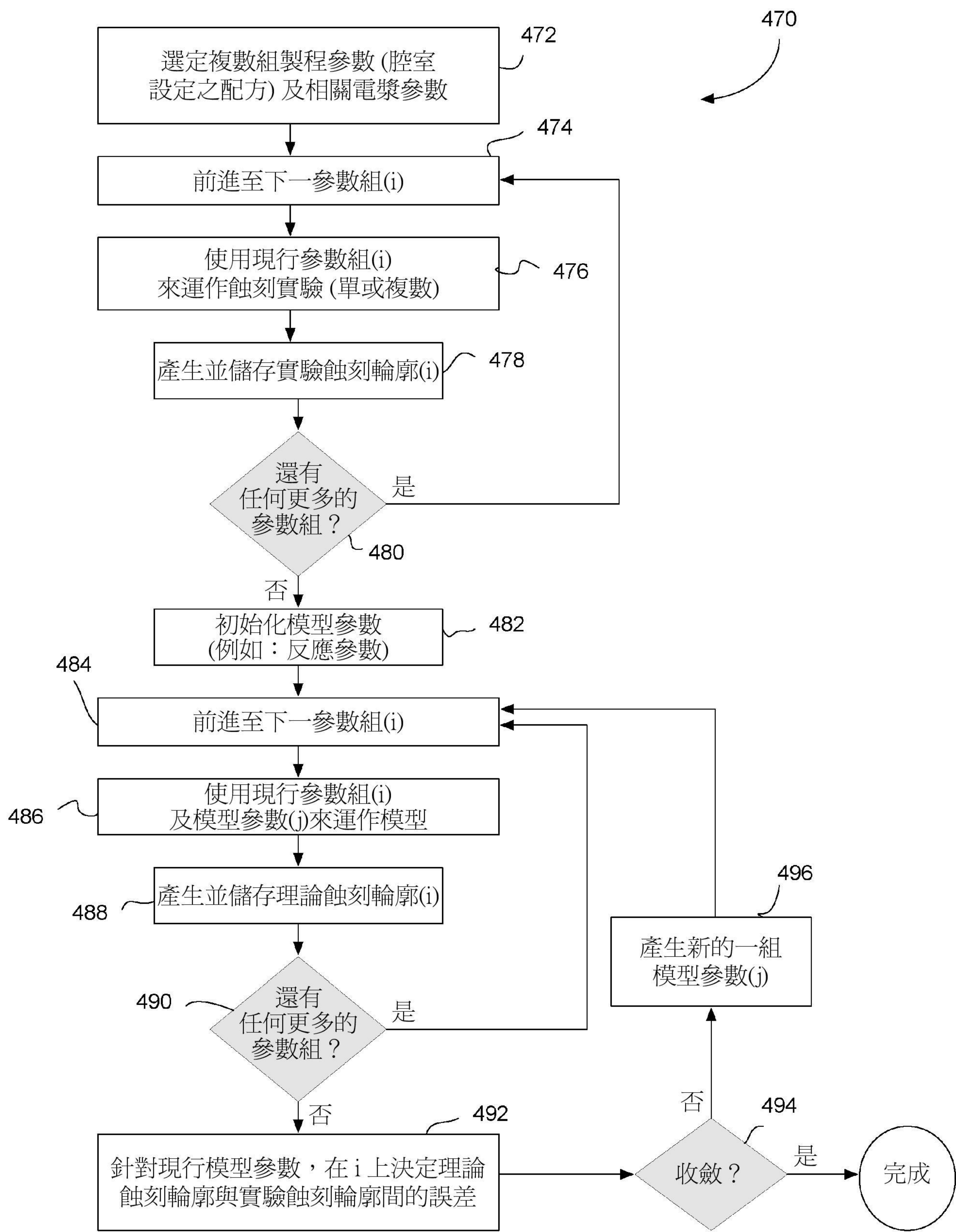


圖 4A

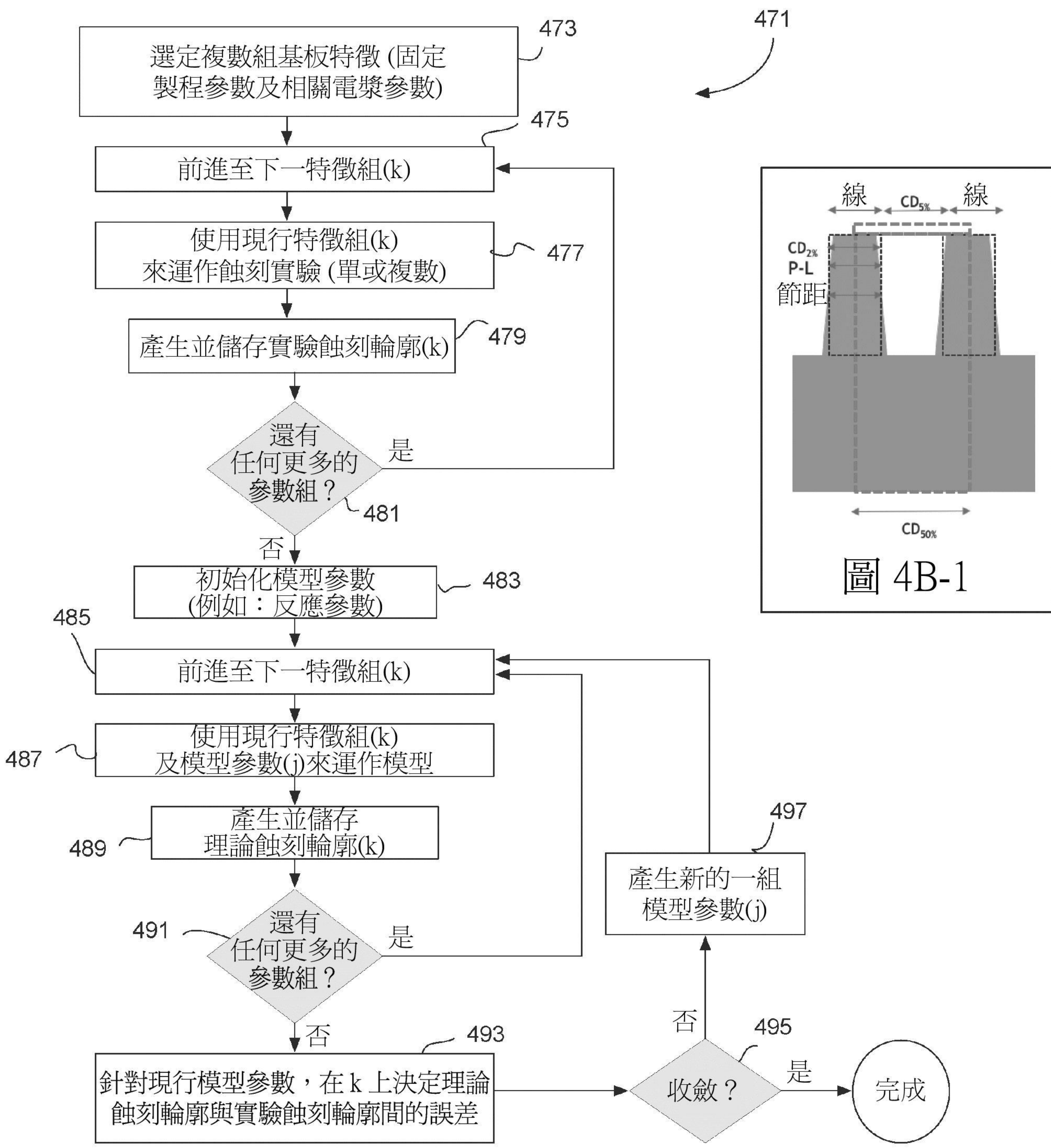


圖 4B

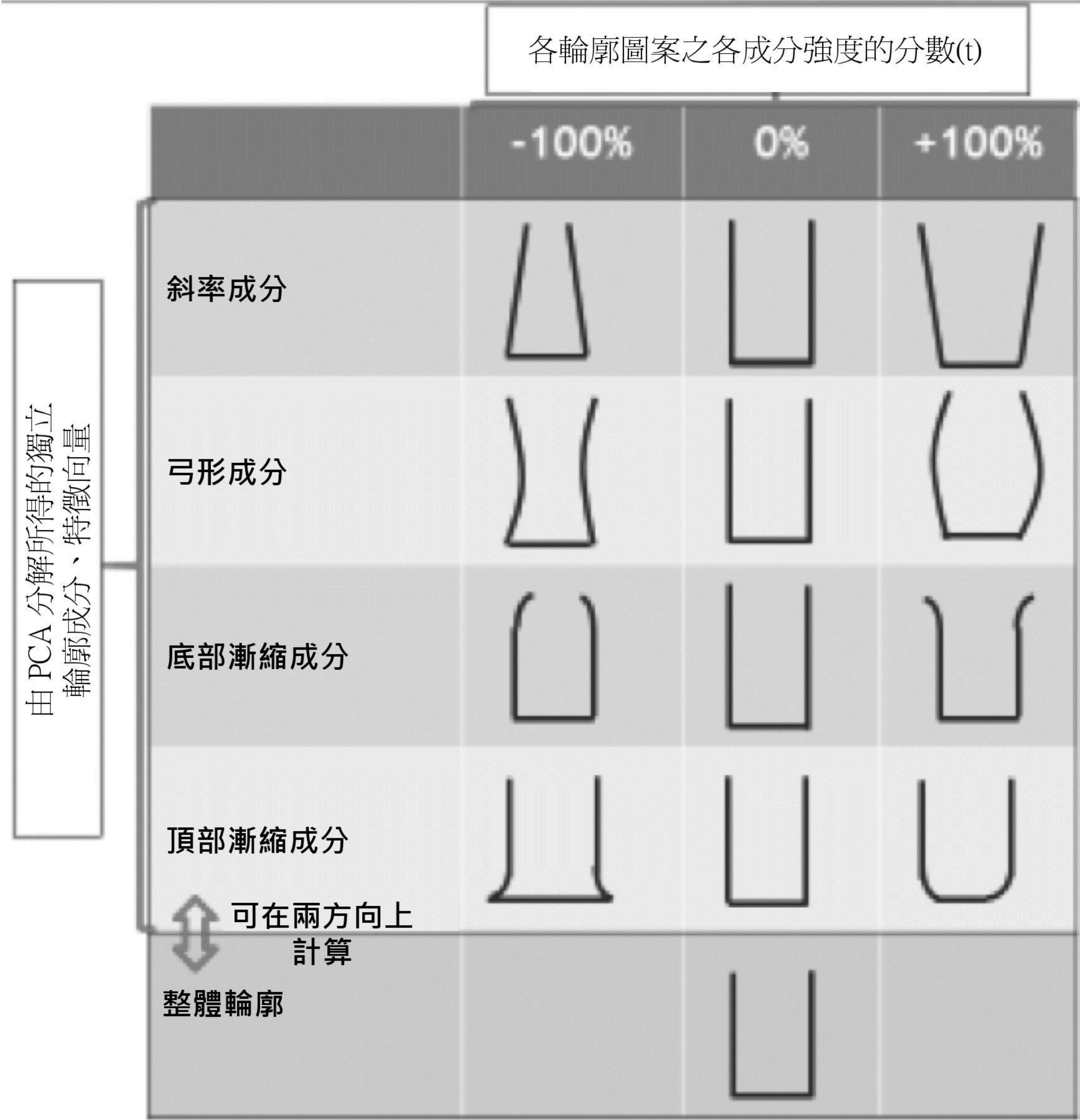


圖 5

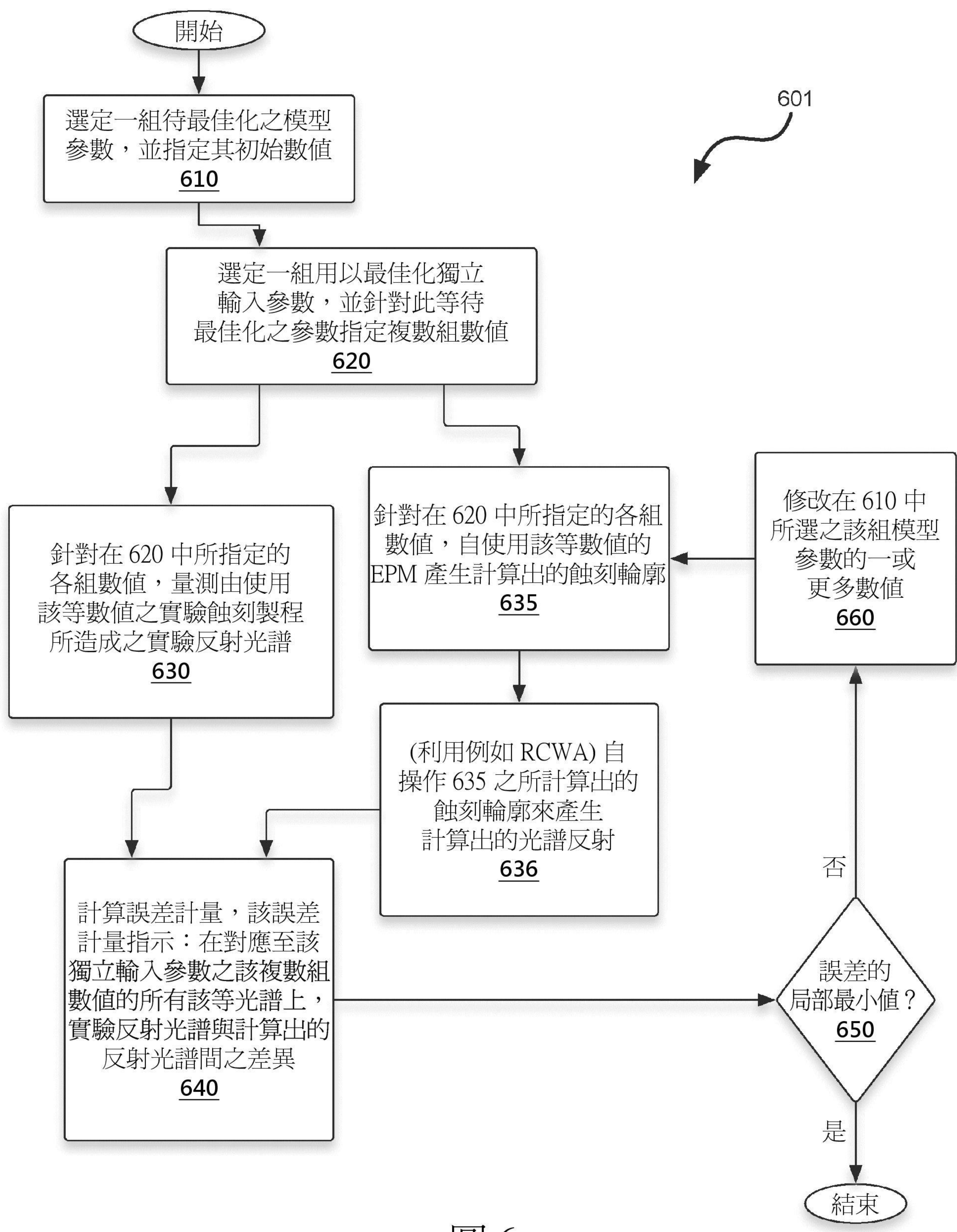
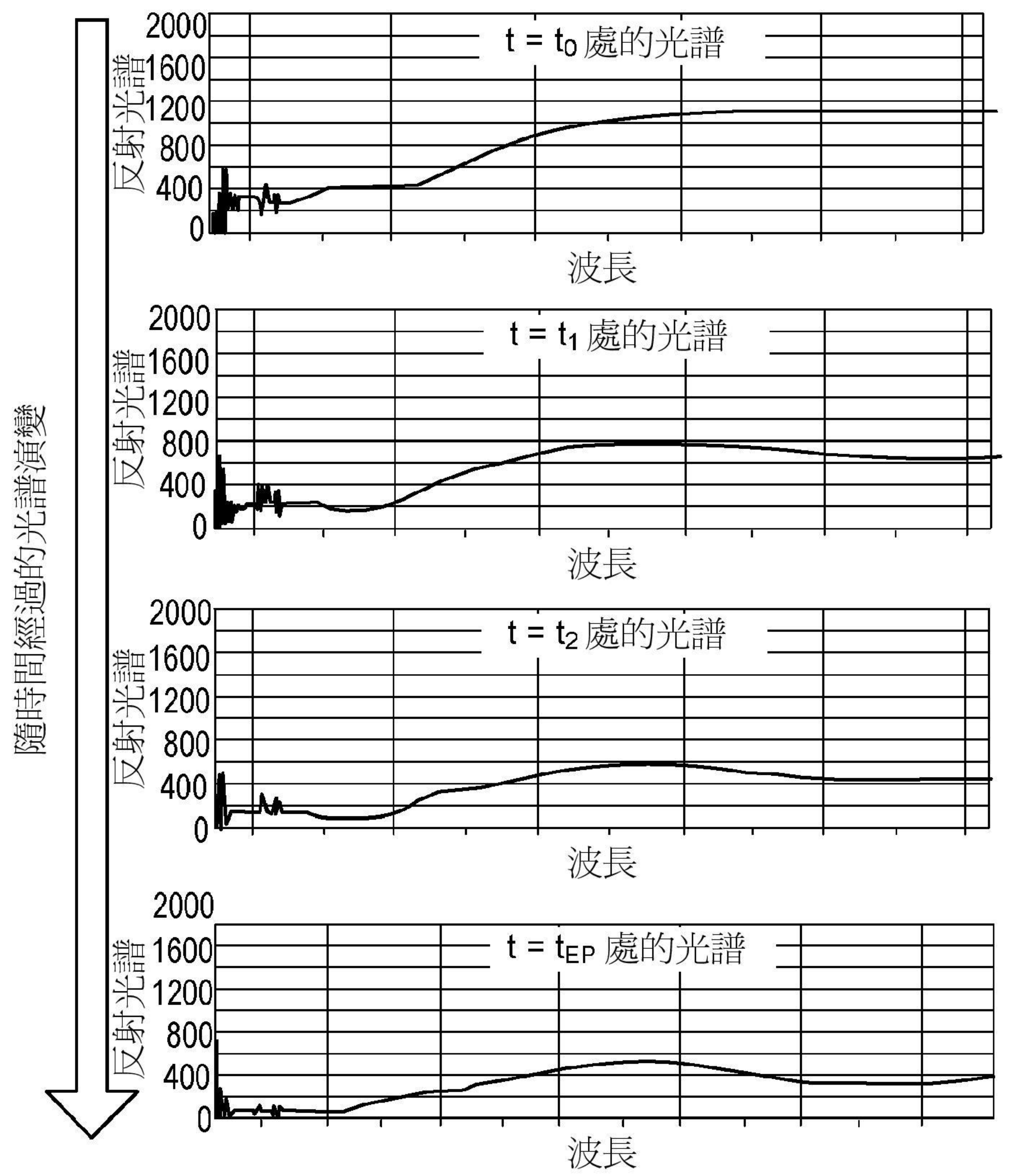


圖 6



正交成分的迴歸 vs 最終特徵部

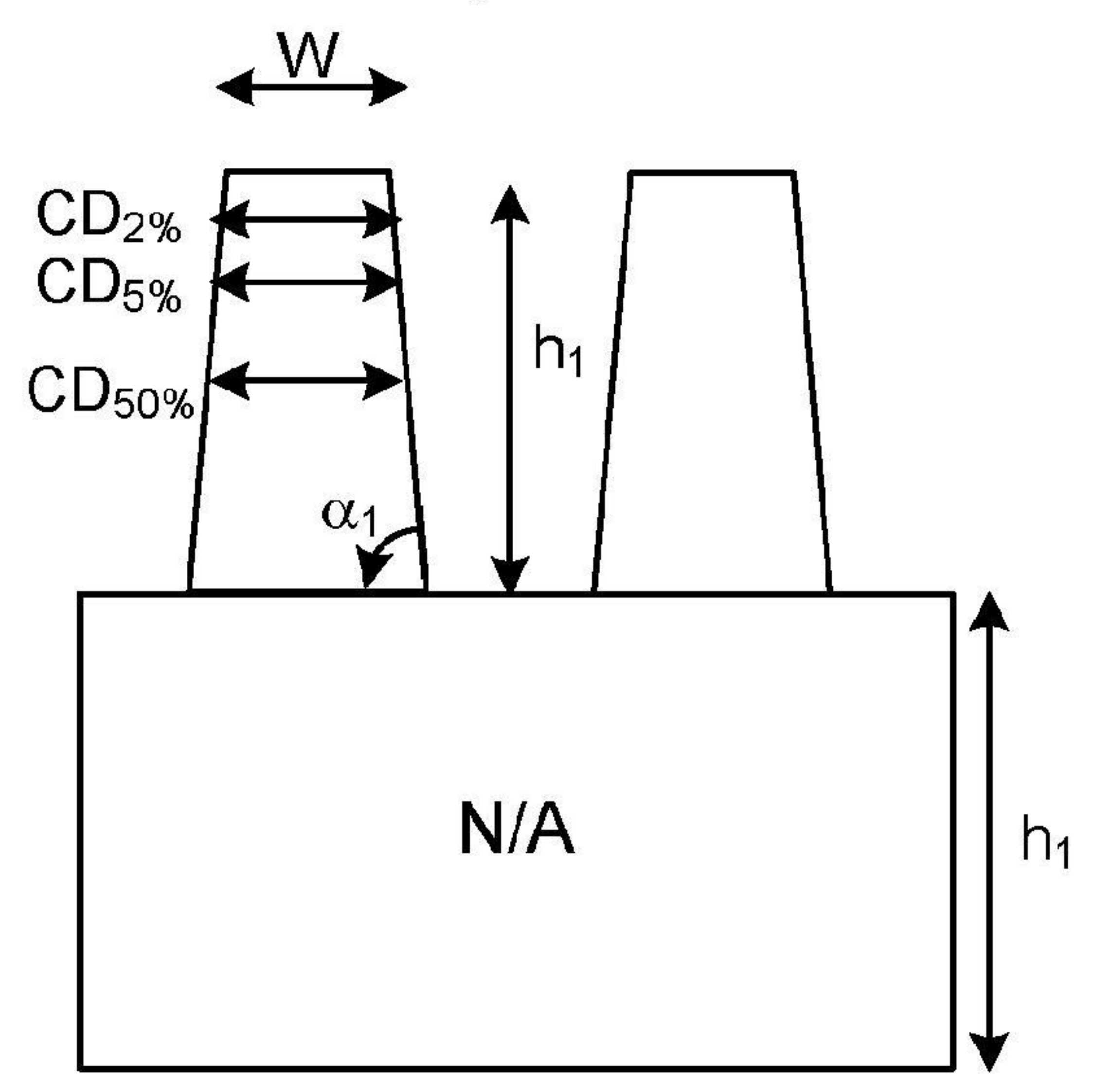
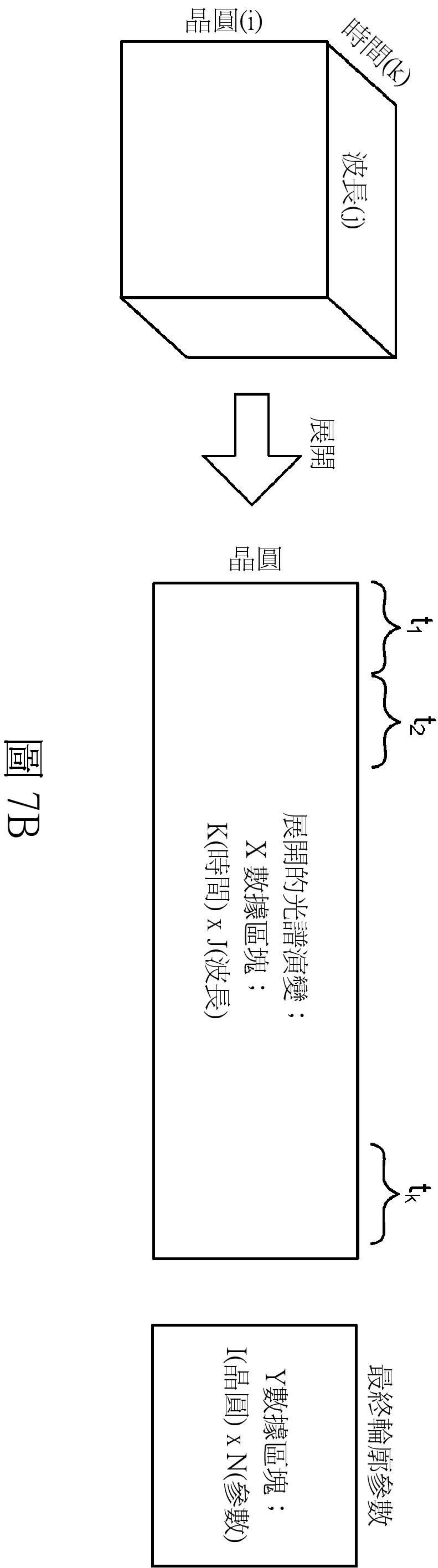


圖 7A



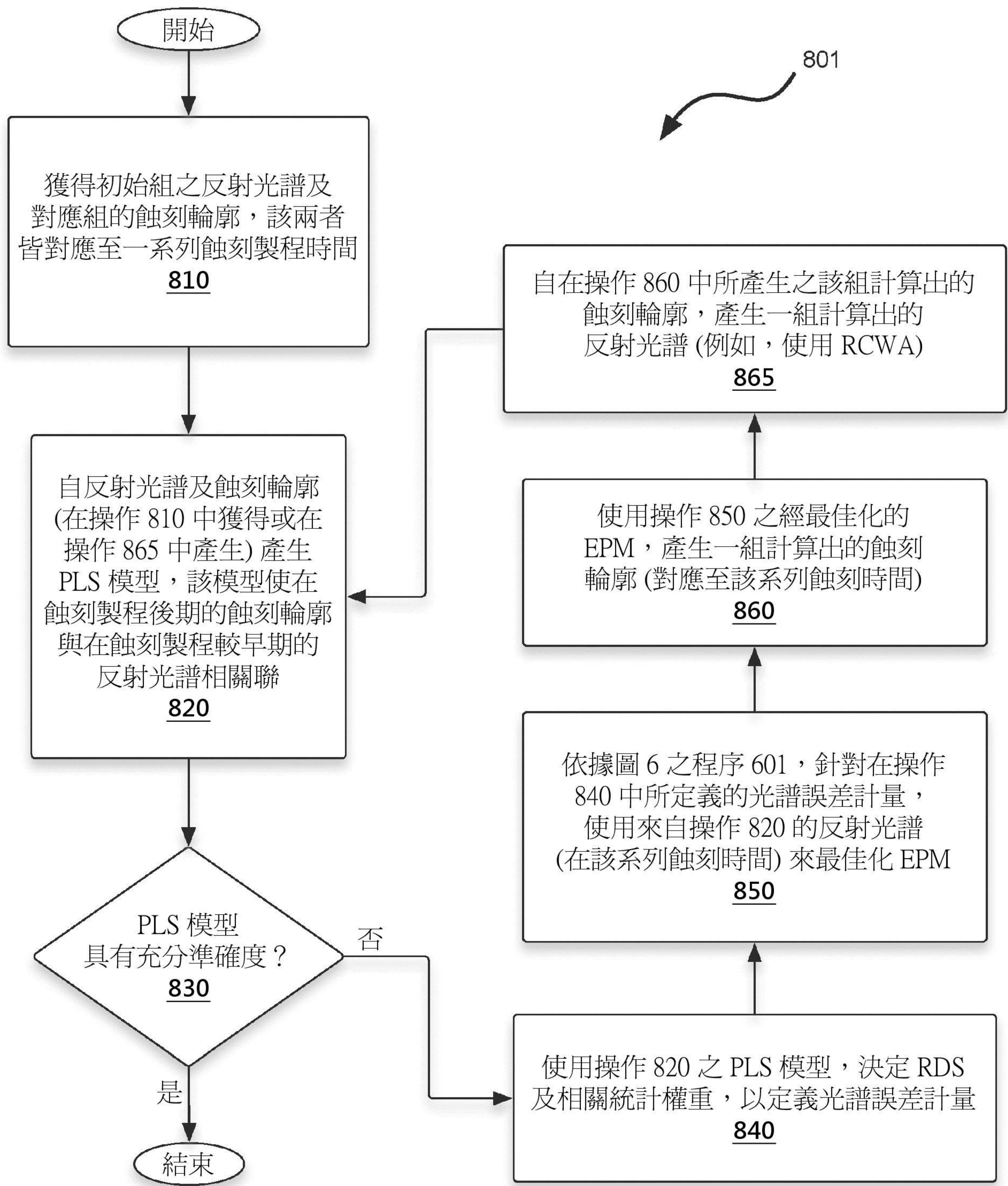


圖 8

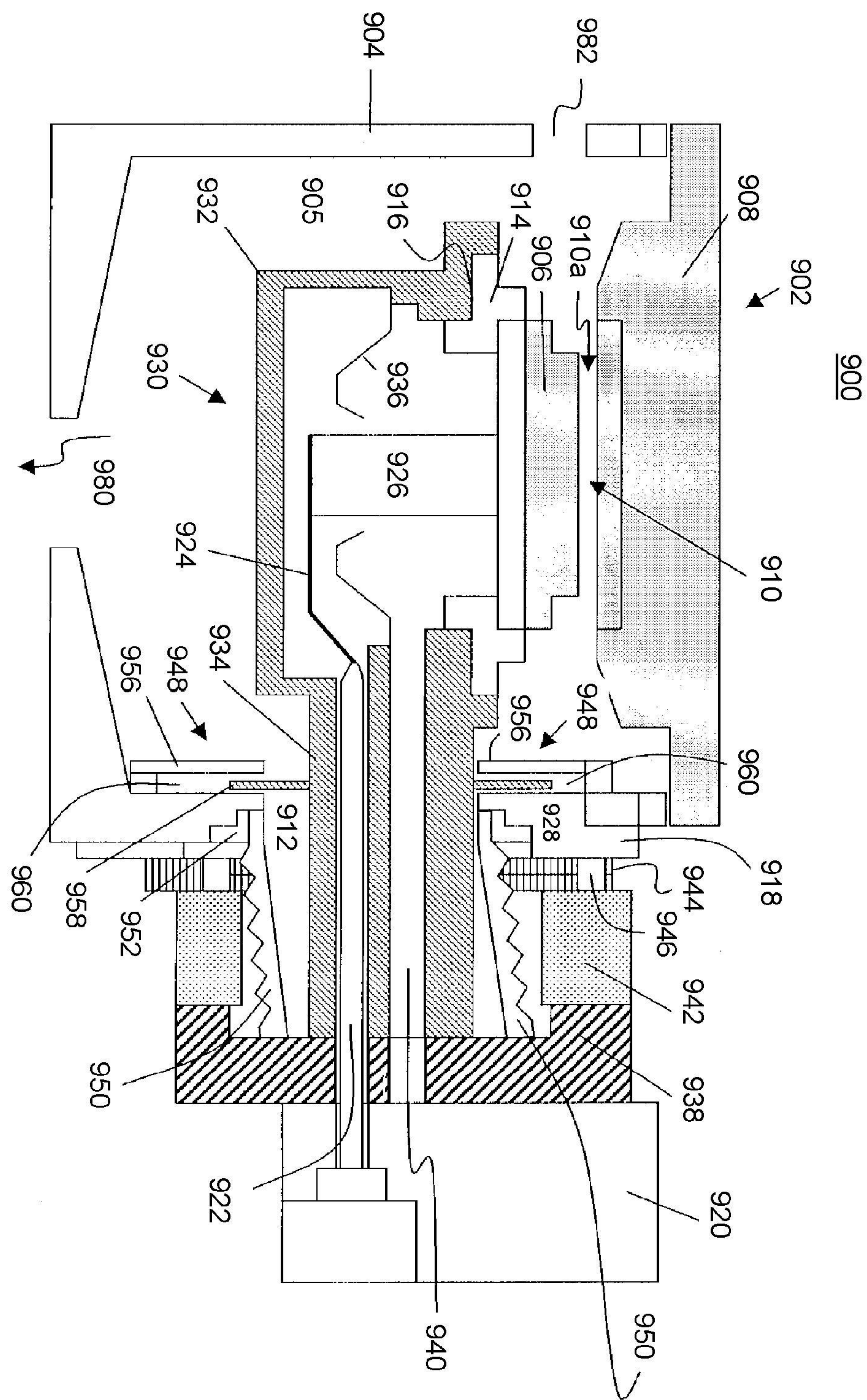


圖 9A

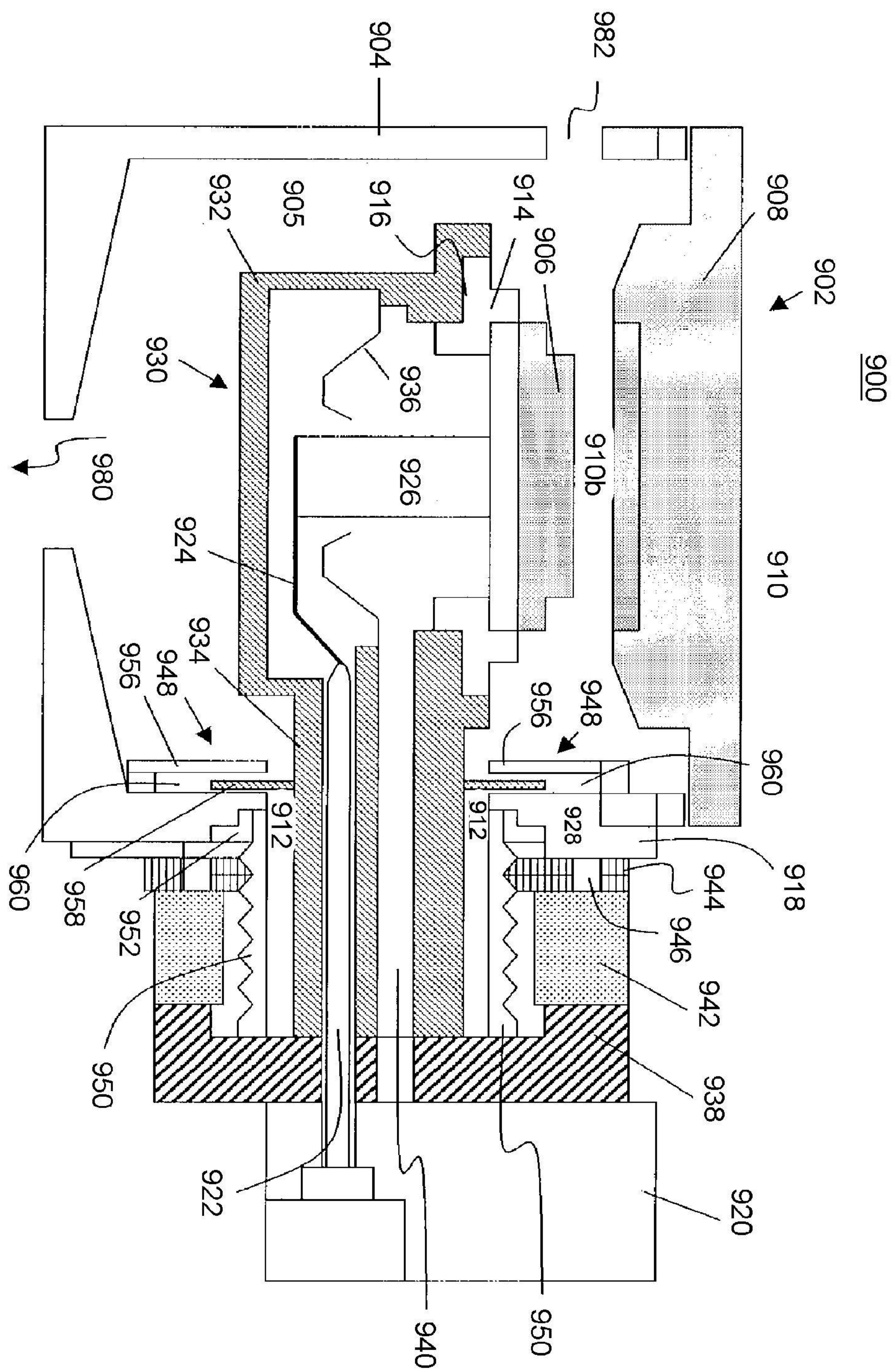


圖 9B

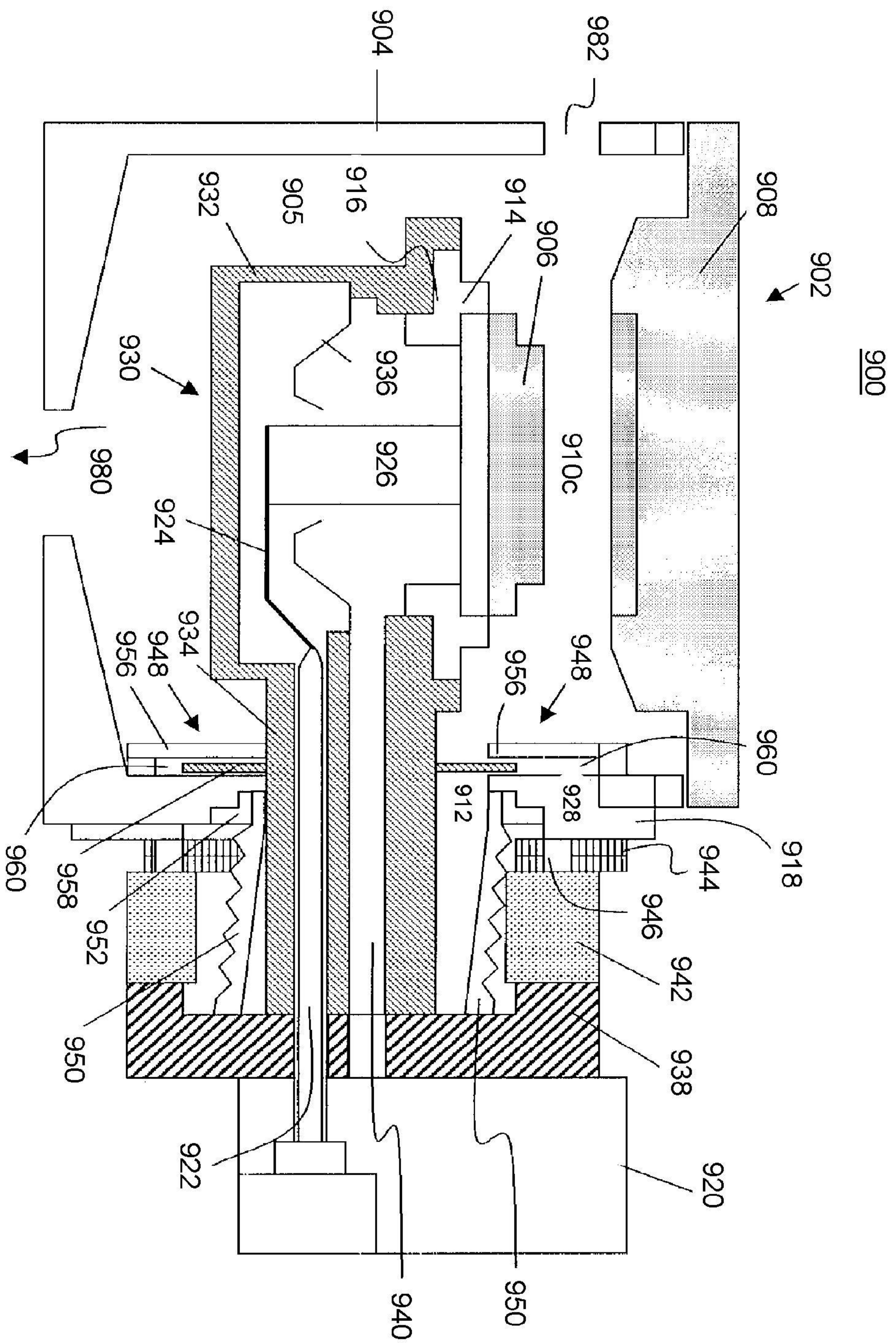


圖 9C

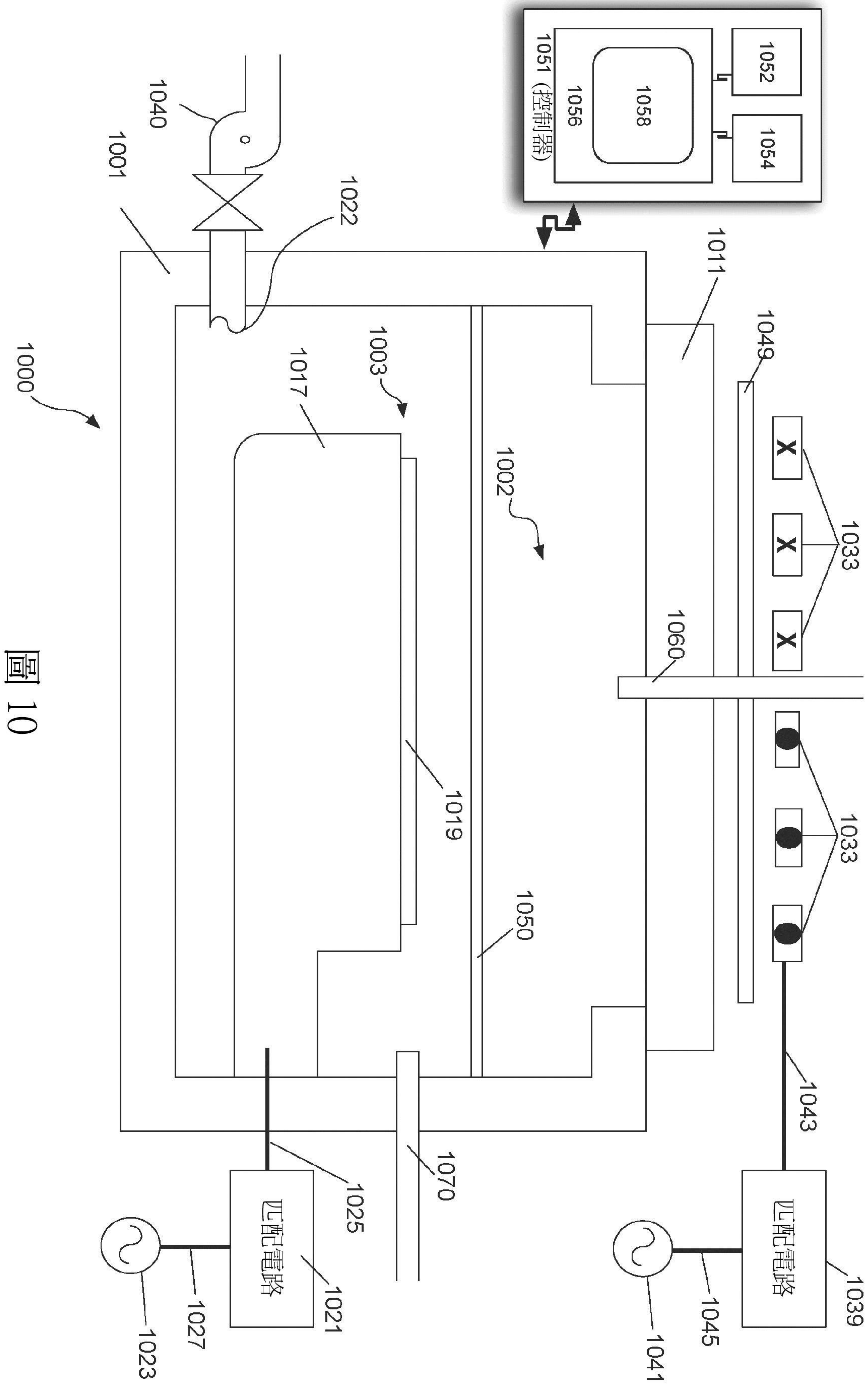


圖 10