

单晶硅各向异性腐蚀的微观动态模拟

姚 娉¹, 闫卫平¹, 马灵芝², 杜立群², 郭吉洪²

(1.大连理工大学 电子与信息工程学院, 辽宁 大连 116023;

2.大连理工大学微系统研究中心, 辽宁 大连 116024)

摘要: 根据单晶硅各向异性腐蚀的特点, 以晶格内部原子键密度为主要因素, 温度、腐蚀液浓度等环境因素为校正因子, 建立了一个新颖的硅各向异性腐蚀的计算机模拟模型。在 VC++ 开发环境下利用 OpenGL 技术, 实现了硅各向异性腐蚀过程的三维微观动态模拟, 为深刻理解硅的各向异性腐蚀过程提供了直观的界面。

关键词: 各向异性腐蚀; MEMS 加工工艺; 计算机模拟; OpenGL 三维技术

中图分类号: TP216 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-4776 (2005) 06-0284-04

Anisotropic Etching Micro Dynamic Simulation of Crystalline Silicon

YAO Ping¹, YAN Wei-ping¹, MA Ling-zhi², DU Li-qun², GUO Ji-hong²

(1.College of Elct.and Info.Engin.Dalian University of Technology, Dalian 116023, China;

2.The Research Center of Micro-system, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: A novel computer simulation model has been built for silicon anisotropic etching process. Based on the anisotropic etching characteristic of silicon, this model depends mainly on the bonds density of inner atoms with respect to environment factors such as temperature, concentration of the etchant. With VC++ and OpenGL, it has accomplished the micro dynamic simulation of silicon anisotropic etching and provided researchers with a vivid interface to the etching process.

Key words: anisotropic etching; MEMS manufacturing technology; computer simulation; OpenGL

1 引言

硅各向异性腐蚀技术是 MEMS 加工的核心工艺之一。硅的各向异性腐蚀, 是指硅的不同晶面具有不同的腐蚀速率^[1]。基于这种腐蚀特性, 可在硅衬底上加工出各种各样复杂的三维微结构。如果能精确的对各向异性腐蚀的结果进行计算机模拟, 那么对于 MEMS 计算机辅助设计系统的建立和 MEMS 工艺水平的提高, 都有重要的意义^[2]。

在硅的各向异性腐蚀中, 各晶面的腐蚀速率有很大差异, 与晶向、腐蚀液浓度、温度、掩模形状等因素有很大关系。如何对不可预料的腐蚀结果进行计算机模拟, 是令众多研究者深感兴趣的问题。目前国内外已有几种取得较好模拟结果的硅各向异性腐蚀模拟软件, 如由 Zhu 和 Liu 等人用原子模型中动态 CA 算法和连续 CA 算法相结合发展的 ACES 软件^[3] (anisotropic crystalline etch simulation), 其模拟所需的二维掩模图样可由常用绘图软

收稿日期: 2004-11-21

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (60174034)

件产生,软件输出产生标准的固体模型格式的三维图样。还有东南大学微电子中心姜岩峰等人用 Borland C 开发的硅各向异性腐蚀三维模拟系统^[2],其中包括输入模块、计算处理模块和输出显示模块等,它们通过 GUI 平台与用户进行数据交流。腐蚀结果用侧面剖视图和俯视图相结合的方式显示,效果比较直观。

目前的软件大都集中在对腐蚀结果的模拟,没有很好地联系腐蚀机理从而直观地演示出腐蚀的微观过程。在腐蚀机理的研究上,被广为接受的是从原子面密度和表面激活能的角度来解释各向异性腐蚀的机理。如果能有一个关于硅各向异性腐蚀模型建立的微观模拟程序,必然能给我们进行腐蚀过程的研究带来极大方便。

OpenGL (open graphic library) 是美国 SGI 公司于 90 年代初推出的开放式三维图形应用程序接口,目前已成为国际上公认的 3D 图形工业标准,在计算机三维动画和图形仿真领域有着广泛的应用。本文在 VC 下,利用 OpenGL 三维图像处理技术^[3],建立了硅原子模型,同时根据文献^[5]提出的硅各向异性腐蚀物理模型,把腐蚀液浓度和温度作为表面激活能^[4]的影响因子,从晶面键密度和表面激活能两方面考虑,抽象了计算机模型,开发了反映硅各向异性腐蚀微观过程的三维动态模拟软件,为研究者深刻理解硅的各向异性腐蚀过程提供了直观的界面。

2 系统的组成结构

硅各向异性腐蚀三维微观模拟系统的结构框图如图 1 所示。

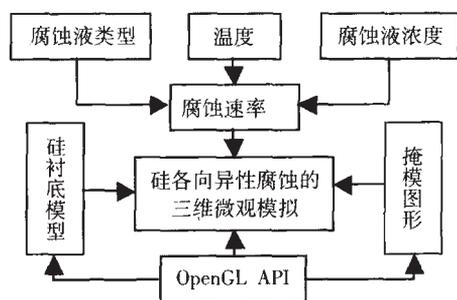


图 1 系统结构框图

Fig.1 System structure diagram

由于 OpenGL 是一个与平台无关的三维图形接口,操作系统必须提供像素格式管理和渲染环境管理。本文在 VC 环境下,进行像素格式设置和渲染管理,用 C++ 语言完成硅衬底模型及腐蚀算法的抽象。衬底由硅晶胞组成,用户可以通过程序界面输入衬底晶胞个数、衬底晶向、腐蚀时间和腐蚀环境等参数。衬底的建立是为了让腐蚀的初始图形更加形象、直观。腐蚀开始后,程序会根据腐蚀过程的需要,自动增加晶胞。掩模图形决定了腐蚀开始时的边界,通过输入一组多边形顶点,程序自动在硅衬底上生成并显示腐蚀窗口。把腐蚀过程看做硅原子的去除过程,硅原子的去除速率由键密度、腐蚀液类型、温度和腐蚀液浓度等输入参数决定。确定了这些参数之后,程序从腐蚀边界开始,判断并移除硅原子,到达规定腐蚀时间之后,形成各晶向的腐蚀表面。

关于 OpenGL 在 VC 环境下的使用方法,相关的文章很多,本文不再详细介绍,重点介绍一下,硅衬底模型的建模思想和腐蚀过程的实现。

2.1 硅腐蚀衬底模型的建立

硅衬底由一个个硅晶胞规则排列组成,每个晶胞由 18 个硅原子构成。硅衬底的创建过程中,抽象了四个类: COpenGLObj 类、 CModelObj 类、 CCrystalObj 类和 CAtomObj 类。COpenGLObj 类中各成员函数通过调用 OpenGL 标准库函数,实现原子、键、晶格等显示图形的绘制;在 CModelObj 类中主要定义衬底初始模型的大小、各晶胞之间的关系等;在 CCrystalObj 类中实现晶胞的创建以及各原子间关系的确定等函数,使各晶胞间共用的原子在程序中只有一个拷贝;在 CAtomObj 类中完成衬底中原子的填充和原子间键的生成等。

图 2 中 (a) 为一个晶胞的正视图 (基准晶向为

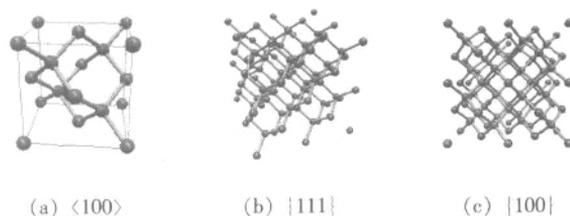


图 2 硅衬底微观结构图

Fig.2 Microstructure of silicon substrate

$\langle 100 \rangle$; (b) 和 (c) 分别为由 8 个晶胞组成的硅衬底的 $\{111\}$ 面和 $\{100\}$ 面截图。通过硅的微观结构图及程序界面上“缩放”、“旋转”等辅助键的使用, 可以清楚地看到各个晶面的原子键密度。

2.2 腐蚀过程的实现

硅各向异性腐蚀的过程可以看作是腐蚀面上硅原子的去除过程。当原子的四个键都存在时, 它处于稳定状态, 不被腐蚀; 当原子有一个价键断开时, 原子的腐蚀开始, 该原子上的其它价键开始断裂。每一个价键的断开速度是不同的, 由腐蚀液浓度、温度、键所在原子所处的能量状态共同决定。当原子上的四个价键完全断开时, 该原子被去除。根据这一过程, 抽象了 CErodeObj 类, 其中 ErodeSet 函数完成初始掩模设置, 确定初始腐蚀面。同时在程序中建立了两个链表, 一个链表上链接腐蚀面上的原子节点, 另一个链表链接本次腐蚀所影响到的原子节点。腐蚀开始后, 腐蚀面链表中的原子进行腐蚀操作, 当原子的四个键全部断开时, 原子生命期结束, 被腐蚀掉。同时, 和他相连的原子被补充到腐蚀面链表中, 进行下一次腐蚀, 如此循环补充, 直到链表中没有原子, 腐蚀结束。腐蚀过程程序代码如下:

```
bool CErodePackage::ExecOneStepErode ()
{
    bool lExeOpera=false;
    POSITION pos pos1;
//1.对链表上的原子执行腐蚀操作
    pos=m_AtomObjListOfSurface->GetHeadPosition ();
    while (pos)
    {
        lExeOpera=ExecMinErodeRule ((CAtomObj
*) (m_AtomObjListOfSurface->GetNext (pos)));
    }
//2. 对链表上键值为 0 的原子进行腐蚀掉操作, 并
    将影响到的原子加入链表
    CAtomObj *pAtomObj;
    pos=m_AtomObjListOfSurface->GetHeadPosition ();
    while (pos)
    {
        pos1=pos;
```

```
pAtomObj= (CAtomObj *)
(m_AtomObjListOfSurface->GetNext (pos));
if (pAtomObj)
{
    if (ExecErodeDeleteOp (pAtomObj))//腐蚀掉
        //原子被腐蚀掉了
        ProceEffectAtom (pAtomObj);//处理影响
        m_AtomObjListOfSurface->RemoveAt (pos1);
    ... ...
}
```

2.3 价键断裂速率的确定

在腐蚀过程中, 腐蚀规则和价键断裂速率由 ExecMinErodeRule 等函数确定。我们以 KOH 腐蚀液为研究对象, 假设腐蚀过程中, 由于硅原子的价键状态不同, 而硅原子处于一系列不连续的能量状态中, 一个氢氧根离子对 Si—Si 键结合能的影响为 $\frac{kT}{2}$, 则考虑到氢氧根离子对硅原子能量状态的影响后, 硅原子激活能可用下式表示^[5]

$$E_s = E_0 - n \times \frac{kT}{2}$$

其中 E_0 为未受氢氧根离子影响时硅原子激活能; n 为硅原子上断裂的价键个数 ($0 \leq n \leq 4$)。

从硅衬底模型图上可以看到不同晶面上原子的化学键情况。图 3 分析了三个主要的低指数晶面 $\{100\}$, $\{110\}$ 和 $\{111\}$ 面上的化学键情况。

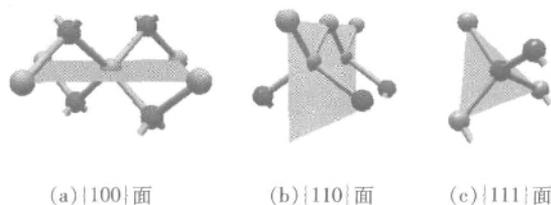


图 3 $\{100\}$, $\{110\}$ 和 $\{111\}$ 面上原子的化学键情况
Fig.3 Bonding situation of $\{100\}$, $\{110\}$ and $\{111\}$ surface atoms

当 $\{100\}$ 晶面处于当前腐蚀面时, 面上原子有两个悬挂键, 键上所连原子已在上步腐蚀中去除, 另外两键连接着原子; 当 $\{110\}$ 晶面处于当前腐蚀面时, 面上原子只有一个悬挂键, 键上原子已在上步腐蚀中去除, 另有一键连接着下层原子, 而其余两键与其所连原子同处于当前腐蚀面上;

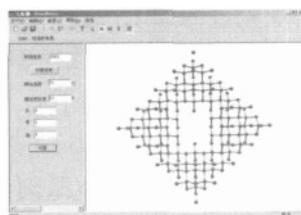
{11} 晶面处于腐蚀面时, 面上原子只有一个悬挂键, 另外三键与其所连原子都在腐蚀面下。不含悬挂键的原子处于稳定状态, 腐蚀速率低^[5-8]。假设每个价键的断裂速率 V 和所在原子的能量状态有如下关系

$$V = -K_1 \left(\ln \frac{E_{xSi}}{\alpha E_0} + \ln \frac{E_{ySi}}{\alpha E_0} \right) + K_2 N_{oh}$$

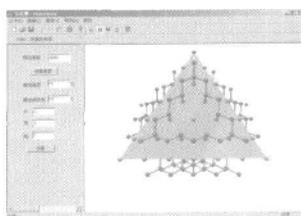
其中, E_{xSi} 和 E_{ySi} 分别代表该键所连接两个原子的能量状态; N_{oh} 为腐蚀液浓度; K_1, K_2, α 为调整系数。该式前一部分反映不同晶面上键的断裂速度和温度的影响, 后一部分考虑腐蚀液浓度的作用, 通过调整系数可以得到不同腐蚀环境下的价键的腐蚀速率, 进而从微观角度模拟硅各向异性腐蚀的过程。

3 模拟输出结果

模拟系统按照前文提出的腐蚀规则, 自动判断腐蚀面上的原子状态, 调整价键的断裂速率, 判断原子的生命周期是否结束。在程序中, 我们设计了用户输入模块, 可以输入腐蚀时间、腐蚀液浓度等初始条件。最初腐蚀的掩模形状, 是在图形视图中初始化得到的。选中表面上一个区域的原子, 该区域的形状就是腐蚀开始的掩模形状。图 4 以 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 衬底为例演示腐蚀结果。图 4 (a) 是设



(a) $\langle 100 \rangle$ 衬底



(b) $\langle 111 \rangle$ 衬底

图 4 腐蚀程序及结果

Fig.4 Etching program interface and result

定在浓度为 33% KOH 腐蚀液中 70 °C 温度下, $\langle 100 \rangle$ 面上由 9 个原子构成的最小正方形掩模图样的自停止腐蚀的模拟结果 (已将图形调转 45°, 基准晶向为 $\langle 110 \rangle$)。可以看到, 腐蚀后 {11} 面为主要形成的面。图 4 (b) 是 $\langle 111 \rangle$ 面上开口为正方形的自停止腐蚀结果。图中阴影是腐蚀停止层, 最终的腐蚀图形也是由 $\langle 111 \rangle$ 面构成的三角形。

4 结论

我们结合硅各向异性腐蚀机理, 把腐蚀液浓度和温度作为表面激活能的影响因子, 从晶面键密度和表面激活能两方面考虑, 抽象了计算机模型, 建立了腐蚀过程的微观模拟程序, 较好地动态显示了硅各向异性腐蚀的微观过程。该软件使本文提出的假设在一定程度上解释了硅各向异性腐蚀的规律, 但是更全面的腐蚀模型还有待进一步开发。

参考文献:

- [1] 黄庆安. 硅微机械加工技术 [M]. 北京: 科学出版社, 1996: 51-123.
- [2] 姜岩峰, 黄庆安. 硅各向异性腐蚀三维计算机模拟系统的建立 [J]. 机械强度, 2001, 23 (4): 484-487.
- [3] ZHU Z J, LIU C. Micromachining process simulation using a continuous cellular automata method [J]. Journal of Microelectromechanical Systems, 2000, 9 (2): 252.
- [4] 和平鸽工作室. OpenGL 高级编程与可视化系统开发 [M]. 北京: 中国水利水电出版社, 2003.
- [5] 张佩君, 黄庆安. 基于 MATLAB 的硅各向异性腐蚀过程模拟 [J]. 半导体学报, 2002, 23 (4): 440-445.
- [6] 姜岩峰, 黄庆安, 吴文刚, 等. 硅在 KOH 中各向异性腐蚀的物理模型 [J]. 半导体学报, 2002, 23 (4): 434-439.
- [7] SEQUIN C H. Computer simulation of anisotropic crystal etching [Z]. Transducer's91, USA: Chicago, 1991: 801.
- [8] THAN O, BUTTGENBACH S. Simulation of anisotropic chemical etching of crystalline silicon using a cellular automata model [J]. Sens A ctuators, 1994, A45 (1): 85.
- [9] ZAKARIA MOKTADIRT, HENRI CAMON. Monte Carlo simulation of anisotropic etching of silicon: investigation of $\langle 111 \rangle$ surface properties [J]. Modelling Simul Mater Sci Eng, 1997, 5: 481-488.

作者简介:

姚 婷 (1979—), 女, 山东青岛人, 大连理工大学测试计量技术及仪器专业硕士, 研究方向为生物芯片技术;

闫卫平 (1950—), 女, 吉林长春人, 大连理工大学电子与信息工程学院微电子研究所教授。