

基于元胞自动机理论的硅各向异性腐蚀模型^{*}

陈杰智¹ 李 冷² 施 毅¹ 刘 明² 郑有焯¹

(1 南京大学物理系, 江苏省光电信息功能材料重点实验室, 南京 210093)

(2 中国科学院微电子研究所 纳米技术与新器件集成技术实验室, 北京 100029)

摘要: 根据硅各向异性腐蚀在微观尺度下的特点, 基于元胞自动机理论提出了新的腐蚀模拟模型. 该模型考虑了腐蚀过程中硅不同晶面的晶体结构特点, 并通过引入碰撞理论, 综合反映了腐蚀温度和浓度对腐蚀的影响作用. 该模型可快速准确地模拟分析各向异性腐蚀工艺过程, 对优化工艺有着理论指导作用.

关键词: 元胞自动机; 各向异性腐蚀; 碰撞理论

EEACC: 2550E

中图分类号: TN304. 02

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2005)08-1671-05

1 引言

硅各向异性湿法腐蚀, 是指硅的腐蚀过程中各个晶面上具有不同的腐蚀速度, 这在微纳电子机械系统(MEMS/NEMS)^[1]和纳米电子器件^[2]制作中有着非常广泛的应用, 是其中的核心工艺之一. 为了精确设计和控制腐蚀工艺, 需要建立有效的腐蚀工艺模拟模型, 从而可以快速准确地分析工艺过程中出现的各种情况并进行优化.

关于硅的各向异性腐蚀已经建立了许多模拟模型^[3~9], 其中大部分是根据一定的物理图像建立的. 例如, 根据腐蚀情况用软件模拟^[4]或者从反应过程微观状态来模拟^[5]. 目前, 标准的腐蚀工艺模型主要有绳模型^[6]和射线追踪模型^[7]. 绳模型在二维有较好的模拟效果, 但不易拓展到三维情况; 相对而言射线追踪模型比较准确, 但较为复杂, 很难在三维情况下模拟. 元胞自动机 (cellular automaton, CA) 作为一个研究复杂系统动态行为的前沿理论, 已经广泛运用到物理、数学、计算机等各个领域. 国外基于元胞自动机理论对各向异性腐蚀模型的研究已有相关报道^[8~11], 但国内这方面的研究工作很少^[12].

本文基于元胞自动机理论, 在分析硅的晶体结

构和各向异性湿法腐蚀原理的基础上, 建立了硅的三维湿法腐蚀模型, 并着重探讨了简化后的二维情况. 在分析腐蚀速度时引入了碰撞模型, 提出了调制系数 $Z_{(i,j,k)}$ 的概念. 模型中包含了晶体结构、腐蚀液浓度和反应温度等诸多因素, 能快速准确地实现腐蚀工艺的模拟.

2 元胞自动机理论

元胞自动机是空间、时间和状态都离散, (空间) 相互作用以及 (时间) 因果关系皆局部的网格动力学模型, 没有明确的方程形式, 而是包含一系列模型的构建规则. 凡是满足这些规则的模型都可以是元胞自动机模型. 作为一个方法框架, 其基本组成部分包括元胞、元胞空间、邻居以及规则四部分, 如图 1 所示.

元胞又称为单元或基元, 如图 1 中的网格单元. 元胞具有离散有限的状态, 通过赋予其不同的值来表示其存在的状态. 元胞空间如图 1 中的网格空间, 是元胞所分布的空间网点集合; 邻居则是一个“动态”的成分, 一般情况下可以考虑两种邻居: 一是 Von Neumann 邻居, 二是 Moore 邻居. 图 1 说明了这两种标准的邻居. 规则, 从另一方面说是一个转移

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 60236010, 60225014), 江苏省自然科学基金 (批准号: DK2004211) 和国家高技术研究发展计划 (批准号: 2003AA302740) 资助项目

陈杰智 男, 1981 年出生, 博士研究生, 目前从事硅基纳米电子学方面的研究.

2004-12-24 收到, 2005-01-27 定稿

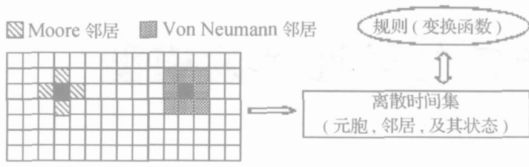


图 1 元胞自动机的组成示意图

Fig. 1 Diagram of cellular automata compositions

函数. 利用这个规则可以对空间的元胞状态值做重复修改.

元胞自动机是一个动态系统,其变化是一个连续等时段的过程. 若设 $t = 0$ 为初始时刻,时间段长为 1,那么 $t + 1$ 为下一时刻. 转换过程中,一个特定元胞某一时刻的值直接取决于上一时刻该元胞及其周围邻居元胞的状态. 用一个表达式表示元胞自动机的结构,可以写为^[12]:

$$A = (L_a, S, N, f) \quad (1)$$

其中 A 代表一个元胞自动机系统; L 表示元胞空间; S 表示有限的状态结合; N 表示元胞邻域内的元胞组合; f 是元胞自动机的局部转换函数.

3 基于元胞自动机的腐蚀模拟模型

首先从原子晶体结构方面来考虑硅的各向异性腐蚀原理.

图 2(a) 是硅 (100) 平面的晶体结构. 如果要使处于 (100) 平面上的原子被腐蚀掉,首先两外层近邻原子要被腐蚀掉;其次还需断裂与下层原子连接的两个共价键. 图 2(b) 是硅 (110) 平面上的情况,一个外层原子的腐蚀可以暴露平面上的原子,但去除这个原子还需要断裂平面内的两个共价键和一个与下层原子连接的共价键. 值得注意的是,由于在同一个平面内的表面原子都会暴露在腐蚀剂中,使这两个共价键容易断裂. 在图 2(c) 所示的硅 (111) 平面中只有一个外层原子,虽然这个原子容易去除使得平面内的原子暴露在腐蚀剂中,但去除这个原子则需要断裂三个与下层原子连接的共价键^[7,8].

图 3 是 (001) 硅片在 25 % TMAH (tetramethyl ammonium hydroxide) 溶液中的各向异性腐蚀的 SEM 观察照片. 图 3(a) 中的线条沿 110 晶向,而 3 (b) 中的线条沿 001 晶向. 从图 3(a) 中可以清楚地看到 (111) 和 (001) 晶面的各向异性腐蚀情况,两个面的夹角是 54.7° ; 而图 3(b) 中的腐蚀剖面则是各

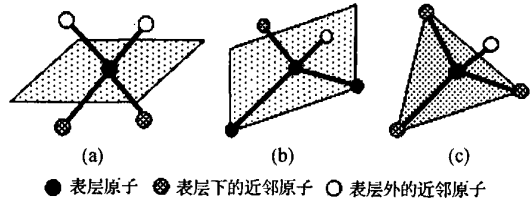


图 2 硅不同晶面上的原子结构示意图 (a) (100) 晶面; (b) (110) 晶面; (c) (111) 晶面

Fig. 2 Diagrams of atoms structure in different silicon crystal planes (a) (100) plane; (b) (110) plane; (c) (111) plane

向同性.

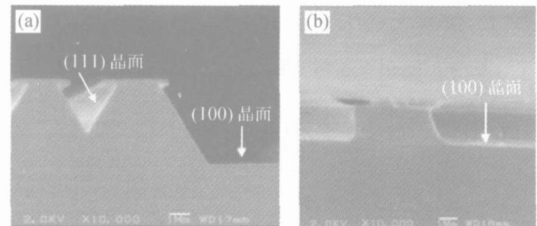


图 3 25 % TMAH 中 (100) 硅的各向异性腐蚀图像 (a) 线条方向沿 110 晶向; (b) 线条方向沿 100 晶向

Fig. 3 Images of (100) orientation silicon anisotropic etching in 25 % TMAH solution (a) Lines along 110 orientation; (b) Lines along 100 orientation

下面将基于元胞自动机理论,构建三维情况下硅的各向异性腐蚀模拟模型.

首先,定义硅的晶体结构为一个元胞空间,而结构中的每个原子则是一个元胞. 从空间角度看,元胞存在着三种状态,一种是被腐蚀剂去掉,用“0”表示其状态;第二种是接触到腐蚀剂的表面元胞,设其状态值为“1”;还有是尚未接触到腐蚀剂的下层元胞,设其状态值为“2”. 同时将中心元胞周围可能影响其下一时刻状态的元胞定义为邻居,其规则用函数表示为:

$$m_{i,j,k}^{t+1} = F(m_{i-r,j-r,k-r}^t, m_{i-r+1,j-r,k-r}^t, \dots, m_{i,j,k}^t, \dots, m_{i,j,k+1}^t, \dots, m_{i+r,j+r,k+r}^t) \quad (2)$$

其中 t 表示当前时刻,并设其时间段为 1, (i, j, k) 表示各个元胞在三维空间中的位置. 规则中表示元胞空间中位置在 (i, j, k) 的元胞下一时刻的状态由其周围半径为 r 内的邻居状态及其自身在这一时刻的状态决定.

具体分析硅的晶体结构,硅在 (111) 晶面上的原子有三个最近邻原子,2 个次近邻原子; (100) 晶面上的原子有 2 个最近邻的原子,3 个次近邻的原子.

可以将这两个晶面统一到二维空间,如图 4(a)所示.图 4(b)是其相应的元胞空间示意图^[8].

根据硅的晶体结构,模型中元胞在二维元胞空间中应该是相间排列而不是传统的密排型,所以在这里标准的 Von Neumann 和 Moore 邻居并不适用.考虑到硅晶体结构中一个中心原子是通过共价键和其他四个近邻原子相连,新的邻居定义如图 5 所示.

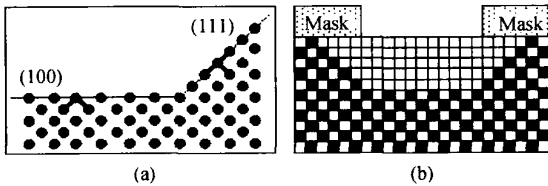


图 4 (a) 简化后的二维硅晶体空间;(b)相应的元胞空间
Fig. 4 (a) Simplified diagram of 3D silicon crystal space;(b) Relevant cellular space

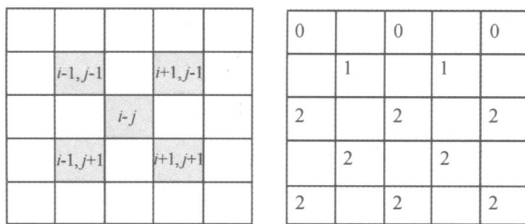


图 5 邻居定义及元胞取值情况

Fig. 5 Novel definition and status value of neighbors

从图 5 中可以看到,斜对角的网格被定义为邻居,每个中心元胞有四个邻居,这与前面所述每一个硅原子周围有四个通过共价键连接的相邻原子一致.各个元胞的具体状态同样用“0”,“1”,和“2”来表示.下面给出确定元胞某一确定时刻具体状态值的规则:

$$m_{i,j}^{t+1} = \begin{cases} 0, & m_{i-1,j-1}^t + m_{i-1,j+1}^t + m_{i+1,j-1}^t + m_{i+1,j+1}^t = 0 \\ 2, & m_{i-1,j-1}^t + m_{i-1,j+1}^t + m_{i+1,j-1}^t + m_{i+1,j+1}^t > 6 \\ 1, & \text{其它情况} \end{cases}$$

为简化模型,假定每一个时段只去除一个元胞.在具体确定去除哪个元胞时,根据不同晶面上的腐蚀速度计算比较各边缘元胞的去除时间,这需要考虑边缘元胞在元胞空间的具体位置尤其是所处的晶面.

进一步,在考虑腐蚀速度时,可以引入碰撞理论^[13].根据碰撞理论,只有平均动能足够高的腐蚀剂离子才能发生有效碰撞,这样的粒子称为活化粒

子.不同晶面的腐蚀速度不仅与其晶面原子密度有关,也与活化粒子浓度有关.各个晶面的腐蚀速度可以统一表示为:

$$V_{(i,j,k)} = z_{i,j,k} N_{(i,j,k)} \quad (4)$$

$N_{(i,j,k)}$ 表示不同晶面上单位体积内的活化粒子 OH^- 数,且 $N_{(i,j,k)} = n(E)$, $n(E) = 8 \mu \times 10^{-c\sqrt{E}} \times (\frac{1}{2kT})^{\frac{3}{2}} m^{\frac{1}{2}} E \exp(-\frac{E}{kT})$, 是腐蚀液中平均动能为 E 的有效活化粒子数, μ 是腐蚀液浓度, m 是粒子质量, v 为热运动速度; $z_{(i,j,k)}$ 是新引入的调制系数.这里引入 z 的目的在于将模型中没有考虑到的因素用一个统计值表示,并通过具体实验确定这个值,然后加入模型中,使模拟的结果更接近实验结果.严格地说, z 值是温度和浓度的函数,即 $z(T, \mu)$.

为了突出腐蚀速度与腐蚀液浓度和温度的依赖关系,同时考虑到粒子的有效浓度^[13],将上式改写为:

$$v_{(i,j,k)} = z_{(i,j,k)} N^*(i,j,k) T^{\frac{3}{2}} \mu \times 10^{-c\sqrt{E}} \quad (5)$$

对于图 4 所示的元胞空间,作为边缘元胞的中心元胞 (i,j) 的腐蚀速度为

$$v(i,j) = \begin{cases} v_{100}, & m(i-1,j-1) + m(i+1,j-1) = 0 \\ v_{111}, & m(i-1,j-1) + m(i+1,j-1) = 1 \end{cases} \quad (6)$$

有了各个元胞的腐蚀速度,接下来需要考虑各种具体的腐蚀情况.图 6(a),(b)和(c)分别分析了三种共价键断裂的方式,实际就是某一时刻边缘元胞存在的三种可能状态.当 $(i-1,j-1)$ 和 $(i+1,j-1)$ 元胞中仅有一个元胞被腐蚀去除时,中心元胞实际处于 (111) 晶面上,此时的腐蚀速度需要用 v_{111} 计算,如图 6(a)所示;当 $(i-1,j-1)$ 和 $(i+1,j-1)$ 元胞都被腐蚀剂去除的时候,暴露的中心元胞处在 (100) 晶面,腐蚀速度按 (100) 晶面的速度 v_{100} 来计算,如图 6(b)所示;还有一种可能,就是其中三个邻居元胞都被腐蚀去除了,此时顶部和侧面的元胞都处在 (100) 晶面,腐蚀从这两个面上同时进行,如图 6(c)所示.计算出边缘元胞的去除时间 t ,如图中所示.

由于同一界面上的元胞大部分有着相同的状态,若计算出某些元胞的去除时间相同,则根据每次只去除一个元胞的规则,将随机去除其中某一个元胞,给出新的元胞界面.不断重复这个过程,直到腐蚀时间至设定值,然后模拟出腐蚀剖面.图 7 是计算机模拟的流程图.

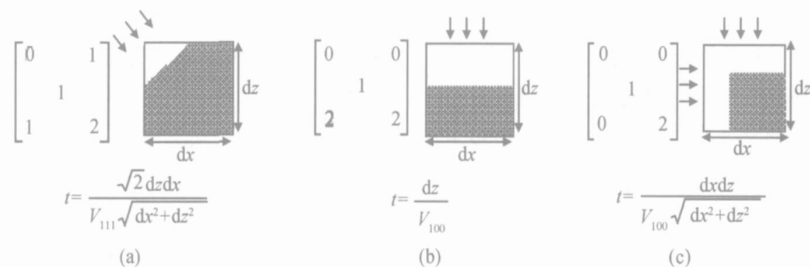


图 6 腐蚀过程中表面元胞的存在状态及相应腐蚀速率的计算 (a) 1 个近邻元胞被去除;(b) 2 个近邻元胞被去除;(c) 3 个近邻元胞被去除

Fig. 6 Status of a boundary cell during etching process and etching velocity calculations for each status (a) One neighbor removed;(b) Two neighbors removed;(c) Three neighbors removed

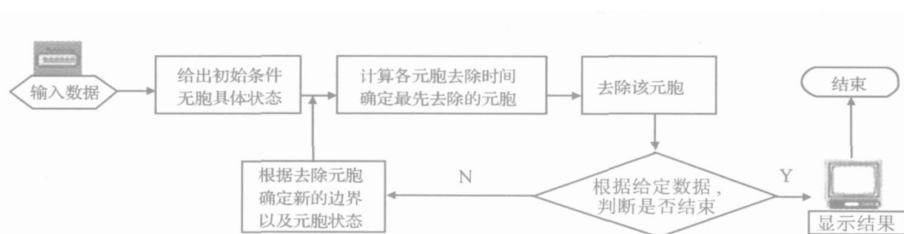


图 7 计算机模拟程序的流程图

Fig. 7 Flow chart of computer simulation program

4 结论

本文基于元胞自动机理论,建立了硅的三维各向异性湿法腐蚀模拟模型,并详细讨论了简化后的二维模型.该模型从硅的晶体结构出发,模拟过程中只需计算比较表面元胞的去除时间,具有稳定快速的特点.进一步,在分析腐蚀速度时引入碰撞模型,提出了调制系数 $z(i, j, k)$ 的概念.模型中包含了晶体结构、腐蚀液浓度和反应温度对各向异性腐蚀的影响,可以准确地模拟腐蚀对象的形貌结构,有助于更好地理解 and 指导各向异性腐蚀这项关键性的工艺.

参考文献

- [1] Tsaur J J , Du C H , Lee Chengkuo . Investigation of TMAH for front-side bulk micromachining process from manufacturing aspect . Sensors and Actuators A , 2001 , 92 : 375
- [2] Saitoh M , Hiramoto T . Extension of Coulomb blockade region by quantum confinement in the ultrasmall silicon dot in a single-hole transistor at room temperature . Appl Phys Lett , 2004 , 84 (16) : 3172

- [3] Zhang Peijun , Huang Qingan . Simulation of anisotropic etch rate diagram for silicon . Research & Progress of SSE , 2002 , 22 (1) : 89 (in Chinese) [张佩君 , 黄庆安 . 硅各向异性腐蚀速率图的模拟 . 固体电子学研究与进展 , 2002 , 22 (1) : 89]
- [4] Zhang Peijun , Huang Qing'an . Simulation of anisotropic etching of silicon based on MATLAB . Chinese Journal of Semiconductors , 2002 , 23 (4) : 440 (in Chinese) [张佩君 , 黄庆安 . 基于 MATLAB 的硅各向异性腐蚀过程模拟 . 半导体学报 , 2002 , 23 (4) : 440]
- [5] Jiang Yanfeng , Huang Qing'an , Wu Wengang , et al . A physical model for silicon anisotropic etching in KOH . Chinese Journal of Semiconductors , 2002 , 23 (4) : 434 (in Chinese) [姜岩峰 , 黄庆安 , 吴文刚 , 等 . 硅在 KOH 中各向异性腐蚀的物理模型 . 半导体学报 , 2002 , 23 (4) : 434]
- [6] Oldham W E , Neureuther A R , Sung C , et al . A general simulator for VLSI lithography and etching processes : Part I - Application to deposition and etching . IEEE Trans Electron Devices , 1980 , ED-27 (8) : 1455
- [7] Matsuzawa T , Ito T , Tanuma M . Three-dimensional photore-sist image simulation on flat surface . IEEE Trans Electron Devices , 1985 , ED-32 (9) : 1781
- [8] Hubbard T J , Antonsson E K . Cellular automata modeling in MEMS design . Sensors and Materials , 1997 , 9 (7) : 437
- [9] Marchetti J , He Y , Than O , et al . Efficient process development for bulk silicon etching using cellular automata simulation techniques . SPIE 1998 Symposium on Micromachining

- and Microfabrication, Micromachined Devices and Components, 1998:20
- [10] Calidonna C R, Naddeo A. Towards a CA model for quantum computation with fully frustrated linear Josephson junction arrays. *Phys Lett A*, 2004, 327(5/6):409
- [11] Chahoud M, Fehly D, Wehmann H H, et al. Cellular-automata-based simulation of anisotropic crystal growth. *J Cryst Growth*, 2000, 220(4):471
- [12] Li Ling. Modeling and simulation of electron beam resist development process. Paper for Master's Degree, Chinese Academy of Sciences, 2004 [李玲. 电子束显影工艺计算机模拟, 中科院硕士论文, 2004]
- [13] Wen Dianzhong, Zhuang Yuguang, Qiu Chengjun. Study of anisotropic etching mechanism of silicon in KOH solution. *Journal of Natural Science of Heilongjiang University*, 1996, 13(3):55 (in Chinese) [温殿忠, 庄玉光, 邱成军. 硅在 KOH 溶液中各向异性腐蚀机理的研究. 黑龙江大学自然科学学报, 1996, 13(3):55]

Cellular-Automata-Based Modeling of Silicon Anisotropic Etching *

Chen Jiezh¹, Li Ling², Shi Yi¹, Liu Ming², and Zheng Youdou¹

(1 Department of Physics, Key Laboratory of Photonic and Electronic Materials Science and Technology of Jiangsu Province, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

(2 Laboratory of Mask-making & Micromachining of Microelectronics Center, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

Abstract: Based on the theory of cellular automata, a novel simulation model is proposed to describe the characteristics of silicon anisotropic etching. The influence of silicon crystal structure in different planes during the etching process are considered. Moreover, the collision theory is also introduced into this model, taking many factors into account, such as etching temperature, etchant concentration, and effective particle concentration. With this model, the simulation and analysis of the silicon anisotropic etching process could be carried out rapidly and accurately, which would theoretically direct how best to optimize the processes.

Key words: cellular automata; anisotropic etching; collision theory

EEACC: 2550E

Article ID: 0253-4177(2005)08-1671-05

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 60236010, 60225014), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province (No. DK2004211), and the National High Technology Research and Development Program of China (No. 2003AA302740)

Chen Jiezh¹ male, was born in 1981, PhD candidate. He is engaged in research on silicon nanoelectronics.

Received 24 December 2004, revised manuscript received 27 January 2005

©2005 Chinese Institute of Electronics