

# 一种可用于硅刻蚀工艺模拟的三维表面演化算法

张 鉴<sup>1</sup>, 戚昊琛<sup>1</sup>, 徐栋梁<sup>1</sup>, 胡智文<sup>2</sup>

(1. 合肥工业大学电子科学与应用物理学院, 安徽合肥 230009; 2. 温州大学瓯江学院, 浙江温州 325035)

**摘 要:** 针对硅微加工中的刻蚀工艺模拟应用, 提出了一种基于点元网格和单位法向量的三维表面演化算法. 在形成的连续曲面上, 以高斯积分法得到点元步进的单位法向量, 实现三维表面的构建与推进. 根据典型的刻蚀工艺及其物理模型, 该表面演化算法能够用于硅等离子体刻蚀等与表面演化方向相关的工艺模拟. 参照简单的各向同性刻蚀, 利用该三维算法实现了不同视角的三维硅刻蚀工艺的模拟结果, 通过与相关实验结果的对比, 验证了这种新型三维表面演化算法对相关工艺描述的实用性与准确性.

**关键词:** 硅刻蚀; 工艺模拟; 三维; 表面演化算法

**中图分类号:** TN30 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2011) 08-1869-04

## A 3-D Surface Evolvement Algorithm for Silicon Etching Simulations

ZHANG Jian<sup>1</sup>, QI Hao-chen<sup>1</sup>, XU Dong-liang<sup>1</sup>, HU Zhi-wen<sup>2</sup>

(1. School of Electronics Science and Applied Physics, Hefei University of Technology, Hefei, Anhui 230009, China;

2. Oujiang College, Wenzhou University, Wenzhou, Zhejiang 325035, China)

**Abstract:** We used unit vectors of the parametric surface cells as an important parameter to achieve the surface evolution algorithm. Instead of the normal vectors of facet cells, Gauss integration is adopted to calculate the normal vectors of the surface cells, so as to determine the evolvement directions of the cells. The simulation results of this algorithm were 3-D visible of variable perspective. If a physical model of given fabrication is provided, it can be applied to other processes with surface evolution direction dependence. Some isotropic etching simulations were performed as examples, and the results indicate the accurate simulated surface.

**Key words:** silicon etching; process simulation; three-dimensional; surface evolvement algorithm

## 1 引言

MEMS 技术在最近十余年得到了飞速的发展<sup>[1]</sup>, 其硅刻蚀加工工艺是 MEMS 器件及系统制造的主要工艺之一<sup>[2]</sup>. 不同于 IC 制造所注重的平面特性, 主要用于 MEMS 的硅加工工艺对三维结构的复杂性和精确性有较高的要求, 因而出现了许多特有的单项工艺. 通过一定的表面演化算法和工艺物理模型对微加工进行有效的表面加工形貌模拟, 是研究 MEMS 制造工艺的一种基本方法, 也是提高 MEMS 器件及系统设计效率的重要手段.

目前可用于硅刻蚀工艺模拟的相关研究已有一些报道<sup>[3~8]</sup>, 然而三维拓扑模拟的实现, 仍然存在不少困难和挑战, 以至于仍然没有通用三维工艺过程模拟软件或程序. 已报道的有些算法还必须对病态表面进行几何

修正, 例如小平面的交叉重叠处理等<sup>[3]</sup>.

本文提出了一种新的三维表面演化算法, 在二维线算法的基础上扩展到三维空间, 并以点元构建曲面的形式替代传统的小平面单元. 为便于验证算法的合理性, 我们采用各向同性等离子体刻蚀工艺对该新型三维表面演化算法进行应用, 并以 Matlab 对模拟结果进行三维可视化处理.

## 2 模型与算法

### 2.1 三维曲面网格划分

为实现微加工相关工艺的三维模拟, 我们对二维线算法进行三维空间下的扩展. 首先, 被加工的三维表面由一系列的点和相连接的线段来描述, 如同网状结构. 为方便计算, 我们仅仅考虑平行于  $x$  轴和  $y$  轴的线段, 而不包含倾斜方向的线段, 如图 1(a) 所示. 在被模拟的

表面,仅存在四边形结构,而不存在三角形和其他多边形单元,因而可以最大限度地避免小平面的重叠,线段的数量也得以减少.其次,演变表面单元  $e$  的单位法向量  $\vec{n}$  代表了表面元法向量所计算点位置的运动方向,如图 1(b)所示.该单位法向量由高斯积分<sup>[9]</sup>计算得到.

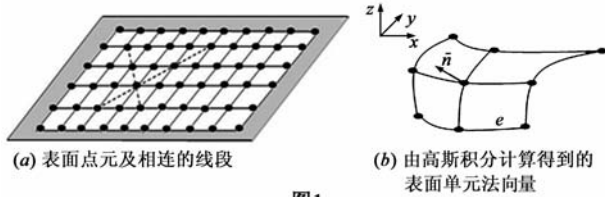


图1

### 2.2 表面演化算法

利用每个表面点元的单位法向量代表该点的运动方向,法向量由高斯积分法来得到.在计算点上沿积分曲面,建立局部直角坐标系.以  $(\xi, \eta, \zeta)$  代表局部直角坐标系的三轴分量,并以  $(\xi_i, \eta_i, \zeta_i)$  代表该坐标系下在一个面元内点  $i$  的坐标值,如图 2 所示.

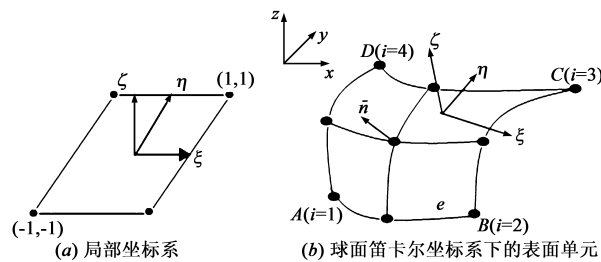


图2 局部表面单元与球面笛卡尔坐标系下表面单元的对应关系

其中点  $A, B, C, D$  用于辅助计算该面元高斯点的表面法向量.

位于高斯点  $n(\xi, \eta)$  的曲面元的表面单位外法向量由式(1)给出:

$$n(\xi, \eta) = \frac{d\xi \times d\eta}{|d\xi \times d\eta|} = \frac{1}{A} \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \frac{1}{A} \left[ \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \xi} \right) i + \left( \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) j + \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) k \right] \quad (1)$$

其中  $A$  的表达式由式(2)给出<sup>[9]</sup>.

$$A = \left[ \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

变参量表面的坐标  $x, y, z$  由球面坐标下的周围四个插值点加权求和得到,如式(3)所示.

$$x = \sum_{i=1}^4 N_{Si} x_i, \quad y = \sum_{i=1}^4 N_{Si} y_i, \quad z = \sum_{i=1}^4 N_{Si} z_i, \quad (i=1,2,3,4) \quad (3)$$

这里  $(x_i, y_i, z_i)$  代表球面坐标系下面元的组成点  $A, B, C, D (i=1,2,3,4)$ , 这些点的位置如图 3 所示. 符号  $N_{Si}$  表示表面元的形貌因子,并由式(4)给出<sup>[9]</sup>.

$$N_{Si} = \frac{1}{4} (1 + \xi_i \xi) (1 + \eta_i \eta) \quad (4)$$

### 2.3 各向同性刻蚀的物理模型

作为一种新的三维表面演化算法,本文将将以各向同性刻蚀为例子,来对该算法进行应用和验证.对于各向同性刻蚀而言,刻蚀表面上各点的刻蚀速率  $ER$  是常数<sup>[10]</sup>.

$$ER = const \quad (5)$$

以  $T(\xi_g, \eta_g)$  代表表面元上的高斯点  $(\xi_g, \eta_g)$  的刻蚀速率和步进方向,则  $T(\xi_g, \eta_g)$  可表示为式(6).

$$T(\xi_g, \eta_g) = ER \cdot \begin{Bmatrix} n_x(\xi_g, \eta_g) \\ n_y(\xi_g, \eta_g) \\ n_z(\xi_g, \eta_g) \end{Bmatrix} = ER \cdot n(\xi_g, \eta_g) \quad (6)$$

### 3 3-D 表面演化算法的应用

为了验证本文所提出应用于硅刻蚀工艺模拟的三维表面演化算法,我们以简单的各向同性刻蚀为例,将该算法应用于制造工艺模拟.为了减少程序运行占用的计算机资源、加快计算速度,在对各向异性刻蚀表面进行网格划分时,还可对不同表面区域独立划分网格.

如图 3 所示,刻蚀表面被划分成两个区域,区域 1 代表平坦的刻蚀底部,曲线部分代表区域 2,为了更精确地描述刻蚀拐角形貌,区域 2 的点元和网格将比区域 1 更密.另外,在区域 2 中,运行每一个刻蚀步长后将在相邻两点之间等间距插入一个新的点,并重新形成网格.这样可以避免由于曲面推进、面积增大而引起的曲面失真.

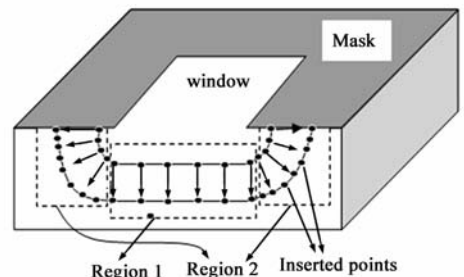


图3 刻蚀区域的分区剖面图

依据典型的实际工艺参数,该各向同性刻蚀验证模拟的刻蚀速率设定为  $0.8\mu\text{m}/\text{min}$ ,刻蚀窗口为  $100 \times 100\mu\text{m}$  的方形区域,考察区域为  $200\mu\text{m} \times 200\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ ,在模拟的初始状态,  $x$  和  $y$  轴方向的点元间距为  $1\mu\text{m}$ .得到的 3D 模拟结果如图 4 所示.

其中图 4(a)显示的是经过 25 分钟刻蚀,去掩膜后的顶视图,其刻蚀深度为  $20\mu\text{m}$ ;图 4(b)显示的是经过

50 分钟刻蚀,保留掩膜的顶视图,其刻蚀深度为  $40\mu\text{m}$ ;图 4(c)和 4(d)分别是保留掩膜的剖面图,相应的刻蚀深度分别为  $20\mu\text{m}$  和  $40\mu\text{m}$ .对应于  $20\mu\text{m}$  和  $40\mu\text{m}$  刻蚀的两种情况,在 CPU 为 P8600(2.4GHz),1.9G 内存的 PC 机上运算的时间分别约为 20.5 秒和 38.7 秒.

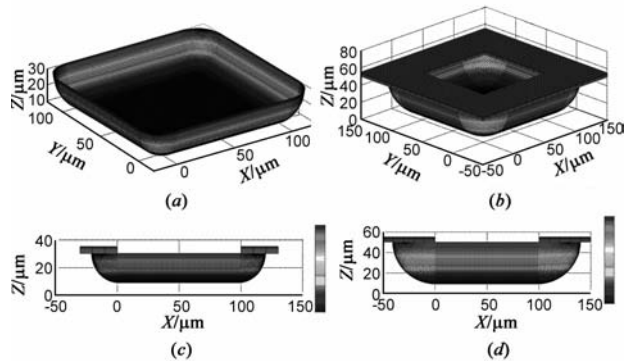


图4 基于三维表面演化算法的各向同性刻蚀模拟结果

为对该算法效率有形象的认识,将初始状态  $x$  轴和  $y$  轴的点元间距设为  $0.32\mu\text{m}$ ,即相对于  $1\mu\text{m}$  的点间距,  $100 \times 100\mu\text{m}$  区间内约分布 10 倍的点,则刻蚀  $20\mu\text{m}$  深度的运算时间约为 1 小时左右.结合对算法基本运算形式的分析,表明该算法的效率近似在  $(n^4)$  的范围.过大的点元密度将不利于实现实时模拟.由于一般的单个 MEMS 结构达不到  $100 \times 100\mu\text{m}$  的尺度,故本文中 10000 左右的点元数量可满足表面模拟的精度要求.

利用 Oxford RIE 系统得到的各向同性刻蚀 SEM 照片<sup>[11]</sup>如图 5(a)所示,该照片为保留掩膜的形式.刻蚀窗口的宽度为  $200\mu\text{m}$ ,刻蚀速率为  $0.8\mu\text{m}/\text{min}$ .刻蚀时间为 87.5 分钟,刻蚀深度约为  $70\mu\text{m}$ .作为对比,图 5(b)显示了用本文表面演化算法结合各向同性刻蚀模型得到的相关模拟结果.在相同的刻蚀时间下,模拟得到的三维表面和实际工艺的刻蚀结果较为一致,表明该三维表面演化算法对刻蚀表面描述的良好效果.

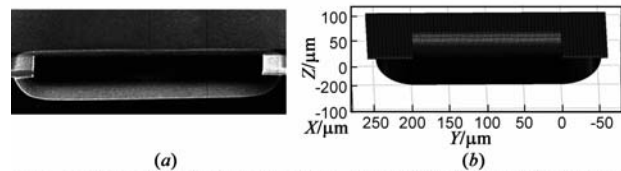


图5 (a) 各向同性刻蚀的SEM照片;(b) 对应的各向同性刻蚀模拟

从得到的模拟结果来看,使用本文模型得到的最终表面轮廓,可为其它的工艺模拟程序,如 Intellisense 公司的商业化工艺仿真软件,提供一种新的实时动态及过程模拟方案.

## 4 结论

本文提出了一种基于点元和曲面网格单元的三维表面演化算法,可应用于硅刻蚀的三维工艺模拟.作为

二维线算法的一种三维扩展形式,本算法不同于经典的线算法小平面三维扩展.以连续网格曲面为单元,并以高斯法确定曲面关键构成点的单位法向量,避免了面元步进时的相互交叠,得到的模拟曲面也更为连续和平滑.通过一些不同加工时间的各向同性刻蚀模拟,及与相关实验结果的对比,验证了本三维表面演化算法对硅刻蚀加工表面描述的准确性.

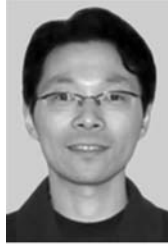
## 参考文献

- [1] 王跃林,苏以撒,王文.微电子机械系统[J].电子学报,1995,23(10):37-42.  
Wang Yaolin, Zohar Yitshak, Wong Man. The microelectromechanical systems [J]. Acta Electronica Sinica, 1995, 23 (10):37-42. (in Chinese)
- [2] 王阳元,武国英,郝一龙,等.硅基 MEMS 加工技术及其标准工艺研究[J].电子学报,2002,30(11):1577-1584.  
Wang Yangyuan, Wu Guoying, Hao Yilong, et al. Study of silicon-based MEMS technology and its standard process [J]. Acta Electronica Sinica, 2002, 30(11):1577-1584. (in Chinese)
- [3] Osano Yugo, Ono Kouichi. Atomic-scale cellular model and profile simulation of poly-Si gate etching in high-density chlorine-based plasmas: Effects of passivation layer formation on evolution of feature profiles [J]. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 2008, 26(4):1425-1439.
- [4] Zhou R C, Zhang H X, Hao Y L, et al. 3D simulation of profile evolution in silicon DRIE [A]. 7th International Conference on Solid-State and Integrated Circuits Technology [C]. Beijing: Institute of Electrical and Electronics Engineers, 2004. 1072-1075.
- [5] Zhou Z F, Huang Q A, Li W H. A cellular automaton-based simulator for silicon anisotropic etching processes considering high index planes [J]. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2007, 17(4):S38-S49.
- [6] Masato Fujinaga, Norihiko Kotani. 3-D topography simulator (3-D MULSS) based on a physical description of material topography [J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1997, 44 (2):226-238.
- [7] 张鉴,何晓雄,刘成岳,戚昊琛.基于线算法的 ICP 深反应离子刻蚀模型[J].真空科学与技术学报,2008,28(5):481-485.  
Zhang Jian, He Xiaoxiong, Liu Chengyue, Qi Haochen. Modeling of deep reactive ion etching by inductively coupled plasma with string algorithm [J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2008, 28(5):481-485. (in Chinese)
- [8] 周再发,黄庆安,李伟华,卢伟.用于光刻胶刻蚀过程模拟的二维动态 CA 模型[J].电子学报,2006,34(5):906-910.

Zhou Zaifa, Huang Qing'an, Li Weihua, Lu Wei. A two dimensional dynamic cellular automata model for simulation of photoresist etching process[J]. Acta Electronica Sinica, 2006, 34(5):906-910. (in Chinese)

- [9] Du J, Olhoff N. Topological optimization of continuum structures with design-dependent surface loading-part2: algorithm and examples for 3D problem[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2004, 27(3):166-177.
- [10] Zhang J, Huang Q A, Li W H. An ICP etch model based on time multiplexed Deep etching [A]. Proc of SPIE [C]. Changchun: The International Society for Optical Engineering, 2006. 60320G. -1-60320G. -8.
- [11] Information[EB/OL] on [http://www.oxfordplasma.de/process/si\\_iso.htm](http://www.oxfordplasma.de/process/si_iso.htm), 2010-07-18.

## 作者简介



张 鉴 男,副教授,硕士生导师.1977年10月出生于浙江慈溪,2007年1月在东南大学获工学博士学位.目前从事微电子教学与 MEMS 研究工作.

E-mail: jzhangseu@yahoo.com.cn



戚昊琛 女,工程师.1981年10月出生于浙江诸暨.合肥工业大学在读硕士研究生,从事 MEMS CAD 和传感系统设计工作.