

# Metropolis 蒙特卡罗模拟湿法腐蚀算法研究及应用\*

朱 鹏<sup>†</sup> 幸 研 易 红 汤文成

(东南大学机械工程学院, 先进制造技术实验室, 南京 211189)

**摘要:** 探讨了 Metropolis 蒙特卡罗方法模拟硅微加工各向异性湿法腐蚀仿真算法. 在台阶流动(step flow)模型上引入了腐蚀概率方程, 确定了蒙特卡罗转移概率. 通过对不同相位晶面(vicinal surface)在掩模下的腐蚀模拟对提出的方法进行了校验分析, 解释了蒙特卡罗法处理复杂晶面的原理和过程. 模拟测试中, 仿真程序能正确地再现不同晶向腐蚀速率特性以及凸角腐蚀的结构形态. 经过与目前报道的元胞自动机以及其他种类蒙特卡罗法比较分析, 模型具有较高的仿真效率和结果精度. 最后, 该系统模拟一个实际的微加速度传感器设计中的凸角补偿问题, 在震动岛块的掩模补偿设计中验证了模型的正确性.

**关键词:** Metropolis 蒙特卡罗; 单晶硅; 各向异性; 湿法腐蚀  
**EECAA:** 2550X

**中图分类号:** O414. 2      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0253-4177(2008)01-0183-06

## 1 引言

单晶硅各向异性腐蚀<sup>[1]</sup>是一项非常重要的硅微加工技术. 为了模拟在不同的腐蚀环境中硅晶体的各向异性, 经常使用的基于原子模型的方法主要有蒙特卡罗(Monte Carlo, MC)和元胞自动机(cellular automata, CA)<sup>[2,3]</sup>. 在基于 CA 的方法中, 文献[2,3]中的连续 CA 最具代表性. 这种对硅原子状态转移呈现并行处理的方法目前主要面向工程应用中模拟在掩模作用下基本结构面形成的过程. 蒙特卡罗法则在仿真尺度更小的场合有效地发挥了作用, 它不但能真实地再现在腐蚀液作用下, (111)面随氧浓度变化的三角形凹陷的走向, (100)表面金字塔状的凸起结构以及腐蚀过程中(110)面锯齿状表面产生的过程, 而且在模拟更为复杂的腐蚀液中的金属阳离子不纯物影响, 以及氧化层边界对腐蚀过程影响中都能得到满意的结果.

研究中, 借鉴文献[4]中的动力学蒙特卡罗(kinetic Monte Carlo, KMC)中的状态转移方法, 使用了 Metropolis 蒙特卡罗<sup>[4~12]</sup>分析方法, 编制了仿真分析程序. 仿真软件能应用掩模对典型的微系统三维结构加工过程进行模拟. 与报道的方法比较, 本文的方法在模拟(100)和(110)的腐蚀加工中具备更快的速度和使用多个掩模进行多步模拟的优点. 其效率和对加工表面的模拟精度与目前发表的连续 CA 比较也有一定的提高, 文中还进一步讨论了高米勒指数晶面在腐蚀加工中的腐蚀速度问题. 最后以凸角处晶面形成结构面以及消除凸角的补偿设计为例进行了测试, 两例仿真很好地符合了实验数据.

## 2 算法模型

### 2.1 蒙特卡罗法

蒙特卡罗法是一个宽泛的概念, 它在计算物理中也有着广泛的应用, Metropolis 蒙特卡罗是蒙特卡罗方法的起源, 在该领域随后又出现了热力学蒙特卡罗, 动力学蒙特卡罗及量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo)等多种分支. 它们描述问题的方式和解决问题的场合有所不同. 其中 Metropolis 蒙特卡罗和动力学蒙特卡罗都能用于硅晶体的各向异性腐蚀模拟. 它们的不同点可以简述如下: Metropolis 蒙特卡罗一般先随机选取当前系统中的一个配置, 然后从旧配置出发尝试发生一个新配置, 如果生成的一个随机数满足这个转移的概率, 系统就变化到新的状态. 而动力学蒙特卡罗中, 需要对系统所有的配置转移速率求和, 然后查找选择其中的一个事件发生, KMC 往往把数据组织成二叉树结构或者给表面粒子做分类, 两种方法在计算物理时间方法上也不相同.

另外, 如果系统中的配置都是在很低的概率条件下(例如, 仿真(111)面的腐蚀过程), 那么 Metropolis 蒙特卡罗就会变得效率非常低下. 然而, 对于动力学蒙特卡罗计算过程中会有一个排序或者查找的过程, 这个过程在系统粒子数较多的情况下, 同样会降低效率. 本文研究对象是在(100)和(110)晶面上进行的各向异性腐蚀, 在与以往的研究结果分析对比中发现, 选择 Metropolis 蒙特卡罗方法, 能够具有动力学蒙特卡罗仿真精度, 表达细微的表面形状, 但是程序数据结构简明, 过程适应性好, 仿真速度能够明显加快.

\* 国家高技术研究发展计划(批准号:2006AA04Z351)和国家自然科学基金(批准号:50675033)资助项目

<sup>†</sup> 通信作者. Email:8844615@163.com

2007-06-13 收到, 2007-07-10 定稿

## 2.2 各向异性腐蚀模型

Metropolis 蒙特卡罗<sup>[5]</sup>认为在一个系统中,假设当前是  $m$  状态,系统能量为  $V_m$ ,在试着转到状态  $n$  的过程中,先计算状态  $n$  的总能量  $V_n$ ,然后再比较两个状态的能量差.当  $\delta V_{nm} = V_n - V_m \leq 0$  时,状态  $n$  是比状态  $m$  能量低的状态.由于系统总是趋向于能量低的状态,此时系统无条件转到状态  $n$ ,若  $\delta V_{nm} = V_n - V_m > 0$ ,则以概率  $\rho_n / \rho_m$  转到状态  $n$ :

$$\rho_n / \rho_m = e^{-\beta \delta V_{nm}} \quad (1)$$

此时需要产生一个随机数  $\xi$ ,若  $\xi < e^{-\beta \delta V_{nm}}$ ,则系统转到状态  $n$ ,否则不变.式中  $\beta$  为波尔兹曼常数.

跟薄膜和晶体生长方法类似,蒙特卡罗仿真中硅的各向异性腐蚀是一种由扭折(kink)驱动的台阶流动(step-flow)的过程,并已经在 STM 观察下得到证实.该模型对不同晶向不同的腐蚀速度的解释与 CA 的模型有很大差别.台阶流动的速度有两类主要腐蚀速度合成,分别为台地(terrace)的速度  $v_{\text{terrace}}$  和与其垂直的台阶(step)的腐蚀速度  $v_{\text{step}}$ ,例如(111)面是全部由台地构成的晶面,反应速度很慢,晶面上的原子腐蚀并不是由(111)面原子主导的,而是由(111)面原子腐蚀掉后产生的扭折主导的.为了简述这个问题,若将其旋转一个角度,例如旋转  $8.47^\circ$  形成(775)晶面的误切,就得到了由台地和台阶不同原子组成的晶面.图 1(a)中可以观察到当一个蒙特卡罗事件发生在台地面(111)时,原子被腐蚀掉的概率很小,一旦发生则会在断面处形成一个扭折位置(kink site),而此处的原子很容易被腐蚀掉,于是就形成了台地面由扭折处快速向外延展开的趋势.这种不断的产生扭折和不断向外延展的过程最终形成了以台阶传播为特征的腐蚀过程.

对各向异性模拟的精度高还意味着能再现一些加工中出现的复杂米勒指数的晶面,目前研究较多的 CA 模型中,经常讨论某一种晶面的原子,例如(311)晶面原子,并试图命名其原子,确定其腐蚀速度.即使单纯确定了(311)等所有晶面原子速率,然而(311)或者(411)并不总是本族晶面中腐蚀最快的晶面,因此硅晶体各向异性相对于氧浓度依存性就没有办法在仿真中得以体现,这样也会使确定速率问题变成一个烦琐的试错法求解的过程.

从图 1 可以看到,在同一晶面族上,表面原子的类型是一致的,并且由不同排列方式共同构成,例如(997)和(775),不同的是其台地的长度和误切的几何角度.(997)的(111)台阶的长度是 7,而(775)的长度为 5.本文使用的确定扭折原子台阶传播的原则,在随后的仿真中发现,能在凸角处呈现那些实验中出现的结构面.

另外,每一步 Metropolis 蒙特卡罗的物理时间有确定的算式.目前报道的连续 CA 算法讨论了时间补偿问题.在 CA 模型的开发中对比测试发现,时间步长对于使用掩模时的 CA 的运行效率和结果有很大影响.加大步长能使系统运行明显加快,但是仿真结果会发生变化.计算 CA 模型中还发现,该方法也可以同样使用精

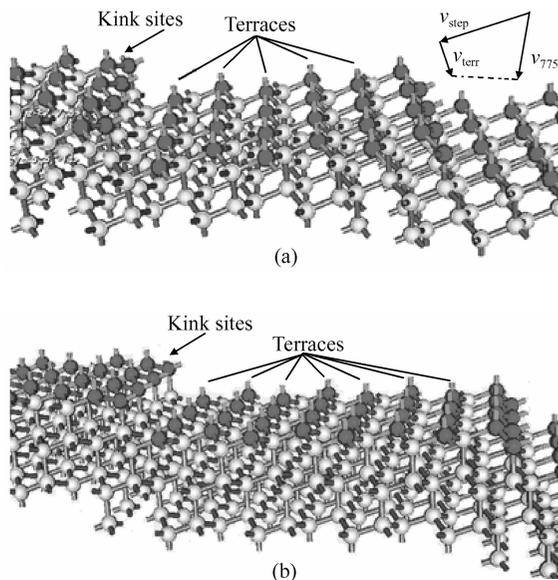


图 1 (a) (775)晶面的台阶结构;(b) (997)晶面的台阶结构

Fig.1 (a) Step structure of (775) surface; (b) Step structure of (997) surface

确的时间步长,从而在根本上摒弃补偿的问题,但是这样会使仿真速度降低至少一个数量级.更进一步,蒙特卡罗法对表面形态模拟的优势可适用于各种微纳米加工方法的仿真,因此研究高效,精确的 MC 模型有更好的工程背景和意义.

## 3 计算仿真

### 3.1 基底模型和概率方程

利用单晶硅原子几何结构的规则性,可以有多种方式选择单元晶格来构成基底,开发中选取(100)晶面上四个原子作为一个单元晶格,则整块衬底可看作是由该单元晶格在  $x, y, z$  三个方向上复制而成的.邻居原子的搜索可以按照编号规则查找,任意相邻原子的坐标和邻居的编号都可以根据齐次坐标变换得到.

同时,以这个基本的单元晶格为基准,经过坐标变换,还可以得到任意晶向的平面结构,例如图 1 中的(775)晶面,就是基于四原子单元晶格重新计算的新的单元晶格组成的,从该晶面可以看到这种台阶和台地构成的原子结构,可用于研究该族晶面在台阶模型中表面原子的逐个腐蚀过程.

硅原子腐蚀这个随机过程中,单个表面原子在不同的状态下具有不同的激活能,以不同的概率转向脱落状态,根据文献[4]的研究,表面原子被腐蚀掉的概率和它的一级邻原子和二级邻原子有关.一级邻居发挥主要影响作用,但一级邻居不能够区分所有的原子类型,如(110)面和(111)面的原子都有 3 个一级邻居但腐蚀速率却相差很大,因此必须考虑二级邻居的因素.下面的方程表示了被腐蚀概率与一级邻居数  $n_1$  和二级邻居数  $n_2$  的关系:

$$P(n_1, n_2) = P_0 \frac{1}{1 + e^{\beta e_1 (n_1 - n_1^0)}} \times \frac{1}{1 + e^{\beta e_2 (n_2 - n_2^0)}} \quad (2)$$

式中  $P_0 = (1 + e^{-\beta e_1 n_1^0})(1 + e^{-\beta e_2 n_2^0})$ ;  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  为波尔兹曼常数;  $n_1^0 = 3, n_2^0 = 7$ , 分别看作在  $T = 0$  时原子能达到激活状态的平均邻居数;  $e_1 = 0.35\text{eV}, e_2 = 0.16\text{eV}$ , 分别看成是一级邻居和二级邻居之间的平均激活能. 位于扭折上的原子即对应于方程中高腐蚀概率的状态参数.

### 3.2 计算过程

与 Gosalvez<sup>[4]</sup> 使用的方法不同, 系统首先初始化衬底的表面原子, 然后处理掩模图形, 程序通过使用像素文件表示掩模的图案. 接着在衬底的原子阵列中创建氧化层或氮化层. 初始化之后在内存中形成了硅表面原子的配置. 系统启动蒙特卡罗法, 生成一个随机数, 根据当前表面原子的总数选取当前系统中的一个配置, 计算这个被选定的硅原子的状态, 获得邻居信息, 带入(2)式求得转移概率. 然后系统再生成一个随机数, 如果这个随机数能满足转移的概率, 系统将移除这个原子, 变化到新的状态, 完成后, 刷新表面原子列表, 改变系统当前配置, 等待下次蒙特卡罗事件. 程序每次都计算蒙特卡罗法单步的物理时间, 并做时间总和的累计. 最后在达到实际系统时间的时刻完成仿真, 接着渲染原子点云数据, 进行可视化输出.

## 4 结果与讨论

### 4.1 凸角结构腐蚀模拟

在未经补偿的掩模下进行凸台腐蚀的过程中会出现复杂晶面构成的凸角. 在利用凸角处出现的晶面获得结构面的 AFM 探针测试中, 当台面逐渐缩小直至消失, 除去掩模后留下的只由凸角结构组成的面时探针针尖结构便形成了. 系统仿真的最终可视化结果如图 2 所示. 腐蚀环境为: 30wt% KOH 溶液; 75°C; (100) 衬底, 尺寸: 500 × 500 晶胞阵列.

由图 2(b) 可见, 在上部和底部的位置处分别出现了临近的(311)及(110)结构面. 应用蒙特卡罗模型可以在正确的三维基本构成面上模拟出了更贴近实验结果的表面结构. 图中邻近的(110)面, 出现了明显的条状表面结构, 界限也能符合实验中结果. 此外在补偿这种凸角的测试中(图 6(d)), (111)面上可以观察到, 腐蚀面是由一个蚀点(pit nucleation)处逐渐向四周延展开来的, 此外(100)表面出现的凸起, (110)面锯齿状的表面, 以上这些特征正是台阶流动模型在蒙特卡罗法的作用结果.

### 4.2 各晶向腐蚀速率测试

实验中常采用轮辐形状掩模对不同晶向的腐蚀速率进行测试. 为了进一步证明该模型对各晶面腐蚀速率模拟的正确性, 测试中采用相同图案的掩模进行对比.

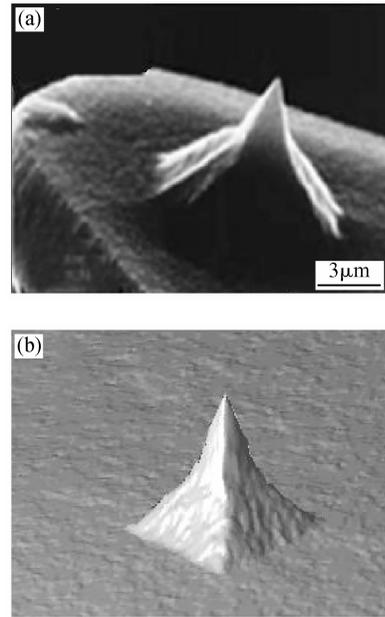


图 2 (a)凸角腐蚀制作的 AFM 探针 SEM 图<sup>[6]</sup>; (b)仿真结果  
Fig.2 (a)SEM micrograph of the fabrication of AFM probe by convex corner etching; (b)Simulation result

为得到腐蚀速率随晶向变化所产生的凸角变化特性, 还分别使用了偏移(110)面 0°, 6°, 12°, 18°, 27°, 30°, 36°, 42° 和 45° 的条形图案的掩模进行测试.

图 3 和 4 得到的点云数据渲染结果比目前基于 CA 的模拟软件更为细致准确. Metropolis 蒙特卡罗计算结果的原子点云数据结构清晰、三维细节表达效果理想. 图 3 中的局部最大和最小的腐蚀速度点 ( $R, P, Q$ ) 清晰, 图 4 中尺寸相同的掩模作用下, 由于不同晶向腐蚀速率各异, 形成了形状和尺寸不同的凸角结构面. 在这一系列的结构面变化中可以发现最大腐蚀速率出现在

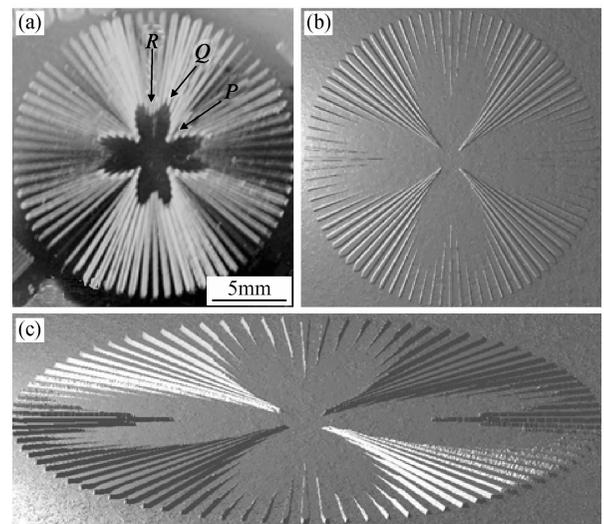


图 3 轮辐掩模下的腐蚀测试 (a)实验结果<sup>[7]</sup>; (b)采用 MC 得到的模拟结果俯视图; 采用 MC 得到的模拟结果立体图(c)  
Fig.3 Etching under the wagon-wheel mask (a)Experimental result<sup>[7]</sup>; (b) Simulation result (top view); (c) Simulation result (side view)

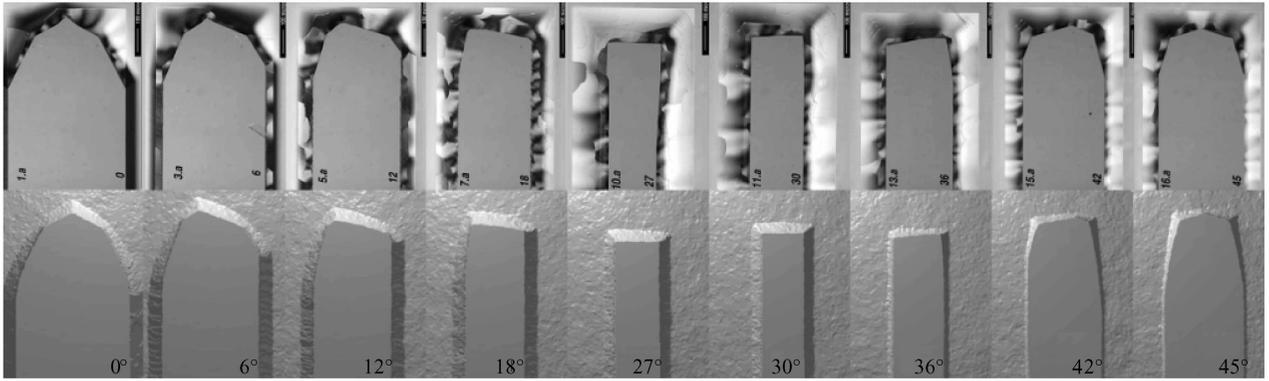


图 4 (100)面相对(110)面旋转 $0^\circ, 6^\circ, 12^\circ, 18^\circ, 27^\circ, 30^\circ, 36^\circ, 42^\circ$ 和 $45^\circ$ 偏角条形掩模腐蚀 上侧为SEM下观察到的形状<sup>[4]</sup>;下侧为本系统仿真输出的原子点云数据渲染图

Fig.4 Etching under masks of rectangular bars misdirected of  $0^\circ, 6^\circ, 12^\circ, 18^\circ, 27^\circ, 30^\circ, 36^\circ, 42^\circ$  and  $45^\circ$  towards (110) orientation respectively SEM images<sup>[4]</sup> (upside); Rendering of atom cloud points from simulation result (underside)

偏离(110)面旋转 $27^\circ$ 的位置,接近(311)晶面附近.文献[4]报道的方法在 $230\text{nm} \times 230\text{nm}$ 仿真尺寸上获得与图4相近的结果,使用Alpha R12000工作站大约需要16min.本文的方法在Pentium4计算机上做同等规模的模拟只需大约3min的时间.

### 4.3 凸角补偿仿真

凸角补偿技术被广泛地应用于微加速度传感器等微结构的加工中.一般地,传感器的结构由震动岛块和弹性支撑结构组成.此结构中,震动岛块由于加速度产生了惯性力,并使得上部的支撑弯曲,进而由转换元件测量位移量来感知实际加速值.为计算惯性力,需要精确计算岛块的质量值,岛块在腐蚀加工中产生的凸角需要消除.该过程是批量生产可靠性的关键.

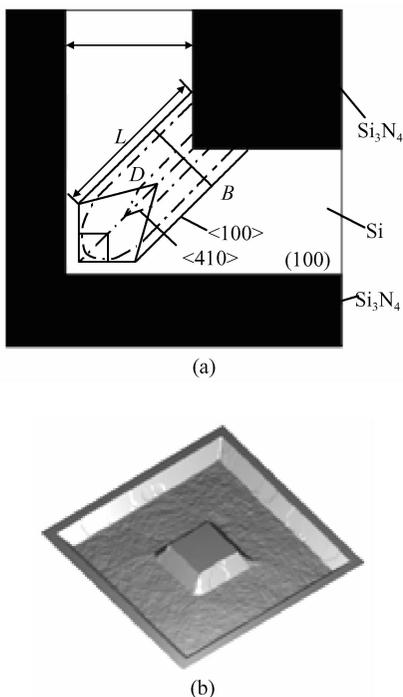


图 5 (a)凸角补偿的原理图;(b)整体模拟图

Fig.5 (a)Sketch map of the convex corner compensation theory;(b)Simulation result of the whole structure

以(100)晶片制作的加速度计,其掩模设计最常见的是使用带状(band)补偿.初步设计中可采用经验公式的做法,其原理如图5(a)所示.

$$L = (H - B/2) \tan \alpha \quad (3)$$

其中  $L$  为 $\langle 110 \rangle$ 方向的长带的长度; $H$ 为腐蚀深度; $B$ 为 $\langle 100 \rangle$ 方向的长带的宽度; $\alpha$ 为 $(411)$ 或者 $(311)$ 与 $(100)$ 面的腐蚀速率比; $a, b$ 为调整系数.本文的模型可以很好地模拟这个带状补偿的过程,腐蚀过程的SEM图和仿真结果如图5(b)和图6所示.

图6中(A~D)分别为腐蚀进行到60,167,258和352min时凸角处呈现出的结构,(a~d)分别给出了模拟程序在对应时间下的输出结果.补偿条的凸角末端处首先出现临近(311)的快腐蚀面,在腐蚀过程中,底部出现的临近(110)面和侧面的(100)面被腐蚀快的面逐渐替代,在接近顶角的时候停止腐蚀加工过程,最后结果得到了完整的由(111)面组成的接近直角的凸台.

### 4.4 仿真效率分析

目前,由于受计算机的存储、计算能力以及可视化的限制,不可能从模拟对象的真实尺寸出发构建原子模型实施仿真分析.事实上,对于各种基于原子模型的仿真方法,一般是在一个合适的尺寸上(如在几百纳米边长的方形尺寸上进行),然后重新映射到真实尺寸和时间规模上.这样大小的尺寸能够满足大多数的掩模精度要求.对一个算法的评价,应该在这个级别的尺寸上做到快速而精确.仿真效率方面,在与文献[3]报道的连续CA方法做相同掩模图案,腐蚀时间的模拟比较中,本模型以图3为例,使用AMD3800(2.01GH)的计算机,同样在 $600 \times 600$ 晶胞的相同深度衬底上,获得类似的结构,耗时约为40s,节省了约55%的时间.另外在与文献[4]报道的动力学蒙特卡罗法比较中,应用于非(111)面的场合,效率也有很大的提高.

Metropolis蒙特卡罗计算直接的影响因素是表面的原子个数和整体上表面原子配置转移概率的大小.其缺点是模拟如(111)面中,计算会变的非常缓慢.测试中,为了使单位尺寸上表面原子数最多,使用了无掩模

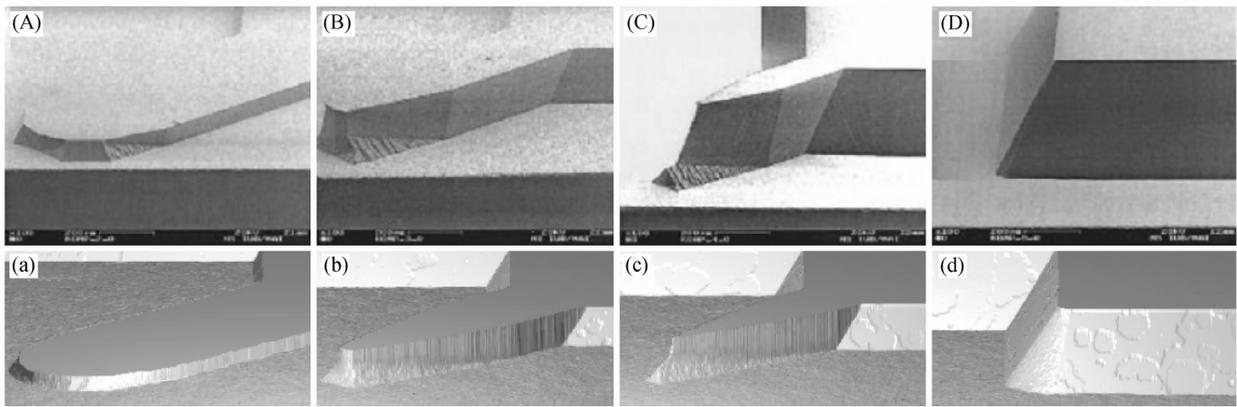


图 6 在不同时刻下由 SEM 观察到的凸角形态(A~D)<sup>[8]</sup>和模拟得到的凸角形态(a~d)  
Fig. 6 Convex corner structure SEM images at different moments (A~D)<sup>[8]</sup> and simulation result (a~d)

作用的衬底讨论算法随尺寸变化的效率问题.

图 7 为对实际尺寸从 100 到 1000nm 边长的正方形(100)和(110)无掩模晶片腐蚀 30 个时间步长所消耗的 CPU 时间. 图 7 中的曲线(3)和(4)是固定在 500nm 边长正方形衬底下不同时间步长的仿真效率分析.

图 7 中(1)、(2)是两条与边长为平方关系的曲线( $\text{nm}^2$ ), 即说明了 Metropolis 蒙特卡罗计算效率和表面原子的数量为线性关系. 由图 7 还可以发现消耗时间与模拟时间步长之间也属于线性的关系(曲线(3)、(4)所示).

## 5 结论

本文使用了在微观尺度上常用的 Metropolis 蒙特卡罗分析方法, 建立了硅微加工的仿真模型, 以凸角结构腐蚀为例进行了算法验证. 对典型的三维微结构形成进行了模拟并与已有的模型在实现方法, 精度和效率方面进行了对比讨论.

该蒙特卡罗方法基于台阶流动模型, 采用了腐蚀概率方程决定转移概率. 解释了各向异性腐蚀中扭折原子作用和台阶传播过程. 最后根据实验结果对提出的方法

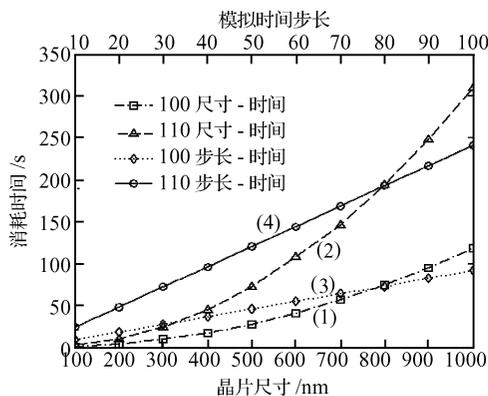


图 7 仿真尺寸、仿真时间步长与计算 CPU 时间曲线

Fig. 7 Relationship between size of substrate, time steps and CPU time

进行了校验. 模拟了一个实际的微加速度传感器设计中的凸角补偿, 在震动岛块的掩模设计中验证了模型的正确性. 利用该算法开发的程序可模拟出由复杂米勒指数面构成的微米/纳米级别的三维复杂的各种微结构. 与报道的其他模型比较发现, 具有较高的仿真效率和精度, 输出结果更为细致准确.

**致谢** 感谢芬兰赫尔辛基理工大学理论和计算物理实验室 M. A. Gosalvez 研究员, 在近两年时间的共同研究中细致的建议和帮助, 以及提供的实验数据.

## 参考文献

- [1] Huang Q A. Silicon micromachining technology. Beijing: Science Press, 1996:51 [黄庆安. 硅微机械加工技术. 北京: 科学出版社, 1996:51]
- [2] Zhu Z, Liu C. Micromachining process simulation using a continuous cellular automata method. Journal of Microelectro-Mechanical Systems, 2000, 9(2): 252
- [3] Zhou Zaifa, Huang Qing'an, Li Weihua. Novel cellular automata model for silicon bulk etching simulation handling high index planes. Chinese Journal of Semiconductors, 2007, 28(5): 731 (in Chinese) [周再发, 黄庆安, 李伟华, 等. 考虑高指数晶面的体硅腐蚀模拟新 CA 模型. 半导体学报, 2007, 28(5): 731]
- [4] Gosalvez M A, Nieminen R M. Anisotropic wet chemical etching of crystalline silicon: atomistic Monte-Carlo simulations and experiments. Appl Surf Sci, 2001, 178(1~4): 7
- [5] Lei Guiyuan. Studies of Monte Carlo and Monte Carlo method. PhD Dissertation of Zhejiang University, 2003 (in Chinese) [雷桂媛. 关于蒙特卡罗及模拟蒙特卡罗方法的若干研究. 浙江大学博士学位论文, 2003]
- [6] Wakayama T, Kobayashi T, Iwata N. Micro-fabrication of silicon/ceramic hybrid cantilever for atomic force microscope and sensor applications. Sensors and Actuators A, 2006, 126(1): 159
- [7] Gosalvez M A, Foster A S, Nieminen R M. Multiscale modeling of anisotropic wet chemical etching on crystalline silicon. Europhysics Letters, 2002, 6(30): 467
- [8] Schroder H, Obermeier E. Convex corner undercutting of {100} silicon in anisotropic KOH etching: The new step-flow model of 3-D structuring and first simulation results. Journal of Microelectro-mechanical Systems, 2001, 10(1): 88
- [9] Akis R, Ferry D K, Musgrave C B. Kinetic lattice Monte Carlo

- simulations of processes on the silicon (100) surface. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 2003, 19(1/2): 183
- [10] Van Veenendaal E, Nijdam A J, Van Suchtelen J. Simulation of anisotropic wet chemical etching using a physical model. *Sensors and Actuators A*, 2000, 84(3): 324
- [11] Gosálvez M A, Foster A S, Nieminen R M. Atomistic simulations of surface coverage effects in anisotropic wet chemical etching of crystalline silicon. *Appl Surf Sci*, 2002, 202(3/4): 160
- [12] Mayer G K, Offereins H L, Sandmaier H, et al. Fabrication of non underetched convex corners in anisotropic etching of (100)-silicon in aqueous KOH with respect to novel micromechanic. *Elements J Electro-Chem Soc*, 1990, 137(12): 3947

## A Metropolis Monte Carlo Simulation Approach for Anisotropic Wet Etching and Its Applications \*

Zhu Peng<sup>†</sup>, Xing Yan, Yi Hong, and Tang Wencheng

(Laboratory of Advanced Manufacture, Department of Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China)

**Abstract:** A simulation model based on Metropolis Monte Carlo for anisotropic etching is presented. The step flow model of kink propagation is introduced in the modeling process of the simulation. For the calculation of the transaction probability of the Monte Carlo method, the removal probability function is set forth by using the nearest-neighbor bond-counting model. The simulation is carried out on different vicinal surfaces to verify the efficiency of the model. Through understanding the kink propagation, the velocity of high Miller-index facets can be explained. Compared with reported CA and other Monte Carlo methods, this model shows higher efficiency and accuracy in simulation. Finally, compensation for convex corners of the micro accelerometer is performed, and the visualization result of simulation agrees well with the experimental results.

**Key words:** Metropolis Monte Carlo; single crystal silicon; anisotropic; wet chemical etching

**EECAA:** 2550X

**Article ID:** 0253-4177(2008)01-0183-06

\* Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China (No. 2006AA04Z351) and the National Natural Science Foundation of China (No. 50675033)

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: 8844615@163.com

Received 13 June 2007, revised manuscript received 10 July 2007

©2008 Chinese Institute of Electronics