

# 基于三维元胞模型的刻蚀工艺表面演化方法\*

郑树琳<sup>†</sup> 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, 北京 100084)

(2012年10月24日收到; 2012年12月13日收到修改稿)

为了更好地理解和认识刻蚀机理, 并为制造工艺提供优化指导, 采用三维元胞模型研究了刻蚀工艺的表面演化过程, 并着重探讨了离子对表面演化过程的影响. 针对刻蚀离子入射角度的求解问题, 提出了一种降维分量拟合方法, 将一个三维曲面拟合问题转化为两个二维曲线拟合进行求解, 对入射点的表面法向量计算实现了快速求解, 与采用最小二乘多项式曲面拟合求解离子入射角度相比, 其计算精度和效率都有较大的提高; 对用于拟合计算的表面元胞的选取方法进行了改进, 提高了拟合的准确度. 将这种方法应用到硅刻蚀工艺三维仿真中, 其模拟结果与相关实验结果对比, 验证了该方法对刻蚀工艺描述的有效性.

**关键词:** 刻蚀, 三维元胞模型, 表面演化算法, 降维分量拟合

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

**DOI:** 10.7498/aps.62.108201

## 1 引言

刻蚀不仅是集成电路制造中的重要工艺, 同时也是 MEMS 加工的重要手段<sup>[1]</sup>. 相对于传统的湿法刻蚀, 干法刻蚀中的等离子体增强刻蚀结合了化学反应与物理轰击, 同时具备高刻蚀选择比和非等向性的优点, 使其成为当前刻蚀工艺中最为广泛使用的方法之一<sup>[2]</sup>.

由于等离子体刻蚀涉及复杂的理化过程, 机理复杂, 对刻蚀过程的模拟成为更好地理解 and 认识刻蚀机理的重要手段<sup>[3]</sup>. 模拟刻蚀表面演化过程的仿真模型主要有以下四种: 线算法、射线算法、水平集方法和元胞模型. 线算法<sup>[4-6]</sup>的优点是表面演化直观, 运算速度快, 需要的内存少; 缺点是稳定性较差, 表面边界容易成环, 扩展到三维模型难度大. 射线算法<sup>[4]</sup>的优点是运算速度比较快, 需要的内存也比较少, 不必跟踪不同射线之间的联系, 可以将其应用到三维模型; 缺点是由于缺乏射线之间的联系, 刻蚀表面的重构比较困难, 并且初始射线选择不合适会导致某些区域不被模型覆盖. 水平集方法<sup>[7,8]</sup>是新兴的表面演化模型, 易于跟踪复杂表面的演化, 容易实现二维/三维模拟; 缺点是表面演化速

度场计算困难, 运算量比较大. 元胞模型<sup>[4,9,10]</sup>结构简单, 稳定性好, 易于从二维模型扩展到三维模型, 容易区分不同区域的材料属性, 并行性好; 缺点是内存需求量较大, 计算精度与运算时间的矛盾较突出. 元胞模型自产生以来, 已被广泛应用到各个领域, 例如物理学中枝晶生长的模拟<sup>[11]</sup>、应用于交通流的模拟<sup>[12]</sup>等. 在等离子体增强刻蚀仿真中, 需要充分考虑刻蚀离子对不同材料、不同轮廓的作用, 利用元胞模型建立相应的刻蚀模型, 可以很容易地对不同材料轮廓、属性进行划分, 因此也使元胞模型成为进行刻蚀工艺模拟的有效方法之一.

目前, 在基于元胞模型的刻蚀工艺仿真中, 主要集中于二维剖面的模拟<sup>[13,14]</sup>, 而对刻蚀对象的三维拓扑模拟主要基于无限长沟槽的规则模型, 并不考虑诸如拐角、圆孔等特殊形状, 无法真正满足三维仿真的要求. 另外, 刻蚀侧壁的粗糙度是三维空间特有的属性, 要考察诸如此类的属性信息, 只能通过三维仿真才能真正对它们进行建模<sup>[15]</sup>.

在基于元胞模型的刻蚀工艺仿真中, 刻蚀离子的入射角度对刻蚀量的计算影响很大, 是仿真中的重要参数, 不正确的角度计算会导致仿真精度出现很大误差<sup>[13,16,17]</sup>. 刻蚀离子的入射角度是离子的

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

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: zsl79831@foxmail.com

入射向量与入射点表面法向量的夹角, 需要通过求取入射点的表面法向量来获得入射角度, 并且该计算过程贯穿于整个仿真过程. 在二维剖面模拟中, 根据最小二乘法采取多项式曲线拟合方法获得离子的入射角度<sup>[13]</sup>. 在基于三维元胞模型的刻蚀工艺仿真中, 入射角度的计算方法是在二维基础上的扩展, 即将二维的曲线拟合转变为三维的曲面拟合进行求解<sup>[9]</sup>. 这种直接多项式曲面拟合求解法, 需要对多元方程组进行求解, 计算量比较大, 且拟合曲面不一定经过采样数据点, 拟合精度比较低, 还要小心处理病态方程组的求解问题. 因此在基于三维元胞模型的刻蚀工艺仿真中, 进一步提高角度计算的准确度和运算速度就显得尤为重要.

本文着重研究基于三维元胞模型的刻蚀工艺表面演化过程, 并提出了一种新的确定离子入射角度的方法, 即采用降维分量拟合方法将三维曲面拟合求解转化为两个二维曲线拟合再合成求解, 并对用于拟合计算的表面元胞的选取方法进行了改进. 为便于验证方法的合理性和有效性, 进行了求解结果准确度和运算速度的对比; 此外, 还将该方法应用到三维元胞模型的刻蚀工艺仿真中, 对算法性能实验以及工艺实验结果进行了对比.

## 2 模型与算法

### 2.1 建立三维刻蚀表面演化模型

在等离子体增强刻蚀中, 主要由离子对刻蚀晶片产生化学反应和物理轰击, 从而推进晶片的刻蚀过程. 图 1 所示是无限长沟槽刻蚀的二维示意图, 当离子流按照一定的角度分布方式输送到刻蚀表面时, 离子在刻蚀表面对刻蚀材料进行刻蚀, 或者发生反射输送到刻蚀表面的另一个地方而产生二次刻蚀. 一般来说, 离子对刻蚀表面的作用等效为刻蚀产额; 刻蚀产额就是单个离子入射到刻蚀表面发生刻蚀所刻掉的原子数, 其本质是描述离子对材料表面刻蚀作用的大小. 对于刻蚀产额的确定, 一般采用经验公式或者直接由试验获得, 并且主要与离子入射的能量、角度、腔室气压以及温度等因素有关. 例如, Osano 等<sup>[18]</sup> 针对 Cl 刻蚀 Si 给出了计算刻蚀产额的经验公式, 而 Kawai<sup>[9]</sup> 给出了如图 2 所示的刻蚀产额、反射概率与入射角度的依赖关系.

刻蚀表面演化模拟过程如图 3 所示. 首先采用表面演化方法建立刻蚀表面演化模型, 并进行相关

属性初始化. 离子在刻蚀凹槽内做匀速运动, 由于刻蚀腔室内气压较小, 假设离子间无碰撞. 当离子输送到刻蚀表面时, 首先要进行拟合计算求取入射点的表面法向量, 从而获得离子的入射角度; 再根据如图 2 所示的反射概率曲线进行行为判断, 也就是判断离子在刻蚀表面是发生了刻蚀还是反射; 然后根据刻蚀产额计算经验公式, 计算离子在入射点处的刻蚀产额, 从而修改演化模型的相关属性, 推进表面演化过程.

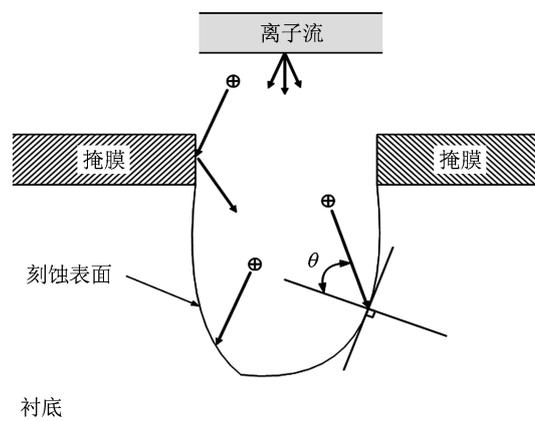


图 1 无限长沟槽刻蚀几何模型二维示意图

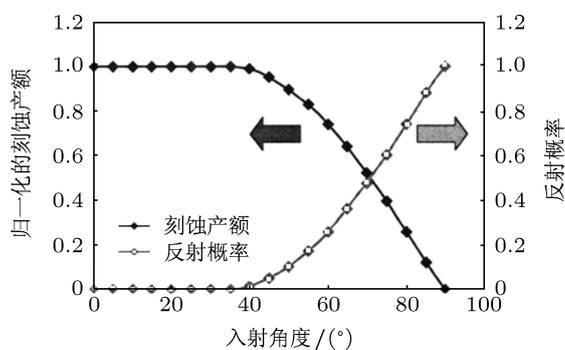


图 2 刻蚀产额、反射概率与入射角度的依赖关系<sup>[9]</sup>

元胞模型是一种时间、空间、状态都离散的动力学模型, 由有限个相同而分立的网格组成, 每个网格被称为一个“元胞”, 每个元胞具有一种或几种可能的状态, 它们在离散的时间进程中按规则演化<sup>[10]</sup>. 刻蚀模拟过程就是通过不断刻蚀掉位于表面的元胞, 使新的元胞又暴露到刻蚀表面, 从而使刻蚀继续进行. 这项技术的优点是可以很容易地处理拓扑结构发生的变化, 并可以扩展到三维. 此外, 基于元胞模型的方法可以跟踪表面的组成, 这对表

面演化过程进行表征和分析是很方便的.

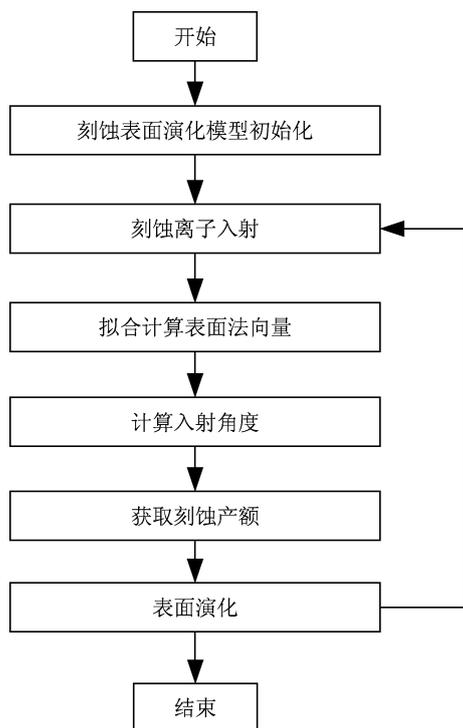


图3 刻蚀表面演化模拟过程

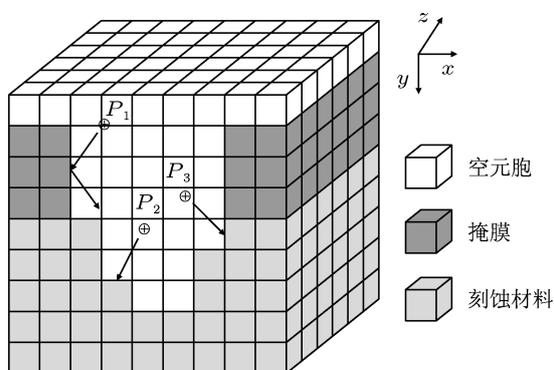


图4 三维刻蚀表面演化模型

利用元胞模型建立的三维刻蚀表面演化模型如图4所示,要模拟区域用边长为1的立方体分割成三维格子,每个三维格子即为一个元胞,并利用元胞不同的属性值区分刻蚀晶片的不同材料;白色格子代表已刻蚀掉的区域,称为空元胞;深灰色格子代表掩膜,浅灰色格子代表待刻蚀材料,统称为刻蚀元胞.模型采用 Neumann 邻域结构,由一个中心元胞和六个相邻元胞构成;当与刻蚀元胞相邻的6个元胞中至少有一个为空元胞时,该刻蚀元胞称为表面元胞.由于衬底的刻蚀是自顶而下的,因此在刻蚀模拟中,刻蚀离子从刻蚀模型的顶部(即为

$y = 0$  的平面)开始向衬底的表面元胞输送.

## 2.2 降维分量拟合方法

### 2.2.1 入射角度是仿真中的重要参数

在模拟过程中,离子的入射角度,如图1中所示的角度  $\theta$ , 是进行离子在刻蚀表面轰击行为(刻蚀或反射)判断的重要依据,同时许多研究也表明了刻蚀量的计算与离子的入射角度息息相关<sup>[19,20]</sup>. Kawai<sup>[9]</sup> 在其博士论文中也以较大篇幅讨论了刻蚀离子的入射角度对仿真结果的影响,同时给出了刻蚀产额、反射概率与入射角度的依赖关系,如图2所示.刻蚀离子以不同的初始角度分布输送到刻蚀表面,将在刻蚀表面上产生不同的入射角度, Saussac 等<sup>[13]</sup> 根据离子的不同初始角度分布讨论了入射角度对刻蚀结果的影响,从另一个侧面反映了不正确的入射角度计算会导致仿真精度出现很大的误差.

离子的入射角度是仿真的重要参数,而该入射角度是离子的入射向量与入射点表面法向量的夹角,需要通过求取入射点的表面法向量来获得入射角度,因此表面法向量的正确求取对于准确推进表面演化显得尤为重要.然而在基于元胞模型的刻蚀工艺仿真中,由于刻蚀模型被离散化为一系列的元胞,其刻蚀表面是由一系列方块组成的折面,表面的角度和曲率不能通过元胞很好地表示,使得表面法向量的求解存在困难.因此在刻蚀仿真中,当离子作用到刻蚀表面时,都需要进行拟合求取表面法向量、获取入射角度等操作,其中拟合求取表面法向量的运算量最大.由于离子数目很大,其流量超过  $10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ , 导致需要频繁地进行上述操作,因此优化求取表面法向量的方法是提高整个仿真效率的重要手段.

### 2.2.2 降维分量拟合方法

本方法首先根据刻蚀离子的入射方向选择两个切平面;分别在两个切平面上求得两个方向上的切向量;然后对这两个切向量采用向量叉积求得入射点的表面法向量,从而获得离子的入射角度.

#### 1) 切平面的选取

由于刻蚀模型是根据元胞模型建立的,整个模型按规则的网格进行划分,因此沿垂直坐标轴的方向选取切平面,可以最大限度地减少切平面上元胞选取的困难.在如图4所示的三维刻蚀模型中,当刻蚀离子  $P_2$  输送到刻蚀表面时,我们确定沿垂直  $Z$  轴和  $X$  轴的两个方向选取切平面,获得如图5(a)和

(b) 的两个切平面, 图中深灰色交叉线方格为入射元胞, 灰色斜线方格为用于拟合计算所选取的表面元胞. 此时, 在两个二维切平面上, 入射元胞都处于表面元胞的位置, 能够通过选取表面元胞进行拟合计算.

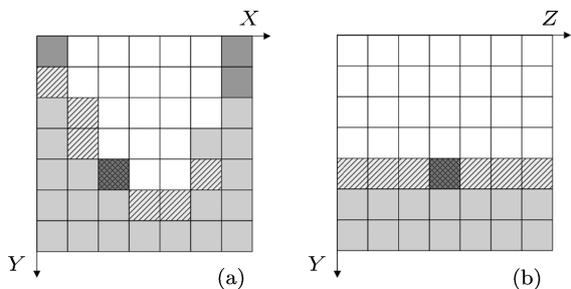


图5 切平面的选取 (a)垂直Z轴; (b)垂直X轴

当固定选择沿垂直X轴和Z轴的两个方向时, 对于绝大多数入射面可以有效地获得切平面, 并进行表面元胞的选取和拟合计算. 而当图4中的刻蚀离子 $P_3$ 输送到刻蚀表面时, 如果依然按沿垂直Z轴和X轴的两个方向选取切平面, 将获得图6(a)和(b)所示的切平面. 此时在图6(b)的二维切平面上, 入射元胞变成非表面元胞, 而无法进行拟合计算; 如果将沿垂直X轴的方向改为沿垂直Y轴的方向, 将获得如图6(c)所示的切平面, 此时入射元胞也相应地成为表面元胞, 从而可以进行拟合计算.

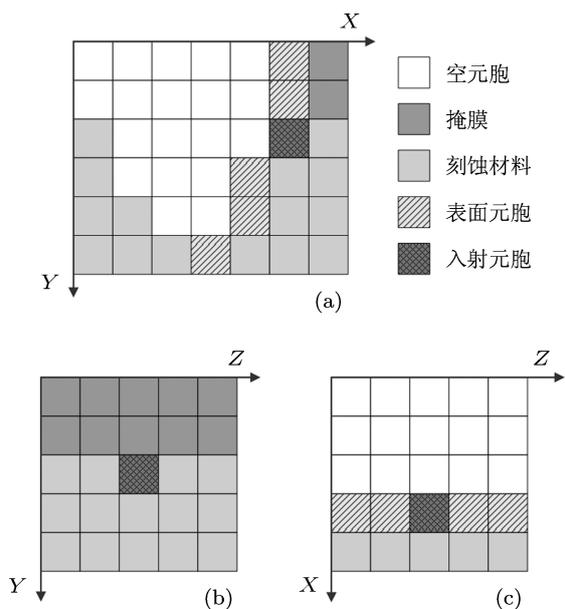


图6 切平面的选取 (a)垂直Z轴; (b)垂直X轴; (c)垂直Y轴

因此, 固定方向选取切平面并不是通用的. 通过比较可以看出, 只有图6(b)中的切平面与刻蚀离

子的入射面是平行的, 而其他切平面与入射面都是垂直的. 切平面的选取就是要确保入射元胞在二维的切平面上仍然是表面元胞, 而选取与入射面垂直的切平面可以保证这一先决条件.

### 2) 表面元胞的选取

在二维的切平面上, 准确地选取表面元胞是进行曲线拟合、计算法向量的前提, 也是提高入射角度计算准确度的必要条件. 固定半径搜索法<sup>[13]</sup>是以入射点为中心, 选取在搜索半径以内的表面元胞. 由于复杂的刻蚀过程导致模型具有不规则的表面, 固定半径搜索法可能选取非连续的表面元胞, 而导致拟合结果的偏差加大. 当刻蚀离子入射到图7(a)中的深灰色交叉线方格, 根据固定半径搜索法可以获得如图7(a)中所示灰色斜线方格的表面元胞. 显然所获得的表面元胞并没有真正反映入射点周围的曲线轮廓. 我们采取两端拓展搜索法可以获得如图7(b)中所示灰色斜线方格的表面元胞, 能够较好地反映入射点周围的曲线轮廓.

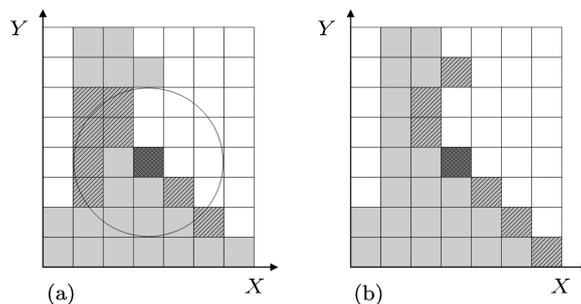


图7 表面元胞的选取 (a)固定半径搜索; (b)两端拓展搜索

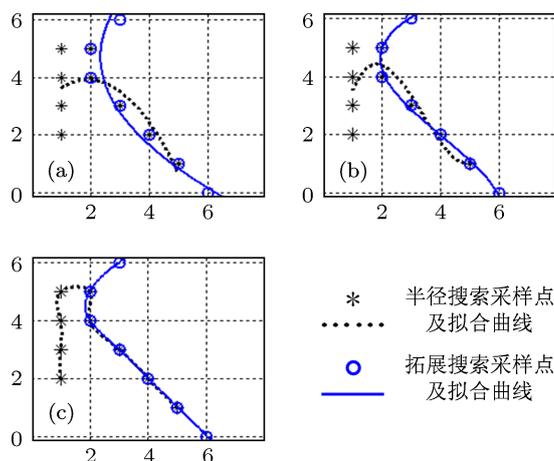


图8 拟合结果 (a)二次多项式; (b)三次多项式; (c)三次样条插值

利用 Matlab 绘制了这两种不同表面元胞选取方法的拟合结果, 如图8所示. 图8(a)和8(b)中分别为采用最小二乘法进行二次多项式和三次多项

式曲线拟合的结果对比, 图 8(c) 为三次样条插值结果对比; 虚曲线为固定半径搜索法选取表面元胞进行拟合的结果, 实曲线为两端拓展搜索法选取表面元胞进行拟合的结果. 从拟合的结果可以看出, 用两端拓展搜索法获得的拟合曲线能够更好地反映入射点周围的曲线轮廓.

### 3) 拟合方法

从三维刻蚀模型中选取了两个切平面后, 问题的求解也从在三维空间上的曲面拟合转化为在二维平面上的曲线拟合. 在二维平面中, 对图 8 中拟合的三条实曲线进行对比, 三次样条插值结果优于其他两个拟合结果, 因此对表面元胞的曲线拟合方法采用三次样条插值方法. 在刻蚀表面演化过程中, 邻近区域的表面元胞在同一坐标轴方向上被刻蚀掉原子的数量是相近的, 因此邻近区域的表面元胞在同一坐标轴方向上的坐标值也是相近的. 在三次样条插值方法中, 要求其中至少有一维的坐标值是互不相等的. 当选取邻近区域的表面元胞进行插值计算时, 表面元胞在两个坐标轴方向上的坐标值可能都不能满足该条件; 即使能够满足该条件, 但是其坐标值之间比较接近, 会导致插值结果产生较大的振荡. 对于如图 9 所示的切平面, 我们获得用于插值计算的表面元胞的坐标值如表 1 所示, 直接使用三次样条插值方法进行计算, 得到的插值曲线如图 10 所示.

表 1 采样数据点

序号	1	2	3	4	5	6	7	8
$x$	0	1	1.01	2	3	4	5	6
$y$	7	6	5	4	3	2.01	2	1

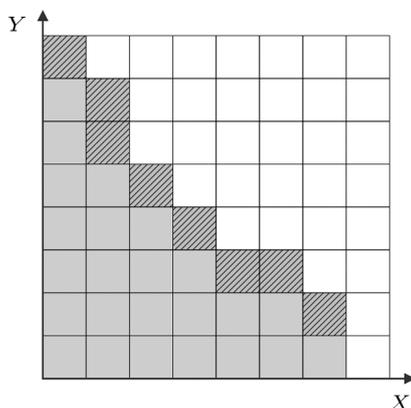


图 9 切平面示意图

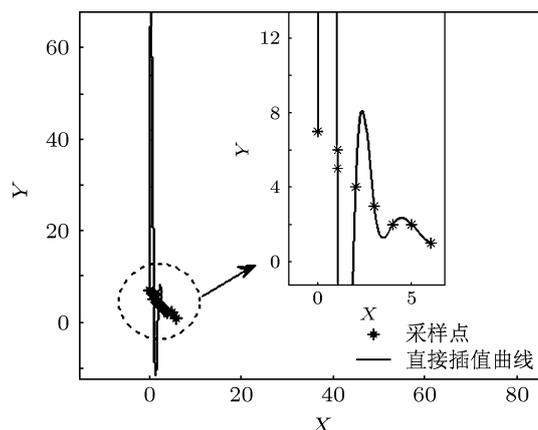


图 10 直接插值曲线, 插图为曲线的局部放大图

从图 10 可以看出, 虽然  $X$  轴和  $Y$  轴的坐标值各不相同, 但是由于存在两个坐标值过于接近, 导致插值曲线产生剧烈振荡而不能真正反映刻蚀表面的轮廓. 因此, 我们引入一个参数  $t$ , 将求解方程转化为参数方程组进行求解, 如 (1) 式所示; 将采样数据点也按表 2 做相应的变换, 其中  $t_0 = 0, t_1 = 1, \dots, t_n = n$ . 此时, 参数  $t$  是各不相同的值, 因此参数方程组中  $x$  和  $y$  分别相对于  $t$  进行三次样条插值, 可以获得入射点  $P_e(x_e, y_e)$  所在区间的插值曲线方程组, 如 (2) 式所示. 再根据 (3) 式, 可以获得拟合曲线在入射点处的切向量  $\alpha = \left( \frac{\partial x}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial t} \right)_{x_e, y_e} = \left( 1, \frac{b_2}{b_1} \right)$ . 而后根据切平面在三维空间中的位置将该二维切向量转化为三维空间向量. 图 11 所示是改进的参数方程组进行求解而获得的曲线, 与刻蚀表面的轮廓相近.

$$y = f(x) \rightarrow \begin{cases} x = X(t) \\ y = Y(t) \end{cases}, \quad (1)$$

$$\begin{cases} x_e = a_1 + b_1(t - t_e) + c_1(t - t_e)^2 + d_1(t - t_e)^3, \\ y_e = a_2 + b_2(t - t_e) + c_2(t - t_e)^2 + d_2(t - t_e)^3, \end{cases} \quad (2)$$

$$\frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x_e} = \frac{\partial y}{\partial t} \Big|_{t_e} / \frac{\partial x}{\partial t} \Big|_{t_e} = \frac{b_2}{b_1}. \quad (3)$$

表 2 采样数据点

序号	1	2	...	$n$
$t$	$t_0$	$t_1$	...	$t_n$
$x$	$x_0$	$x_1$	...	$x_n$
$y$	$y_0$	$y_1$	...	$y_n$

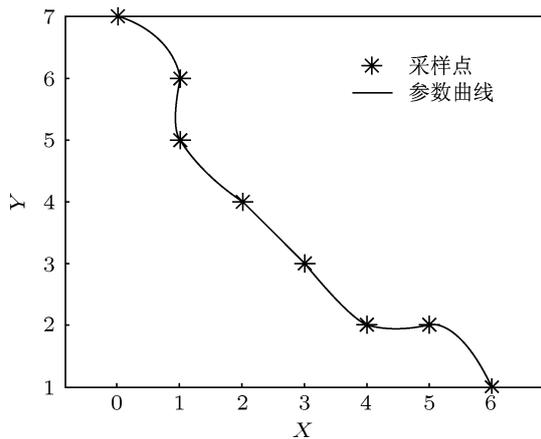


图 11 参数曲线

4) 计算入射角度

根据前面几个步骤的拟合计算, 可以获得入射点在两个切平面上各自的切向量  $\alpha = (x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha)$  和  $\beta = (x_\beta, y_\beta, z_\beta)$ , 而与这两个切向量垂直的向量即为入射点的表面法向量, 因此根据 (4) 式可求得入射点的表面法向量  $\gamma(x_n, y_n, z_n)$ ; 然后根据该表面法向量和刻蚀离子的入射向量  $V(x_v, y_v, z_v)$ , 按 (5) 式求得离子的入射角度  $\theta$ .

$$\gamma(x_n, y_n, z_n) = \alpha \times \beta = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x_\alpha & y_\alpha & z_\alpha \\ x_\beta & y_\beta & z_\beta \end{vmatrix}, \quad (4)$$

$$\theta = \cos^{-1} \left( \frac{x_v * x_n + y_v * y_n + z_v * z_n}{\sqrt{x_v^2 + y_v^2 + z_v^2} * \sqrt{x_n^2 + y_n^2 + z_n^2}} \right). \quad (5)$$

3 实验结果与讨论

3.1 入射角度计算的精度与效率比较

在基于元胞模型的刻蚀工艺仿真中, 离子入射角度的计算方法之一是采用最小二乘多项式拟合方法求解, 因此本文提出的降维分量拟合方法选择与最小二乘二次多项式拟合方法、最小二乘三次多项式拟合方法进行对比, 主要从计算的精度和效率两方面进行比较.

计算精度采用如下方法进行比较: 假设有一个光滑的曲面函数  $z = f(x, y)$ , 已知向量  $V(x_v, y_v, z_v)$  与曲面相交于点  $P(x_0, y_0, z_0)$ ; 通过求取该点处的法向量  $\gamma(x_n, y_n, z_n)$ , 可以获得向量  $V$  与法向量  $\gamma$  之间的夹角  $\theta_0$ ; 然后利用三种拟合方法分别对曲面进行数据采样、拟合/插值、求取表面法向量, 从而获

得夹角  $\theta_s$  (由降维分量拟合方法获得)、 $\theta_2$  (由最小二乘二次多项式拟合方法获得) 和  $\theta_3$  (最小二乘三次多项式拟合方法获得), 最后与  $\theta_0$  进行比较. 选择下面所列出的曲面方程, 入射向量为  $V(2, 8, 1)$ , 与曲面相交于点  $P(3, 3, z)$ ,  $z$  分别为各方程在  $x = 3$  和  $y = 3$  时获得的数值. 用于对比的曲面方程如 (6) 式所示, 四种方法的计算结果对比如图 12 所示, 纵坐标为角度 (单位为弧度).

$$\begin{aligned} z_1 &= 5 + 2x - 3y - 4x^2 - 3y^2, \\ z_2 &= 7 - 5y - 13x^2 - 9xy + 6y^2 + 2x^3 - 3y^3, \\ z_3 &= 43 - 4x - 23x^2 + 19xy^2 - 37xy + 16y^2 \\ &\quad + 3x^4 - 5y^4, \\ z_4 &= -20 - 14\cos(x) - 3x^2\sin(y) + 9x\cos(y)^2 \\ &\quad - 37xy, \\ z_5 &= 71 - 3xy^3 - 23x^2y^3 + 19xy^3 - 37xy + 16y^2 \\ &\quad + 7x^4y - 6y^5. \end{aligned} \quad (6)$$

从图 12 的对比结果可以看出, 对于曲面方程为不含有三角函数的普通多项式, 且最高次方数小于拟合多项式的最高次方数, 利用最小二乘法进行多项式拟合的结果比较接近实际结果; 反之, 拟合结果就会偏差比较大, 尤其是用二次多项式拟合的结果偏差更明显 (最大偏差  $4.81^\circ$ ). 而本文提出的降维分量拟合方法, 其拟合结果受这两个条件的影响比较小, 与精确角度都比较接近 (最大偏差  $0.26^\circ$ , 与三次多项式拟合的最大偏差相当).

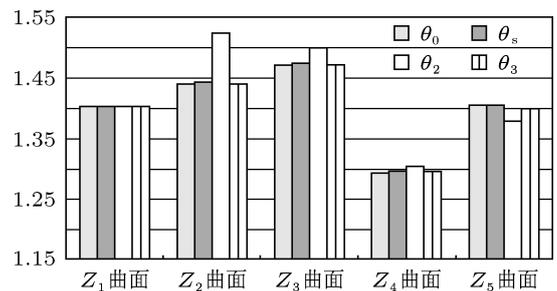


图 12 计算精度对比示意图

计算效率的对比采用如下方式: 对同一个采样数据集, 分别利用这三种方法进行多次拟合求取夹角的操作, 统计各自所耗费的时间. 图 13 是对同一个三维的数据集进行多次拟合求取夹角操作的时间对比, 时间单位为秒. 从图中可以明显地看出, 本文采用的降维分量拟合方法相较最小二乘法多项式拟合, 其运算速度有较大的提高. 虽然三次多项

式拟合精度有所提高,但其运算速度也下降很快.

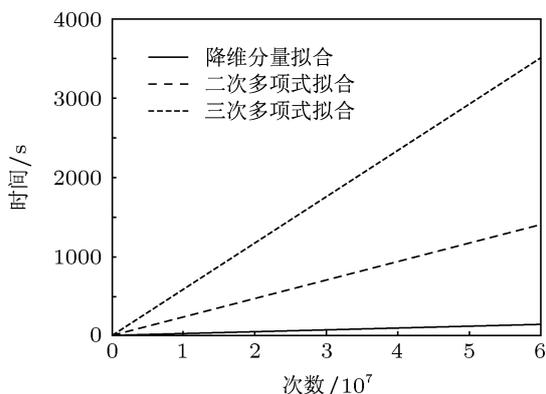


图 13 计算效率对比示意图

### 3.2 在刻蚀工艺仿真中的应用

将本文所提出的降维分量拟合方法应用到三维元胞模型的刻蚀工艺仿真过程中,我们建立一个  $4\ \mu\text{m} \times 4\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$  的三维元胞模型,其中沟槽

宽  $2\ \mu\text{m}$ , 掩膜厚  $1\ \mu\text{m}$ , 元胞尺寸为  $10\ \text{nm}$ ; 刻蚀离子的入射流量为  $9.812 \times 10^{14}\ \text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ , 垂直方向的入射角度按正态分布, 其半峰全宽 (full width half maximum, FWHM) 为  $2^\circ$ ; 刻蚀产额、反射概率与入射角度的依赖关系如图 2 所示, 假设刻蚀离子不对掩膜进行刻蚀. 最终得到的仿真结果如图 14(a) 所示, 其二维剖面轮廓与 Saussac 等<sup>[13]</sup> 的二维仿真结果 (如图 14(b) 所示) 较为一致.

为了更进一步验证本文刻蚀表面演化方法的有效性, 我们利用一台 Oxford 100 型刻蚀机进行了刻蚀实验, 刻蚀结果的扫描电子显微镜 (SEM) 照片如图 15(a) 所示, 根据刻蚀机腔室的几何尺寸、输入的气体类型 (Cl/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, 利用本文的刻蚀表面演化方法, 获得了如图 15(b) 所示的仿真结果, 其坐标精度为  $10\ \text{nm}$ , 与实际工艺的刻蚀结果较为一致, 表明该三维表面演化方法对刻蚀表面描述的良好效果.

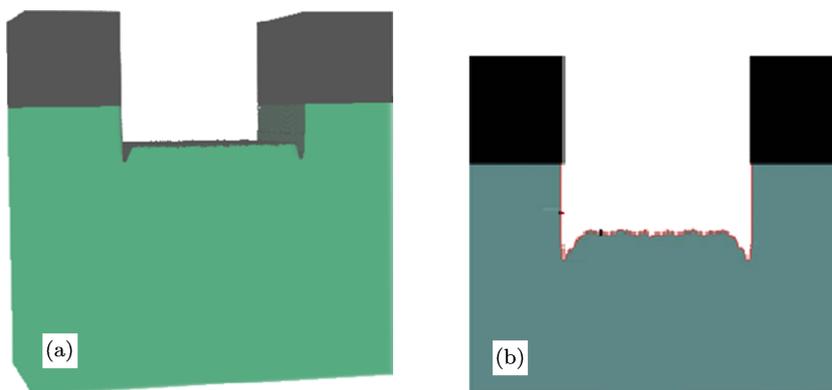


图 14 结果对比 (a) 三维仿真结果; (b) Saussac 等的二维仿真结果<sup>[13]</sup>

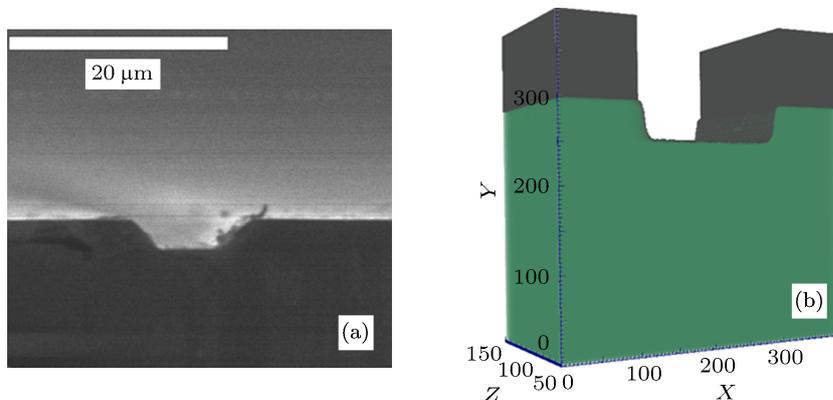


图 15 结果对比 (a) SEM 照片; (b) 三维仿真结果

## 4 结论

本文基于三维元胞模型研究了刻蚀工艺的表面演化过程, 并着重探讨了离子对表面演化过程的影响; 针对刻蚀离子入射角度的求解问题, 提出了降维分量拟合的方法. 本方法不同于通常的直接曲面拟合求解方法, 它将三维曲面拟合问题转化为两

个二维曲线拟合进行求解, 降低了计算复杂度, 实现了刻蚀离子入射角度的快速求解; 并且与通常采用最小二乘多项式曲面拟合求解离子入射角度进行了实验对比, 在计算准确度和运算速度两方面都有较大的提高. 将本方法应用到刻蚀工艺三维仿真中, 并将模拟结果与相关实验结果进行对比, 验证了该方法对刻蚀工艺描述的有效性.

- [1] Wang Y Y, Wu G Y, Hao Y L, Zhang D C, Xiao Z X, Li T, Zhang G B, Zhang J W 2002 *Chin. J. Electron.* **30** 1577 (in Chinese) [王阳元, 武国英, 郝一龙, 张大成, 肖志雄, 李婷, 张国炳, 张锦文 2002 电子学报 **30** 1577]
- [2] 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]
- [3] Zhou Z F, Huang Q A, Li W H, Lu W 2007 *Sci. China* **37** 32 (in Chinese) [周再发, 黄庆安, 李伟华, 卢伟 2007 中国科学 **37** 32]
- [4] Toh K K H, Neureuther A R, Scheckler E W 1994 *IEEE Trans. Comput.-Aided Design Integr. Circuits Syst.* **13** 616
- [5] Zhang J, Qi H C, Xu D L, Hu Z W 2011 *Chin. J. Electron.* **39** 1869 (in Chinese) [张鉴, 戚昊琛, 徐栋梁, 胡智文 2011 电子学报 **39** 1869]
- [6] Jewett R E, Hagouel P I, Neureuther A R, van Duzer T 1977 *Polym. Eng. Sci.* **17** 381
- [7] Osher S, Sethian J A 1988 *J. Comput. Phys.* **79** 12
- [8] Osher S, Fedkiw R P 2001 *J. Comput. Phys.* **169** 463
- [9] Kawai H 2008 *Ph. D. Dissertation* (Cambridge: Massachusetts Institute of Technology)
- [10] Zhou Z F 2009 *Ph. D. Dissertation* (Nanjing: Southeast University) (in Chinese) [周再发 2009 博士学位论文 (南京: 东南大学)]
- [11] 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]
- [12] Xue Y, Dong L Y, Dai S Q 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 445 (in Chinese) [薛郁, 董力耘, 戴世强 2001 物理学报 **50** 445]
- [13] Saussac J, Margot J, Chaker M 2009 *J. Vac. Sci. Technol. A* **27** 130
- [14] Dai Z L, Yue G, Wang Y N 2011 *Curr. Appl. Phys.* **11** S121
- [15] Guo W, Sawin H H 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 194014
- [16] Chang J P, Arnold J C, Zau G C H, Shin H S, Sawin H H 1997 *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 1853
- [17] Chang J P, Mahorowala A P, Sawin H H 1998 *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** 217
- [18] Osano Y, Ono K 2005 *Jpn. J. Appl. Phys.* **44** 8650
- [19] Vitale S A, Chae H, Sawin H H 2001 *J. Vac. Sci. Technol. A* **19** 2197
- [20] Chang J P, Sawin H H 1997 *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 610

# A three-dimensional surface evolution algorithm based on cellular model for etching process\*

Zheng Shu-Lin<sup>†</sup> Song Yi-Xu Sun Xiao-Min

(Department of Computer Science and Technology, Tsinghua University, State Key Laboratory of Intelligent Technology and Systems, Beijing 100084, China)

(Received 24 October 2012; revised manuscript received 13 December 2012)

## Abstract

In order to get a better understanding of etching mechanism and provide optimization guidance for manufacturing process, a three-dimensional (3D) profile evolution simulator based on cellular model is developed to investigate the surface evolution of etching process, and discuss emphatically the effect of ions on the surface evolution. According to the solving problem for angle of ion incidence, a component fitting-based dimension reduction method is presented to convert a 3D surface fitting problem into a two-dimensional (2D) curve fitting problem, and achieve fast solution for the surface normal vector of the incident point. Compared with least squares polynomial fitting method, this method improves computational accuracy and efficiency of the ion incidence angle. The improvement on the accuracy of fitting is achieved by improving the selection method of surface cellular for fitting. The fitting method is applied to 3D simulation of silicon etching process, and the simulation results verify the simulated surface by comparing with relevant experimental results.

**Keywords:** etching, three-dimensional cellular model, surface evolution algorithm, component fitting-based dimension reduction method

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

**DOI:** 10.7498/aps.62.108201

---

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

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: zsl79831@foxmail.com