

# 蒙特卡罗法单晶硅的腐蚀工艺表面微观形态仿真研究

幸 研<sup>†</sup> 朱 鹏 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:** 讨论了基于蒙特卡罗法模拟各向异性腐蚀加工的微观表面形态的仿真方法. 应用台阶流动模型, 分析了  $(h, k, l)$  晶面中  $(h+2, h, h)$ ,  $(h, 1, 1)$ ,  $(h+2, h+2, h)$  以及  $(h, h, 1)$  晶面族上反应活跃的台阶部位原子的排列特征, 结合微掩模的作用和定义方法, 提出了通过限制各晶面族台阶部位广泛存在的一级、二级邻居数为  $(3, 7)$  原子移除概率的方法来模拟快速反应区域的吸附抑制现象. 把上述内容应用于 RPF 函数对  $(100)$  面的凸起结构,  $(110)$  面的带状条纹以及  $(111)$  面的三角形凹陷微观结构进行了仿真计算, 解释了腐蚀中微观形貌的特征和成因. 算法在 3 种基础晶面和高指数  $(322)$  晶面的计算结果能够很好地符合实验中观察到的表面形态微观特征, 验证了方法的有效性.

**关键词:** 蒙特卡罗; 单晶硅; 湿法腐蚀; 表面形态  
**EECAA:** 2550X

**中图分类号:** O414. 2      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0253-4177(2008)10-2027-07

## 1 引言

各向异性湿法腐蚀是一项重要的 MEMS 工艺, 在多次掩模的作用下, 能够产生复杂的腔体、悬臂梁、针尖等三维微结构. 湿法腐蚀与离子腐蚀等形成的复合工艺, 已经成为主要的微结构加工手段<sup>[1]</sup>. 目前各向异性腐蚀研究领域, 对于腐蚀中微结构面形成的仿真方法已经有了较为广泛的研究, 基于原子模型的计算方法能够为准确地模拟加工中出现的晶面<sup>[2~4]</sup>. 但是实验发现, 腐蚀表面常常出现一些难以预料的微小的特殊形态. 这些典型微观形貌在不同晶面下表现不同, 形式固定.  $(100)$  表面呈现的是金字塔状的凸起,  $(110)$  面出现的是锯齿状条纹, 而  $(111)$  面会形成三角形凹陷<sup>[5]</sup>. 随着 MEMS 器件的复杂化、微型化, 在器件的性能方面将不得不考虑表面粗糙度以及表面形态因素的影响. 在仿真方法中, 蒙特卡罗法 (MC) 的计算特点使其成为加工结构面腐蚀以及微观表面形态研究的主要手段.

目前在开展的微观形态实验和仿真中, 对基础晶面  $(100)$ ,  $(110)$ ,  $(111)$  微观特征的研究提出了多种假设. 不同的研究人员在晶面计算模型以及参数使用上各不相同. Veenendaal<sup>[6]</sup> 在解释  $(100)$  面的微观结构时认为, 凸起现象的原因不只是凸起顶端附着物带来的微掩模影响, 凸起的棱边部存在吸附微小附着物的现象, 这一现象使得该处的原子较为稳定. Veenendaal 的 MC 模型只考虑最近的一级邻居, 4 种类型的原子. 该方法一般只能用于模拟表面形貌, 由于其最大腐蚀速率的晶面被设定为  $(100)$ , 并且计算模型中有限的原子分类限制了正确识别加工中出现的高指数晶面的能力, 仿真范围有限. Gosalvez<sup>[7]</sup> 使用了 6 种原子类型, 根据微观形貌特征确定了原子的跃迁几率, 但是在不同的晶面需要调

整不同的参数. 同样 6 种原子的模型模拟腐蚀工艺无法达到精确仿真的目的. 研究表面形貌的蒙特卡罗法大都基于薄膜生长模型发展而来, 方法上采用了 Solid-on-Solid 模型假设, 即在深度方向是单值的函数, 限制了对复杂三维结构面的腐蚀计算.

本文从作者已开展的研究出发<sup>[8]</sup>, 讨论表面形貌的仿真方法, 提出的改进模型一方面能够满足计算腐蚀复杂三维结构面的要求; 另一方面, 微观形貌上能准确符合实验中出现的特征. 在微观形貌模拟中, 基于台阶流动模型, 详细分析了各晶面族的台阶台地特征, 应用微掩模并且把吸附效应的影响作用于活跃的台阶部位. 基于原子移除概率方程 (RPF) 函数, 考虑上述腐蚀的微观效应, 在基础晶面和高指数晶面  $(322)$  上模拟出了实验中出现的表面形貌.

## 2 表面微观特性

实验中发现, 湿法腐蚀中单晶硅表面形貌在不同的晶面上出现的结构形状各异, 但是微观特征非常明显. 腐蚀液的浓度、搅拌与否以及表面活性剂的添加都会对粗糙度有所影响. 一些典型的微观形貌在 KOH 以及 TMAH 腐蚀系统中均会出现.  $(100)$  晶面最容易观察到的是如图 1(a) 所示的金字塔状的凸起, 这些凸起在腐蚀开始的时候会快速形成, 然后大小趋于稳定, 塔状结构的 4 面是稳定的  $(111)$  面, 在凸起排列密度较高的地方会形成相互聚集交错的情形.

$(110)$  面微观形貌完全不同于  $(100)$  面, 它的特征是以图 1(b) 的条带状形态分布的, 条带的方向为  $\langle 110 \rangle$  向, 复杂带状结构侧面的倾角虽然没有  $(100)$  面凸起结构面容易辨识, 但是可确定条带侧面的方向大致为偏

<sup>†</sup> 通信作者. Email: xingyan@seu.edu.cn

2008-03-18 收到, 2008-05-30 定稿

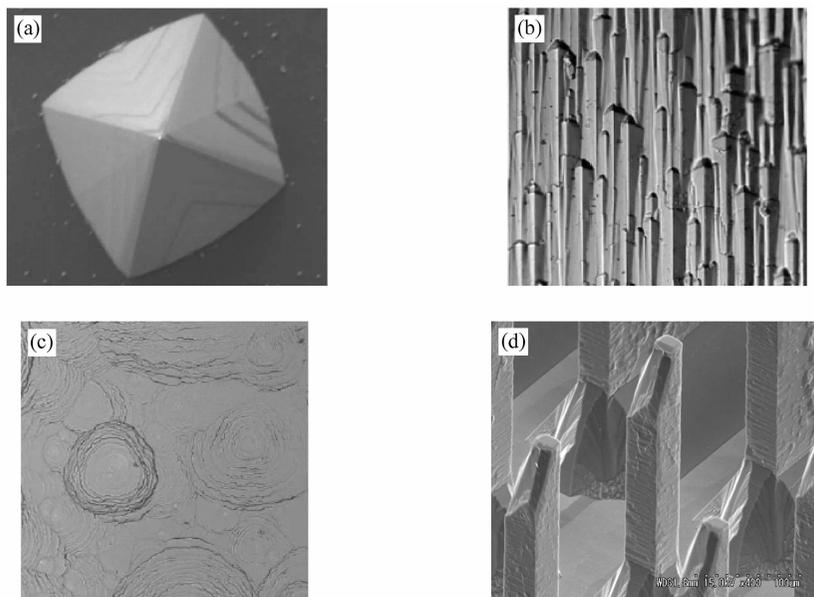


图 1 实验中基础晶面的微观形貌<sup>[5]</sup> (a) (100)晶面在腐蚀中出现的金字塔状凸起(单个),10wt%,KOH,70°C;(b) (110)晶面以条带状凸起为特征的微观形貌,26wt%,KOH,80°C;(c) (111)晶面以三角形凹陷为特征的微观形貌,43wt%,KOH,40°C;(d) 微针阵列中(110)面构成的针壁上的条带状的集束凸起<sup>[9]</sup>,34wt%,KOH,70°C

Fig.1 Surface morphology of three principle planes during etching<sup>[5]</sup> (a) Single pyramidal etching hillock on Si (100) in 10wt% KOH at 70°C;(b) Strip patterned morphology on Si (110) during etching in 26wt% KOH at 80°C;(c) Triangular etch pits on Si (111) surface in 43wt% KOH at 40°C;(d) Formation of strip structure on the Si (110) sidewall of micro needle array etched in 34wt% KOH at 70°C<sup>[9]</sup>

$\langle 111 \rangle$  向的  $(h, h, 1)$  面. 为了说明微观形貌的影响, 图 1 (d) 显示了 KOH 腐蚀加工得到的微针阵列<sup>[9]</sup>, 微针的侧壁是  $\langle 110 \rangle$  向的晶面, 结构面上的条带状的特征在扩散效应的作用下非常明显, 而 (110) 面在这种腐蚀中出现的较高粗糙度已经成为影响 (110) 晶面使用的一种原因.

(111) 晶面的微观特征是表面出现类似三角形的凹陷, 低、中和高浓度的情况也有所不同. Sato 的研究<sup>[10]</sup> 发现在 KOH 中等浓度腐蚀的情况下, 三角形并不明显, 凹陷形态近似于六边形. 较低浓度变化到高浓度时, 三角形表面形貌会出现朝向的翻转.

在微观形貌的成因上, 较为一致的看法是腐蚀过程中往往会产生一些不溶的硅化物, 腐蚀液普遍存在金属阳离子, 另外反应过程中也会有大量的氢气泡产生并释放出来. 这些不纯物等因素一方面起到了类似于微掩模的作用, 另一方面在反应较快的地方硅化物以及阳离子等吸附在腐蚀面上, 起到了对某种硅原子在一段时间内的抑制作用. 以上因素的共同作用使表面变得不平. 实验发现凸起的数量还依赖于腐蚀剂的浓度. 腐蚀条件在 60°C 低浓度时, 腐蚀面几乎布满了凸起, 当浓度达到 30wt% 以上时, 凸起密度降低到 0, 高浓度时凸起被侵蚀并最终消失. 综合前述分析, 蒙特卡罗仿真方法需要在合适的腐蚀液浓度下, 讨论两种附加因素影响的腐蚀模型. 其中一个为气泡和不纯物在腐蚀中发挥微掩模的作用, 另一个是它们在一段时间内会对部分反应活跃的原子的产生较为明显的阻滞作用.

### 3 蒙特卡罗法建模

#### 3.1 微掩模效应的模拟

仿真中蒙特卡罗模型使用了原子移除概率方程 (RPF), RPF 函数可由计算合适的硅表面原子转移概率, 来描述各个晶面上的宏观腐蚀速率, 应用 RPF 函数能够正确模拟出腐蚀中出现的复杂结构面<sup>[4,8]</sup>. RPF 函数有两个参数  $n_1$  和  $n_2$ , 分别为一级邻原子和二级邻原子总数, 它们将硅表面上的原子分成 48 种类型. 函数的形式为:

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

式中  $P_0 = (1 + e^{-\beta e_1 n_1^0})(1 + e^{-\beta e_2 n_2^0})$ , 使得当  $n_1$  和  $n_2$  为 0 时, 计算的移除概率为 1;  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  为波尔兹曼常数;  $T$  为温度;  $e_1, e_2, n_1^0, n_2^0$  为模型的参数, 对于不同的腐蚀系统 4 个参数取值不同. RPF 函数假设单个表面原子在不同的状态下具有不同的能量, 据此以不同的概率转向脱落状态, 例如一个一级邻原子和二级邻原子数量为  $n_1$  和  $n_2$  的表面原子, 总能量可以看作  $E(n_1, n_2) = e_1 n_1 + e_2 n_2$ .  $e_1$  可看成是克服单个一级邻居之间键的连接脱离所需要的平均能量,  $e_2$  为克服二级邻居之间影响的单个平均键能.  $n_1^0, n_2^0$  解释为阈值参数, 即当目标原子的一级和二级邻居的数量小于阈值的时候, 就会以较高的转移概率转向脱落. 本文模型的参数取值

为  $n_1^0 = 3, n_2^0 = 7, e_1 = 0.35\text{eV}, e_2 = 0.16\text{eV}$ , 模拟腐蚀条件为采用中低浓度的 KOH 溶液。

直接使用 RPF 函数计算得到的腐蚀表面虽然粗糙不平,但是还不足以正确模拟各个晶面上的微观特征.由于微掩模效应是来自外界的附加条件,为了在仿真中描述微掩模,本文采用了一个值为 0 或者 1 的随机位置矩阵来代表微掩模的位置,非 0 的位置代表微掩模作用的地方.随机矩阵由微掩模分布密度和模拟尺寸两个参数来控制.仿真中,当表面原子落在随机位置矩阵的非 0 的位置上,就会限制当前原子的活性,转移概率就变低,达到对气泡和不纯物的吸附作用位置的模拟.解吸附的模拟有两种方法,一种是随着仿真的推进,这些微掩模会自动脱离表面原子失去作用;另一种是采用经过一定的蒙特卡罗步数系统,主动恢复被限制原子的活性.配合 RPF 函数,调整随机位置矩阵就可以达到模拟微掩模作用的目的.图 2(a)为模拟中使用的随机微掩模图形.

### 3.2 台阶区域原子与表面形态

腐蚀过程和表面形貌的解释,需要详细分析单晶硅晶面的特征和原子的排列规律,进而确定在模拟中产生阻滞效应的原子类型.单晶硅的 3 个基础晶面(111), (110)和(100)的表面原子类型单一,在理想的初始基础晶面上,原子都处在同一个  $z$  方向的深度上,而从基础晶面旋转一定的角度得到的一般  $(h, k, l)$  晶面会呈现出台阶和台地相互交错的结构形式,原子排列也不再处于同一个深度上.典型的结构如图 2(b)和图 3 中的 4 种晶面所示.这种交错结构中台地表面原子特征相对固定,是由基础晶面(111), (110)和(100)组成;而台阶部分的原子类型变化很多,每个  $(h, k, l)$  晶面的台阶会由 2~3 种,甚至由更多类型的原子排列组成.一个晶面族中的晶面差别是台地的长度不同.台阶处的原子被看作扭折(kink),具有较高的移除概率,是反应活跃的区域.MC 方法正是基于这种可以描述高指数晶面的台阶特征因素,形成表面形貌的台阶流动(step-flow)传播过程.

$(h, k, l)$ 晶面可以从基础晶面旋转得到,分别为从  $\langle 111 \rangle$ 到  $\langle 100 \rangle$ 方向,  $\langle 111 \rangle$ 到  $\langle 110 \rangle$ 以及  $\langle 100 \rangle$ 到  $\langle 110 \rangle$ 方向旋转.如果再按照米勒指数的特点,3 个旋转方向又可归纳定义为多种晶面族.例如从  $\langle 111 \rangle$ 到  $\langle 100 \rangle$ 方向,共有两个晶面族,它们分别是  $(h+2, h, h)$ 以及  $(h, 1, 1)$ 族.  $(h+2, h, h)$ 晶面族是按照与(111)面的夹角依次为(111), (755), (533)到(211)的一组晶面.  $(h, 1, 1)$ 晶面族是从(211), (311), (611)到(100)的一组晶面.从  $\langle 111 \rangle$ 到  $\langle 110 \rangle$ 晶向也有两个晶面族,它们分别是  $(h+2, h+2, h)$ 和  $(h, h, 1)$ .  $(h+2, h, h)$ 晶面族是依次从(111), (775), (553)到(331)的一组晶面;  $(h, h, 1)$ 晶面族是从(331), (551), (991)到(110)的一组晶面.

图 2(c)是标准  $\langle 110 \rangle$ 晶向下晶面信息的极射平面投影图,可以看作是顶面为(110)晶面的一个单晶硅球体的投影图.如果沿着球的赤道方向把(111)面定为  $x$  轴

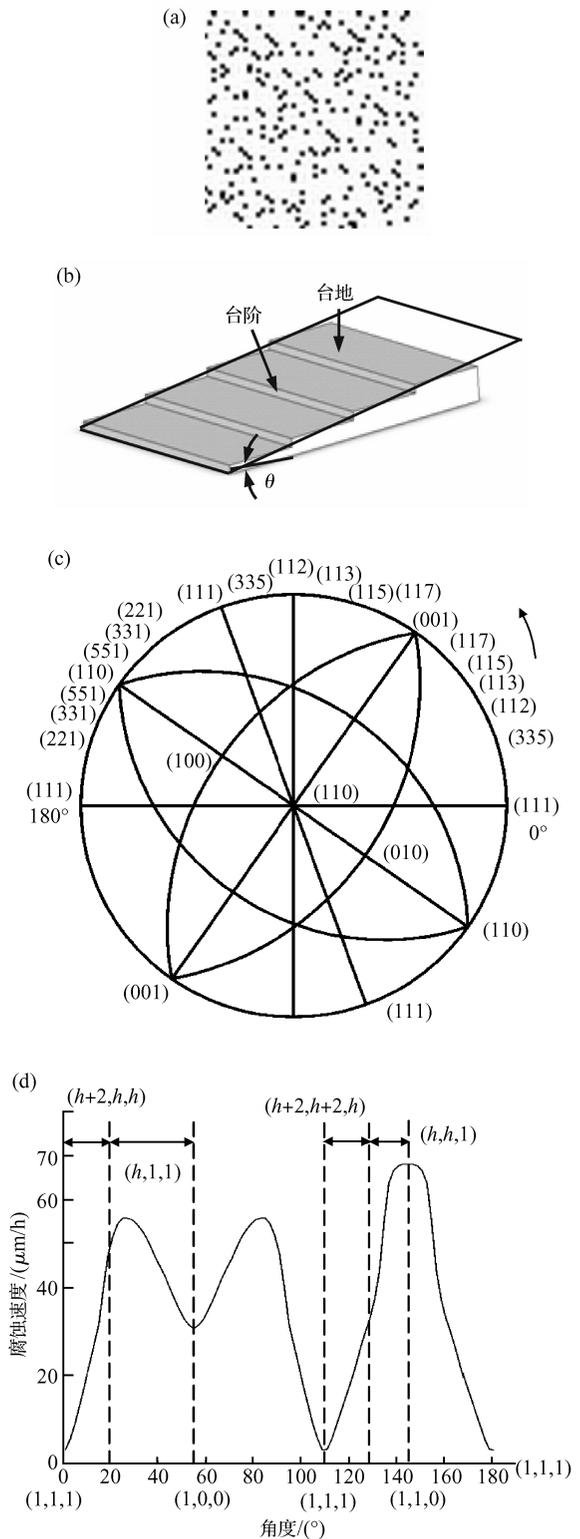


图 2 (a) 仿真中由随机位置矩阵表示的微掩模; (b) 台阶流动模型中的台地和台阶; (c) 顶面为(110)面的单晶硅的球体投影图; (d)  $(h+2, h, h), (h, 1, 1), (h+2, h+2, h)$ 和  $(h, h, 1)$ 晶面相对于基础晶面的角度分布和腐蚀速度(腐蚀速度数据为 KOH, 50wt%<sup>[3]</sup>)

Fig.2 (a) Micro mask pattern represented by the random position matrix in the simulation; (b) Terrace and step region in step flow model; (c) Stereographic projection of silicon crystal-line with (110) plane on top; (d) Etch rates of the  $(h+2, h, h), (h, 1, 1), (h+2, h+2, h)$  and  $(h, h, 1)$  families against cutting angles to the (111) orientation in KOH 50wt%<sup>[3]</sup>

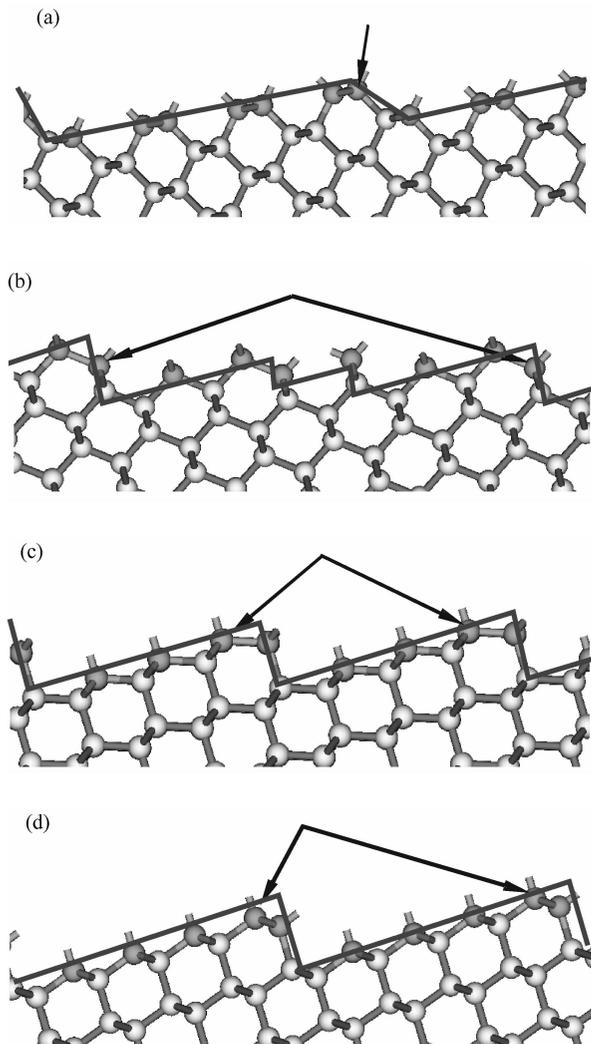


图3 (a)  $(h, h, 1)$ 晶面族(771)晶面的台阶结构和(3,7)原子位置;(b)  $(h, 1, 1)$ 晶面族(611)晶面台阶结构和(3,7)原子位置;(c)  $(h+2, h, h)$ 晶面族(533)晶面台阶结构和(3,7)原子位置;(d)  $(h+2, h+2, h)$ 晶面族(553)晶面台阶结构和(3,7)原子位置

Fig.3 (a) Positions of (3,7) labeled atoms on (771) plane in  $(h, h, 1)$  family; (b) Positions of (3,7) labeled atoms on (611) plane in  $(h, 1, 1)$  family; (c) Positions of (3,7) labeled atoms on (533) plane in  $(h+2, h, h)$  family; (d) Positions of (3,7) labeled atoms on (553) plane in  $(h+2, h+2, h)$  family

$0^\circ$ 角,沿着圆周旋转  $180^\circ$ 到负  $x$  方向上会得到  $(h+2, h, h)$ ,  $(h, 1, 1)$ ,  $(h+2, h+2, h)$ 和  $(h, h, 1)$ 晶面族的所有晶面.由于  $x$  轴的下部分与上部分是对称关系,本研究选择了上半部分的区域.图 2(d)以晶面偏离(111)面的角度为自变量,标定了  $180^\circ$ 范围内晶面族区间的位置,曲线部分为 KOH, 50wt%,  $70^\circ\text{C}$ 下的各个晶面族各向异性腐蚀速率<sup>[3]</sup>.如果在各区间找到族晶面上均出现的台阶原子,就可以把活性抑制的现象施加到这种公共的原子类型上,来解决蒙特卡罗法模拟表面形貌的问题.

由于晶面族的晶面台阶和台地的原子类型一致而长度不同,因而在每个晶面族上可以选择一个晶面用于分析原子排列规律.本文采用的 4 个典型晶面为(771), (611), (533)和(553),它们所代表晶面族及其台地台阶

结构如图 3 所示.根据蒙特卡罗计算使用的一级邻原子和二级邻原子数量  $(n_1, n_2)$  分类表面原子的方法,经过计算识别发现(771), (611), (533)和(553)晶面的台阶部位都广泛分布一种相同种类  $(n_1, n_2)$  参数为(3,7)类型原子.图 3 中分 4 种情况,标识了(3,7)类型的原子在不同晶面的台阶部位存在的情况.

基于上述分析,蒙特卡罗模拟中,  $(n_1, n_2)$  为(3,7)类型的原子在表面形貌成因作用下的移除概率,如下式计算:

$$k_{\text{step}} = [1 + bT(t)]k_{\text{step}}^0 \quad (2)$$

式中  $k_{\text{step}}^0$  为 RPF 函数计算得到的表面原子移除概率;  $k_{\text{step}}$  为考虑表面形貌因素的移除概率;  $b$  是控制表面形貌影响因素的参数,计算时  $b$  取  $-0.99$ ,表示原子处于抑制状态;  $T(t)$  为原子被抑制时间的函数,代表抑制持续的时间以及该时间内对抑制程度的影响,  $T(t)$  可以为帽函数或者指数递减函数.计算中  $T(t)$  采用了简单的帽函数,  $t$  为蒙特卡罗法时间步长.

## 4 表面形貌的仿真

### 4.1 微观结构的模拟

表面微观形貌的计算首先采用随机采样的暗点模拟附着物形成微掩模的过程,仿真可以控制附着点的密度和持续的时间;接着抑制晶面台阶上一级和二级邻居数量为(3,7)类型原子反应的活性,使它们的移除概率降低,其余类型的原子转移概率从 RPF 函数获得.最终计算结果如图 4(d)~(f)所示,分别在(100), (110)和(111)面得到与图 1(a)~(c)实验相符合的微观形貌.图 4(a)是在(100)面小尺寸基底上,仿真得到的金字塔形状的单个凸起的原子排列情况,经测试判定 4 个表面为(111)面,棱边处为一级和二级邻居数量为(3,7)类型的原子,图中凸起的 4 个结构面的微观特征也非常符合台阶流动的假设.计算结果也说明了(3,7)原子在腐蚀过程中会受到微掩模较大的影响,并且在腐蚀中起到了很重要的作用.

图 4(b)显示的是蒙特卡罗法计算中(110)面的小尺寸微观结构,由于(110)晶面链状原子的排列特点,遇到微掩模作用和抑制台阶活性的(110)原子是以一行一行的形式去除的,一条原子链在某处发生解链后整条链都会被迅速腐蚀掉,而当某处遇到有附着物时,腐蚀就会在该处发生停滞,并产生一个条纹的端部结构,形成了图中的条状结构.在图 4(b)中,这个  $\langle 110 \rangle$  向的条带,一面的侧壁已经形成了稳定的(111)面,另一面是由  $(h, h, 1)$  面构成.(111)面微观形貌的原子排列如图 4(c)所示,由于(111)面的腐蚀速度很慢,失去了微掩模的条件,仿真中没有考虑微掩模的作用,只是对一级和二级邻居数量为(3,7)类型的原子的转移概率进行了抑制,结果输出中可以观察到明显的三角形凹陷结构的出现.

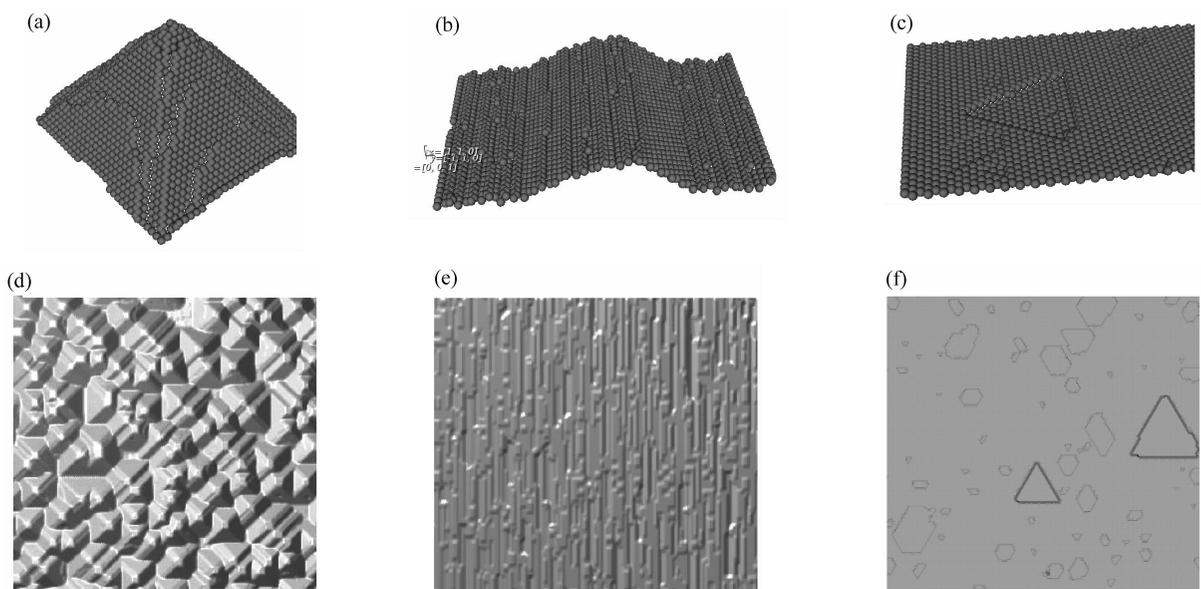


图 4 (a)计算中的(100)面上单个凸起的原子排列;(b)计算中的(110)面上单个条带特征的原子排列;(c)计算中的(111)面上单个三角形凹陷的原子排列;(d)腐蚀中(100)面表面形貌的模拟结果;(e)腐蚀中(110)面表面形貌的模拟结果;(f)腐蚀中(111)面表面形貌的模拟结果

Fig.4 (a) Atoms pattern of a pyramidal hillock on Si (100) in simulation;(b) Atoms pattern of a strip structure on Si (110) in simulation;(c) Atoms pattern of a triangular pit on Si (111) in simulation;(d) Simulation of surface morphology on etching of Si (100);(e) Simulation of surface morphology on etching of Si (110);(f) Simulation of surface morphology on etching of Si (111)

### 4.2 粗糙度计算

蒙特卡罗法计算的表面形态能与实验中观察到的微观特征相一致,因此利用模拟结果中表面原子的空间分布可以计算描述微观形貌粗糙度参数.微观表面粗糙

度的计算数据虽然来自模拟结果,但对于单晶硅在不同腐蚀环境中的实验以及对表面特性研究具有一定指导意义<sup>[11]</sup>.本研究中的粗糙度参数由表面原子在 Z 方向的深度计算得出.如图 5(a)所示,系统首先创建一个无掩模的(h,k,l)衬底平面,设置初始平面的 Z 方向为

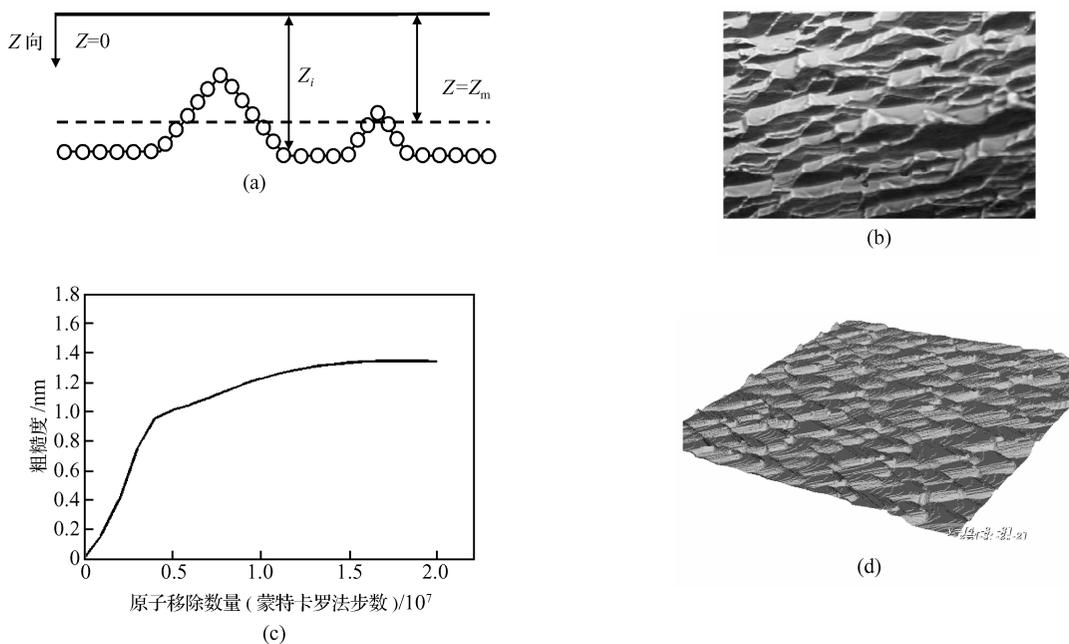


图 5 (a)粗糙度参数的计算图解;(b) (322)腐蚀表面的 SEM 图<sup>[5]</sup>,34wt% KOH 70℃;(c) (322)表面粗糙度参数与表面原子移除数量的关系;(d) (322)表面的形态特征的仿真结果

Fig.5 (a) Illustration of the calculation of surface roughness;(b) SEM picture of surface morphology on Si(322) etched in 34wt% KOH at 70℃;(c) The relationship between surface roughness and atom removals;(d) Simulation of surface morphology on Si(322)

0, 然后应用蒙特卡罗法腐蚀衬底, 随着原子的移除, 表面形貌开始出现. 所有表面原子的  $Z$  方向的深度  $Z_i$  之和的均值就是腐蚀表面的平均高度  $Z_m$ . 计算的粗糙度采用类似于样本标准差的形式来评价表面原子分散程度, 由下式计算:

$$R_f = \frac{[\sum_{i=1}^N (z_i - z_m)^2]^{1/2}}{\sqrt{N}} \quad (3)$$

$$z_m = \frac{\sum_{i=1}^N z_i}{N} \quad (4)$$

式中  $z_i$  为每个表面原子的深度;  $z_m$  为平均深度;  $N$  为表面原子总数.

示例计算中选择了高米勒指数晶面进一步验证文中的结论. 粗糙度的参数取无掩模的 (322) 晶面衬底, 由蒙特卡罗的步长来控制采样的间隔计算得到. 图 5(c) 显示的是不同模拟时间下的表面粗糙度值. 实验观察到的 (322) 面表面腐蚀形貌特征如图 5(b) 所示, 图 5(d) 为仿真计算得到的与实验一致的表面形貌. (322) 可等同于 (644) 晶面, 因此它属于  $(h+2, h, h)$  晶面族, (322) 初始形貌中的台地部分是由 (111) 基础晶面构成, 图 5(b) 所示表面形貌特征为三角波浪的形状, 示例仿真计算的表面尺寸是边长为 200nm 的方形衬底.

在图 5(c) 中, 粗糙度变化曲线的粗糙度数值在腐蚀开始的时候逐渐增大, 当仿真时间足够长后将会收敛为固定值. 虽然本文提出的方法在表面形貌上很好地符合了实验的情况, 但某些晶向粗糙度计算有时会与实验的测定值出现差距. 这是因为影响粗糙度的因素有很多, 例如腐蚀液的扩散现象, 这些因素使得粗糙度与计算结果相差几个数量级. 扩散效应会导致更为粗糙的表面, 实验证明不同浓度、温度及活性剂作用下, (100) 面金字塔或 (110) 面条纹等结构除了在分布密度外, 凸起尺寸也会有所不同, 特别在 (110) 晶面, 会出现非常粗大的条状特征. 仿真中除了微观表面的形状特征之外, 若要在尺寸上能与实验结果一致, MC 方法还需要考虑建立增强的台阶并聚以及扩散现象的描述.

## 5 结论

基于微观形貌的成因, 以 (771), (611), (533) 和 (553) 典型晶面的台阶部位特征为对象, 讨论了  $(h+2, h, h)$ ,  $(h, 1, 1)$ ,  $(h+2, h+2, h)$  以及  $(h, h, 1)$  晶面族上反应活跃的原子排列特征, 发现和确定了各个晶面族在台阶处广泛分布的  $(n_1, n_2)$  参数为 (3, 7) 类型原

子. 模拟中以随机位置矩阵描述微掩模的定义, 通过施加微掩模和限制 (3, 7) 原子移除概率的方法, 模拟出了实验中观察到的表面形貌. 提出的方法与比目前报道的方法相比控制参数简化及实用性好. 模拟计算中 (100), (110), (111) 晶面以及高指数晶面 (322) 上的表面形态, 能够很好地符合实验中的微观特征. 论文提出的方法, 将相对准确的表面形貌引入仿真模型, 并在多数晶面适用, 计算的参数统一, 对于开展腐蚀微观特性的研究具有一定意义.

**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 博士在共同研究中细致的建议和帮助.

## 参考文献

- [1] Huang Q A. Silicon micromachining technology. Beijing: Science Press, 1996; 51 (in Chinese) [黄庆安. 硅微机械加工技术. 北京: 科学出版社, 1996; 51]
- [2] Zhou Zaifa, Huang Qingan, 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]
- [3] Xing Y, Gosalvez M A, Sato K. Step flow based cellular automaton for the simulation of anisotropic etching of complex MEMS structures. New Journal of Physics, 2007, 9(12): 1
- [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] Veenendaal E V, Sato K, Shikida M, et al. Micro-morphology of single crystalline silicon surface during anisotropic wet etching in KOH and TMAH. Sensors and Actuators A, 2001, 93(4): 219
- [6] Veenendaal E V, Sato K, Shikida M. Micro-morphology of single crystalline silicon surfaces during anisotropic wet chemical etching in KOH: velocity source forests. Sensors and Actuators A, 2001, 93(4): 232
- [7] Gosalvez M A, Nieminen R M. Surface morphology during anisotropic wet chemical etching of crystalline silicon. New Journal of Physics, 2003, 5(7): 100
- [8] Gosalvez M A, Xing Y, Sato K, et al. Atomistic methods for the simulation of evolving surfaces. J Micromechan Microeng, 2008, 18(4): 1
- [9] Shikida M, Ando M, Ishihara Y, et al. Non-photolithographic pattern transfer for fabricating pen-shaped micro needle structures. J Micromechan Microeng, 2004, 14(6): 1462
- [10] Sato K, Masuda T, Shikida M. Difference in activated atomic steps on (111) silicon surface during KOH and TMAH etching. Sensors and Materials, 2003, 15(2): 93
- [11] Zakaria M, Camon H. Monte Carlo simulation of anisotropic etching of silicon: investigation of (111) surface properties. Modeling and Simulation in Material Science and Engineering, 1997, 5(6): 481

## Monte Carlo Simulation for the Surface Morphology of Anisotropic Etching of Crystalline Silicon

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

(*Laboratory of Advanced Manufacturing Technology, School of Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China*)

**Abstract:** This paper presents a Monte Carlo method for the simulation of the surface morphology during wet anisotropic etching. Based on the step flow model, the atomistic characteristics of the active step region of four silicon crystalline families  $(h+2, h, h)$ ,  $(h, 1, 1)$ ,  $(h+2, h+2, h)$ , and  $(h, h, 1)$  are investigated. Atoms with 3 first neighbors and 7 second neighbors on the active step region are restricted in the removal probability under the effect of both micro mask and silicate particles adherence. By applying the above conditions on the RPF function, the formation of pyramid protrusion on (100) plane, the zigzag strip structures on (110) plane, and triangular etch pits on (111) plane is explained and simulated. The simulation result on three principle planes and high index (332) plane agrees well with the surface morphology from the experiment, which provides verification of the simulation method.

**Key words:** Monte Carlo simulation; single crystal silicon; wet chemical etching; surface morphology

**EECAA:** 2550X

**Article ID:** 0253-4177(2008)10-2027-07

---

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: xingyan@seu.edu.cn

Received 18 March 2008, revised manuscript received 30 May 2008