

硅各向异性腐蚀的原子级模拟^{*}

姜岩峰¹ 黄庆安²

(1 北方工业大学信息工程学院 微电子中心, 北京 100041)

(2 东南大学电子工程系 MEMS 教育部重点实验室, 南京 210096)

摘要: 应用原子级模型中的随机 CA 算法, 针对硅材料和具体的工艺特点, 构造了相应的函数, 并在此基础上编制了应用软件——SSAE. 该软件可独立运行, 能够模拟出硅在 KOH 中不同腐蚀条件下腐蚀的过程和结果, 并且克服了其他采用原子级模型的模拟软件中常出现的边界模糊等缺点. 该结果与其他软件和实验结果相比, 较为一致, 并且该软件具有占用系统资源少、运行时间快等优点, 具有一定的实用价值.

关键词: 各向异性腐蚀; 计算机模拟; 原子模型

PACC: 7320A; 7300

中图分类号: TN304. 02

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2005)03-0618-06

1 前言

硅各向异性腐蚀是制造微机械结构的关键技术之一, 利用这种技术, 可以制造出各种各样形状的微结构件, 例如微型压力传感器的硅杯、微型加速度传感器的悬臂梁和空腔等^[1]. 硅各向异性腐蚀的主要特性与腐蚀速度和硅的晶向、掺杂浓度及外加电位有关, 这种腐蚀技术为器件精密侧面加工提供了一种适当的方法, 它是靠调整器件结构使它和快腐蚀的晶面或慢腐蚀的晶面方向相适应, 利用腐蚀速度依赖于杂质浓度和外加电位这一特点可实现适时停止腐蚀. 基于这种腐蚀特性, 利用这一工艺与其他工艺相结合, 就可以在硅衬底上加工出各种各样的三维微结构, 进而得到各种各样的 MEMS 产品. 所以, 硅各向异性腐蚀工艺是 MEMS 产品生产的核心和不可缺少的必备工艺之一^[1]. 如果能有效而精确地对各向异性腐蚀的结果和过程进行计算机模拟, 将极大地提高 MEMS 的设计和制造技术的水平, 促进 MEMS 计算机辅助设计系统的建立.

遗憾的是, 虽然硅各向异性腐蚀已经得到了十分广泛的应用, 但是各向异性腐蚀的机理至今仍不

十分清楚^[2], 腐蚀速率的主要数据来源于实际测量^[3]. 因此, 我们无法通过现成的公式或已知的方程来程式化地推知腐蚀将会产生的形状. 在这种情况下, 通过计算机编程来实现各向异性腐蚀过程的模拟就显得十分必要.

本文采用随机 CA 算法, 根据硅材料和具体工艺的特点, 构造了模拟所需要的函数和软件, 所得到的结果不但可以显示在一定腐蚀液条件(如温度、浓度等)下, 不同掩膜窗口某一时间后的腐蚀结果; 并且其腐蚀过程也都可以以相应三维腐蚀图形的形式表现出来. 在此基础上, 构造了硅各向异性腐蚀模拟软件(SSAE).

2 模拟算法

要想对硅的各向异性腐蚀进行计算机模拟, 需要对各向异性腐蚀的特点和机理有详细的了解. 硅的各向异性腐蚀是指硅的不同晶面具有不同的腐蚀速率. 这种不同在特定的晶面之间表现得十分明显, 比如(100)和(111)面的硅腐蚀速率的比值 $R_{(100)} / R_{(111)}$ 可高达 100~400, 在浓度为 55% 的 KOH 溶液中, $R_{(100)} / R_{(111)}$ 比值甚至达到 500^[1]. 硅单晶在各向

^{*}北京市自然科学基金资助项目(批准号:4042013)

姜岩峰 男, 1972 年出生, 副教授, 从事 MEMS CAD 研究.

黄庆安 男, 1963 年出生, 教授, 博士生导师, 目前主要从事 MEMS 方面的研究.

2004-03-03 收到, 2004-06-10 定稿

异性腐蚀时,腐蚀速率除了强烈地依赖于晶向外,材料的掺杂浓度、腐蚀液的浓度、腐蚀温度、掩膜的形状以及其相对于硅衬底的方向等因素都对腐蚀速率产生影响,同时也对各向异性腐蚀的结果产生影响,增加了预计的难度。

本文模拟采用原子模型中随机 CA 算法,对(100)衬底几种常见掩膜窗口进行模拟,同时力求算法简单,方便实用,可以确定单晶硅经过各向异性腐蚀后及其各个中间过程的图形和形状,同时还可以进行三维显示。

在原子模型中,假设衬底由驻于晶格上的原子阵列表示,则材料的腐蚀就是根据腐蚀规则“移去”或“保留”原子的过程。腐蚀时,对某一原子是否移去由此原子与相邻原子的连接状态决定。处于晶格上的原子只可能处在两种状态:“移去”或“保留”。在程序处理过程中,对各个原子逐个进行判断,根据此原子与相邻原子的连接状态来判定是“移去”还是“保留”。因此,在这种确定状态的前提下,只需要考虑几个主要晶向的腐蚀速率就可以了。

在构造算法时,引进几率 P_c ,这个几率是一个随机量,用它来说明相同晶面、不同原子腐蚀速率的差异。对每一个腐蚀步骤中的每一个原子,被分配的 P_c 值都要跟预先设定的阈值 P_t 相比较,而 P_t 的设定与特定的晶向的相对腐蚀速率有关。如果 P_c 大于 P_t ,这个原子就将被移去,否则它将在晶格中被保留。这样,一个原子是否在腐蚀过程中被移去,不仅仅取决于这个原子与相邻原子的连接状态,还取决于几率 P_c 。

采用原子模型(CA 模型),需要先构造一个单晶硅晶格结构。由于硅原子是周期性排列的,它的最小单元是一个体心正四面体结构,由 5 个原子组成。但如果模型中采用这个最小单元,只用这 5 个硅原子,尚不足以代表所有硅原子的状态特征。

如果用 2 个连着的 minimum 单元,也即 2 个连着的正四面体,其中需要 8 个硅原子,如图 1 所示。考察这 8 个硅原子,发现它们是可以代表所有原子的状态的。

根据各个晶面的特征,只要在程序中对单个原子邻近的 4 个原子的状态进行描述,就可以判定这个原子是处于哪个晶面上的,也就可以得到这个原子被“移去”的几率。

例如,处于(100)面上的原子,在它邻近的 4 个硅原子中,有 2 个已经被“移去”,另 2 个还存在,所

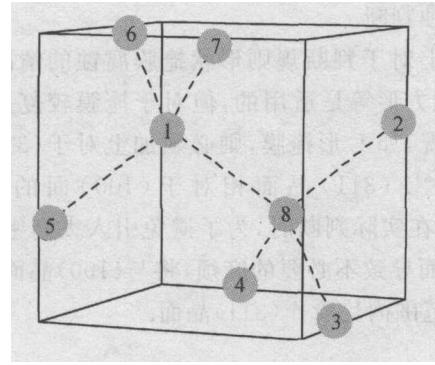


图 1 模拟中采用的单元示意图

Fig. 1 Sketch of used cell during simulation

以,如果有 1 个硅原子,经程序判断后,它周围的 4 个原子满足上面的条件,就可以断定它是处于(100)面上的。

但是对于(111)和(110)晶面上的原子,它邻近的 4 个原子中,都是一个已经被“移去”,另外 3 个没有被腐蚀,必须采取一定的办法把二者区分开。Gosalvez 曾考虑过用次近邻原子的状态来加以区别^[4],但那种情况将导致的模型基本单元所包含的原子数将多达几十个,直接影响了模拟的速度。

为了保证腐蚀模拟的方便快捷,采取了等效的方法。对于处在(110)面上的原子,其近邻中 3 个没有被腐蚀掉的硅原子中,有 2 个是在当前(110)面上。这样就可以把处在(110)面上的原子其近邻原子的状态描述为:1 个已经被“移去”,2 个是处在当前晶面上,另外 1 个还没有被腐蚀,也即处在硅衬底里面。这样,当 1 个硅原子经程序判断后,它周围的 4 个原子满足这个条件,我们就可以认定它是处于(110)面上的。

这样,在图 1 中对原子 1,它周围的 4 个原子是:原子 5,原子 6,原子 7 和原子 8。我们可以先建立一个原子 1 函数,它的 4 个参数是原子 5,原子 6,原子 7,原子 8。只要对它的参数的值进行考察,就可以判断出它是处于哪个晶面上的,也就可以判定它是被“移去”,还是被“保留”。对原子 8,它周围的 4 个原子是:原子 1,原子 2,原子 3 和原子 4。同样可以得到原子 8 函数,然后同样可以判定出它是被“移去”还是被“保留”。对其他原子,虽然从图 1 中只能看到它邻近的 4 个原子中的 1 个原子,但由于周期性,其他的 3 个原子都可以用图中的其他原子平移单位长度所得。所以,只要在程序里加以设置,这 8 个原子足以代表单晶硅里所有原子的各种状态,也可以周而复始,一个接一个地对硅原子进行状态判

断和腐蚀判断.

以上对于判断规则形状掩膜腐蚀的情况,如长方形、正方形等是适用的,但对于掩膜较复杂、有凸角的情况,如L形掩膜,则必须加上对于(311)晶面的判断^[5]. (311)晶面相对于(100)面的夹角为 25.24° ,在实际判断时,为了避免引入太高密勒指数的晶面而导致不必要的麻烦,将与(100)晶面夹角为 25 ± 2 范围内均看作(311)晶面.

3 算法中的函数

根据上面讲到的处于(100), (110), (111)和(311)晶面上的原子邻近4个原子的特点,自定义一个函数,这里称之为rule函数.在rule函数中,有5个可变参数,第一个参数代表需要判断处于哪个晶面的原子,其余4个参数代表邻近的4个原子.由于不同的硅原子在程序里已经用0,1或2等数来表示,所以我们在定义rule函数的规则时,它的5个参量也用0,1,2这些数.对rule函数的值,我们可以定义为0或1.由于要反映出不同晶面上原子腐蚀速率的差异,需要先给出不同晶面腐蚀速率的比,算出1个对应于各个晶面的阈值,然后在定义rule函数的值时,先给出1个随机函数,由这个随机函数产生1个随机数.这个随机数和预先设定的阈值进行比较,若小于这个阈值,rule函数就为“0”;若大于这个阈值,rule函数的值就为“1”.当某个原子经rule函数判断后,它的值也随之由rule函数重新设置,若设为0,就表明要被“移去”,这样,对于大量的硅原子,在经过rule函数处理后,被移去的概率就和预先设定的阈值趋于一致.

在定义了腐蚀函数后,还需要定义掩膜函数,用mesh来表示,在mesh函数中用列表对掩膜图形进行描述,不同的描述得到不同的图形.为了节省并充分利用程序,将掩膜程序独立出来,其他的部分定义为silicon函数,在silicon函数中,将atom函数、rule函数、etching函数以及阈值的计算、腐蚀时间的定义都包含进去.由于需要得到不同掩膜、不同腐蚀速率比、不同时刻的腐蚀结果,所以silicon函数就要具有掩膜图形、各晶面的腐蚀速率比、腐蚀时间等参数,只要我们对参数进行设定,就可以改变掩膜图形、腐蚀速率比、腐蚀时间等参数,从而得到相应的结果,不需要再重新编制程序.

由以上分析可以看出本程序的思路,对硅晶体

用一个列表来表示,列表中不同的数代表原子的不同状态,执行silicon函数,就对代表硅晶体的列表进行计算处理.再对运算结果使用列表绘图函数,就能得到表示腐蚀结果的图形.

4 腐蚀模拟结果

按照上面的程序思路,先编制掩膜图形函数.根据实际工艺的需要,目前编制了以下几种掩膜图形的函数:长方形、正方形、L形、倾斜角为 45° 的斜长方形以及倾斜角为 75° 的斜长方形.

先建立一个具有正方形网格的表格,需要不同的掩膜,便将其对应的部位“变黑”.反映在程序中,便是将掩膜部分的网格和其他部分赋予不同的值,见图2.每个网格代表一个晶胞的上表面.

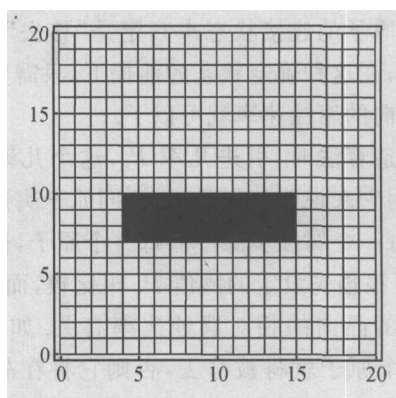


图2 掩膜示意图

Fig. 2 Rectangle mask diagram

由实验数据可知^[6],在100, 34%的KOH溶液中,各相关晶面腐蚀速率比 $p_{110} : p_{311} : p_{100} : p_{111} = 50 : 45 : 30 : 1$.在此条件下,建立一个具有 $20 \times 20 \times 20$ 个晶胞、{100}衬底的单晶硅模型,对长方形的掩膜图形进行腐蚀模拟.

执行程序后,可以得到在腐蚀过程中不同时刻一系列图形,由于篇幅所限,在这里只列出其中有代表性的几幅,见图3和图4,分别是不同视角观察的结果.

同样地,对于正方形、L形、 45° 斜长方形、 75° 斜长方形的掩膜图形下的腐蚀分别进行了模拟,图5列出了比较有代表性的 75° 斜长方形掩膜的腐蚀模拟结果.

图6给出了考虑(311)晶面后,对L形掩膜腐蚀的模拟结果.

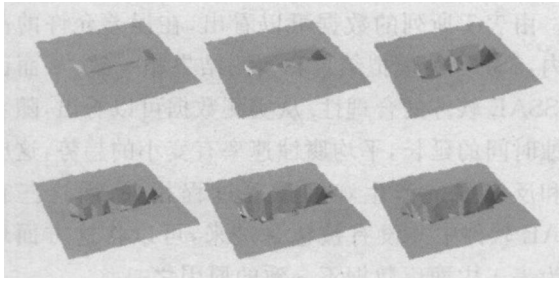


图 3 腐蚀过程各个时刻示意图

Fig. 3 Simulation of the etching process using SSAE

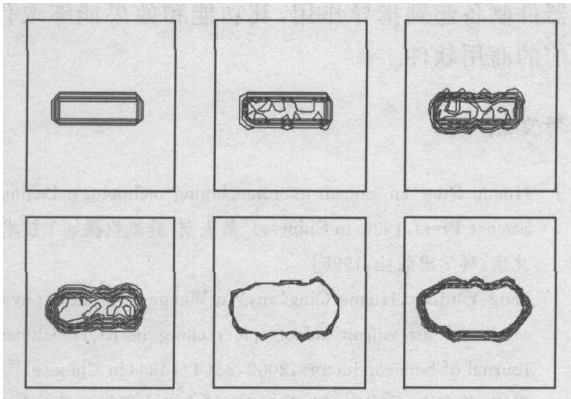


图 4 与图 3 各个时刻对应的俯视图

Fig. 4 Planform of situations corresponding to that in Fig. 3

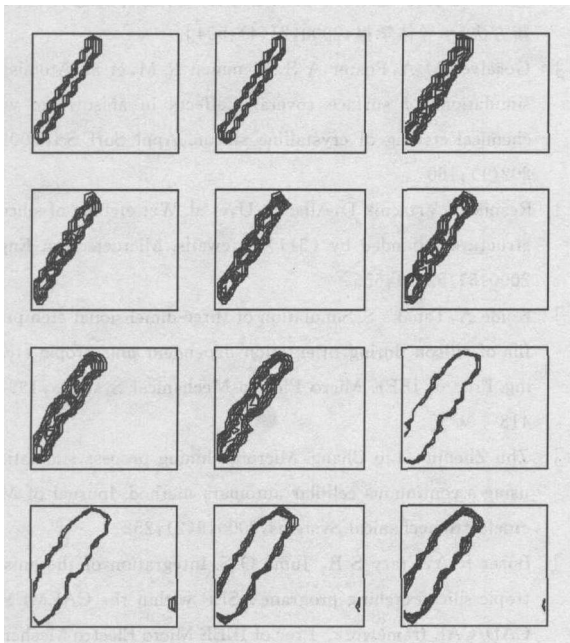


图 5 75 斜长方形掩膜的腐蚀模拟结果

Fig. 5 Planform of simulation using SSAE corresponding to rectangle mask with 75°

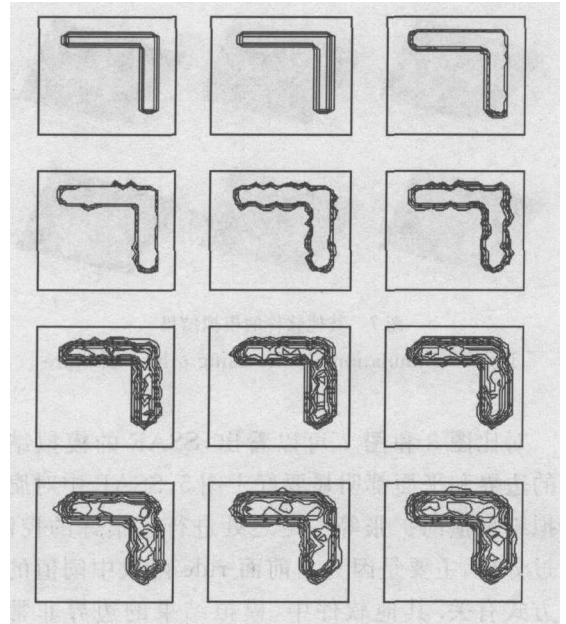


图 6 L 形掩膜的腐蚀模拟结果

Fig. 6 Planform of simulation using SSAE corresponding to L shape mask

5 分析与结论

在以上所构造函数的基础上,加上适当的输入界面和用于输出的图形处理能力,独立开发出用于模拟硅在 KOH 中各向异性腐蚀的软件——SSAE.

目前,用于硅在 KOH 中各向异性腐蚀的软件有多种.如由 Zhu 和 Liu 等人^[7]用原子模型中动态 CA 算法和连续 CA 算法相结合发展的硅各向异性腐蚀模拟软件 ACES (anisotropic crystalline etch simulation),该软件能够模拟在不同腐蚀液、不同衬底方向硅的腐蚀.其模拟所需的二维掩膜图样可由常用的绘图软件产生,图形格式可以是 CIF, GD-SII, GIF 或 BMP;软件输出产生标准的固体模型格式的三维图样,并且在 Open GL 或 VRML 浏览器上可显示结果,整个软件可在 PC 机上运行.另外还有由 Buser 等人^[8]用几何模型发展的硅各向异性腐蚀模拟软件,是第一个被集成进 CAEMEMS (computer-aided engineering of micro-electro-mechanical systems) 计算机辅助设计系统的硅各向异性腐蚀模拟软件,具有较强处理数据的能力和显示输出的能力.

应用某商用软件对与图 3 所对应的腐蚀条件进行模拟,与图 3 所示相一致的各个时刻对应的结果示于图 7 中.

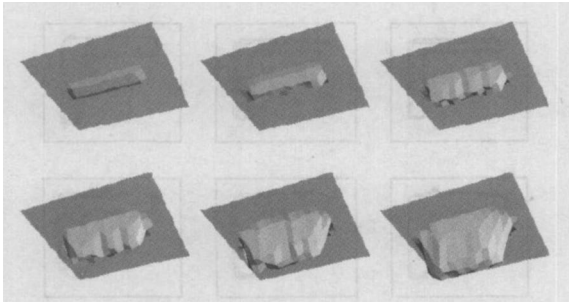


图 7 其他软件的模拟结果

Fig. 7 Simulation results using other software

对比图 3 和图 7 可以看出,SSAE 的模拟结果中的边界和平面都明显要好于图 5,SSAE 中对腐蚀模拟结果横向扩张等不足之处进行了很好的控制.经过分析,主要是因为与前面 rule 函数中阈值的确定方式有关.其他软件中,模拟结果的边界非常模糊,如图 5 所示,这主要是由于在软件中所采用的原子级模型的结果.针对这个在使用原子级模型时普遍会出现的问题,SSAE 中先应用构造的 rule 函数对待处理的原子进行判断,判断后,待处理原子的几率值由 rule 函数重新设置,而 rule 函数对原子的设置值由其阈值决定.这样,一方面保证了几率值与根据特定条件下确定的腐蚀速率值密切相关,确保了模拟的精确;另一方面,对于待处理原子的几率值也进行了有效的集中控制,避免出现其他软件中模拟结果边界模糊、横向边界扩张等问题.

SSAE 的模拟结果一方面可以进行图形显示,同时能够以数据形式表现出腐蚀的结果.如通过 SSAE 可以得到当掩膜版为边长 $10\mu\text{m}$ 的正方形,在 70%,34% 的 KOH 溶液中腐蚀 (100) 单晶硅某一时间后的腐蚀深度,如表 1 所示.为对比方便,实际测量结果也示于表 1 中,测量使用的是 Tencor Instruments 公司的 Alpha-step 200.

表 1 在 70%,34% 的 KOH 溶液中腐蚀 (100) 晶面的模拟结果和实测结果

Table 1 Simulation and actual measurement results corresponding to KOH etchant with 34% at 70

腐蚀时间/ min		2	5	8
腐蚀深度 / μm	SSAE 模拟	1.85	4.56	7.32
	实测	2.10	4.85	7.10

由表 1 所列的数据可以看出,在误差允许的范围,SSAE 的模拟结果和实测结果相一致,从而证明 SSAE 软件的合理性.从实测数据可以看出,随着腐蚀时间的延长,平均腐蚀速率有变小的趋势,这应该和反应物的产生和输运等过程相关,而这些在 SSAE 软件中并没有被包含进来,可以将这方面理解为表 1 中两组数据不一致的原因之一.

综合以上分析,可以认为,原子级的模拟软件 SSAE 所采用的算法及所得到的结果是合理的,所得到的结果在一定程度上能够对 MEMS 中的工艺和器件制备起到指导作用,其功能和效果能够取代目前的商用软件.

参考文献

- [1] Huang Qing'an. Silicon micromachining technology. Beijing: Science Press, 1996 (in Chinese) [黄庆安. 硅微机械加工技术. 北京: 科学出版社, 1996]
- [2] 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]
- [3] Yang Heng, Bao Minhang, Shen Shaoqun, et al. A novel method for measuring etch rate in silicon anisotropic etchant. Chinese Journal of Semiconductors, 2000, 21(4): 504 (in Chinese) [杨恒, 鲍敏杭, 沈绍群, 等. 测定硅各向异性腐蚀速率分布的新方法. 半导体学报, 2000, 21(4): 504]
- [4] Gosalvez M A, Foster A S, Nieminen R M, et al. Atomistic simulations of surface coverage effects in anisotropic wet chemical etching of crystalline silicon. Appl Surf Sci, 2002, 202(1): 160
- [5] Resnik D, Vrtacnik D, Aljancic U, et al. Wet etching of silicon structures bounded by (311) sidewalls. Microelectron Eng, 2000, 51/52(2): 555
- [6] Koide A, Tanaka S. Simulation of three-dimensional etch profile of silicon during orientation dependent anisotropic etching. Proc of IEEE Micro Electro Mechanical Systems, 1997: 418
- [7] Zhu Zhenjun, Liu Chang. Micromachining process simulation using a continuous cellular automata method. Journal of Microelectromechanical Systems, 2000, 9(2): 252
- [8] Buser R A, Crary S B, Juma O S. Integration of the anisotropic-silicon-etching program ASEP within the CAEMEMS CAD/CAE framework. Proc of IEEE Micro Electro Mechanical Systems, 1992: 133

Simulation of Silicon Anisotropic Etching Using Cellular Automata Method *

Jiang Yanfeng¹ and Huang Qing 'an²

(1 *Microelectronic Center, College of Information Engineering, North China University of Technology, Beijing 100041, China*)

(2 *MEMS Key Laboratory of Education Ministry, Department of Electrical Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China*)

Abstract : Simulation of silicon anisotropic etching is made using cellular automata method. According to material property of silicon and etching process ,the relevant function is listed. Moreover ,a software named SSAE is finished with which the etching process and results can be simulated. Its results accord to other softwares and experiments. Compared with other similar software ,SSAE has some advantages ,such as independence to hardware and operation system ,economization ,high simulation speed ,etc.

Key words : anisotropic etching; simulation; cellular automata

PACC : 7320A; 7300

Article ID : 0253-4177(2005)03-0618-06

* Project supported by Natural Science Foundation of Beijing(No. 4042013)

Jiang Yanfeng male ,was born in 1972 ,associate professor. He is engaged in research on MEMS CAD.

Huang Qing 'an male ,was born in 1963 ,professor ,tutor of doctor candidate. He is engaged in research on MEMS.

Received 3 March 2004 ,revised manuscript received 10 June 2004

© 2005 Chinese Institute of Electronics