

考虑高指数晶面的体硅腐蚀模拟新 CA 模型*

周再发[†] 黄庆安 李伟华 邓 伟

(东南大学 MEMS 教育部重点实验室, 南京 210096)

摘要: 针对目前体硅腐蚀(硅各向异性腐蚀)的 3D CA 模型无法引入(211), (311), (331), (411)等较多高密勒指数晶面, 模拟精度不高的问题, 建立了一种高精度的体硅腐蚀模拟的新 3D 连续 CA(元胞自动机)模型. 模型可以有效地引入(211), (311), (331), (411)等高密勒指数晶面, 提高模拟精度. 模拟结果与实验结果一致, 证明了模型的模拟效果, 对体硅腐蚀模拟研究和提高 MEMS 设计水平具有一定的实用意义.

关键词: 元胞自动机; 腐蚀模拟; 微机电系统; 微加工技术; 各向异性腐蚀

EEACC: 2560; 2550E; 2575

中图分类号: TN40

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)05-0731-06

1 引言

体硅腐蚀(硅各向异性腐蚀)技术^[1]是指在硅的腐蚀过程中, 硅的不同晶面具有不同的腐蚀速率, 它是 MEMS(micro-electro-mechanical system)加工的主体工艺之一, 在很多 MEMS 器件的加工过程中起着重要作用, 因此, 硅的各向异性腐蚀过程模拟成为建立 MEMS CAD 系统的重要研究内容之一. 随着计算机运算速度的提高及 MEMS 结构变得日渐复杂, 元胞自动机(CA)方法以其高精度和三维处理能力等优点, 逐渐在硅各向异性腐蚀过程模拟方面显出优势, 目前国内外已有多种硅的各向异性腐蚀模拟的元胞自动机模型^[2-10]. 然而目前的 CA 模型虽多, 但都无法同时精确地引入(120), (211), (311), (331), (411)等较多的高密勒指数晶面. 文献[8,9]提出的 3D 连续 CA 模型能够引入(311)或(211)等少量的高密勒指数晶面, 但还不能精确地引入(331), (411), (120)等更多的高密勒指数晶面, 因而这些模型的模拟精度不高. 如果模型能够考虑更多的晶面, 模型会变得更精确.

为了提高硅各向异性腐蚀模拟的精度, 本文直接采用硅的晶格结构作为 CA 的晶格结构, 建立了一种新的高精度 3D 连续 CA 模型. 根据硅各向异性腐蚀过程中与腐蚀液接触的表面元胞的相邻元胞和次相邻元胞数目及这些相邻元胞和次相邻元胞相对于腐蚀界面的位置, 确定该表面元胞所在的晶面. 模型可以有效地引入(120), (211), (311), (331), (411)等较多的高密勒指数晶面. 模拟结果与实验结

果一致, 证明了模型的模拟效果, 对硅各向异性腐蚀模拟研究和提高 MEMS 设计水平具有一定的实用意义.

2 3D 连续 CA 模型

3D 连续 CA 模型采用图 1 所示的硅的晶格结构. 在模拟过程中, 将硅衬底细分成小的立方体元胞, 由一些离散的位于晶格点位置的元胞组成的阵列代表硅衬底, 每个元胞并不代表一个真正的原子, 而是根据分辨率的要求确定元胞的尺寸. 在硅各向异性腐蚀过程中, 根据腐蚀过程中与腐蚀液接触的表面元胞的相邻元胞和次相邻元胞数目及这些相邻元胞和次相邻元胞相对于腐蚀界面的位置, 确定该表面元胞所在的晶面. 在此, 某一个表面元胞的相邻元胞是指通过“Si-Si”键与该元胞直接连接的元胞, 次相邻元胞是指通过“Si-Si”键直接与该元胞的相邻元胞直接连接的元胞. 这样腐蚀衬底的过程可转变为根据一定规则以及模拟计算时间步长不断腐蚀元胞阵列中单个元胞的过程, 某个元胞的腐蚀速率, 取决于该元胞的相邻元胞和次相邻元胞数目及这些相邻元胞和次相邻元胞相对于腐蚀界面的位置. 腐蚀模拟过程中, 表面元胞并不总是在时间步长的整数倍时间内被完全腐蚀, 很多情况下是在某一时间步长内被完全腐蚀, 因而在这一时间步长内, 就会有该元胞邻域内的元胞新暴露在腐蚀液中而且被部分腐蚀. 这样, 一个元胞的腐蚀过程会涉及到多个元胞的腐蚀计算, 严重影响模型的运算速度. 但是如果忽略这些剩余时间, 无疑会影响模拟的精度, 模型中引入时间补偿的方法^[3,7,8]可以解决这个冲突, 既

* 国家杰出青年科学基金资助项目(批准号:50325519)

[†] 通信作者. Email:zhouzaifa@yahoo.com.cn

2006-07-06 收到, 2007-01-12 定稿

能保证模拟精度,又基本不影响运算速度.

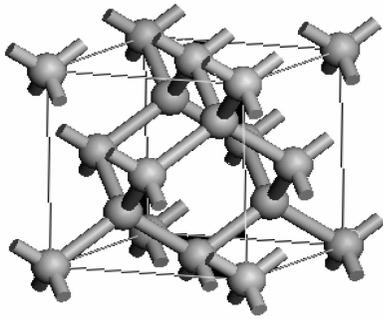


图 1 元胞自动机的晶格结构
Fig.1 Silicon crystal structure

采用“0”,“1”,“2”三种状态标志来定义元胞的腐蚀状态,“0”表示元胞已经被完全腐蚀;“1”表示元胞已成为表面元胞即将被腐蚀或者已被部分腐蚀;“2”表示元胞位于衬底内部,还没有与腐蚀液接触.此外,在连续 CA 模型中,每个元胞有连续可变的的状态,用一个 M 值表示这个连续状态, M 定义为当前时刻元胞被腐蚀后剩余部分与整个元胞的比值.腐蚀开始后,一个元胞所对应的 M 值任意地在 $M=1$ (保留)和 $M=0$ (移走)之间分布.腐蚀模拟开始后,根据初始条件确定腐蚀窗口,位于腐蚀窗口内的元胞成为腐蚀界面的表面元胞,其状态标志转变为“1”.根据这些状态标志为“1”的表面元胞的相邻元胞和次相邻元胞数目及这些相邻元胞和次相邻元胞相对于腐蚀界面的位置,确定每一表面元胞所在的晶面.具体地说,就是根据这些相邻元胞及次相邻元胞是位于腐蚀界面上(状态标志为“1”),位于衬底内部未与腐蚀液接触(状态标志为“2”),还是已经被完全腐蚀(状态标志为“0”),来确定每一表面元胞所在的晶面.然后,根据各晶面的腐蚀速率和腐蚀模拟的时间步长,对表面元胞进行“腐蚀”,不断得到元胞的新 M 值.如果在某一时间步长,某一元胞的 M 值变为“0”,则表示该元胞在这一时间步长内已经被完全腐蚀,则计算出该元胞对应的时间步长值,同时,其对应的状态标志由“1”变为“0”,与该元胞直接相连的相邻元胞状态标志也会改变.相应的改变规则为:

(1) 原状态为“2”的相邻元胞,其状态变为“1”.

(2) 原状态为“1”或“0”的相邻元胞,其状态继续保持不变.

也就是说,如果一个表面元胞在某一时间步长内被完全腐蚀,而与该元胞直接相连的相邻元胞中还有未暴露到腐蚀液的内部元胞,那么这些元胞会在下一时间步长暴露到腐蚀液中,成为表面元胞,然后在下一时间步长根据各表面元胞的相邻元胞和次相邻元胞数目及这些相邻元胞和次相邻元胞相对于腐蚀界面的位置,确定每一表面元胞所在的晶面,然后按照给定的时间步长不断“腐蚀”与腐蚀液接触的表面元胞.当某一表面元胞被完全腐蚀之后,与该元胞直接相连未暴露到腐蚀液的内部元胞,在下一时间步长暴露到腐蚀液中,成为表面元胞,这些新暴露到腐蚀液中的元胞又逐渐被腐蚀.这样不断重复上面的腐蚀过程,就会在衬底表面内自动地产生各向异性腐蚀过程中出现的晶面,直到给出的总腐蚀时间结束.

图 2 给出了腐蚀过程中如何确定(100),(110)和(111)3个低密勒指数晶面的示意图,例如(100)晶面上的元胞有 2 个状态标志为“2”的相邻元胞,2 个状态标志为“1”的次相邻元胞和 4 个状态标志为“2”的次相邻元胞,如图 2(a)所示.然而,(111)晶面上的元胞有 3 个状态标志为“2”的相邻元胞,2 个状态标志为“1”的次相邻元胞和 5 个状态标志为“2”的次相邻元胞,如图 2(c)所示.同理也可确定(211),(311),(331),(411)等高密勒指数晶面上的元胞.图 3 给出了(311),(331)晶面上元胞的元胞连接状态示意图,例如,(311)晶面上的元胞有 2 个状态标志为“2”的相邻元胞,4 个状态标志为“1”的次相邻元胞和 2 个状态标志为“2”的次相邻元胞.表 1 总结了以上晶面及其他常见晶面上元胞的连接规则,对于表 1 没有列出的其他晶面,则采用近似插值的方法,这样本文提出的模型可以有效地考虑腐蚀过程中出现的高密勒指数晶面,模型的精度得到了提高.下一节将讨论应用该 CA 模型的模拟硅的各向异性腐蚀,并将模拟结果与实验结果进行对比,以确认模型的效果.

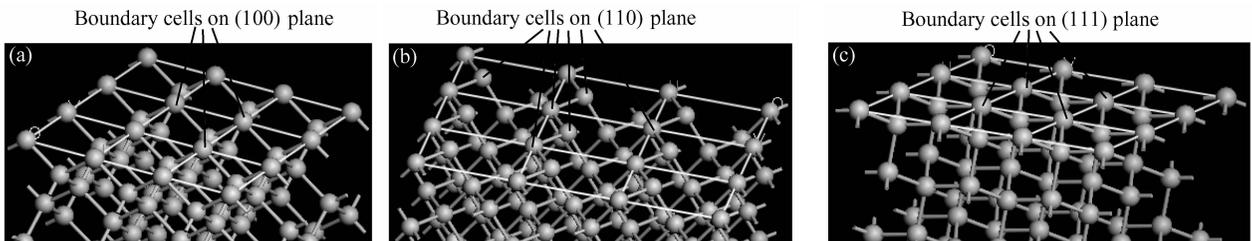


图 2 (100),(110)和(111)晶面元胞连接示意图 (a),(b)和(c)分别为(100),(110)和(111)晶面的情况.

Fig.2 Bonding situations of the (100),(110) and (111) surface cells (a),(b) and (c) are for (100),(110) and (111) surface cells, respectively.

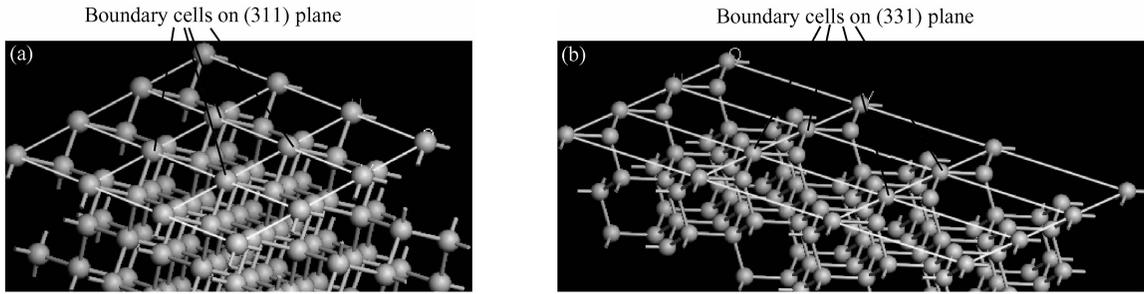


图 3 (311)晶面(a)和(331)晶面(b)元胞连接示意图
Fig.3 Bonding situations of the (311) surface (a) and (331) surface (b) cells

表 1 不同晶面上表面元胞的相邻元胞数,次相邻元胞数及这些相邻元胞和次相邻元胞相对于腐蚀界面的位置

Table 1 Numbers of nearest and second nearest neighbors and their location with respect to etch front for boundary cells on different crystal planes

不同晶面上的表面元胞	未被完全腐蚀的相邻元胞数目		未被完全腐蚀的次相邻元胞数	
	表面元胞数目	内部元胞数目	表面元胞数目	内部元胞数目
(100)	0	2	4	4
(110)	2	1	2	5
(111)	0	3	6	3
(120)	1	1	3	3
(211)	1	2	4	3
(311)	0	2	5	2
(331)	2	1	4	3
(411)	1	1	2	5

3 模拟与讨论

根据上一节中建立的 CA 模型,编制计算机程序实现了硅各向异性腐蚀过程的模拟.本文采用 p⁺ 型(100)的硅衬底(大约 0.08~0.2Ω·cm).对于轻掺杂的硅衬底,各晶面腐蚀速率随掺杂浓度的变化并不显著,但在掺杂浓度较高时,对于不同掺杂浓度的硅衬底,各晶面腐蚀速率随掺杂浓度的变化会发生显著变化,文献[1]给出了经验公式用于计算硅腐蚀速率随掺杂浓度的变化规律,在本文的模型中,针对不同的衬底掺杂浓度,需要用该文献中所总结的经验公式修正不同晶面上元胞(如表 1)的腐蚀速率.

首先采用与<110>方向成不同角度的矩形腐蚀窗口,如图 4(a)所示,模拟在浓度为 40wt% 的 KOH 腐蚀液中硅的各向异性腐蚀过程,腐蚀液温度为 70℃.对应于 24min 腐蚀时间的模拟结果和实验结果如图 4(b)和(c)所示,模拟结果与实验结果一致.由于采用了动态算法,只需要处理表面元胞的腐蚀过程,模拟速度较快,模拟采用 400×400×60 的元胞阵列,在 Pentium IV 计算机上所需的模拟时

间大约为 1min,以下的模拟时间也都基于 Pentium IV 计算机.

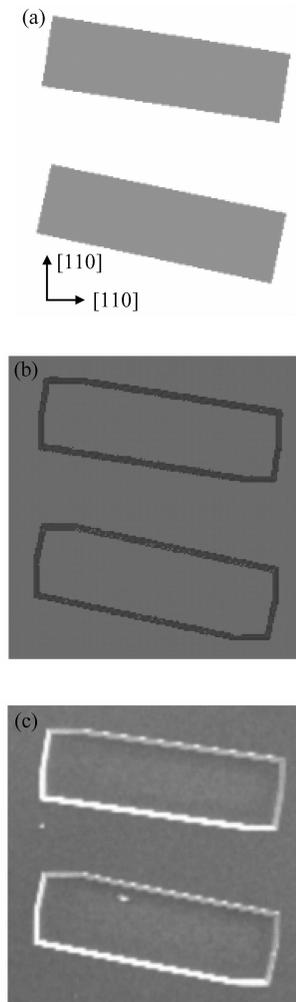


图 4 采用与<110>方向成不同角度的两个矩形腐蚀窗口时,硅在 KOH 腐蚀液中腐蚀 24min 时得到的模拟结果和实验结果 (a)掩模图形;(b)模拟结果;(c)实验结果

Fig.4 Simulation and experimental results for rectangular etching windows with different misalignments with respect to <110> direction in KOH (a) Mask shape;(b) Simulation result;(c) Experimental result

虽然掩模的分辨率通常会受实际工艺条件的限制,但还是会经常采用如图 5(a)所示的“spoke”掩模结构来测试腐蚀速率图^[3].现在采用该掩模结构模拟硅在 40wt% 的 KOH 腐蚀液中硅的各向异性腐蚀过程,腐蚀时间为 12min.得到的模拟结果如图 5(b)所示,模拟结果与图 5(d)所示的实验结果比较符合,相比于如图 5(c)所示的采用 ACES 得到的模拟结果^[5],由于本文的模型可以有效地引入(211), (311), (411), (331)等高密勒指数晶面,模拟精度有显著提高,图 5(b)与实验结果更为一致.在这个模拟过程中,采用 $600 \times 600 \times 10$ 的元胞阵列,模拟时间大约为 1.5min.由上面两种不同掩模结构所需的

模拟时间可以看出,采用动态算法只处理表面元胞的腐蚀过程,模拟速度较快,而且所需模拟时间只与每一腐蚀计算步长所需处理的表面元胞数目有关,而不是直接与所采用的三维元胞阵列大小相关.图 5 采用的三维元胞阵列比图 4 采用的三维元胞阵列要小,实际所需的腐蚀时间也要少,但由于图 5 在每一腐蚀计算步长所需处理的表面元胞较图 4 要多,因而所需的实际模拟时间反而要多些.

接着采用如图 6(a)所示的腐蚀窗口,模拟进一步检验模型的效果,对应于腐蚀时间为 30min 和 50min 的模拟结果分别和其相应的实验结果一致,如图 6 所示.最后,采用与 $\langle 110 \rangle$ 方向成不同角度的

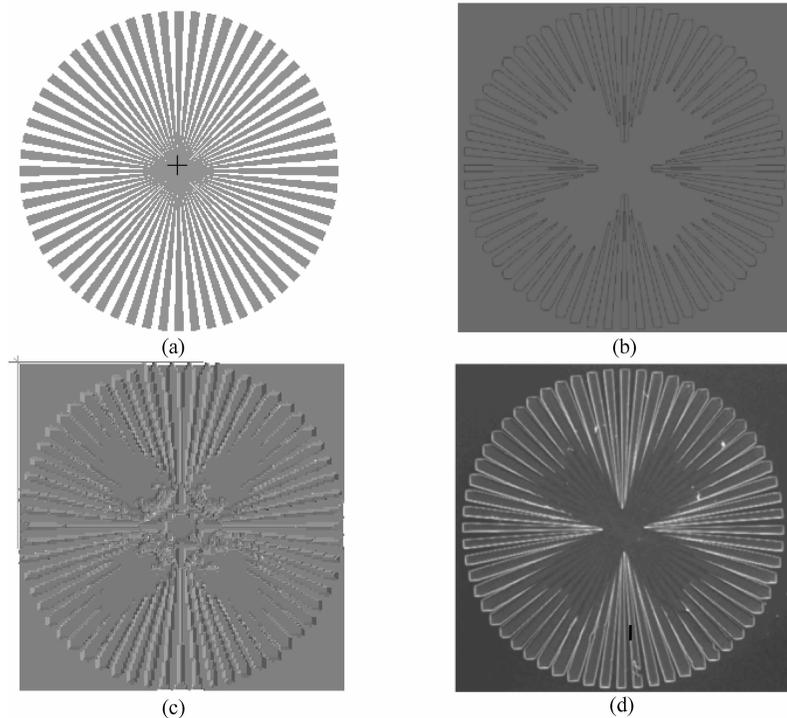


图 5 采用“spoke”掩模模拟硅在 KOH 腐蚀液中腐蚀过程的模拟结果和实验结果 (a)掩模图形;(b)本文 CA 模型的模拟结果;(c)ACES 的模拟结果;(d)实验结果

Fig.5 Simulation and experimental results using a spoke pattern in KOH solution (a) Mask shape;(b) Simulation result by the CA model presented in this paper;(c) Simulation result by ACES;(d) Experimental result

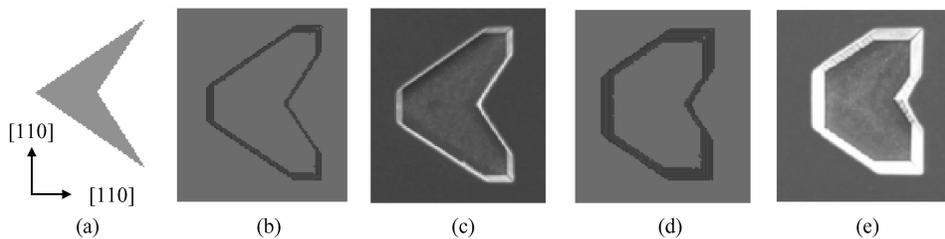


图 6 硅在 40wt% KOH 腐蚀液中腐蚀过程的模拟结果和实验结果 (a)掩模图形;(b)腐蚀时间为 30min 时的模拟结果;(c)腐蚀时间为 30min 时的实验结果;(d)腐蚀时间为 50min 时的模拟结果;(e)腐蚀时间为 50min 时的实验结果

Fig.6 Simulation and experimental results in 40wt% KOH solution (a) Mask shape;(b) Simulation result for 30min etching;(c) Experimental result for 30min etching;(d) Simulation result for 50min etching;(e) Experimental result for 50min etching

两个矩形掩模模拟硅在 10wt% KOH 腐蚀液中的腐蚀过程,图 7(a)与(b)分别为掩模与 $\langle 110 \rangle$ 方向呈 0° 和 12° 角的模拟结果,由模拟结果可以明显地看到,凸角腐蚀出现高密勒指数晶面的情况,同时模拟结果与图 7(c)与(d)所示的实验结果^[11]一致.以上模拟结果体现了 3D 连续 CA 模型三维处理能力强的优点,可以有效地处理掩模图形生成复杂三维结构的过程.同时也表明,本文提出的 CA 模型可以有效地引入(211),(311),(331),(411)等高密勒指数晶面,提高模拟精度,得到的模拟结果与实验结果较为符合,本文建立的模型对腐蚀工艺研究和一些 MEMS 器件制备有一定的实用意义.

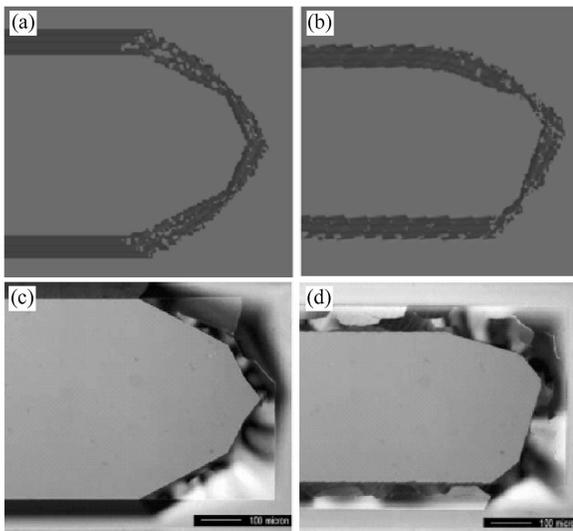


图 7 采用与 $\langle 110 \rangle$ 方向成不同角度的两个矩形掩模时,硅在 10wt% KOH 腐蚀液中腐蚀过程的模拟结果与实验结果 (a)和(b)为模拟结果;(c)和(d)为实验结果^[11]

Fig.7 Simulation and experimental results for rectangular mask with different misalignments with respect to $\langle 110 \rangle$ direction in 10wt% KOH (a),(b) Simulation results;(c),(d) Corresponding experimental results^[11]

4 结束语

本文直接采用硅的晶格结构作为 CA 的晶格结构,建立了一种新的高精度 3D 连续 CA 模型.根据硅各向异性腐蚀过程中与腐蚀液接触的表面元胞的相邻元胞和次相邻元胞数目及这些相邻元胞和次相邻元胞相对于腐蚀界面的位置,确定该表面元胞所在的晶面.模型可以有效地引入(211),(311),(331),(411)等高密勒指数晶面.模拟结果与实验结果一致,证明了模型的模拟效果,对硅各向异性腐蚀模拟研究和提高 MEMS 设计水平具有一定的实用

意义.下一步将主要围绕进一步完备腐蚀工艺条件和腐蚀速率数据库开展工作.

致谢 感谢日本名古屋大学微纳系统工程系的 Gosalvez M A 博士给作者寄来了他的手稿,并与作者进行了有益的讨论,提出了有益的建议.同时也对东南大学自动化研究所的沈海平和达飞鹏教授在模拟结果显示过程中提供的帮助表示谢意.

参考文献

- [1] Huang Q A. Silicon micromachining technology. Beijing: Science Press, 1996 [黄庆安. 硅微机械加工技术. 北京: 科学出版社, 1996]
- [2] Than O, Buttgenbach S. Simulation of anisotropic chemical etching of crystalline silicon using a cellular automata model. Sensors and Actuators. 1994. A45: 85
- [3] Hubbard T J. MEMS design: the geometry of silicon micromachining. Ph D Dissertation, California: California Institution of Technology, 1994
- [4] Marchetti J, He Y, Than O, et al. Efficient process development for bulk silicon etching using cellular automata simulation techniques. SPIE's Symposium on Micromachining and Microfabrication, Micromachined Devices and Components, Santa Clara, USA, 1998: 1
- [5] Zhu Z, Liu C. Micromachining process simulation using a continuous cellular automata method. Journal of Microelectromechanical Systems, 2000, 9(2): 252
- [6] Jiang Y F, Huang Q A. Atomic simulation of silicon anisotropic etching. Chinese Journal of Semiconductors, 2005, 26(3): 618 (in Chinese) [姜岩峰, 黄庆安. 硅各向异性腐蚀的原子级模拟. 半导体学报, 2005, 26(3): 618]
- [7] Zhou Z F, Huang Q A, Li W H, et al. Study on simulation of silicon anisotropic etching using cellular automata method. Research and Progress of Solid State Electronics, 2006, 26(1): 128 (in Chinese) [周再发, 黄庆安, 李伟华, 等. 元胞自动机方法模拟硅的各向异性腐蚀研究. 固体电子学研究与进展, 2006, 26(1): 128]
- [8] Zhou Z F, Huang Q A, Li W H, et al. A three-dimensional continuous cellular automata model for simulation of anisotropic etching process of silicon. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2006, 27(6): 1601 (in Chinese) [周再发, 黄庆安, 李伟华, 等. 硅各向异性腐蚀模拟的 3-D 连续 CA 模型研究. 仪器仪表学报, 2006, 27(6): 1601]
- [9] Zhou Z F, Huang Q A, Li W H, et al. A 3-D simulator for silicon anisotropic wet chemical etching process based on cellular automata. Journal of Physics: Conference Series, 2006, 34: 674
- [10] Chen J Z, Li L, Shi Y, et al. Cellular-automata-based modeling of silicon anisotropic etching. Chinese Journal of Semiconductors, 2005, 26(8): 1671 (in Chinese) [陈杰智, 李泠, 施毅, 等. 基于元胞自动机理论的硅各向异性腐蚀模型. 半导体学报, 2005, 26(8): 1671]
- [11] Gosalvez M A, Nieminen R M, Kilpinen P, et al. Anisotropic wet chemical etching of crystalline silicon: Atomistic Monte-Carlo simulations and experiments. Appl Surf Sci, 2001, 178(1): 7

A Novel Cellular Automata Model for Silicon Bulk Etching Simulation Handling High Index Planes*

Zhou Zaifa[†], Huang Qing'an, Li Weihua, and Deng Wei

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

Abstract: A novel three-dimensional (3D) continuous cellular automata (CA) model is presented for the simulation of silicon bulk etching processes. More high-index planes such as (211), (311), (331), (411) planes have been successfully incorporated into the novel 3D continuous CA model to increase the simulation accuracy. Simulation results agree with experimental results, indicating that the simulation accuracy has been increased. This is useful for the research of silicon bulk etching process and micro-electro-mechanical system (MEMS) design.

Key words: cellular automata; etching simulation; micromachining; MEMS; anisotropic etching

EEACC: 2560; 2550E; 2575

Article ID: 0253-4177(2007)05-0731-06

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

[†] Corresponding author. Email: zhouzaifa@yahoo.com.cn

Received 6 July 2006, revised manuscript received 12 January 2007