

基于 MATLAB 的硅各向异性腐蚀过程模拟^{*}

张佩君 黄庆安

(东南大学微电子中心, 南京 210096)

摘要: 根据硅各向异性腐蚀特点, 在硅各向异性腐蚀速率图基础上, 提出算法, 利用数学软件 MATLAB 模拟了几种简单掩膜图形的腐蚀过程。程序从二维掩膜描述出发, 找到相关晶面, 产生动态的三维几何结构的输出。并推导出凸角补偿时补偿条的相关尺寸。其结果对 MEMS 加工有一定参考价值。

关键词: 硅; 各向异性腐蚀; MATLAB; 模拟

EEACC: 2575; 8460

中图分类号: TN 402; TN 405

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2002)04-0440-05

1 引言

随着 MEMS (micro-electro-mechanical-system) 的发展, 需要解决 MEMS 产业化的关键技术。计算机辅助设计(CAD)就是其中的关键技术之一。工艺模拟是 MEMS CAD 中一个重要的组成部分, 使用 SUPREM 可进行集成电路(IC) 工艺模拟。而 MEMS 工艺是 IC 工艺和专用的微机械加工技术的结合, 微机械加工技术强调纵深方向的加工, 所以 MEMS 的结构具有三维特性。MEMS 工艺模拟要求从设计者给出的几何参数和工艺流程文件模拟出真实的三维结构。

对 MEMS 常用的硅体加工而言, 由于不同晶面原子排列的密度不同, 在各向异性腐蚀液中就呈现出不同的腐蚀速率。比如在 KOH、EPW 腐蚀下, 硅晶体中紧密的{111}面的腐蚀速率比其它松散排列的面要慢许多倍。基于这种腐蚀特性, 可在硅衬底上加工出各种各样的微结构, 如制造平坦的面、垂直的壁、椎形坑或倾斜的悬臂。所以, 硅的各向异性腐蚀成为 MEMS 工艺模拟主要的研究对象^[1]。为了建立三维固体几何模型, 首先要对 Si 的各向异性腐蚀有深刻的理解和建模, 尤其是对单晶硅在经过化学

腐蚀之后产生的几何形状进行模拟。

目前开发的 MEMS 工艺模拟软件主要是体机
械加工, 像 OYSTER^[2] 和 ASE^[3] 等。

本文将根据硅的各向异性腐蚀特点, 以几种常
用的掩膜图形为例, 用数学软件 MATLAB 模拟出
动态的腐蚀过程, 其方法可为将来模拟复杂的掩
膜图形作参考。同时, MATLAB 简单易学, 因此容
易在体加工模拟中得到应用。

2 常用掩膜图形

对于晶体腐蚀形状的预测, 总是基于 Batterman 提出的两种情形, 即在凹角表面, 腐蚀相对较慢的面成为限制腐蚀的晶面; 而在凸角表面, 情况恰恰相反, 处于支配地位的是腐蚀相对较快的面。

为了模拟凹角和凸角处的腐蚀过程, 通常采用
方形或矩形的掩膜。同时, 方形或矩形掩膜也是
MEMS 的常用结构。对于凹角, 方形或矩形的内部
被腐蚀; 对于凸角, 则外部被腐蚀。它们分别被腐蚀
速率最慢和最快的面支配。本文采用 MATLAB 编
程, 使整个腐蚀过程中晶体形状的改变可视化。腐蚀
速率均调用 MATLAB 模拟出的硅各向异性全腐蚀
速率图^[4]。

* 教育部科学与技术研究重点项目(No. 00065)

张佩君 女, 1978 年出生, 硕士研究生, 主要从事 MEMS 模型与模拟研究。

黄庆安 男, 1963 年出生, 教授, 博士生导师, 主要从事微电子技术和 MEMS 的教学研究。

2001-05-18 收到, 2001-10-23 定稿

© 2002 中国电子学会

2.1 几何结构形状确定

三维立体图形是由许多面构成的,而每个面又由多条边组成.表示此图形时采用边界描述,即一个面有几条边构成,就计算出该面各顶点的位置,再连接成边.在腐蚀过程中,点的出现源于面的相交.两个面相交于一条线,三个面相交于一点,点的位置由三个相交的面的位置决定.当这些面处于运动状态,点的位置也随之改变.

表示平面有多种方法,其中点法式方程较为简便.也就是说,有了平面上一点和这个平面的法向量,就可确定平面的方程.那么解三个平面方程组成的方程组,就能获得它们的交点,不过这只是某一时刻交点的位置.腐蚀过程中,各晶面按各自的腐蚀速率运动,所以平面方程是时间的函数,可表示为:

$$l(x - p_x) + m(y - p_y) + n(z - p_z) = 0 \quad (1)$$

其中 (l, m, n) 是法向量即晶面的晶向; (p_x, p_y, p_z) 是该平面任意一点 p 的坐标,它随时间变化,可表示为:

$$\frac{x_0 - p_x}{l} = \frac{y_0 - p_y}{m} = \frac{z_0 - p_z}{n} = u \quad (2)$$

(x_0, y_0, z_0) 是 $t=0$ 时 p 的坐标,它与 (p_x, p_y, p_z) 在一条直线上.由下式

$$(lu)^2 + (mu)^2 + (nu)^2 = (vt)^2 \quad (3)$$

解出 u ,获得 (p_x, p_y, p_z) 的表达式,代入方程(1),得到平面的方程,解三个不同晶面的平面方程,就可得到它们的交点.从 $t=0$ 开始,每过 Δt 计算一次交点的位置,再把同一个面上的相关点相连,呈现一次腐蚀图形.程序再决定终止的条件(某些点相重合),就能展现整个腐蚀的全过程.

下面以几种常用掩膜图形为例来分析腐蚀过程及编程方法,采用(100)单晶衬底硅和 KOH 腐蚀.

2.2 精确对准时方形、矩形窗口

腐蚀前,先在硅表面覆盖一层掩膜(如 SiO_2 或 Si_3N_4),然后刻出窗口,使硅暴露在外面.方形或矩形窗口的腐蚀规则类似于凹角,最终边界由腐蚀速率最慢的面决定.由于{111}面有极慢的腐蚀速率,经过一段时间腐蚀后,腐蚀出的孔腔边界就是{111}面.在晶格中{111}面与(100)面的交线沿{110}方向,且交角为 54.74° ,所以所开的窗口边缘应平行于{110}方向.

窗口中的 Si 暴露在 KOH 溶液中,(100)面垂直

于表面向下腐蚀,由于受到{111}面的限制,对于方形窗口和矩形窗口,孔腔边界仅由四个{111}面决定.

对于上述所有情形,程序为同一个,只是输入的参数有所改变,输入的掩膜顶点坐标决定了窗口的尺寸和形状.各面的腐蚀速率影响腐蚀终止的时间,及模拟{111}面的缓慢腐蚀, $v_{111}=0$ 则不腐蚀.矩形窗口的模拟结果见图 1.

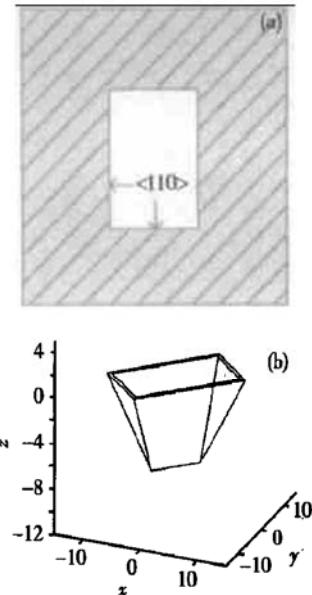


图 1 矩形窗口模拟结果({110}方向) (a) 掩膜俯视图;(b)由{111}构成的最终图形

Fig. 1 Simulation results of rectangular window ($\langle 110 \rangle$ alignment) (a) A top view of the mask; (b) The final diagram formed by {111}

2.3 对准角为 45° 时的方形窗口

各向异性腐蚀剂不腐蚀凹角的特性决定了在(100)衬底上的腐蚀规则:掩膜上刻出的任何一种封闭的图形,在经过长时间的腐蚀以后,都会形成{110}取向的且四个侧壁为{111}面的孔腔,且表面沿{110}取向的图形是包围该封闭窗口的最小矩形^[1].本文模拟了对准角为 45° 时方形窗口的腐蚀情形,虽然最终图形仍是符合腐蚀规则的孔腔,但中间过程稍微复杂.首先,沿四条掩膜边方向会出现垂直于表面的四个{100}面,在四个掩膜顶点处会出现四个{111}面,因为四个顶点在{110}取向的最小的正方形边上.随后的过程将是:{100}面逐渐变小至消失,{111}面逐渐增大而处于支配位置.垂直于表面的四个{100}面消失后,平行于表面的(100)面也逐

渐变小, 直到{111}面相交于最底部的一点, 使腐蚀过程停止。模拟结果见图 2。

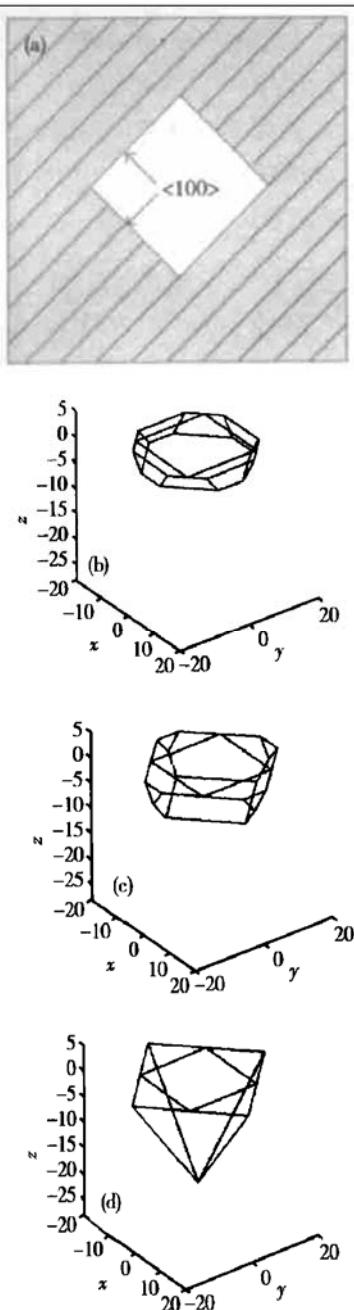


图 2 方形窗口沿 $\langle 100 \rangle$ 方向的模拟结果 (a) 掩膜俯视图; (b) 过程 1; (c) 过程 2; (d) 由{111}构成的最终图形

Fig. 2 Simulation results of square window ($\langle 100 \rangle$ alignment) (a) A top view of the mask; (b) Step 1; (c) Step 2; (d) Final diagram formed by {111}

2.4 凸角情况

台面结构的凸角被腐蚀时, 顶部不再是垂直的

四边形, 经较短时间的腐蚀呈十二边形; 长时间的腐蚀呈八边形。

为了能提出精确的补偿结构, 必须辨别出凸角处倾斜面的方向^[1]。凸角处的腐蚀由侧向腐蚀最快的面决定, 但是对于不同的腐蚀剂, 倾斜面不同, 有{212}、{331}、{211}等。本文模拟了台面的一个凸角处出现侧向腐蚀最快的{331}面的腐蚀情形。

在制作加速度传感器、触觉传感器时, 希望能腐蚀出整齐的台面结构, 所以在制作这些器件时, 就必须采用凸角补偿的方法。补偿条的加法可有多种方式, 如方形、矩形、三角形等^[1]。Mayer 等人在凸角上附加了{100}条形掩膜, 以实现凸角的补偿^[6]。在图 3 中, ①④⑦⑩表示 $\langle 110 \rangle$, ②⑨表示 $\langle 100 \rangle$, ③⑤⑥⑧表示 $\langle 310 \rangle$, 它们分别是面(111)、(100)、(311)与表面(001)的交线。各顶点的运动可表示为:

$$p_5 = v_{5,6}t_1 + v_{5,6}t_2 + v_{3,8}t_3 + v_{3,8}t_4 \quad (4)$$

$$p_6 = v_{6,7}t_1 + v_{6,8}t_2 + v_{3,8}t_3 + v_{3,8}t_4 \quad (5)$$

$$p_7 = v_{7,8}t_1 + v_{6,8}t_2 + v_{3,8}t_3 + v_{3,8}t_4 \quad (6)$$

$$p_8 = v_{8,9}t_1 + v_{8,9}t_2 + v_{8,9}t_3 + v_{8,10}t_4 \quad (7)$$

$$T = t_1 + t_2 + t_3 + t_4 \quad (8)$$

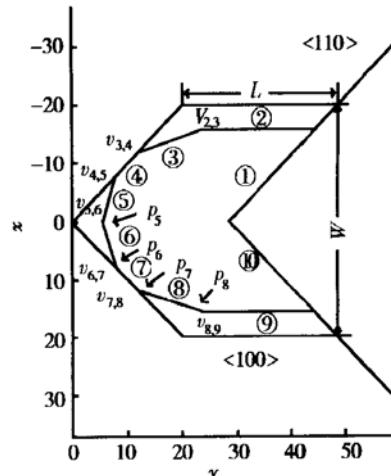


图 3 带{100}条的凸角补偿结构

Fig. 3 Convex corner compensation structure with $\langle 100 \rangle$ bar

p_k 是 k 点的位置, $v_{i,j}$ 是交线 i,j 交点的运动速率。 t_1 为从腐蚀开始 $t=0$ 到⑦消失的时间, t_2 为从 $t=t_1$ 到⑥消失的时间, t_3 为从 $t=t_1+t_2$ 到⑨消失的时间, t_4 为从 $t=t_1+t_2+t_3$ 到⑧消失的时间, T 为腐蚀的总时间。

初始时, $p_5=p_6, p_7=p_8$ 。在腐蚀槽宽度很小的

情况下,为了获得良好的凸角结构,设计时必须满足: p_8 在 $\langle 110 \rangle$ 方向的分量最小,由此得 $t_3 = 0$.这时 $\langle 310 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 同时消失,以侧向 $\langle 310 \rangle$ 来终止腐蚀.以补偿条的尖端为原点, $\langle 100 \rangle$ 为坐标轴,通过建立两个 $\langle 310 \rangle$ 的运动方程:

$$y = x/3 + \sqrt{10}v_{\langle 310 \rangle}t/3 \quad (9)$$

$$y = 3x - W + \sqrt{10}v_{\langle 310 \rangle}t \quad (10)$$

得出其交点A 方程:

$$x_A = 3W/8 - \sqrt{10}v_{\langle 310 \rangle}t/4 \quad (11)$$

$$y_A = W/8 + \sqrt{10}v_{\langle 310 \rangle}t/4 \quad (12)$$

令 $x = 0$ 得:

$$t_A = 3W/(2\sqrt{10}v_{\langle 310 \rangle}) \quad (13)$$

再建立 $\langle 100 \rangle$ 的运动方程:

$$x = W/2 - v_{\langle 100 \rangle}t \quad (14)$$

代入相邻的 $\langle 310 \rangle$ 方程得:

$$y = W/2 - 3v_{\langle 100 \rangle}t + \sqrt{10}v_{\langle 310 \rangle}t \quad (15)$$

此即交点B 的轨迹,令 $y = x + L$,求其与 y 轴相交的时间:

$$t_B = L/(\sqrt{10}v_{\langle 310 \rangle} - 2v_{\langle 100 \rangle}) \quad (16)$$

由于 $t_A = t_B$,故

$$L/W = 3/2 - 3/(\sqrt{10}(v_{\langle 310 \rangle}/v_{\langle 100 \rangle})) \quad (17)$$

这就是条形掩膜的长和宽应满足的条件.

腐蚀总时间 T 可表示为:

$$T = S/v_{\langle 310 \rangle} \quad (18)$$

其中 S 是侧向 $\langle 310 \rangle$ 从 $t=0$ 至 $t=T$ 移动的距离,按几何关系,

$$S = \sqrt{(W/2)^2 + (L - W/2)^2} \sin(\operatorname{tg}^{-1}(1/3) + \operatorname{tg}^{-1}(W/(2L - W))) \quad (19)$$

这样,在给出腐蚀深度 H 条件下,因 $T = S/v_{\langle 310 \rangle} = H/v_{\langle 100 \rangle}$,可求出 S .再由(17)、(19)式就可求出 L 和 W 的最佳尺寸,使腐蚀槽宽度最小. 模拟结果见图 4.

文献[7]中采用的是同样结构的补偿条,经 KOH 溶液各向异性腐蚀后获得凸角结构,腐蚀以侧向 $\langle 410 \rangle$ 方向终止. 按本文的推导过程得:

$$L/W = 2(1 - 3/(\sqrt{17}v_{\langle 410 \rangle}/v_{\langle 100 \rangle})) \quad (20)$$

$$S = \sqrt{(W/2)^2 + (L - W/2)^2} \sin(\operatorname{tg}^{-1}(1/4) + \operatorname{tg}^{-1}(W/(2L - W))) \quad (21)$$

当 $v_{\langle 410 \rangle}/v_{\langle 100 \rangle} = 1.4$, 腐蚀深度 $H = 310\mu\text{m}$ 时,由(20)、(21)式可求得 $W = 727\mu\text{m}$, $L = 698\mu\text{m}$, 若

$v_{\langle 100 \rangle} = 50\mu\text{m}/\text{h}$, 腐蚀时间 T 应该为 $H/v_{\langle 100 \rangle} = 6.20\text{h}$, 计算机模拟出当凸角处正好形成直角时, $T = 6.182\text{h}$, 相当吻合. 模拟值与预期值的比较见图 5, 取定腐蚀深度为 $H = 310\mu\text{m}$.

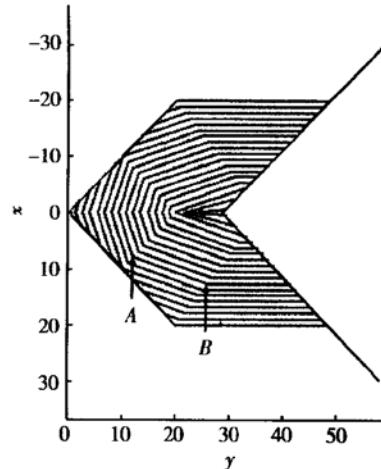


图 4 凸角补偿模拟

Fig. 4 Simulation results of computed compensation structure

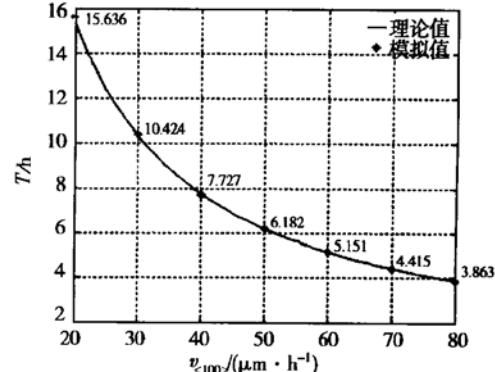


图 5 模拟结果与理论值比较

Fig. 5 Comparison of simulating results and theoretical results

3 讨论与结论

目前,硅各向异性腐蚀实验数据积累比较充分,根据这些实验数据,用 MATLAB 计算出每一个晶面的腐蚀速率^[4]. 本文在 MATLAB 计算所得的硅各向异性全腐蚀速率图基础上,提出了相应的算法,模拟了常用几何掩膜腐蚀出的几何结构. 在实际应用中,根据腐蚀液成分、腐蚀温度、给定的时间,可预测简单掩膜图形下腐蚀的形状,对体加工工艺有一

定的参考价值。由于 MATLAB 简单易学, 运算功能强大, 并且有较好的输出界面, 因此基于 MATLAB 的硅各向异性腐蚀模拟容易在实际中得到应用。

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] Koppelman G M. OYSTER, a three-dimensional structural simulation for microelectro-mechanical design. Sensors and Actuators, 1989, A20: 179
- [3] Buser A B, Rooij N F. ASEP: a CAD program for silicon anisotropic etching. Sensors and Actuators, 1991, 28: 71
- [4] Zhang P J, Huang Q A. A complete anisotropic etching rate diagram for Si based on MATLAB. Micro-and Nanometer Science and Technology, 2000, 5(1): 131[张佩君, 黄庆安. 基于 MATLAB 的硅各向异性全腐蚀速率图. 微米/纳米科学与技术, 2000, 5(1): 131]
- [5] Zhang Y H. Master MATLAB, Beijing: Publishing House of Tsinghua University, 1999[张宜华. 精通 MATLAB. 北京: 清华大学出版社, 1999]
- [6] Long M K, Burdick J W, Antonsson E K. Design of compensation structures for anisotropic etching. In: Processing 2nd of the International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, 1999: 124
- [7] Zhang Q X, Liu L T, Li Z J. New method of convex corner compensation in anisotropic etching of (100)Si in KOH. Chinese Journal of Semiconductors, 1996, 17(12): 923[张庆鑫, 刘理天, 李志坚. (100)Si 在 KOH 中各向异性腐蚀的凸角补偿新方法. 半导体学报, 1996, 17(12): 923]

Simulation of Anisotropic Etching of Silicon Based on MATLAB*

Zhang Peijun and Huang Qing'an

(Microelectronic Center, Southeast University, Nanjing 210096, China)

Abstract: According to the property of anisotropic etching of the single-crystal silicon, some computer programs based on MATLAB are described which can be used to simulate the etching processes of simple mask structures. Starting from the describing of a 2-D mask layout, the programs find the relevant etching planes and create a dynamic output of the etched 3-D structure. The simulated results on the convex corner compensation agree well with available experiments.

Key words: silicon; anisotropic etching; MATLAB; simulation

EEACC: 2575; 8460

Article ID: 0253-4177(2002)04-0440-05

* Project supported by Science and Technology Major Project of Ministry of Education of China (No. 00065)

Zhang Peijun female, was born in 1978, postgraduate for MSc. She is engaged in the research on MEMS modeling and simulation.

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