

X 光散射技術之半導體檢測應用

X-ray Scattering Techniques for Semiconductor Analysis and Applications

林智敏、翁世璋

Jhih-Min Lin, Shih-Chang Weng

X 光散射技術 (X-ray scattering techniques) 涵蓋多種非破壞性 (non-destructive) 分析方法，被廣泛應用於材料的結構分析以及其物理和化學性質的研究。常見技術包括：X 光繞射 (X-ray diffraction, XRD)、小角與廣角 X 光散射 (small-/wide-angle X-ray scattering, SAXS/WAXS)、X 光反射率 (X-ray reflectivity, XRR)、X 光拉曼散射 (X-ray Raman scattering, XRS)、康普頓散射 (Compton scattering)，以及共振與非共振非彈性 X 光散射 (resonant/Non-resonant inelastic X-ray Scattering, RIXS/NRIXS) 等。根據散射過程中的能量轉移特性，這些技術可大致分為彈性散射 (elastic scattering) 和非彈性散射 (inelastic scattering)。本文將重點討論 X 光彈性散射技術在半導體檢測中的應用，這些技術主要針對材料的微結構分析，為半導體製程中的奈米尺度結構表徵提供關鍵資訊。

X-ray scattering techniques encompass a variety of non-destructive analytical methods that are widely applied in the structural analysis of materials as well as the study of their physical and chemical properties. Commonly used techniques include X-ray diffraction (XRD), small- and wide-angle X-ray scattering (SAXS/WAXS), X-ray reflectivity (XRR), X-ray Raman scattering (XRS), Compton scattering, and resonant/non-resonant inelastic X-ray scattering (RIXS/NRIXS). Based on the energy transfer characteristics during the scattering process, these techniques can be broadly classified into elastic scattering and inelastic scattering. This article focuses on the application of elastic X-ray scattering techniques in semiconductor testing, primarily targeting the microstructural analysis of materials. These techniques provide crucial information for characterizing nanoscale structures, which is vital for semiconductor manufacturing processes.

一、簡介

當物聯網 (internet of things, IoT)⁽¹⁾ 與元宇宙 (Metaverse)⁽²⁾ 等概念的陸續被提出，這些需要結合網絡 (network)、高效運算 (high performance computing, HPC) 和人工智能 (artificial intelligence, AI) 提供更加多元且廣泛的服務，也正在逐漸改變目前大眾的生活。驅使這一切發展背後不可或缺的核心動力之一，便是半導體製造技藝的迅速進步。自 1958 年德州儀器公司 (Texas Instruments, TI) 首次在實驗室中將多個電子元件集成到單一晶片，這是被認為是

現代積體電路的誕生。TI 更在 1961 年推出第一款商用的積體電路產品，包含幾個電晶體、電阻器以及電容器，可用於邏輯電路和放大功能。1971 年英特爾 (Intel) 推出第一款商用微處理器 Intel 4004，則是世界上第一款半可編程微處理器。半導體產業在過去數十年間依循莫爾定律 (Moore's Law)⁽³⁾ 的預測穩步前進。然而，隨著元件尺寸逐漸逼近物理極限，各大半導體製造企業紛紛採用創新策略，如開發新型電晶體結構、引入先進封裝技術以及探索新型材料，努力延續莫爾定律的生命力。目前，半導體製程已進入數奈米的極小尺度，製造工藝與檢測技術面臨前所未有的挑戰。在這樣的背景下，半導體檢測技術在製程中的角色愈發關鍵。本文將重點介紹 X 光散射技術在當前半導體檢測中的應用。

X 光 (X-ray)，又稱倫琴輻射 (Roentgen radiation)，是一種波長介於紫外光 (ultraviolet) 與伽馬射線 (Gamma ray) 之間的電磁波 (electromagnetic wave)。自 1895 年由德國物理學家倫琴 (W. C. Roentgen) 發現以來，X 光經過一個多世紀的發展，已被廣泛應用於醫學影像、工業檢測、安全檢查、考古與藝術鑒定以及科學研究等多個領域。對科學家而言，X 光是探測物質結構和性質的重要工具，通過 X 光與物質的相互作用產生的吸收、散射、螢光等效應，研究人員能夠從圖譜或能譜中獲取大量有價值的信息進行分析，從而揭示物質的內在特性。

自倫琴發現 X 光以來，相關技術的發展為人類社會作出了巨大貢獻，而 X 光散射技術的起源可追溯至 1912 年德國物理學家勞厄 (Max von Laue) 發現晶體中 X 光繞射現象。同年，布拉格父子 (William Henry Bragg and William Lawrence Bragg) 進一步揭示了繞射角度與晶體平面間的關係，開創了利用繞射圖形解析晶體結構的先河。基於這些奠基性研究，X 光散射技術逐步發展，形成了現代完整的理論體系。

在半導體檢測領域，X 光散射技術主要應用於：

- X 光繞射 (X-ray diffraction, XRD)^(4, 5, 6)：用於分析晶體結構與應力。
- X 光反射率 (X-ray reflectivity, XRR)^(7, 8)：用於量測薄膜的厚度、密度及表面粗糙度。
- 掠角入射 X 光散射技術 (GISAXS/GIWAXS)^(9, 10)：廣泛應用於有機半導體 (organic semiconductor) 及薄膜結構的分析。

隨著半導體製程的不斷縮小和結構日益複雜，這些 X 光散射技術正為解決製造和檢測中的挑戰提供強有力的支持。本文將對其具體應用進行深入探討。

二、X 光繞射

磊晶技術 (epitaxy) 是晶圓前段製程的核心技術之一，廣泛應用於製造高品質半導體元件，如積體電路中的金屬層、絕緣層和半導體層會利用物理氣相沉積法 (PVD)、化學氣相沉積法 (CVD)、原子層沉積法 (ALD) 或是分子束磊晶 (MBE) 等技術在基板表面生成，特定材料、厚度、結晶性 (非晶／多晶／單晶) 性質的薄膜各自依賴不同的製程技術。在特定的條件下，薄膜需要以磊晶的方式成長，如 MOS 中的半導體層、矽／矽鍺超晶格結構、GaN 薄膜等。在磊晶成長的過程中，基板與薄膜之間因為晶格常數的差異，會產生應力，造成薄膜晶格的結構 (晶相) 變化與物理特性的改變。因此研究磊晶成長機制與基板之間的關連性，是半導體成長的重要關鍵。

如圖 1 所示，磊晶薄膜與單晶基板的晶格常數不同，在成長時介面的薄膜晶格會受到來自基板的應力，造成薄膜的晶格扭曲，薄膜的 X 光繞射點亦會因此應變場產生移動，如

圖 1 右圖所示。在倒空間中，薄膜的繞射點會因為介面的晶格常數與基板接近，而在介面方向 (H, K)，移至與基板相近的位置。垂直方向 (L) 則因應力釋放而變長 (cubic-to-tetragonal distortion)，L 方向會向 L = 0 移動。因此研究薄膜繞射點在倒晶格空間的變化，可以獲得應變場的資訊，而研究此方法稱為倒空間映射 (reciprocal space mapping, RSM)⁽¹¹⁾。跟據 Laue Condition：

$$\vec{Q} = \vec{G}_{hkl}, |\vec{G}_{hkl}| = G = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

則可以利用繞射點的位置，計算出相對應晶面的間距。

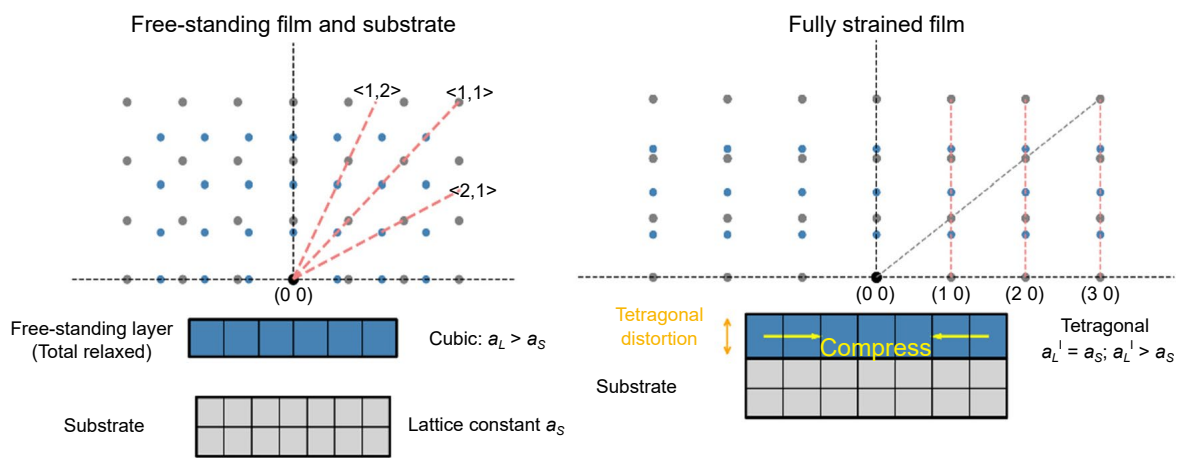


圖 1. 磊晶薄膜與基板關係示意圖。左圖，薄膜與基本皆為立方結構，薄膜的晶格常數大於基板。由於薄膜與基板間無應力產生，彼此的倒晶格繞射點對應原本的晶體結構。右圖，由於薄膜與基板的晶格常數不同，薄膜因應變場產生晶格形變，因為介面的晶格收縮導至繞射點移至於基板相同的位置 (介面方向晶格常數一致)，而垂直方向因釋放應力而伸長，繞射點在垂直方向向原點移動 (垂直晶格常數變大)。

圖 2 左為一薄膜與基板之 RSM 圖與鏡面 X 光繞射圖。此系統為在鈦酸鋇 (SrTiO₃, STO) (001) 單晶基板上，生長鈣酸鋇 (SrRuO₃, SRO) 薄膜，SRO 的厚度約為 12 nm。STO 基板的法線方向為 L 方向 [001]，基板表面的 in-plane 方向則為 [100] 與 [010]。右圖為沿著 STO [001] 方向的鏡面 X 光繞射 (specular x-ray diffraction)，右上角插圖為全範圍 L-scan，右圖為 L = 3 的放大圖。STO (003) 左側為 SRO (330) 的繞射峰 ($d_{\text{SRO}(330)} \sim 1.3157 \text{ \AA}$)，兩側的週期性振盪來自於磊晶薄膜厚度的干涉，稱之為 Laue Oscillation。左圖則為 STO (024) 與 SRO (444) 之 RSM 圖。STO (024) 為一非對稱反射 X 光繞射點，其包含垂直分量 (L) 與表面分量 (K)，根據 RSM 結果可以得到薄膜 SRO (444) 晶面間距 $d_{\text{SRO}(444)} \sim 0.8793 \text{ \AA}$ ，配合 $d_{\text{SRO}(440)}$ 的長度，可以計算出 SRO (444) 在 K 軸方向的投影量 ($d_{\text{SRO}(004)} \sim 1.938 \text{ \AA}$) 與 STO (020) 晶面間距 ($d_{\text{STO}(020)} \sim 1.95 \text{ \AA}$) 相匹配。

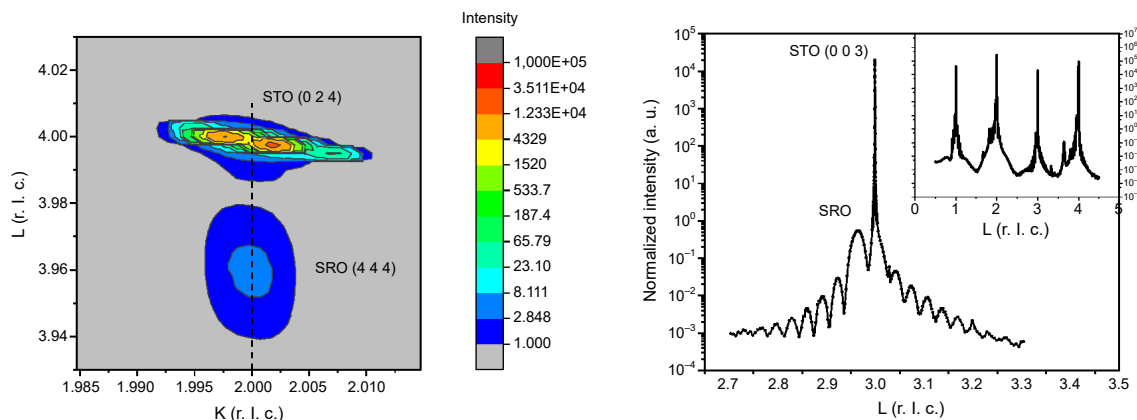


圖 2. SRO 磊晶薄膜成長於 STO 基板之上之 RSM 與 STO (00L) 鏡面 X 光繞射圖。

三、掠角表面 X 光繞射

當磊晶薄膜的厚度越來越薄，到達三層 (tri-layer)、雙層 (bilayer)、甚至單層 (monolayer) 結構的情形下，由於成長堆疊的週期性 (層數) 結構減少，不足以滿足因週期性結構形成之建設性干涉條件，因此傳統的 X 光繞射技術 (out-of-plane XRD) 無法獲得足夠明顯的繞射訊號。然而，磊晶薄膜在平面方向仍然具有長程有序的原子週期性排列，得以滿足建設性干涉的條件，形成顯著的 X 光繞射訊號。

為了獲得超薄磊晶薄膜在基板表面的結構訊息，掠角表面 X 光繞射 (grazing-incidence x-ray diffraction, GIXRD) 在此情況下成為不可或缺的技术。如圖 3 所示，X 光以低於全反射角 (critical angle) 的角度入射薄膜表面，並維持繞射平面於薄膜表面上，GIXRD 能夠解析薄膜系統的平面原子排列、薄膜結晶性、原子面間距、薄膜與基板間應力與晶向的關係。

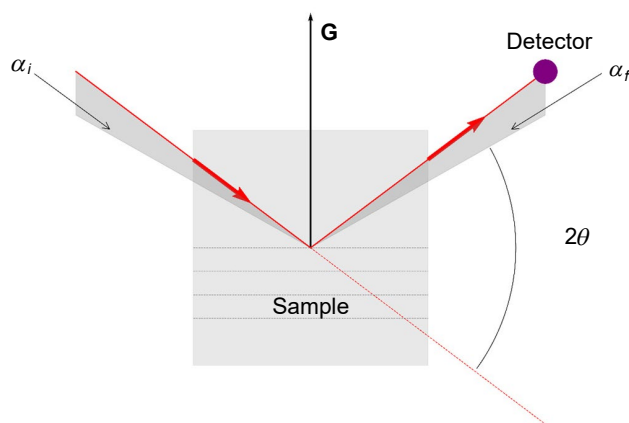


圖 3. 掠角表面 X 光繞射示意圖。

以二維材料 MoS_2 為例，圖 4 左為 Al_2O_3 (001) 基板與單層 (monolayer) 2H-MoS_2 磊晶薄膜照片。紅色方框標示量測之單層 MoS_2 樣品區間，紅色箭頭標示方位角 (azimuthal angle ϕ) = 0 的位置。由於同步輻射硬 X 光光源為水平偏振，故繞射面多半為垂直方向，圖 5 為 GIXRD 的實驗架設與示意圖，X 光在水平方向 (垂直基板表面) 以小角度入射樣品，在特定的 2θ 角度時，薄膜表面倒晶格向量剛好能滿足繞射條件，產生建設性繞射光。圖 4 (中) 為

沿著 Al_2O_3 [100] 方向之 θ - 2θ 掃描結果，由圖可知， MoS_2 [100] 方向是沿著 Al_2O_3 [110] 方向成長，而 MoS_2 [110] 方向則是沿著 Al_2O_3 [100] 成長，而且 MoS_2 皆是沿著特定方向成長的單晶薄膜，沒有扭曲區域 (twisted domain) 的存在。將偵測器固定於特定角度 (2θ) 時，以圖 4 右圖為例，偵測器固定於 MoS_2 (110) 與 (100) 的 2θ 角度，樣品則沿著表面法線方向 (surface normal) 旋轉 (azimuthal scan)，由於 2H- MoS_2 為六方晶系，包含一個垂直層狀結構的六重旋轉對稱軸。因此沿著此旋轉對稱軸轉動時，每轉動 60° 在倒空間中會存在另一個對稱等價的繞射面 (family of planes)，以 $\{h\ k\ l\}$ 表示。在右圖中，黑色線為 MoS_2 {110} 對稱繞射面，而紅色線為 MoS_2 {100} 對稱繞射面。細窄的半高寬 (rocking curve) 表示高度的結晶性， 60° 度的對稱性顯示高度對稱性、單一結構區塊 (single domain)。

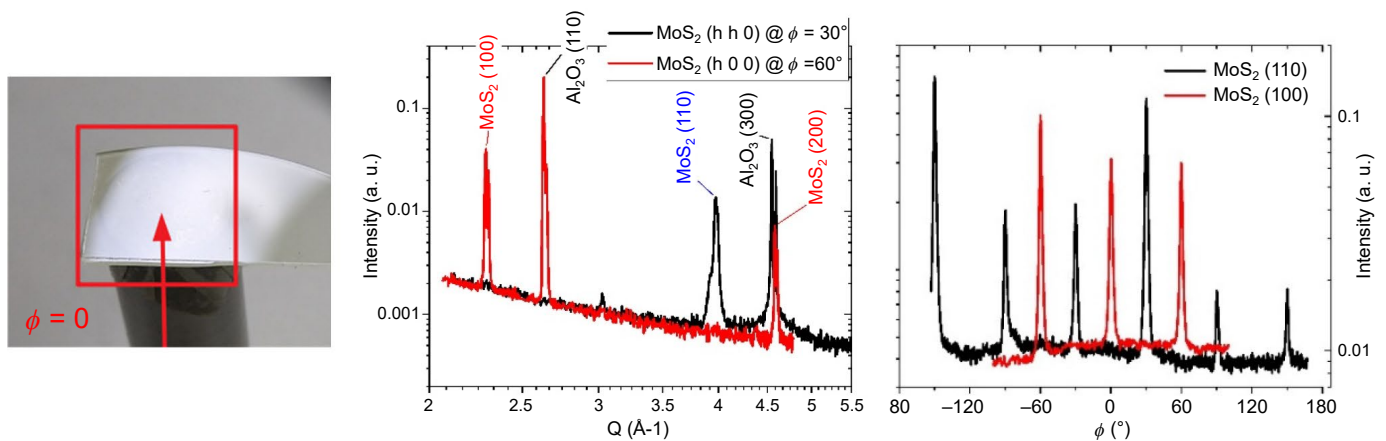


圖 4. 左圖：monolayer $\text{MoS}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ (001) 樣品照片。中圖：GIXRD 沿著 Al_2O_3 [100] 與 Al_2O_3 [110] 進行 θ - 2θ 掃描。右圖：將 θ 與 2θ 固定於 MoS_2 (110) 與 (100) 位置，繞著表面法線方向 Al_2O_3 [001] 進行方位角的掃描 (Azimuthal scan)。

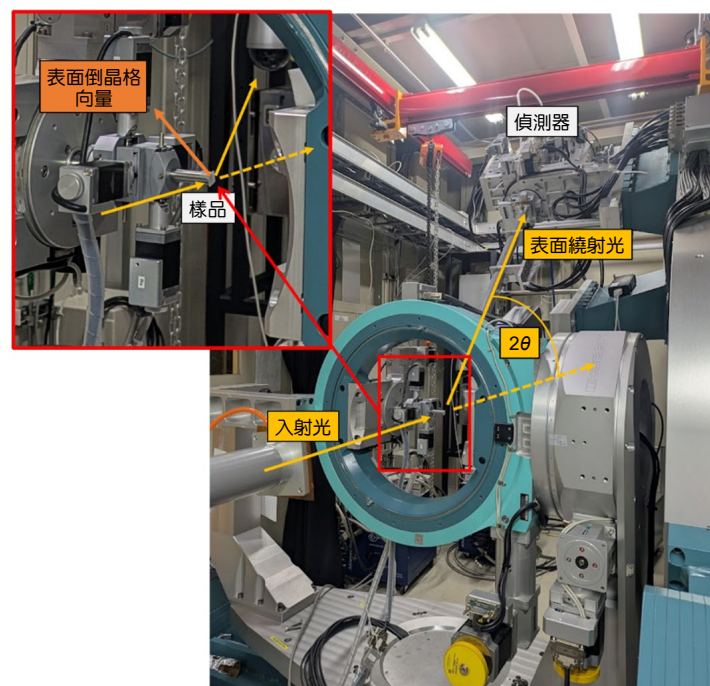


圖 5. TPS 09A 繞射儀與 GIXRD 量測實驗架設。

四、X 光反射率

影響薄膜沉積率涉及到非常多的因素，為確保可以精確控制薄膜的性質，使用的檢測技術包含光學量測技術、X 光量測技術、電子顯微鏡、原子力顯微鏡等，這些技術各自有其優勢以及限制。X 光反射率量測主要使用於量測薄膜厚度、密度與介面粗糙度的實驗技術，可精確量測單層或是多層膜的結構，並且達到奈米級精度。高精度以及非破壞性的優勢經常被使用在薄膜沉積、光刻層和封裝材料的結構分析。

X 光反射率的工作原理是基於 X 光入射材料表面產生反射的特性。當 X 光入射至材料表面，部分 X 光穿透進入材料內部，部分 X 光被反射出材料表面，如圖 6 所示。

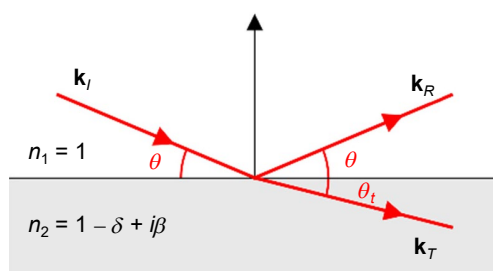


圖 6. 光在兩個不同介質之間介面產生反射與折射示意圖。

這些穿透進入材料內部的 X 光，因為不同介質折射率差異產生折射的現象並在材料內部傳播，同時可視為下一次產生反射的入射光。這些被折射的穿透光碰到另外一個介面，如果是基板上僅有單層薄膜的結構，接下來產生反射與折射即是薄膜與基板之間的介面。如果為多層膜的結構，產生折射與反射的介面則是兩層異質薄膜的介面，而被折射的穿透光會與下一個介面產生折射與反射。在入射角等於出射角條件下，也被稱為鏡面反射 (specular reflection)。隨著入射角度改變，量測其相對應的鏡面反射強度。將鏡像反射的強度對入射強度歸一化 (normalized) 即可獲得反射率 (R)。反射率隨入射角度變化的曲線，即為薄膜的 X 光反射率曲線。

由菲涅耳方程式 (Fresnel equation)，反射率可由下列關係式表示

$$R_F = \left| \frac{n_1 \cos(\theta_i) - n_2 \cos(\theta_t)}{n_1 \cos(\theta_i) + n_2 \cos(\theta_t)} \right|^2$$

n_1, n_2 ：上下兩層介質的折射率。

θ_i, θ_t ：入射角和折射角。

對於多層結構而言，其散射強度如下面關係式表示

$$R(q) = \left| \sum_j r_j e^{iqz_j} \right|^2$$

其中：

r_j ：每層界面的菲涅耳反射係數。

z_j ：界面的位置。

$q = 4\pi/\lambda \sin(\theta)$ ：散射向量，此處 θ 為入射角。

薄膜的 X 光反射率的曲線以材料的臨界角 (critical angle, θ_c) 可以分為兩個區域，當入射角低於臨界角 (critical angle, θ_c) 時，入射的 X 光會產生全反射，而臨界角由材料的電子密度 (electron density, ρ_e) 決定，

$$\theta_c = \sqrt{2\delta} = \sqrt{\frac{r_e \lambda^2 \rho_e}{\pi}}$$

r_e ：古典電子半徑

λ ：X 光波長

當入射角超過臨界角，入射光部分反射，部分穿透樣品進入樣品內部，反射率開始下降。進入樣品的 X 光會因為在介面間發生多次反射，形成干涉條紋。這干涉條紋反映出薄膜構造，包含厚度、密度與粗糙度等性質。此一強度隨角度變化的震盪曲線被稱為 Kiessig 震盪 (kiessig fringe)。這些震盪的頻率與幅度和薄膜的厚度、密度和介面粗糙度相關。震盪週期 (Δq) 與薄膜厚度 (d) 關係如下

$$\Delta q = \frac{2\pi}{d}$$

所以由 X 光反射率的量測，我們可以由臨界角得到材料的電子密度，由干涉條紋的擬合可以得到薄膜厚度、密度與介面粗糙度等參數，藉由這些參數便可以瞭解到薄膜沉積的品質。圖 7 為利用 GenX⁽¹²⁾ XRR 數據擬合軟體所得之結果。XRR 數據為鐵／白金的超晶格結構 (GenX 範例)，為 MgO 基板上成長 [Fe 14.4Å/Pt 13.9Å] 共 20 層的超晶格。紅色實線為 GenX 的 XRR 數據擬合結果。

五、掠角入射 X 光散射技術

掠角入射 X 光散射技術 (grazing incidence X-ray scattering, GIXS) 是一種被廣泛使用在薄膜、奈米結構與表面分析的實驗技術，可分為掠角入射小角度 X 光散射 (grazing incident small angle X-ray scattering, GISAXS) 以及掠角入射廣角 X 光散射 (grazing incident wide angle X-ray scattering, GIWAXS) 技術。廣角 X 光散射定義上非常接近 X 光繞射，此處主要討論小角度 X 光散射⁽¹³⁾。考慮到樣品的厚度以及基板的存在，傳統穿透幾何 (transmission geometry) 的 X 光散射技術對於薄膜樣品的量測相對來說是不適合的。微米或是奈米的薄膜厚度，同時存在不可避免的基板，低掠角入射的樣品幾何是更好的實驗設定。除了避免

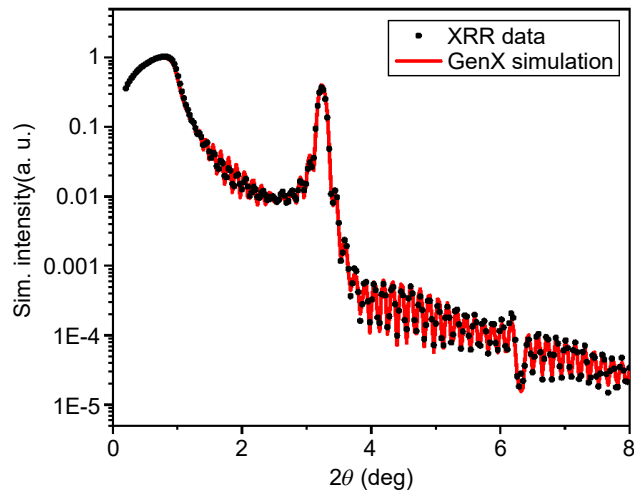


圖 7. XRR 數據與曲線擬合結果。數據資料為反射率擬合軟體 GenX 之範例檔，擬合曲線則為 GenX curve fitting 之結果。

入射光穿透基板的衰減；薄膜厚度過小造成以穿透幾何量測時，X 光照射體積 (illumination volume) 過小影響散射訊號，也可以因為掠角入射增加其在表面的照射面積改善；同時掠角入射也可增強其表面靈敏性。除了量測樣品表面構造形貌，也可以提供薄膜內部奈米級結構訊息。掠角入射 X 光散射的實驗幾何，如下圖所示。

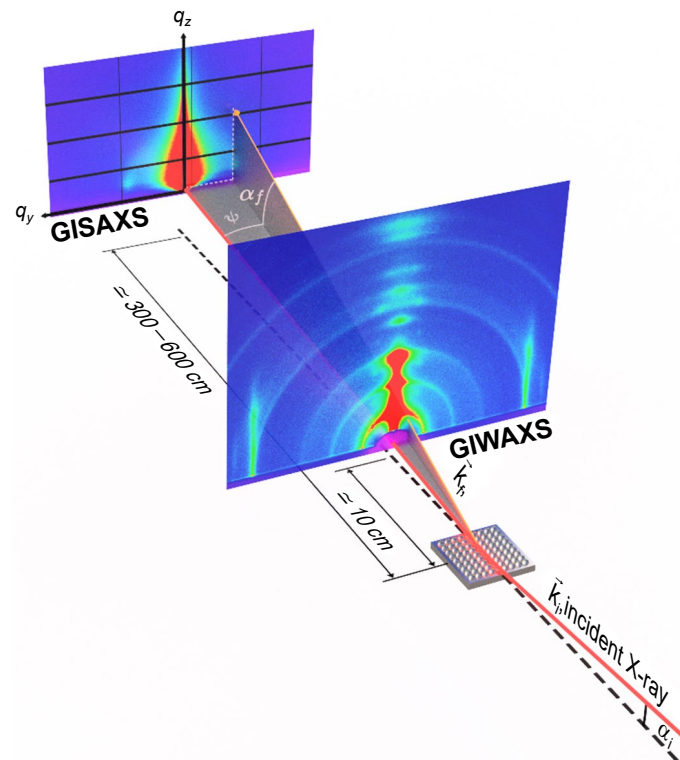


圖 8. 掠角入射 X 光散射示意圖。

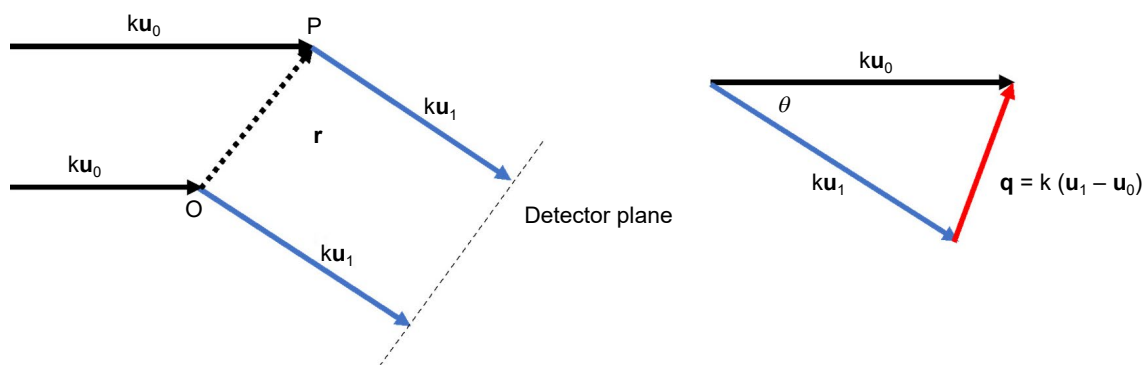


圖 9. 入射光對空間中兩粒子 PO 的散射，PO 之間距離為 r ，相位差 $q \cdot r$ 。

由下圖所示，入射光向量 ku_0 ，散射光為 ku_1 ，空間中兩點 PO 距離為 r ，其相位差 ($\Delta\phi$) 由兩點間產生的光程差而來， $\Delta\phi = k\delta = -kr \cdot (u_0 - u_1) = -r \cdot q$ ，其中 $q = 4\pi/\lambda \sin(\theta/2)$ 。當散射光因為相位差會出現干涉，這些干涉強度的變化即為材料內部週期性結構的特徵， $qr = 2\pi$ 反應干涉條紋週期，也就是材料內部的特徵長度即為 $r = 2\pi/q$ 。

更進一步來說，在空間中的電子分佈為 $\rho(r)$ ，散射振幅為其傅立葉轉換 (Fourier transform, FT)，可寫為

$$A(\vec{q}) = A_e \cdot \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

而散射強度即為

$$I(\vec{q}) = A(\vec{q}) \cdot (\vec{q})^* = I_e \cdot \iint \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d\vec{r} d\vec{r}'$$

當改為掠角入射幾何，如圖所示，散射向量可被改寫成如下

$$\begin{aligned} \vec{q}_x &= \frac{2\pi}{\lambda} [\cos(\psi) \cos(\alpha_f) - \cos(\alpha_i)] \\ \vec{q}_y &= \frac{2\pi}{\lambda} [\sin(\psi) \cos(\alpha_f)] \\ \vec{q}_z &= \frac{2\pi}{\lambda} [\sin(\alpha_i) - \sin(\alpha_f)] \end{aligned}$$

二維散射圖形經 Ewald 修正過後，即可由圖形中選取需要的區域做面內 (in-plane) 與面外 (out-of-plane) 的結構。可以獲得樣品水平或是垂直的結構，分別可應用在各種不同領域。除了利用 X 光以接近樣品表面臨界角入射，對於表面具有非常高的靈敏度，也可以利用改變入射角調整 X 光穿透深度來探測不同深度的結構。

當入射角度小於臨界角時，其探測深度約為 5–10 奈米。入射角在一度與臨界角之間或是大於一度，其穿透深度分別依照下列關係式

$$\begin{aligned} \Lambda &= \frac{\lambda}{4\pi} \sqrt{\frac{2}{(\alpha_i^2 - \alpha_c^2)^2 + 4\beta^2 - (\alpha_i^2 - \alpha_c^2)}} \\ \Lambda &= \frac{\lambda}{4\pi} \sin \alpha_i \end{aligned}$$

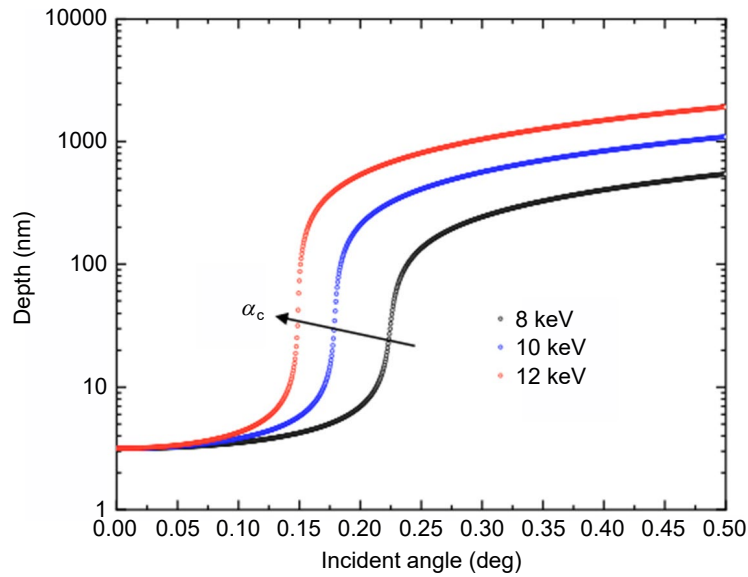


圖 10. 入射光能量與入射角度對穿透深度曲線。

所以由掠角入射 X 光散射的散射圖形，可以由其產生的散射特徵定性的來分析。如圖 11 所示。平行或是垂直基板堆積的結構可以由其水平或是垂直的干涉條紋求得其特徵長度。在部分有序的結構，可以得到域大小，具方向性或均向性，甚至可由散射圖形中截取的一維散射曲線擬合來分析其內含的結構形狀。

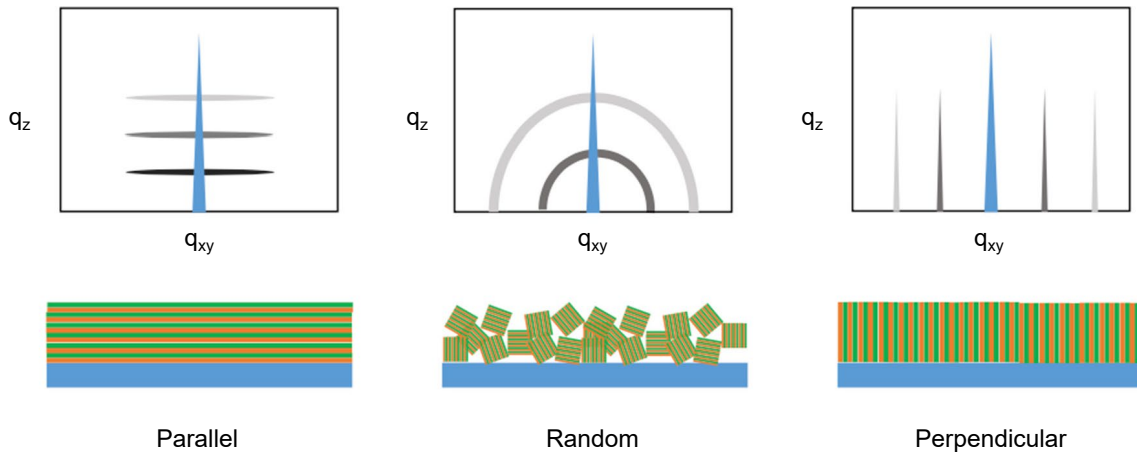


圖 11. 掠角入射 X 光散射特徵，由左至右分別為平行，部分有序，垂直結構。

六、關鍵尺寸—小角度 X 光散射

這項技術最先提出是由美國國家標準技術研究所 (National Institute of Standards and Technology, NIST) 與國際商業機器公司 (International Business Machines Corporation, IBM) 提出，是 X 光散射技術進行非破壞性檢測半導體材料中的關鍵尺寸⁽¹⁴⁾。近年來隨著半導體製程的進步，複雜的三維奈米結構，以 X 光散射技術進行非破壞性檢測，實際上要完全解決

其結構分析是有相當難度。在上面兩個部分中，我們分別提到 X 光反射率量測以及小角度 X 光散射 (critical dimension small angle X-ray scattering, CD-SAXS) 技術。就目前而言，在關鍵尺寸量測也是分別以這兩項技術為工具提供相關技術發展^(15, 16)。

小角度散射主要可以量測數奈米到微米尺度的樣品形狀，由於其散射光之間的干涉可以得到其結構的特徵長度， $r = 2\pi/q$ 。以相對簡單的結構在驗證實驗技術時，常用的結構如光柵，便可以由其干涉產生的週期性圖形來求得其參數。另外，由散射光的圖譜經由演算法也可求得在實空間中的結構，散射強度可寫成 $I(q) = |f(q)|^2 = n_p S(q) F(q)$ ，而 $S(q)$ 跟 $F(q)$ 分別為結構因子與形狀因子。其散射強度與空間中電子密度分度存在傅立葉轉換的關係。可以建立分析模型與模擬技術來分析複雜的結構。除了小角度散射外，反射率量測同時被運用在關鍵尺寸的應用，構成薄膜最重要的三個參數，厚度、密度以及粗糙度。由反射率的曲線可以擬合出實空間中，垂直膜面散射密度曲線。在 X 光散射中，散射來自於光子與電子的彈性散射，也就是等於可以獲得薄膜結構垂直的電子密度分布。由此便可以驗證在薄膜沉積時，厚度以及性質。就現狀而言，實驗室的光源對於此類應用仍然亮度不足，還必須依賴同步輻射光源才能達到最佳效能。

七、同調 X 光散射成像術

在 X 光散射技術中，若光源具有高同調性，便可以更進一步進行同調 X 光散射成像術，可以由散射光的圖像，經過演算法直接復原實空間中樣品的影像。目前主要利用第三代同步輻射設施，如台灣光子源 (Taiwan Photon Source, TPS) 或日本 SPring-8 (Super Photon ring-8 GeV)，或是近年成功運轉的第四代同步輻射光源，如瑞典的 MAX IV (MAX IV Laboratory)⁽¹⁷⁾ 或法國的 ESRF-EBS (European Synchrotron Radiation Facility-Extremely Brilliant Source)⁽¹⁸⁾，獲得高同調性 X 光光源 (coherent X-ray source)，進而實現 X 光同調散射影像技術 (coherent diffraction imaging, CDI)。

CDI 在原理上與既有的 X 光散射技術有相同的物理基礎，其實驗架構如圖 12(a) 所示。當同調 X 光照射於樣品後，散射光傳播至遠方並由二維偵檢器 (2D detector) 記錄其強度分佈，若光源具有良好的時間與空間同調性，則光波間的同調干涉效應 (coherent interference) 會形成獨特的同調散射圖譜 (coherent scattering pattern)，經由相位回復演算法 (phase retrieval algorithm)，可以重建出樣品的影像。例如，圖 12(b) 顯示了使用掃描式 X 光同調散射影像技術 (scanning CDI, ptychography) 所獲得的標準樣品影像，而圖 12(c) 則是作為對比，相同樣品的掃描式電子顯微鏡影像。

傳統的 X 光顯微技術儘管具備高穿透性等優勢，通常仍需要 X 光透鏡 (X-ray optics) 進行成像或聚焦，然而，由於 X 光透鏡的製作極為困難，其影像解析度往往受限於 X 光透鏡的品質，難以進一步提升。相對而言，以 ptychography 為例，X 光同調散射影像技術具有無透鏡 X 光顯微技術 (lensless X-ray microscopy) 的特點，其影像解析度取決於同調散射圖譜所乘載的資訊，不受 X 光光學元件的品質限制。例如，圖 12(b) 所示的影像解析度已達到傳統 X 光顯微技術不易達到的 7 奈米。因此，隨著具有高同調性的第四代同步輻射光源逐漸普及，ptychography 也逐漸成為當前最具前瞻性的 X 光影像技術之一。

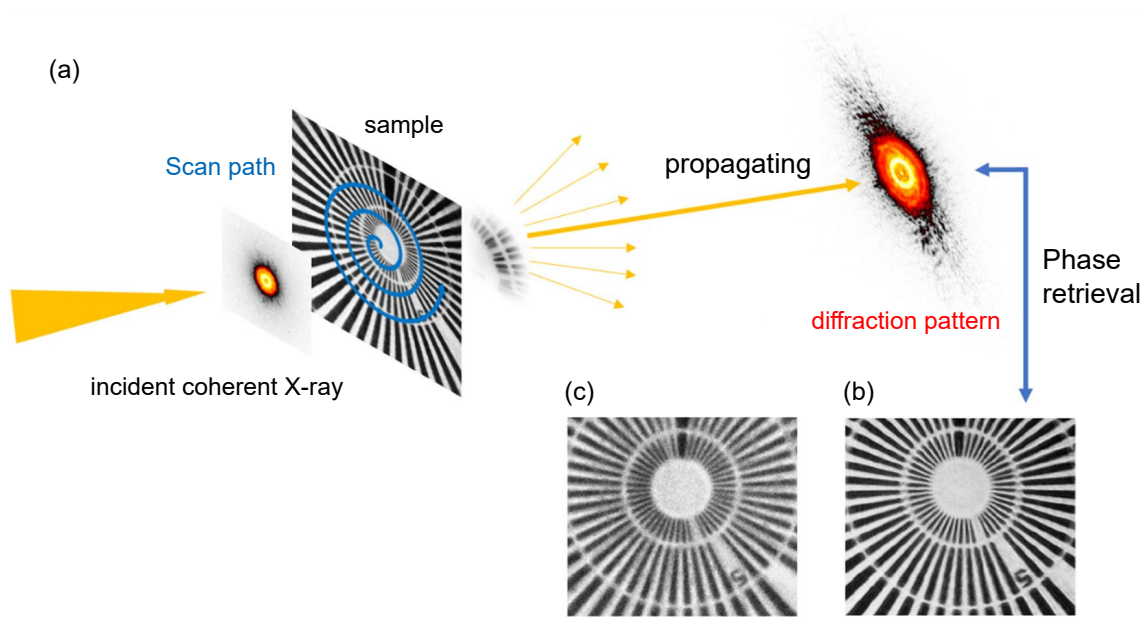


圖 12. (a) 為 CDI 實驗的基礎實驗架構，(b) 為遞迴計算後得到的影像與 (c) SEM 得到的影像。

八、結論

當新世代的半導體製程達到兩奈米以下的工藝，傳統的量測技術在結構深寬比 (Aspect Ratio) 不斷地挑戰下，以及三維結構佔據了主流，如何能夠對於結構深處的細節提供更多的資訊，如側壁角，層間厚度，這將會是接下來量測技術的挑戰。相對於可見光或是電子，X 光具有的獨特穿透性，以及可以達到奈米級的精度，將會是這些競爭有利的基礎。但以目前狀況在儀器方面必須提高實驗室光源亮度，並進行多技術整合，提供更完善的解決方案。在數據處理與解讀方面，對於散射數據的分析仍有一定進入門檻，但可藉由人工智能機器學習與深度學習技術，逐漸改善數據擬合演算分析與模擬反演的模型建立，提升量測效率。當可以解決這些問題後，開發臨場量測技術，即時監控，將會被實現在製程量測中。

參考文獻

1. T. Lynn, P. T. Endo, A. Ribeiro, G. Barbosa and P. Rosati, "The Internet of Things: Definitions, Key Concepts, and Reference Architectures", in *The Cloud-to-Thing Continuum*, Palgrave Macmillan, Cham, pp. 1-22 (2020).
2. L.-H. Lee, T. Braud, P. Zhou, L. Wang, D. Xu, Z. Lin, A. Kumar, C. Bermejo and P. Hui, ArXiv, (2021).
3. G. E. Moore, *Proceedings of the IEEE*, **86** (1), 82 (1998).
4. W. H. Bragg and W. L. Bragg, *Proceedings of the Royal Society A*, **88**, 428 (1913).
5. Bernard Dennis Cullity, *Elements of X-ray Diffraction*, Addison-Wesley, (2001).
6. Myeongkyu Lee, *X-Ray diffraction for materials research: from fundamentals to applications*, CRC Press: New York, (2017).
7. Miho Yasaka, *The Rigaku Journal*, **26** (2), 1 (2010).
8. J. Als-Nielsen and D. McMorrow, *Elements of Modern X-ray Physics*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, (2011).
9. C. Wang, C. Zuo, Q. Chen and L. Ding, "GIWAXS: A powerful tool for perovskite photovoltaics," *Journal of Semiconductors*, **42** (6), 060201(2021).
10. A. Mahmood and J.-L. Wang, *Solar RRL*, **4** (10), 2000337 (2020).
11. S. Pereira, M. R. Correia, E. Pereira, K. P. O'Donnell, E. Alves, A. D. Sequeira, N. Franco, I. M. Watson and C. J. Deatcher, *Applied Physics Letters*, **80**, (2002).

12. A. Glavic and M. Björck, *Journal of Applied Crystallography*, **55**, 1063 (2022).
13. A. Guinier, X-ray diffraction: in crystals, imperfect crystals, and amorphous bodies, Courier Corporation, (2013).
14. W.-l. Wu, R. J. Kline, R. L. Jones, H.-J. Lee, E. K. Lin, D. F. Sunday, C. Wang, T. Hu and C. L. Soles, *Journal of Micro/Nanopatterning, Materials, and Metrology*, **22** (3), 031206 (2023).
15. K. Sasaki, T. Hashimoto, Y. Kuo, H. Tsukada and H. Tanizaki, *Metrology, Inspection, and Process Control for Semiconductor Manufacturing XXXV*, **11611**, (2021).
16. R. J. Kline, D. F. Sunday, D. Windover and B. D. Bunday, *J. Micro/Nanolith. MEMS MOEMS*, **16** (1), 014001 (2017).
17. Z. Matěj, R. Mokso, K. Larsson, V. Hardion and D. Spruce, "The MAX IV imaging concept," *Advanced Structural and Chemical Imaging*, **2**, 1 (2016).
18. P. Bruno and et al., *The European Physical Journal Plus*, **139** (10), 928 (2024).

作者簡介

林智敏先生為國立清華大學工程與系統科學博士，現為國家同步輻射研究中心 X 光散射小組助理研究員。

Jhih-Min Lin received his Ph.D. in Engineering and System Science from National Tsing Hua University. He is currently an Assistant Research Fellow in the X-ray Scattering Group at National Synchrotron Radiation Research Center.

翁世璋先生為國立清華大學物理研究所博士，現為國家同步輻射研究中心材料科學小組助研究員。

Shih-Chang Weng received his Ph.D. in Physics from National Tsing Hua University. He is currently an Assistant Research Fellow in the Materials Science Group at National Synchrotron Radiation Research Center.