

牺牲层腐蚀二维数值模拟与仿真^{*}

李艳辉[†] 李伟华

(东南大学 MEMS 教育部重点实验室, 南京 210096)

摘要: 建立了基于扩散方程的二维腐蚀模型, 并给出相应的边界条件. 为求解二维扩散方程, 分别给出了有限差分显式和隐式求解算法. 得到了每一时刻溶液在具体位置的浓度值, 再由 Topography 模型计算腐蚀前端面的腐蚀情况得到腐蚀前端行进轮廓线. 编程实现了对多种不同牺牲层几何结构以及组合结构腐蚀过程的仿真, 最后实验验证了模拟的真实性.

关键词: 牺牲层腐蚀; 扩散方程; 差分算法

EEACC: 2520; 2575

中图分类号: TN304.01

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)07-1321-05

1 引言

牺牲层释放是微电子机械系统(MEMS)结构制造中广泛应用的一项技术. 近年来 MEMS 的技术研究和产业化发展迅速, 在开发 MEMS 的过程中, 为了节省开发的周期和成本, 计算机辅助设计(CAD)的作用显得越来越重要. 而牺牲层腐蚀的计算机模拟是 MEMS CAD 工艺模拟非常重要的环节, 对它的研究有着重要的意义.

在集成电路(IC)工艺中已研究了氢氟酸(HF)腐蚀氧化硅的模型. 但牺牲层腐蚀与集成电路工艺中氧化硅腐蚀存在着很大差异, 主要是由于 MEMS 结构对空间几何结构特性的要求远高于 IC. 例如牺牲层释放的不彻底会严重降低 MEMS 器件的机械性能, 甚至造成器件无法正常工作. 相反如果腐蚀时间过长造成过腐蚀, 会影响甚至破坏 MEMS 结构层, 造成器件性能和可靠性的大大降低. 因而能否实现对牺牲层腐蚀进行准确的控制是影响 MEMS 器件性能优劣的关键环节.

为了对牺牲层腐蚀过程进行模拟, 已经建立了多种模型. 这些模型大都是基于扩散方程的, 对腐蚀过程的模拟几乎都是在二维空间内进行. Liu 等人^[1,2]利用极坐标把腐蚀模型扩展到了二维平面中. Eaton 等人^[3,4]则实现了利用一维腐蚀模型来模拟比较复杂的一般结构和组合结构. 但是这些模型都存在着一定的局限性, 它们的应用范围受到一定的限制, 只能对一些特殊结构进行模拟. 因此对 MEMS 结构中很多复杂结构, 特别是不同基本结构

组成的组合结构的腐蚀不能进行准确的直观模拟.

由于牺牲层腐蚀主要受溶液扩散机制的制约, 本文从二维扩散方程出发建立了二维腐蚀模型. 根据有限差分数值算法解得了二维扩散偏微分方程, 并利用 Topography 模型^[5]计算腐蚀前端面的移动轨迹. 编程实现了对多种不同牺牲层结构例如悬臂梁、固支梁、圆形、矩形以及组合结构复杂的模拟.

2 二维腐蚀模型

一般来说, 腐蚀机制由化学反应和扩散机制决定. 溶液首先扩散到腐蚀前端面再与牺牲层发生化学反应. 腐蚀液有效成分会随反应进程而发生变化, 消耗的有效成分需要补充, 这种现象在平面腐蚀中并不明显, 或认为这种影响忽略不计. 但在掏空式的腐蚀中, 腐蚀液必须通过腐蚀开口处进入, 腐蚀溶液首先要从腐蚀开口扩散到腐蚀前端面处, 再与前端面的牺牲层反应, 这时腐蚀主要受扩散机制制约. 通过实验证明, 腐蚀开始一段时间后将主要受扩散影响^[6].

在主要受扩散机制制约的化学腐蚀过程中, 可把腐蚀系统分为三部分(如图 1 所示)^[5]: 腐蚀液层; 化学反应层; 材料层. 在腐蚀液层主要受溶液扩散的支配, 溶液浓度分布可以近似表示为没有腐蚀的扩散分布; 化学反应层同时受溶液扩散和化学反应支配; 材料层中, 扩散和化学反应都被忽略. 在区域 化学反应非常快, 近似认为溶液扩散到腐蚀前端即被立刻腐蚀掉. 由于化学反应占主要地位, 扩散处于次要地位, 所以区域 的溶液分布取决于

^{*} 国家杰出青年科学基金资助项目(批准号: 50325519)

[†] 通信作者. Email: seuliyanhui@163.com

2005-11-03 收到, 2006-02-22 定稿

化学平衡. 通过计算推导, 得到了化学反应层的宽度 d 只有 $0.02\mu\text{m}^{[5]}$. 由于 d 非常小, 腐蚀液层浓度扩散等高线近似相当于腐蚀前端表面.

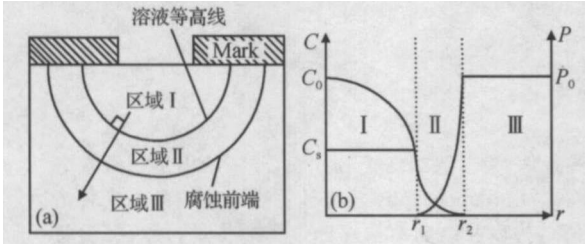


图 1 (a) 化学腐蚀过程的三个区域; (b) 在受扩散制约下, 腐蚀溶液浓度 C 和腐蚀材料密度 P 的分布

Fig. 1 (a) 3 regions of chemical etch process; (b) Distribution of etchant concentration C and etching material concentration P in the restriction of diffusion

由于回流项比扩散项小两个数量级^[1], 忽略回流交换项, 腐蚀模型主要基于以下二维扩散方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right] \quad (1)$$

式中 $C = C(x, y, t)$ 为溶液在 t 时刻、 (x, y) 位置的浓度, 其中 $t > 0, 0 < x < a, 0 < y < b$; D 为溶液的扩散系数, 它由牺牲层材料和腐蚀溶液共同决定.

为求解此偏微分方程, 须确定方程的边界条件. 其初始条件为

$C(x, y, 0) = 0$ (x, y) 为不是开口位置的坐标点;

$C(x_0, y_0, t) = C_0$ (x_0, y_0) 为开口位置的坐标点, C_0 为开口处溶液浓度.

边界条件为

$$\begin{aligned} C(0, y, t) = 0, \quad C(a, y, t) = 0, \\ C(x, 0, t) = 0, \quad C(x, b, t) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

在牺牲层腐蚀中, 腐蚀溶液浓度等高线(面)是由扩散机制制约各向同性运动的. 腐蚀边界条件随着每一时间步长而重新设定, 从而使得腐蚀速率随着时间步的变化而变化. 由于腐蚀开口位置的溶液浓度是恒定的, 在腐蚀二维平面内溶液是呈余误差分布的^[7]

$$\frac{C}{C_p} = \text{erfc} \left[\frac{x+y}{\sqrt{8Dt}} \right] \quad (3)$$

其中 C, C_p 分别为腐蚀前端浓度和端口腐蚀液浓度, 端口浓度是指腐蚀前端处已经被腐蚀掉的单元的浓度.

为了便于分析, 先考虑一维的情况. 在一维空间内, 溶液分布可以表示为

$$\frac{C}{C_p} = \text{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{D_x t}} \right] \quad (4)$$

浓度等高线的运动可以表示为

$$x = 2\sqrt{D_x t} \text{erfc}^{-1} \left[\frac{C}{C_p} \right] \quad (5)$$

其中 erfc^{-1} 为余误差函数的逆. 进而可得到等高线表面的运动速率为

$$\frac{dx}{dt} = 2\sqrt{\frac{D_x}{t}} \text{erfc}^{-1} \left[\frac{C}{C_p} \right] \quad (6)$$

从(5)和(6)式可以看出, 等高线之间长度与 $\sqrt{D_x t}$ 成正比, 而等高线运动速率与 $\sqrt{D_x/t}$ 成正比. 由(5)式得到, 相邻浓度等高线的扩散长度在扩散时间 $t = n^2, (n+1)^2, (n+2)^2 \dots (\text{min})$ 时为一常量. 腐蚀速率 V_x 和扩散系数 D_x 的关系, 扩散时间 t 和腐蚀时间 T 的关系可分别由以下两式表示

$$\sqrt{D_x} = k_1 V_x \quad (7)$$

$$\sqrt{t} = k_2 T \quad (8)$$

其中 k_1, k_2 均为常数, 它们的单位分别为 $\text{s}^{1/2}$, $\text{s}^{-1/2}$, 这两个常数只作为比例系数并没有具体物理意义, 且都可以假设为单位常量.

腐蚀前端的移动过程可以看作溶液浓度等高线的推进过程. 由(5)和(6)式可以得到腐蚀前端面移动的距离

$$X = V_x T = \sqrt{D_x t} \quad (9)$$

对于在二维模型中以上公式同样适用^[6]. 并且由于 $D_{x,y} = D, V_{x,y} = V$. 腐蚀前端面移动的距离为

$$X = Y = VT = \sqrt{Dt} \quad (10)$$

将(10)式代入(3)式可得^[7]

$$\frac{C}{C_p} = \text{erfc} \left[\frac{2\sqrt{Dt}}{\sqrt{8Dt}} \right] = \text{erfc} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) = 0.32 \quad (11)$$

上式表明, 当腐蚀前端面溶液浓度与腐蚀端口处溶液浓度的比值大于等于 0.32 时, 就可以认为该位置已经被腐蚀掉了, 腐蚀前端面将向前推进一步. 然后重新设定腐蚀边界条件, 进行下一步腐蚀, 最终可以得到腐蚀前端面腐蚀行进的轮廓线.

3 数值解法以及程序实现

腐蚀模型的数值求解, 主要是对二维扩散方程(1)的求解. 数值求解方程(1)主要是利用网格划分法把腐蚀平面离散为许多很小的单元, 然后逐一求解每一个单元的量.

首先, 把腐蚀平面剖分为网格:

x 方向上, $x_j = jh, j = 0, 1, 2 \dots J$;

y 方向上, $y_l = lh, l = 0, 1, 2 \dots L$.

腐蚀时间划分为 n 步, $t_n = n$.

以上 h 和 Δt 分别为空间步长和时间步长.

根据计算时间步的先后可分为显式差分格式和隐式差分格式. 显式求解算法易于实现, 但是为有条件稳定, 精度较低; 隐式算法是无条件稳定且精度比

显式算法高,但计算复杂需要求解阶数很大的线性方程组,速度较慢.下面分别对两种格式给出具体实现过程.

采用显式格式微分方程 (1) 可以分解成以下的形式^[11]

$$C_{jl}^{n+1} = (1 - 4r) C_{jl}^n + r(C_{j+1,l}^n + C_{j-1,l}^n + C_{j,l+1}^n + C_{j,l-1}^n) \quad (12)$$

其中, $j=0,1,2,3 \dots J-1; l=0,1,2,3 \dots L-1; r = D/2h^2$ 为稳定因子.

这种格式包括五个结点.其计算精度为 $O(h^2 + \tau)$,在满足条件 $r \le 1/4$ 时算法保持稳定.

隐式格式主要有 Crank-Nicolson (C-N) 格式和交替方向隐式 (ADI) 格式^[8~11].在稳定因子 $r > 0$ 的条件下,两格式都保持无条件收敛.由于 C-N 需求解更大阶数的线性方程组,计算速度明显低于 ADI 格式,因此采用 ADI 格式.此算法的计算精度为 $O(h^2 + \tau^2)$.具体实现表示为

第一步:

$$(1 + 2r) C_{jl}^{n+\frac{1}{2}} - rC_{j+1,l}^{n+\frac{1}{2}} - rC_{j-1,l}^{n+\frac{1}{2}} = (1 - 2r) C_{jl}^n + rC_{j+1,l}^n + rC_{j-1,l}^n \quad (13)$$

第二步:

$$(1 + 2r) C_{jl}^{n+1} - rC_{j,l+1}^{n+1} - rC_{j,l-1}^{n+1} = (1 - 2r) C_{jl}^{n+\frac{1}{2}} + rC_{j,l+1}^{n+\frac{1}{2}} + rC_{j,l-1}^{n+\frac{1}{2}} \quad (14)$$

程序流程见图 2,首先将腐蚀平面离散为网格,再求每一个网格单元在一定时刻的浓度值.设定腐蚀平面中的每一单元腐蚀情况用一个标志值来表示,已经腐蚀掉用 0 来表示,没有则用 1 表示.腐蚀

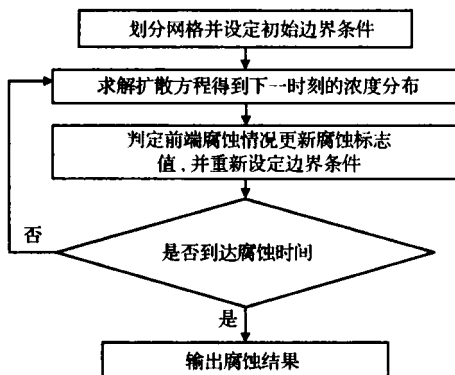


图 2 模拟程序流程图

Fig. 2 Flow chart of the simulation program

开始时只有开口位置的判定值为 0,其他的位置均设定为 1.开始计算下一个时刻的浓度值,并由 (11) 式判定腐蚀前端浓度值与端口溶液浓度比是否大于 0.32.大于则说明该单元已被腐蚀掉,并设定其标志值为 0,小于 0.32 则标志值仍为 1,该单元浓度置 0.

重新设定边界条件再进行下一步的腐蚀,直到腐蚀到给定的腐蚀时间.最后得到在这个腐蚀时间内的腐蚀结果.

4 实验验证及讨论

为了验证仿真结果,设计了腐蚀测试结构并进行流片.实验采用低温热氧化 (LTO) 生长的氧化层作为牺牲层.具体的工艺流程是:首先,在硅衬底上生长一层厚度为 $2\mu\text{m}$ 的 LTO;接着采用反应离子刻蚀 (RIE) 法刻槽,快速热氧化一层厚度小于 $0.05\mu\text{m}$ 的氧化层;再低压化学气相淀积 (LPCVD) 一层 $0.6\mu\text{m}$ 的多晶硅,最后刻蚀形成腐蚀开口.

用质量百分比浓度为 30% 的氢氟酸 (HF) 溶液对测试硅片进行腐蚀,腐蚀一定时间后,用去离子水冲洗晾干后,在高倍显微镜下观察腐蚀前端面的轮廓.模拟中扩散系数 D 是一个至关重要的参数,它与腐蚀速率有着密切关系.由于溶液浓度、牺牲层的厚度以及牺牲层材料的种类都对腐蚀速率产生很大的影响,所以扩散系数 D 受这些因素的影响显著.各具体工艺线因生长牺牲层以及腐蚀控制有一定的差异,但对一具体稳定的工艺线,其扩散系数是较稳定的.因此,把 D 看作常数,可以通过实验结果拟合提取.具体方法是根据 (10) 式推导出系数 D ,再代入不同时间步长和相应步长内的实验腐蚀尺寸求得 D ,最后对在不同时刻的 D 求平均值.

通过实验腐蚀照片和模拟得到轮廓图以及实验腐蚀尺寸与模拟尺寸的对比,可以看出实验结果与模拟结果符合较好.图 3 为单孔 $90\mu\text{m} \times 90\mu\text{m}$ 的牺牲层结构,在开口尺寸分别为 10, 20 和 $30\mu\text{m}$ 在腐蚀 20min 时的腐蚀照片与模拟结果的对比.表 1 为此结构实验测量腐蚀长度与模拟得出腐蚀长度的对比.图 4 为四方孔 $80\mu\text{m} \times 80\mu\text{m}$ 的牺牲层结构在开口尺寸分别为 6 和 $12\mu\text{m}$ 在腐蚀 15min 时腐蚀照片与模拟结果的对比.图 5 是开有八个半径 $2.5\mu\text{m}$ 圆孔的 $100\mu\text{m} \times 150\mu\text{m}$ 悬臂梁结构腐蚀 15min 时实验照片与模拟结果的对比.

表 1 腐蚀结构实验腐蚀尺寸(腐蚀开口的长度)与模拟尺寸的对比

Table 1 Contrast the experimental etching size (length of the opening) to the simulated size of the sacrificial structure

Opening size/ μm	10	20	30
Experimental data, $d/\mu\text{m}$	49	58.7	69
Simulation data, $d/\mu\text{m}$	45	57	68

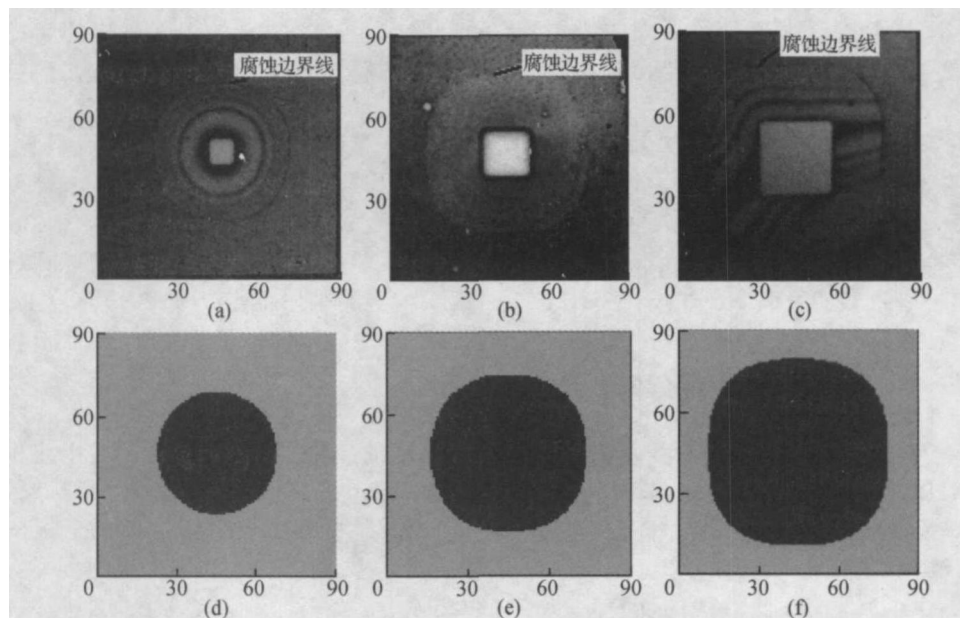


图 3 边长分别为 10,20 和 30 μm 的方形开口结构腐蚀 20min 时的实验照片 (a), (b), (c) 与模拟结果 (d), (e), (f) 的对比
Fig. 3 Contrast the experimental photos (a), (b), (c) to the simulation result (d), (e), (f) of 10,20 and 30 μm singular square-port structure etched for 20min

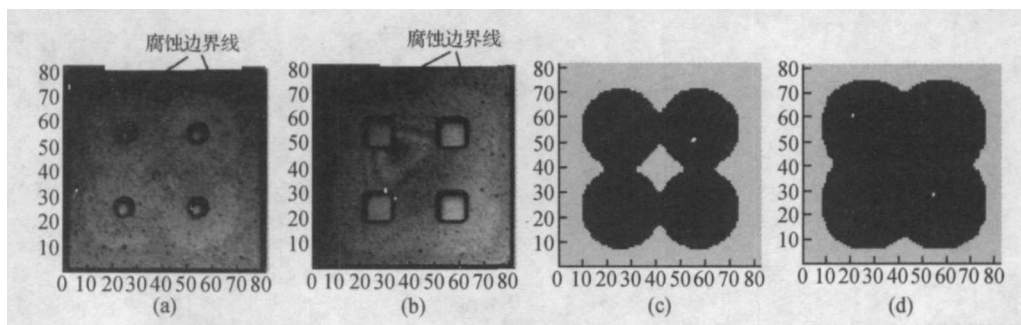


图 4 边长分别为 6 和 12 μm 的方形四开口结构腐蚀 15min 时的实验照片 (a), (b) 与模拟结果 (c), (d) 的对比
Fig. 4 Contrast the experimental photos (a), (b) to the simulation result (c), (d) of four-square-port structure with opening length of 6 μm and 12 μm etched for 15min

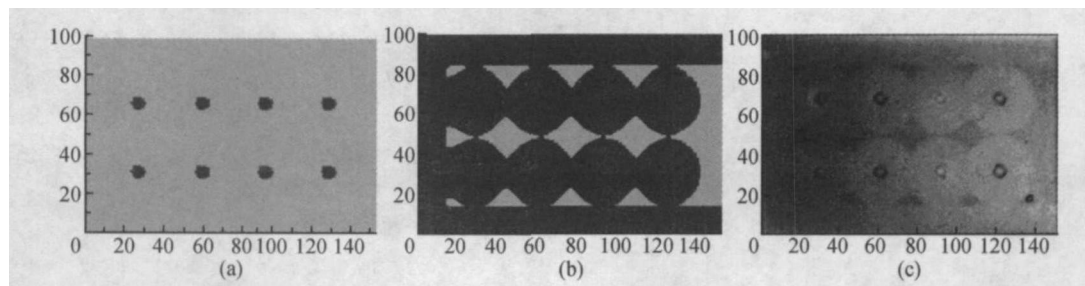


图 5 开有八个半径为 2.5 μm 圆孔的悬臂梁结构腐蚀 15min 的实验照片与模拟结果的对比 (a) 牺牲层结构的掩模; (b) 模拟结果; (c) 实验照片
Fig. 5 Contrast the experimental photos to the simulation result of eight-circle-port cantilever structure after etching 15min (a) Mask of sacrificial structure; (b) Simulation result; (c) Experimental photo

从模拟结果与实验照片的对比中,可以看出两者腐蚀形状吻合较好,但腐蚀尺寸还存在着一定的误差.主要原因是采用的二维腐蚀模型对一些影响腐蚀的因素没有考虑,为了简化模型,只考虑了扩散

机制对腐蚀的影响,没有把化学反应的影响考虑进来.另外扩散系数 D 在腐蚀过程中是变化的,而本文把 D 看作了一个常数.这些都使得模拟出来的精度不够理想,需要在今后工作中继续修正、完善.

5 结论

牺牲层腐蚀主要受溶液扩散的制约,本文利用 Topography 模型给出了基于二维扩散方程的牺牲层腐蚀模型以及求解方程的有限差分数值算法,得到溶液在每一位置具体时刻的浓度值.由 Topography 模型计算腐蚀前端面腐蚀进行情况,编程得到了能够模拟不同牺牲层结构以及组合结构的仿真程序.通过实验腐蚀照片与模拟结果的对比可知,两者保持较好的一致性.

参考文献

- [1] Liu J , Tai Y C , Lee J , et al. In-situ monitoring and universal modeling of sacrificial PSG etching using hydrofluoric acid. Micro Electro Mechanical Systems, MEMS '93 Proceedings, An Investigation of Micro Structures, Sensors, Actuators, Machines and Systems. IEEE, Fort Lauderdale, 1993:71
- [2] Li W J , Shih J C , Mai J D. Numerical simulation for the sacrificial release of MEMS square diaphragms. First International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, UC-Los Angeles, USA, 1998:59
- [3] Eaton W P , Smith J H. Release-etch modeling for complex surface micromachined structures. Micromachined Devices and Components, Proceedings of the SPIE, Austin, TX, 1996, 2882:1
- [4] Matamisa G. Release etch modeling analysis and the use of laser scanning microscopy for etch time prediction of micromachined structures. Proceedings of SPIE, 2000, 4174:267
- [5] Fujinaga M , Kotani N , Kunikyo T , et al. Three-dimensional topography simulation model: etching and lithography. IEEE Trans Electron Devices, 1990, 37(10):2183
- [6] Westberg D , Paul O , Andersson G , et al. Surface micromachining by sacrificial aluminum etching. Journal of Micromechanics and Microengineering, 1996, 6(4):376
- [7] Salo T , Vancura T , Baltes H. Modeling of sacrificial aluminum etching in complex geometries. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2004, 14:123
- [8] Lu J F , Guan Z. Numerical algorithm of partial differential equation. Beijing: Tsinghua University Press, 2004:112 (in Chinese) [陆金甫, 关治. 偏微分方程数值解法. 北京: 清华大学出版社, 2004:112]
- [9] Schilling R J , Harris S L. Applied numerical methods for engineers using MATLAB and C. Beijing: Press of Mechanics Industry, 2004:440
- [10] Dai J Z , Qiu J X. Numerical algorithm of differential equation. Nanjing: Southeast University Press, 2002 (in Chinese) [戴嘉尊, 邱建贤. 微分方程数值解法. 南京: 东南大学出版社, 2002]
- [11] Dehghan M. Second-order schemes for a boundary value problem with Neumann's boundary conditions. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2002, 138:173

2D Numerical Simulation of Sacrificial Layer Etching*

Li Yanhui[†] and Li Weihua

(Key Laboratory of MEMS of the Ministry of Education, Southeast University, Nanjing 210096, China)

Abstract: Since the etching mechanism of sacrificial layer is mainly restricted by diffusion, a 2D etching model based on the diffusion equation is constructed and the relative boundary conditions are given. Explicit and implicit numerical algorithms using the finite-difference method are presented to solve the 2D diffusion equation to get the value of the concentration at every site at different times. The topography model is then used to compute the etching state to determine the etch contour at the front. A simulation program that can simulate different complex sacrificial structures is implemented. The simulation is validated by experiments.

Key words: sacrificial layer etching; diffusion equation; difference algorithm

EEACC: 2520; 2575

Article ID: 0253-4177(2006)07-1321-05

* Project supported by the National Outstanding Young Scientists Fund of China (No. 50325519)

[†] Corresponding author. Email: seulyanhui@163.com

Received 3 November 2005, revised manuscript received 22 February 2006