

複数散乱体の同時・高精度 3次元計測 High-accuracy simultaneous 3D measurement of multiple scatterers

星野鉄哉, 青木貞雄, 伊藤雅英

イノベティブ計測技術開発研究センター 筑波大学

〒305-8573 つくば市天王台 1-1-1

Tetsuya HOSHINO* Sadao AOKI and Masahide ITOH

R&D Center for Innovative Material Characterization, University of Tsukuba,

1-1-1 Tennoudai, Tsukuba, Ibaraki 305-8573, Japan

奥行きのある立体的な試料は、正確なイメージを3次元で表現できる。試料の散乱または吸収が大きい場合、ホログラフィや位相再生法では3D正確度は約100波長である。一方、光波散乱計測を結像計測、および深層学習と組み合わせると、約1波長の正確度を持つ汎用的な計測ができる。ここでは、表面に凹凸のある矩形レジストについて、形状・サイズを見積もった。

1 はじめに

光を利用して小さいものを見る原理（顕微鏡の原理）は、その近似の程度から数学的に大まかに3つに分けられる。一つは光が直進することを利用して、光線追跡を行う方法である。試料内を光は直進し、試料の像はそのまま投影される。医療用に広く使われる、X線CTではこの投影像から元の3次元像を再構成する。もう一つは、レンズの結像を利用する方法である。光学の原理としては、レンズのフーリエ変換作用を利用している[1]。そして、フーリエ変換ができるのは、フラウンホーファー近似を用いたときに限られる。フラウンホーファー近似は、試料サイズに比べて十分遠方で計測されるときに成立する[2]。そのため、近距離の光の伝搬の考慮が必要となる試料内での多重反射や多重散乱は考慮できない。3次元形状を計測するための主要な手法の一つである位相再生法も同じ近似に基づいており、試料表面で散乱された自由に伝搬する光を扱う。3番目が、試料の厚みや屈折率を厳密に考慮して、散乱パターンから像を推定する手法である。光波散乱計測（スキヤトロメトリ）と呼ばれている。元の像を求める過程は試行錯誤であり、単純な形状でなければ適用が難しい。しかし、解析がうまくいけば、他の二つの原理と比較して計測対象サイズを二桁小さくでき、

二桁正確度が向上する。本検討ではこの3番目の手法による計測を行った。

表1において、有力な、X線による高分解能3次元計測手法の一つは位相再生法である。位相再生法はホログラフィと基本的考え方は同じであり3次元像を高速に得るのに適しているが、フラウンホーファー近似の仮定が入る。このため、散乱や吸収が大きい場合、これらの手法では、計測対象のサイズが小さくても100波長程度にとどまっており、正確度も10波長程度である[3]。3次元像を高分解能に計測する手法としては2光子吸収あるいは、一分子の蛍光を時間分解で高感度計測する手法が知られているが、これらも、レンズの結像を利用しているので、フラウンホーファー近似の範疇に入り、吸収や散乱が大きい場合には、同様の性能となる。一方、光波散乱計測は、光学の原理式であるマクスウェルの方程式を厳密に評価するので、3次元形状計測において、フーリエ変換を利用した解析に比べ散乱や吸収が大きい場合、正確度が二桁向上する[4]。

一方、光波散乱計測では実験の散乱パターンから元の形状が自動的に推定されていないため、フーリエ変換による算出と比較すると、再現性や客観性に問題がある。そのため、深層学習（DL: Deep Learning）による形状推定をこの方法に適用した。

表1 3次元顕微光計測の比較

近似	計測手法	主な波長	試料サイズ / 波長	3次元正確度 / 波長	3次元計測時間	試料構造
線形近似	CT(コンピュータ断層撮影)	0.2 nm	~10 ⁷ [5]	~10 ⁴ [5]	~100 min [6]	複雑, 広視野
フラウンホーファー近似	位相再生	0.2 nm[7, 8]	5600 [7, 8]	250 [7, 8]	45 min [7, 8]	複雑, 広視野
厳密解	光波散乱計測	10 nm [4]	10~10 ² [4]	2[4]	1 min	単純
		400~700 nm	1~10 ²	0.1~1	<1 ms	単純

DL は周期構造への適用例がある[9]。今回はより汎用性の高い孤立形状に DL を適用した。

光波散乱計測のもう 1 つの問題は、局所的な構造情報しか取得できないため、複雑な構造の分析が困難になることである。ここでは、試料の同じサイトに対して画像形成測定と光波散乱計測の両方を実行して、複雑な形状も分析できるようにした。

2 実験

2.1 試料

2 cm 角のシリコンウエハにフォトリソグラフィを用いて、20 μm 間隔の孤立した矩形格子レジストパターンを作成した[10]。20 μm は、軟 X 線では回折パターンが孤立したものであると仮定するのに十分な長さである[11]。原子間力顕微鏡の評価では、高さ 188 nm であり、レジスト表面の平均粗さは 2.2 nm である。また、幅の設計値は 750 nm である。

2.2 計測方法

ビームライン BL-11D の分光器で波長 10 nm を選択した。ゾーンプレートで画像を形成することにより、光波散乱計測と同じ場所での結像を行った。入射角度 θ_i は Si 基板に対して、 43.7° であり、ゼロ次光をビームストップで遮蔽している。回折角は θ_d である。光波散乱計測と結像の切り替えはゾーンプレートの移動で行った。

3 結果および考察

結像から、焦点の合った領域が 5 つの格子をカバーしていることが分かった (図 1)。以下では、DL を使用して回折パターンからこの格子の形状を推定する。実験結果は、長方形の表面の溝の高さを 0、2、4、6 nm に変更した 4 種類と、三角形、楕円、半楕円の 3 種類を含む、合計 7 種類で評価した。(図 2)。シミュレーション条件を図に示す。溝の周期 p は $w/7$ である。分離されたシステムに適用可能な条件下で、厳密結合波解析 (RCWA) によって、7 種類の合計で 1024 の教師データが計算された。実験では偏光 TE と TM が混じっているが、TM の反射は無視できるほど小さい。この偏光の定義は文献[4]と同じである。膜厚 d_2 は、膜内でコヒーレンスが消失していると仮定し 4 値で平均化している[12]。

計算した角度ごとに、実験データから標本点を抽出した。DL のために、各試料の角度分布と対応する形状を全結合した。プログラミング言語は Python で、フレームワークは Pytorch である。活性化関数として正規化線形ユニットを使用し、出力層としてソフトマックス関数を使用した。プログラムの実行に必要な各層のバッチ、反復、およびパラメータの数を最適化した。隠れ層の数は 3、パラメータ数は 85 である。バッチ数が 64、反復回数が 60 の場合、教師データと同じテストデータで検証された正解の割合は 62% である。

評価結果は、表面凸高さが 4 nm の長方形となり、小さいほうが判定した種類と近いことを示す novelty score は 5.1×10^{-5} と高い信頼性が得られた。このようにレジスト表面に nm レベルの凸面があることが、

原子間力顕微鏡だけでなく、光学的にも検証された。さらに、散乱パターンを、長方形のレジストの幅と高さを 20 nm 刻みで変化させて計算した。ここでは、形状算出のためのシミュレーション指標を、この角度分布の図 3 の矢印で示した谷の角度に設定し、実験と計算の差の二乗平均を評価した。RCWA の計算条件は、孤立系に適用できるように調整した[11]。矩形のレジストの断面形状は、幅 750 ± 20 nm、高さ 188 ± 20 nm となった。

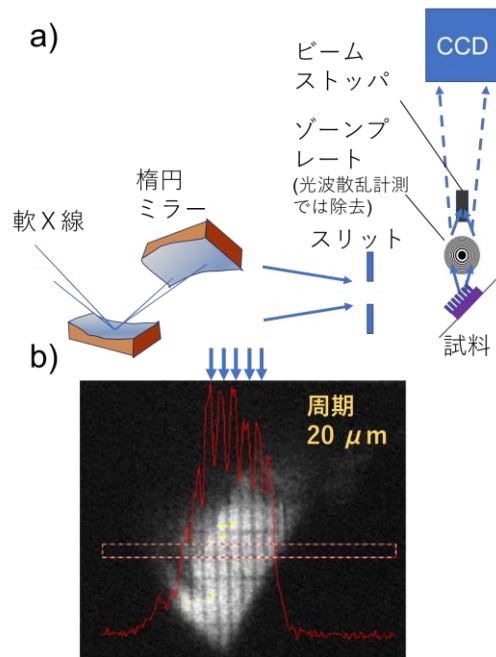


図 1 (a) 光波散乱計測と結像の光学系。(b) 暗視野結像。

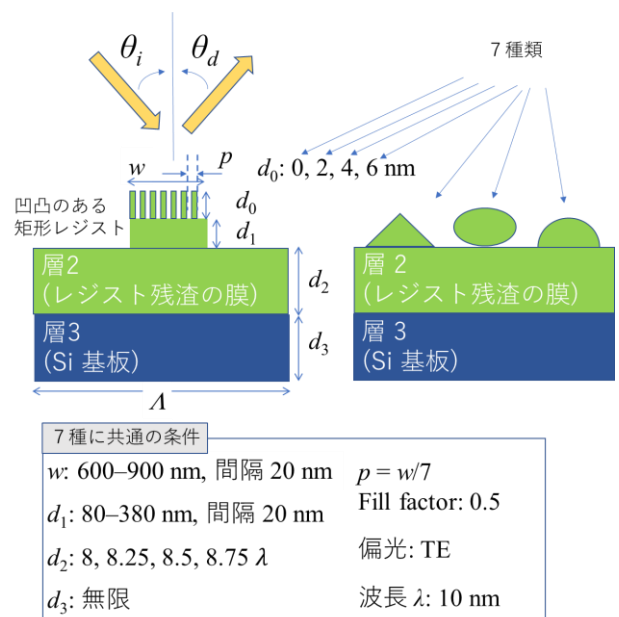
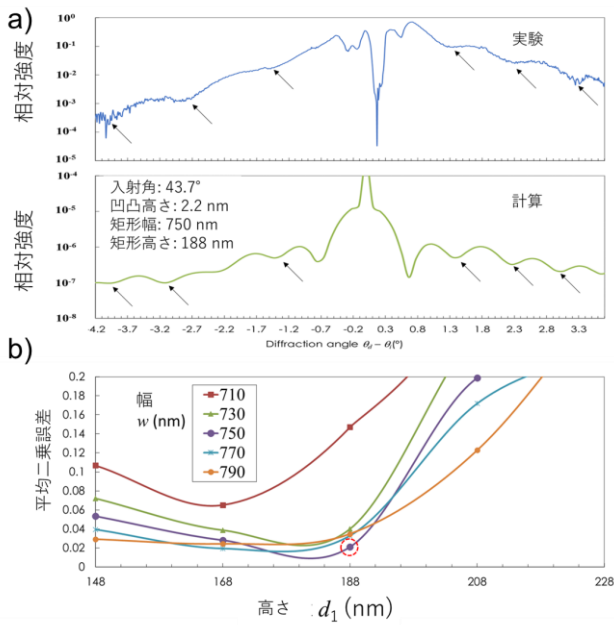


図 2 DL のモデル。

図 3. (a) 実験と計算の散乱パターンの比較。(b) 最小二乗誤差による矩形の幅と高さの算出。



4 まとめ

複雑な構造を解析するために、Si 基板上の単一格子のレジストの結像測定により測定部位を明確にしなが、コヒーレント散乱パターンを測定した。客観的な結果を得るために、波長 10 nm の光の散乱パターンを DL で解析して形状を推定した。形状は上面に凹凸のある矩形になり、その信頼性指標は高かった。さらに、散乱パターンの谷の角度を使用して、矩形の幅と高さを 2 波長の分解能で推定できた。上に示したように、高分解能光波散乱計測が汎用測定に利用できることを示した。

光波散乱計測では、有機物であるレジストパターンの実験から、格子幅の分解能が 20 nm となり、理論的には 1 nm も可能である[4]。X線でも損傷はあるが、電子線に比べるとその度合いはかなり小さく、波長 10 nm 以上では損傷を抑えつつ計測できることが知られている[13]。この意味で、X線において、長い波長で高分解能計測をする手法が求められており、本研究はこの観点からも有用な手段を与える。

謝辞

井藤浩志博士と七里元晴様にはレジストパターンの試料作成と原子間力顕微鏡による評価をしていただきました。また、渡辺紀生博士には、研究を進めるうえでの、ディスカッションをさせていただきました。

間瀬一彦教授と菊地貴司様、若林大佑博士には、PF の実験を進めるうえでご協力をいただきました。

参考文献

[1] 青木貞雄, "光学入門" 共立出版 (2002) .
 [2] Max Born and Emil Wolf, "Principles of Optics, 7th (expanded) edition." United Kingdom: Press Syndicate of the University of Cambridge (1999).

[3] J. Gao, D. R. Guildenbecher, P. L. Reu, and J. Chen, *Opt. Express* **21**, 22, 26432 (2013).
 [4] T. Hoshino, M. Shiono, B. Saswatee, S. Aoki, K. Sakurai and M. Itoh, *Appl. Opt.*, **59**(28), 8661-8667 (2020).
 [5] C. L. Duvall, W. R. Taylor, D. Weiss, and R. E. Guldberg. *American Journal of Physiology-Heart and Circulatory Physiology* **287**.1 H302-H310 (2004).
 [6] M. Kampschulte, A. C. Langheinrich, J. Sender, H. D. Litzlbauer, U. Althöhn, J. D. Schwab, E. Alexandre-Lafont, G. Martels and G. A. Krombach, *Röntgenstrahlen und der bildgebenden Verfahren*. **188**(02) 146 (2016).
 [7] J. Miao, T. Ishikawa, B. Johnson, E. H. Anderson, B. Lai, and K. O. Hodgson, *Phys. Rev. Lett.* **89** 088303 (2002).
 [8] A. Suzuki, S. Furutaku, K. Shimomura, K. Yamauchi, Y. Kohmura, T. Ishikawa, and Y. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* **112** 053903 (2014).
 [9] J. Bischoff, J. J. Bauer, U. Haak and L. Hutschenreuther, H. Truckenbrodt, "Optical scatterometry of quarter-micron patterns using neural regression," in Optical scatterometry of quarter-micron patterns using neural regression. In Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XII, (International Society for Optics and Photonics, Santa Clara, 1998), pp. 526-537.
 [10] T. Hoshino, S. Aoki, M. Itoh, M. Shichiri and H. Itoh, "Transmission and Reflection Coherent Diffraction for High-accuracy Cross-sectional Measurement by Soft X-rays," in International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2020 (ISOM'20), (SPIE, Takamatsu, 2020), We-B-05 (2020).
 [11] T. Hoshino, T. Yatagai and M. Itoh, *Opt. Express*, **20**(4), 3954-3966 (2012).
 [12] T. Hoshino, B. Saswatee, S. Aoki and M. Itoh, *Appl. Opt.*, **60**(25), 7765-7771(2021).
 [13] S. Marchesini, H. N. Chapman, S. P. Hau-Riege, R. A. London, A. Szoke, H. He, M. R. Howells, H. Padmore, R. Rosen, J. C. H. Spence, and U. Weierstall, *Opt. Express* **11**, 2344 (2003).

* hoshino.tetsuya.gt@u.tsukuba.ac.jp