

# 基于压缩表示的离子刻蚀仿真三维表面演化方法\*

杨宏军<sup>1)2)†</sup> 宋亦旭<sup>1)</sup> 郑树琳<sup>1)</sup> 贾培发<sup>1)</sup>

1) (清华大学计算机科学与技术系, 智能技术与系统国家重点实验室, 清华信息科学与技术国家实验室, 北京 100084)

2) (沈阳炮兵学院, 沈阳 110162)

(2013年5月31日收到; 2013年8月1日收到修改稿)

为了研究表面演化过程的机理, 提出了一种基于压缩表示的三维表面演化方法来模拟等离子体刻蚀工艺, 并着重探讨了离子刻蚀的仿真. 为了解决三维元胞自动机内存需求量大问题, 该方法将二维数组和动态存储方式相结合, 既实现元胞信息的无损压缩存储, 又保持三维元胞间的空间相关性. 实验结果也表明该方法不仅节省了大量内存, 而且在高分辨率条件下查找离子初始碰撞的表面元胞效率较高, 满足高分辨率仿真的要求. 将该方法应用于实现刻蚀工艺三维表面仿真中, 模拟结果与实验结果对比验证了该方法的有效性.

**关键词:** 等离子体刻蚀, 元胞自动机, 表面演化方法, 高分辨率仿真

**PACS:** 82.20.Wt, 81.65.Cf, 81.16.-c

**DOI:** 10.7498/aps.62.208201

## 1 引言

刻蚀加工工艺是集成电路制作过程的关键步骤, 其质量决定最终集成电路的性能和产品的集成度. 等离子体刻蚀工艺利用等离子体中高能离子的轰击作用, 可得到高纵横比、各向异性的刻蚀结果, 因此, 在微机电系统加工和半导体制造技术中应用广泛<sup>[1-3]</sup>. 由于集成电路的特征尺度不断缩小 ( $\leq 100$  nm), 这样就对等离子体刻蚀工艺提出更高的要求. 只有更好控制刻蚀表面形状和表面局部微观特征 (表面粗糙度、局部均匀性和曲率等), 才能满足当前的生产需求.

等离子体行为及表面作用过程复杂, 模拟方法<sup>[4]</sup>能够帮助人们加深对刻蚀工艺的认识, 探索指定刻蚀结果的工艺参数, 理解特殊刻蚀结果的成因. 刻蚀表面演化过程模拟主要通过指定的输入条件下, 预测刻蚀表面随时间演化来实现. 方法主要包括线方法<sup>[5]</sup>、水平集方法<sup>[6-8]</sup>和基于元胞自动机的方法<sup>[4,9-11]</sup>等. 元胞自动机 (CA) 是一种时间、空间、状态都离散的动力学系统, 是非线性科学的一种重要研究方法, 特别适合于对复杂时空演

化过程进行动态模拟研究. 它是将  $d$  维仿真区域离散成大量网格 (2 维为正方形, 3 维为立方体), 称为元胞. 每一个元胞具有一种或几种状态, 按照特定的演化规则, 每一个元胞从当前状态向下一个状态演化, 这样实现对复杂现象的模拟, 广泛地应用到社会、经济、军事和科学研究的各个领域, 例如物理现象研究中枝晶生长和凝固过程的模拟<sup>[12-14]</sup>, 交通现象研究中交通流的模拟<sup>[15-18]</sup>, 疾病研究中传染病传播的模拟<sup>[19,20]</sup>以及网络病毒传播<sup>[21,22]</sup>和刻蚀过程的模拟<sup>[4,9-11]</sup>等. 刻蚀过程的元胞自动机模拟就是通过模拟大量粒子在表面刻蚀的效果, 并将其转化为驱动表面元胞状态变化的演化规则, 从而模拟表面元胞不断的刻蚀, 实现刻蚀表面演化. 元胞自动机具有结构简单、鲁棒性高、稳定性好、无维度的限制, 并能方便表达复杂的表面结构和形貌.

由于刻蚀表面特征尺度不断缩小, 对仿真能力提出了更高的要求. 简单低分辨率二维元胞自动机无法满足对复杂刻蚀图形准确模拟的要求, 不适宜描述刻蚀表面细节, 难以表达微观物理现象, 不能再现复杂的刻蚀图形的刻蚀结果. 因此, 高分辨率三维元胞自动机<sup>[10]</sup>成为研究半导体刻蚀过程仿真

\* 国家科技重大专项 (批准号: 2011ZX2403-002) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: yanghj\_72@126.com

的发展方向, 甚至出现原子尺度元胞自动机<sup>[23,24]</sup>来研究刻蚀表面微观性质. 由于元胞自动机要根据每个元胞的当前状态进行演化, 因此, 在使用元胞自动机进行仿真时必须存储所有元胞信息. 要想模拟表面特殊微观现象, 元胞自动机模型应该能够再现微观效果, 这样就需要减小元胞尺度, 提高仿真区域的分辨率. 随着仿真区域分辨率的提高, 元胞数量增长迅速, 对元胞信息存储方法提出了更高的挑战, 需要合适的表示方法来表示所有的元胞的信息.

要采用元胞自动机对刻蚀过程实现高分辨率模拟, 首先要解决三维元胞信息的存储问题. 对于有限计算机内存来说, 传统利用三维数组法(3DA)存储仿真区域的所有元胞信息, 数组中的每个元素对应一个元胞, 虽然操作方便, 但随着分辨率的提高, 元胞数量剧增, 存储元胞信息的三维数组中元素数量也随之剧增, 导致内存需要量快速增长, 在现有硬件条件下, 难以实现高分辨率模拟. 考虑到仿真过程中, 按照表面演化规则, 往往是表达刻蚀表面的元胞状态发生变化, 它仅占仿真区域的一小部分, 因此, 杜立群等<sup>[25]</sup>在对玻璃微流控芯片湿法刻蚀三维模拟时, 将三维模型中每列元胞信息用一个长方体表示, 高度表示该列非空元胞高度和, 提出了用二维数组来存储元胞信息的方法, 实现内存的节省. 但对于包含多个表面元胞的列来讲, 仅用高度不能表示侧壁刻蚀现象, 此时表面元胞间可能出现空元胞, 因此, 这种方法不能模拟复杂的刻蚀结果. Zhou等<sup>[26]</sup>在对光刻胶刻蚀过程模拟中提出三维动态CA模型, 采用三维数组和动态链表相结合的方法(3DA-DMA)来实现元胞信息的存储. 该方法建立一个三维数组来表示所有元胞信息, 同3DA的差别在于数组中的元素仅存储元胞的类别及指向存储元胞信息的地址, 仅对表面元胞才存储元胞的状态信息. 所有表面元胞的信息用动态链表来管理, 根据模拟过程中表面元胞的变化来动态增删或更新动态链表的元胞信息. 这种方法虽然可以解决文献<sup>[25]</sup>的不足, 一定程度上节省了内存, 但对大量非表面元胞存储类别信息, 随着分辨率的提高, 内存占用量也不可忽视. 因此, 现有的元胞信息存储结构不能满足利用元胞自动机进行高分辨率模拟的需求. 为了实现半导体制造过程中刻蚀和沉积工艺的高分辨率仿真, 需要有效元胞信息存储结构来存储元胞信息.

鉴于此, 本文提出一种基于二维数组和动态存

储方式的元胞信息压缩存储方法(2DS-DMA)并应用到三维元胞自动机中, 实现对离子刻蚀工艺的模拟. 该方法仅存储与元胞模型演化相关的表面元胞的信息, 不仅实现了元胞信息的无损压缩存储, 而且保持了三维元胞的空间相关性. 通过与现有存储方法对比, 验证了2DS-DMA存储方法的可行性. 最后, 采用结合2DS-DMA存储方法的三维表面演化方法来模拟实际刻蚀工艺过程, 也验证了本文提出方法的有效性.

## 2 基于压缩表示的三维表面演化方法

### 2.1 三维表面演化模型

等离子体刻蚀主要由具有方向性的高能离子和表面相互作用的结果. 因此, 模拟等离子体刻蚀过程时, 需要模拟大量离子微观运动及与刻蚀表面作用的关系, 通过计算到达刻蚀表面离子的流量分布、角度和能量分布以及刻蚀产额来实现. 假设等离子体刻蚀表面作用机理是:

1) 表面各点刻蚀主要由离子通过增强刻蚀或物理溅射刻蚀实现. 研究表明, 无论是离子物理溅射还是增强化学刻蚀, 离子携带能量和入射角度(入射方向和表面法线夹角)与其刻蚀产额密切相关, 这里采用Chang等<sup>[27]</sup>提出的刻蚀产额模型作为离子作用机理, 图1是入射角度的依赖关系<sup>[10]</sup>, 刻蚀产额表示为 $Y_{\text{total}}(E_+, \theta) = A(\sqrt{E_+} + \sqrt{E_{\text{th}}})C(\theta)$ , 其中,  $C(\theta)$ 表示角度依赖项,  $E_{\text{th}}$ 是能量阈值,  $A$ 为与离子和基底材料相关的常数;

2) 由于离子的平均自由程长, 假设离子在近表面运动过程中不发生碰撞;

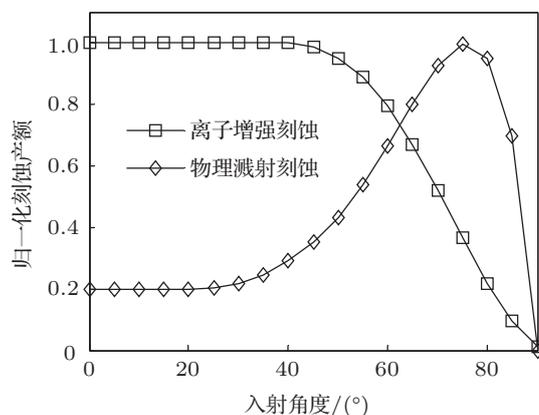


图1 刻蚀产额与入射角度的依赖关系

3) 当离子运动到刻蚀表面时, 入射角度大于某一临界角  $\theta_{th}$  时, 离子发生能量无损失的反射;

4) 假设离子从模拟区域上表面随机产生, 角度满足正态分布, 能量满足麦克斯韦分布.

根据刻蚀表面作用机理, 本文将 Monte Carlo 方法和 CA 方法相结合实现等离子体刻蚀过程三维表面演化模型.

根据模拟精度要求, 利用 CA 技术, 首先将模拟区域 (Length×Width×Height) 划分为边长为  $a$  的立方体格子的集合, 如图 2 所示, 来表示整个模拟区域、掩膜图形和刻蚀材料. 每个立方体格子称为元胞, 它是元胞自动机最基本的操作单元, 也是刻蚀的基本对象. 每个元胞可看作三维离散欧几里得空间中的点  $(x, y, z)$ ,  $x \in [0..l - 1]$ ,  $y \in [0..w - 1]$ ,  $z \in [0..h - 1]$ ,  $x, y$  和  $z$  分别表示该元胞在  $x$  轴、 $y$  轴和  $z$  轴上坐标位置,  $l, w$  和  $h$  分别代表沿  $x$  轴、 $y$  轴和  $z$  轴三个方向元胞划分的数量, 即  $l = \text{Length}/a$ ,  $w = \text{Width}/a$ ,  $h = \text{Height}/a$ ,  $c(x, y, z)$  用于描述元胞  $(x, y, z)$  的对应状态. 元胞状态  $c(x, y, z)$  由材料属性 flag (0, 空; 1, 掩膜; 2, 基底材料)、不同材料粒子 (原子或分子) 的含量和其他附加信息等组成. 这里采用 von Neumann 邻域结构, 它由 1 个中心元胞和 6 个相邻元胞构成, 当元胞中材料含量为 0 时, 该元胞称为空元胞. 根据元胞  $(x, y, z)$  与相邻元胞的关系, 非空元胞可分为表面元胞和内部元胞 (掩膜元胞和材料元胞). 当元胞相邻的 6 个元胞至少有 1 个为空元胞时, 该元胞称为表面元胞; 当元胞相邻的 6 个元胞都不是空元胞时, 该元胞称为内部元胞. 模拟区域中所有表面元胞组成刻蚀表面, 根据刻蚀机理, 刻蚀仅发生在刻蚀表面上, 因此只有表面元胞根据演化规则引起状态变化. 刻蚀演化过程可以表示为: 通过计算得到达到刻蚀表面的离子的刻蚀产额来不断刻蚀表面元胞, 直到表面元胞成为空元胞, 同时又形成新的表面元胞的过程来推动刻蚀表面的持续变化.

模拟时首先利用 Monte Carlo 方法 (MC) 从模拟区域上表面随机产生大量角度满足正态分布、能量满足麦克斯韦分布的离子; 然后, 跟踪离子在元胞中的运动, 查找离子初始碰撞的表面元胞; 接下来, 根据该表面元胞局部表面信息计算表面法线, 获得离子的入射角; 再判断离子在刻蚀表面是发生刻蚀还是反射; 若发生刻蚀, 则根据刻蚀产额模型计算离子在入射点处的刻蚀产额, 根据刻蚀产额来刻蚀入射点处元胞中材料的含量, 更改相关属性,

推进表面演化过程; 若发生反射, 则重新跟踪离子的运动. 等离子体刻蚀过程的三维元胞表面演化算法见算法 1.

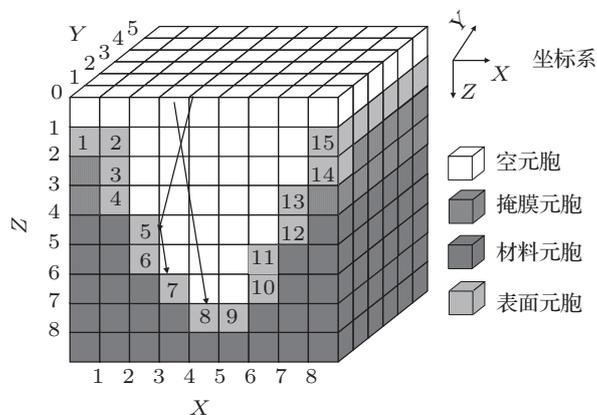


图 2 模拟区域的元胞表示及入射离子运动

算法 1 三维元胞表面演化算法

输入: 元胞各维划分数量  $l, w, h$ , 模拟离子总数  $N$ , 角度分布参数, 能量分布参数, 反射临界角  $\theta_{th}$

输出: 刻蚀表面

- 1 将模拟区域进行元胞划分并存储
- 2 循环当离子数量  $n$  小于离子总数  $N$ 
  - 2.1 利用 MC 方法产生离子 Ion (position, direction,  $E$ )
  - 2.2 跟踪离子 Ion 查找离子初始碰撞的表面元胞
  - 2.3 计算表面法线和入射角度  $\theta$
  - 2.4 若  $\theta \leq \theta_{th}$  ( $\theta_{th}$  反射临界角)
    - 2.4.1 yield= 计算刻蚀产额 ( $\theta, E$ )
    - 2.4.2 刻蚀原子并改变元胞状态
  - 2.5 否则
    - 2.5.1 计算反射后的离子 Ion (position, direction,  $E$ )
    - 2.5.2 转 2.2
  - 2.6  $n++$
- 3 输出模拟结果

从算法 1 中, 可以看出将模拟区域进行元胞划分并存储元胞信息是模拟的第一步, 由于现有的三维元胞信息存储方法, 在当前计算机硬件条件下无法存储所有元胞信息来实现高分辨率元胞自动机模拟问题, 本文采用基于二维数组和动态存储方法 (2DA-DMA) 来存储元胞信息, 实现基于压缩表示的离子刻蚀仿真三维表面演化方法.

## 2.2 基于二维数组和动态存储方式的元胞信息压缩存储方法

如图 2 所示, 三维元胞自动机模型需要存储模

拟区域中  $l \times w \times h$  个元胞信息. 根据刻蚀机理, 微观粒子仅在刻蚀表面发生刻蚀, 对材料内部并不产生影响. 由于元胞自动机模型刻蚀表面由所有表面元胞来组成, 所以元胞自动机的演化只涉及表面元胞, 其他元胞大部分时间甚至整个仿真阶段都不发生变化. 也就是说, 只要知道表面元胞的信息就可以实现刻蚀过程的模拟. 因此, 为了更有效地利用内存, 只需存储表面元胞的信息即可, 如仅将这些表面元胞信息用一个动态数组存储, 虽然存储空间复杂度最低, 但搜索定位元胞的时间复杂度会很高.

综合考虑到这些因素, 在保持元胞模型空间相关性的前提下, 本文提出了基于二维数组和动态存储方式的元胞信息压缩存储方法 (2DA-DMA). 首先, 将三维元胞自动机模型每一列元胞  $\{(x,y,z)|y \in [0..h]\}$ ,  $x \in [0..l-1]$ ,  $y \in [0..w-1]$ , 看成一个元胞. 则该三维元胞自动机模型转变为二维元胞自动机模型, 用一个二维数组  $\text{Cell2d}[l][w]$  就可存储该二维元胞自动机的元胞信息, 这时数组中每个元素  $\text{Cell2d}[x][y]$  表示三维元胞模型的  $xy$  平面上  $(x,y)$  处一列的元胞  $\{(x,y,z)|z \in [0..h]\}$  的信息. 为了有效使用内存, 根据刻蚀规则, 不需要存储所有元胞的信息, 只存储该列中所有表面元胞的信息. 因此, 二维静态数组的每个元素  $\text{Cell2d}[x][y]$  只需存储  $(x,y)$  列所有表面元胞的个数  $\text{cellnum}$  和一个用来存储  $(x,y)$  列所有表面元胞一维动态数组  $\text{zcell}$ . 该一维动态数组  $\text{zcell}$  中每个元素除记录元胞的信息  $c(x,y,z)$  外, 还增加一个记录表面元胞沿  $z$  轴坐标值  $z$ , 用于还原该列所有元胞信息.

利用 2DA-DMA 存储方法可将图 2 所示元胞自动机模型存储为图 3 所示结构. 从图 3 可以看出, 2DA-DMA 存储方法仅存储所有元胞的信息, 节省了大量内存, 存储空间复杂度由  $o(n^3)$  降到了  $o(n^2)$ ; 同时根据刻蚀材料的层次关系, 通过表面元胞信息可以恢复所有元胞信息, 实现了整个三维元胞自动机模型的无损压缩存储, 满足了高分辨率模拟时对空间的要求. 同时, 2DA-DMA 存储方法还保持了三维元胞模型中的空间相关性信息, 二维数组下标  $(x,y)$  可以表示三维元胞模型中  $x$  轴、 $y$  轴方向的坐标,  $z$  轴方向的坐标由该列中存储表面元胞中坐标  $z$  来体现.

在模拟刻蚀表面演化过程中, 无论是跟踪离子的运动还是计算表面法线, 都需要判断元胞  $(x,y,z)$  是否为表面元胞, 其效率直接影响模拟方法的效率. 因此, 规定存储每列表面元胞信息的一维动态

数组  $\text{zcell}$  中的元素, 按  $z$  坐标值由小到大排序, 可以采用快速的二分法查找算法来实现. 这样, 当判断元胞  $(x,y,z)$  是否是表面元胞时, 首先, 根据水平面的两个坐标  $x$  和  $y$  定位到该元胞所在二维数组中位置  $\text{Cell2d}[x][y]$  单元; 再根据一维动态数组  $\text{zcell}$  首元素的坐标位置  $\text{zcell}[0].z$  和尾元素的坐标位置  $\text{zcell}[\text{cellnum}-1].z$ , 判别  $z$  是否在这两数之间, 若不在则元胞  $(x,y,z)$  不是表面元胞, 否则利用二分法对数组中元素进行搜索, 从而确定  $(x,y,z)$  是否为表面元胞. 算法 2 为表面元胞查找算法.

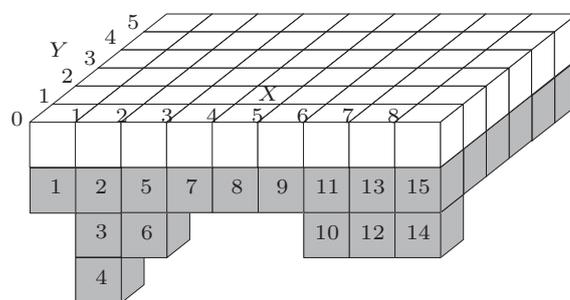


图3 2DA-DMA 存储方法

算法2 表面元胞查找算法

---

输入: 元胞位置  $(x,y,z)$   
 输出:  $\geq 0$ , 表面元胞数组下标;  $-1$ , 非表面元胞  
 算法:  
 1  $n =$  从  $\text{Cell2d}[x][y]$  取得当前列表面元胞数量  $\text{cellnum}$   
 2  $\text{Cellxy} =$  从  $\text{Cell2d}[x][y]$  中取得表面元胞地址  $\text{zcell}$   
 3 若  $y < \text{Cellxy}[0].y$  或者  $y > \text{Cellxy}[\text{cellnum}-1].y$  则  $\text{return}-1$   
 4 否则  
 4.1  $\text{left} = 0; \text{right} = \text{cellnum} - 1$   
 4.2 循环  $\text{left} \leq \text{right}$   
 4.2.1  $\text{mid} = (\text{left} + \text{right}) / 2$   
 4.2.2 若  $(\text{Cellxy}[\text{mid}].y = y)$   $\text{return mid}$   
 4.2.3 否则若  $(\text{Cellxy}[\text{mid}].y < y)$   $\text{left} = \text{mid} + 1$   
 4.2.4 否则  $\text{right} = \text{mid} - 1$   
 5  $\text{return}-1$

---

随着刻蚀过程的持续, 表面元胞不断转变为空元胞, 而与此空元胞相邻的内部元胞又转变为表面元胞. 内部元胞的材料属性可根据基底材料和掩膜材料间明确层次关系来确定, 因此, 每个内部元胞不用浪费空间来存储材料信息.

## 2.3 改进 3 维 DDA 算法查找离子初始碰撞的表面元胞

根据算法 1, 三维表面演化方法需要模拟大量离子的运动, 从而找到离子与刻蚀表面初始碰撞的表面元胞. 当离子能量、角度和位置确定后, 离子的运动可看作从起点出发, 按运动方向引出的一条射线, 一直延伸到最近的表面元胞, 即离子初始碰撞的表面元胞. 最简单的方法就是用这条射线和每个表面元胞进行求交测试, 找出全部相交的表面元胞, 然后再根据距起点远近找出最近的表面元胞. 然而由于表面元胞数量巨大且变化频繁, 这种方法效率低下. 借鉴计算图形学中光线跟踪加速

算法 3 改进的 3 维 DDA 算法

---

输入: 离子的当前坐标  $p(x, y, z)$ , 元胞  $(i, j, k)$ , 运动方向  $d(x, y, z)$   
 输出: 0, 未找到; 1, 找到, 离子坐标  $p(x, y, z)$ , 表面元胞位置  $(i, j, k)$   
 算法:  
 1 计算离子前进最快方向作为主轴, 假设为  $z$   
 2 取  $z$  方向增量  $\Delta z = 1$ ,  $\Delta x = d.x/d.z$ ,  $\Delta y = d.y/d.z$   
 3 循环 未达到模拟区域边界  
 3.1 位置更新  $p(x, y, z) = p(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z)$   
 3.2 计算元胞位置更新量  
 3.2.1 若  $x < i + 1$ , 则  $\Delta i = 0$ , 否则  $\Delta i = 1$   
 3.2.2 若  $y < j + 1$ , 则  $\Delta j = 0$ , 否则  $\Delta j = 1$   
 3.2.3 若  $z < k + 1$ , 则  $\Delta k = 0$ , 否则  $\Delta k = 1$   
 3.3 查找遗漏元胞  
 3.3.1 若  $\Delta i + \Delta j + \Delta k = 2$ , 则计算离子轨迹与两个元胞公共面的交点, 由先后关系得遗漏元胞  $(i0, j0, k0)$   
 3.3.2 若  $\Delta i + \Delta j + \Delta k = 3$ , 则计算离子轨迹与两个元胞公共面的交点, 由先后关系得遗漏元胞  $(i0, j0, k0), (i1, j1, k1)$   
 3.3.3  $(i, j, k) = (i + \Delta i, j + \Delta j, k + \Delta k)$   
 3.4 利用算法 2 依次判断元胞  $(i0, j0, k0), (i1, j1, k1), (i, j, k)$ , 若存在表面元胞, 则离子坐标  $p(x, y, z)$ , 表面元胞  $(i, j, k)$ , return 1  
 4 return 0

---

技术<sup>[28]</sup>, 本文改进了 3 维数值微分法 (digital differential analyzer, DDA) 算法, 实现了离子初始碰撞的表面元胞的查找, 减少了测试的盲目性. 三维 DDA 算法是将空间剖分成网格的基础上, 利用空间的连贯性来实现. 离子从起始点出发, 依次检查它所穿越的元胞, 一直到达到最近表面元胞. 改进的 3 维 DDA 算法可用算法 3 来描述.

## 3 实验结果与讨论

### 3.1 三维元胞模型及实验环境

本文采用如下环境进行实验.

模拟环境及参数: 选用无限长沟槽作为三维元胞刻蚀模型, 模型尺寸  $1.5 \mu\text{m} \times 1.5 \mu\text{m} \times 1.5 \mu\text{m}$ , 沟槽宽度  $0.5 \mu\text{m}$ , 深度  $0.5 \mu\text{m}$ , 离子的入射角度满足方差为  $5^\circ$  的正态分布.

硬件环境: 计算机采用 Intel(R) Core(TM) i5-2300 处理器, 内存 4G, 操作系统 win7.

### 3.2 内存需求量间比较

为了分析 2DA-DMA, 3DA 和 3DA-DMA 三种存储方法的优劣, 本文分别采用三种存储方法来初始化模型, 统计出不同分辨率各自所需的存储空间, 得到表 1 所示结果. 这里, 元胞状态信息包括材料属性 (空, 掩膜, 基底材料)、元胞中各种粒子的含量、各向刻蚀量和相邻元胞状态等相关信息, 共需 14 个字节. 对于 2DA-DMA 存储方法, 额外添加两个字节用于表示此元胞在三维元胞空间  $z$  轴上位置. 表 1 中, 每列表示指定的分辨率  $m \times m \times m$  (表中  $m$  为各方向划分元胞数量) 下三种存储方法各自所需存储空间; 每行表示指定存储方法中十种分辨率各自所需的存储空间 ( $1 \text{ G} = 1024 \text{ M}$ ).

表 1 不同分辨率条件下三种存储方法存储元胞信息内存占用对比表

分辨率	200	400	600	800	1000	1200	1400	1600	1800	2000
3DA	112 M	896 M	3.02 G	7.17 G	14 G	24.1 G	38.4 G	57.3 G	81.6 G	112 G
3DA-DMA	41 M	324 M	1.09 G	2.58 G	5.03 G	8.68 G	13.8 G	20.6 G	29.3 G	40.1 G
2DA-DMA	2 M	8 M	18 M	32 M	50 M	72 M	98 M	128 M	162 M	201 M

从表 1 中可以看出, 随着分辨率的提高, 三种存储方法所需内存都在增加. 其中, 3DA 方法增长最快, 当分辨率达到  $600 \times 600 \times 600$  时, 占用内存超过 3 G, 目前的计算机无法承受; 3DA-DMA 方

法增长的较慢, 但分辨率达到  $800 \times 800 \times 800$  时, 占用内存也接近 3 G, 也不能实现高分辨率模拟; 2DA-DMA 方法在分辨率达到  $2000 \times 2000 \times 2000$ , 占用的内存仍不超过 300 M, 完全可以满足采用元

胞自动机实现高分辨率模拟时对硬件的要求. 而此时其他两种方法占用内存已超过几十吉, 现有硬件条件不能满足要求.

### 3.3 查找离子初始碰撞的表面元胞效率比较

三维表面演化方法需要跟踪大量离子到刻蚀表面的运动, 离子初始碰撞的表面元胞查找效率直接影响仿真方法的性能. 因此, 本文分别用 3DA-DMA 和 2DA-DMA 两种存储方法来初始化元胞模型, 采用改进的 3 维 DDA 算法来查找离子初始碰撞的表面元胞. 在离子数量一定时, 统计得到分辨率和离子初始碰撞的表面元胞查找效率间的关系如图 4 所示; 在分辨率一定时, 统计出离子数量和离子初始碰撞的表面元胞查找效率间的关系如图 5 和图 6 所示.

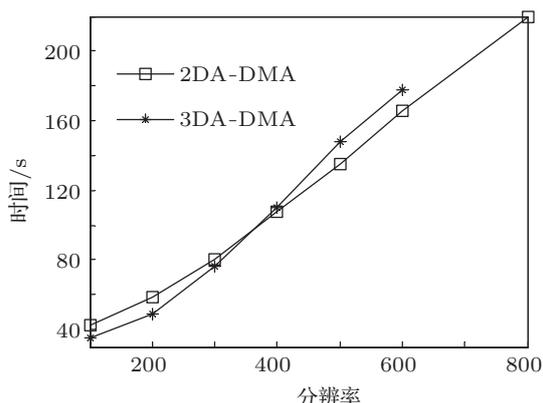


图 4 入射离子数量为  $10^8$  时, 分辨率和离子初始碰撞的表面元胞查找效率对比

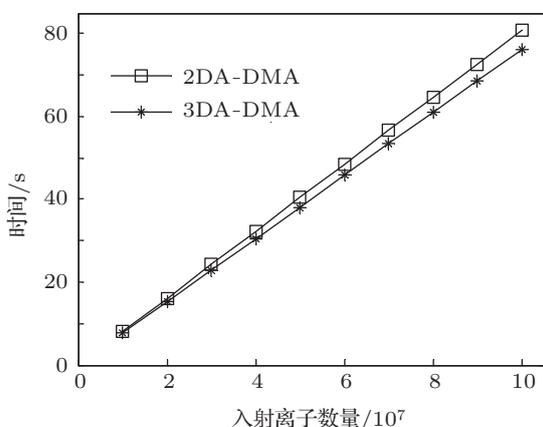


图 5 分辨率为  $300 \times 300 \times 300$  时, 离子数量和离子初始碰撞的表面元胞查找效率对比

从图 4 可以看出, 当离子数量一定时 ( $10^8$ ), 随

着分辨率的提高, 两种存储方法对应的查找时间都在增加, 呈线性增长趋势. 这主要是由于随着分辨率的提高, 元胞自动机模型中元胞数量呈线性增长, 导致离子运动过程中经过的元胞数量呈线性增长所致. 但两者的增长速度不同, 3DA-DMA 增长速度明显高于 2DA-DMA, 分辨率为  $400 \times 400 \times 400$  时是一个分界点, 两者效率相当. 当分辨率小于  $400 \times 400 \times 400$  时, 采用 2DA-DMA 方法的查找效率要低于 3DA-DMA 方法, 但相差不太明显. 从图 5 中也可以看出, 随着离子数量的增加, 两种方法对应的查找时间都在增加, 呈线性增长趋势, 其中 2DA-DMA 方法查找效率始终低于 3DA-DMA 方法. 产生这种现象的原因是在跟踪离子运动时, 采用 2DA-DMA 存储方法需要通过搜索才能确定所经过的元胞是否为表面元胞, 相比 3DA-DMA 方法利用数组高效随机访问能力效率要低一些. 但由于每列中表面元胞数量较少, 大部分情况为仅由 1 个表面元胞组成, 因此查找效率相差也不太明显. 当分辨率大于  $400 \times 400 \times 400$  时, 采用 2DA-DMA 方法的查找效率明显高于 3DA-DMA 方法, 从图 6 中也可以看出这种结果. 产生这种现象的主要原因可能是, 在高分辨率条件下 3DA-DMA 方法需要大量内存存储元胞信息, 而 2DA-DMA 方法却占用较少的内存, 提高了高速缓存的一致性, 这样大部分元胞信息可能存在高级缓存中, 增加了高速缓存的命中率, 减少了高速缓存和内存间切换次数, 因此查找效率高. 总之, 采用 2DA-DMA 方法三维表面演化方法, 不仅可以有效地节省内存, 而且离子初始碰撞的表面元胞查找效率高, 满足高分辨率离子刻蚀过程模拟的要求.

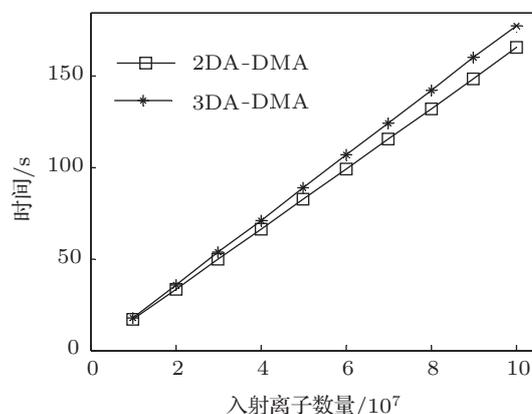


图 6 分辨率为  $600 \times 600 \times 600$  时, 离子数量和离子初始碰撞的表面元胞查找效率对比

### 3.4 仿真应用

为了验证基于压缩表示的三维表面演化方法的有效性,将其应用实际等离子体刻蚀工艺仿真过程中.图7(a)是一台Oxford 100型刻蚀机的刻蚀结果的扫描电镜照片.模型尺寸 $0.9\ \mu\text{m} \times 3.3\ \mu\text{m} \times 0.9\ \mu\text{m}$ ,刻蚀掩膜为长方形沟槽,槽宽 $0.3\ \mu\text{m}$ ,槽深 $0.075\ \mu\text{m}$ .根据刻蚀机腔室的几何尺寸、输入的气体类型(CI/Ar)、射频电压、下电极温度、压强等条件,采用CFD-ACE+获得了到达硅片表面的离子的相关数据,根据这些数据计算三维表面演化方法所需的输入数据.其中,能量离子流量 $10^{18}/\text{m}^2$ ,这里假设离子能量相同,刻蚀产额模型为 $\text{Yield}(\theta) = A \cos(\theta) / \cos(\theta_0)$ ,其中 $A$ 是与能量相关常数, $\theta_0$ 为刻蚀产额曲线趋势转换点.图7(b)是分辨率在 $300 \times 1000 \times 300$ 时的产生模拟结果.

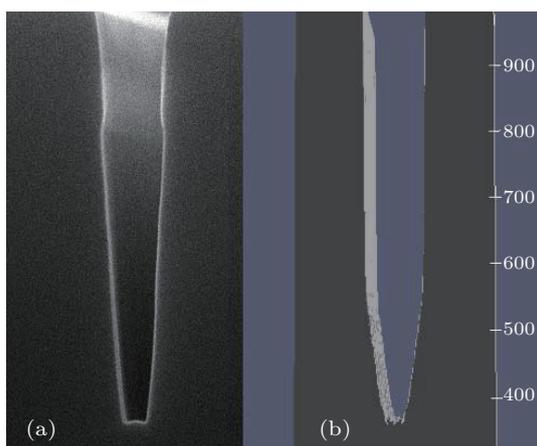


图7 结果对比 (a) 实验结果; (b) 三维仿真结果

从图7中可以看出,模拟结果与实际工艺的刻

蚀结果基本一致,再现了实际刻蚀结果的特征,侧壁陡直,底部不平且出现微凸现象,验证了该三维表面演化方法的有效性.仿真说明这些特征主要是由高能离子方向性刻蚀和离子的反射作用引起的.同时利用高分辨率模拟结果,统计刻蚀表面微观特征(表面粗糙性,局部均匀性),来找出其与刻蚀初始条件间关系,为进一步研究刻蚀机理提供指导.

### 4 结论

本文提出了一种基于压缩表示的三维表面演化方法来预测等离子体刻蚀过程中刻蚀表面的演化,并着重探讨了对离子刻蚀的仿真.该方法将二维数组和动态存储方式相结合实现元胞信息存储,解决了三维元胞自动机内存需求量大的问题,不仅实现了元胞信息的无损压缩存储,而且保持三维元胞间的空间相关性.从内存需求量上看,与3DA和3DS-DMA方法相比,2DS-DMA方法极大地降低了内存需求量;从离子初始碰撞的表面元胞查找效率上看,当分辨率超过 $400 \times 400 \times 400$ 时,基于2DS-DMA方法三维表面演化方法查找效率明显高于其他方法,说明2DS-DMA方法可满足三维表面演化方法的要求.最后,将基于2DS-DMA的等离子体刻蚀过程三维表面演化方法应用到实现刻蚀工艺三维仿真中,模拟结果与实验结果对比也验证了本文提出方法的有效性.

以后的工作中,将使用基于压缩表示的三维表面演化方法来模拟各种条件下的刻蚀过程,通过高分辨率的刻蚀结果来分析刻蚀表面微观特征(表面粗糙性,局部均匀性)和刻蚀条件间关系,以便深入地认识刻蚀机理.

- [1] Chang J P, Mahorowala A P, Sawin H H 1998 *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** 217
- [2] Chang J P, Sawin H H 1997 *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 610
- [3] Dai Z L, Mao M, Wang Y N 2006 *Physics* **35** 693 (in Chinese) [戴忠玲, 毛明, 王友年 2006 物理 **35** 693]
- [4] Saussac J, Margot J, Chaker M 2009 *J. Vac. Sci. Technol. A* **27** 130
- [5] Levinson J A, Shaqfeh E S G, Balooch M, Hamza A V 2000 *J. Vac. Sci. Technol. B* **18** 172
- [6] Kokkoris G, Tserepi A, Boudouvis A G, Gogolides E 2004 *J. Vac. Sci. Technol. A* **22** 1896
- [7] Shimada T, Yagisawa T, Makabe T 2006 *Jpn. J. App. Phys.* **45** 132
- [8] Ertl O, Selberherr S 2010 *Microelectron. Eng.* **87** 20
- [9] Hoang J, Hsu C, Chang J P 2008 *J. Vac. Sci. Technol. B* **26** 1911
- [10] Kawai H 2008 *Ph. D. Dissertation.* (Cambridge: Massachusetts Institute of Technology)
- [11] Zheng S L, Song Y X, Sun X M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 108201 (in Chinese) [郑树琳, 宋亦旭, 孙晓民 2013 物理学报 **62** 108201]
- [12] Li Q, Li D Z, Qian B N 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3477 (in Chinese) [李强, 李殿中, 钱百年 2004 物理学报 **53** 3477]
- [13] Shan B W, Lin X, Wei L, Huang W D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1132 (in Chinese) [单博炜, 林鑫, 魏雷, 黄卫东 2009 物理学报 **58** 1132]
- [14] Shi Y F, Xu Q Y, Liu B C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 108101 (in Chinese) [石玉峰, 许庆彦, 柳百成 2012 物理学报 **61** 108101]
- [15] Bentaleb K, Jetto K, Ez-Zahraouy H, Benyoussef A 2013 *Chin. Phys. B* **22** 018902
- [16] Yue H, Shao C F, Chen X M, Hao H R 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6901 (in Chinese) [岳昊, 邵春福, 陈晓明, 郝合瑞 2008 物理学报 **57** 6901]
- [17] Zhao H T, Mao H Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 060501 (in Chinese) [赵

- 韩涛, 毛宏燕 2013 物理学报 **62** 060501]
- [18] Ren G, Lu L L, Wang W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 144501 (in Chinese) [任刚, 陆丽丽, 王炜 2012 物理学报 **61** 144501]
- [19] Jin Z, Liu Q X, Mainul H 2007 *Chin. Phys.* **16** 1267
- [20] Jin Z, Liu Q X 2006 *Chin. Phys.* **15** 1248
- [21] Song Y R, Jiang G P, Xu J G 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 120509 (in Chinese) [宋玉蓉, 蒋国平, 徐加刚 2011 物理学报 **60** 120509]
- [22] Wang Y Q, Jiang G P 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 080510 (in Chinese) [王亚奇, 蒋国平 2011 物理学报 **60** 080510]
- [23] Ono K, Ohta H, Eriguchi K 2010 *Thin Solid Films* **518** 3461
- [24] Chiamonte L, Colombo R, Fazio G, Garozzo G, La Magna A 2012 *Comp. Mater. Sci.* **54** 227
- [25] Du L Q, Li P, Liu J S 2008 *Chin. J. Comput.* **31** 868 (in Chinese) [杜立群, 李璞, 刘军山 2008 计算机学报 **31** 868]
- [26] Zhou Z F, Huang Q A, Li W H, Lu W 2007 *IEEE Trans. Comput. Aided Design Integr. Circuits Sys.* **26** 100
- [27] Chang J P, Arnold J C, Zau G C H, Shin H, Sawin H H 1997 *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 1853
- [28] Fujimoto A, Tanaka T, Iwata K 1986 *IEEE Comput. Graph. Appl.* **6** 16

## A 3D profile evolution method of ion etching simulation based on compression representation\*

Yang Hong-Jun<sup>1)2)†</sup> Song Yi-Xu<sup>1)</sup> Zheng Shu-Lin<sup>1)</sup> Jia Pei-Fa<sup>1)</sup>

1) (State Key Laboratory on Intelligent Technology and Systems, Tsinghua National Laboratory for Information Science and Technology, Department of Computer Science and Technology, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

2) (Shenyang Artillery Academy, Shenyang 110162, China)

(Received 31 May 2013; revised manuscript received 1 August 2013)

### Abstract

In order to study the mechanism of the profile evolution process, a three-dimensional (3D) profile evolution method based on compression representation is proposed to simulate the plasma etching process and consider emphatically ion etching. To solve the problem of large memory requirements of 3D cellular model, the presented method adopts a new data structure, which combines two-dimensional array with dynamic storage, to represent cellular information. The structure realizes the lossless compression of cellular information and keeps the spatial correlation between 3D cells. The experimental results show that the method not only significantly reduces the memory, but also has a higher searching efficiency of surface cell which ion first passes through in high-resolution simulation. The method is applied to 3D profile evolution simulation of silicon etching process. A comparison between the simulation results and the experimental results also verifies the effectiveness of the proposed method.

**Keywords:** plasma etching, cellular automata, profile evolution algorithm, high-resolution simulation

**PACS:** 82.20.Wt, 81.65.Cf, 81.16.-c

**DOI:** 10.7498/aps.62.208201

\* Project supported by the National Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2011ZX2403-002).

† Corresponding author. E-mail: yanghj.72@126.com