

最深者，由刻蚀量决定其中。(1)表见(1)个十不不达零时率表时刻蚀深，中 ERI 五  
次以上，由刻蚀量不表零时，刻蚀量表零时率表时刻蚀深一个，然则，由刻蚀量不  
一个一立数是，由刻蚀量表零时率表时刻蚀深一个，然则，由刻蚀量不

# 一种用于 VLSI 工艺模拟的反应离子刻蚀速率模型\*

陈林海  
复旦大学微电子学研究所  
冯向明  
阮刚  
(复旦大学微电子学研究所, 上海)  
1988年11月21日收到

冯向明 阮刚  
(复旦大学微电子学研究所, 上海)  
1988年11月21日收到

王立群  
复旦大学微电子学研究所  
朱良  
吴江平  
李伟  
胡晓东

本文提出了一种适用于 VLSI 工艺模拟的反应离子刻蚀 (RIE) 速率模型。模型的建立采用统计数学方法, 结合较少次数的实验。该模型精度高, 实用性强。对  $CF_4/O_2$  刻蚀二氧化硅和  $SF_6/O_2$  刻蚀掺磷多晶硅的实验表明, 模型精度达到 5%。该模型植入刻蚀模拟器后能使亚微米刻蚀模拟的精度, 提高到一个新的水平。

主题词 反应离子刻蚀, 刻蚀工艺模拟, 统计数学

## 一、引言

七十年代以来, 各种干法刻蚀工艺由于其特有的优越性而在 VLSI 制造中得到广泛的应用。但是, 由于干法刻蚀同时涉及各种复杂的物理、化学过程, 所以迄今为止还没有能描述基于刻蚀中粒子碰撞、运动以及各种成分间相互反应等基本参量, 并从中获得刻蚀速率、刻蚀剖面形状等刻蚀参数的解析模型, 从而限制了干法刻蚀工艺模拟的发展; 就连著名的 VLSI 刻蚀工艺模拟程序 SAMPLE 1.6 文本中, 也还缺乏描写干法刻蚀的模型。

本文提出了一种适用于 VLSI 工艺模拟的反应离子刻蚀 (RIE) 速率模型。该模型的建立避开了人们尚未认识的基本刻蚀机理, 从实用出发, 使得在较少次数的实验内, 通过统计数学方法设计实验方法和处理实验结果, 迅速而有效地得出具有一定精度的刻蚀速率公式。该公式特别适用于工艺模拟, 因而大大减少在工艺优化过程中的时间和费用。

对  $CF_4/O_2$  刻蚀二氧化硅和  $SF_6/O_2$  刻蚀掺磷多晶硅进行了实验, 实验结果表明, 我们提出的模型公式具有较高的可信度, 在实用范围内, 模拟值与实测值的误差约为 5%。

## 二、模型的建立

以下分参数筛选、实验设计、结果拟合和统计检验等四个步骤描述模型的建立。

### 1. 参数筛选

\* 国家自然科学基金资助课题。

在 RIE 中, 影响刻蚀速率的参数不下十个(参见表 1), 其中有些是可控的, 有些是不可控的。诚然, 一个完整的模拟应考虑所有参数的影响, 但这是不必要的, 也是不现实的。在满足工艺模拟所需精度的前提下, 筛除影响不大的参数, 减少参数个数是建立一个实用模型时首先要考虑的问题。

表 1 影响 RIE 速率的参数

1	气体流量	6	电极材料
2	气体成分含量	7	硅片在电极上的位置
3	气体压力	8	电极间距
4	功率	9	刻蚀时间
5	电极温度	10	前面工序的影响

如果某一实验结果与  $k$  个参数有关, 第  $i$  ( $i = 1, \dots, k$ ) 个参数在可变范围内选做  $l_i$  次实验, 则总共需要的实验次数为

$$l_1 \cdot l_2 \cdot \dots \cdot l_k = \prod_{i=1}^k l_i \quad (1)$$

如  $l_1 = l_2 = \dots = l_k = l$ , 则要进行  $l^k$  次。显然, 当  $l$  和  $k$  较大时, 实验次数将多到不可忍受。

如果忽略各参数的高次项及交叉高次项对实验结果的影响, 根据有关数学原理, 对于每个参数可以只选取二个值即  $l = 2^{[1]}$ , 一般都选参数值范围的高端和低端, 分别用“+”和“-”表示。这种实验方法即所谓的二级设计。

我们的实验在英国等离子体技术公司制造的 RIE 80 系统上进行, 该系统的可控参数有: 气体流量、气体中各成分的含量、气压、功率、刻蚀时间和硅片在电极上的位置等 6 个。对于完全二级设计, 实验的总数与参数个数有关。当具有 6 个可变参数时, 实验次数将为  $2^6$  即 64 次。如果进一步忽略各参数间一次项的相互交叉影响, 可以采用所谓的 Resolution IV 设计<sup>[2]</sup>, 即仅取全部实验的  $\frac{1}{2^4}$ 。由于这种实验设计是针对参数个数是 2 的整数次幂而言的, 而大于 6 的最小二次幂是 8, 因此实际进行的实验次数  $N$  应为

$$N = \frac{1}{2^4} \times 2^8 = 16.$$

这 16 次实验中各参数值的确定方法是这样的。因为包含四个参数的完全二级设计共需进行  $2^4$  即 16 次实验, 故首先列出我们实验中前四个参数的值, 按完全二级设计方法排列, 见表 2 的左四列。然后对前 8 次实验依次取  $5 = -1 \cdot 2, 6 = -1 \cdot 3, 7 = -1 \cdot 4, 8 = 1 \cdot 2 \cdot 3$ , 后 8 次实验取  $5 = 1 \cdot 2, 6 = 1 \cdot 3, 7 = 1 \cdot 4, 8 = 1 \cdot 2 \cdot 3$ , 这里  $j$  表示第  $j$  个参数的实验值。这样即可得到全部 16 次实验点的选取方法。当然, 在我们的实验中只需按表 2 的左六列取值, 最后二列是冗余的。

接着计算每个参数对实验结果的贡献的相对值, 其计算公式为:

$$a_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_{ki} y_i \quad (k = 1, \dots, 8) \quad (2)$$

表 2 参数筛选实验点的选取

实验次序	参数编号							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	+	-	-	-	-	-	-	-
2	+	-	-	-	+	+	+	+
3	-	+	-	-	+	-	-	-
4	+	+	-	-	-	+	+	+
5	-	-	+	+	-	+	+	-
6	+	-	+	+	+	-	+	+
7	-	+	+	+	+	+	-	-
8	+	+	+	-	-	-	+	-
9	-	-	-	-	+	+	-	-
10	+	-	-	-	+	-	+	+
11	-	+	-	-	-	+	-	+
12	+	+	-	-	+	-	+	+
13	-	-	+	+	+	-	-	-
14	+	-	-	+	+	-	+	+
15	-	+	+	+	+	-	-	-
16	+	+	+	+	+	+	+	+

$a_k$  为第  $k$  个参数对实验结果贡献的相对值,  $D_{ki}$  是表 2 中第  $k$  列第  $i$  行所对应的值, “-”号取 -1, “+”号取 +1;  $y_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) 是第  $i$  次实验中测出的结果, 在我们的实验中即为刻蚀速率;  $N$  为总的实验次数。根据  $|a_k|$  的大小, 可从中筛选出最有影响力的 (即  $|a_k|$  最大的) 3 个参数, 以进行下一步工作。

## 2. 实验设计

任何数学表达式都可以用一个任意次的多项式来逼近。因此, 我们可以把刻蚀速率  $y$  与筛选出的 3 个参数  $x_1$ 、 $x_2$  和  $x_3$  的关系写成

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^3 b_{ii}x_i + \sum_{i=1}^2 \sum_{j=i+1}^3 b_{ij}x_ix_j + \sum_{i=1}^3 b_{ii}x_i^i + \dots \quad (3)$$

当近似到二次项时, 上式为

$$\begin{aligned} y = & b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 \\ & + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2 \end{aligned} \quad (4)$$

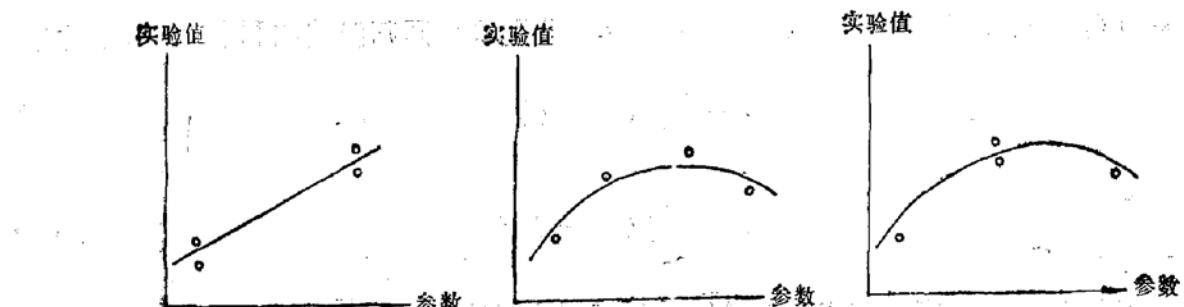


图 1 实验设计对模型建立的影响

这里共有 10 个待定因子，显然，为确定这些因子所需的实验次数至少为 10 次；实际上的实验次数一般不止 10 次，以便将来回归计算时具有一定的自由度。

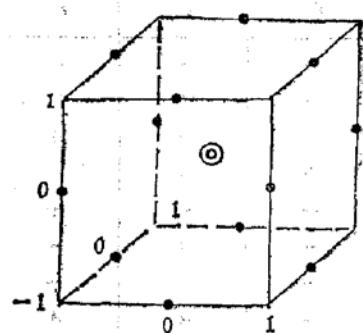


图 2 Box-Behnken 实验点的选取

考虑到二次项的存在，任一参数的实验值必须至少有三个。在不改变实验次数的条件下（如固定为 4 次，见图 1），如果只取高端和低端二个实验值，实验结果一般如图 1-(1) 所示，这时往往认为得到的直线模型很好地反映了实际情况，但是如果把实验点平均分布于实验范围内，很可能得到图 1-(2) 所示的结果，显然，平方关系比线性关系能更好地描写真实情况。所以每个参数的实验值只取高端和低端二个值会掩盖平方关系的性质。如果把平均插入的实验点改为在中间值重复进行，（见图 1-(3)），则不但同时可以反映出二次方的关系，而且可以给出实验系统稳定性及其它误差的信息，为后面的统计检验提供必要的数据。

如不考虑重复实验，3 个参数的完全三级实验共需  $3^3$  即 27 次。根据 Box-Behnker 设计方法<sup>[3]</sup>，只需选取这些实验中的一部分即可完全地反映整个区域的情况，即立方体中心一次及立方体各棱中点各进行一次实验，共 13 次；若在中心点重复 4 次实验，总共实验次数是 17 次，见图 2 的示意。

该实验设计的特点在于，以往的实验往往是在变化某一参数时固定其余参数，其结果是不仅实验次数繁多，而且实验范围并不全面和完整；在我们的实验中所有参数同时变化，实验次数反而减少，得出的结果精度也较高（这一点后面将会提到）。

### 3. 结果拟合

根据上述两步骤讨论的方法，我们选取变化三个参数作 17 次实验得出有关结果，并用最小平方回归方法拟合，得出(4)式中各项系数，从而求出 RIE 刻蚀速率。

### 4. 统计检验

统计检验是在求解经验方程后进行的一个重要步骤。它用于给定模型的可信度，分析模型预期结果与实际情况偏差的来源，指导进一步改进模型的方向。

首先要进行的工作是检验整个模型的可信度。根据统计理论，如果模型成立，则  $F$ -比即

$$F = \frac{s_{reg}/f_{reg}}{s_{res}/f_{res}} \quad (5)$$

应服从  $F(f_{reg}, f_{res})$  分布<sup>[4]</sup>，(5)式中的  $s_{reg}$ 、 $s_{res}$  分别表示回归误差和剩余误差的总和：

$$s_{reg} = \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (6)$$

$$s_{res} = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (7)$$

$y_i$  和  $\hat{y}_i$  分别是第  $i$  次实验的实际测量结果和模型的预期值， $\bar{y}$  是总共  $N$  次实验的平均实测值， $f_{reg}$  和  $f_{res}$  是相应的自由度。这种方法称 F-检验。

接着进行同样的 F-检验，以检验回归方程中各项的显著性。能够采用 F-检验是因为得出的回归方程中各系数是正态分布的随机变量，与  $s_{res}$  相互独立。

为表征模型 5 实际情况的符合程度，引入相对剩余误差  $\alpha$ ，定义为

$$\alpha = 1 - \frac{s_{res}/f_{res}}{s_{tot}/f_{tot}} \quad (8)$$

式中  $s_{tot}$  是总误差， $f_{tot}$  是总自由度：

$$s_{tot}^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (9)$$

$$f_{tot} = f_{res} + f_{reg}$$

在模型与实测值完全符合的情况下， $\alpha = 1$ ；愈接近于 1 意味着二者愈吻合。

为了作进一步的分析，把剩余误差分成失配误差及重复误差这二部分，并作相应的 F-检验，以考察剩余误差的来源。当得出的  $F$  值很大时则可认为剩余误差主要是由失配即模型本身与实际偏差造成的；反之则是由实验系统的不稳定及其它因素（如系统误差、测量误差等）造成的。

### 三、实验及结果分析

总共制备了三种样品： $\text{SiO}_2$  及两种不同掺磷浓度的多晶硅，具体制备条件见表 3。

首先对  $\text{CF}_4/\text{O}_2$  刻蚀二氧化硅进行筛选工作，被筛选的可控参数及其变化范围和表

表 3 实验样品的制备

批号	材料	制备
1	$\text{SiO}_2$	$\langle 100 \rangle \text{Si}$ , 热氧化, $1180^\circ\text{C}$ , 干氧 10 分钟, 湿氧 120 分钟(水温 $98^\circ\text{C}$ ), 干氧 15 分钟
2	掺磷多晶硅 (#1)	$\langle 100 \rangle \text{Si}$ , 低温淀积, $\text{SiH}_4$ 气氛, $800^\circ\text{C}$ , 60 分钟; 掺磷 $1100^\circ\text{C}$ , 4 分钟
3	掺磷多晶硅 (#2)	$\langle 100 \rangle \text{Si}$ , 低温淀积, $\text{SiH}_4$ 气氛, $800^\circ\text{C}$ , 60 分钟; 掺磷 $1100^\circ\text{C}$ , 12 分钟

表 4 各参数的变化范围及  $a_k$  值

参数	变化范围	$a_k$
功率	$25 \sim 100 \text{W}$	274
气体流量	$20 \sim 50 \text{sccm}$	27
$\text{O}_2$ 含量	$30\% \sim 60\%$	-218
气压	$4.3 \sim 5.0 \times 10^{-2} \text{torr}$	166
硅片位置	边缘~中心	17
刻蚀时间	5~10 分钟	73

征对刻蚀速率贡献相对大小的  $\alpha_k$  值见表 4。从中显而易见，对刻蚀速率影响最大的三个参数是功率、气体中  $O_2$  含量及气压。与  $O_2$  含量对应的  $\alpha_k$  值为负意味着，在所考察的范围内， $O_2$  含量的增加严重抑制了刻蚀的进行。

表 5 Box-Bohnken 实验条件

参 数	SiO <sub>2</sub>			多晶硅 (#1)			多晶硅 (#2)		
	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1
功率(W)	25	60	95	30	60	90	30	60	90
$O_2$ 含量 (%)	30	45	60	0	20	40	0	20	40
气压 ( $10^{-2}$ torr)	4.3	4.8	5.3	1.2	2.5	4.0	1.0	2.5	4.0

表 6 统计检验结果

f-比 样品	SiO <sub>2</sub>	多晶硅 (#1)	多晶硅 (#2)
$x_1$ (功率)	22	25	22
$x_2$ ( $O_2$ 含量)	6.9	143	96
$x_3$ (气压)	9.0	13	11
$x_1 x_2$	0.1	6.5	4.1
$x_1 x_3$	3.3	10	1.3
$x_2 x_3$	7.4	2.8	3.3
$x_1^2$	0.1	1.6	0.5
$x_2^2$	0.6	0.5	3.6
$x_3^2$	0.7	5.8	2.1
模型检验	6.0	23.0	16.0
失配检验	7.7	23.0	13.0
$\alpha$ 值	0.84	0.93	0.91

(置信度为 95% 和 99% 的 F-分布值依次为 3.48 和 6.06)

对三批样品分别按图 2 所示意的实验点和表 5 所列出的条件进行了实验。对实验结果进行拟合计算及统计分析后的结果见表 6。三批样品相应的经验公式可信度均在 95% 以上，对多晶硅样品甚至可达 99% 以上。三者的  $\alpha$  值均接近于 1，这表明，二次项公式可在相当程度上代表实际情况。对剩余误差组成进行分析后得到的  $f$  值很大，这说明实验系统的稳定性和重复性是良好的，实验结果的测量是可信的，而且表明，既然剩余误差基本上是由于模型与真实情况的偏离造成的，那么如果在近似多项式后面加上三次项乃至更高次项，可以进一步提高模型的精度。

计算了给出模型在实验点上的预测值，并与测量值进行了比较，在中心实验点误差不大于 2%，边缘实验点的平均误差约为 10%（见表 7）。由于实验点除中心点外都位于系统可调范围的边缘，而实际工作条件不会取这样极端的条件，因此可以认为，模型对实际工艺条件下刻蚀速率的预测精度在 95% 以上。另外，对多项式系数进行的 F-检验结果显示，各参数一次项的  $f$  值均较大，这也证实了前面筛选工作是正确的。

表 7 模型预测值与实测值的比较

	模拟值 ( $\mu\text{m}$ )		$\text{SiO}_2$	多晶硅#1	多晶硅#2
	实测值 ( $\mu\text{m}$ )	模拟值 ( $\mu\text{m}$ )			
中心实验点	1	0.22		1.60	1.57
	2	0.25		1.50	1.44
	3	0.25		1.56	1.60
	4	0.24		1.61	1.58
	5	0.26		1.47	1.44
	平均	0.244		1.548	1.526
平均相对误差			2%	0.1%	0.3%
边缘实验点	平均相对误差		11%	11%	10%

用本模型得出的多晶硅刻蚀速率预测值同文献[5]给出的刻蚀速率进行了比较(见图3),二者吻合情况良好。

#### 四、结 论

从以上讨论可看出,由于应用了各种统计数学方法,使得我们能够处理反应离子刻蚀系统中同时变化的各种参数,显著减少了为获得最后结果所需的实验次数,由此建立的 RIE 速率模型有较高的精确度及可靠性,这种处理方法为解决其它科技问题中的多参数系统问题提供了有用的经验。同时,该模型填补了刻蚀工艺模拟中反应离子刻蚀模型的空白,在将实验结果植入通用刻蚀工艺模拟系统后,必将扩充和增强模拟器的实用性和模拟精度,使二维刻蚀工艺模拟的水平达到一个新的高度。

最后,感谢我所邹斯洵同志在实验上的支持及关注。

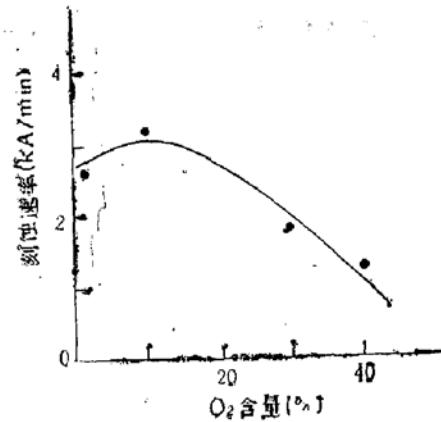


图3 模型预测值与文献[5]给出的结果比较  
(多晶硅, RIE-80 系统, 100W, 0.045torr,  
26°C)

● 文献[5] — 本模型

#### 参 考 文 献

- [1] G. E. P. Box, *et al*, *Statistics for Experimenters*, John Wiley & Sons, Inc., (1978).
- [2] J. P. C. Kleijnen, *Statistical Techniques in Simulation*, Part 2, Marcel Dekker, Inc., (1975).
- [3] E. I. du Pont de Nemours & Co., *Strategy of Experimentation Course*, F & FP, Applied Technology, Wilmington, DE, (1980).
- [4] 茹诗松等: 回归分析及其试验设计,华东师范大学出版社(1981).
- [5] 黄兵: 硅化物 RIE 的工艺研究,复旦大学毕业论文, 1988.

## A Reactive Ion Etching Rate Model for VLSI Process Simulation

FENG Xiangming, RUAN Gang

(Microelectronics Institute, Fudan University)

### Abstract

A reactive ion etching (RIE) model for VLSI process simulation is presented. Statistical mathematics method combined with fewer experiments is used in the establishment of the model. It is suitable for practical application with high precision. The precision of the model is 5% for  $\text{CF}_4/\text{O}_2$  etching silicon dioxide and  $\text{SF}_6/\text{O}_2$  etching phosphorus-doped poly-silicon. The implantation of the model into corresponding process simulator will raise the simulation of the characteristics of sub-micron dry etching process to a new level.

**KEY WORDS** Reactive ion etching, Etching process simulation, statistical mathematics