

# 激光直接写入过程的计算机仿真研究

周光亚

(上海交通大学信息存储研究中心, 上海 200030)

陈益新

(上海交通大学应用物理系, 上海 200030)

王宗光

(上海交通大学应用化学系, 上海 200030)

杨国光

(浙江大学现代光学仪器国家重点实验室, 杭州 310027)

**摘 要** 基于光刻胶正胶曝光显影过程的理论模型, 用梯度折射率介质光线追迹的方法进行了由于局部溶解速率不同而造成的显影过程中胶面面形随时间变化过程的计算。对任意给定的曝光量分布及显影时间, 可以精确地确定显影后的面形, 为激光直写研究提供了一种有效的工具。同时, 通过对显影速率作阈值近似后, 导出了光刻胶曝光显影后面形与表面所需曝光量分布之间的关系, 为激光直接写入提供了理论指导。

**关键词** 衍射光学, 激光直接写入, 计算机仿真。

## 1 引 言

衍射光学器件目前已广泛地应用于光束整形<sup>[1]</sup>、折衍射混合系统<sup>[2]</sup>、灵巧扫描器<sup>[3]</sup>、光互连<sup>[4]</sup>等领域。与常规光学器件相比, 衍射光学器件具有体积小、重量轻、易于集成和复制、成本低等优点。激光直接写入<sup>[5]</sup>是近年来发展起来的一种新的衍射光学器件制作工艺, 它可以在光刻胶的表面直接刻出连续的三维浮雕结构, 与光刻、蚀刻<sup>[6]</sup>及薄膜沉积<sup>[7]</sup>制作技术相比, 工艺简单, 且避免了多层掩模之间的套刻对准工艺, 因而可以大大提高衍射光学器件的制作精度。激光直接写入的本质是利用光刻胶的曝光显影特性, 将曝光量的空间分布转化为胶表面的三维轮廓。因此, 如何按所需的面形确定胶表面的曝光量分布是激光直写技术中的关键问题。本文通过对显影速率作阈值近似后, 导出了光刻胶曝光显影后的面形与胶表面所需曝光量分布之间的关系, 为激光直接写入提供了理论指导。并用梯度折射率介质光线追迹的方法对胶的曝光显影过程建立了完整的动态仿真。仿真研究结果表明, 这种阈值近似具有较好的精度。

## 2 光刻胶的曝光与显影

光刻胶正胶如 Shipley 公司的 AZ4620 等, 一般由三种成分组成, 即光敏混合物 PAC、树

脂 R 及有机溶剂 S。光敏混合物的作用是抑制光刻胶树脂在显影液中的溶解，在没有光敏混合物存在的情况下，光刻胶较易溶于显影液，其表面溶解速率为 15 nm/s，在有光敏混合物存在的情况下，溶解速率下降为 0.1 nm/s~ 0.2 nm/s，因此光敏混合物又称为抑制剂。抑制剂在吸收波长为 300 nm~ 450 nm 的紫外辐射能量后分解，其分解产物 P 可以大大加速光刻胶在显影液中的溶解，使其表面溶解速率高达 100 nm/s~ 200 nm/s，激光直接写入正是利用了光刻胶的这一特性，即控制胶层各处的曝光量，改变其抑制剂 PAC 及生成物 P 的浓度，这样也就达到了在显影时控制各处的显影速率的目的，显影后即可得到所需的表面微结构。

假设光刻胶涂层的折射率与基底材料匹配，即光线在光刻胶与基底的界面上没有反射，并且曝光光束垂直于基片表面，则曝光过程可以用以下偏微分方程组来描述<sup>[8]</sup>：

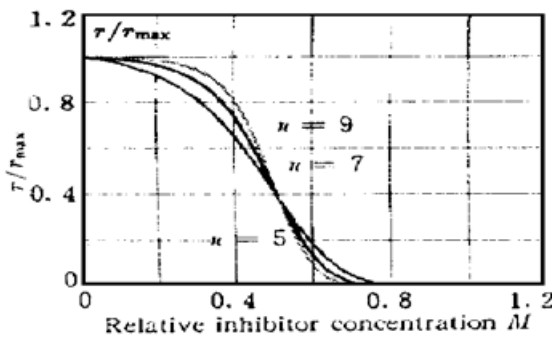
$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial I(z, t)}{\partial z} &= - I(z, t)[AM(z, t) + B] \\ \frac{\partial M(z, t)}{\partial t} &= - I(z, t)M(z, t)C \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

式中  $I(z, t)$ 、 $M(z, t)$  分别为  $t$  时刻距离光刻胶表面深度为  $z$  处的光强与抑制剂规一化浓度。 $A$ 、 $B$ 、 $C$  为光刻胶的曝光常数。在给定初始条件  $M(z, 0) = 1$  及边界条件  $I(0, t) = I_0$  的情况下，对方程组(1)求解可以得到光刻胶曝光后内部各点的抑制剂浓度分布。

光刻胶的显影可以看成是一个表面溶解的过程，溶解速率  $r$  与抑制剂浓度  $M$  的关系为<sup>[9]</sup>：

$$r = r_{\max} \frac{(a + 1)(1 - M)^n}{a + (1 - M)^n} + r_{\min} \quad (2)$$

式中  $a$ 、 $n$ 、 $r_{\max}$ 、 $r_{\min}$  为显影常数， $r_{\max}$  为最大溶解速率，即光刻胶完全曝光后在显影液中的溶解速率。 $r_{\min}$  为最小溶解速率，对应于光刻胶未曝光的情形，一般可近似为 0。 $r/r_{\max}$  与  $M$  关系的典型曲线如图 1 所示。由图可知此曲线有一个拐点，该点对应的  $M$  称为抑制剂的阈值浓度  $M_{TH}$ ，可由下式来确定：



$$M_{TH} = 1 - \left[ \frac{(n - 1)a}{(n + 1)} \right]^{\frac{1}{n}} \quad (3)$$

当  $M > M_{TH}$  时对应于较小的溶解速率，反之则对应于较大的溶解速率。 $n$  的值越大，曲线的阈值效应就越明显，因此  $n$  有时又称为选择性系数。

本文采用 Dill 提出的测试方法<sup>[8]</sup>对 Shipley 公司的 AZ4620 正胶的曝光与显影常数进行了测量，得到了以下结果：

曝光常数:  $A = 0.23 \mu\text{m}^{-1}$        $B = 0.0228 \mu\text{m}^{-1}$        $C = 0.225 \text{mm}^2/\text{mJ}$   
 显影常数:  $r_{\max} = 69 \text{nm/s}$        $M_{TH} = 0.79$        $n = 5$

测试条件为前烘 90℃、6 min，显影液为 AZ400K (1·4 稀释)，显影温度为 23℃。

### 3 光刻胶曝光显影过程的计算机仿真

曝光过程的数值计算比较简单，考虑二维情况，边界条件为：光强在光刻胶表面沿 X 轴的分布  $I(X, 0, t) = I_0(X)$ ，初始条件为：曝光开始时胶层内部各点的抑制剂浓度均为 1，即  $M(X, Z, 0) = 1$ 。胶层的厚度为  $d$ ，曝光时间为  $T_{\text{exp}}$ 。将曝光时间分成  $n$  等分，即  $\Delta t = T_{\text{exp}}/n$ ，

同时也将胶层分成极薄的  $m$  等分, 即  $\Delta Z = d/m$ , 则其模拟过程为:

$$\begin{aligned} j &= 0 \cdots n - 1, & i &= 0 \cdots m - 1 \\ \Delta I(X, i\Delta Z, j\Delta t) &= -I(X, i\Delta Z, j\Delta t)[AM(X, i\Delta Z, j\Delta t) + B]\Delta Z \\ I[X, (i+1)\Delta Z, j\Delta t] &= I(X, i\Delta Z, j\Delta t) + \Delta I(X, i\Delta Z, j\Delta t) \\ \Delta M(X, i\Delta Z, j\Delta t) &= -I(X, i\Delta Z, j\Delta t)M(X, i\Delta Z, j\Delta t)C\Delta t \\ M[X, i\Delta Z, (j+1)\Delta t] &= M(X, i\Delta Z, j\Delta t) + \Delta M(X, i\Delta Z, j\Delta t) \end{aligned}$$

等分数越多, 模拟结果就越精确。

显影过程一般可以用三种技术<sup>[10]</sup>来模拟, 即网格模型(Cell-Removal)、光线追轨模型(Ray-Tracing)及橡皮筋模型(String-Models)。相比较而言, 光线追轨模型方法所耗的计算量较少, 所以本文选用光线追轨模型作深入的研究。假定显影时, 溶解只发生在界面, 且最大溶解发生在沿界面的法线方向, 定义为单位溶解矢量  $\tau$ , 考虑  $\tau$  倾斜地入射到一个溶解速率分别为  $r$  和  $r + dr$  的界面上, 如图 2 所示。易得:

$$\frac{r + dr}{r} = \frac{\sin(\theta + d\theta)}{\sin(\theta)} \quad (4)$$

若定义显影溶解的等效折射率:

$$n = \frac{r_{\max}}{r(x, z)} \quad (5)$$

则界面上的溶解过程服从斯涅耳(Snell)折射定律。曝光后的光刻胶内部各点的  $r(x, z)$  各不相同, 因此显影问题实际上是梯度折射率的光线追迹问题, 在某一时刻溶解矢量终点所构成的面即为显影所形成的三维轮廓, 这在相应的梯度折射率光线追迹问题中对应为等光程面。

用龙格-库塔(Runge-Kutta)算法, 对光线方程  $\frac{d}{ds}(n \frac{dR}{ds}) = \nabla n$  求解, 可以得到梯度折射率介质中的光线追迹公式<sup>[11]</sup>:

$$R_{i+1} = R_i + \Delta t[T_i + \frac{1}{6}(A + 2B)], \quad T_{i+1} = T_i + \frac{1}{6}(A + 4B + C) \quad (6)$$

其中:  $A = \Delta t D(R_i)$ ,  $B = \Delta t D(R_i + \frac{\Delta t}{2} T_i + \frac{1}{8} \Delta t A)$ ,  $C = \Delta t D(R_i + \Delta t T_i + \frac{1}{2} \Delta t B)$ 。

$R_i = [x_i, z_i]^T$  和  $T_i = [n \cos \alpha_i, n \cos \gamma_i]^T$  分别为光线上第  $i$  个追迹点的位置矢量与方向矢量,  $\alpha_i, \gamma_i$  为光线在该点处与  $x, z$  轴的夹角,  $\Delta t$  为相邻两个追迹点之间的距离,  $D(R_i)$  为:

$$D(R_i) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial n^2}{\partial x}, \frac{\partial n^2}{\partial z} \right] \Big|_{x=x_i, z=z_i} \quad (7)$$

光线追迹的初始条件为: 光线均从光刻胶的上表面出发, 方向与上表面垂直。追迹光线所得的等光程面即为显影后胶面的面形, 等效光程  $L_{OPL}$  与显影时间  $T_{dev}$  之间的关系为:

$$L_{OPL} = r_{\max} T_{dev} \quad (8)$$

该模拟方法可以很容易地推广到三维情形。

## 4 曝光量分布的确定

用上面给出的仿真算法, 对给定的曝光量分布可以精确地求得显影后的面形, 但由于整个仿真过程十分复杂, 其逆过程, 即由显影后的面形来确定胶面所需的曝光量分布仍然非常

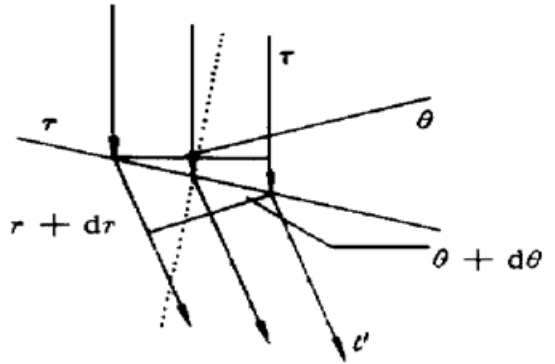


Fig. 2 Scheme of ray-tracing algorithm

困难。因此, 必须对显影过程作一些近似:

$$\left. \begin{aligned} r &= r_{\max}, & (M \leq M_{\text{TH}}) \\ r &= r_{\min} = 0, & (M > M_{\text{TH}}) \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

作上述阈值近似后, 可不必考虑显影过程中复杂的面形变化, 因为, 当选择较长的显影时间时, 显影面形将停止在胶内部满足条件  $M = M_{\text{TH}}$  的各点所形成的面上而不再发生变化, 这个面形完全可以由胶表面的曝光量分布来确定。

求解一阶偏微分方程式(1)中的第二式可以得到:

$$M(z, t) = M(z, 0) \exp \left[ - C \int_0^t I(z, \tau) d\tau \right] \quad (10)$$

其中  $\int_0^t I(z, \tau) d\tau$  的意义是  $t$  时刻距离胶表面深度  $z$  处的曝光量, 记为  $E(z, t)$ , 并且抑制剂的初始浓度  $M(z, 0) = 1$ , 可得:

$$M(z, t) = \exp [- CE(z, t)], \quad I(z, t) = \frac{dE(z, t)}{dt} \quad (11)$$

(1) 式中的第一式两边对时间积分, 可得:

$$\int_0^t \frac{\partial I(z, \tau)}{\partial z} d\tau = - \int_0^t I(z, \tau) [AM(z, \tau) + B] d\tau \quad (12)$$

将(11)式代入(12)式经处理后可得:

$$\frac{\partial E(z, t)}{\partial z} = \frac{A}{C} \{ \exp [- CE(z, t)] - 1 \} - BE(z, t) \quad (13)$$

这个公式表示了  $t$  时刻的曝光量  $E$  沿深度方向  $z$  的传播规律, 它实际上可转化为常微分方程, 此方程较易解出, 将  $E$  及  $z$  移至等式两边并积分可得:

$$z = - \int_{E_{\text{TH}}}^E \frac{1}{\frac{A}{C} [\exp(-CE) - 1] - BE} dE \quad (14)$$

(14) 式即表示了曝光量由表面的  $E$  递减到  $E_{\text{TH}}$  时的深度, 其中  $E_{\text{TH}} = - \ln(M_{\text{TH}})/C$ , 由前面的分析可知这个关系也就是曝光量与显影后深度的关系。由此关系即可根据显影后的面形来确定曝光量分布。

## 5 仿真结果

以菲涅耳透镜为例, 通过对曝光显影过程的计算机仿真来考察一下阈值近似的精度, 所选择的菲涅耳透镜的参数为: 焦距  $f = 400 \mu\text{m}$ , 孔径  $D = 84 \mu\text{m}$ , 中心波长  $\lambda_0 = 0.6328 \mu\text{m}$ 。由衍射光学设计可知, 此菲涅耳透镜理想的表面轮廓(衍射效率为 100%) 如图 3 所示。由(14)式求得的表面所需的曝光量分布如图 4 所示。

若 AZ4620 胶层以图 4 所示的曝光量分布曝光显影, 其仿真结果如图 5、图 6 所示。

由仿真结果可以得到以下结论: 1) 显影过程经过一定时间以后面形变化已相对较小, 称这个时间为定形时间, 对阈值化近似, 定形时间约为 2.5 min, 也就是说, 若以阈值化近似设计曝光量分布, 则显影大约需要 2.5 min。2) 由于实际上当曝光量  $E \leq E_{\text{TH}}$  时, 显影速率并

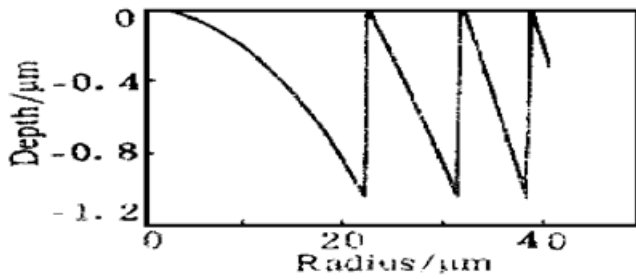


Fig. 3 Surface profile of the phase Fresnel lens,  $f = 400 \mu\text{m}$ ,  $D = 84 \mu\text{m}$ ,  $\lambda_0 = 0.6328 \mu\text{m}$

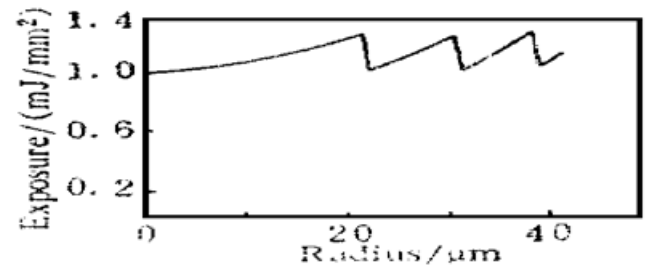


Fig. 4 The distribution of the exposure energy based on the threshold approximation of the development rate

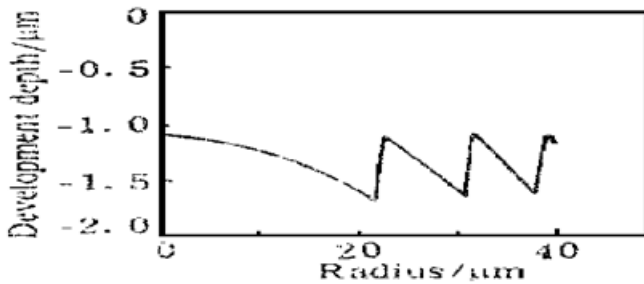


Fig. 5 The surface contour of resist film after 1 minute development in 1.4 AZ400K developer: water at 23°C

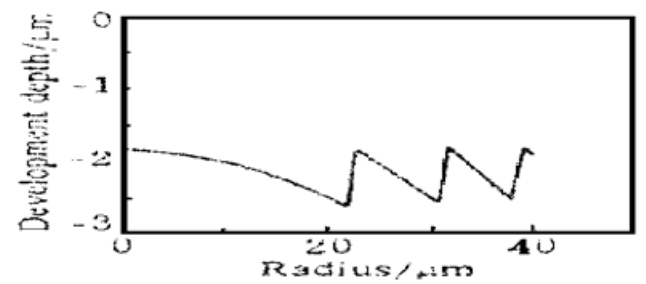


Fig. 6 The surface contour of resist film after 2.5 minutes development in 1.4 AZ400K developer: water at 23°C

非为零, 因此显影后整个面形都相应地向下移动, 这一点在选择胶层厚度时必须考虑, 即所选胶层的厚度必须大于直写面形的最大深度与近似化引起的面形整体向下移动量之和。3) 对阈值化近似, 显影后的面形与理想面形的均方误差(这里是指经过定形时间以后)为:

$$\bar{\epsilon}^2 = \left[ \int_0^R h(r) - [h'(r) - h'(0)]^2 dr / \int_0^R dr \right]^{1/2}$$

其中  $h(r)$  为在半径  $r$  处的理想深度,  $h'(r)$  为显影后的深度, 上式中已考虑了显影后面形的整体向下移动。计算可以得到, 此均方误差约为 0.18, 具有较高的精度。

**结 论** 本文基于光刻胶正胶曝光显影过程的理论模型, 用光线追迹的方法实现了对光刻胶曝光显影过程的计算机仿真, 为激光直接写入的研究提供了一种有效的工具。同时, 通过对显影速率作阈值近似后, 导出了光刻胶表面所需曝光量分布与曝光显影后的面形之间的关系, 并以菲涅耳透镜为例进行了仿真研究, 结果表明阈值近似具有足够的精度, 为激光直接写入技术提供了一种理论指导。

### 参 考 文 献

- [1] J. Cordinley. Application of a binary diffractive optics for beam shaping in semiconductor processing by lasers. *Appl. Opt.*, 1993, **32**(14): 2538~2542
- [2] C. Londoño, P. P. Clark. Modeling diffractive efficiency effects when designing hybrid diffractive lens systems. *Appl. Opt.*, 1992, **31**(13): 2248~2252
- [3] W. Goltsov, M. Holz. Binary micro optics: an application to beam steering. *Proc. SPIE*, 1989, **1052**: 131~141
- [4] V. V. Wong, G. J. Swanson. Design and fabrication of a Gaussian fan-out optical interconnect. *Appl. Opt.*, 1993, **32**(14): 2502~2511

- [5] M. T. Gale, M. Rossi, J. Pedersen *et al.*. Fabrication of continuous-relief micro-optical elements by direct laser writing photoresists. *Opt. Eng.*, 1994, **33**(11) : 3556~ 3566
- [6] T. J. McHugh, D. A. Zweig. Recent advances in binary optics. *Proc. SPIE*, 1989, **1052** : 85~ 90
- [7] J. Jahns, S. J. Walker. Two-dimensional array of diffractive microlenses fabricated by thin film deposition. *Appl. Opt.*, 1990, **29**(7) : 931~ 936
- [8] F. H. Dill, W. P. Hornberger, P. S. Hauge *et al.*. Characterization of positive photoresist. *IEEE Trans. on Electron Devices*, 1975, **ED-22**(7) : 445~ 452
- [9] C. A. Mack. Developmant of positive photoresist. *J. Electrochem. Soc. : Solid-State Science and Technology*, 1987, **134**(1) : 148~ 152
- [10] R. E. Jewett, P. I. Hagouel, A. R. Neureuther *et al.*. Line-profile resist development simulation techniques. *Polymer Engineering and Science*, 1977, **17**(6) : 381~ 384
- [11] 易明. 现代几何光学, 南京: 南京大学出版社, 1986. 219~ 223

## Computer Simulation Studies of Laser Direct Writing Process

Zhou Guangya

(Information Storage Research Center, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030)

Chen Yixin

(Department of Applied Physics, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030)

Wang Zongguang

(Department of Applied Chemistry, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030)

Yang Guoguang

(State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou 310027)

(Received 17 January 1998; revised 11 June 1998)

**Abstract** Based on the theoretical process model for positive photoresist, ray-tracing algorithm is used to calculate the time evolution of surface profiles produced by a locally dependent surface etching phenomenon. Depending on the simulation programs established, the final developed surface profile can be computed from any given distribution of exposure energy and development time. This provides a convenient way for investigating laser direct writing process. By introducing a threshold approximation in development process, the relationship between the initial distribution of exposure energy on the upper surface of the resist film and the surface profile after development is deduced, which provides an effective theoretical approach for laser direct writing technology.

**Key words** diffractive optics, laser direct writing, computer simulation.