

基于刻蚀速率匹配的离子刻蚀产额优化建模方法*

高扬福 宋亦旭† 孙晓民

(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, 清华大学信息科学与技术国家实验室, 北京 100084)

(2013年8月20日收到; 2013年11月7日收到修改稿)

随着微电子产业的不断发展, 刻蚀特征尺度达到纳米级, 等离子体刻蚀工艺过程机理研究越来越受到重视. 刻蚀表面仿真是研究离子刻蚀特性的重要方法. 在离子刻蚀表面仿真中, 离子刻蚀产额模型是研究刻蚀机理的重要模型, 也是元胞自动机等仿真方法的重要基础. 为了解决利用传统方法无法得到准确刻蚀产额模型参数的问题, 本文提出一种基于刻蚀速率匹配的离子刻蚀产额优化建模方法, 该方法以实际刻蚀速率与模拟刻蚀速率之间的均方差为优化目标, 利用基于分解的多目标进化算法来优化离子的刻蚀产额模型参数, 并将得到的刻蚀产额模型参数应用到采用元胞方法的刻蚀工艺的实际仿真过程中. 实验结果表明了该刻蚀产额优化建模方法的有效性.

关键词: 刻蚀产额模型, 刻蚀速率, 多目标进化算法

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

DOI: 10.7498/aps.63.048201

1 引言

微电子产业在过去的几十年中得到迅猛的发展, 而作为微电子产业的重要组成部分, 等离子体刻蚀工艺也引起了人们极大的重视, 比如考虑等离子体对不同刻蚀薄膜的影响^[1]. 等离子刻蚀的优势在于能够通过控制刻蚀工艺参数来获得更好深宽比的刻蚀剖面. 由于有离子参与刻蚀, 等离子体刻蚀工艺机理非常复杂, 对等离子体刻蚀机理的深入研究可以帮助确定优化的工艺参数. 利用计算机仿真技术来模拟刻蚀过程, 可以减少刻蚀实验的投入, 因此越来越受到广泛的重视. 但是随着刻蚀特征尺寸越来越小, 等离子体刻蚀工艺对计算机仿真的性能和模型的准确性也提出了更高的要求.

用于模拟离子刻蚀表面演化过程的方法目前主要有两类: 基于刻蚀速率的方法和基于刻蚀产额的方法. 基于刻蚀速率的方法主要有线算法^[2,3]和水平集方法^[4,5], 基于刻蚀产额的方法主要是元胞自动机法^[6,7].

线算法在刻蚀表面选取一些离散的点, 计算这

些点的刻蚀速率, 然后让这些点在刻蚀表面沿着各自的法线方向以相应的刻蚀速率移动, 通过这些点的推进来表征整个刻蚀表面的演化过程; 水平集方法结合刻蚀演化表面点的刻蚀速率, 将低维的刻蚀演化表面(零水平集)转化成高维曲面(水平集函数), 然后通过求解水平集函数的偏微分方程来得到不同时刻的演化表面状况. 这两种方法都只是利用刻蚀速率进行演化, 没有在算法运行过程考虑离子在刻蚀表面发生的物理作用和化学作用.

元胞自动机是一种离散的动力学系统, 其在时间、空间以及状态上都是离散的, 因此特别适用于仿真过程中复杂时空的演化. 它首先要把仿真区域划分成大量的网格(元胞), 这些元胞都有不同属性, 然后依据给定的演化规则让每一个元胞向下一个状态演化, 从而实现演化过程. 元胞自动机法因为实现起来比较简单, 利用压缩表示方法可以大大减少对内存空间的占用^[8], 因而最近几年得到广泛的应用^[9-11]. 相比基于刻蚀速率的方法, 元胞自动机法更是可以通过在演化规则中体现理化作用的影响从而利于机理研究. 但是, 作为演化规则的一个

* 国家科技重大专项(批准号: 2011ZX2403-002)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: songyixu@163.com

关键部分,刻蚀产额模型的准确性直接影响到元胞自动机法仿真的演化结果,所以如何构建一个准确的刻蚀产额模型是至关重要的.

目前,研究离子刻蚀产额建模主要有两种方法:离子轰击实验法^[12]和分子动力学方法^[13].离子轰击实验法主要通过仪器产生特定速度和角度的离子轰击表面,然后分析刻蚀结果,得到离子平均刻蚀率;分子动力学方法利用经典力学来模拟离子在刻蚀表面上的作用,实际上是一种理论计算的方法,其精度取决于势函数的准确性.由于实际加工过程的理化反应极其复杂,刻蚀产额往往需要体现多种离子之间的相互作用,两种方法都不能模拟实际加工环境,所以求得的刻蚀产额往往是定性的趋势性的结果,把得到的刻蚀产额模型应用于基于元胞的方法仿真时,往往和加工结果有较大的误差.

因此,为了解决上述两种方法不能得到用于元胞自动机仿真的准确刻蚀产额参数的问题,本文提出一种基于刻蚀速率匹配的离子刻蚀产额建模方法,以实际刻蚀速率与模拟刻蚀速率之间的均方差为优化目标,利用基于分解的多目标进化算法来求得多种离子的刻蚀产额模型参数,并将得到的刻蚀产额参数模型应用到刻蚀工艺的实际仿真过程中,最后将模拟的结果与实际工艺结果进行对比.

2 离子刻蚀产额问题

2.1 离子刻蚀产额优化模型

利用元胞自动机法模拟刻蚀过程,首先要初始化模型的相关参数,并在刻蚀表面上方固定高度生成不同种类且满足一定分布的离子.对于每个离子,模拟它在仿真区域的运动,计算它到达刻蚀表面时的入射角度,根据该入射角度来确定离子是发生反射还是刻蚀.如果发生刻蚀,计算离子的刻蚀产额,依据刻蚀产额来更改入射位置刻蚀表面的元胞属性;如果发生反射,计算离子在反射后的运动方向并重新模拟它在仿真区域的运动^[14].图1是元胞自动机法模拟刻蚀的流程.

由上可知,在刻蚀仿真过程中一个重要的环节是利用入射粒子的信息来求取离子的刻蚀产额.离子的刻蚀产额指的是一个离子入射到刻蚀表面后与刻蚀表面发生作用所刻掉的平均原子数,是用来描述离子对材料表面刻蚀能力的大小.一般来说,

离子的刻蚀产额越大,离子对刻蚀表面的刻蚀作用也越强.

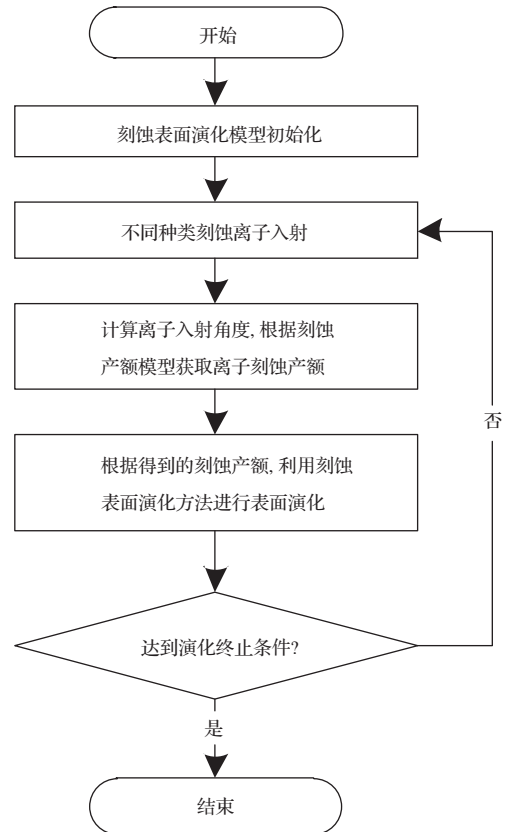


图1 基于元胞自动机的刻蚀仿真演化方法流程^[14]

离子的刻蚀产额又可分为化学刻蚀产额 Y_c 和物理溅射产额 Y_p ^[7],两者分别对应刻蚀过程中的离子增强刻蚀和物理溅射.离子增强刻蚀通过离子与材料表面发生化学反应生成可挥发性的化学产物来达到刻蚀的目的.物理溅射是离子通过撞击材料表面,在与表面层原子不断碰撞过程中将能量传给表面层原子,当表面层原子获取足够能量能够挣脱材料表面束缚时,它就脱离材料表面,从而实现刻蚀.

离子的刻蚀产额与离子的入射角度有关.Kawai^[6]给出如图2所示离子刻蚀产额与离子入射角度之间的对应关系.同时,对于物理溅射产额,它还与入射离子能量的开方成线性关系.Steinbruchel^[15]给出了物理溅射产额与能量之间关系的表达式:

$$Y_s(E_+) = C(\sqrt{E_+} - \sqrt{E_{th}}), \quad (1)$$

其中, $Y_s(E_+)$ 是物理溅射产额, C 是常数, E_+ 是入射离子的能量, E_{th} 是能量的阈值.

Osano等^[16]在研究氯离子刻蚀硅表面时,在

综合离子增强刻蚀和物理溅射的基础上, 给出了离子刻蚀产额公式:

$$Y(E_+, \theta) = C(\sqrt{E_+} - \sqrt{E_{th}})f(\theta), \quad (2)$$

其中, C 和 E_{th} 是刻蚀过程与刻蚀工艺相关的参数, θ 是入射离子的角度; $f(\theta)$ 是刻蚀过程与入射角度相关的函数, E_+ 是入射离子的能量.

针对某种刻蚀离子, 如果要得到能用于仿真过程的刻蚀产额模型, 需要确定刻蚀产额模型中的参数 C , E_{th} 以及 $f(\theta)$ 中的参数. 前述的离子轰击实验法和分子动力学法求取刻蚀产额模型参数均有缺点, 因此本文利用多目标进化算法来求取刻蚀产额模型参数.

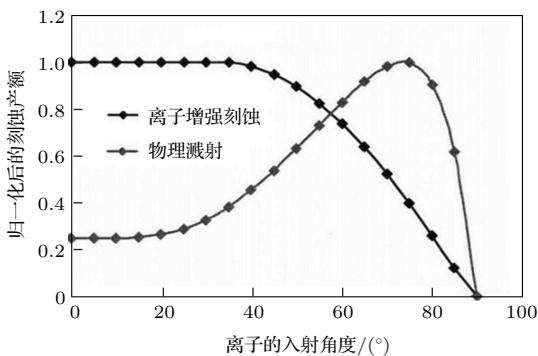


图2 离子的刻蚀产额与入射角度之间的对应关系 [6]

利用多目标进化算法来求取刻蚀产额模型参数, 首先需要确定优化的目标. 目前利用优化算法来求取刻蚀产额模型参数主要以模拟刻蚀剖面相对于实际刻蚀剖面的误差作为优化目标 [17]. 这种方法能够得到比较符合实际仿真过程的参数, 但是模拟刻蚀剖面所用时间非常长, 优化的离子刻蚀产额参数也只有一种, 而且只能描述刻蚀过程的轮廓信息 (某个时刻的刻蚀剖面信息), 无法体现刻蚀过程的细节信息 (刻蚀表面点的速率信息).

当刻蚀剖面的每个演化过程求取的模拟刻蚀速率与实际刻蚀速率都很相近时, 对应的模拟刻蚀剖面与实际刻蚀剖面也会很相近, 因为当前时刻刻蚀表面每个点的速率信息直接影响着下一时刻的刻蚀剖面形状. 但是, 当模拟的刻蚀剖面与实际刻蚀剖面相近时, 对应的模拟刻蚀速率反而不一定能与实际刻蚀速率相近. 而在给定离子刻蚀产额模型参数的情况下可以很快求取刻蚀表面选定点模拟刻蚀速率, 因此从刻蚀产额与刻蚀速率的关系入手, 利用模拟刻蚀速率相对于实际刻蚀速率的误差作为优化目标来求取离子的刻蚀产额模型参数.

整个算法的主要流程如下: 首先, 初始化刻蚀产额参数, 利用离子刻蚀产额模型来求取模拟刻蚀速率; 然后以模拟刻蚀速率相对于实际刻蚀速率的误差作为优化目标, 利用多目标进化算法调整刻蚀产额模型参数, 不断缩小误差, 最终得到符合要求的刻蚀参数. 具体的优化框架如图 3 所示.

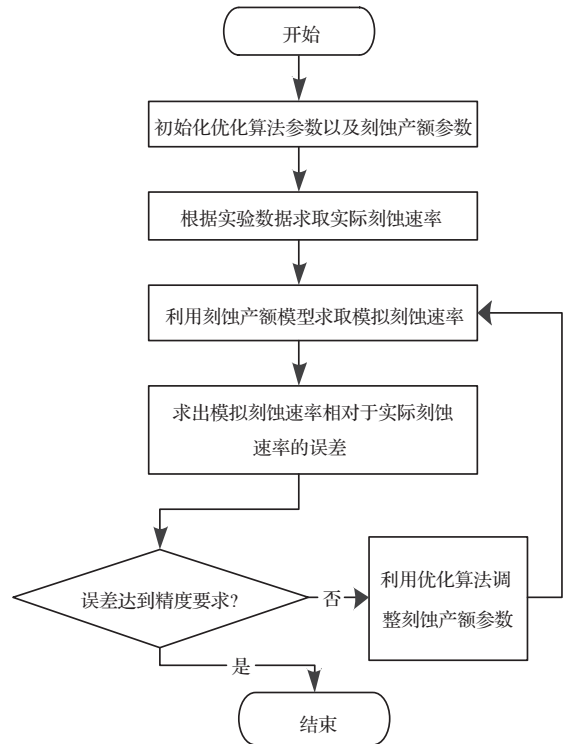


图3 刻蚀产额优化框架

2.2 刻蚀速率与刻蚀产额的关系

刻蚀表面选定点的刻蚀速率与入射离子的刻蚀产额密切相关. 对于固定能量和固定入射角度的同种离子, 它们对刻蚀表面选定点的刻蚀速率满足 [3]:

$$ER(P) = \frac{E_Y(P) \times J(P)}{N_t}, \quad (3)$$

其中, $E_Y(P)$ 是入射离子在 P 点的刻蚀产额, $J(P)$ 是入射到 P 点的离子流量, N_t 是被刻蚀材料的原子密度, $ER(P)$ 是在一定流量的固定能量和固定入射角度的同种离子对 P 点的刻蚀速率.

在刻蚀表面演化过程中, 对于给定的刻蚀产额模型参数, 利用 (4) 式可以求取刻蚀表面选定点的模拟刻蚀速率. 但是该点的入射离子不可能只有一个, 而应该是由入射到该点的所有离子共同作用的结果. 假设共有 n 种类型的离子入射到该点, 则该点的实际刻蚀速率可表示为这些离子对刻蚀表面

选定点的刻蚀速率之和, 即

$$\begin{aligned} ER(P) &= \sum_{i=1}^n ER_i(P) \\ &= \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^n E_{Y_i}(P) \times J_i(P). \end{aligned} \quad (4)$$

2.3 刻蚀产额优化目标

在实际等离子体刻蚀加工过程中, 可以通过扫描电镜 (SEM) 分析不同时刻刻蚀剖面, 或者针对给定的加工剖面, 利用刻蚀剖面演化算法对中间过程仿真, 从而获得刻蚀剖面各个点的实际刻蚀速率. 利用前述的刻蚀产额与刻蚀速率之间的关系, 同时结合刻蚀加工数据, 可以求得刻蚀剖面上各个点的模拟刻蚀速率. 所以为了衡量模拟刻蚀速率相对于实际刻蚀速率的偏差, 我们以模拟刻蚀速率与实际刻蚀速率之差作为衡量标准.

在实际刻蚀过程中, 如果只选取一种宽度的刻蚀演化剖面, 很容易因为实验本身的误差导致测量得到的实际刻蚀速率与真实值有误差, 进而使得模拟刻蚀速率与实际刻蚀速率之差也有误差. 为了减少误差, 我们选择多种宽度下的刻蚀剖面演化结果, 并对第 k 种宽度的剖面演化结果, 定义 (5) 式作为误差函数:

$$e_k(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w(i, j)(v_{rij}(\mathbf{x}) - v_{sij}(\mathbf{x}))^2, \quad (5)$$

其中, \mathbf{x} 是刻蚀产额模型参数, n 表示第 k 种宽度下刻蚀剖面演化过程用于优化的剖面数, m 表示每个刻蚀演化表面选取用于优化的点的数量, v_{rij} 是第 k 种宽度下第 i 个剖面第 j 个选定位置点的实际刻蚀速率, v_{sij} 是与 v_{rij} 相对应的模拟刻蚀速率, $w(i, j)$ 是权重因子, 表示 v_{sij} 相对于 v_{rij} 的偏差对整体误差的影响程度.

此时对应的目标函数为

$$f(\mathbf{x}) = (e_1(\mathbf{x}), e_2(\mathbf{x}), \dots, e_p(\mathbf{x})), \quad (6)$$

其中 p 是刻蚀演化剖面不同宽度的沟槽数量.

我们的目标就是要最小化函数 $f(\mathbf{x})$, 并求出对应的 \mathbf{x} , 使得模拟刻蚀速率与实际刻蚀速率尽量接近. 由于 $f(\mathbf{x})$ 是一个函数向量, 不能只优化 $f(\mathbf{x})$ 的一个分量, 需要均衡 $f(\mathbf{x})$ 中的不同分量, 因此, 刻蚀产额模型参数优化的问题就转化成了多目标优化问题.

2.4 多目标优化算法

2.4.1 多目标优化算法简介

利用上述方法, 刻蚀产额问题转化成了多目标优化问题. 多目标优化问题不同于单目标优化问题. 单目标优化问题中可以直接通过比较解的值来确定解的优劣, 而多目标优化问题中的解不一定都能直接比较. 如果一个解的各个目标值都不优于另一个解, 而且其中一个目标还劣于另一个解, 则这个解劣于另一个解.

目前优化算法多应用于物理模型的优化 [18,19]. 而多目标进化算法 (MOEA) 的出现更是为解决多目标优化问题提供了一条新的途径, 它不需要清楚目标函数内部的结构, 只根据目标函数的结果对优化方向进行相应的调整. 而在多目标进化算法中, 基于分解的多目标进化算法 [20] (MOEA/D) 在解决多目标优化问题时计算复杂度低, 在特定情况下得到的结果也较其他多目标进化算法好, 因此本文选取基于分解的多目标进化算法作为优化算法.

2.4.2 转化成单目标问题

MOEA/D 通过选取均匀分布的权重向量, 然后利用基于分解的方法把多目标优化问题转化成单目标优化问题, 从而避开了基于分配关系的 MOEA 算法中适应度值分级和维护多样性等问题. 本文选取切比雪夫法作为基于分解的方法, 具体如下:

$$\begin{aligned} \min g^{\text{te}}(x|\lambda, z^*) &= \max_{1 \leq i \leq p} \{\lambda_i |f_i(x) - z_i^*|\}, \\ \text{s.t. } x &\in \Omega, \end{aligned} \quad (7)$$

其中, p 为目标的个数; $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p)$ 为权重向量且满足 $\sum_{i=1}^p \lambda_i = 1$; $z^* = (z_1^*, z_2^*, \dots, z_p^*)$, 且满足 $z_i^* = \max\{f_i(x)|x \in \Omega\}$, 保存各个目标在优化过程中的最小值.

2.4.3 进化算子的选取

进化算子是进化算法中的核心部分, 它涉及到选择, 交叉以及变异操作.

交叉操作: 对于个体 \mathbf{x}^{r_1} , 随机地从相应的集合中选取两个个体 \mathbf{x}^{r_2} 和 \mathbf{x}^{r_3} , 利用差分进化算子 [21] 生成新的个体 $\bar{\mathbf{y}} = (\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n)$, 即

$$\bar{y}_k = \begin{cases} x_k^{r_1} + F(x_k^{r_2} - x_k^{r_3}) & (R_1 \leq CR) \\ x_k^{r_1} & (R_1 > CR) \end{cases}, \quad (8)$$

其中, R_1 为 $[0, 1]$ 之间的随机数, F 是比例因子, CR 是交叉概率.

变异操作: 对于个体 $\bar{y} = (\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n)$, 可通过多项式变异得到变异后的个体, $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, 即

$$y_k = \begin{cases} \bar{y}_k + \sigma_k(b_k - a_k) & (R_2 \leq p_m) \\ \bar{y}_k & (R_2 > p_m) \end{cases}, \quad (9)$$

其中, a_k 和 b_k 分别是第 k 个待优化参数的下界和上界, R_2 为 $[0, 1]$ 之间的随机数. 而 σ_k 又满足

$$\sigma_k = \begin{cases} (2 \times R_3)^{\frac{1}{\eta+1}} - 1 & (R_3 \leq 0.5) \\ 1 - (2 - 2 \times R_3)^{\frac{1}{\eta+1}} & (R_3 > 0.5) \end{cases}, \quad (10)$$

在上面公式中 η 是控制参数, R_3 为 $[0, 1]$ 之间的随机数.

选择操作: 对于一个个体 $x^i = (x_1^i, x_2^i, \dots, x_n^i)$, 利用交叉操作和变异操作后得到新的个体 $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, 如果存在个体 x^i 的邻居 x^j 满足

$$g^{te}(y|\lambda^j, z^*) \leq g^{te}(x^j|\lambda^j, z^*), \quad (11)$$

则用个体 y 代替个体 x^j .

2.4.4 精英保留策略

本文采用精英保留策略来避免在优化过程中丢失好的个体. 主要的实现方式是引进外部种群. 在优化过程中, 该外部种群始终用来保存优化过程中得到的当前最优解. 因此, 对于一个新生成的个体 y , 如果在外部种群中存在个体的适应度值劣于 y , 则从外部种群中移除该个体; 同时如果 y 的解不劣于外部种群中的个体, 则将 y 加入外部种群.

2.4.5 MOEA/D 算法流程

- 1) 根据给定的条件生成初始种群;
- 2) 设置精英种群为空;
- 3) 当还没达到终止条件;
- 4) 对初始种群的每个个体;
- 5) 利用实际刻蚀结果计算 v_r ;
- 6) 利用刻蚀产额与刻蚀速率的关系计算 v_s ;
- 7) 根据 5) 和 6) 的结果计算适应度值;
- 8) 对个体进行交叉操作;
- 9) 对个体进行变异操作;
- 10) 对个体进行选择操作, 保留较优解;
- 11) 利用精英保留策略更新精英种群;
- 12) 结束;
- 13) 结束;
- 14) 输出最优解.

3 结果与讨论

3.1 利用总流量信息求取刻蚀表面选定点的流量信息

在仿真实验中, 通过商业软件 CFD-ACE+ 可以获取等离子体中各种入射离子总的流量信息, 但是无法获取到达刻蚀表面选定点的离子流量信息. 在文献 [3] 中提到利用总流量信息求取刻蚀表面选定点的流量信息, 但是该方法只能粗略地计算离子流量信息, 而且不能处理离子分布是离散的情形.

一种常见的求取刻蚀表面选定点入射离子的流量信息的方法如图 4 所示. 在离子束中的离子到达初始刻蚀线时, 入射离子在初始刻蚀线上应该是均匀分布的. 在该线上均匀选取 n 点, 则每个点的流量信息仍为原来的流量信息. 然后让这些点的离子继续沿着自己的入射角度输送到刻蚀表面, 通过统计这些离子输送到刻蚀表面选定点附近区域的流量信息来确定选定点的流量信息.

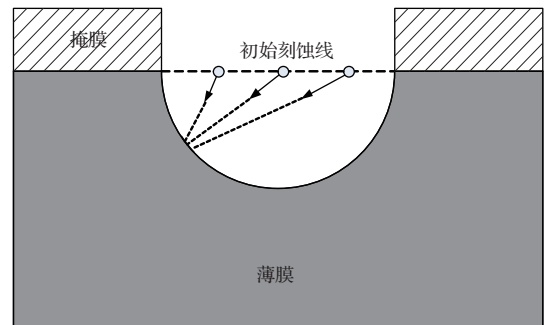


图 4 利用离散点法求取表面选定点流量

这种方法的时间复杂度为 $O(n \times m \times k)$, n 为初始刻蚀线上选取点的数量, m 为刻蚀表面选取点的数量, k 为入射离子不同角度、不同能量的流量数量. 当选取的模型较大或者选取的模型是 3D 模型时, 计算量会大大增大.

扫描法是另一种更快求取刻蚀表面选定点入射离子的流量信息的方法. 主要步骤如下: 首先, 在选定点周围选取几个最近的刻蚀表面点, 按照横坐标的顺序依次将它们用线段连在一起, 这几条线段就是对应选定的选取区域, 如图 5 所示; 然后, 根据入射离子的入射角度 θ , 做以这些点为起点, 以 θ 为倾斜角的一系列平行射线, 并与初始刻蚀线相交, 求出这些平行射线与初始刻蚀线的所有交点, 并找出其中距离最远的两个交点, 假设两点的横坐标分别为 x 和 $y(x < y)$, 则横坐标在 x 和 y 之间并

且入射角度等于 θ 的所有离子均会入射到该选定点的选取区域.

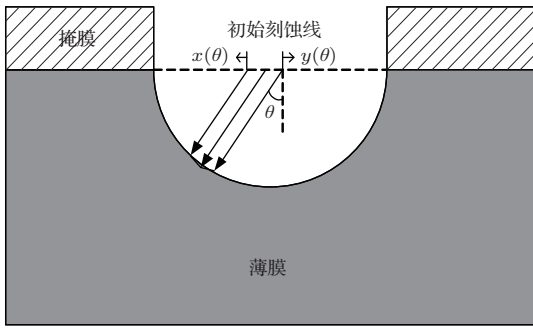


图5 利用扫描法求取选定离子流量

因此该选定点的入射流量信息可表示为

$$F(P) = \left(\int_{x(\theta_1)}^{y(\theta_1)} \Delta F_1(t, \theta_1) dt, \dots, \int_{x(\theta_n)}^{y(\theta_n)} \Delta F_1(t, \theta_n) dt \right), \quad (12)$$

其中 P 是该选定点的位置, θ_i 是第 i 种离子的入射角度, $F_1(t, \theta_i)$ 是在初始刻蚀线位置为 t 、入射角度为 θ_i 的流量信息.

与第一种方法相比, 这种方法的时间复杂度为 $O(m \times k)$, 当沟槽宽度和深度较大时, 该算法运行时间与第一种方法相比有较大的提高. 表1是两种方法所用时间的对比.

表1 不同方法求取刻蚀表面特定点离子流量所用时间

表面选取点的数量/个	方法一所用时间/ms	方法二所用时间/ms
573	3615	64
757	6491	140
889	7897	230

3.2 优化前后的刻蚀产额模型参数及刻蚀速率对比

在离子刻蚀产额模型(2)式中, 还没有给出函数 $f(\theta)$ 的具体表达式. 文献[22]给出 $f(\theta)$ 的表达式为

$$f(\theta) = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) \cdot (\cos \theta, \cos^2 \theta, \cos^3 \theta, \cos^4 \theta, \cos^5 \theta, \cos^6 \theta). \quad (13)$$

在等离子体刻蚀过程中同时有中性粒子和离子参与作用, 但是由于中性粒子的反应机理比较复杂, 而且离子刻蚀占据主导地位, 因此我们只考虑离子刻蚀. 同时由于利用元胞自动机法模拟刻蚀过

程时如果考虑离子能量信息时复杂度会大大增大, 为了简化计算, 令 $x_0 = C(\sqrt{E_+} - \sqrt{E_{th}})$, 这样刻蚀产额公式就转化成(14)式. 此时, 待优化的参数就是 $\mathbf{x} = (x_0, x_1, \dots, x_6)$.

$$Y(E_+, \theta) = x_0 f(\theta). \quad (14)$$

在本次实验中, 我们主要采取离子增强刻蚀的方式对材料进行刻蚀. 在实际刻蚀过程, 直接获取刻蚀过程不同时刻剖面信息的实验量比较大, 在一般情况下只能获取到刻蚀剖面的初始形貌和最终刻蚀形貌. 利用离子的流量信息、初始剖面形貌和最终刻蚀形貌, 通过基于水平集的演化方法进行仿真, 可以获得刻蚀过程不同时刻刻蚀表面的形貌, 从而获取不同时刻刻蚀表面选定点的刻蚀速率.

利用基于水平集的演化方法获取的刻蚀速率与实际刻蚀速率结果非常相近, 而且演化过程中的刻蚀剖面形貌也比较符合实际刻蚀过程, 但是模拟整个过程所用时间非常长, 不适合模拟时间尺度比较大的刻蚀过程, 因此我们把基于水平集方法获取的刻蚀速率当作实际刻蚀速率, 并在这个基础上对刻蚀产额模型进行优化.

本文选取的初始刻蚀产额模型参数[22]如表2所示.

利用基于分解的多目标进化算法优化之后, 得到优化后的刻蚀产额模型参数如表3.

表2 初始刻蚀产额模型参数

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1.6667	18.7	64.7	145.7	-206	147.3	-39.9

表3 优化后的刻蚀产额模型参数

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
2.051	12.255	25.569	47.383	-3.541	-92.538	53.727

优化前后的刻蚀产额曲线对比如图6所示. 相比优化前的刻蚀曲线[22], 优化后的刻蚀产额曲线更接近文献[6]中实际的离子增强刻蚀产额曲线, 也进一步说明本次刻蚀过程发挥主要作用的是离子增强刻蚀.

在刻蚀演化过程的特定时刻(第8000步), 实际刻蚀速率结果如图7所示, 模拟刻蚀速率的结果如图8所示.

从两个图的对比中可以看出, 总体上模拟刻蚀速率与实际刻蚀速率拟合得比较好. 模拟刻蚀速率在沟槽边缘的位置会出现值比较大的情况, 这是因为在边缘位置计算入射角度的方法存在误差. 同样,

在沟槽尖角位置和中心位置, 实际刻蚀速率大于模拟刻蚀速率, 这是因为没有考虑反射的缘故.

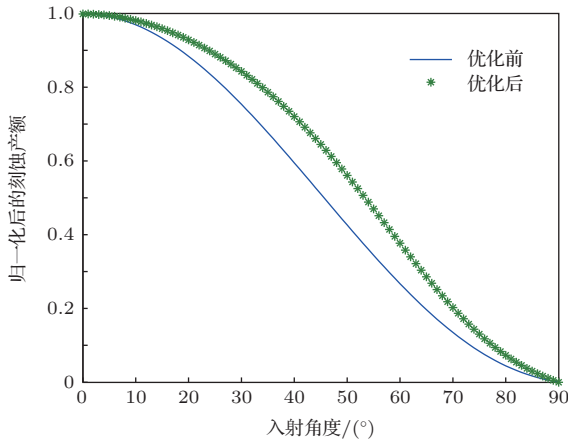


图6 优化前后归一化的刻蚀产额曲线对比

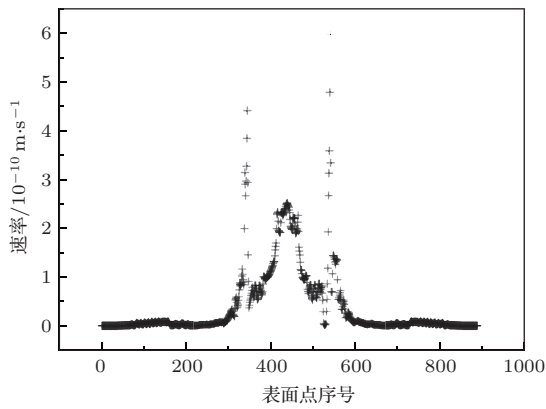


图7 刻蚀剖面表面选取点实际刻蚀速

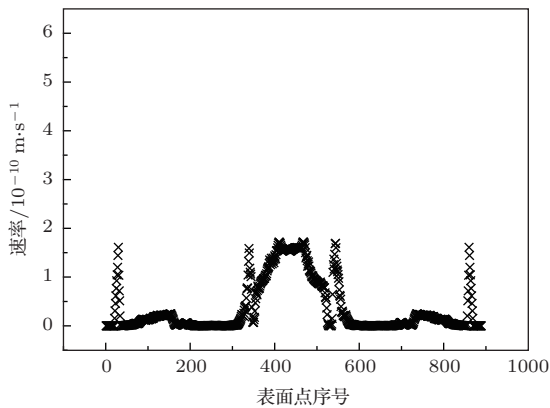


图8 刻蚀剖面表面选取点模拟刻蚀速率

3.3 与实际刻蚀仿真结果的对比

为了验证得到的刻蚀产额模型参数的有效性, 将其应用到实际的刻蚀仿真过程中. 图9是使用一台Oxford100型刻蚀机刻蚀后得到的SEM照片.

在相同的实验条件下, 包括刻蚀的几何尺寸、入射离子的类型、感应耦合等离子体(ICP)功率、基底偏压、气体压强等, 用基于元胞自动机的剖面演化方法进行仿真. 图10是优化之前的仿真结果, 图11是优化之后的仿真结果, 表4是实际沟槽以及优化前后刻蚀沟槽深度对比.

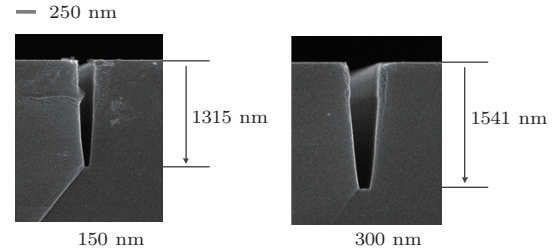


图9 不同宽度的沟槽实际刻蚀结果

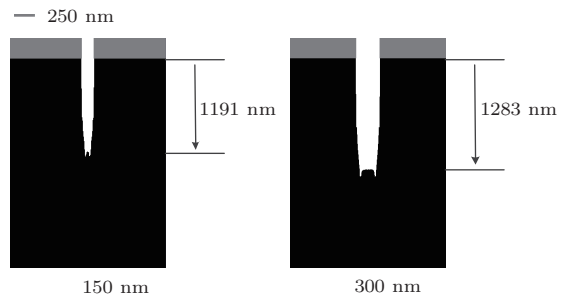


图10 优化前沟槽仿真结果

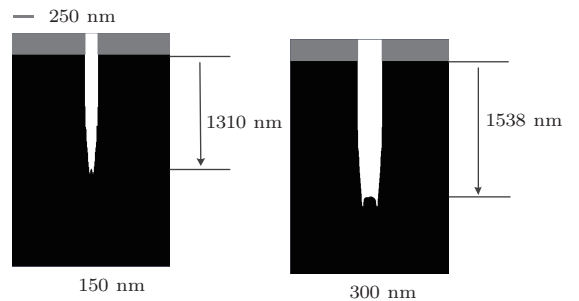


图11 优化后沟槽仿真结果

表4 不同宽度沟槽实验结果对比

	150 nm 的宽度/nm	300 nm 的宽度/nm
实际沟槽深度	1315	1541
优化前沟槽深度	1191	1283
优化后沟槽深度	1310	1538

对比优化前后的刻蚀仿真结果, 优化后的刻蚀结果的深度更接近于实际仿真结果. 而且在刻蚀宽度变小的时候, 仿真结果的深度也变小; 同时每个仿真结果的总体形状与实际刻蚀结果也比较符合.

4 结 论

本文提出一种基于刻蚀速率匹配的离子刻蚀产额建模方法,在方法中以模拟刻蚀速率相对于实际刻蚀速率之间的误差作为优化目标,并用基于分解的多目标进化算法来优化求取刻蚀产额模型参数,然后把优化后的参数应用到实际刻蚀仿真过程中.对比优化前后的刻蚀结果,优化后的沟槽深度更接近实际刻蚀结果,从而证明本文提出方法的有效性.本文方法尚未单独考虑中性粒子的作用,在以后的工作中,将进一步细化演化模型,获得更好的仿真结果.

参考文献

- [1] Wu J, Ma Z B, Shen W L, Yan L, Pan X, Wang J H 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 075202 (in Chinese)[吴俊, 马志斌, 沈武林, 严垒, 潘鑫, 汪建华 2013 物理学报 **62** 075202]
- [2] Levinson J A, Shaqfeh E S G, Balooch M, Hamza A V 2000 *J. Vac. Sci. Technol. B* **18** 172
- [3] Tuda M, Nishikawa K, Ono K 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 960
- [4] Osher S, Sethian J A 1988 *J. Comput. Phys.* **79** 12
- [5] Osher S, Fedkiw R P 2001 *J. Comput. Phys.* **169** 463
- [6] Kawai H 2008 *Ph. D. Dissertation* (Cambridge: Massachusetts Institute of Technology)
- [7] Saussac J, Margot J, Chaker M 2009 *J. Vac. Sci. Technol. A* **27** 130
- [8] Yang H J, Song Y X, Zheng S L, Jia P F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 208201 (in Chinese)[杨宏军, 宋亦旭, 郑树琳, 贾培发 2013 物理学报 **62** 208201]
- [9] Li Z, Xu G A, Ban X F, Zhang Y, Hu Z M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 200203 (in Chinese)[李钊, 徐国爱, 班晓芳, 张毅, 胡正名 2013 物理学报 **62** 200203]
- [10] 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]
- [11] Yong G, Huang H J, Xu Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 010506 (in Chinese)[永贵, 黄海军, 许岩 2013 物理学报 **62** 010506]
- [12] Chang J P, Arnold J C, Zau G C H, Shin H S, Sawin H H 1997 *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 1853
- [13] Gou F, Kleyn A W, Gleeson M A 2008 *Int. Rev. Phys. Chem.* **27** 229
- [14] 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]
- [15] Steinbruchel C 1989 *Appl. Phys. Lett.* **55** 1960
- [16] Osao Y, Ono K 2005 *Jpn. J. Appl. Phys.* **44** 8650
- [17] Yang H J, Song Y X, Zheng S L, Wang L H, Jia P F 2013 *Proc. 25th Chinese Control and Decision Conference* Guiyang, China, May 25–27, 2013 p2913
- [18] Liu H H, Liu Y H 2012 *Chin. Phys. B* **21** 026102
- [19] Liu J F 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2615
- [20] Zhang Q, Li H 2007 *IEEE Trans. Evolut. Comput.* **11** 712
- [21] Li H, Zhang Q 2009 *IEEE Trans. Evolut. Comput.* **12** 284
- [22] Chiaramonte L, Colombo R, Fazio G, Magna A L 2012 *Comp. Mater. Sci.* **54** 227

An optimization method for ion etching yield modeling based on etching velocity matching*

Gao Yang-Fu Song Yi-Xu[†] Sun Xiao-Min

(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)

(Received 20 August 2013; revised manuscript received 7 November 2013)

Abstract

With the constant development of the microelectronics industry, the etching scale has come up to nanoscale, which makes the plasma etching mechanism attract more and more attention. The profile surface simulation is one of the most significant technologies for the study of ion etching. In the process of ion etching surface simulation, the ion etching yield model serves as an important model for the study of etching mechanism as well as the basic foundation of some simulations such as cellular automata. In order to solve the problem that it is difficult to achieve accurate parameters of etching yield model by adopting the traditional method, the paper proposes an optimization method for ion etching yield modeling based on etching velocity matching. Aiming at reducing the mean square error between the simulated etching velocity and the real etching velocity, it optimizes the parameters of ion etching yield modeling by using the decomposition-based multi-object evolution algorithm, which then is applied to etching simulation process on the basis of cellular automata. And the validity of the proposed method was verified by the experimental results.

Keywords: etching yield model, etching velocity, multi-object evolution algorithm

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

DOI: [10.7498/aps.63.048201](https://doi.org/10.7498/aps.63.048201)

* 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: songyixu@163.com