

文章编号: 0253-2239(2004)08-1146-5

全息光栅实时显影监测曲线的理论模拟*

赵劲松¹ 李立峰¹ 吴振华²

(¹ 清华大学精密仪器系, 北京 100084
² 北京光学仪器厂光栅研究室, 北京 101149)

摘要: 在特定的工艺条件下,光刻胶的非线性效应非常显著;合理地利用非线性效应,能够制作出近似矩形的全息光栅掩模。为了分析清楚非线性效应对光栅沟槽成形的作用机理,有必要建立一个显影理论模型。模拟得到的光栅轮廓和实验样片的扫描电子显微镜照片结果很吻合。根据这个模型,进而使用光栅严格理论,得到其主要特征与实时监测实验曲线一致的理论模拟监测曲线。理论分析和实验证实,该模型基本表征了工艺条件对光栅沟槽形状的影响,并揭示了光刻胶呈现显著非线性效应时,必然对应着明暗条纹中心位置之间的显影刻蚀速率相差很大。这个模型为全息光栅的工艺研究提供了一个有效的理论分析工具。

关键词: 物理光学; 全息光栅; 显影实时监测; 光刻胶; 显影模型; 光栅掩模

中图分类号: O436.1 文献标识码: A

Modeling of In-Situ Monitoring Curves During Development of Holographic Gratings

Zhao Jinsong¹ Li Lifeng¹ Wu Zhenhua²

(¹ Department of Precision Instruments, Tsinghua University, Beijing 100084
² Department of Grating Research, Beijing Optical Instruments Factory, Beijing 101149)

(Received 5 June 2003; revised 1 September 2003)

Abstract: Under specific processing conditions, the nonlinearity of photoresist is strong, which can be advantageously used to make rectangular holographic grating masks. In order to clarify the relationship between the fabrication conditions and the groove profile formation, a model for simulating the development of photoresist grating is presented. The theoretically simulated groove profiles are in good agreement with profiles obtained from SEM photographs of fabricated gratings. Based on this model, combined with using a rigorous code for modeling grating diffraction, the efficiency of the reflected -1st order of diffraction is simulated as a function of development time. The main features of the simulated curve are found to coincide with those of the experimental in-situ monitoring curve. It is verified that the remarkable nonlinear effect of photoresist must be accompanied with a vast difference of etch rate between the center of a bright fringe and the center of its neighboring dark fringe. The model has been demonstrated capable of characterizing the influence of fabrication conditions on holographic grating groove formation.

Key words: physical optics; holographic grating; in-situ monitoring of development; photoresist; development model; grating mask

1 引 言

在全息光栅的制作中,显影是光栅沟槽成形的

最后一道工艺,其重要性是不言而喻的。为了制作预期槽形的全息光栅,提高生产效率,必须对显影工艺步骤进行实时的监测;为了使实时的显影监测和控制具有目标性,并对实验结果做出合理的解释,建立相应的显影理论模型,在制作前提供预测和在制作后进行分析是非常必要的。因此,许多文献^[1~4]

* 国家 863 计划资助课题。

E-mail: zhaojs00@mails.tsinghua.edu.cn

收稿日期:2003-06-05;收到修改稿日期:2003-09-01

都提出了各自的显影理论模型。

虽然人们早已熟知光刻胶具有非线性效应,但此前的研究者为了获得立体感很强的全息图或者制作正弦全息光栅,都刻意把工艺条件控制在线性区,所以在理论模型中一般都对曝光和显影过程进行了线性化处理^[2~4]。在我们的制作工艺中,光刻胶的非线性效应非常显著,而且发现可以利用非线性效应制作出梯形或矩形的全息光栅掩模,这对使用离子束刻蚀方法将光栅图形转移到基底材料上去是非常有利的,而且这种梯形(或矩形)光栅还可以直接应用于许多实际的技术领域^[5,6]。所以,我们的工艺路线是充分利用这种非线性效应,理论模型的关键就是要能很好地模拟这种非线性效应。由于制作工艺的目的、方法和结果不同,所以我们的显影理论模型与已报道的模型有根本的区别。

本文介绍一个显影模型,阐述如何把这个显影模型和我们先前的曝光模型^[7]、还有光栅衍射效率理论计算三者有效地结合起来,从而在理论上模拟出全息光栅的实时显影监测曲线。在第2节里,我们首先给出显影模型的理论基础,并且简单描述了模拟光栅槽形随显影时间演变的数值方法。然后,在第3节里,我们在曝光模型的基础上确定了显影刻蚀速率的计算公式。第4节介绍理论模拟出的光栅槽形与实验结果的比较。第5节介绍理论模拟出的实时监测曲线和实验得到的实时监测曲线的比较。通过显示这两个阶段的理论模拟结果都能和对应的实验结果很好地吻合,证明这个显影模型是比较合理的、有效的。

2 光栅显影模型的理论基础

显影模型的建立基于下述两个前提假设^[1]:

1) 空间某点的显影刻蚀速率取决于该点处已曝光的感光剂分子(PAC)浓度; 2) 显影刻蚀速度的方向总是沿着光栅瞬时轮廓的法线方向。由于得不到模型的解析解,只能使用数值解法模拟显影过程中光栅瞬时轮廓的演化;光栅瞬时轮廓就是等时间面。

如果全息干涉光场是均匀和稳定的,那么,整块光栅的显影情况可以通过分析光栅的任意一个横截面(xOy 面)而确定。如果在代表初始光刻胶表面的水平直线(Ox)上任意取一个“质点” M ,在显影过程中,随显影时间的增长, M 将作一个显影刻蚀的空间运动。如图1所示, l 是一个质点的显影刻蚀运动轨迹, M 是其上任意一点, g 是经过 M 的光栅瞬时轮廓

线, q 是通过 M 的 g 的切线。由于显影刻蚀速度 V 的方向总是 g 的法线方向,显影刻蚀速度的方向角 θ 必然等于切线 q 的斜角 α 。若质点 M 的显影刻蚀速度 V 沿 x 和 y 轴投影的分量记为 v_x 和 v_y ,则

$$v_x = V \sin \theta, \quad v_y = V \cos \theta. \quad (1)$$

显影刻蚀速度的绝对值 V 将在第3节中讨论。在实际的模拟计算中为了减小计算量,根据光栅的对称性和周期性, x 的取值范围只需半个周期,其余取值范围的计算数据可通过镜面反射和平移操作得到。

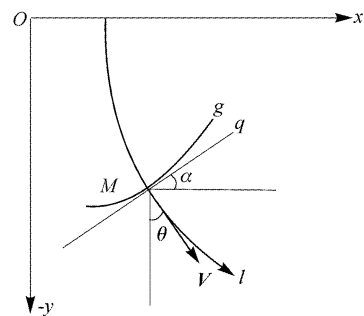


Fig. 1 The etching velocity of the developer directs perpendicularly to the instant surface profile of the photoresist grating undergoing development

为了数值模拟光栅槽形随显影时间的演变,我们采用一个弹性弦模型。假设一个弹性弦上共有 N 个结点, $N \gg 1$,它们的坐标可用 (x_i, y_i) 表示, $i = 1, 2, \dots, N$ 。在显影开始的 $t = t_0 = 0$ 时刻, $[x_i^{(0)}, y_i^{(0)}] = [x_i^{(0)}, 0]$,即所有结点都位于光刻胶的初始上表面, $x_i^{(0)}$ 分布遍半个光栅周期,其中 $x_1^{(0)} = 0$, $x_N^{(0)} = d/2$,它们分别位于明暗条纹的中心位置。 $x_i^{(0)}$ 的分布不一定是均匀的,但是当 $N \rightarrow \infty$ 时,相邻间距要趋于0。令 $0 = t_0 < t_1 < t_2 \dots < t_M$ 是一个时间序列, $\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$ 。又定义 $X^{(k)} = [x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_N^{(k)}]$, $Y^{(k)} = [y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_N^{(k)}]$,这里 $[x_i^{(k)}, y_i^{(k)}]$ 给出第 i 个结点在 $t = t_k$ 时刻的位置,因此 $[X^{(k)}, Y^{(k)}]$ 给出整个弹性弦(即光栅)在 $t = t_k$ 时刻的形状。光栅的形状演变可以用如下差分方程组近似模拟:

$$\begin{cases} X^{(k)} = X^{(k-1)} + v_x^{(k-1)} [X^{(k-1)}, Y^{(k-1)}] \Delta t_k, \\ Y^{(k)} = Y^{(k-1)} + v_y^{(k-1)} [X^{(k-1)}, Y^{(k-1)}] \Delta t_k, \end{cases} \quad (2)$$

其中 $v_x^{(k-1)}$ 和 $v_y^{(k-1)}$ 是 N 维向量,它们的第 i 个分量, $v_{x_i}^{(k-1)}$ 和 $v_{y_i}^{(k-1)}$,分别是在 $[x_i^{(k-1)}, y_i^{(k-1)}]$ 点处显影刻蚀速度沿 x 和 y 方向的矢量分量。一般说来, $v_{x_i}^{(k-1)}$ 和 $v_{y_i}^{(k-1)}$ 不只依赖于 $[x_i^{(k-1)}, y_i^{(k-1)}]$ 点的位置和该点处的刻蚀速率,也依赖于该点的若干个相邻点的位置(用以确定法线方向),除非 $i = 1$ 或 N 。在那里,在所有时刻,由于几何对称性, $v_{x_1}^{(k)} = v_{x_N}^{(k)} = 0$ 。

从理论上讲,相邻点的数目取的越多,法线方向就可以被确定得越准确。在我们编制的计算机程序中,为了简便起见,我们只用每一点和它的一个右侧邻点确定该点处的法线方向。

3 显影刻蚀速率的确定

在显影模型中,显影刻蚀速率的确定对模拟全息光栅轮廓的近似程度是至关重要的。从图 2 中的扫描电子显微镜照片可以看出,我们所得的全息光栅轮廓具有相同的特点:光栅顶部平坦,侧壁与水平线的夹角接近,光栅槽底干净,无残胶,光栅轮廓接近矩形。图 2(a)和图 2(b)所示的都是 1200 g/mm 的全息光栅,虽然胶厚分别为 750 nm 和 467 nm,但同样能维持前三条特性。这说明,在我们的全息光栅制作工艺中,非线性效应非常显著,而且非线性效应对制作矩形的全息光栅掩模是非常有利的。所以,确定显影刻蚀速率的关键在于要能很好地模拟这种非线性效应。

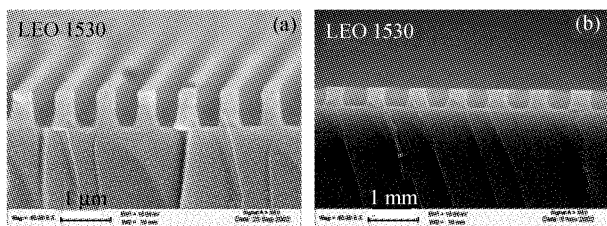


Fig. 2 Scanning electron micrographs of samples with photoresist thicknesses (a) 750 nm and (b) 467 nm, respectively

3.1 确定显影刻蚀速率的基础

显影刻蚀速率是由显影液和已曝光光刻胶的性质决定的,所以显影理论模型是曝光模型的理论延伸。曝光量作用于光刻胶有感光效率和感光饱和的问题,因此已曝光的感光剂分子浓度的变化是确定显影刻蚀速率的基础。我们的曝光模型的前提假设是:背景光可以忽略,干涉条纹足够稳定,过曝光潜像的消失速度基本上由潜像的自衍射感光决定,考虑到胶层很薄,而且光刻胶对 441.6 nm 波长吸收率较低,光刻胶接受的光强只依赖于横坐标,不依赖于纵坐标。由此导出的曝光模型由下面的公式描述(详细推导参看文献[7]):

$$\begin{cases} D_e(x, t) = 1 - \exp[-\alpha \cdot E(x, t)], \\ f(x) = 2A^2[1 + \cos(Kx)], \\ E(x, t) = f(x) \cdot t + \gamma \cdot t^3, \end{cases} \quad (3)$$

在上式中, A 是干涉光束的电场振幅, $f(x)$ 是理想干

涉条纹的光强分布, $E(x, t)$ 和 $D_e(x, t)$ 分别是曝光量和已曝光的感光剂分子浓度随时间变化的空间分布函数。参量 α 主要决定于明条纹的中心位置处的 D_e 的变化速度(即潜像相位调制深度增大的速率),单位为 $\text{cm}^2 \cdot \text{mJ}^{-1}$ 。参量 γ 决定于暗条纹的中心位置处的 D_e 的变化速度(即潜像相位调制深度消失的速率),单位为 $\text{mW}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s}^2)$ 。图 3 中,横轴 x 取了两个光栅周期,左纵轴表示 D_e 的负值,右纵轴表示光强,图中的曲线族模拟了前文中两块样片的空间分布函数的轮廓随曝光时间的演化过程,图 3(a)和图 3(b)分别对应着图 2(a)和图 2(b),相应的曝光时间分别为 210 s 和 172 s,曲线的时间采样间隔均为各自曝光时间的 1/8,随着曝光时间的增长,两者的明暗条纹中心位置之间函数 D_e 的差值都趋近于最大。

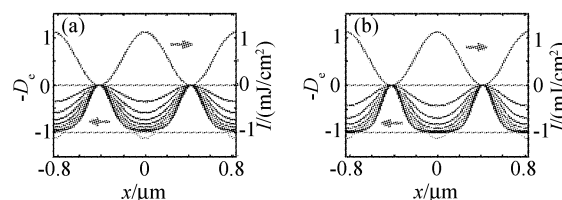


Fig. 3 Simulated evolution of spatial distribution function $D_e(x, t)$ during exposure. The sampling time interval is 1/8 of the total exposure time of respective samples [(a) 210 s and (b) 172 s]

3.2 刻蚀速率和已曝光感光剂分子浓度 D_e 的关系

我们假设已曝光感光剂分子的浓度 D_e 与显影刻蚀速率 V (速度 V 之模)之间有下列关系:

$$V(x, t) = V_0 \cdot \exp[\kappa \cdot D_e(x, t)]. \quad (4)$$

当曝光时间 $t = 0$, 有 $E(x, 0) = 0, D_e(x, 0) = 0$, 则 $V(x, 0) = V_0$, 也就是说 V_0 是未曝光的光刻胶的显影刻蚀速率。如果在最佳时刻 T_C (明条纹的中心位置得到充分曝光,同时暗条纹中心位置的曝光量尽可能地得到了抑制)停止曝光,那么,在明条纹中心位置($x = 0$), $D_e(0, T_C) \approx 1$, 有 $V(0, T_C) \approx V_0 \cdot \exp \kappa$, 在暗条纹中心位置($x = d/2$), $D_e(d/2, T_C) \approx 0$, 有 $V(d/2, T_C) \approx V_0$ 。由此

$$\frac{V(0, T_C)}{V(d/2, T_C)} \approx \exp \kappa, \quad (5)$$

显然 κ 的物理意义就是:明暗条纹中心位置的显影刻蚀速率之间的倍率系数。大量的模拟试验表明, κ 主要决定着全息光栅的占宽比。

3.3 实际模拟中 V_0 和 κ 的确定

实际模拟中,由测量或假设,一般已知光栅的槽形(周期 d , 槽深 H 和占宽比 Δ) 和工艺参量(曝光时间 t_c 和显影时间 t_D)。在明条纹中心位置,由于光刻

胶被彻底曝光了,深度方向的已曝光感光剂分子的浓度变化相同,所以显影刻蚀速度大小和方向都是恒定的,其值可按下式粗略估计:

$$V(0, t_c) \approx H/t_D. \quad (6)$$

然后,根据需要模拟的占宽比,通过反复试验来确定 κ 值,再由 $V_0 \approx V(0, T_c)/\exp\kappa$ 确定 V_0 。知道了 V_0 和 κ ,根据(4)式,任意位置处的显影刻蚀速率就被其坐标值和曝光时间 t 唯一地确定了。最后,根据公式(1)~(4),就可以模拟显影过程中光栅轮廓的演化过程了。

4 理论模拟与实验的比较

在 1200 g/mm 全息光栅的制作中,我们使用 $\lambda=441.6$ nm 的 He-Cd 激光作为记录光源,使用 Shipley S1805 光刻胶和 Shipley 351 显影液,显影液与去离子水的体积稀释比率为 1:4。在图 2 中的两块样片的工艺条件分别为:(a)光刻胶初始厚度约 750 nm,曝光时间 210 s,显影时间 185 s;(b)光刻胶初始厚度约 467 nm,曝光时间 172 s,显影时间 112 s。把上述工艺条件代入显影模型,分别得到图 4 中(a)和(b)两个显影过程中光栅轮廓演化的模拟结果,图中,横轴是空间坐标 x ,纵轴沿光栅的槽深方向,光栅轮廓的演化终止在显影停止时刻。

与图 2 中的扫描电子显微镜(SEM)照片比较,显影模型的理论模拟结果同样具有平坦的光栅顶部,接近的侧壁夹角,干净、无残胶的光栅槽底,接近 90° 梯形的光栅轮廓,以及相近的占宽比。

大量的理论模拟试验分析显示,当 κ 较大, V_0 较小时,光刻胶的非线性效应显著,获得的槽形接近矩形,如图 4 所示,其中 $\kappa=11.512$, $V_0=5.555 \times 10^{-5}$;相反,当 κ 较小, V_0 较大时,光刻胶的非线性效应能够得到抑制,获得的槽形近似为正弦形,见图 5,其中 $\kappa=3.333$, $V_0=0.177$;如果 κ 和 V_0 取值在上述两种极端情况之间,则得到的槽形也在上述两种极端结果之间。由此可得:光刻胶呈现显著非

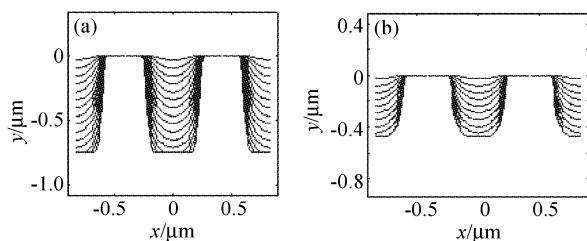


Fig. 4 Modeling of groove profile evolution of samples (a) and (b) during development

线性效应时,必然有明暗条纹中心位置之间的显影刻蚀速率相差很大。

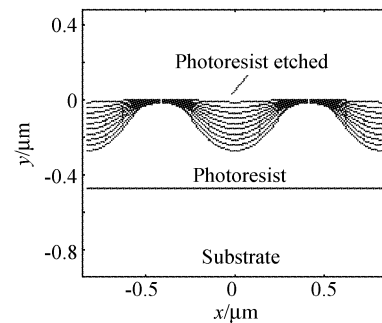


Fig. 5 A sinusoidal grating obtained when the nonlinearity of photoresist is restrained. The development time is the same as the sample in Fig. 4(b)

需要指出的是,由于明条纹中心位置的显影刻蚀速率 $V(0, t)$ 具有上限,所以 κ 和 V_0 都相对较大的情况是不可能存在的,而且当 $V(0, t)$ 趋近于上限时, V_0 和 $\exp(\kappa)$ 之间基本成反比关系。如果 κ 和 V_0 都相对较小,对应着严重曝光不足的情况。因此,在全息光栅的实际制作过程中, κ 和 V_0 的值不是任意可取的,特定的工艺条件唯一确定一对 κ 和 V_0 值;特定的一对 κ 和 V_0 值决定了特定的光栅槽形。适当控制工艺参量,通过抑制或放大光刻胶的非线性效应,可以获得正弦形、梯形或者矩形的全息光栅,而且可以在一定范围内调整占宽比。

5 实时监测与模拟监测曲线的比较

在上节光栅轮廓的显影演化模拟结果的基础上,假设显影的实时监测波长是 632.8 nm,我们使用光栅软件 KAPPA^[7],模拟计算了在满足利特罗(Littrow)条件(即自准直)下反射负一级的衍射效率随显影时间变化的曲线(以下简称模拟监测曲线),如图 6 所示,其中的(a)和(b)分别对应于图 4(a)和图 4(b),横轴是显影时间,左纵轴是反射负一级的衍射效率,右纵轴是光栅槽深和残胶厚度,单调上升和下降的两线分别是光栅槽深和残胶厚度与显影时间的关系曲线。理论模拟显示,对 750 nm 的初始光刻胶厚度,模拟监测曲线有三个峰,第二个峰很小;而对 467 nm 的初始光刻胶厚度,模拟监测曲线有二个峰。如果显影分别停止在第三和第二个峰值之后,那么,对两种厚度的光刻胶厚度,所得光栅的槽底都能干净无残胶。图 6 中的(a')和(b')分别是上述两块样片的显影实时监测曲线(关于显影的实时监测装置,参看文献[8],可以看出,它们也分别具有三个和二个峰值,这与模拟监

测曲线是相符的。

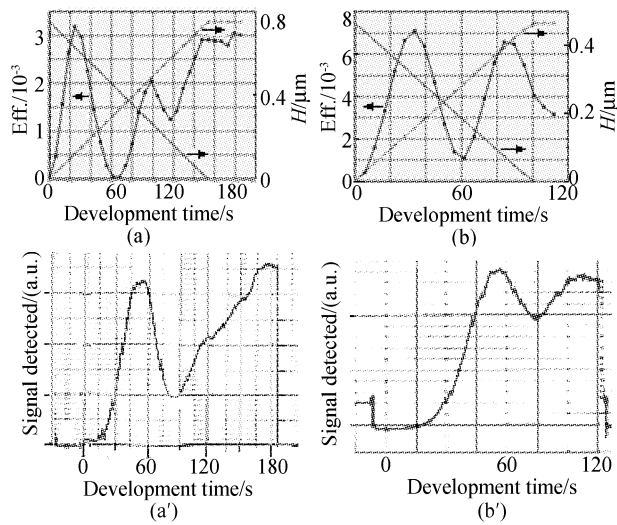


Fig. 6 Theoretically simulated development curves [Figs. 6(a) and 6(b)] and their corresponding in-situ monitoring curves [Figs. 6(a') and 6(b')] are found to have the same features

显影实时监测曲线与模拟监测曲线之间存在着明显的差异,其主要原因有:理论模拟的最终光栅槽形与扫描电子显微镜(SEM)照片中样片的实际槽形有差别;理论模拟显影过程中光栅轮廓的演变(占宽比、槽深的变化范围和速度)与制作过程的真实情况一定存在较大的差异;光刻胶初始厚度、残胶厚度、占宽比的测量值都存在着误差。即便如此,本论文中的显影理论模型和光栅严格理论的结合仍具有两个重要用途:第一、在制作全息光栅之前,根据假设的工艺条件,可以模拟出制作可能获得的全息光栅槽形,同时模拟出显影监测曲线,预先使制作者获知需要在实际监测曲线的什么位置停止显影,从而获得槽底干净无残胶的全息光栅。第二、在制得的特殊槽形的全息光栅,或者在工艺参量与光栅槽形之间的对应关系出现异常情况之后,把工艺制作参量带入显影模型,结合使用光栅软件,可以对其成因进行深入的分析。这对提高工艺研究效率和工艺制作水平是非常有意义的。

理论分析证实,槽深、占宽比和残胶厚度是影响反射负一级衍射效率的主要因素,它们各自的微小变化都会导致负一级衍射效率曲线的明显改变;而实时的显影监测曲线客观地反应了在显影过程中光

栅轮廓演化的瞬时情况。这就预示了使用实时的监测技术,并辅助以理论模型的预测,可以对全息光栅的沟槽形状进行比较精确的控制。

结论 在本文中我们建立了一个显影理论模型,根据这个模型能很相似地模拟出实验获得的全息光栅的轮廓形状;结合光栅的严格理论,我们进一步获得的显影模拟监测曲线与实时监测曲线具有一致的主要特征,因此,这个显影模型是比较合理的。实验和理论模型的分析结果都证实,在本实验室的工艺条件下,光刻胶的非线性效应非常显著;合理利用这种非线性效应,可以方便地制作出近乎矩形的全息光栅。这个显影理论模型还揭示出,表征光刻胶非线性效应程度的本质参量是明暗条纹中心位置的显影刻蚀速率之间的倍率,这为工艺研究指明了方向。

总之,这个显影理论模型结合光栅严格理论,对于在全息光栅的制作前提供预测,在制作完成后分析,都是一个有效的理论分析工具。

参 考 文 献

- 1 Li Lifeng. *Application of Diffraction Theory to Analysis and Fabrication of Waveguide Gratings*. Ph. D. dissertation, University of Arizona, USA, 1988
- 2 Lindau S. The groove profile formation of holographic gratings. *Optical Acta*, 1982, **29**(10):1371~1381
- 3 Britten J A, Boyd R D, Shore B W. In-situ end-point detection during development of submicrometer grating structures in photoresist. *Opt. Engng.*, 1995, **34**(2): 474~479
- 4 Smith H M. *Holographic Recording Materials*. Springer-Verlag, 1977
- 5 Zhang Haitao, Gong Mali, Zhao Dazun *et al.*. Design and error analysis of trapeziform grating for high density optical disk storage. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2002, **22**(1):92~98 (in Chinese)
- 6 Li Yigui, Chen Di, Zhu Jun *et al.*. Sub wavelength gratings based on a new microfabrication technology. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2002, **22**(8):1008~1010 (in Chinese)
- 7 Zhao Jinsong, Li Lifeng, Wu Zhenhua. In-situ self-monitoring of latent image in fabrication of holographic gratings. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2004, **24**(6): 851~858 (in Chinese)
- 8 Li L, Xu M, Stegeman G I *et al.*. Fabrication of photoresist masks for submicrometer surface relief gratings. *Proc. SPIE*, 1987, **835**:72~82