摘要

近年来,随着 MEMS 研究及其应用的快速发展,微细加工技术作为其中的 一个重要组成部分,获得了长足的进步。UV-LIGA 技术是现代微细加工中的热 门技术之一,与使用 X 射线的 LIGA 技术相比,其光刻工艺中采用传统紫外光 源,故其有着工艺简单,成本低廉的优势,可以进行大规模成批量的生产,因此 受到广泛的关注和研究。

光刻技术作为 UV-LIGA 中的关键一环,对其进行理论仿真研究一直都是热 点。随着具有复杂高深宽比结构的 MEMS 器件获得越来越多的需求,采用计算 机模拟的方法对光刻工艺仿真,可以降低研制成本,缩短研制周期,并对于提高 微机电产品质量、指导实际加工过程等方面都有着极其重要的意义。

UV-LIGA 工艺主要采用接近式光刻,接近式曝光和后烘过程作为接近式光 刻中的两个重要组成部分,首先应当考虑。曝光过程的研究主要集中对胶表面曝 光图形和胶体深层曝光图形的预测两个方面。后烘过程则主要是对曝光过程的延 续,也是胶体发生实质改变的一个重要步骤。而 SU-8 负性化学放大胶由于其优 秀的性质也获得了微细加工领域的广泛关注,是 UV-LIGA 技术中主要使用的一 种胶体。

本文就 SU-8 胶接近式光刻曝光工艺中的曝光和后烘机理展开研究,以期获 得能够完整地反映 UV-LIGA 工艺中 SU-8 曝光后烘过程的理论模型。不论是曝 光过程还是后烘过程,无法用单一的学科理论进行解释,需要交叉学科知识的支 持,这正是 MEMS 领域研究的特点之一。本文以国家自然科学基金(NO. 60473133)"基于准 LIGA 技术的 MEMS 制造误差修正方法计算机仿真研究"为 基础而展开研究,对接近式紫外光刻工艺的曝光及后烘过程中涉及的理论进行深 入研究,克服了光刻技术中交叉学科应用带来的难点,对曝光及后烘工艺实质进 行深层分析,提出了能充分反映工艺过程的理论模型。

对于胶表面曝光,本文以纯光学标量衍射理论为基础,结合课题组的研究, 提出用模拟退火算法结合波前分割法对光场影响最大掩模范围进行灰阶编码掩 模矫正。通过在一定范围内对二元灰阶编码掩模的面元网格进行局部搜索优化, 最终得到光学临近矫正后的掩模编码及其矫正光场。

I

此外,在深度曝光过程仿真方面,以 Dill 曝光模型为代表的光化学曝光模型 更能反映其主要实质。本文以 Dill 经典曝光模型为基础,对该模型在时间轴和深 度轴方向进行扩展,形成了更为完整的曝光仿真理论。在时间轴模型的扩展方面, 分析了 SU-8 光刻胶的组成及其曝光交联化学反应过程,建立了适合于 SU-8 胶 的光交联反应动力学模型。而在深度轴上,以复折射率扩展下的基尔霍夫衍射公 式为基础,利用光束传播法的思想分阶段计算某曝光时刻下胶体内部的光场分 布。本文在深度轴上建立的光学模型解决了接近式光刻中光束传播路线上折射率 跳变问题,且对标量衍射理论在微不均匀介质的应用上进行扩展。最后,通过复 折射率分布作为纽带,将两个轴上的模型耦合起来,形成了能够反映 SU-8 曝光 实质的新型光化学曝光模型。

在后烘仿真方面,本文从 SU-8 后烘反应过程中的光聚合反应入手,分析了 SU-8 后烘过程中的主要机理,并以 Ferguson 后烘反应动力学模型为基础,并加 入光致酸的扩散模型,形成新的后烘反应-扩散模型。本文着重介绍了 Vrentas-Duda 渗透剂-高分子聚合物体系自由体积扩散理论,通过对 Vrentas-Duda 扩散系数公式按 SU-8 后烘扩散过程的需要进行简化,结合 Ferguson 后烘反应动 力学模型,最终形成了可以描述 SU-8 后烘过程中光致酸-环氧交联链扩散体系的 后烘反应-第二类扩散模型。

实验结果表明,本文建立的曝光后烘耦合模型可以一定程度上反映加工图形 轮廓,是完整而有效的微细加工过程模拟理论。

关键词: 接近式光刻; 光刻仿真; 掩模优化; 曝光模型; 后烘模型

Π

Abstract

With the fast development of research and application of MEMS in recent years, micromachining technology has made great progress as an important part of MEMS as well. UV-LIGA technique is a hot technology of modern micromachining, which adopt tradition ultraviolet light system as illumination source. Comparing to the LIGA technique using X ray, it has virtue of briefness of technology, low system cost, and possibility of large-scale mass production, so it has been paid wide attention to.

Photolithography technology is a key step of UV-LIGA, and it always is a hotspot of theory simulation research of it. Along with the more and more requirements of MEMS devices with complex high aspect ratio structures, simulations of lithography technique with cyber-simulant methods can reduce cost of design and shorten research cycle. Besides, it is of great significance for lithography simulation to increase micromachining product quality, guide the actual manufacturing process and so on.

UV-LIGA technology mainly uses proximity lithography. It has proximity exposure and post exposure bake(PEB) as the two important components, which should be considered first. The study of exposure process mainly focus on the exposure figure on the surface of photoresist and the deep exposure figure inside the photo resist. PEB process is a kind of continued process of exposure, and it is a very important process in which photoresist changes essentially. The SU-8 photoresist is a kind of negative chemically amplified resists, which has been paid attention to in micromachining field because of its excellent character, and it is a kind of photoresist mainly used in UV-LIGA technology.

This paper deals with reaction mechanisms of photoresist in exposure and PEB processes in lithography technology, and its purpose is to get appropriate models which can inextenso reflect the exposure and PEB process of SU-8 in UV-LIGA technology. Not only exposure process and also PEB process, can not be explained by the single discipline theory. It is necessary to be supported by interdisciplinary

I

knowledge, which right is the characteristic of research in MEMS field. This paper based on the Chinese National Natural Science Foundation(No. 60473133)-----Simulation research of MEMS manufacturing error correction method based on UV-LIGA technology, make in-depth research on the theories of exposure and PEB processes in proximity UV-lithography technology. We overcomed the difficulties brought by interdisciplinary application in lithography, and built theory models which can fully simulate exposure and PEB processes.

As for exposure on the surface of photoresist, this paper based on the optical scalar diffraction theory, rectified the binary gray-tone coding mask within the limit of most effective on the illumination by simulated annealing algorithm and division of wave front method, combined with the research of our group. Through the local searching and partially optimization on the binning grid of binary gray-tone coding mask, the optical proximity corrected mask code was obtained finally.

Furthermore, for the simulation of deep exposure process, the photochemistry exposure model represented by the Dill's exposure model is more reasonable and applicable. This paper based on the classical Dill's exposure model, generalized its time and depth exposure model, and the more reasonable and integrated emulational theory methods were proposed. To generalize the time axis exposure model, the components of SU-8 photoresist and its photopolymerisable reaction in exposure process were analyzed, and a reaction kinetics model befitting SU-8 was built. In the depth axis, based on the Kirchhoff's diffraction formula generalized by the complex refractive index, the illumination distributing inside the photoresist at some moment was calculated by stages, using the beam propagation method. In this paper, the optical exposure model built on the depth axis can solve the problem of the jumping refractive index in the propagating path in proximity lithography, and the scalar diffraction theory was generalized to apply in micro-heterogeneous medium. Finally, the two models were coupled by complex refractive index, forming a new photochemistry exposure model which can reflect the essential process of SU-8 exposure. As for simulation of PEB, this paper started with analysis of SU-8

П

photopolymerisable reaction, discussed the main mechanism of the reactions in PEB process. Based on the Ferguson PEB reaction kinetics model, the diffusion model of photoacid was considered, and a new PEB reaction-diffusion model was built. In this paper, the Vrentas-Duda free volume diffusion theory of solvent-polymer system was introduced. According to the simplification to the Vrentas-Duda free volume diffusion coefficient calculating formula and combining with the Ferguson PEB reaction kinetics model, the PEB reaction-second-style-diffusion model of photoacid- epoxy crosslinked chain system was built to describe SU-8 PEB process finally.

The experimental results indicate that the improved exposure and PEB model built in this paper can reflect the actual situation of experiment figure in a certain degree, and it is an integrated and effective simulation theory of micromachining process.

Keywords: Proximity Lithography; Lithography Simulation; Mask Optimization; Exposure Model; PEB Model

中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文,是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成 果。除已特别加以标注和致谢的地方外,论文中不包含任何他人已经发表或撰写 过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确 的说明。

作者签名: 2 新 签字日期: ンク・6.8

中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一,学位论文著作权拥有者授权中国科学技术大学拥 有学位论文的部分使用权,即:学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交 论文的复印件和电子版,允许论文被查阅和借阅,可以将学位论文编入《中国学 位论文全文数据库》等有关数据库进行检索,可以采用影印、缩印或扫描等复制 手段保存、汇编学位论文。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

保密的学位论文在解密后也遵守此规定。

☑公开 □保密(___年) 作者签名: 文. 初 签字日期: 26.6.8

导师签名: 美口人 签字日期: 2010.6.

第1章 绪论

1.1.微电子机械系统(MEMS)

Micro-Electro-Mechanical System, 简称 MEMS, 中文含义是微电子机械 系统。MEMS 还可以简称为微机电系统,这是美国的叫法。目前世界上对于微 机电系统,还没有一个统一的定义。在日本,它通常被称之为"微机械",即"Micro Machine"。在欧洲,通常称为"微系统",即"Micro System"。而在中国, 我们认同 MEMS 这个名称。因为 MEMS 比较完整、准确地刻画了微机电系统的 主要特征^[1]。MEMS 是专指那种外形轮廓尺寸在毫米量级以下,构成它的机械零 件和半导体元器件尺寸在微米-纳米量级(10⁻⁶米-10⁻⁹米),可对声、光、热、磁、 运动等自然信息进行感知、识别、控制和处理的微型机电装置。MEMS 是正在 飞跃发展的微/纳米技术中一项十分重要的成果^{[2][3]},它通过把微型电机、 微型 电路、 微型传感器、 微型执行器等微型装置和器件集成在硅片上, 能够达到搜 集、处理与发送信息或指令等功能,还能够按照所获取的信息自主地或根据外部 的指令采取行动,从而大幅度地提高系统的自动化、智能化和可靠性水平。MEMS 是多种学科交叉融合并具有战略意义的前沿高技术,是未来的主导产业之一。可 以预见, MEMS 将以其微型化的优势, 对未来科学技术、生产方式及质量产生 深远影响,它不仅可以带动许多相关学科的发展,更将是关系到国家经济繁荣、 科技发展和国防安全等方面的一项关键技术[4][5][6]。

1.2. 微细加工技术

在 MEMS 发展过程中, MEMS 器件由于需要已经被不断缩小了, 一些 MEMS 器件的尺寸已经到了微米甚至纳米级。这种微小尺寸装置器件的加工显然超越了 车、磨、钻、锻、铸、焊等传统机械加工方法的极限。用于加工这种微小器件的 技术称为微细加工技术, 或称为微制造。微细加工的出现和发展与大规模集成电 路密切相关, 微细加工工艺中包括大量过去 50 年中为微电子工业开发的加工工 艺^[7]。目前微细加工主流技术主要包括:基于半导体集成电路微细加工工艺的硅 表面加工和体硅加工技术, 20 世纪 80 代中期以后出现的 LIGA 技术以及由传统 精密、超精密机械加工技术发展而来的微细机械加工技术等。

1.2.1. 硅微加工技术

硅微加工技术主要利用集成电路工艺对硅材料进行加工,形成硅基 MEMS 器件,在 MEMS 研究中具有重要地位。这类微细加工技术可分为两大类:表面 硅加工(Surface Micro-Machining)和体硅加工(Bulk Micro-Machining)技术。表面 硅加工技术中常用的一种技术为表面牺牲层技术;而体硅加工技术中以腐蚀技术、和键合技术尤为重要。

表面牺牲层 (Surface Sacrificial Layer) 技术:牺牲层技术是表面微细加工采 用的一种重要工艺。其基本工艺步骤为:先在衬底上沉淀牺牲层材料,利用光刻 技术,在牺牲层上刻蚀形成设计的图形,然后用结构材料淀积并光刻出所需的图 形,最后再用化学腐蚀剂将作为结构支撑的牺牲层材料腐蚀掉,这样就形成了悬 浮可动的微结构部件。由于被去掉的中间支撑层只起分离作用,故称其为牺牲层, 其厚度一般为 1-2 微米。利用牺牲层可制造出多种活动的微结构,如微型桥、悬 臂梁及悬臂块等,此外该技术常被用来制作敏感元件和执行元件,如谐振式微型 陀螺、谐振式微型压力传感器、微型马达、微型加速度计及各种制动器等。该技 术的优点是与 IC 工艺有着良好的兼容性,与集成电路集成性好,是现在应用较 为广泛的微细加工技术^{[8][9]}。

腐蚀(Etching)技术:对硅等硬材料,没有现成的传统机械加工手段可以 实现微纳尺寸级别的加工。用物理或化学技术,即通过干法或者湿法腐蚀来进行 加工,是仅有的可利用的加工硅的方法。腐蚀工艺根据是否依赖于加工材料的晶 向分为各向同性腐蚀和各项异性腐蚀。对于硅这种具有金刚石立体晶体结构的材 料来说,各向异性腐蚀(Anisotropic Etching)是体硅微细加工技术中的关键技术 之一。腐蚀不同材料的的基底,有不同种类的腐蚀剂。对于相同材料的基底采用 不同种类腐蚀剂进行腐蚀,也会得到不同的加工效果。如用来腐蚀硅材料的普通 各向同性腐蚀剂为 HNA,可以经行各向同性腐蚀;而氢氧化钾(KOH)、乙二胺 和邻苯二酚(EDP)、四甲基氢氧化铵(TMAH)以及肼(N2H4)则是硅各向异 性腐蚀的常用腐蚀剂。由于各种各向异性腐蚀剂对硅不同晶面的腐蚀速率不同, 故选用合适的掩模和晶向可以获得高深宽比结构。深宽比同高宽比,即微结构中 凹结构的深度或凸结构的高度与表面尺寸的比率。早期 MEMS 压阻式压力传感 器和加速度传感器都采用了各向异性腐蚀技术^{[10][11]},但该方法与集成电路集成

度较差,且存在横向尺寸加工精度有限及加工器件尺寸较大等方面的缺点。干法腐蚀有三种实用技术:等离子刻蚀、离子研磨以及反应离子刻蚀。这些加工技术 克服了湿法化学腐蚀的缺点,是目前微机械加工的主流技术。随着 IC 工艺的发 展,感应耦合等离子体刻蚀、高密度等离子体刻蚀技术及设备被不断引用进来, 使得干法刻蚀可以制作比较理想的高深宽比的沟槽。

键合(Bonding)技术:键合技术是不利用任何粘合剂,通过化学键和物理 作用将硅片与硅片、硅片与玻璃或其它材料紧密地结合起来的方法。它常与其它 微细加工手段同时运用,可以对微结构进行支撑和保护以及实现机械结构之间或 机械结构与集成电路之间的连接。常见的硅片键合技术包括金硅共熔键合、硅-玻璃静电键合、硅-硅直接键合以及玻璃焊料烧结等^[12]。

一般说来, 硅加工技术与传统 IC 工艺结合性好, 可方便地对微机械和微电 子系统进行集成, 适合大规模成批量生产, 是 MEMS 主流加工技术。

1.2.2.LIGA 技术和 UV-LIGA 技术

表面硅加工和体硅加工涉及的微细加工过程都是从 IC 技术演变而来的,故 而大多数用于 IC 产品和集成电路的理论、经验以及设备,经过细微调整后也都 适用于某些微细加工。然而,这些良好的继承性却伴有两个主要欠缺:①微结构 深宽比较低;②绝大部分工艺必须使用硅作为基底材料。大部分硅基微电子机械 系统在加工过程中都是用标准尺寸和厚度的晶片作基底,通过此基底上作腐蚀或 其他一些加工工艺,形成所需的三维结构体系。因此,材料的深度尺寸会不可避 免的受限于此。另外硅基 MEMS 结构还排斥聚合物、塑料和金属等传统材料^[7]。

用于微电子机械系统的 LIGA 工艺与上述工艺有根本的区别。它没有前述硅 基微细加工技术的两个缺点。该工艺在制作非硅基底的微结构上具有巨大的潜 力,如用来制造金属或塑料的微齿轮或微马达等。LIGA 是德语光刻 (Lithographie)、电镀(Galvanformung)和压模(Abformug)的简称,是20世 纪 80 年代中期,德国 Karlsruhe 原子核研究中心开发的技术。

如图 1-1 所示, LIGA 工艺开始时是利用深层辐射 X 射线在厚层光刻胶上光 刻出设定要求的图形。在这个过程中所使用的 X 射线是由同步辐射加速器产生 的,它波长短,具有很强的穿透力来穿透光刻胶层,可以获得高分辨率和高深宽

比结构。X 射线的短波可以获得 0.2 微米的线宽度和大于 100:1 的深宽比。当采 用光刻技术获得所需图形时,采用微电极沉积等电铸技术可在电绝缘的光刻胶间 隙中制造一个铜、金、镍或镍合金等材料构成的与设计图形互补的金属结构。再 把光刻胶去除,电铸所获得的金属结构本身既可作为最终产品使用,也可以作为 批量产品的铸塑模具。与硅材料结构相比,金属微结构具有更强的韧性,且受温 度影响较小,制作也相对方便,设备成本低,适合中小型工厂。如用 LIGA 工艺 制造出铸塑模具后,则可利用该模具通过注射成型等工艺制造大批量的塑料复制 品,而这些微型复制品则具有较高的精度和低廉的成本。



图 1-1 LIGA 工艺一般流程

LIGA 技术的优点在于可以获得具有高深宽比的由各种金属、塑料或陶瓷零件组成的非硅材料三维微机电结构, 扩展了硅微加工技术的局限性。但由于其工艺中需要成本昂贵的同步辐射 X 射线光源, 人们设法用其他光源进行替代。近年来, 国内外开发出了多种不需同步辐射光源的准 LIGA 技术。基于厚胶紫外光刻的 UV-LIGA (Ultraviolet-LIGA)技术, 基于准分子激光刻蚀的 Laser-LIGA 技术和基于深槽刻蚀的 DEM (Deepetching, Electroforming and Microreplication) 技术等则是准 LIGA 技术中的代表, 而其中又以 UV-LIGA 技术最为常见^[13]。

UV-LIGA 采用成本相对低廉的紫外光线代替 X 射线源进行光刻工艺,除了 所用光刻光源和掩模外,其它工艺过程则与 LIGA 工艺基本相同。根据各频段紫 外光的特点,工艺加工的厚度从数微米至数百微米不等,是制作一定厚度、高深 宽比微结构的一种简易、低成本的手段。LIGA 与 UV-LIGA 技术的具体比较参 见表 1-1^[14]。

除了上面提到的硅微加工技术和 LIGA/准 LIGA 加工技术外,其它的一些微 细加工技术也在蓬勃发展着,如激光加工^[15]、电火花加工^[16]、离子束加工^[17]、 电子束加工^[18]、微波加工^[19]等。

	LIGA 技术	UV-LIGA 技术
光源	同步辐射X光	常规紫外光
掩模版	以金金属为吸收体的X射线掩模版	标准铬金属掩模版
光刻胶	聚甲基丙稀酸甲脂 PMMA	正性和负性光刻胶, 聚酰亚胺,SU-8 胶
深宽比	一般≦100,最高 500	一般≤10,最高50
最小尺寸	亚微米	一至几个微米
胶膜厚度	几十至 1000 微米	几至几百微米
侧壁陡直度	可大于 89.9 度	一般 88 度以下
生产成本	较高	较低
生产周期	较长	较短

表1-1 LIGA 和 UV-LIGA 技术主要特点比较^[20]

1.2.3.微细加工技术中的多学科性

除了最初的微细加工工艺是从集成电路加工技术发展而来的这一事实,今天 的微细加工工艺中包括了众多方面的学科及各学科的交叉。这里之所以要强调微 细加工技术中的多学科性,是因为在本文第3第4章中将集中讨论几个学科方面 的交叉理论进行建模仿真,从而说明微细制造并非单一学科方面的理论知识即可 解释和解决加工过程中发现的现象和问题,而正是这种多学科交叉的前沿性、高 新性使得微细加工技术发展前景如此光明,使其成为新世纪中极具潜力的产业之 _[21]。

如图 1-2, 自然科学将在微细加工技术及其理论中的下述领域发挥着关键作用^[7]:

 在一些微细加工工艺中,电化学被广泛应用于将基底离子化的电解中; 而光化学则是光刻工艺中进行的一种重要化学反应。这些化学分支学科本身就是 学科交叉的产物。



图 1-2 MEMS 设计与制造包括的主要科学和工程学科

 电液动力学原理被应用于微导管和微管道中驱动流体流动,如利用毛细 流体流动制成的制动器。

 分子物理学中的一些模型被用于描述微电子机械系统中微尺度材料的特 性和特征变化。而分子动力学原理则为描述纳米尺度材料力学性能所需要。

分子生物学在生物传感器和生物医学微设备的设计和制造中有着十分重要的应用。纳米技术中也利用了很多分子生物学的基础原理,促进了纳米工艺和纳米器件的发展。

5. 等离子物理学是研究等离子体的形成、性质和运动规律的物理学分支学
科。它是微细加工工艺中一些腐蚀工艺和沉积工艺的主要建模工具。

6. 量子物理学可以用于解释微尺度下材料和物质某些物理行为,如微流体和固体中的热传输问题。

7. 尺寸效应^[22]: 当构件的几何尺寸缩小到一定范围时将出现的材料性能和 构件力学行为发生较大变化的一种现象。这种效应让我们认识到不是所有的物理

量都可以顺利的按比例缩小即可进行设计和制造,同时该效应也催生了微摩擦、 微尺度热学、微尺度流体学等学科的发展。

在科学技术突飞猛进的今天,任何理论和技术的发展都将伴随着学科间的交 叉与融合。在交叉领域被逐渐重视的新时期,各学科各自的发展都将不断对微电 子机械系统的理论及制造工艺中的缺陷或空白进行填补,这是一种新时代的挑 战,我们需要在信息爆炸的时代不断补充各方面的知识,但同时这也是一种难得 的机遇,各国虽然在 MEMS 领域的研究永不停息,却要受到交叉学科中各自学 科本身发展的制约,因而相对于传统加工,在微细加工工艺方面我们可以缩短与 它国的差距^{[23][24]}。

1.3. 光刻技术

光刻(Lithography)是以某种光子束或粒子束,经过由通透和非通透的图形 组成的掩模版,照射在涂覆光刻胶(或称光致抗蚀剂)上,利用光刻胶的感光性 或抗蚀性,形成与掩模版图形一致(正胶情形)或相补(负胶情形)的感光区域, 再经过化学显影,去除或保留这些区域得到相补或相同于掩模版图形的光刻胶图 案。光刻是高精度微几何形状图形化最有效的手段之一,是 IC 工艺中的的核心 技术。它可以大规模复制微细图形进行生产,是一种低成本高效率的加工技术 [25][26]。

1.3.1.光刻胶技术

光刻胶(photoresist)又称光致抗蚀剂,是一种由感光树脂、增感剂和溶剂 等主要成分组成的对某些波长感光灵敏的胶状混合液体。特定的光刻胶只对某些 特定波长的光敏感,而在相同光线照射下,不同光刻胶所进行的光化学反应和显 影表现形态也不尽相同。根据这种差异可将光刻胶分为两大类:正性胶(positive photoresist)和负性胶(negative photoresist)。负性胶在光照后形成不易溶物质, 留下与掩模板相同的胶体图形;而正性胶则在光照后形成可溶物质,感光区域可 被显影液去除,留下与掩模板相补的胶体图形(图1-3)。一般来说,正胶感光灵 敏度较低,分辨率较高;负胶感光灵敏度较高,分辨率较差,且负胶可以形成台 阶等结构复杂的图形^[27]。



图 1-3 正胶与负胶的显影表现形态

光刻胶还可以按适用的光源分类,如分别与紫外光刻、X 射线刻蚀和电子束 刻蚀相适应的紫外光刻胶、X 射线光刻胶和电子束胶等。光刻胶作为 MEMS 技 术中的重要一环,它与其配套试剂(如显影液)一起在国内外市场上呈快速增长 的势态,是极具生命力的产品,具有良好的市场前景和发展机遇,也越来越受到 各方面的关注^[28]。

1.3.2.光刻工艺的分类

如前所述,光刻工艺中使用不同光源配套以对应的光刻胶可以分为光学光 刻、电子束光刻和离子束光刻等;而光学光刻又可以进一步根据光源光波波长分 为紫外光刻(UV: 365-436nm)、深紫外光刻(DUV: 157-250nm)、超深紫外光刻(EUV: 11-14nm)和X射线光刻(<10nm)。根据曝光控制系统的曝光方式,光刻技术又可 分为无掩模直接光刻和基于掩模版的光刻。无掩模直接光刻技术(如激光直写技 术等)通过计算机直接控制光聚焦系统将定义的图案扫描直接在覆盖有光刻胶的 基底上曝光。虽然该技术可以达到很高的直写精度,而且省去了掩模板的设计加 工,但加工起来却十分耗时故而大批量生产受到限制,成本较高。基于掩模成像 的光刻技术则类似于日常生活中的照片冲洗技术,掩模相当于照片底片,制造方 便且可以大规模生产。本文将要讨论的主要是这种基于掩模版的光刻类型。根据 光刻工艺中对掩模利用方式不同,又可将基于掩模版的光刻进一步分为接触式光 刻、接近式光刻、投影光刻等几种形式。

1.3.2.1. 接近式、接触式和投影式光刻



图 1-4 接触式光刻方式示意图

如图 1-4 所示,接触式光刻技术是传统的曝光技术。曝光时,采用机械加压 或真空吸附使掩模版与涂覆有光刻胶的基片紧密接触。接触式光刻是 1:1 的图形 转移,无焦深限制,图形转印面积大,曝光设备简单、操作方便,生产效率高, 且具有较高的分辨率,可以进行厚胶光刻,可以获高深宽比微结构^[29]。但是, 由于光刻胶具有一定的腐蚀性,光刻掩模经常与之接触会造成掩模版破损;同时 由于掩模板的接触,光刻胶的纯度也会受到玷污,进而影响光刻工艺的图形质量。



图 1-5 接近式光刻方式示意图

为了对昂贵的掩模进行保护,使其可以重复使用,从而开发了接近式光刻技术。如图 1-5,接近式光刻技术与接触式光刻技术几乎相同,只是在掩模版与光

刻胶之间拉开一定间隙(gap),一般为几微米,以防止了两者接触导致的缺陷。 但是正是由于该间隙的存在,光学衍射产生的加工误差被带入进来,从而造成光 刻图形的失真^[30]。虽然与接触式光刻相比,接近式光刻的图形精度要差一些, 但它继承了接触式光刻的大部分优点如可进行大批量生产,设备简单,操作方便, 生产效率高,而且也可以获得高深宽比的微结构。这种光刻方式常在 LIGA 和 UV-LIGA 技术中发挥其优势。



图 1-6 投影式光刻方式

如图 1-6,投影式光刻技术是将掩模图形通过光学系统投影到基片上曝光成 像。这种光刻技术中,掩模版与光刻胶不存在接触,避免了昂贵的掩模版接触光 刻胶造成的污染从而对加工精度产生影响,是在工业界使用最多的光学光刻技 术。由于投影式光刻系统中光刻胶上的曝光图形是光通过掩模版再经由光学系统 形成的像,因此比光刻得到的图形尺寸可以比掩模版的图形尺寸小,只要采用合 适的光路设计,可以通过缩影成像系统将掩模版上图形缩小一定倍数成像。常用 的缩小倍数有 2.5 倍,5 倍和 10 倍等。这种缩小图形成像的做法可以降低由掩模 缺陷带来的加工误差,因而广泛应用于实际工业生产中。随着投影光刻技术的进 步,步进式光刻方法也被引用进来,步进器控制曝光基片载台,从一个位置移动 到另一个位置进行光刻。而近年来,随着数字微反射镜器件 DMD (Digital Micromirror Device)的问世,更加高效低成本的步进投影数字化无掩模光刻等技 术被提出来,使得投影式光刻的方式更加多样化^[31]。

图 1-7 反应了光刻方式根据曝光工艺的差别进行的详细分类。

第1章 绪论



图 1-7 光刻方式按曝光工艺进行分类

1.3.2.2. 紫外线、电子束、离子束和 X 射线光刻

紫外光刻采用的光源为波长一般在 100-400nm 的紫外波段, 有些光刻技术甚 至采用波长低于 100nm 的极端远紫外线(EUV)作为光源进行光刻^[32]。这类光刻工 艺原则上可以采用接触式、接近式或者 1:1 投影式结构作为曝光手段。在掩模的 选择上,常用高质量的人造石英作为基底材料, 它对紫外光线有着良好的透射性; 而一般用铬金属膜作为紫外光的遮蔽层。这种技术可以获得 1 至 1.5um 甚至更低 的光刻分辨率, 日本在这项技术的实用方面处于领先地位^[33]。

电子束光刻一般用于对微细图形进行直接刻画或投影复印,因而无需掩模, 节省了掩模的加工费用,但同时也需要增加获得电子束光源的成本。这种光刻技 术克服了光学衍射带来的加工误差,从而使电子束光刻具有较高的分辨率,容易 获得亚微米级分辨率的图形。但由于电子抗蚀剂制造的限制及电子在抗蚀剂中的 散射效应和对准等因素的影响,阻碍了电子束光刻分辨率的进一步提高。

离子束是一种带电原子或带电分子的束状流,和电子流特性相似。离子束和 电子束相比,散射角较小,加工精度较高;完成同样产品的加工,离子束所需能 量比电子束更小,而且主要是无热加工。较小的热加工效应使其可以用于微量加 工,特别适用于绝缘体或半导体加工。同电子束光刻一样,离子束光刻时可以采 用无掩模的聚焦方式,省去了掩模的加工,但生产效率低。离子束光刻也可以采 用加掩模的方式进行,但由于一般掩模就是采用电子束或离子束光刻生产的,故 而寻找能够遮挡离子束的材料来制造掩模成为其最大困难。

X 射线由于其波长极短,穿透能力很强,且可以忽略其采用接近式光刻时的 衍射效应。X 射线光刻掩模常用金 Au 金属等材料制造,故而成本较高。虽然 X 射线光刻加工精度较高,但由于 X 射线发射效率低而导致生产效率低下,同时

与离子束光刻一样需要探索反差较大的掩模材料^[34]。

1.3.3.掩模及其加工

光刻工艺中,需要一整套(几块至十几块)相互间能精确套准的、具有特定 几何图形的光复印掩蔽模版,简称光掩模版。掩模的基本功能是当光束照在掩模 上时,图形区和非图形区对光刻光源发出的入射光有不同的吸收能力和透过能 力。理想情况是图形区可以让光完全透射过去,非图形区则将光完全吸收;或与 之完全相反。

掩模制造技术发源于光刻,而后在其发展中又逐渐独立于光刻技术。掩模的 制造工艺可分为版图设计,掩模原版制造,主掩模制造,工作掩模制造四个主要 阶段。首先根据工艺要求设计所需要的版图;再通过绘图机绘制该版图,得到放 大的原图,一般放大 100 至 1000 倍;然后用缩小照相机进行初缩得到"掩模原 版",如缩小到原图的 10 倍;再用步进重复殖版机进行精缩和分步重复,得到"主 掩模板"或称"母版"(master mask);最后用接触式印照机通过光刻工艺得到工 作掩模。由于在光刻中掩模板重复使用会使其磨损产生伤痕,故使用一定次数后 需更换用新版;为节省成本,在得到母版后一般会复制多块工作掩模以供光刻使 用^[35]。

此外,掩模版的随机缺陷密度对微细加工成品率有着很大的影响,这种影响 将满足博塞-爱因斯坦分布,即成品率随单元有效面积或随机缺陷密度的增大而 呈负指数关系急剧下降。现阶段的掩模制造工艺在实现2-3 微米线宽已日趋成熟, 甚至有些已经达到1 微米以下^{[36][37]}。

1.4. 光刻仿真技术的发展及其研究意义

由于光刻设备昂贵,制作成本较高,因此我们需要尽可能准确的预测光刻能 力,提高光刻过程中的制造精度,尽量减小制造误差。用光刻模拟的方法获取光 刻生成图形的信息是一种极好的手段,如果模型足够精确,可以得到定性甚至定 量的制造误差,也可以了解其误差产生的主要原因,并通过一定的手段去矫正这 些误差,减小这些误差带来的影响。借助模拟手段,我们可以预测怎样才能在现 有的光刻工艺条件下使光刻水平达到极限。在过去的 20 年里,已经研究出许多 光学增强方法,极大地提高了现有设备的能力。可以说,光刻模拟是发展光刻的 一个重要组成部分;采用模拟的办法引导制造业的发展,是一条行之有效而且很 有前途的途径。它不仅减少了做大量实验需要的人力和物力,而且有助于光刻理 论的发展^{[38][39]}。

1.4.1.投影式光刻仿真

目前光刻工艺过程的仿真在 IC 领域的研究和应用已经较为深入,特别是投 影式光刻曝光仿真理论研究较多,是因为 IC 工艺中主要使用投影式光刻。随着 研究进展,投影式光刻仿真模型不断完善,陆续出现了一些商业光刻仿真软件。 如 1979 年由加州大学的 Oldham 等人开发的投影光刻工艺模拟软件 SAMPLE (Simulation and Modeling of Profiles in Lithography and Etching)^[40]。该软件是在 最初的 Dill 仿真模型^[41]的基础上加入了 Hopkins 部分相干光衍射理论进行成像计 算,并提出了光刻胶的橡皮筋显影算法(String Algorithm)^[42],利用单元算法取 代线性计算。该软件使得研究人员首次可以使用计算机来对光刻过程进行模拟仿 真,指导光刻设计和工艺处理。于是,SAMPLE 软件在工业界开始应用于整个 光刻团队^[43]。后来,该研究小组仍以此为基础推出了著名的二维透射系统仿真 程序 SPLAT (Simulation of Projection Lens Aberrations via TCCs)^[44]。该软件仍 以 Hopkins 部分相干光衍射理论为基础,采用透射交叉系数 TCC (Transmission Cross-Coefficient)来仿真二维成像光学系统,可对光刻中的离轴照明、透镜相差、 四极照明等进行仿真计算分析^{[45][46]}。由于该软件模拟光刻的计算量非常大,故 其整个计算过程都只能在服务器上进行。

1985年,FINLE科技的 Mack 等推出了著名的 PROLITH^[47](the Positive Resist Optical Lithography)光刻仿真软件,在成像模型中添加了光刻胶中驻波的分析, 并加入了前烘模型和显影动力学模型等。最为重要的是,由于该软件采用了一些 快速算法简化了模型计算,使得计算量显著下降,从而开启了将光刻仿真运行于 个人电脑的先河。这不仅极大地普及推广了光刻仿真的应用,而且使得光刻仿真 对所有光刻工作参与者(从高级研究员到过程显影工程师或制造工艺工程师)都 能直接参与到光刻产品样品的试制过程中去。直到今天,PROLITH 软件还在不 停更新发展中,从最初 1990年 FINLE 公司推出的 PROLITH/2 版本到该公司被 KLA-Tencor 收购后于 2007年 2 月推出的 PROLITH 10 版本,再到最近 2010年 2 月 KLA-Tencor 推出的最新版 PROLITH X3.1^[48]。

国内对投影式光刻模拟仿真的研究从 20 世纪 90 年代中期逐步展开。中科院 光电所的范建兴、唐波等^{[49][50]},四川大学物理系的郭永康等^[51],以及浙江大学 的王国雄等^[52],对该领域的仿真研究都做出了卓越的贡献。有的工作组在其研 究工作中开发了独立自主的仿真软件,如中科院光电所的范建兴等在进一步研究 了部分相干光成像的仿真计算后,开发了 BEHAVE 软件,用以探讨微细加工光 刻工艺中的驻波效应以及整个光刻工艺过程的仿真^[53]。

1.4.2.接触/接近式及深度光刻仿真

随着微细加工技术在工业中的应用越来越广泛,为了降低 MEMS 器件的研 制成本和缩短研制周期,高效率低成本的接触或接近式光刻仿真研究被提上日 程。这类光刻仿真研究又着重于两个方面:一是模拟仿真光刻胶表面由于衍射效 应带来的加工误差,二是针对高深宽比厚胶光刻中的深度光刻仿真。而前者由于 衍射效应只在接近式光刻中存在,故只针对接近式仿真进行研究,国内大部分研 究集中于此,如中国科学技术大学的田学红^[34]、陈有梅^[54]、李晓光^[55]、李木军^[56] 等人各自用不同手段对胶表面衍射效应产生的光刻误差进行仿真及补偿。后者则 研究相对较少,已经提出的一些研究着重于接触式光刻系统,如用前面提到的接 近式仿真的方法先对胶表面的曝光情况进行仿真,再用相同的办法逐层仿真胶体 内部深度光刻情况即可,也有通过一些手段把接近式光刻改造成接触式光刻系 统,如 Louisiana 州立大学的 WANG Wan-jun 课题组就采用了这种方法进行仿真 ^[57]。

不论是接触式光刻还是接近式光刻,上面所说的研究都针对光刻工艺中的曝 光过程进行模拟仿真。而有些课题组则侧重于某些其他工艺过程或光刻细节的仿 真,如K.A. Valiev 等深入研究了光刻机中的蝇眼积分透镜照明机理^[58],提出了 光刻机曝光衍射光强叠加的仿真方法;Ferguson 等则针对光刻工艺中的后烘阶段 提出了针对负性化学放大胶的后烘反应动力学模型^[59];日本的 LTJ(Litho Tech Japan)公司也利用其技术与设备优势,负胶后烘模型的建立及实验方面进行了 卓越的研究^{[60][61][62]};而在光刻显影工艺的模拟方面,既有从早期的 Dill、Kim 等提出的简单的经验模型^{[63][64]},到由 Mack 等提出的适用于薄层光刻胶显影的 MACK 显影模型^[65],也有由该模型改进而来的各种可以适应更多光刻情形的模 型^{[66][67]}。当然,有些综合能力较强的研究组在光刻工艺过程的各方面都做出了

不懈的研究,这些研究组在国外都以公司研究部门以及商用软件开发团队身份出现,作为纯粹的研究组织更多是在国内。除了前面提到过的四川大学郭永康课题组^{[68][69][70][71][72][73][74]},相比而言东南大学 MEMS 教育部重点实验室的黄庆安课题组则更为杰出。他们不仅在光刻中的曝光工艺、后烘工艺、显影工艺(或刻蚀工艺)方面给出了自己的研究及实验结果^{[75][76][77][78][79][80][81][82]},而且最近开始和中国国内第一家 MEMS 软件设计公司英特神斯 (IntelliSense)公司倾力合作,研究道路越走越宽^[83]。

1.4.3.光刻仿真的研究意义

如前所述,UV-LIGA 技术既可用以加工高深宽比微结构,又不需要昂贵的 X 射线源和特制的 LIGA 掩模板,设备成本低,且与 IC 工艺兼容性较好,是一 种蓬勃发展中的热点微细加工技术^[84]。而光刻工艺作为 UV-LIGA 技术中最为重 要的一个组成部分,其加工精度与难度问题首先应当加以重视。虽然 UV-LIGA 技术有众多优点,但其由于采用了接近式曝光系统以及光场自身等方面的原因使 得加工高深宽比微结构时在两方面产生加工误差:一是光刻胶表面图案内外拐角 圆化,图形失真变形的问题;二是加工高深微结构时的垂直度变差,从而影响了 所加工微零件的精度;如图 1-8 中由中国科技大学国家同步辐射田扬超课题组实 验得到的电镜照片所示。



图 1-8 微细加工中的图形失真变形问题

为了定性或者定量描述这些加工误差,寻求补偿措施,用模拟仿真的方法要 比反复实验确定最优参数来的省时省力,节省了成本,加速了研发或生产。如前 所述,微细加工过程中包含各交叉学科方面的知识或技术,且微细加工本身的加 工重复性并没有传统加工那么简单,它涉及到很多加工条件的细微变化,如温度、 湿度、洁净度等。用计算机模拟仿真的方法就可以避免这些工况不稳定的影响, 模拟出一个理想条件下的加工结果,从而指导实验,方便在系统误差之外寻找加 工误差等。总而言之,光刻仿真正成为国内外的研究热点。特别在中国,国家已 经开始加以重视微细加工对产业的影响,如江苏省已投入巨资扶持中国国内第一 家 MEMS 模拟软件研发公司英特神斯(IntelliSense)公司;可以说,问题与前 景同在,机遇与挑战并存。

1.5.本文的主要工作

本文以 UV-LIGA 工艺中的接近式光刻过程为研究对象,针对 SU-8 负性厚 胶的特点,研究了光刻各阶段工艺过程的模拟仿真方法,并以曝光过程的模拟及 后烘过程的模拟为重点,分阶段阐述其模拟仿真中理论模型的建立及计算方法。 在国家自然科学基金的资助下,本文利用模拟退火算法结合区域优先计算法完成 了对接近式光刻表面加工误差的补偿方面的工作;建立了加入折射率变化的负性 厚胶曝光模型,实现了真正的接近式光刻仿真,填补了光刻胶折射率变化对曝光 过程影响方面的研究方面的空白;改进了后烘扩散模型,获得了良好的仿真结果。 具体的工作内容按全文5 章展开分别介绍:

第1章: 绪论。着重介绍了基于光学光刻的微细加工技术及其仿真技术的研 究发展状况,同时也阐明了光刻工艺中的的难点及本课题的研究意义。

第2章:接近式深度光刻模拟理论。介绍接近式光刻中各工艺过程中所需各 学科知识和模拟理论,为后面详细说明各过程模型建立打下基础。

第3章: SU-8 接近式深度光刻曝光理论模型的建立与计算。分为两个部分: 一是用模拟退火算法结合区域优先的计算方法实现对接近式光刻表面加工误差 的补偿。二是以适用于正性薄胶的 Dill 经典曝光模型为基础,分两方面对其进行 改进以适用于负性厚胶曝光: 1. 向适用于负性光刻胶改进: 比较了正负性光刻 胶组成及参与光刻的一般区别,建立负胶化学反应动力学模型; 2. 向适用于厚 层光刻胶改进: 加入光波导技术中的光束传输法理论,对标量衍射计算理论加以 扩展并建立引入折射率变化的曝光模型,并给出各曝光时间下的计算结果。

第4章: SU-8 接近式深度光刻后烘理论模型的建立与计算。以 Ferguson 提出的经典后烘反应动力学模型为基础,把药剂传输学中的自由体积扩散经验模型加以简化后应用于对后烘扩散反应模型的建立中,获得了良好的仿真结果。

第 5 章: 总结及展望。概括了从曝光模型的建立到后烘模型的改进中的主要 工作,指出本文的创新之处,同时也分析现阶段工作中的不足,对将来该领域的 研究方向和内容作出展望。

本章参考文献

[1] 深入 DLP™技术,

http://www.projector-window.com/projector/benq/benq-dlp-1.htm

[2] Nexus Report, Market analysis for microsystems: an interim report from nexus

[3] J. Knutti, Finding markets for microstructures. Micromachining and Fabrication Process Technology IV Proceedings, SPIE, Vol. 3511,1998: 17-23

[4] Job Elders, Vincent Spiering, Steve Walsh. Microsystems technology (mst) and mems applications: An overview. MRS Bulletin, 2001, 26(4):312-315

 [5] Asad M. Madni, Lawrence A. Wan. Microelectromechanical systems (MEMS): An overview of current state-of-the-art. IEEE Aerospace Applications Conference Proceedings, 1998, 1: 421-427

[6] 张栋. 对微机电系统发展趋势和面临挑战的思考. 科技情报开发与经济, 2006, 24(16):180-181

[7] Tai R. Hsu 著, 王晓浩等译. MEMS 和微系统——设计与制造. 机械工业出版 社, 2004.1

[8] 张永华. MEMS 中的牺牲层技术. MEMS 器件与技术, 2005, 2: 73-77

[9] 吴晓, 周星元. 基于 MEMS 牺牲层技术的发展现状. 现代制造工程, 2007(9): 86-116

[10] Fukuda, Menz W (Edited by). Micro mechanical systems: principles and technology. Elsevier Science B V, 1998

[11] A.B. Frazier and M.G. Allen. J, Microelectromechanical System, 1990, Vol.2, No.2, 87-94

[12] 李太和, 李晔辰. 硅片键合技术的研究进展. 传感器世, 2002, 8(9): 6-10

[13] 李雄. UV-LIGA 技术光刻工艺的研究. 华中科技大学硕士学位论文, 2004.3

[14] 李木军. 接近式光刻仿真研究. 中国科学技术大学博士学位论文, 2007.9

[15] 激光微加工技术的应用及其进展,

http://www.zt-laser.com/gsjs/jgyy/JGZS/200611/408.html

[16] 王振龙等. 电火花加工技术的发展趋势与工艺进展. 制造技术与机床, 2001(7): 8-11

[17] 顾文琪. 聚焦离子束微纳加工技术. 北京工业大学出版社, 2006.12

[18] 葛璜. 电子束、离子束、光子束纳米微细加工技术的进展. 仪器仪表学报, 1996, 17(1): 70-74

[19] 焦永伟. 微波、毫米波部件高速加工技术. 第九届机械加工技术学术年会会议论文集, 2004.10.1: 92-95

[20] 田扬超. LIGA 和 UV-LIGA 技术工艺标准化研究. 国家 863 计划技术成果, 2007

[21] 陈宏圣. 微细加工技术的原理和应用研究. 机电产品开发与创新, 2008, 21(5): 191-192

[22] 汪国宝. 微机电系统设计与制造. 化学工业出版社, 2004.3

[23] 王立鼎, 罗怡. 中国 MEMS 的研究与开发进程. 仪表技术与传感器, 2003 (1): 1-3

[24] 汪培霞, 贾育秦. 从物理学发展看 MEMS 的跨学科研究. 物理与工程, 2005, 15(5): 39-50

[25] 冯伯儒. 光刻技术及其极限和发展前景. 光电工程, 1994, 21(2): 57-64

[26] 肖啸, 刘世杰. 光刻技术发展现状分析. 乐山师范学院学报, 2004, 19(5): 26-29

[27] 伊福廷, 张菊芳, 彭良强, 韩勇. 利用紫外光刻技术进行 SU8 胶的研究. 微 纳电子技术, 2003(7/8): 126-141

[28] 郑金红. 光刻胶的发展及应用. 精细与专用化学品, 2006, 14(16): 24-30

[29] 楼祺洪等. 用紫外准分子激光器进行接触式光刻的初步研究. 光学学报, 1986, 6(3): 274-276

[30] 李木军等. 光刻图形失真的部分相干光理论分析. 纳米技术与精密工程, 2007, 5(3): 224-229

[31] 徐文祥等. 步进投影数字光刻技术研究. 中国仪器仪表, 2008(12): 48-50

[32] 曾交龙, 高城, 袁建民. 极端远紫外光刻的等离子体光源及其光学性质研究 进展. 物理, 2007, 36(7): 537-542

[33] 林景全. 日本极紫外光刻. 光机电信息, 1997, 14(6): 13-15

[34] 田学红. 深度光刻计算机模拟及实验研究. 中国科学技术大学博士学位毕 业论文, 2003.6

[35] 彭力. 电子束掩模制造技术及其发展方向. 第十三届全国电子束、离子束、 光子束学术年会论文集, 2005.12: 109-112

[36] 胡广荣. 0.5 微米掩模制造曝光及显影工艺改进. 苏州大学硕士学位论文, 2007.11

[37] 掩膜版制造工艺: 迎接 45 和 32nm 节点新挑战, http://www.2ic.cn/html/60/t-329760.html

[38] 余国彬,姚汉民,胡松,陈兴俊. 深紫外深度光刻蚀在 LIGA 工艺中的应用. 微纳电子技术. 2004(4): 30-31

[39] LIU R, ZHENG J J, ZHOU H J, et al. A Generalized Dill Exposure Model for Negative Thick Photoresist. Proceedings of the 2007 International Conference on Information Acquisition, Jeju City, Korea, July 9-11, 2007: 285-291.

[40] http://cuervo2.eecs.berkeley.edu/

[41] Dill F H, Hornberger W P. Characterization of Positive Photoresist [J]. IEEE Trans. Electron Devices(S0018-9383), 1975, ED-22(7): 445-451

[42] W. G. Oldham, S. N. Nandgaonkar, et al. A general simulator for VLSI lithograpy and etching process: Part I-Application to projection lithography. IEEE Trans. Electron Devices, 1979, ED-26(4), p717-722

[43] http://www.2ic.cn/bbs/viewthread.php?action=printable&tid=243442

[44] http://www.eecs.berkeley.edu/IPRO/Software/Catalog/Description/splat.html

[45] 付萍等. 一种基于 SPLAT 的离轴照明成像算法的研究与实现. 微电子学, 2003, 33(3): 180-183

[46] 崔滨等. SOC 光刻仿真 3D 实时显示方法研究. 系统仿真学报, 2008, 20(23): 6383-6386

[47] C. A. Mack. PROLITH: A comprehensive optical lithography model. SPIE Vol. 538, 1985, p207-220

[48] http://www.enet.com.cn/enews/arss5500.shtml

[49] 范建兴, 冯伯儒等. 投影式光刻技术的计算机模拟研究. 微细加工技术, 1996(4): 23-31

[50] 唐波, 王效才等. 部分相干成像的模拟计算方法. 光电工程, 1996, 23(2): 20-27

[51] 石瑞英, 杜开瑛, 郭永康等. 光学邻近效应与掩模特征尺寸的关系. 光电工程, 1998, 25(6): 55-59

[52] http://www.enet.com.cn/enews/arss5500.shtml

[53] 王国雄, 史峥等. 用于光刻模拟的快速计算稀疏空间点光强的方法. 计算机 辅助图形设计与图形学学报, 2003, 15(7): 783-786

[54] 郑津津,陈有梅等. SU-8 紫外深度光刻的误差及修正.光学精密工程,2007, 15(12): 1926-1931

[55] 李晓光, 沈连婠等. 接近式光刻的角谱法仿真研究. 微细加工技术, 2007(4): 22-26

[56] 李木军, 沈连婠等. 接近式紫外光刻中图形失真的分析与预修正仿真. 机械 工程学报, 2008, 44(11): 69-74

[57] REN Yang, WANG Wan-jun. A numerical and experimental study on gap compensation and wavelength selection in UV-lithography of ultra-high aspect ratio SU-8 microstructures. Sensors and Actuators, B: Chemical(S0925-4005), 2005, 110(2): 279-288 [58] K. A. Valiev, I. V. Velikov, G. S. Volkov, and D. Yu. Zaroslov, The Coherence factors of excimer laser radiation in projection lithography, J. Vac. Sci. Technol. B 7(6), Nov/Dec 1989

[59] Richard A. Ferguson, Modeling and simulation of a deep-ultraviolet acid hardening resist[J]. J VAC. Sci. Technol B, 1990,8(6):1423

[60] Atsushi Sekiguchi, Mikio Kadoi, et al., Measuring System for Simulation Parameters of Chemical Amplification Resist Systems, Electronics and Communications in Japan, Part 2, Vol. 82, No. 2, 1999, Translated from Denshi Joho Tsushin Gakkai Ronbunshi, Vol. J81-C-II, No. 6, June 1998, pp. 542.549

[61] Yoshihisa Sensu, Atsushi Sekiguchi, et al., Modeling of Cross-linking Reactions for Negative-type Thick film Resists, Journal of Photoploymer Science and Technology, Vol.19,No.(2006)51-56 ©2006TAPJ

[62] Yoshihisa Sensu, Atsushi Sekiguchi, et al., Profile Simulation of SU-8 Thick
Film Resist, Journal of Photoploymer Science and Technology, Vol.18,
No.(2005)125-132 ©2005TAPJ

[63] K. L. Konnerth, F. H. Dill. In-situ measurement of dielectric thickness during etching or development pocesses, IEEE Trans. Electr. Dev., 1975, 22(7): 452

[64] D. J. Kim, W. G. Oldham, A. R. Neureuther. Characterization and modeling of a resist with built-in induction effect, Proc. Kodak Microelec Seminar, 1983, 112

[65] C. A. Mack. Development of positive photoresist. J. Electrochem. Soc., 1987, 134(1): 148

[66] C. A. Mack. New kinetic model for resist dissolution. J. Electrochem. Soc., 1992, 139(4): L35

[67] S. Robertson, E. Pavelcheck, W. Hoppe, et al. Improved notch model for resist dissolution in lithography simulation. Proceedings of SPIE, 2001, 4345(II): 912-920

[68] 刘世杰. 厚胶光刻技术研究. 四川大学硕士学位论文, 2004.5

[69] 肖啸. 厚层抗蚀剂成像特性研究. 四川大学硕士学位论文, 2003.5

[70] 唐雄贵, 郭永康, 杜惊雷, 刘世杰, 高福华. 基于角谱理论的厚层光刻胶衍 射光场研究. 光学学报, 2004, 24(12): 1692-1696

[71] 刘世杰, 杜惊雷, 段茜, 罗伯靓, 唐雄贵, 郭永康, 杜春雷. 厚层抗蚀剂曝光 模型及其参数测量. 半导体学报, 2005, 26(5): 1065-1071

[72] 刘世杰, 杜惊雷, 肖啸, 彭钦军, 刘驰, 郭永康. 厚层抗蚀剂显影轮廓分析. 光学与光电技术, 2003, 1(4): 43-46

[73] 段茜,姚欣,陈铭勇,马延琴,刘世杰,唐雄贵,杜惊雷.用改进曝光模型模 拟厚胶显影轮廓.光电工程,2006,33(4):50-54

[74] TANG X G, YANG X Y, GAO F H, GUO Y K. Simulation and analysis for microstructure profile of optical lithography based on SU-8 thick resist.Microelectronic Engneering. 2007(84): 1100-1103

[75] 卢伟. SU-8 胶接触式 UV 光刻模拟. 东南大学硕士学位论文, 2006.3

[76] 卢伟,黄庆安,李伟华,周再发.负性化学放大胶的光刻模型及模拟. 微电子学. 2005, 35(6): 568-576

[77] ZHOU Z F, HUANG Q A, LI W H. Photolithography Process Simulation for INtegrated Circuits and Microelectromechanical System Fabrication. CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS, 2006, 27(4): 705-711

[78] 冯明, 黄庆安, 李伟华, 周再发, 朱真. SU-8 胶在深紫外光源下的光强分布 模拟. 传感技术学报, 2006, 19(5): 1470-1476

[79] 周再发, 黄庆安, 李伟华, 卢伟. 光刻胶刻蚀过程模拟的三维动态 CA 模型. 中国科学 E 辑: 科学技术, 2007, 37(1): 32-42

[80] 冯明, 黄庆安, 李伟华, 周再发, 朱真. SU-8 胶深紫外光刻模拟. 半导体学报, 2007, 28(9): 1465-1470

[81] 朱真, 黄庆安, 李伟华, 周再发, 冯明. SU-8 胶曝光衍射效应的模拟及丙三 醇补偿方法. 半导体学报, 2007, 28(12): 2011-2017

[82] 周再发,黄庆安,李伟华,卢伟.光刻胶刻蚀过程模拟的元胞自动机算法研 究.中国集成电路. 2005 (74): 68-73

[83] 英特神斯公司在国内主页: http://www.intellisense.com.cn/, 英特神斯公司在 美国总部的主页: http://www.intellisense.com/

[84] 余国彬,姚汉民,胡松.高深宽比的微细加工技术——UV-LIGA 技术.第十 二届全国化合物半导体材料、微波器件和光电器件学术会议论文集,2002.10: 252-256

第2章 接近式光刻模拟理论

2.1. 引言

UV-LIGA 技术是现阶段微细加工技术中的一个重要手段,是近几年内的研究热门技术。它的核心技术之一就是通过深度光刻获得高深宽比的微结构 ^{[1][2][3][4]}。因此随着微细加工技术的不断发展,为了节省人力财力,提高加工效 率,缩短研发生产周期,人们对光刻过程的仿真逐渐重视起来。

很多因素,如光源的波长、照明方式、相干度等,掩模的利用及其类型,以 及成像方式等都会对光刻加工质量产生影响。UV-LIGA 技术中使用光线的是紫 外光,一般使用的是波长为 365 纳米的 i 线和波长为 405 纳米的 h 线等^[5]。掩模 采用一般采用对紫外线有良好遮蔽作用的铬金属膜覆在石英玻璃基板上加工而 成。成像方式采用既能保护掩模和光刻胶,又能获得良好高宽比的接近式曝光系 统。

光刻技术的基本工艺过程又根据其利用的光刻胶不同而有所差异。对于正 胶,光刻工艺一般分为基片预处理、甩胶、前烘、曝光、显影、后烘、后处理等, 而对于负胶,光刻工艺则一般分为基片预处理、甩胶、前烘、曝光、后烘、显影、 后处理等^[6]。在这些工艺过程中,尤以曝光、后烘和显影最为关键。可以看出正 负性胶在后烘及显影顺序上有所差异,关于正负胶的差异本文将在第三章进行详 细讨论,关于后烘模拟理论将在本章 2.4 节及第四章中讨论。

就目前的研究情况来看,光刻仿真的研究主要集中在曝光、后烘和显影三个 阶段。曝光阶段的仿真研究则主要集中在对胶表面曝光图形的纯光学仿真上 ^{[7][8][9][10]},而对光进入胶体内部引起的光化学反应研究不够深入^{[11][12]}。后烘阶段 的仿真有两个方面:一是主要针对正胶,讨论后烘带来的光刻胶内部热应力问题 ^{[13][14]},二是针对负胶,进行的后烘化学反应动力学研究以及讨论对整个光刻过 程的影响^{[15][16]}。而现阶段,后者的研究极为贫乏,是本文关注的重点。显影阶 段的模拟理论主要集中在显影速率模型的研究上,这类研究较为成熟,随着时代 的发展,已经推出了几代不断改进的理论模型^{[17][18][19][20][21]}。

本文后面的各种讨论都将针对基于 UV-LIGA 技术的接近式曝光方式,采用 近年来应用较为广泛的 SU-8 负性胶进行光刻仿真模拟研究,并鉴于负性光刻胶 的特殊性,着重于对光刻工艺中的曝光和后烘过程的模拟理论及其仿真建模进行 研究。本章将按各主要光刻工艺过程,分别介绍其主要工艺原理及模拟理论。

2.2. 接近式曝光模拟理论

如图 2-1 所示,接近式曝光过程中掩模及光刻胶间有一定的间隙(gap)存 在,因此接近式光刻技术既可以保护昂贵的掩模不受污染,又可以继承接触式光 刻的某些优点,可以加工高深宽比微结构,适应大规模生产需要等等。接近式光 刻模拟仿真研究正是由于这种光刻技术在工业生产中的优势而逐渐被重视。曝光 过程作为光刻工艺的重要组成部分,应当首先考虑,其结果直接影响其后续工艺 (后烘、显影、后处理等)的进行。虽然曝光过程只是整个光刻过程中的一个部 分,其实验结果无法单独提取,模型仿真结果无法和实验结果进行比对,但是如 果可以建立合适的曝光模型,不仅能够初步预见整个光刻过程之后的最终胶体轮 廓,也可以看出曝光阶段对整个光刻工艺的影响。



从目前已有的研究情况来看,接近式曝光模拟仿真研究主要可以分两类。第 一类是纯光学曝光模拟仿真研究。这类研究一般围绕接近式光刻中的显著缺陷一 一光学临近效应(Optical Proximity Effect)而展开^[22],其仿真对象主要是光场通 过掩模后产生衍射后在胶体表面形成的衍射图像,通过纯光学理论模拟胶表面衍 射光场分布,可以预计胶表面图形变形失真的情况,并且在进行胶体内部的深度 曝光模拟时一般忽略间隙的存在,即在接触式曝光的前提下去模拟深度曝光。这 样无需考虑其他,仍然可以通过简单的改变衍射距离而用纯光学理论近似地解决 问题^{[23][24][25]}。第二类则以早期的 Dill 经典曝光模型为代表,以考虑曝光中的光 化学反应为重点,加以光学衍射理论为辅助,从而使对整个曝光过程的模拟更加 完善^{[11][26][27]}。

2.2.1. 纯光学曝光模拟理论

由于纯光学曝光模拟研究中主要是针对接近式曝光中的临近效应(OPC)而 开展的,主要目标在模拟计算出胶表面的光强分布乃至光刻图案中的图形误差, 并旨在采用一定的矫正手段来减小这种加工误差的出现。实际上,纯光学的方法 并不能很好地模拟接近式曝光中胶体内部光刻图案的情况,因为忽略了曝光过程 中的光化学反应,将无法完整地刻画曝光过程。关于这种反应带来的影响将在第 三章中讨论。

2.2.1.1. 接近式曝光照明系统

照明系统是对一套包括各种光学器件的、对点光源或点扩展光源发出的光进 行空间和角分布处理后,获得对曝光工艺有利出射光的光学系统。这种照明系统 的设计一般在工业生产的光刻机中占有十分重要的地位。接近式曝光照明系统一 般由3个部分组成:光源、透镜系统和滤波器件。

对于接近式光刻,其光源主要有以下几种:汞灯、激光器和同步辐射光源。 而对 UV-LIGA 工艺采用的紫外光源,其来源比较单一,主要是汞灯和气体激光器,而汞灯相对激光器更容易制造,一般采用高压汞灯作为 UV-LIGA 加工工艺的光源^[28]。

从光源发出的光并非可以直接使用,让其入射到掩模表面,必须先进行空间 和频谱方面的调整。往往从光源发出的光是不满足光刻需要的,如由汞灯发出的 光不平行,照射强度不均会照成设计与加工间的误差;由激光器发出的光照射面 积太小,无法满足加工需要等。透镜系统作为曝光照明系统中的重要组成,主要 功能是对光源发出的光进行空间和角分布修改。它可以有很多设计方式,以适应 不同工艺需要。对于 UV-LIGA 中常用的汞灯光源来说,一般先用椭球镜汇聚光 源发出的出射光,然后通过透镜、聚光镜等对光束进行扩束及平行化处理,最后 用蝇眼透镜对光场强度进行均匀化处理,一般采用的是柯勒原理照明系统。图 2-2 显示了由中科院光电技术研究所研制的 URE-2000 系列紫外深度光刻机机中 曝光头结构示意图^[29]。虽然各光刻机中有的曝光头透镜系统设计的简单,有的 则比较复杂,但认为其一般都可用柯勒照明系统来描述,如图 2-3 所示。



图 2-2 URE-2000 光刻机曝光头机构及光路原理图



图 2-3 柯勒照明系统示意图

滤波器件主要是通过光吸收器件或滤波片等,对光束在频谱分布上加以调制,光刻需要的频谱得以保留,而对光刻无用甚至有害的频谱部分会被滤除。 UV-LIGA 中高压汞灯光源发出的紫外光经过相应的滤波片后,可以近似为单色 光处理。

为了得到均匀一致的入射光强,人们在滤波器件中设计了一种叫蝇眼透镜的 透镜组。这是根据苍蝇复眼的特殊构造和原理而发明出来的,最初用来安装在照 相机内用来拍摄高分辨率照片的。本课题组的陈有梅等人针对该特殊结构进行仿 真研究,研究了蝇眼透镜对照射在光刻胶表面衍射光场的影响。研究认为,蝇眼 透镜把整个光场分隔成与透镜组中的小透镜一样尺寸的部分,每一小部分光场最 后都会叠加到像面即掩模面上。这个过程实际上是一个先微分再积分的过程,因 此蝇眼透镜也被称为积分透镜^[30]。通过蝇眼透镜,可以认为柯勒照明系统中通 过聚光镜的入射光是由蝇眼透镜焦平面上各个光源发出的。这些点光源发可近似 视为单色点光源,且由于汞灯光源一般被认为是单色扩展非相干光源,所以由这 些电光源发出的光束之间可视为完全相干光。这样通过对每束光的衍射光场采用 衍射理论计算,然后将各计算出的衍射光场进行非相干叠加即可得出光刻胶表面 的光强分布。不同光刻系统中小透镜的排列方式各不相同,考虑如图 2-4 的蝇眼 透镜结构。由于蝇眼透镜结构的分布性,这些焦平面上的点光源的位置并非全部 在聚光镜的光轴上,91 个小透镜位置各不相同,焦平面上形成91 个位置各异的 点光源。如放在三维空间中考虑,每一个由焦平面点光源发出的光作为掩模表面 的入射光,其入射矢量一般有3 个分量,这样计算起来比较复杂。研究组通过旋 转坐标轴的方法(如图 2-5)将点光源发出的平面波置于某一坐标平面内,将掩 模入射矢量分量缩减为1个,方便了计算,且最后的光场只需要通过补偿由旋转 坐标轴带来的差量即可^[31]。



图 2-4 蝇眼透镜结构示意图 图 2-5 多点光源阵列及坐标旋转示意图

2.2.1.2. 接近式曝光模拟理论基础

众所周知,光波是电磁波,光的传播也符合麦克斯韦(Maxwell)电磁波方 程组的描述。各向同性介质中的麦克斯韦方程组为^{[32][33]}

$$\nabla \bullet B = 0 \tag{2.1}$$

$$\nabla \bullet D = \rho \tag{2.2}$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \tag{2.3}$$

$$\nabla \times H = j_0 + \frac{\partial D}{\partial t} \tag{2.4}$$

式中, B、D、E、H分别代表磁感应强度、电位移矢量、电场强度和磁场强度; ρ 为封闭曲面内的电荷密度; j_0 为积分闭合回路上的电流密度, $\frac{\partial D}{\partial t}$ 为位移电流密度。

电磁场的传播与其传播介质有关,在利用麦克斯韦方程处理光传播问题时, 还应加入反应物质在电磁场作用下的关系式,称物质方程。各向同性介质中的物 质方程有下述简单形式:

$$B = \mu H \tag{2.5}$$

$$D = \varepsilon E \tag{2.6}$$

$$j_0 = \sigma E \tag{2.7}$$

式中, σ 、 μ 、 ε 分别为电导率、磁导率和介电常数。

物质方程给出了光传播介质的电学和磁学性质,与麦克斯韦方程共同构成一 个完整的方程组,来描述电磁场在各项同性介质中传播的普遍规律。本论文涉及 到的光传播介质如真空和光刻胶,都以各向同性均匀介质来处理。

在研究纯光学传播问题时,不考虑所研究空间中存在或靠近辐射源的情况, 认为 j_0 电流密度和电荷密度 ρ 都为零。对麦克斯韦方程中式 2.3 和式 2.4 取旋度, 同时令 $v = 1/\sqrt{\epsilon \mu}$,可得

$$\nabla^2 E - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 B}{\partial t^2} = 0$$
 (2.8)

$$\nabla^2 B - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0$$
 (2.9)

以上两式具有一般的波动微分方程的形式,称为波动方程。一般认为,E和B实际上是带有传播方向的矢量,分别称为电矢量和磁矢量,这两个矢量共同组成了 光波矢量。可以看出,为了得到E和B的三个分量从矢量角度去求解麦克斯韦 方程将是一件非常麻烦的事情。实验研究表明,当衍射孔径比波长大得多,并且 观察点离衍射点不太近时,可以忽略麦克斯韦方程中电矢量和磁矢量的耦合关 心,将光矢量用标量代替后,也可以十分准确地描述光传播的物理过程。因此, 人们建立了一套以基尔霍夫衍射公式为代表的经典衍射理论,用复振幅来表示光
场的大小。这些理论根据入射光的相干度分为完全相干衍射理论以及部分相干衍 射理论,而角谱理论则作为一种特殊的标量衍射理论,通过在频域中的计算推导 衍射光场。

1. 完全相干衍射理论

如前所述,当光源发出的光经过透镜系统和滤波器件后,掩模表面上的入射 光为平面波。平面波的特点是等相位面为平面。在各向同性介质中,等相位面与 传播方向垂直。若令直角坐标系中光传播的方向余弦为(cosα, cosβ, cosγ), 平面波的复振幅被表示为:

$$U(x, y, z) = u(x, y, z) \exp[ik(x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma)]$$
(2.10)

式中, u为(x,y,z)点处的振幅, $k = 2\pi/\lambda$ 为波数, λ 为波长。对于平面波, 通 常将光束的传播方向设为z轴。这样,在给定平面z = z,上的光波复振幅表示为

$$U(x, y, z_1) = u_0(x, y, z_1) \exp[ik(x\cos\alpha + y\cos\beta + z_1\cos\gamma)]$$
(2.11)

由于 $\cos \gamma = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta}$ 是一个与x, y无关的复常数,上式可以写为:

$$U(x, y, z_1) = U_0(x, y, z_1) \exp[ik(x \cos \alpha + y \cos \beta)]$$
(2.12)

其中

$$U(x, y, z_1) = u_0(x, y, z_1) \exp(ikz_1 \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta})$$
(2.13)

如果不讨论该列光波与其相干波列的干涉问题时,常数相位因子通常被忽略,因 为它对该列光波的相对相位及强度分布不产生影响。式 2.13 即为常用的平面波 复振幅表达式。

将式 2.8 和 2.9 中的光矢量用标量 u(x, y, z, t) 表示, 可得光的标量波动方程:

$$\nabla^2 u - \frac{1}{\nu^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \tag{2.14}$$

式中, v 为光波的传播速率, t 为观察时刻, 为简单起见, 先在真空中讨论光的 传播, 用 c 取代 v 。

用复振幅来表示光波场,即

$$U(x, y, z, t) = U(x, y, z) \exp(-i2\pi v t)$$
(2.15)

将上式代入式 2.14,并用 c 取代 v, 可得

$$(\nabla^2 + k^2)U(x, y, z) = 0$$
(2.16)

式中 $k = 2\pi/\lambda$ 为波数, λ 为真空中光波长。该式称为亥姆霍兹(G.R. Helmholtz) 方程,可以认为是自由空间传播单色光波的复振幅必须满足的波动方程。

德国物理学家基尔霍夫(Kirchhoff)利用格林定理这一数学工具,并对衍射 屏的边界条件作出一系列假定,最终推导得^[34]

$$U(x, y, z) = \frac{1}{j\lambda} \iint_{\Sigma} U_0 \frac{\exp(ikr)}{r} \times K(\theta) dS$$
(2.17)

其中, *U*为衍射光入射面的光场复振幅分布; *U*₀为出射光场复振幅分布;为衍射光波长; *k*为波数; $j = \sqrt{-1}$; Σ 为衍射孔积分面; *r*为出射面上某点到入射面上考察点的距离; $K(\theta) = \frac{\cos(n, r_0) + 1}{2}$,称为倾斜因子; *n*为出射面衍射孔上的出射点外法线矢量; $\vec{r_0}$ 为出射面上某点到入射面上考察点的矢径; $\theta = \cos(\vec{n}, \vec{r_0})$,表示这两个向量的夹角,如图 2-6 所示。该式称为基尔霍夫衍射公式,是应用最为广泛的公式,本文将在第三章对其作进一步的研究。



图 2-6 标量衍射示意图

虽然由基尔霍夫公式计算出的结果与实际符合得非常好,但是,从理论上来 说该公式存在着很大的不严格性,这种不严格性主要来自于基尔霍夫对边界条件 的假设,从而导致由基尔霍夫公式在某些极限情况下推导出的结果与其假设自相 矛盾。为了解决这个矛盾,物理学家索莫菲(A.J.W. Sommerfeld)选择了与基 尔霍夫不同的格林函数,克服了基尔霍夫边界条件的自身矛盾。最后获得的瑞利 -索莫菲衍射公式仅在倾斜因子上与基尔霍夫公式有所不同,瑞利-索莫菲衍射公 式的表述为

$$U(x, y, z) = \frac{1}{j\lambda} \iint_{\Sigma} U_0 \frac{\exp(ikr)}{r} \times \cos(\vec{n}, \vec{r_0}) dS$$
(2.18)

对于单色平面波,归一化振幅为1,表示为

$$U_0(x, y, z) = \exp(jkz) \tag{2.19}$$

如果掩模振幅透射率函数用 *t*(*x*, *y*)表示,将上式代入基尔霍夫公式或瑞利-索莫菲衍射公式,则衍射光场在点 *P*(*x*, *y*, *z*)的复振幅为

$$U(x, y, z) = \frac{\exp(jkz)}{j\lambda} \iint_{\Sigma} t(x, y) \frac{\exp(ikr)}{r} \times K(\theta) dS$$
(2.20)

则P点光强可用其复振幅表示为:

$$I(P) = U(P) \times U^{\bullet}(P) \tag{2.21}$$

2. 部分相干衍射理论

如前所述,我们提到了点光源和单色光的概念,这些都只是一种在数学上理想化的抽象。对于一个严格的单色光场,其振幅不随时间变化,相位随时间作线性变化。光振动在时间上无限延续,传播的波列无限长,这自然是实际不存在的。同样,任何点光源也只是一种理想模型,实际并不能严格存在。任何光源都包含有一定的尺寸及波长范围,影响着光源出射光的相干性。与此对应,完全不相干的光源也并不存在,只是一种理想化模型。由于严格相干光和非相干光实际上都不可能得到,因此,通常光源的出射光实际上是存在于完全相干与完全不相干之间的中间状态,称为部分相干(Partial coherence)^{[35][36]}。

作为近代光学中最重要的定理之一的范西泰特-策尼克(Van Cittert-Zernike) 定理,通过讨论由准单色扩展的非相干光源在照明面产生的光场的互强度来计算 反映相干光场的传播。



图 2-7 范西泰特-策尼克定理的几何关系示意图

如图 2-7 所示, $\Sigma_1 和 \Sigma_2$ 平面相互平行,相距为*z*。 Σ_1 是一个准单色扩展光源,由它发出的非相干光照射到 Σ_2 面上,我们现在想求出 Σ_2 面上任意两点 Q_1 和 Q_2 的互强度:

$$J(Q_1, Q_2) = \iint_{\Sigma_2} I(S) \frac{\exp(j\bar{k}(r_2 - r_1))}{r_1 r_2} dS$$
(2.22)

其中*k*为扩展光源出射光的平均波数,*I(S)为S*点光强。复相干度由下式给出,它反映了复振幅间的相干程度。

$$j(Q_1, Q_2) = \frac{1}{\sqrt{I(Q_1)}\sqrt{I(Q_2)}} \iint_{\Sigma_2} I(S) \frac{\exp(j\bar{k}(r_2 - r_1))}{r_1 r_2} dS$$
(2.23)

式中

$$I(Q_1) = J(Q_1, Q_1) = \iint_{\Sigma_1} \frac{I(S)}{r_1^2} dS$$
 (2.24)

$$I(Q_2) = J(Q_2, Q_2) = \iint_{\Sigma_1} \frac{I(S)}{r_2^2} dS$$
(2.25)

将范西特-泽尼克定理推广到更普遍的情况,引入介质的透射函数 $K(S,Q_i,v)$,它代表一个位于S处的面元 $d\Sigma$ 的单色点光源在 Q_i 处引起的复扰动, 该单色点光源的频率为v,且具有单位强度和零相位。用 $j\lambda K(S,Q,v)$ 代替式(2.22) 中的 $\frac{\exp(j\bar{k}(r_i)}{r_i}$,以过渡到更一般的情况,得到霍普金斯公式表达式:

$$J(Q_1, Q_2) = \bar{\lambda}^2 \iint_{\Sigma_2} I(S) K(S, Q_1, \bar{\nu}) K^*(S, Q_2, \bar{\nu}) dS$$
(2.26)

相应的复相干度为

$$j(Q_1, Q_2) = \frac{\bar{\lambda}^2}{\sqrt{I(Q_1)}\sqrt{I(Q_2)}} \iint_{\Sigma_1} I(S)K(S, Q_1, \bar{\nu})K^*(S, Q_2, \bar{\nu})dS$$
(2.27)

我们知道,惠更斯原理认为光在传播过程中,任一时刻上的波阵面上的振动 都是由它前面的任一时刻的波阵面上各点的光振动来共同决定的。类似地,相干 照明下,光在传播路径上任一被照明面上的互强度,也应由它前面的任一照明面 上的各点对的互强度共同决定,如图 2-8 所示,且有^[37]

$$J(Q_1, Q_2) = \iiint_{\Sigma_1} \int J(P_1, P_2) \exp\left[j\overline{k}(r_2 - r_1)\right] \frac{K(\theta_1)}{\overline{\lambda}r_1} \frac{K(\theta_2)}{\overline{\lambda}r_2} dS_1 dS_2$$
(2.28)

这就是准单色近似下的互强度传播规律,式中的 $K(\theta_1)$ 和 $K(\theta_2)$ 为倾斜因子。让上式中的 $Q_1 \rightarrow Q_2$,则容易得到 Σ_2 面上的光强分布,即



图 2-8 互相干传播的几何关系示意图

3. 角谱理论

光从孔径平面出射,入射到观察平面上,两个平面上的光场分布都可以分别 被看成是很多不同方向传播的单色平面波分量的线性组合。这些平面波分量的传 播方向和空间频率相对应,如用平面波方向余弦的角度分量分别去表示其空间频 率分量,即用 $A(\xi,\eta) = A\left(\frac{\cos \alpha}{\lambda}, \frac{\cos \beta}{\lambda}\right)$ 来表示复振幅为U(x, y)对应的空间频率 谱。如孔径平面上的光场分布为 $U_0(x_0, y_0)$,观察平面上的光场分布为U(x, y), 且其对应的角谱分别为则 $A_{0}(\xi,\eta)$ 和 $A(\xi,\eta)$,则根据傅里叶变换定理,有:

$$U_{0}(x_{0}, y_{0}) = \int \int_{-\infty}^{+\infty} A_{0}(\xi, \eta) \exp[j2\pi(\xi x_{0} + \eta y_{0})] d\xi d\eta$$
(2.30)

$$U(x, y) = \int \int_{-\infty}^{\infty} A(\xi, \eta) \exp\left[j2\pi(\xi x + \eta y)\right] d\xi d\eta \qquad (2.31)$$

将式 2.31 代入式 2.16 的亥姆霍兹方程,并注意到其边界条件为 *z* = 0 处的角 谱为 *A*₀(*ξ*,*η*),求出该方程的解为:

$$A(\xi,\eta) = A_0(\xi,\eta) \exp(jkz\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta})$$
(2.32)

将 $A_0(\xi,\eta)$ 和 $A(\xi,\eta)$ 看作系统的输入和输出频谱,可得系统的传递函数为

$$H(\xi,\eta) = \frac{A(\xi,\eta)}{A_0(\xi,\eta)} = \exp\left(jkz\sqrt{1-(\lambda\xi)^2-(\lambda\eta)^2}\right)$$
(2.33)

前面讨论的光场波长 λ 为衍射光在折射率为 1 的真空中的波长,如果要研究 光束在均匀吸收介质中的衍射问题,则要将式中的波长变为随介质折射率变化的 实际波长,并引入复折射率的概念:

$$\hat{n} = n + j\kappa \tag{2.34}$$

且

$$\lambda = \lambda_0 / \hat{n} = \lambda_0 / (n + j\kappa)$$
(2.35)

其中 2 为光在介质中波长, 2₀ 为光在真空中的波长, ^î 为复折射率, n 为我们通 常意义上所说的介质折射率, x 为介质的消光系数。把式 2.35 代入传递函数式 2.33,通过推导运算后可得

$$H(\xi,\eta) = \exp(-\alpha_0 z) \exp(i z \beta_0)$$
(2.36)

其中α的数值与光波场的空间频率有关,表明光在均匀介质中传播时,对不同的 空间频率,衰减不同,可以称为频率衰减系数;而β则反映光波场频谱的相位变 化及滤波作用,它也是一个与空间频率有关的函数。

$$\alpha_{0} = \frac{2\pi}{\lambda_{0}} \frac{\sqrt{2n\kappa}}{\sqrt{n^{2} - \kappa^{2} - \lambda_{0}^{2}(\xi^{2} + \eta^{2}) + \sqrt{[n^{2} - \kappa^{2} - \lambda_{0}^{2}(\xi^{2} + \eta^{2})]^{2} + 4n^{2}\kappa^{2}}}}{\beta_{0} = \frac{2\pi}{\lambda_{0}} \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{n^{2} - \kappa^{2} - \lambda_{0}^{2}(\xi^{2} + \eta^{2}) + \sqrt{[n^{2} - \kappa^{2} - \lambda_{0}^{2}(\xi^{2} + \eta^{2})]^{2} + 4n^{2}\kappa^{2}}}}{(2.37)}$$

除此之外,我们还可以由菲涅尔公式确定光场在两种介质界面处透射振幅系 数的频域表示为^[38]

$$T(\xi,\eta) = \frac{2\sqrt{1-\lambda^2(\xi^2+\eta^2)}}{\sqrt{1-\lambda^2(\xi^2+\eta^2)}+\sqrt{n^2-\lambda^2(\xi^2+\eta^2)}}$$
(2.38)

透射率可表示为:

$$T = C_r \cdot \left| T(\xi, \eta) \right|^2 \tag{2.39}$$

其中C,为透射率因子,由光在空气中介电常数 ε_0 、磁导率 μ_0 以及光在介质中的 介电常数 ε_r 、磁导率 μ_r 或由介质对空气的相对介电常数 ε_{r0} 和相对磁导率 μ_{r0} 决定。

$$C_{r} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{r}}{\mu_{r}}} / \sqrt{\frac{\varepsilon_{0}}{\mu_{0}}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{r}}{\varepsilon_{0}}} / \sqrt{\frac{\mu_{r}}{\mu_{0}}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{r0}}{\mu_{r0}}}$$
(2.40)

用透射振幅系数频谱表示光在透过介质分界面后的光场为

$$A(\xi,\eta) = A_0(\xi,\eta)T(\xi,\eta)$$
(2.41)

此外,由菲涅尔公式还可得光在介质表面反射振幅系数的频域表示为[39]

$$R(\xi,\eta) = \frac{\sqrt{1 - \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)} - \sqrt{n^2 - \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)}}{\sqrt{1 - \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)} + \sqrt{n^2 - \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)}}$$
(2.42)

对于两侧的介质复折射率为n,和n,的广义界面,透射振幅系数为

$$T_{1,2}(\xi,\eta) = \frac{2n_1\sqrt{1-\lambda^2(\xi^2+\eta^2)}}{n_1\sqrt{1-\lambda^2(\xi^2+\eta^2)}+\sqrt{n_2^2-n_1^2\lambda^2(\xi^2+\eta^2)}}$$
(2.43)

透射率因子近似为

$$C_r \approx n_2/n_1 \tag{2.44}$$

反射振幅系数为

$$R_{1,2}(\xi,\eta) = \frac{n_1 \sqrt{1 - \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)} - \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)}}{n_1 \sqrt{1 - \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)} + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \lambda^2 (\xi^2 + \eta^2)}}$$
(2.45)

2.2.1.3. 接近式曝光表面误差修正

在接近式曝光工艺中,曝光表面图形会产生某些变形,其加工图形存在着明 显的加工误差。特别是在图形相互临近的部位,由于光波间的干涉和衍射作用明 显,图形偏差会相对较大。例如,在线段顶端和图形拐角的地方,这种偏差就比 较明显,而这些部位又往往是对电路性能或微结构精度影响起关键作用的地方。 这种由于光波的干涉、衍射作用而使光刻加工图形与掩模设计图形产生偏差的现 象称为光学临近效应(OPE: Optical Proximity Effect)^{[40][41]}。在接近式光刻工艺 中,光学邻近效应是不可避免的,必须采取相应的措施尽可能地减小从掩模图形 与到曝光图形的变形与偏差。

目前工业界普遍采用的方法是在传统的物理设计与掩模制造中加入成品率 以驱动对掩模版的修正,即通过改变掩模板上的图形结构或形状以及图形透光相 位来弥补接近式曝光中光学临近效应带来的加工误差。这种掩模板图形的补偿机 制称作光刻增强技术(RET: Reticle Enhancement Technology),用该技术矫正后 的光刻图形一般与预期设计图形基本符合。对于接近式光刻来说,光刻增强技术 主要指的是光学临近效应矫正(OPC: Optical Proximity Correction),通常针对掩 模分为传统透射掩模 OPC 和相位转移掩模(PSM: Phase Shift Mask) OPC^{[42][43][44][45]}。

对传统透射掩模进行矫正的方法又一般分为两类:一是基于规则的方法,即 通过预先建立矫正数据库,实际处理中通过查找数据库便可以迅速得到矫正方法 及数据。这种方法速度快,实现方便,便于处理大型掩模版图如 IC 工艺中的大 规模集成电路版图;二是基于模型的方法,即通过选择适当的光学计算模型,在 实际处理中利用光学模型模拟曝光成像机制,实现对掩模板的校正。这种方法需 要占用较多的时间和空间,但能获得精确度较高的矫正结果。中国科学技术大学 的陈有梅等人用标量衍射理论模拟了接近式曝光中胶表面的光场分布,并通过基 于模型的方法调整光刻掩模图形结构,对曝光图形误差进行矫正,获得了良好的 效果(如图 2-9)^[46]。清华大学的蔡懿慈课题组讨论了掩模版图形修正范围的选 择规则,并用基于模型的 OPC 矫正方法对掩模版图形进行矫正,设计并实现了 一种 MR-OPC 矫正系统,既保证了系统处理的质量和效率,又能够获得良好的 矫正精度(如图 2-10)^{[47][48]}。



图 2-9 陈有梅等人的 OPC 修正结果



图 2-10 清华大学课题组的 MR-OPC 修正结果

如前所述,掩模也是利用光刻工艺制造出来的,在传统的光刻工艺中,掩模的结构只分为透光和不透光两种,这种只有黑白两种灰度的掩模称为透射性或振幅型掩模。随着加工精度的需要和光刻技术的发展,人们在传统掩模的基础上发展了相移掩模技术^[49]。所谓相移掩模,就是在传统的透射掩模上,选择性地给一些透光图形加上一层适当厚度的透明膜层,称为相移层。通过适当选择相移层的材料,使得被涂覆相移层的区域与相邻未涂层的区域之间有 180°或其奇数倍的相位差^{[50][51]}。此外再辅之以透过率的适当变化,可以改变相邻图形区域衍射光束间的干涉状态。通过相邻透光区光场之间的干涉,可以减小整个光场分布中的暗区光强,增大亮区光强,从而提高了光刻对比度,改善了加工图形的分辨率。用相移掩模进行曝光,还可以利用相邻图形间的相位梯度使光场反向反转及产生零场区,提高了图形的陡直度,对比度和分辨率。由于亮区光强分布变得相对集中,因此也改善了曝光剂量的容忍度^[52]。

相移掩模的出现使得通过对掩模结构改进来光学临近效应矫正的手段更为 主宫,利用相移掩模进行铄正的技术也与相移掩模本身制造技术一起正处于研究 和发展中。中科院光电技术研究所的冯伯儒等人,通过分析相移掩模对衍射光场 分布的影响,研究出了适用于光学临近效应矫正的相移掩模,并获得了良好的矫 正结果^{[52][53]}。虽然相移掩模在光学临近效应矫正方面已显示出一定的潜力,但 由于相移掩模本身的制造技术的限制以及相位引入带来的计算量增加使得该技 术需要进一步的发展与研究。现阶段在光学临近效应矫正方面研究更多的是灰阶 掩模或称灰度掩模、衰减相移。灰阶掩模技术是一种介于传统掩模和相移掩模之 间的技术。这种掩模不考虑邻域之间的相位差,而是利用掩模上铬膜厚度(以紫 外掩模版为例)的不同则吸收率不同的原理来实现对光场振幅透射率的控制。随 着掩模加工技术的深入,掩模加工精度越来越高,使得掩模也可以像加工 IC 工 艺中的凹凸点阵一般获得具有不同透过率分布的灰阶阵列,这类技术称为灰阶编 码掩模技术^[54]。通过控制灰阶编码掩模各位置点元上的灰阶状态,改变灰阶编 码的排列方式,可以减小邻近效应带来的衍射误差,获得对曝光精度有利的曝光 光场。如对二元灰阶掩模(或称交替型灰阶掩模)有透射(灰阶为1)和不透射 (灰阶为2),对6%衰减型灰阶掩模有三种灰阶状态(灰阶分别为0,0.245和1)。 四川大学的杜惊雷课题组用灰阶编码的二元掩模代替灰阶掩模实现精细校正,讨 论了灰阶编码掩模与灰阶掩模的等效关系,给出了灰阶编码掩模实现光学邻近效 应校正的模拟结果[55][56]。中国科学技术大学的李晓光、李木军等人则采用遗传 算法对二元灰阶掩模进行处理,获得了临近光学效应矫正后的灰阶编码[57][58]。 近年来,随着空间光调制器 (DMD: Digital Micro mirror Device) 技术的引用,

编码掩模的设计方法更为丰富多样,掩模设计将更具实时性和灵活性^{[59][60]}。

2.2.2.光化学曝光模拟理论

不论是正性光刻胶还是负性光刻胶曝光,不论是采用哪种曝光形式,只要是 考虑深层曝光问题时都无法与光化学反应理论脱离关系。只用纯光学理论建立的 曝光模型并不能完全反应曝光过程的真实情况,故而本文并不认为仅用纯光学理 论即可建立深层曝光模型。实际上,在曝光过程中,光场的照射会使光刻胶内部 发生组成成分变化,而这种变化反过来又会影响光场在胶内部的传播及其分布。

因此曝光过程应该是光学传播过程和光化学反应的交叉融合的过程,要完整地解释该过程则需要涉及光化学反应及其反应动力学方面的理论知识。这类光化学曝光理论模型以 Dill 模型为代表,通过不断改进和完善,被越来越多的人所认同作 深层曝光理论模型的主流^{[61][62][63]}。

2.2.2.1. Dill 经典曝光模型简介

DILL 模型是 1975 年由 Frederick H. DILL 提出的一种经典曝光模型^[11]。Dill 认为,当光照到光刻胶内部时,其一部分光照被不参加光化学反应的胶体成分所 吸收,但更多的光照是被参加光化学反应的胶体成分吸收了,而这种光化学反应 导致胶体内部化学成分的变化,进而使得光照分布发生改变,这样改变的光照又 再次影响胶体内部化学成分的分布。也就是说,曝光过程实际上就是光化学反应 与光照随胶体化学成分改变而变化,两个过程互相耦合起来的一种过程。Dill 用 两个式子表示了这种过程:

$$\frac{\partial I(z,t)}{\partial z} = -I(z,t)[AM(z,t) + B]$$
(2.46)

$$\frac{\partial M(z,t)}{\partial t} = -I(z,t)M(z,t)]C$$
(2.47)

其中: z 为从胶表面垂直向下的深度; t 表示已曝光的时间; I 和 M 分别表示在该 深度该时刻的光照分布和光致化合物 PAC(Photo-active Compound)的归一化浓度 分布; A、B、C 为光刻胶的曝光参数,它们可以通过对光透过率曲线的测量结 合其推导的公式算得^[11]。

通过某些已知的边界条件即可求解这个方程组,当然其中某些函数及参数还 要借助于实验手段来获得。关于 Dill 模型的详细介绍将在本文第三章中进行。

2.2.2.2. Dill 模型的重要意义

虽然 Dill 模型只是针对正性薄胶的, Dill 也指出用其模型模拟负胶时有一定 的局限性^[11]。但 Dill 首次建立了一种能近似反应光化学反应动力学本质的数学 模型。它引导人们从光刻胶的组成成分出发,通过了解光刻胶的组成以及光刻胶 在曝光过程中的化学反应过程,从化学反应动力学角度出发建立合适的曝光模 型。这使人们从单纯的光学衍射理论研究曝光过程到相对完整地用光学结合光化 学的方法描述曝光过程。

其实最初 Dill 所在的研究小组在研究光刻仿真一年后,该小组中的安迪.纳 鲁特转入伯克利大学当教授,并与另一个教授比尔一起于 1979 年推出了早期的 SAMPLE 光刻仿真软件。该软件在最初 Dill 的仿真模型中加入了部分相干成像 理论,并利用单元算法取代线性计算,从而使商业性软件开始在工业界应用于整 个光刻领域。至于后来的 PROLITH 系列软件等也都是在早期光刻仿真模型的基 础上不断改进,不断完善,逐渐拉开了光刻仿真研究的大幕。可以说,Dill 经典 曝光模型是各种光刻模拟理论及成型商业软件的鼻祖,它的出现在 MEMS 领域 中起着无可代替的作用。

2.3. 后烘模拟理论

后烘过程对于正胶和负胶的意义并不相同。对正胶而言,后烘工艺一般在显 影之后,其作用主要是通过烘烤去除基片及光刻胶上残留的显影液,另外还起着 坚实胶体与基片附着力的作用。对于负胶而言,后烘工艺在显影之后,其作用除 了坚膜之外,更主要的是让曝光过程中进行的光化学反应在加热条件下更加充 分。

2.3.1.化学放大胶

化学放大胶(CAR: Chemical Amplified Resist)是指光刻胶曝光过程中光化 学反应会产生某种化合物,该化合物又作为光化学反应某一环的催化剂,促使其 加快进行,这种效应称为"化学放大"^{[64][65]}。化学放大胶的曝光速度非常快, 对短波长光源具有很好的光学敏感性,易于加工高深宽比的微结构,具有较高的 对比度和分辨率。随着微细加工技术的深入,化学放大胶技术发展很快,成为下 一代光刻技术中极具发展潜力的一种光学记录介质^{[66][67]}。本文将要讨论的 SU-8 胶就属于这种化学放大胶,其化学放大的作用在后烘阶段尤为明显。

2.3.2.后烘反应动力学模型

对于光学放大胶,后烘过程通常考虑较多的是所谓"化学放大"的化学反应 机理,这主要涉及的理论是后烘反应动力学。Richard A. Ferguson 等于 1990 年提 出的后烘反应动力学模型是经典的后烘模拟理论,是大多数后烘反应仿真研究的

基础^[15]。Ferguson 后烘反应动力学模型是在 Dill 曝光模型的基础上加以研究, 通过对光刻胶在后烘中的反应机理,建立的一种经验模型。该模型中主要涉及了 负性光学放大胶在后烘中光致酸浓度和已激发交联位浓度这两个化学量,它能近 似反映这两个化学量在后烘过程中的化学变化,并指出这两个化学量随时间的变 化也是互相耦合的过程。

在 Ferguson 后烘反应动力学模型被提出之后,人们又在其基础上加以改进, 认为光致酸的浓度的变化不仅与其本身浓度、已激发交联位浓度有关,还与光致 酸的扩散过程有关,逐渐形成更完善的所谓"后烘反应-扩散"模型^[68]。这样, 后烘过程就不单单是化学反应的过程,还要涉及传质传热学方面的理论知识。关 于 Ferguson 后烘反应动力学模型以及改进的反应-扩散模型将在第四章中详细讨 论。

2.4. 显影速率模型

与曝光和后烘过程相比,显影过程则显得比较单调。显影过程就是在通过显 影液的腐蚀作用,对曝光后烘工艺之后的光刻胶图形进行溶解或保留。它是一个 纯粹的化学反应过程。如果能够通过曝光和显影模型的模拟,计算出胶体内部各 组成成分的分布,若进一步考虑显影过程中光刻胶的溶解速率的变化,再加入适 当的数值模拟后,则可将光刻胶显影后的图案轮廓绘出,为整个光刻工艺提供参 考。

显影模型随着时代的发展,从早期的 Dill^[69]、Kim^[70]模型,到 Mack^[71]、加 强型 Mack^[72]模型,以及 Notch、加强型 Notch 模型^[73],显影模型的研究正逐渐 深入。

Dill 模型是针对正胶考虑的模型, 其考察的主要胶体成分化学量是光致化合物的浓度。Dill 建立了一个显影速率仅与光致化合物浓度 *M* 有关的经验模型:

$$R(M) = \exp(E_1 + E_2 M + E_3 M^2)$$
(2.48)

其中三个参数 *E*₁、 *E*₂ 及 *E*₃ 的值通过试验曲线拟合得到。这种方法的得到的显影 速率在通常并不准确,而且三个参数并无实际物理意义。Dill 模型模拟出的显影 速率曲线在 *M* 值较小的部分并不准确。

Kim 等人在 1984 年提出另一模型来解决 Dill 显影模型中显影速率在某些情况不准确的问题。Kim 模型中,考虑到了光刻胶深度对显影速率的影响,胶体内部显影速率和光刻胶表面显影速率被分开讨论,辅助以适当的参数和实验数据趋势,得到了拥有 6 个未知数的显影速率经验式。

Mack 等提出用反应动力学模式描述显影机制,在此模型中,所有参数都有 其实际物理意义。Mack 模型分别模拟了三个过程中的化学行为:显影液分子扩 散至光刻胶表面,显影液分子与光刻胶发生化学反应及反应后产物又扩散回显影 液中。模型中采用了阈值的概念,只包含3个未知数。这种模型在对正胶显影过 程模拟时,在*M* 值较大的区域拟合曲线与实验值偏差较大。加强型 Mack 模型 是在 Mack 模型的基础上增加了剩余光致化合物对显影速率的抑制影响,相比于 Mack 模型,该模型可以建立较为符合实验数据的显影速率曲线。

Notch 模型由 Mack 和 Arthur 等人提出,以 Mack 模型为基础,加上胶表面 开口宽度对显影速率的影响,以描述某些特殊行为的材料,如 Ultra-i123。该模 型的一般表示形式为

$$R(M) = R_{\max} (1-M)^n \frac{(\alpha+1)(1-M)^{n_notch}}{\alpha+(1-M)^{n_notch}} + R_{\min}$$
(2.49)

其中

$$\alpha = \frac{n - notch + 1}{n - notch - 1} (1 - M_{th_notch})^{n_notch}$$
(2.50)

式中 n 是显影液的选择性参数,而 n_notch 是开口的选择性参数, M_{th_notch} 是开口存在时光致化合物的相对浓度。而对于某些具有高分辨率的光刻胶如 Novolac/DNQ,加强型 Notch 模型能够对其进行较高精度地描述。加强型 Notch 模型的一般形式为

$$R_{Notch}(M) = R_{\max}(1-M)^{n} \frac{(\alpha+1)(1-M)^{n} - notch}{\alpha+(1-M)^{n} - notch} + R_{\min}\left[\frac{S}{S^{M}}\right] \left[1 - \frac{(\alpha+1)(1-M)^{n} - notch}{\alpha+(1-M)^{n} - notch}\right]^{2}$$
(2.51)

其中 $\alpha = \frac{n_notch+1}{n_notch-1} (1 - M_{th_notch})^{n_notch}$ 。该模型比 Notch 模型多了参数S,可以

通过与实验曲线拟合得到。

在得到显影速率模型之后,用刻蚀模型可以模拟出最后的光刻模型。目前刻 蚀过程的模拟主要有串模型(String)、元胞去除(Cell Remove)、光线追踪 (Ray-tracing)和元胞自动机(Cellular Automata)四种模型^{[74][75][76][77]}。这四种 模型各有其优缺点: String 模型计算速度快,需要内存少,但稳定性不够好; Cell Remove 模型稳定性好,但计算速度慢; Ray-tracing 模型计算速度快,需要内存 少,但模型稳定性对初始射线的选择有依赖; Cellular Automata 模型则对工艺过 程中多界面处理的模拟方面有优势^{[78][79]}。

至此,光刻工艺中的主要工艺过程中的主流模拟理论介绍完毕,后面将以这 些理论为基础,针对曝光和后烘过程提出新型仿真模型,用更加完善的模拟理论 去适应不断进步的光刻工艺。

本章参考文献

[1] Ehrfeld w, Lehr H. Deep x-ray lithography for the production of three-dimensional microstructures from metals, polymers and ceramics. Radiation Physics and Chemistry. Volume:45, Issue:3, March,1995: 349-365.s

[2] Khan Malek, Chantal G. Su8 Resist for low-cost X-ray patterning of high-resolution, high-aspect-ratio MEMS. Microelectronics Journal. Volume:33,Issue:1-2,January 2,2002, PP.101-105

[3] LaBianca N ,Gelorme J D. high aspect ratio resist for thick film applications.SPIE , 1995, 2438 :846~852.

[4] 李雄. UV-LIGA 技术光刻工艺的研究. 华中科技大学硕士论文, 2004.3

[5] 孙再吉.i 线光学光刻技术及其发展潜力. 固体电子学研究与进展, 1999, 19(4): 438-447

[6] 电子胶水学习指南, http://blog.21ic.com/user1/5470/index.html

[7] 郑津津, 陈有梅, 周洪军, 田杨超, 刘刚, 李晓光, 沈连婠. SU-8 紫外深度光刻的误差及修正. 2007 中德双边高级专家 X 射线光学研讨会, 2007

[8] 李晓光. 紫外光刻仿真及掩模优化设计研究. 中国科学技术大学博士论文, 2007.5

[9] 李木军, 沈连婠等. 接近式紫外光刻中图形失真的分析与预修正仿真. 机械 工程学报, 2008, 44(11): 69-74

[10] REN Yang, WANG Wan-jun. A numerical and experimental study on gap compensation and wavelength selection in UV-lithography of ultra-high aspect ratio SU-8 microstructures. Sensors and Actuators, B: Chemical(S0925-4005), 2005, 110(2): 279-288

[11] F. H. Dill, W. P. Hornberger, P. S. Hauge, J. M. Shaw. Characterization of Positive Photoresist. IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES, 1975, ED22(7): 445-452 [12] 刘世杰, 杜惊雷, 段茜, 罗伯靓, 唐雄贵, 郭永康. 厚层抗蚀剂曝光模型及 其参数测量. 半导体学报, 2005, 26(5): 1065-1071

[13] 杜立群,朱神渺. 微机电系统中 SU8 厚光刻胶的内应力研究. 光学精密工程, 2007,15(9): 1377-1382

[14] 杜立群,朱神渺,喻立川. 后烘温度对 SU8 光刻胶热溶胀性及内应力的影响. 光学精密工程,2008,16(3):500-504

[15] Richard A. Ferguson, Modeling and simulation of a deep-ultraviolet acid hardening resist[J]. J VAC. Sci. Technol B, 1990,8(6):1423-1427

[16] 卢伟, 黄庆安, 李伟华, 周再发. 负性化学放大胶的光刻模型及模拟. 微电 子学. 2005, 35(6): 568-576

[17] K. L. Konnerth, F. H. Dill. In-situ measurement of dielectric thickness during etching or development pocesses, IEEE Trans. Electr. Dev., 1975, 22(7): 452

[18] D. J. Kim, W. G. Oldham, A. R. Neureuther. Characterization and modeling of a resist with built-in induction effect, Proc. Kodak Microelec Seminar, 1983, 112

[19] C. A. Mack. Development of positive photoresist. J. Electrochem. Soc., 1987, 134(1): 148

[20] C. A. Mack. New kinetic model for resist dissolution. J. Electrochem. Soc., 1992, 139(4): L35

[21] S. Robertson, E. Pavelcheck, W. Hoppe, et al. Improved notch model for resist dissolution in lithography simulation. Proceedings of SPIE, 2001, 4345(II): 912-920

[22] 蔡懿慈,周强,洪先龙,石蕊,王旸.光学邻近效应矫正(OPC)技术及其应用. 中国科学 E 辑, 2007, 37(12): 1607-1618

[23] 郑津津, 陈有梅等. SU-8 紫外深度光刻的误差及修正.光学精密工程, 2007, 15(12): 1926-1931

[24] 李晓光, 沈连婠等. 接近式光刻的角谱法仿真研究. 微细加工技术, 2007(4): 22-26

[25] 李木军. 接近式光刻仿真研究. 中国科学技术大学博士论文, 2007.3

[26] 刘世杰, 杜惊雷, 段茜, 罗伯靓, 唐雄贵, 郭永康, 杜春雷. 厚层抗蚀剂曝光 模型及其参数测量. 半导体学报, 2005, 26(5): 1065-1071

[27] 段茜,姚欣,陈铭勇,马延琴,刘世杰,唐雄贵,杜惊雷.用改进曝光模型模 拟厚胶显影轮廓.光电工程,2006,33(4):50-54

[28] 张帅, 贾育秦. MEMS 技术的研究现状和新进展. 现代制造工程, 2005(9): 109-112

[29] 中国科学院光电技术研究所. URE-2000 系列紫外深度光刻机. 中国集成电路, 2008,17(4): 20-21

[30] LIN D J, ZHOU C X, YIN Y. Construction principle of i-line illumination optical system and simulation calculation of the intensity distribution.Microfabrication Technology, 1999(4): 24-27

[31] 陈有梅,郑津津,周洪军,沈连婠,张自军.接近式光刻衍射光场的快速计 算机模拟.中国科学技术大学学报,2007,37(1):30-34

[32] 郁道银,谈恒英.工程光学.北京:机械工业出版社,1999

[33] Marie May, Anne-Marie Cazabat. Optique. DUNOD. Paris, 1996

[34] 李俊昌. 激光的衍射及热作用计算. 北京: 科学出版社, 2002.3

[35] Max Born and Emil Wolf. Principles of Optics[M]. 7th(expanded) edition.United States of America: Cambridge University Press, 1999

[36] 谢建平,明海,王沛.近代光学基础.北京:高等教育出版杜,2006

[37] 苏显渝,李继陶. 信息光学. 北京: 科学出版社, 1999.9

[38] 波恩(M. Born),沃尔夫(E. Wolf).光学原理.北京:科学出版社,1985

[39] 唐雄贵, 郭永康, 杜惊雷等. 基于角谱理论的厚层光刻胶衍射光场研究. 光 学学报, 2004, 24(12): 1691-1696

[40] Chen J F, Laidig T L, Wampler K E, et al. Practical method for full-chip optical proximity correction. SPIE, 1997, 3051: 790-803

[41] Dolainsky D, Maurer W. Application of a simple resist model to fast optical proximity correction. SPIE, 1997, 3051: 774-780

[42] Berman P, Kahng A B, Vidhani D, et al. Optimal phase conflict removal for layout of dark field alternating phase shifting masks. IEEE Trans Computer-aided Des Integr Circuits Syst, 2000, 19(2): 175-187

[43] Liu Y, Zakhor A. Binary and phase shifting mask design for optical lithography.IEEE Trans Semicond Manuf, 1992, 5(2): 138-152

[44] Liu Y, Zakhor A, Zuniga M A. Computer-aided phase shift mask design with reduced complexity. IEEE Trans Semicond Manuf, 1996, 9(2): 170-181

[45] Moniwa A, Terasawa T, Nakajo K, et al. Heuristic method for phase-conflict minimization in automatic phase-shift mask design. Jpn J Appl Phys, 1995, 34: 6584—6589

[46] 陈有梅. 紫外深度光刻的计算机模拟及误差修正. 中国科学技术大学硕士 论文, 2007.5

[47] 石蕊, 蔡懿慈, 洪先龙, 吴为民, 杨长旗. 基于规则的光学邻近矫正中规则 的相关处理. 半导体学报, 2002, 23(7): 701-706

[48] 蔡懿慈,周强,洪先龙,石蕊,王旸.光学邻近效应矫正(OPC)技术及其应用. 中国科学 E 辑, 2007, 37(12): 1607-1618

[49] 冯伯儒. 什么是相移掩模. 光的世界, 1992, 10(3): 10-11

[50] 冯伯儒, 陈宝钦. 相移掩模的制作. 微细加工技术, 1997(1): 8-16

[51] 冯伯儒, 张锦, 陈宝钦, 侯德胜, 苏平. 亚分辨图形相移掩模的制作方法. 微细加工技术, 2001(2): 14-19

[52] 蔡懿慈,周强,洪先龙,石蕊,王旸. 相移掩模和光学邻近效应校正光刻技术. 光电工程,2001,28(1):1-5

[53] 沈锋, 冯伯儒, 孙国良. 相移掩模对曝光图形空间像光强分布影响的计算机 模拟. 光电工程, 2001, 28(1): 1-5

[54] 谌廷政. 微光学器件灰度掩模制作及应用技术的研究. 国防科学技术大学 博士学位论文, 2004.9

[55] 杜惊雷,黄奇忠,姚军,粟敬钦,郭永康,崔铮,沈锋. 灰阶掩模实现光学邻 近校正及计算模拟研究.光学学报,1999(5):698-702

[56] 杜惊雷, 粟敬钦, 罗克俭, 张怡霄, 郭永康, 崔铮, 周崇喜. 用灰阶编码掩模 实现邻近效应精细校正的研究. 光学学报, 2000(4): 518-524

[57] 李晓光, 沈连婠, 李木军, 郑津津, 张四海. 基于遗传算法的接近式紫外光刻中掩模补偿优化研究. 系统仿真学报, 2008, 20(17): 4601-4604

[58] 李木军, 沈连婠, 李晓光, 赵玮, 刘雳霆, 郑津津. 接近式紫外光刻中图形 失真的分析与预修正仿真. 机械工程学报, 2008, 44(11): 69-74

[59] 刘驰. DMD 用于数字光刻成像研究. 四川大学硕士学位论文, 2005.6

[60] 白鹭 高益庆. 基于 DMD 的数字灰阶编码掩模的设计. 光电技术应用, 2007, 22(4): 35-37

[61] LIU R, ZHENG J J, ZHOU H J, et al. A Generalized Dill Exposure Model for Negative Thick Photoresist. Proceedings of the 2007 International Conference on Information Acquisition, Jeju City, Korea, July 9-11, 2007: 285-291.

[62] 肖啸. 厚层抗蚀剂成像特性研究. 四川大学硕士学位论文, 2003.5

[63] 卢伟. SU-8 胶接触式 UV 光刻模拟. 东南大学硕士学位论文, 2006.3

[64] J. M. J. Frechet, H. Ito, C. G. Willson. Proc Microcircuit Eng, 1982, 82: 260-261

[65] H. Ito, C. G. Willson, J. M. J. Frechet. Proc of 1982 Symposium on VLSI Technology, 1982: 86-87

[66] 田丰, 韩立, 杨忠山. 化学放大胶在电子束光刻技术中的应用. 微纳电子技术, 2003, 40(12): 43-46

[67] 王春伟, 李弘, 朱晓夏. 化学放大光刻胶高分子材料研究进展. 高分子通报, 2005(2): 70-80

[68] L. Capodieci, A Krasnoperova, F Cerrina, et al. New models for the simulation of post-exposure bake of chemically amplified resist. Proc. SPIE, 2003, 5039: 1132-1142

[69] K. L. Konnerth, F. H. Dill. In-situ measurement of dielectric thickness during etching or development pocesses, IEEE Trans. Electr. Dev., 1975, 22(7): 452

[70] D. J. Kim, W. G. Oldham, A. R. Neureuther. Characterization and modeling of a resist with built-in induction effect, Proc. Kodak Microelec Seminar, 1983, 112

[71] C. A. Mack. Development of positive photoresist. J. Electrochem. Soc., 1987, 134(1): 148

[72] C. A. Mack. New kinetic model for resist dissolution. J. Electrochem. Soc., 1992, 139(4): L35

[73] S. Robertson, E. Pavelcheck, W. Hoppe, et al. Improved notch model for resist dissolution in lithography simulation. Proceedings of SPIE, 2001, 4345(II): 912-920

[74] R. E. Jewett, P. I. Hagouel, A. R. Neureuther, et al. Line-profile resist development simulation techniques. Polymer Engineering Science, 1977, 17(6): 381-384

[75] P. I. Hagouel, A. R. Neureuther. Modeling of X-ray resist for high-resolution lithography. ACS Organic Coating and Plastics Preprints, 1975, 35(2): 258-265

[76] F. H. Dill, A. R. Neureuther, J. A. Tuttle, et al. Modeling projection printing of positive photoresist. IEEE Transactions on Electron Devices, 1975, ED-22(9): 456-464

[77] I. Karafyllidis, A. Thanailakis. Simulation of two-dimensional photoresist etching process in integrated circuit fabrication using cellular automata. Modeling Simulation and Material Science Engneering, 1995, 3(5): 629-642

[78] 周再发, 黄庆安, 李伟华, 卢伟. 用于光刻胶刻蚀过程模拟的二维动态 CA 模型. 电子学报, 2006(5): 1132-1142

[79]周再发,黄庆安,李伟华,卢伟.光刻胶刻蚀过程模拟的元胞自动机算法研究.中国集成电路.2005 (74): 68-73

第3章 SU-8 接近式深度光刻曝光理论模型 的建立与计算

如前所述,UV-LIGA 技术是微细加工技术中的热门工艺手段,SU-8 胶是 UV-LIGA 中常用的负性光刻胶。本文以UV-LIGA 中的接近式紫外光刻作为模拟 仿真对象,希望建立能够反映光刻过程中各加工工艺的加工误差,以指导实际加 工工艺过程。而曝光过程作为光刻工艺中的重中之中,首先应当加以考虑。接近 式曝光过程一般分为两个阶段:1.光场通过掩模图形到达胶体表面,形成胶表 面曝光图形。由于光学临近效应的存在,使得光刻图形产生误差。现阶段对该光 刻误差的矫正手段大多集中在对掩模图形的预先修正方面,而灰阶编码掩模的出 现使得掩模图形的设计变得更加方便易行。2.光场在胶体内的传播,形成胶体 内部深层曝光图形。这个阶段大部分的研究都集中在纯光学手段的模拟方面,虽 然容易理解,方便实现,但有其局限性和不完善性。Dill 曝光模型作为早期提出 的经典曝光模型,是一种考虑胶体内光化学量变化的简单模型,它从纯光学手段 以外的光化学方向考虑曝光模型的建立,是人们普遍认同的曝光模型建立的基 础。

本章将分两个部分,分别介绍基于模拟退火算法的表面曝光矫正模型以及基于 Dill 经典曝光模型的深层接近式曝光模型。

3.1. 基于模拟退火算法的接近式光刻掩模的光学临近效应矫正

3.1.1.模拟退火算法简介

模拟退火算法最初来源于金属加工工艺中的退火原理。退火是金属加工中一 种常用的热处理工艺,一般过程为:先将固体加温至充分高,然后以适宜温度冷 却(缓慢冷却或控制冷却)^[1]。加温时,固体内部粒子随温升变为无序状,内能 增大;而缓慢冷却时粒子逐渐趋于有序,在每个温度都达到平衡态,最后在常温 时达到基态,内能减为最小(如图 3-1 所示)。



图 3-1 退火工艺原理

模拟退火算法(SA: Simulated Annealing Algorithm)又称模拟冷却法、统计 冷却法、概率爬山法、随机松弛法和 Monte-Carlo 退火法等。1983 年 Kirkpatrick 等人^[2]通过借鉴金属退火工艺原理开展了一些富有成效的工作,将其思想应用于 组合优化理论,形成了模拟退火算法的基础。模拟退火算法是人工神经网络算法 的一种,是局部搜索算法的扩展,主要用于在一个大的搜寻空间内寻求命题的最 优解,其主要特点是无需求解目标函数的偏导数或解大型矩阵方程组,就能找到 一个全局最优解,且程序编写简单,易于加入约束条件;但需要多次迭代计算, 效率不高,影响其广泛应用^{[3][4]}。

模拟退火算法的具体步骤如下:

 给定模型参数的变化范围,在该范围内随机选择一个初始模型m₀,并计 算相应目标函数值 *E*(m₀);

2. 给予当前模型一个扰动而产生新模型*m*,计算相应目标函数值*E*(*m*),并 计算与目标函数值的偏差 $\Delta E = E(m) - E(m_0);$

3. 如 $\Delta E < 0$,则接受新模型*m*;如 $\Delta E \ge 0$,则接受新模型*m*的概率为 *P* = exp(- $\Delta E/T$),其中*T*为当前温度。当新模型被接受时,用*m*覆盖*m*₀;

4. 在温度T下重复一定次数的扰动和判断接受过程,即重复2,3步骤;

5. 按一定步长缓慢降低温度T;

6. 重复步骤2至步骤5直到收敛条件满足为止。

如上所述,模拟退火算法一般可以分为4个组成部分:目标函数:也称代价 函数,通过对目标函数的比较来决定当前状态的改变,同时也作为算法结束的判 别条件;产生机制:以一定扰动产生一个新状态,这种扰动以一定概率随机进行, 新状态的产生是个概率函数,称为生成函数;接受准则:以一定概率接受新状态, 这个概率函数称为接受函数;控制参数:以一定的冷却方式退火,用控制参数确 定随机引入的扰动强度。

3.1.2.掩模平面光场波前对场点的有效影响范围

在 UV-LIGA 加工工艺中,通过对灰阶编码掩模的光学临近效应矫正是减小 光学临近效应带来加工误差的有效方法之一。微细加工中的掩模版虽然相比 IC 集成电路工艺并不算大,但为了保证优化精度,通常希望掩模的编码元尺寸尽量 减小,导致编码元的数量较多。如果在整个模板上应用模拟退火算法,再加上每 个编码元都有随机选取的几种状态,就容易在目标函数值的不敏感区域进行过多 的状态改变,出现过长的马尔可夫链,接受恶化解太多,最终无法收敛到全局最 优解。所以在用模拟退火算法对整个模板进行修正之前,需划分出掩模中的重点 区域,即对目标函数值影响较大的场点范围。

中国科学技术大学田学红^[5]等指出对场点光场贡献最大的区域来自掩模场 点对应点附近,但没有指出这个区域的大小。李木军等则先利用波前分割的方法 划分了掩模版上对光场的影响区域,然后利用半波带分析法给出掩模上对场点影 响最大的区域范围的计算方法,形成了系统的接近式光刻衍射光场的有效波前作 用规律分析^[6]。



图 3-2 掩模图形上的波前分割

如图 3-2, 李等首先指出, 可将掩模图形最终划成 3 个区域: 掩模上与场点 P 相对应的 O 点附近圆形区域 S₁, 远离 O 点的图形边缘部分 S₃ 以及这两个区域中 间的小矩形面元组成的 S_2 。通过研究,如能适当调整掩模版上划分小矩形的中 心和边长, S_2 中的小矩形面元符合光场相消条件,该区域中的波前对P点贡献 为 0。而在 S_3 区域,各面元距离O点较远而间隙相对较小,使得倾斜因子很小, 衍射光场对P点的贡献相对微小,且该区域内各面元零乱不规则,在积分运算时 被积函数高频振荡,其线性叠加的结果会互相抵消。对 S_1 圆形区域,以P点为中 心将波前分割成一系列的半波带,通过半波带波前划分的特点^[7],分析得到掩模 上对场点影响最大的范围主要是场点附近一个半波带大小的区域。在接近式光刻 条件下,有 $d >> \lambda$,通过计算,这个区域可近似为半径 $\sqrt{\lambda d}$ 的圆。

3.1.3.在有效影响范围下对二元灰阶编码掩模的模拟退火算法矫正

根据李等的掩模上对场点影响最大范围理论可知,为了矫正光学临近效应较 严重的拐角处的曝光误差,可以重点考虑以拐角拐点为中心,√λd 为半径的圆 形区域内掩模的矫正。

在此理论基础上,以T形掩模图形为例,进行基于模拟退火算法的二元灰阶 编码掩模局部修正。



图 3-3 划分编码网格的 T 形掩模图形

图 3-3 是一个 T 形掩模图形,将其划分网格,网格边长是 5 um。然后再划 分出 T 形图形中影响成像的重点区域,即凸直角处的一个网格,5 um×5 um区域; 凹直角处的 3 个网格,10 um×10 um 区域。根据波前分割理论,当 d 为 15 um,在 i线紫外光(波长 λ=0.365 um)光源下,相应的最有效影响范围约为 2.5 um。本

文把最有效影响范围取在重点区域四周相应延伸 2.5 um, 优化即在选定的方框中进行, 如图 3-4 所示。



图 3-4 划分优化区域后的 T 形编码掩模图形

如前所述, 衍射光场在两个拐角处衍射导致的畸变现象较为严重, 在凸直角和凹直角拐角中心圆范围内是本文考虑的重点。因此对这两片区域进行进一步的编码网格划分。考虑到目前可用于制造掩模的电子束曝光机的分辨率已达 0.1 um 以下, 如美国 JEOL 公司的 JBX-5500FS 电子束光刻机可以加工的最小线宽可以 达到 10 nm^[8]。故这里进一步划分的网格尺寸为 0.5 um, 是完全可以加工的。

在用模拟退火算法对划分好网格的二元灰阶编码掩模进行处理之间,首先必须了解算法实现过程中定义的几个重要假设:假设掩模版上不同状态编码网格面元的某种排列顺序 X_m为退火问题中的某系统状态,且假设需要优化的目标函数为 H(X₋)退火问题中的能量函数, H(X₋)的计算方法如下:

$$H(X_m) = f(X_m) - \Phi \tag{3.1}$$

其中, Φ为目标光场分布,也即无衍射效应的理想光场分布, *f*(*X*_m)为在排列 顺序 *X*_m下的衍射光场分布。算法中再引入一个可调温度变量 *T*,相当于退火过 程中的系统温度。这样,光学邻近效应掩模矫正问题就成了使目标函数最小化的 优化掩模版图形的求解问题,也即退火系统最低能量稳态的求解问题。

其次,由 Boltzman 分布定理可知,系统在热平衡时某状态 X, 存在几率为:

$$P(X_{m}) = \frac{1}{Z(T)} \exp[-H(X_{m})/T]$$
(3.2)

其中 Z 为只与温度有关的归一化函数,在某一温度下计算状态分布概率时可以省 略。另外通过该式可以知道,当系统温度比较高的时候,各状态存在几率相同, 即系统有可能处于任何一个状态。此后以一定步长缓慢减小系统温度 T,并且在 每个节点温度上都让系统在充分的时间内达到热平衡状态。与金属热加工工艺中 的退火类似,随着系统温度的逐渐降低,系统热平衡时所处的状态便会慢慢趋向 于最小系统能量状态,也即所要寻找的最优解。

模拟退火算法中某节点温度下热平衡过程需通过充分长的时间进行状态变 化,实际上是指编码掩模图形的变化,这里通过改变灰阶编码掩模图形上一个随 机选取网格面元的光振幅传输系数来实现。对于二元灰阶掩模,光振幅传输系数 只有 1 和 0 两种状态。随机选中网格中位置为(*i*,*k*)的像素,如果该像素的传输 系数 *a_{i,k}*为 1,则有一定几率变为 0,反之亦然。假设 *a_{i,k}*为 1 时的状态为 *X_m*,能 量函数为 *H*(*X_m*),而*a_{i,k}*为 0 时的状态为 *X_n*,能量函数为 *H*(*X_n*),则该节点温 度下由状态 *X_m*变为 *X_n*的几率为:

$$P(X_m \to X_n) = \begin{cases} 1 & H(X_n) - H(X_m) < 0\\ \exp[-(H(X_n) - H(X_m))/T] & H(X_n) - H(X_m) \ge 0 \end{cases}$$
(3.3)

任意一次状态改变都按照式 3.3 进行判断,如果接受改变, *a_{i,k}*值产生变化,称 之为一次"成功改变",如果不接受改变, *a_{i,k}*仍保持原值,且称之为一次"失败 改变"。通过计算成功改变次数和总改变次数的比率,来判断该节点温度下是否 处于平衡状态,从而决定是否停止计算。

用以上模拟退火算法对上述划分好的T形二元灰阶编码掩模进行修正,取初 始温度为 6,温度衰减系数为 0.8,外循环次数即温度衰减次数为 25,内循环次 数即状态改变次数为 200,得出修正后的凸角及凹角处的模板图形,如图 3-5。

把修正好的局部图形拼接到整体的 T 形图形上,得出最终的掩模图形,如 图 3-6 所示:



图 3-5 凸直角模板和凹直角模板修正前后(a,b,c,d 分别为凸直角模板修正前、 凸直角模板修正后、凹直角模板修正前和凹直角模板修正后的灰阶编码)



图 3-6 二次编码后的二元灰阶掩模

在掩模与光刻胶之间的间隙 *d* =15μm 的情况下,优化后的掩模图形对应的曝 光轮廓图形如图 3-7 所示。与未对掩模进行编码矫正前对比,光刻胶曝光图形和 掩模版图形的吻合程度有了很大的提高。



图 3-7 优化前后掩模图形对应的曝光轮廓图形(黑色规则图形为掩模版图形, 蓝色非规则曲线为曝光轮廓图形)

3.2. 基于 Dill 模型建立 SU-8 接近式深度曝光理论模型

如前所述,纯光学方法可用于计算接近式曝光胶体表面的衍射光场或近似计 算接触式曝光胶体内部的光场分布。但对于接近式曝光胶体内部光场分布的模拟 方面,纯光学的建模方法遇到最大的瓶颈就是无法克服光场从空气隙到达胶体又 从胶体向内部传播时传播介质光学性质的跳变以及光场变化与胶体组成成分间 的耦合过程。本文将以经典 Dill 模型为基础,以标量衍射光学理论结合光化学知 识,着重解决这两方面的问题。

3.2.1.经典 Dill 曝光模型

Dill 曝光模型是 Frederick H. DILL 于 1975 年提出的,是一种主要针对正性 胶组成和变化的经验模型^[9]。Dill 主要考虑正胶中的三种化合物成分:抑制剂、 基质和反应生成物。抑制剂的主要作用是抑制基质在显影液中的溶解,由于其对 光敏感,在一定光照强度下能进行光解反应,因此一般称为光致化合物(PAC: Photo-active Compound)。由于 PAC 受光照分解进而导致基质在显影液中溶解度 的变化,从而对胶体形貌产生改变,形成显影图案,因此可说正胶的曝光过程主 要就是 PAC 受光照的分解过程,其主要考虑的化学反应为光解反应。Dill 认为, 光场被胶体吸收,不仅是光解反应对光场的吸收利用,还应考虑胶体组成部分以 及反应生成物等对光场的衰减作用。

首先 Dill 根据朗伯-比尔定律(Lambert-Beer Law)^[10]建立光场随深度的经验模型:

$$\frac{dI}{dz} = -I\sum_{i} a_{i}m_{i} \tag{3.4}$$

其中 *I* 为入射总光强度, *z* 为从胶表面垂直向下的深度, *m*, 为第*i* 个化合物成分的摩尔浓度, *a*, 为第*i* 个化合物成分的摩尔吸光率。如用下标 1、2、3 分别表示 正胶中的三种主要成分即 PAC、胶体基质和反应生成物。则分开表示为

$$\frac{\partial I(z,t)}{\partial z} = -I(z,t) \left[a_1 m_1(z,t) + a_2 m_2(z,t) + a_3 m_3(z,t) \right]$$
(3.5)

这里 a_1 、 a_2 、 a_3 分别表示为 PAC、胶体基质和反应生成物的摩尔吸光率,而 m_1 、 m_2 、 m_3 分别表示为 PAC、胶体基质和反应生成物的摩尔浓度, I(z,t)表示为在 深度 z 和曝光时间 t 下的光强度。

对 PAC 在光照作用下随时间的分解, Dill 也用一个经验模型来表述:

$$\frac{\partial m(z,t)}{\partial t} = -m_1(z,t)I(z,t)C \tag{3.6}$$

其中C为 PAC 每单位强度下的衰减百分比。

另外, Dill 作了以下假设作为初始或边界条件:

- *I*(0,*t*) = *I*₀ 表面恒定光强
- *m*₁(*z*,0) = *m*₁₀ 初始 PAC 分布均匀
- $m_2(z,t) = m_{20}$ 胶体基质不参与反应,假设其均匀且恒定不变

 $m_1(z,t) = m_{10} - m_1(z,t)$ 1mol 的 PAC 生成 1mol 的生成物

上述各初始边界条件代入式 3.5 并整理得

$$\frac{\partial I(z,t)}{\partial z} = -I(z,t) [m_1(z,t)(a_1 - a_3) + a_2 m_{20} + a_2 m_{10}]$$
(3.7)

再将 $m_1(z,t)$ 归一化处理得到PAC的归一化浓度M(z,t):

$$M(z,t) = \frac{m_1(z,t)}{m_{10}}$$
(3.8)

且令 $A = (a_1 - a_3)m_{10}$, $B = a_2m_{20} + a_3m_{10}$, 代入到式 3.7, 并与式 3.6 的归一化形 式联立, 有

$$\frac{\partial I(z,t)}{\partial z} = -I(z,t)[AM(z,t) + B]$$
(3.9)

$$\frac{\partial M(z,t)}{\partial t} = -I(z,t)M(z,t)]C$$
(3.10)

式 3.9 与 3.10 一起组成了 Dill 经典曝光模型的主体部分,式 3.9 是尺度(深度)轴上的模型,反应了光照分布受胶体组成成分吸收而衰减的过程, α = AM(z,t)+B 称为衰减函数;而式 3.10 是时间轴上的模型,反应了胶体组成成分随光化学反应进行而变化的过程,这两个过程互相耦合,形成了整个模型。

模型中的参数为*A、B*和*C*,除了*C*有明显的物理意义即光学吸收率或光学 灵敏度,*A*和*B*实际上也有一定的物理意义,从这两个参数的产生来看,*A*代表 了曝光吸收有关项,即曝光过程中 PAC 和反应生成物的化学量;*B*则代表了曝 光吸收无关项,即基质和初始 PAC 等化学量。这个模型的建立主要基于光刻胶 材料*A、B*和*C*三个参数的确立,因此 Dill 曝光模型一般又称为 ABC 三参数曝 光模型。

根据 Dill 实验及推导, A、B和C三个参数可由以下公式确定:

$$A = \frac{1}{d} \ln \frac{T(\infty)}{T(0)}$$
(3.11)

$$B = -\frac{1}{d} \ln T(\infty) \tag{3.12}$$

$$C = \frac{A+B}{AI_0 T(0)[1-T(0)]} \frac{dT(0)}{dt}$$
(3.13)

其中d为胶体厚度;函数T是与时间有关的量,是 Dill 根据实验测得的胶体材料 透光率随时间变化的曲线T(t);T(0)代表初始透光率, $T(\infty)$ 代表时间足够长时 透光率趋向一平稳值, $\frac{dT(0)}{dt}$ 代表透光率曲线在初始时的斜率。

由式 3.11-3.13 计算出的值是三参数的初值,这里需要不断改进三参数值,使由三参数决定的T曲线与实验曲线有最好的相符性。用均方差 MSD 表征其差异:

$$MSD = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [T_{c}(t_{i}) - T_{e}(t_{i})]^{2}$$
(3.14)

这里 N 为对T 曲线的采样次数, t,为第i次的采样时间, T,为由初始A、B、C 或

上一次 A、 B、 C 得到的"估计值", T_e为实验值。然后先使 A 变化±1%, 得 到 A'和 A",在用这些值计算 MSD 得到三点,确定一条抛物线,取抛物线最小值, 得到新的 A。再用新 A 与之前的 B、 C 一起代入 MSD,使 B 变化±1%,同样取 抛物线最小值得到新 B;类似的方法得到新 C。这样不停地计算下去,直到 MSD 的值小于一定值(如 0.0001)后,认为 A、 B、 C 接近真实值,停止计算。一旦 三参数的值确定了,就可以通过式 3.9 与 3.10 计算得到曝光光场的分布情况以及 PAC 的分布状况。

Dill 经典曝光模型虽然只能近似反映某类光刻胶的曝光过程,但它开辟了光 化学理论在建立曝光模型应用的先河。人们逐渐认识到,曝光过程实际上是一个 纯光学传播过程和光化学反应过程的交叉耦合过程。

3.2.2.对 Dill 模型在深度轴上进行扩展

如前所述, Dill 模型中仅用偏微分经验式描述了光场在某一时刻随深度的分 布。Dill 认为这种胶体内部衍射光的传播是呈指数近似减弱的, 在其文章中也指 出, 该模型对于厚胶而言并不准确, Dill 模型在深度轴需要进行扩展。在实际接 近式曝光系统中, 除了单纯考虑光场受胶体吸收衰减外, 还应考虑光场在胶体内 部传播时所受的干扰, 也即折射率场对光场分布的影响。

3.2.2.1. 基尔霍夫衍射公式在均匀介质中的应用





对于接近式曝光,在通过光刻机中的蝇眼透镜系统后,射到掩模表面上的光 一般为具有不同角度的平行光^[11]。为了方便讨论,本文认为入射到掩模表面的 为垂直于掩模的平行光束。这束平行光经过掩模后发生衍射,照射到胶体表面, 并向胶体内部传播,如图 3-8 所示。 如前所述,通常情况下,光波用矢量形式来表达。但用矢量波方法求解衍射问题很复杂,而研究表明,用标量代替矢量也可以比较准确地描述光传播的物理 过程,形成了一套以基尔霍夫公式为代表的经典标量衍射理论。这里重新把基尔 霍夫衍射公式列出:

$$U = \frac{1}{j\lambda} \iint_{\Sigma} U_0 \frac{K(\theta)}{r} \exp(j\frac{2\pi}{\lambda}r) ds$$
 (3.15)

其中: U 为衍射光入射面的光场分布, U_0 为出射光场分布, Σ 为出射口的积分 区域, r 为出射面上某点到入射面上观察点的距离, λ 为衍射光波长, $K(\theta)$ 称为倾 斜因子, 它表示出射面上某点到入射面上观察点的矢径与出射面该点的外法线夹 角对衍射场的影响, $K(\theta) = [\cos(n, r) + 1]/2$ 。

在式 3.15 中, λ为衍射光在折射率为 1 的真空中的波长,如果要研究光束在 均匀吸收介质中的衍射问题,则要将式中的波长变为随介质折射率变化的实际波 长,并引入复折射率的概念:

$$\hat{n} = n + j\kappa \tag{3.16}$$

$$\lambda = \lambda_0 / \hat{n} = \lambda_0 / (n + j\kappa) \tag{3.17}$$

对 SU-8 紫外曝光来说, λ₀为真空中的 365 nm 紫外光的波长, n 为复折射率, n 为通常所说的介质折射率, κ为介质的消光系数,与材料的吸收率有关。

将复折射率引入后,把式 3.16、式 3.17 代入基尔霍夫公式,得到:

$$U = \frac{\hat{n}}{j\lambda_0} \iint_{\Sigma} U_0 \frac{K(\theta)}{r} \exp(j\frac{2\pi}{\lambda_0}\hat{n}r) ds$$

= $\frac{\hat{n}}{j\lambda_0} \iint_{\Sigma} U_0 \exp(-\frac{2\pi}{\lambda_0}\kappa r) \exp(j\frac{2\pi}{\lambda_0}nr) \frac{K(\theta)}{r} ds$ (3.18)

不难看出,复折射率的引入使得上式可以描述光波在均匀吸收介质中衍射的表达式^[12],光波的复振幅将随传播长度指数衰减,若用真空中波数 k_0 取代 $2\pi/\lambda_0$,则 $k_0\kappa$ 可称为振幅衰减系数。

3.2.2.2. 光束传播法 BPM (Beam Propagation Method)

光束传输法 BPM 是二十世纪 70 年代 J.A.Fleck, M.D.Feit 和 J.R.Morris 为了

处理大气中的激光传输而提出来的^[13]。最初的 BPM 是以快速傅里叶变换(FFT: Fast-Fourier Transform)为数学手段实现的,称为 FFT-BPM。

BPM 的主要出发点是光波的传播受两方面因素的影响: 1. 由于波动本质, 会受到衍射; 2. 在微不均匀介质中光波从一个面 z 传播到邻近的平面 z + Δz, 各 处的相移量有微小的差别, 与 x, y 位置有关。既然这些影响一直对波产生作用, 因此可将时间分为微小的时间段, 空间也分割为短的长度段 Δz。因此连续变化 的介质可以用一系列均匀介质分割的透镜来表示, 如图 3-9。在透镜间的介质有 常数的折射率 n, 它是相邻的两透镜间的折射率 n(x, y, z) 的平均。当然这些透镜 不是通常意义上所说的光学仪器中使用的球面透镜, 而是广义透镜, 它包含了介 质折射率分布 n(x, y, z) 的特征^[14]。



图 3-9 广义波导结构和等效透镜波导结构原理

为了数值计算,将透镜间均匀介质中的波分解为平面波谱

$$U(x, y, \Delta z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\xi, \eta) \exp\left[-j(\xi x + \eta y + \beta \Delta z)\right] d\xi d\eta$$
(3.19)

其中参数 ξ 、 η 、 β 分别是x、y、z的分量的波矢。实际上, β 必须满足条件 $\beta = \sqrt{n^2 k_i^2 - \xi^2 - \eta^2}$ (3.20)

k_i为对应平均折射率下的波数。

式 3.19 中的积分是二维傅里叶变化,可以用快速 FFT 计算,但由于 ξ 和 η 一 般很小, β 成为很大的量,波随 z 迅速变化。作为全波传输问题,可将迅速变化 的 z 和较为缓慢变化的振幅分开,将式 3.20 重写为

$$\beta = \bar{n}k - \frac{\xi^2 + \eta^2}{\bar{n}k + \sqrt{\bar{n}k^2 - \xi^2 - \eta^2}}$$
(3.21)

这样就把大的常数部分 *nk* 和小的*ξ*、η相关部分分开。将式 3.21 代入式 3.19 得 到微不均匀介质中的传输可表达为:

$$U(x, y, \Delta z) = F \exp(-ink\Delta z)$$
(3.22)

其中

$$F = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{\beta>0} A(\xi,\eta) \exp\left[j \frac{\xi^2 + \eta^2}{\bar{n}k + \sqrt{\bar{n}k^2 - \xi^2 - \eta^2}} \Delta z\right] \exp\left[-j(\xi x + \eta y)\right] d\xi d\eta \quad (3.23)$$

BMP 传播过程的透镜阶段可由波动方程描述。平行于 z 轴的波可描述为 $G = \exp[-in(x, y, z)k\Delta z]$,而在均匀介质阶段,式 3.22 中已经包括了相移 $\exp(-ink)$,在透镜阶段这种相移应当扣除掉。最终得到

$$U(x, y, \Delta z) = F \cdot G \tag{3.24}$$

通过以上 FFT-BPM 的推导,可以了解 BPM 的关键思想在于:光在透镜间 可以按照均匀介质中传播来计算,在透过广义透镜时只发生相位变化,这种相位 变化与当前位置的折射率以及透镜间介质的平均折射率有关。

3.2.2.3. 空气与胶体阶段的分阶段衍射

一般 BPM 应用于介质折射率连续微小变化的介质,对于接近式曝光来说, 衍射光透过掩模后先经过空气隙再进入光刻胶内部,由于光刻胶的折射率与空气 折射率相差比较大,可认为介质折射率发生跳变,这种情况下 BPM 应用相对困 难。有些文献中采用把曝光系统浸在一种与光刻胶折射率几乎相同的溶液中,这 样空气隙中充满了液体的光刻胶,使其曝光方式变成接触式曝光,简化了计算 ^[15],但同时也将加大了曝光系统的设计和加工难度,增加了成本。这里本文仍 然不改变其曝光方式,采用分阶段计算的方法,把整个衍射过程分成空气隙衍射 阶段和胶体内部传播阶段,如图 3-10。



图 3-10 分阶段计算接近式曝光衍射场 图 3-11 胶体表面扩大以弥补分阶段 示意图 衍射的能量损失

值得注意的是,当胶体从表面向下传播时,把整个胶体表面看作新一次衍射 的掩模图形孔。由于把一次衍射计算分割成了两次进行,光场在第一次衍射到达 胶体表面后实际的衍射范围是无限大,但一般计算衍射光场时只使用了胶体表面 这个区域内的光场向下计算,区域外的光场能量并未使用,因此本文采用把胶体 表面扩大的方法来弥补其中的能量损失,比如把胶体表面面积扩大 N 倍, N 的 数值可以根据计算精度要求和计算量大小来衡量,比如扩大厚道胶表面为掩模面 边长的两倍,如图 3-11。

3.2.2.4. 用 BMP 建立非均匀折射率厚胶深度曝光模型及其计算结果

前面介绍了 BPM 的思想,即把连续微小变化折射率介质等效成一系列广义 透镜分割的介质组,光在透镜间可以按照均匀介质中传播来计算,在透过广义透 镜时只发生相位变化。这里把这个思想应用到标量衍射理论中,得到新的基尔霍 夫衍射公式:

$$U = \frac{1}{j\lambda_0} \iint_{\mathcal{L}} \frac{\overline{\hat{h}} \exp(jk_0 r)}{r} \cdot K(\theta) \cdot \exp\{-jk_0 r[\hat{n}(x, y, z) - \overline{\hat{h}}]\} ds \qquad (3.25)$$

其中: k_0 为光在真空中的波数, $\overline{\hat{n}}$ 为两透镜间介质的平均复折射率, exp{-j $k_0r[\hat{n}(x, y, z) - \overline{\hat{n}}]$ 为透过广义透镜时由于折射率不同带来的相位补偿。

在分阶段进行衍射场计算时,在空气隙中光场透过掩模图形在空气折射率下 发生衍射到达胶体表面,该过程的计算可以直接使用基尔霍夫衍射公式(式 3.15);当胶体从表面向下传播时,把整个胶体表面看作新一次衍射的掩模图形
孔, 衍射光向胶体内部传播时, 即使胶体内部进行光化学反应使其各处胶体成分 发生变化, 进而使得其内部各处折射率变得不一致, 但是这种变化不大。各处折 射率虽然有所差异, 但整个胶体仍然可以看作折射率微小连续变化的不均匀介 质, 可以采用上述 BPM 思想改进的基尔霍夫衍射公式 (式 3.25)。

这样,本文从基尔霍夫经典衍射公式出发,以解决公式在胶体不均匀折射率 下计算为出发点,结合 BPM 思想,完成了深度方向上曝光模型的建立。图 3-12 和图 3-13 分别为特定掩模尺寸下的曝光系统以及由该曝光系统采用上述模型计 算的胶体内部光场的归一化复振幅分布。



图 3-12 某种掩模尺寸下的曝光系统图 3-13 胶体内部光场的归一化复振幅分布 3.2.3.对 Dill 模型在时间轴上进行扩展

经典 Dill 曝光模型中,其在时间轴上的描述为正胶 PAC 浓度在某固定光场 下的指数近似衰减。对于 UV-LIGA 中常用的 SU-8 负胶来说,胶体成分随时间 轴的变化比正胶更为复杂。本文从对比正负胶体区别出发,对 SU-8 光刻特性进 行描述,最终获得能够刻画 SU-8 胶光化学反应的动力学模型。

3.2.3.1. 负性光刻胶 SU-8 简介及其组成

SU-8 光刻胶于 1995 年由 IBM 公司推出,是一种环氧基负性化学放大胶。 SU-8 胶初期用于紫外光刻,近些年来也在同步辐射 X 光刻中得到了广泛应用。 随着 MEMS 技术的发展,SU-8 胶的优点越来越被 MEMS 业界所重视。SU-8 胶 的低分子量使它能溶于很多类型的溶剂中,可以形成高浓度混合物;且它在近紫 外谱区(*i*线 365 nm)有着非常低的吸光性,使其具有很好的透光性能,从而适 合于厚胶加工及高深宽比微结构的制造。SU-8 胶还具有良好的自平整能力,在 前烘过程中可以消除边缘凸起,使自身实现表面平整,在接触或接近式光刻中保 证掩模和光刻胶有良好的接触。SU-8 胶的该优点是其他光刻胶无法比拟的,也 是进行毫米量级超厚结构微细加工技术开展的前提和保证。另外,SU-8 胶在曝 光和后烘过程中进行了一系列的交联反应,得到的立体交联结构具有良好化学稳 定性能和机械强度,使其具有良好的力学性能、抗化学腐蚀性和热稳定性。基于 以上优点,SU-8 胶被广泛应用于 MEMS、微细加工、芯片封装等领域,特别对 于 UV-LIGA 工艺,SU-8 胶是其研究热点^{[16][17]}。

SU-8 胶是负胶中的一种,前面介绍了 Dill 曝光模型是针对正胶而建立的,如果想建立适用于 SU-8 负胶的曝光模型,首先需要比较正负两种光刻胶的主要特性。

3.2.3.2. SU-8 光刻胶的光刻特性

	应用表现	组成成分	反应机理	反应参与 者	生成物特 点	后烘影响
正胶	"照哪哪 溶"	树脂、 PAC、溶液	PAC 的光解 反应	PAC	单一	蒸发显影液、减 小驻波效应
负胶	"照哪哪 不溶"	树脂、光引 发剂、溶液	阳离子型光 聚合反应(光 解、引发、链 增长)	光引发 剂、树脂	多样、聚合 程度随反 应时间变 化	酸扩散、更充分 地发生聚合反 应,减小驻波效 应

表 3-1 正负两种光刻胶的主要特性对比^[18]

如表 3-1 所示,正负两种光刻胶的区别不仅仅在于曝光时的外在表现的不同, 更重要的是其内部的光化学反应机理的区别。在 DILL 曝光模型中主要考虑的是 PAC 的光解反应,而负胶则需要考虑的是光聚合反应,对于 SU-8 胶来说主要是 阳离子型光聚合反应,包括光解、引发、链增长等反应步骤。如果想向适用于负 胶的曝光模型改进,就应了解在负胶曝光时所进行的光化学反应,建立适合的光 化学反应动力学模型。当然,在此之前应首先了解所研究的胶体的组成成分。





图 3-14 SU-8 双酚 A 型环氧树脂单体结构 图 3-15 三芳基硫鎓盐分子结构 对于 SU-8 胶来说,胶体主要由溶质(双酚 A 型环氧树脂)、溶剂(γ-丁内 脂)和光引发剂(三芳基硫鎓盐)组成,图 3-14 和图 3-15 分别为双酚 A 型环氧 树脂和三芳基硫鎓盐的分子结构^[17]。根据相关文献^[19],可以知道 SU-8 胶在曝光 以及曝光后进行后烘的整个过程中,主要的光聚合反应分 3 步进行:

光解:
$$Ar_3S^+MtXn^- \xrightarrow{hv} Ar_2S + Ar \bullet + HMtXn$$
 (3.26)

引发:
$$M(单体) + HMtXn \longrightarrow HM^+MtXn^-$$
 (3.27)

链增长: $HM^{t}MtX\bar{n} + nM \longrightarrow H(M)_{\mu}M^{t}MtX\bar{n}$ (3.28)

其中, $Ar_3S^+MtXn^-$ 为光引发剂三芳基硫鎓盐, Ar表示苯基, M为双酚 A 型环 氧树脂单体, 且 $MtXn^-$ 表示 BF_4 、 PF_6 、 AsF_6 、 SbF_6 等

如式 3.26-3.28 所示,首先,光引发剂在紫外光作用下产生强酸 HMtXn (式 3.26),然后单体直接质子化,生成一个以碳、氧、硫或氮为中心的阳离子 (式 3.27),最后通过式 3.28,树脂单体在阳离子链末端不断交联,生成高分子^[19]。可以看出通过光引发剂的光解,生成了光致酸,故常用 PAC (Photo-Acid Generator)来代表光引发剂。另外,还可看到光致酸作为中间产物,促进了链增长的进行,是交联反应中的催化剂。

虽然前面了解了 SU-8 胶从曝光到后烘阶段的主要光聚合反应,但是这里需要的仅仅是在曝光阶段的光化学反应机理,后烘阶段在以后的研究中考虑,于是 认为:式 3.26 仅在曝光阶段进行,式 3.27、3.28 在曝光阶段部分进行,主要是 在后烘阶段进行;而后两步反应中反应物的减少、生成物的增加都会对曝光光照 的分布产生影响;因此曝光阶段需要考虑的不仅仅是光引发剂的光解反应,而且 后两步反应也都需要考虑在内。以此为依据,建立适合 SU-8 胶的光化学反应动 力学模型。

3.2.3.3. SU-8 负胶曝光反应动力学模型

通过前面的讨论,本文在曝光阶段主要关心的化学量为:光引发剂 PAG 浓度的变化、由光引发剂产生的光致酸浓度的变化以及各个环氧树脂单体交联的程度如何。本文用以下符号表示这些量:

H(x, y, z, t): 光致酸的浓度, h(x, y, z, t): 光致酸的归一化浓度,

G(x, y, z, t): 光引发剂的浓度, g(x, y, z, t): 光引发剂的归一化浓度,

m(x, y, z, t):树脂单体已激发交联位的归一化浓度,用来表示单体交联程度。

根据" PAG(g(z,t))—<u>NUV(365nm)</u>→光致酸(h(z,t))→已激发单体交联位(m(z,t))" 这样的光化学反应机理,可以用以下方程式表示该反应的化学动力学模型^{[20][21]}:

$$\frac{\partial m(z,t)}{\partial t} = -k_1 h^n(z,t) m(z,t)$$
(3.29)

$$\frac{\partial h(z,t)}{\partial t} = -k_2 h(z,t) - \frac{\partial g(z,t)}{\partial t}$$
(3.30)

$$\frac{\partial g(z,t)}{\partial t} = -CI(z,t)g(z,t)$$
(3.31)

其中, C为光解反应中光引发剂的衰减系数; k₁和k₂均为 Arrhenius 反应速率系数, k₁为交联反应参数, k₂为催化剂(酸)的钝化参数; n为光解反应级数, k₁、 k₂和 n 均可由实验获得^[21]。可以看出新的反应动力学模型针对 SU-8 反应机理, 作出了不同于正胶的化学反应动力学模型改进。式 3.29 表明交联位浓度的变化 速率与当已有交联位浓度、光致酸浓度以及反应级数有关; 式 3.30 表明光致酸 浓度的变化速率与已有的光致酸浓度有关,也与光引发剂浓度的变化速率有关, 因为 1 摩尔的光引发剂减少就导致 1 摩尔的光致酸的增加; 式 3.31 表明纯粹的 光解反应,这与 Dill 模型相似,光引发剂浓度的衰减速率不仅与已有光引发剂浓 度有关,而且与当前光场分布有关,光场分布越强的地方光引发剂分解得越快。 这里还需要给出一些初始条件和边界条件,在曝光阶段关于时间的初始条件 和边界条件为:

$$g(x, y, z, 0) = 1$$
 $g(x, y, z, \infty) = 0$ (3.32)

$$h(x, y, z, 0) = 0$$
 $h(x, y, z, \infty) = 1 - \beta$ (3.33)

$$m(x, y, z, 0) = 0$$
 $m(x, y, z, \infty) = \beta$ (3.34)

其中 β 表示在曝光阶段,三步光聚合反应中后两步反应(式 3.27 和式 3.28)的反应程度,也即光交联反应在曝光阶段的反应量占整个光刻过程反应量的百分比; β 可由实验估算,日本 Litho Tech Japan 公司的实验数值为:在 125 mJ/cm^2 的曝光剂量下, β 约为 9%^[20]。另外,在曝光开始的时候,初始光场在胶表面处应为 $I(x,0,0) = I_0, I_0$ 为一常值,设为 1。

这样,通过分析 SU-8 胶的组成及反应机理,得到了 SU-8 胶仅在曝光阶段 的光交联反应动力学模型,虽然这种化学反应动力学模型只是一种经验模型,但 它反应 SU-8 光刻胶随时间组成成分的变化,于是把其作为 SU-8 胶在时间轴上 的曝光理论模型。

3.3. 改进深度曝光模型及其计算结果分析

3.3.1.时间轴和深度轴模型间的联系

前面本文通过对 Dill 经典曝光模型的深度轴和时间轴模型分别进行了讨论, 对深度轴模型,用 BPM 方法结合分阶段衍射计算可以模拟某一时刻特定折射率 分布下的深层衍射光场;而对时间轴模型,针对 SU-8 负胶的特点,建立了合适 的光交联反应动力学模型。实际上,整个曝光过程互相联系,互相耦合,曝光中 胶体组成影响光场分布,而光场分布又反过来影响胶体组成。联系这两个模型的 纽带必须既与胶体组成成分有关,又与光场分布有关,这里用复折射率这个物理 量来联系两个模型,使其能够反应整个曝光过程。由于复折射率中的消光系数几 乎不随胶体组成成分变化^[22],因此主要考虑对象为通常所说的折射率场分布。

考虑某时刻16在已知折射率场的情况下,可通过深度轴曝光模型计算光场分 布。当时间轴上的时间间隔划分比较短时,通常认为在t。时刻到下一时刻t。+Δt 的光场分布不变,也可以理解为在很短时间间隔内胶体组成成分未来得及发生变 化,于是光场不变。这样通过 SU-8 胶反应动力学模型计算得 t_a + Δt 时刻胶体内 部各组成成分分布,可以由这些胶体组成成分估算t_a+Δt时刻的折射率场分布。 首先可以查出 SU-8 胶在未曝光和完全曝光情况下的折射率, n_o=1.67 为 SU-8 胶 未曝光时的折射率^[22], n_{md}=1.8 为 SU-8 胶完全曝光时的折射率^{[22][23]}。其次考虑 到高分子化合物折射率的影响因素有很多:分子半径、电子分布情况、单位分子。 的原子数目、分子结构的紧密程度等等^[24]。由于本人自身学科背景限制及讨论 方便,取高分子化合物单位分子的原子数目作为考察对象,也作为由当前化合物 组成成分计算折射率的依据。在式 3.29-3.31 计算的各化合物成分中,由于氢离 子的原子量相对很小故而不考虑光致酸浓度对折射率的影响,只考虑光引发剂浓 度和单体交联位浓度对胶体折射率的影响。由图 3-14 和 3-15 所示的交联单体和 光引发剂结构分子式可知,单位分子的交联单体的原子数约为光引发剂的5倍, 因此可近似认为光引发剂浓度和单体交联位浓度对折射率的影响程度比约为 1:5。又由式 3.32 和式 3.34 可知光引发剂浓度和单体交联位浓度分别在未曝光和 完全曝光时刻的数值。因此可用线性差值的方法估算当前胶体组成下的折射率, 如下式所示。

 $n_{\rm ind} = (n_{\rm end} - n_0) \times \{w_1 \times [1 - g(z, t)] + w_2 \times m(z, t)/\beta\}$ (3.35)

其中 w₁=1/6,为光引发剂浓度对折射率的影响比重,w₂=5/6,为单体交联位浓 度对折射率的影响比重,n_{ind}为当前胶体组成下的折射率,加上消光系数作为虚 部,得到当前胶体组成下的复折射率,也即 t₀ + Δt 时刻的复折射率场分布。然后 由得到的复折射率场分布可以计算 t₀ + Δt 时刻的光场分布,如此进行下去,得到 某曝光时间后的光场分布和胶体组成成分分布,即为所要计算的结果,计算流程 如图 3-16 所示。



图 3-16 完整曝光模型的求解流程示意图



前面完成了完整的 SU-8 胶接近式深度曝光模型的建立,在此基础上进行仿 真计算。图 3-17 为用扩展后的完整曝光模型在图 3-12 所示的曝光系统下计算出 来的曝光时间分别为 30 s、60 s、120 s 和 180 s 时的胶内部光场分布,可以看出 其随曝光时间变化不大。为了了解各曝光时刻光场分布之间的差异,把相邻曝光 时刻的光场作差处理,得到相邻曝光时刻间的光场变化情况,如图 3-18 所示, 可以看出光场变化还是存在的,0 s 到 30 s 之间,归一化光场最大变化为 0.074,

3.3.2.完整深度曝光模型的计算结果及其分析

而 30 s 之后变化不大。后面将从基尔霍夫公式出发分析深层曝光光场分布随时 间变化不大的原因。



图 3-19 胶体内部光场传输时上一层到下一层的衍射面元传播示意图

分析引入复折射率的基尔霍夫衍射公式,暂时不考虑复折射率中的虚部,只 考虑通常意义上所说折射率在该衍射公式中的影响,则基尔霍夫衍射公式可以离 散地表示为

$$U_{q} = \frac{1}{j\lambda_{0}} \sum_{i_{1}i_{2}} U_{p} \frac{K(\theta)}{r} n \cdot \exp(jk_{0}nr) \cdot \Delta s$$
(3.36)

如图 3-19 所示, U_q 为入射面上的复振幅分布, U_p为出射面上的复振幅分布;为 了考虑由于时间变化引起折射率改变而对入射面光照分布的影响,不妨考虑出射 面上同一个离散点对入射面上光照在不同折射率下的变化:假设某时刻的折射率 为 n, 时间间隔 Δt 后变为折射率 n, 并把衍射公式表示为

$$U_{q} = a \cdot \sum_{i_{l_{2}}} U_{p} \cdot \frac{n \cdot \exp(jk_{0}nr)}{r} \cdot b = a \cdot \sum_{i} U_{p} \cdot b \cdot f$$
(3.37)

在考察整体差异前,先考察作和运算的因子间随时间的变化,因此考虑函数

 $\Delta f = f_1 - f_2 = [(n_1 \cos \alpha n_1 - n_2 \cos \alpha n_2) + j(n_1 \sin \alpha n_1 - n_2 \sin \alpha n_2)]/r \quad (3.38)$

由于这里的 f 代表出射面上某个离散点到入射面的复振幅,要得到光照分布 即光强还需要对其做模分析。对 Δf 做取模后平方的运算,得到:

$$|\Delta f|^{2} = [n_{1}^{2} + n_{2}^{2} - 2n_{1}n_{2}\cos\alpha(n_{1} - n_{2})]/r^{2} \le (n_{1} + n_{2})^{2}/r^{2}$$
(3.39)

而又由不等式|a₁+a₂|-|b₁+b₂|≤|a₁-b₁|+|a₂-b₂|推广后最终可推得:

$$\Delta U_{q} \le \frac{ab(n_{1} + n_{2})^{2}}{r^{2}} \sum_{i} U_{p}$$
(3.40)

这说明由于时间变化引起折射率改变带来的光强分布在,比较大也即离曝 光中心点越远或曝光深度越深时,这种变化越不明显;而在光照浅层区,由上面 的推导可知,折射率改变引起光强分布的变化是明显的,而且由于余弦函数的周 期性可知,这种变化在空间尺度上也是周期性的。

总之,由于时间变化引起折射率改变带来的光强分布变化是存在的,只是在 深层并不明显,这是由于 SU-8 胶仅在曝光阶段的交联反应进行得并不完全所致。 这说明,曝光时间的长短对曝光阶段的影响有限,这种影响主要集中在后烘阶段。 在后烘阶段中,交联反应将更为激烈,折射率变化更为明显,因此光场的变化将 在后烘阶段得以完全体现。

3.4.本章总结

本章分两个方面讨论了 SU-8 接近式光刻中曝光过程的仿真:

 结合课题组成员的工作,简单介绍了模拟退火算法的计算过程,同时介绍 了用波前分割法得到的对光场影响最大的掩模范围。利用模拟退火算法,在一定 范围内对二元灰阶编码掩模的面元网格进行局部搜索优化,最终得到光学临近矫 正后的掩模编码。

2. 针对纯光学曝光模型在模拟接近式曝光时的弊端,基于 Dill 经典曝光模型,对其分别在深度轴和时间轴上进行扩展:

在深度轴上,以基尔霍夫衍射公式为基础,引入复折射率,利用 BPM 的思想分阶段计算某曝光时刻下胶体内部的光场分布。解决了接近式光刻中光束传播路线上折射率跳变问题,且对标量衍射理论在微不均匀介质的应用上进行扩展。

在时间轴上,通过比较正负光刻胶的特点,分析 SU-8 光刻胶的组成及其曝 光交联化学反应过程,建立了适合于 SU-8 胶的光交联反应动力学模型。最后用 折射率场将两个模型联系在一起,形成一个具有互相耦合场分布的完整曝光模 型。通过整个曝光模型的建立与计算,最终给出一定曝光时间后的光场分布;结 果表明,在曝光阶段,胶内深层光场整体分布随时间变化不大,曝光时间对曝光 阶段光场分布的影响较小,而这种影响将在后烘阶段得以放大。

本章参考文献

[1] http://baike.baidu.com/view/57271.htm

[2] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, M. P. Vechi Jr. Optimization by simulated annealing. Science, 1983(220): 671-680

[3] 刘怀亮. 模拟退火算法及其改进. 广州大学学报(自然科学版), 2005, 4(6): 503-506

[4] 蒋龙聪, 刘江平. 模拟退火算法及其改进. 工程地球物理学报, 2007, 4(2): 135-140

[5] 田学红, 刘刚, 田扬超等. 接近式光刻的计算机模拟研究. 微纳电子技术, 2003, 40(7): 181-185

[6] 李木军, 沈连婠, 赵伟, 郑津津, 周杰. 接近式光刻衍射光场的有效波前作用 规律分析. 光学学报, 2010, 30(2): 525-530

[7] Max Born, Emil Wolf. Principles of Optics. 7th(expanded) edition. United States of America: Cambridge University Press, 1999. 514-515, 426-427, 413-416

[8]http://www.jeolusa.com/PRODUCTS/SemiconductorEquipment/ElectronBeamLit hography/JBX5500FS/tabid/480/Default.aspx

[9] F. H. Dill, W. P. Hornberger, P. S. Hauge, J. M. Shaw. Characterization of Positive Photoresist. IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES, 1975, ED22(7): 445-452

[10] 医用化学, http://www.zysj.com.cn/lilunshuji/yiyonghuaxue/index.html

[11] 陈有梅,郑津津,周洪军,沈连婠,张自军.接近式光刻衍射光场的快速计 算机模拟.中国科学技术大学学报, 2007,37(1): 30-34

[12] 李俊昌. 激光的衍射及热作用计算. 北京: 科学出版社, 2002.

[13] M. D. Feit, J. A. Fleck. Appl Opt, 1978, 17: 3990-3998

[14] 李安英. 光波导光束传输法数值分析新进展. 激光技术, 2000, 24(4): 236-240

[15] REN Y, WANG W J. A numerical and experimental study on gap compensation and wavelength selection in UV-lithography of ultra-high aspect ratio SU-8 microstructures. Sensors and Actuators, B: Chemical(S0925-4005), 2005, 110(2): 279-288

[16] 刘景全, 蔡炳初, 陈迪, 朱军, 赵小林, 杨春生. SU-8 胶及其在 MEMS 中的 应用. 微纳电子技术, 2003, 40(7): 132-136

[17] 伊福廷, 张菊芳, 彭良强, 韩勇. 利用紫外光刻技术进行 SU8 胶的研究. 微 纳电子技术, 2003, 40(7): 126-128

[18] LIU R, ZHENG J J, ZHOU H J, et al. A Generalized Dill Exposure Model for Negative Thick Photoresist [C]// Proceedings of the 2007 International Conference on Information Acquisition, Jeju City, Korea, July 9-11, 2007: 285-291

[19] 任华, 张秋禹, 李丹, 陈晓伟. 阳离子型光引发聚合、化学通报, 2006(69): w055

[20] Heinrich Kirchauer, Photolithography Simulation, PhD thesis, Wien, im März, 1998.4

http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/kirchauer/diss.html

[21] Yoshihisa Sensu, Atsushi Sekiguchi, et al. Profile Simulation of SU-8 Thick Film Resist, Journal of Photoploymer Science and Technology(0914-9244), 2005, 18(1): 125-132

[22] Permanent Epoxy Negative PhotoresistPROCESSING GUIDELINES FOR:SU-8
2000.5, SU-8 2002, SU-8 2005, SU-8 2007, SU-8 2010 and SU-8 2015[EB/OL],
http://microchem.com

[23] Electromagnetic properties of the SU-8 photoresist[EB/OL], http://memscyclopedia.org/su8.html

[24] 宁青菊, 谈国强, 史永胜, 高淑雅. 无机材料的物理性能. 化学工业出版社, 2006.1

第4章 SU-8 接近式深度光刻后烘理论模型 的建立与计算

对于 SU-8 胶光刻来说,后烘工艺是在曝光之后,显影之前,其主要作用是 在加热条件下让胶体内树脂单体的光聚合反应更加充分,从而 SU-8 胶光照部位 在显影液中由可溶状态变为不可溶或难溶状态,最终经由显影工艺形成胶体图 形。可以说,后烘工艺是整个光刻过程中起实质变化的一步,其研究也具有非常 重要的意义。

4.1.SU-8 胶后烘反应过程

后烘过程主要是光聚合反应过程,所以光聚合反应动力学模型是整个后烘反 应模型的基础。要想建立合适的后烘反应动力学模型,需要了解后烘过程中 SU-8 光聚合反应进一步进行的机理。研究发现^[1],后烘过程中主要存在两种过程:第 一,前面介绍过的催化剂光致酸 *HMtXn* 参与的 SU-8 环氧树脂阳离子型光聚合反 应;第二,光致酸 *H*⁺的扩散过程(*MtXn*⁻表示 *BF*₄、*PF*₆、*AsF*₆、*SbF*₆等).

如前所述, SU-8 胶是一种化学放大胶。关于 SU-8 胶体的组成及其反应机理 在第三章曾做过简单介绍,这里让我们再详细地了解下 SU-8 环氧树脂阳离子型 光聚合反应的机理。首先,当光致酸通过光引发剂产生后,为 SU-8 胶单体的环 氧单体功能团提供质子,而环氧功能团接受质子后打开 C-O 键,且该 C 原子与 下一个环氧功能团中的 O 原子连接,同时质子也被转移到该环氧功能团上,并 与 *MtXn*⁻ 重新形成光致酸 *HMtXn*,继续催化下一个环氧功能团的交联反应。整 个过程的反应机理可用以下几个式子表示(以光致酸 *HSbF*,为例)^{[2][3]}:





这样经由光致酸催化反应,曝光后的 SU-8 胶主要组成从互相无关联的游离 单体状态变为单体间高度交联的链段状态,如图 4-1 所示。



图 4-1 光致酸催化单体交联示意图

4.2. Ferguson 后烘反应动力学模型

Ferguson 后烘反应动力学模型是 Richard A. Ferguson 于 1990 年提出的,主要针对化学放大型光刻胶^[4]。以 SU-8 化学放大胶为例,由前面的分析可知, SU-8 后烘过程中交联反应的速率及程度不仅与当前环氧基团浓度有关,而且与当前光 致酸浓度密切相关,另外后烘温度也是一个影响因素。在曝光之前,光刻胶内各 处的组成成分并不完全一致,因此曝光时胶体各处的环氧基和光致酸浓度也不尽 相同。根据有机化学反应动力学,当环氧基和光致酸浓度都较高时,可以获得快

速的交联反应速率,但是其大量的生成物同时也阻碍着交联反应的进一步进行, 故而交联反应进行的效率会降低。反之,当浓度较低时,光致酸很快催化环氧基, 使交联反应更为充分,但其反应速率相对较慢。根据这样的反应动力学机理, Ferguson用两个式子表示后烘反应动力学模型:

$$\frac{\partial m(x, y, z, t)}{\partial t} = -k_1 \left[1 - m(x, y, z, t) \right] h^n(x, y, z, t)$$
(4.4)

$$\frac{\partial h(x, y, z, t)}{\partial t} = -k_2 h(x, y, z, t)$$
(4.5)

其中, t 表示后烘时间; h(x, y, z, t)和 m(x, y, z, t)分别为负胶光交联反应中的光致 酸归一化浓度和已激发交联位归一化浓度; k₁、k₂为 Arrhenius 反应速率系数, n为反应级数, k₁、k₂、n均为适应性参数,可以通过文献查得。式 4.4 反映了 已激发交联位浓度随时间的变化速率与当前时刻下的光致酸和已激发交联位浓 度有关,而式 4.5 则反映了光致酸浓度随时间的变化速率与当前的自身浓度有关。

Ferguson 后烘反应速率模型是从 Dill 后烘模型的基础上结合高分子化学反应动力学发展而来的。虽然它也是一种经验模型,但从一定程度上能够反映化学放大胶后烘过程的反应实质^[5]。

4.3. 后烘反应-扩散模型

如前所述,Ferguson 后烘反应动力学模型能够反映 SU-8 后烘过程中的主要 进程,即光致酸对环氧基团间交联的催化过程,但后烘反应中如果光致酸只在原 位置不动就只能催化该处的交联,当生成物越来越多时会阻碍光交联反应的进 行,这也是曝光阶段虽有交联反应进行但并不充分的原因之一。在后烘阶段,温 度上升使得光致酸中的 *H*⁺变得活跃,向有更低浓度光致酸分布的地方扩散,从 而使得交联反应进一步充分进行。因此,扩散作用应该作为 SU-8 后烘过程建模 中必须考虑的因素之一^[6]。

4.3.1.菲克扩散模型

所谓扩散,就是由大量原子的热运动引起的物质的宏观迁移。如按浓度的均 匀程度对扩散分类,可以分为互扩散(有浓度差的空间扩散)和自扩散(没有浓 度差的空间扩散)。这里如不特殊说明,后面所说的扩散主要指互扩散作用。

4.3.1.1. 菲克定律(Fick's Law)

菲克定律(Fick's Law)是生理学家 Fick 于 1855 年参照 Fourier 建立的导热 方程,并在实验的基础上提出的,是一种描述物质从高浓度区向低浓度区迁移的 定量公式^[7]。

假如一个体系因为形成温度梯度而偏离平衡,则会发生热流动,破坏温度梯度使体系重新建立平衡,这就是典型的传热过程。能量从体系的一个区域流向另一个区域。等压单组份体系的热流和温度之间存在着简单关系,只要温度梯度不大,便可以用 Fourier 传热定律计算热流。如在 z 方向上存在温度梯度时的热流量 J。为

$$J_q = -\kappa \frac{dT}{dz} \tag{4.6}$$

其中, κ为热导率。

同样的,对于一个有浓度(或分子数密度)梯度的混合物,也会形成物质流动以恢复体系的均匀性。有两方面的运动可对这一流动有贡献,一是由于体系的整体运动(即质心运动);二是由于混合物中各组份的相对运动。而菲克定律正是描述了后者使体系均匀化作用的定量表述。在一个等温二元混合物中,如在*z*方向上存在浓度梯度,则物质扩散流*J*₄为

$$J_A = -D\frac{dn_A}{dz} \tag{4.7}$$

其中D为扩散系数, n_{λ} 为有梯度的物质浓度。这个式子被称为菲克第一定律。 文字描述为: 在单位时间内通过垂直于扩散方向的单位截面积的扩散物质流量 (或称扩散通量 Diffusion flux)与该截面处的浓度梯度(Concentration gradient) 成正比。



图 4-2 扩散池体系示意模型

上面提出的传质方程并不明显地包含有时间因子,为考虑瞬间效应,讨论如 图 4-2 所示的扩散池体系。在扩散池内,有A和B两种物质。开始时A分子被 限制在0到*a*这个窄范围内;如将挡板抽走,A分子将扩散进入含有B分子的区 域(假设这个区域无限长)。为考察A分子浓度与位置和时间的关系,考虑z和 z+Δz之间横截面为S这部分扩散池段。在这个体积内,A分子数N_A的变化速 率应该等于进入和离开这段区域内的A分子流量之差,即

$$\frac{\partial N_A}{\partial t} = SJ_A(z) - SJ_A(z + \Delta z) \tag{4.8}$$

由于这段体积为 $S\Delta z$, A 的分子数密度就为 $N_A/S\Delta z$; 又由 $J(z+\Delta z) = J(z) + \Delta z \frac{\partial J}{\partial z}$, 再利用式 4.7, 整理得

$$\left(\frac{\partial n_A}{\partial t}\right)_z = -\left(\frac{\partial J}{\partial z}\right)_t = \left[\frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial n_A}{\partial z}\right)\right]$$
(4.9)

如考虑 x、 y、 z 三个方向上的浓度梯度,则浓度随时间的变化关系为

$$\frac{\partial n_A}{\partial t} = \nabla \left(D \nabla N_A \right) \tag{4.10}$$

如认为 D 与位置无关,则又可写成

$$\frac{\partial n_A}{\partial t} = D\nabla^2 N_A \tag{4.11}$$

这就是菲克第二定律,由该式可以确定已知边界条件下的浓度分布^[8]。

由菲克第二定律建立的扩散模型即菲克扩散模型,这类模型中的扩散被称为

菲克扩散(Fickian Diffusion)或第一类扩散。在这种扩散中,当扩散温度恒定时, 其扩散系数被认为是一常数,不随物质浓度变化而变化。

4.3.1.2. 菲克扩散模型在后烘建模中的应用

将菲克扩散模型式 4.11 加入到 Ferguson 后烘反应动力学模型中去,使后烘 反应过程模型加入对 H⁺扩散的描述。即

$$\frac{\partial m(x, y, z, t)}{\partial t} = -k_1 \left[1 - m(x, y, z, t) \right] h^n(x, y, z, t)$$
(4.12)

$$\frac{\partial h(x, y, z, t)}{\partial t} = -k_2 h(x, y, z, t) + D\nabla^2 h(x, y, z, t)$$
(4.13)

式 4.12 和 4.13 共同组成了后烘反应-扩散模型,这里我们称为后烘反应-菲克扩 散模型。

这里为了计算方便,模拟 k₁ 和 D 均与温度成 Arrhenius 关系,并忽略光致酸 由于中和等原因造成的浓度衰减^[9],即 k₂=0。有

$$k_1 = A_1 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \tag{4.14}$$

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_0}{RT}\right) \tag{4.15}$$

其中 R 为波尔兹曼常数, T 为后烘温度(K), E_a和 E₀为表观活化能, A₁和 D₀为 指前因子(也称频率因子),这些参数均可通过实验确定或文献查得。

4.3.2. 第二类扩散模型

对于扩散模型,扩散温度的影响主要是对扩散系数D的影响,无疑扩散系数 是扩散模型中的重要参数。对于菲克扩散,在恒定温度下扩散系数不随物质浓度 变化,而实际上在扩散介质内部,不同位置的扩散系数不尽相同,因此扩散系数 应与该位置的物质浓度及其他因素有关,这类扩散被称为第二类扩散^[10]。 4.3.2.1. 自由体积扩散理论

在药物传输系统及聚合物膜渗透等方面的研究中,经典的菲克扩散理论模型 不足以描述聚合物中的传质。在这类扩散研究中,主要研究对象为渗透剂小分子 在高分子聚合物种的扩散。对于 SU-8 后烘扩散来说,渗透剂为光致酸,高分子 聚合物为环氧单体形成的交联分子链。这种扩散系统中,除温度和浓度以外,渗 透剂和聚合物的分子尺寸、聚合物的分子质量及其结构(如结晶度和交联密度) 等因素也对扩散现象产生影响,使得预测这类聚合物中的传质变得复杂^[11]。目 前已有一些理论模型可以一定程度上描述简单聚合物体系的传质过程,这些模型 大致分为三类,即流体力学类模型^[12]、阻塞效应类模型^[13]和自由体积类模型^[14]。 特别是自由体积类模型中的 Vrentas-Duda 自由体积扩散模型^[15],由 Vrentas 等基 于 Fujita 模型提出^[16],其大部分参数可以通过分子性质独立确定,使扩散系数的 预测成为可能,获得了广泛的应用。

Vrentas-Duda 自由体积理论认为高分子材料的体积由三部分组成^{[17][18][19]}(如 图 4-3): 1. 聚合物子分子本身占有的体积(occupied volume),与绝对零度时聚 合物晶体原子规则排列形成的晶体密堆体积有关; 2. 聚合物分子链段由于热运 动产生的空隙自由体积(interstitial free volume),与聚合物链段的韧性和链段原 子间的相互作用力有关; 3. 聚合物链段之间的空洞自由体积(hole free volume), 与温度及聚合物晶体原子外表面积有关。



图 4-3 高分子聚合物的体积组成

分子或跳跃单元在溶液中扩散或跃迁需要具备两个条件,一是分子周围有足

够大的自由体积空间容纳迁移分子,二是分子能够获得足够大的能量实现跃迁。 Vrentas 等以 Cohen 和 Turnbull、Macedo、Chung 等研究为基础,提出了单组份 简单液体分子扩散系数表达式为:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\gamma \hat{V}_1^*}{\hat{V}_{FH}}\right)$$
(4.16)

其中, D₀为指数前置因子; R 为波尔兹曼常数; T 为操作温度(K); E^{*}为分子克 服相邻分子引力所需的临界能量,由分子间作用力决定; γ 为重叠因子,一般介 于 0.5 和 1 之间,用于描述一个空洞自由体积空间可用于不同单元的迁移; \hat{V}_1 表 示分子迁移所需的临界摩尔空洞自由体积,其大小可根据绝对零度下的分子特征 体积确定。

而对于双组份扩散体系, Vrentas 等认为各组分间的空隙自由体积均匀分布 于该组分分子周围,且体系中的空洞自由体积随机分布而不受分子种类的制约。 式 3.16 所示的单组份扩散系数推广至高分子聚合物-溶剂双分子体系中,有

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right) \exp\left[-\frac{\omega_1 \hat{V}_1^* + \omega_2 \zeta \hat{V}_2^*}{\omega_1 \frac{K_{11}}{\gamma} \left(K_{21} + T - T_{g1}\right) + \omega_2 \frac{K_{12}}{\gamma} \left(K_{22} + T - T_{g2}\right)}\right]$$
(4.17)

其中,下标 1 表示溶剂参数,下标 2 表示高分子聚合物参数; ω_i 为 i的质量分数; T_{gi} 为材料 i的玻璃化温度(K); K_{11} , K_{21} 为溶剂自由体积参数; K_{12} , K_{22} 为 高分子自由体积参数; \hat{V}_i^* 为 i 迁移所需的临界空穴自由体积; ζ 表示溶剂分 子迁移所需的临界摩尔空洞自由体积与聚合物单元迁移所需的临界摩尔空洞自 由体积之比。这些参数都由分子性质独立确定,对于特定的扩散体系可以通过文 献查找和某些计算方法和公式求取。

Hong^[20]汇总了四十六种常见溶剂的自由体积参数,并给出了估算有机溶剂 自由体积参数的方法。同时,Hong^[20]和 Yamaguchi^[21]等还公开了几十种常见高 分子聚合物的自由体积参数。对于无法查取的溶剂和聚合物参数,也可以结合一 些计算方法和公式得到,从而使得通过该模型定量计算扩散系数成为可能。具体 地说, $D_0 \, K_{11} / \gamma \, \partial K_{21} - T_{g1}$ 可用 Dullien 提出的液体扩散系数与黏度关系式求 取^[22], \hat{V}_i^{\bullet} 可用 Suden 的基团贡献法求取^[23], 用 WLF 方程(链段运动的特殊温 度-黏度依赖关系半经验方程)可以求取 $K_{12} / \gamma \, n \, K_{22}$ ^[24], 而 ζ 则可用 Hong 修正 的 Zielinski 的线性关系式求取^[25]。

自由体积理论为人们提供了一种能够准确描述高分子材料中溶剂扩散现象 的方法,而 Vrentas-Duda 模型则将其发展到一个新的高度,使这种分子扩散的行 为具有可预测性。但其求解过程中所需的自由体积参数的获得仍然比较复杂,且 所有基于高分子聚合物-溶剂体系建立的扩散系数模型在参数求取、适用范围以 及模拟准确性等方面存在一定的局限性。因此如果要进一步对高分子聚合物-溶 剂体系扩散现象进行研究,就需要在分子水平上进行探索,才可能获得更为有效 的模型和预测方法。

4.3.2.2. 简化自由体积扩散模型在后烘建模中的应用

对于 SU-8 后烘扩散体系而言,后烘温度一般在胶体的玻璃化温度以上,符 合自由体积理论中讨论的高分子聚合物-溶剂扩散体系,这里的渗透溶剂为光致 酸,高分子聚合物为环氧单体形成的交联分子链。但 Vrentas-Duda 自由体积扩散 理论公式过于繁琐,且对于 SU-8 胶来说,其参数无法完全查到,故将 Vrentas-Duda 自由体积扩散系数计算公式加以简化。这里认为其中参数 E^{*} 对扩散的影响可以 忽略^[26],且用光致酸和已激发交联位归一化浓度分别代替溶剂和高分子聚合物 的质量分数,有:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{1}{RT}\right) \exp\left[-\frac{h+m}{h(T-T_{g1})+m(T-T_{g2})}\right]$$
(4.18)

其中,h和m分别为光致酸和已激发交联位浓度; T_{g2}为高分子交联链的玻璃化 温度,可以查取; T_{g1}为光致酸的玻璃化温度,但由于光致酸作为催化剂是光聚 合反应中的中间产物,其参数难以获得,但我们主要的考察对象是光致酸中的 H⁺,因此可从相关文献中查取与光致酸结构相似的酸类参数并结合基团贡献法 近似估算^[27]。 将式 3.18 与 Ferguson 后烘反应动力学模型联立,即

$$\frac{\partial m(x, y, z, t)}{\partial t} = -k_1 \left[1 - m(x, y, z, t) \right] h^n(x, y, z, t)$$
(4.19)

$$\frac{\partial h(x, y, z, t)}{\partial t} = -k_2 h(x, y, z, t) + \nabla (D\nabla h)$$
(4.20)

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{1}{RT}\right) \exp\left[-\frac{h+m}{h(T-T_{g1})+m(T-T_{g2})}\right]$$
(4.21)

式 4.19-4.21 共同组成了新的后烘反应-扩散模型,由于这里的扩散系数与胶体组成有关,属于第二类扩散,因此我们把新后烘模型称为后烘反应-第二类扩散模型。

4.3.2.3. 仿真计算及结果比较

相比后烘反应-菲克扩散模型,后烘反应-第二类扩散模型中由于扩散系数 D 是与温度和胶体成分浓度相关的函数,同时也是空间位置的函数,即胶体中不同 位置的扩散系数不同,并注意到式 4.13 和式 4.20 之间的细微区别,因此后烘反 应-第二类扩散模型中各物理化学量间的耦合更加复杂,其解耦计算也相对繁琐。



图 4-4 曝光(a)和后烘过程(b)中物理化学量间的耦合关系

实际上,本文提出的曝光模型和后烘模型虽然在表述细节上大相径庭,但是 其耦合形式却有异曲同工之妙。回顾本文第三章所建立的曝光模型,以复折射率 为纽带,使曝光时间轴模型和深度轴模型耦合在一起。这里建立的后烘反应-第 二类扩散模型也正是以扩散系数为纽带,将光致酸浓度随时间的变化和已激发交 联位随浓度的变化两个过程联系在一起。光致酸浓度根据扩散系数决定的扩散速 率进行改变;同时光致酸浓度的分布对催化反应进程产生影响,进而影响着已激 发交联位浓度的分布;而光致酸和已激发交联位的浓度又同时决定了扩散系数的 大小(如图 4-4(b)所示)。因此,后烘模型的解耦计算也可以参照曝光耦合模型, 其计算流程如图 4-5 所示。



图 4-5 后烘模型解耦计算流程示意图

这里也要加入一些初始条件:

$$h(0) = h_0, \quad m(0) = m_0 \tag{4.22}$$

其中 h₀、 m₀分别是曝光结束后光致酸和已激发交联位的浓度分布。根据第三章 介绍的曝光耦合模型计算的曝光后未后烘前在胶体中剖面深度上的归一化已激 发交联位浓度分布如图 4-6(a)所示。由于 SU-8 胶的显影临界剂量为 150 mJ/cm^{2[28]}, 则在 1200 mJ/cm²的曝光剂量下,可取已激发交联位归一化浓度在 0.125 的等值 线区域图作为后烘结束后的参考图形(图 4-6(b))。



图 4-6 曝光后胶体中剖面深度上的归一化已激发交联位浓度分布(a)及 0.125 等值 线区域图(b)

下面设定后烘实验参数及模型计算参数,如表 4-1 所示。

	实验参数	模型参数		
t _{PEB}	8m	k2	0	
T	0-4m 338K 4-8m 368K	k,	338K 0.0003S ⁻¹ 368K 0.0007S ⁻¹	
		n	0.65	
		T _{gl}	111K	
		T_{g2}	328K	
		D_0	6.992×10 ⁻⁷ um ² /s	

表 4-1 主要实验及模型参数^{[9][29][30][31]}

将表 4-1 中的各参数代入后烘反应-第二类扩散模型,计算后烘 8 分钟之后 的已激发交联位归一化分布。图 4-7(a)、(b) 和(c)分别是用该后烘模型计算的后 烘之前、后烘 8 分钟的后烘图形以及同等条件下的实验电镜照片(倾斜 45°角 拍摄),可以看出改进后的曝光后烘模型计算的深层图形轮廓可以定性地描述实 际加工图形情况,即虽然最终结果在深度上有一定的倾斜并不很明显,但相比后 烘前的图形,其陡直度有了显著提高,这正是由于后烘过程中光致酸在加热后的 扩散效果所致。



图 4-7 后烘前(a)及后烘 8 分钟的 m=0.125 等值线区域图(b) 以及同等条件下 SEM 照片(c)

4.4. 对后烘扩散建模的一些展望

在前面的讨论中, SU-8 胶后烘模型中的一个重要组成就是光致酸的扩散过 程。实际上,想要非常准确地描述这种扩散过程是非常困难的,前面介绍的自由 体积扩散模型中也认为,自由体积的形成也是具有随机性的,故而渗透剂在高分 子聚合物中的扩散进程也可以理解为渗透分子具备一定能量后以一定的概率进 行转移,产生扩散现象。随着计算机理论的进步,人工神经网络理论得到了长足 的发展^{[32][33][34]}。在某些研究中,神经网络算法也被引用于某些传质系数的估计 方面,主要应用于土木工程等领域的研究中,如对混凝土中氯离子的渗透性研究 ^[35]以及洞穴壁散湿量的估计^[36]等。神经网络的一个重要特点是能充分逼近复杂 的非线性关系,这对于传质系数的研究是有利的。因此可以利用神经网络的优点, 对胶体后烘扩散过程的随机性进行估计,以扩散元发生扩散的概率值作为神经网 络函数中的传递函数权值,在多次实验后烘显影图形作为样本值的基础上,以实 验图形轮廓作为传递函数优化目标,最终获得能够反映真实图形轮廓的扩散传递 函数。如图 4-8 为某种 BP 神经网络在后烘扩散模型上应用的想法示意图。本文 由于精力和知识背景的限制,对该方面的研究没有充分进行,需要进一步利用相 关知识对其细化和优化。



图 4-8 某种 BP 神经网络在后烘扩散模型上应用的想法示意图

此外,与此相关的研究还有:化工分离中用 Maxwell-Stefan 方程计算多组分 溶液体系扩散传质^{[37][38][39]},土木工程中用有限元方法预测混凝土氯离子的扩散 系数^[40],化学工程中 UNIFAC 活度系数模型结合 Vrentas-Duda 自由体积理论预 测了聚合物溶液中小分子的扩散行为^[41]以及借助实验手段测量估计液相扩散系 数^{[42][43]}等等,这些对于 SU-8 后烘反应-扩散建模都有一定的指导意义。

4.5.本章总结

本章从 SU-8 后烘反应过程中的光聚合反应入手,分析了 SU-8 后烘过程中 的主要机理,即环氧基团在光致酸催化下的交联反应以及光致酸的扩散过程。首 先介绍了 Ferguson 后烘反应动力学,作为最早提出的负性化学放大胶交联反应 动力学模型,是建立 SU-8 胶后烘模型的基础。考虑到光致酸的扩散过程在整个 后烘进程中的重要性,需要对渗透剂-高分子聚合物体系的扩散机理进行分析。 分别介绍了扩散系数为常数的菲克扩散模型和扩散系数随浓度分布变化的第二 类扩散模型。前者以菲克扩散定律为基础,在 Ferguson 后烘反应动力学基础上 加入简单的扩散过程,形成后烘反应-扩散模型。而后者以化工及药剂领域中研 究的自由体积扩散理论为基础,对 Vrentas-Duda 渗透剂-高分子聚合物体系中的 自由体积扩散系数公式作简化,结合 Ferguson 后烘反应动力学模型,形成可以 描述 SU-8 后烘过程中的光致酸-环氧交联链扩散体系的后烘反应-第二类扩散模 型。与实验结果的对照表明,简化的 Vrentas-Duda 自由体积扩散系数公式可以定 性地描述 SU-8 后烘反应-扩散过程,该模型对实际的加工过程有一定程度上的指 导意义。

本章参考文献

[1] 任华, 张秋禹, 李丹, 陈晓伟. 阳离子型光引发聚合. 化学通报, 2006(69): w055

[2] Hubert Lorenz. SU-8: A Thick Photo-resist for MEMS. http://www.gule.umd.edu/~shengli/SU-8.html. 2002.8.12

[3] Maggie Marie Bobbitt Bump. The effect of chemistry and network structure on morphological and mechanical properties of diepoxide precursors and poly (hydroxyethers): Dissertation submitted to the Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University in partial fulfillment of the degree of Doctor of Philosophy In Chemistry, 2001.4

[4] Richard A Ferguson. Modeling and simulation of a deep-ultraviolet acid hardening resist[J]. J VAC. Sci. Technol B, 1990,8(6): 1423-1427

 [5] Richard A Ferguson. Modeling and Simulation of Reaction Kinetics in Advanced Resist Processes for Optical Lithograpy. Memorandum No. UCB/ERL M91/78, Electronics Research Laboratory, College of Engineering University of California, Berkeley, 1991.9

[6] 卢伟, 黄庆安, 李伟华, 周再发. 负性化学放大胶的光刻模型及模拟. 微电子 学. 2005, 35(6): 568-576

[7] 何龙庆,林继成,石冰.菲克定律与扩散的热力学理论.安庆师范学院学报 (自然科学版),2006,12(4):38-39

[8] P.C 乔丹著, 宋心琦等译. 化学动力学与传递, 清华大学出版社, 1985.6

[9] 卢伟. SU-8 胶接触式 UV 光刻模拟. 东南大学硕士学位论文, 2006.3

[10] Tollkuehn B, Erdmann A, Kivel N, et al. New methods to calibrate simulation parameters for chemically amplified resist. Proc SPIE, 2002(4691): 1168

[11] 徐 晖, 王绍宁, 郑俊民. 用自由体积理论描述扩散现象[J]. 中国药剂学杂 志, 2004, 2(1): 7-12

[12] Cukier R I. Diffusion of brownian spheres in semidilute polymer solutions. Macromolecules, 1984, 17: 252-255

[13] Fircke H. A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems. Phys. Rev., 1984,24575-582

[14] Yasuda H, Lamaze C E, Ikenberry L D. Permeability of solutes through hydrated polymer membranes. Part I. Diffusion of sodium chloride. Die. Makro. Chem., 1968, 118: 19-27

[15] Vrentas J S, Duda J L. Molecular diffusion in polymer solutions. AIChE J, 1979, 25: 1-24

[16] Fujita H. Diffusion in polymer-diluent systems. Fortschr Hochpolym-Forsch, 1961, 3: 1-47

[17] Vrentas J S, Duda J L. Diffusion in polymer-solvent system. I. Reexamination of free-volume theory. J Polym Sci: Polym Phys Ed, 1977, 15: 403-416

[18] Vrentas J S, Duda J L. Diffusion in polymer-solvent system. II. A predictive theory of the dependence of diffusion coefficients on temperature, concentration, and molecular weight. J Polym Sci: Polym Phys Ed, 1977, 15: 417-439

[19] Vrentas J S, Duda J L. Diffusion in polymer-solvent system. III. Construction of deborah number diagrams. J Polym Sci: Polym Phys Ed, 1977, 15: 441-453

[20] Hong S U, Prediction of polymer/solvent diffusion behavior using free-volume theory[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 1995,34: 2536-2544

 [21] Yamaguchi T, Wang B G, Matsuda E, Suzuki S, Nakao S I. Prediction and estimation of solvent diffusivities in polyacrylate and polymethacrylates[J]. J. Polym. Sci., Part B, Polym. Phys., 2003,41: 1393-1400

[22] Dullien F A L. Predictive equations for self-diffusion in liquids: A different approach. AIChE J, 1972, 18: 62-70

[23] Haward R N. Occupied volume of liquids and polymers. J. Macrmol. Sci. -Rev. Macromol. Chem., 1970,C4: 191-242

[24] 何平笙. WLF方程——链段运动的特殊温度依赖关系. 高分子通报, 2002(2): 75-78

[25] Hong S U. Predicting ability of free-volume theory for solvent self-diffusion coefficients in rubbers. J. Appl. Polym. Sci., 1996, 61:833-841

[26] 吕宏凌, 王保国. 高分子聚合物中溶剂扩散系数的预测. 化工学报, 2006, 57(1): 6-12.

[27] 吕宏凌, 王保国高. 分子中的扩散系数——Vrentas-Duda 模型及其发展. 功能高分子学报, 2005, 18(2): 353-360

[28] 田学红. 深度光刻计算机模拟及实验研究. 中国科学技术大学国家同步辐射实验室博士学位论文, 2003

[29] DeWitt D P, Niemoeller T C, Mack C A, Yetter G. Thermal design methodology of hot and chill plates for photolithography, Proc. SPIE, 2196: 432-448, 1994

[30] 李宗隆. 深紫外光线阻曝光后烘烤制程模拟之理及算法. 奈米通讯, 7(a), http://www.ndl.org.tw/old/ndlcomm/P7 2/P7_2.htm

[31] Yoshihisa Sensu, Atsushi Sekiguchi, Satoshi Mori, et al. Profile simulation of SU-8 thick film resist. Proceedings of SPIE, 5753: 1170-1185

[32] 王增会, 陈尔奎, 孙艳霞, 钟军伟, 陈增强. 基于神经网络的故障诊断与容 错控制及在加热炉控制系统的应用. 第 19 届中国过程控制会议论文集, 2008.7: 304-308

[33] 郭彦伟. 基于并行结构的 BP 改进算法研究. 山东师范大学硕士学位论文, 2009

[34] 吴炜烨. 基于神经网络语音识别算法的研究. 中南大学硕士学位论文, 2009[35] 管昌生, 王雨齐. 基于 BP 神经网络的氯离子扩散系数预测模型. 国外建材科技, 2006(4): 85-87

[36] 夏勇 陈卫昌等, 基于神经网络的传质系数模型建立及应用.计算机测量与 控制, 2002, 10(2): 109-111

[37] 阎建民, 罗先金, Krishna R. 多组分溶液扩散系数的理论预测研究. 第二届 全国化学工程与生物化工年会, 2005.10

[38] 阎建民, 罗先金, Krishna R. 非电解质溶液扩散系数的理论研究评述. 化工学报, 2006, 57(10): 2263-2269

[39] 阎建民, 罗先金, Krishna R. 二元液体混合物扩散系数的理论计算. 高校化 学工程学报, 2007, 21(6): 919-923

[40] 毛科峰,郑建军,丁建江. 混凝土 CI 扩散系数预测的有限元方法. 建筑材料 学报, 2007, 10(2): 230-234

[41] 刘庆林, 龚雄辉. UNIFAC-ZM 活度系数模型预测聚合物溶液中溶剂扩散系数. 计算机与应用化学, 2003, 20(3): 225-228

[42] 张运宏. 基于数字图像全息干涉法测量液相扩散系数的研究. 大连交通大 学硕士学位论文, 2007

[43] 何茂刚, 郭盈, 钟秋, 张颖. 一种新的测定流体质扩散系数的全息干涉图像 处理方法. 西安交通大学学报, 2008, 42(11): 1350-1355

第5章 总结与展望

近年来随着 MEMS 技术的迅猛发展,诸如 LIGA 技术等利用紫外光刻技术 制作高深宽比复杂微细结构的需求越来越多。为了提高加工精度、降低制造成本、 缩短生产周期,用计算机模拟其加工工艺过程的仿真技术越来越受到该研究领域 及工业界的重视。曝光和后烘过程作为光刻工艺中的两个最为重要的步骤,对其 进行过程仿真不仅可以为实验工艺条件参数设置提供参考,指导加工形成正确的 工艺路线和工艺参数,而且利用仿真预测的加工误差也为寻找光刻加工过程中误 差引入提供参考,以及为系统的优化设计、减小加工误差提供理论依据。本论文 以国家自然科学基金 (NO. 60473133)"基于准 LIGA 技术的 MEMS 制造误差修 正方法计算机仿真研究"为基础而展开研究,对接近式紫外光刻工艺的曝光及后 烘过程中涉及的理论进行深入研究,克服了光刻技术中交叉学科应用带来的难 点,对曝光及后烘工艺实质进行充分模拟,提出了能够充分反映工艺过程的理论 模型。在前面几章的论述之后,本文的主要工作及展望总结如下。

5.1.本文的主要工作

首先,本文按负胶接近式光刻的主要工艺流程(接近式曝光——后烘——显 影)介绍并总结了各工艺步骤的仿真模拟理论。在曝光仿真方面,把现阶段的曝 光模型按其依据理论分为两个大类,即纯光学曝光模拟理论和光化学曝光模拟理 论。在纯光学曝光模拟理论中,介绍了接近式曝光照明系统的模拟方法、接近式 曝光模拟中常用的几种标量衍射理论以及常用的一些接近式曝光所产生表面加 工误差的修正方法。在光化学曝光理论的介绍中,以Dill 经典曝光模型为代表, 叙述了光化学曝光理论在曝光仿真研究中的重要地位,指明光化学曝光理论才是 真正意义上的曝光仿真。对于后烘过程仿真理论,简单介绍了我们主要研究对象 SU-8 负胶所属类型——化学放大胶的经典后烘仿真理论,即 Ferguson 后烘反应 动力学模型。与曝光和后烘过程相比,显影过程则显得比较单调,且显影模型随 着时代的发展,显影模型的研究正逐渐深入,显影仿真理论也渐趋成熟,本文在 简单介绍几种经典显速率模型之后并未对该方面经行详细叙述。

对于胶表面曝光,用简单的纯光学标量衍射理论即可模拟,本文在其基础上

结合课题组的研究,提出用模拟退火算法结合波前分割法对光场影响最大掩模范 围进行灰阶编码掩模矫正。通过在一定范围内对二元灰阶编码掩模的面元网格进 行局部搜索优化,最终得到光学临近矫正后的掩模编码。

如前所述,本文认为光化学曝光模型能反映深度曝光过程的主要实质,需要 采用化学动力学模型模拟曝光化学反应,并结合标量衍射理论加以光场计算。本 文以 Dill 经典曝光模型为基础,参考其建模方向,即时间轴模型和深度轴模型相 互耦合,对该模型进行扩展,形成了更为完整的曝光仿真理论。在时间轴模型的 扩展方面,分析 SU-8 光刻胶的组成及其曝光交联化学反应过程,建立了适合于 SU-8 胶的光交联反应动力学模型。而在深度轴上,以复折射率扩展下的基尔霍 夫衍射公式为基础,利用光束传播法的思想分阶段计算某曝光时刻下胶体内部的 光场分布。本文在深度轴上建立的光学模型解决了接近式光刻中光束传播路线上 折射率跳变问题,且对标量衍射理论在微不均匀介质的应用上进行扩展。最后, 通过复折射率分布作为纽带,将两个轴上的模型耦合起来,形成了能够反映 SU-8 曝光实质的新型光化学曝光模型。

本文在后烘仿真方面,从 SU-8 后烘反应过程中的光聚合反应入手,分析了 SU-8 后烘过程中的主要机理,进而为后烘模型的建立提供依据。首先介绍了最 早提出的负性化学放大胶交联反应动力学模型——Ferguson 后烘反应动力学模 型,以其作为建立 SU-8 胶后烘模型的基础。考虑到光致酸的扩散过程在整个后 烘进程中的重要性,进而对渗透剂-高分子聚合物体系的扩散机理进行分析。本 文分别介绍了扩散系数为常数的菲克扩散模型和扩散系数随浓度分布变化的第 二类扩散模型。着重介绍了第二类扩散模型中的 Vrentas-Duda 渗透剂-高分子聚 合物体系自由体积扩散理论。通过对 Vrentas-Duda 扩散系数公式按 SU-8 后烘扩 散过程的需要进行简化,结合 Ferguson 后烘反应动力学模型,最终形成了可以 描述 SU-8 后烘过程中的光致酸-环氧交联链扩散体系的后烘反应-第二类扩散模 型。

5.2.本文的创新之处

 本文针对 MEMS 光刻工艺的交叉学科、多理论结合的特点,分别考虑了 曝光和后烘过程中的耦合模型。对曝光模型,涉及到光学领域中的标量衍射理论、

光纤通讯及光信号处理领域中的光束传播法理论、高分子化学领域中的光化学反应动力学理论,等等。而后烘模型中则有:高分子化学领域中的光化学反应动力学理论以及药剂及化工领域中的溶剂-高分子扩散体系等。可以说,本文的研究 正是在基于这些难点而不断展开,也正是本文的特色之一。

在曝光仿真理论中,本文提出了针对 SU-8 负胶的新型光化学理论模型。
 该模型解决了接近式光刻中光束传播路线上折射率跳变问题,且用光束传播法对
 标量衍射理论进行扩展,使其能够在微不均匀介质上进行应用。

3. 在后烘仿真理论中,本文提出的 SU-8 后烘-第二类反应扩散模型,能够 用于描述后烘过程中光致酸的第二类扩散,是一种新型的、更能反映后烘过程实 质的理论模型。

 此外,本文结合课题组的研究成果,提出用模拟退火算法结合波前分割 法对光场影响最大掩模范围进行灰阶二元编码掩模矫正,是一种较为有效,更加 快捷的局部掩模优化方法。

5.3. 不足之处

虽然本文在曝光后烘仿真研究领域取得了一定的成效,但仍然存在以下不足 之处:

1. 虽然显影方面的仿真研究显得相对单调且日趋成熟,但其作为整个光刻 工艺中的一环也应当加以注意。相对曝光后烘过程而言,显影是纯粹的常温化学 反应过程。本文由于时间和知识背景的限制,并未对显影过程进行进一步的分析。 另外,有些文献单独对前烘和显影后清洗等步骤也进行了分析,这些过程对整个 光刻工艺都会产生或多或少的影响。如果能够对这些过程都加以考虑,势必能更 能反映整个光刻加工中的误差引入问题。

2. 本文在深度光刻的仿真方面给出了详细的讨论,定性描述了深度光刻的加工误差,相对于表面光刻模拟,本文无法给出其矫正方法。实际上,国内外也极少能见到该方面的研究文献。深度光刻形成三维结构中的垂直度是微细加工元件的一个重要属性,如果能够通过一定的手段进行优化,减小加工误差,正是深度光刻模拟仿真研究领域面临的一个难题。

由于本文集中于光刻理论方面的研究,忽略了实验。鉴于精力和实验设备有限,实验所得样本图形极为有限,限制了仿真模型计算结构与实验图形的充分对比。另外有些实际实验工作也未来得及进行,如制造矫正后的二元灰阶编码掩模并用其进行接近式曝光,与模拟结果对比等。

5.4. 深度光刻误差矫正方法可行性展望

现阶段,虽然有很多文献针对光学邻近效应给出了一些胶表面光刻误差矫正 的方法^[1],但是对于高深宽比光刻带来的深度图形制造误差矫正方面的研究却几 乎没有。近年来发展势头强劲的全息技术使得全息光刻有了长足的发展^[2],并为 UV-LIGA 中的深度光刻误差矫正带来了可能。



图 5-1 接近式深度光刻图形误差示意图

如图 5-1 所示,深度光刻图形误差主要在由衍射造成的多余部分(区域 1) 和由衍射和吸收共同作用形成的不足部分(区域 2)。在高深宽比微细加工的 UV-LIGA 工艺中,区域 1 相对于区域 2 的影响非常小,因此主要考虑区域 2 带 来光刻误差的矫正方法。

利用全息技术对区域 2 进行补偿的主要思想是: 首先利用原子束全息技术, 在基片上堆积原子产生形如区域 2 的微细图形结构^[3],该结构的精度与计算全息 的设计图形也即前面光刻仿真图形精度有关。然后用该微细结构做紫外全息成 像,制作包含区域 2 形状信息的紫外全息掩模。最后在 UV-LIGA 光刻之后在接 近式光刻间隙中插入该全息掩模再次曝光,即完成了对深度光刻图形误差的矫 正。

从理论上说,该方法是可行且有效的。但该方法存在几个明显的缺点,如原

子全息本身作为新兴技术其成本必然不低,而 UV-LIGA 正是出于降低加工成本 考虑而从 LIGA 技术发展而来,用全息技术来对 UV-LIGA 光刻误差进行矫正虽 然可行,却又提升了成本,相当于杀鸡用牛刀。另外由于全息掩模的制作只能是 对特定的深度图形进行,也就是说矫正不同深度的图形误差需要不同的全息掩 模,而且全息掩模的衍射效率问题也值得考虑。总之,全息技术为深度光刻图形 误差的矫正带来了希望,但真正用于实际生产仍有很长的路要走。

本章参考文献

[1] 石蕊, 蔡懿慈, 洪先龙, 吴为民, 杨长旗. 基于规则的光学邻近矫正中规则的 相关处理[J]. 半导体学报, 2002, 23(7): 701~706.

[2] 彭宗举, 陈芬, 周亚训, 冯伯儒, 张锦. 全息微光刻中全息掩模衍射特性的理论研究[J]. 光电子技术与信息, 2004(6): 67~71

[3] FujitaJ, MitakeS, ShimizuF. Interferometric modulation of an atomic beam by an electric field: a phase hologram for atoms[J]. Phys Rev Lett, 2000, 84(18): 4027~4030.

附录:发表论文情况

1. LIU R, ZHENG J J, ZHOU H J, et al. A Generalized Dill Exposure Model for Negative Thick Photoresist [C]// Proceedings of the 2007 International Conference on Information Acquisition, Jeju City, Korea, July 9-11, 2007: 285-291

2. 刘韧,郑津津,沈连婠,田扬超,刘刚,周洪军.基于 DILL 模型的 SU8 厚 胶曝光仿真.光电工程,2010,37(2):32-39

3. 潘攀, 李木军, 郑津津, 刘韧, 沈连婠. 采用波前分割法的接近式光刻掩 模版局部优化. 现代制造工程, 2010(1): 18-22

 Coupling Model of Deep Exposure and Post Exposure Back Process based on SU-8 Photoresist Lithography Technology. Journal of Vacuum Science and Technology B, under view.
致 谢

还记得我在做硕博连读中期答辩的时候,我曾把整个攻读博士学位的过程比 作红军两万五千里长征,虽然一路走来磕磕碰碰,但是却也能抵达终点。在这里, 我要由衷感谢五年研究生生涯中所有给予我帮助的人们。

首先我要衷心感谢我的导师郑津津教授,他在我攻读博士学位期间对我学业 上的悉心指导和生活上的热情关怀是我能顺利毕业的关键。我从本科开始就作为 他的弟子在实验室研究学习,直到博士毕业,可以说是郑老师的一手栽培。在六 年里多的时间里,从本科毕业设计开始,指导我选择课题方向,到后来课题的深 入,指导我在课题研究中发现创新,再到最后指导学位论文的撰写与修改,无不 凝聚了郑老师的智慧与辛勤。他是我们实验室的领导者,但更是我们的良师益友。 他在我学生期间给我了一次出国学习的机会,在那短短的三天时间里我从他那里 学到了很多课本或校园里无法学到的东西,与人的交流、对课题前沿的敏锐嗅觉、 对国外文化的理解等等等等。平时的实验室例会也好,在他办公室单独交流也好, 他总能在课题研究或处理问题等方面给予我充分的指导。此外,郑老师在实验室 管理上松紧有度,在督促我们保质保量完成自己研究课题任务的同时给予了我们 充足的空间与时间。这里我要特别感谢他对我在研一到博二的四年里担任 05 级 本科班班主任一职的宽容与理解,班主任的工作诚然对实验室工作有所影响,但 是在他的理解与支持下,我还是较好地处理了两者之间的关系。我和郑老师相处 的六年的时间并不长,但他严谨的治学态度,务实求真的工作精神,清晰的逻辑 思维,以及在科研上敏锐的学术嗅觉都将使我受益匪浅,终生难忘。

沈连婠教授虽然不是我的导师,但作为 CAD/CAM 课题组的带头人,她总 能在各方面给予我们很多有益的建议。她那活跃的思想、渊博的知识、踏实认真 的工作作风、乐观平和的生活态度是我们学习的榜样。虽然在研究生期间,年少 轻狂的我还和沈老师顶撞过,但在我深知她对学生的一片赤诚之心后,我才知道 她丰富的经验和人生阅历是我们课题组的一大财富。我要感谢她在课题上给我的 指导,也感谢她给予我在人生道路上的教导。

此外我要感谢中国科学技术大学同步辐射实验室的田扬超老师、刘刚老师、 周洪军老师以及本系的王克逸老师、李木军老师在课题研究及实验等方面给予的

103

支持和帮助,没有他们我的课题将无法顺利进行。

在攻读博士期间,本课题组已经毕业的李晓光师兄、赵伟师兄、陈有梅师姐, 都曾在理论方面给予了我许多帮助,同组的陶波师弟也在实验方面给予了我巨大 的帮助,能在这个互助互进的集体中学习工作,不胜荣幸。同时我要感谢郑老师 及沈老师两个实验室的全体同仁,没有你们的关怀与支持,我的读博之路无法平 坦。

最后我要感谢我的家人,感谢他们一直以来给予我的理解与支持,他们无私 的爱一直是我前进的动力。特别要感谢我的妻子王灵灵,多年以来一直都在支持 我的工作,照顾我的生活,伴我走过无数难忘的日子,使我的论文得以顺利完成。