

离子刻蚀工艺表面演化仿真的三维元胞模型^①郑树琳^② 宋亦旭^③ 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)

摘 要 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离子刻蚀工艺的表面演化过程。针对三维元胞模型内存使用量大,采用了静态数组和动态双向链表相结合的方式进行信息存储;提出了边界时间最短优先移动法,改进了刻蚀离子入射轨迹计算量大的问题;通过一种降维分量拟合方法实现了刻蚀离子入射角度的快速求解,并重点对用于拟合计算的表面元胞的选取方法进行了改进,提出了滚轮搜索法,提高了拟合的准确度。将该模型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,验证了该模型对刻蚀工艺描述的有效性。

关键字 离子刻蚀,三维元胞模型,边界时间最短优先移动法,滚轮搜索法

0 引 言

刻蚀不仅是集成电路制造中的重要工艺,同时也是微机电系统(MEMS)加工的重要手段^[1]。由于刻蚀涉及复杂的理化过程,因而对刻蚀过程的模拟则成为更好地理解 and 认识刻蚀机理的重要手段^[2]。目前用于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^[3-5]、射线算法^[3]、水平集方法^[6,7]和元胞模型^[3,8-10]。元胞模型相对于其他三种方法,虽然存在内存需求量较大和计算精度与运算时间的矛盾较突出的缺点,但它的优势也是明显的:结构简单,稳定性好,易于从二维模型扩展到三维模型,并且更容易区分不同区域的材料属性,具有天然的并行性。在离子增强刻蚀仿真中,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。

目前基于元胞模型的刻蚀工艺仿真主要集中于二维剖面的模拟^[11,12],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^[13]。在离子刻蚀工艺仿真中,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^[11,14,15]。同时对离子入射轨迹的正确模拟,是准确找到离子入射点的前提,也是正确计算入射角度的必要条件。离子的入射角度通常采用最小二乘法进行多项式拟合获得^[8,11],然而这种直接多项式拟合求解法,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。由于仿真中需要模拟大量的离子入射,需要频繁进行入射轨迹计算和入射角度的求取,这两项计算量占了整个仿真过程的绝大部分计算时间,因此在离子刻蚀工艺仿真中,进一步提高这两部分的运算效率和计算精度就显得尤为重要。本研究着重探索基于三维元胞模型的离子刻蚀工艺表面演化过程,通过采用静态数组和动态双向链表相结合的方式进行信息存储,减少模型的内存使用量。为了提高仿真的运算效率及计算精度,分别对离子入射轨迹和入射角度的计算方法进行了改进,并对求解结果准确度和运算速度进行了对比,以验证方法的

① 国家科技重大专项(2011ZX2403-002)资助项目。

② 男,1979年生,硕士;研究方向:计算机应用技术;E-mail:zsl79831@foxmail.com

③ 通讯作者,E-mail:songyixu@163.com

(收稿日期:2012-12-11)

合理性和有效性,此外,还将该模型应用到刻蚀工艺仿真中,对算法性能实验以及工艺实验结果进行了对比。

1 模型与算法

1.1 刻蚀表面演化过程

在离子刻蚀中,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。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所刻蚀掉的原子数,其本质是描述离子对材料表面刻蚀作用的大小。图1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。

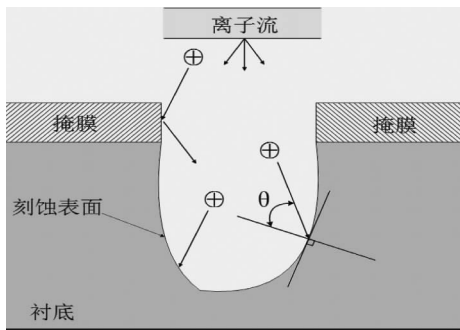


图1 无限长沟槽刻蚀几何模型二维示意图

刻蚀表面演化模拟过程如图2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。当离子输送到刻蚀表面时,首先要

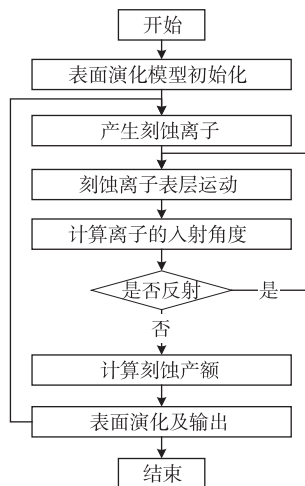


图2 刻蚀表面演化模拟过程

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;再根据反射概率曲线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。

1.2 建立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3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,材质属性值为“0”;深灰色格子代表掩膜,材质属性值用“2”表示,浅灰色格子代表待刻蚀材料,材质属性值用“1”表示,两者统称为刻蚀元胞。模型采用 Von Neumann 邻域结构,由1个中心元胞和6个相邻元胞构成;当与刻蚀元胞相邻的6个元胞中至少有1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。

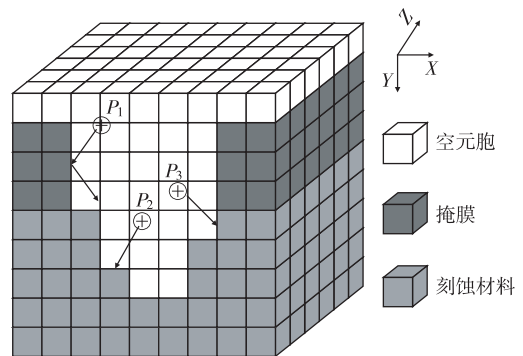


图3 三维刻蚀表面演化模型

在三维刻蚀表面演化模型中,表面元胞将可能受到来自6个方向的刻蚀,我们分别记录每个元胞在6个方向上被刻蚀掉的原子数,当表面元胞被选取用于表面拟合时,元胞的表面坐标不再统一用边界的整数数值表示,而是根据各方向的刻蚀量采用浮点数表示,从而提高刻蚀表面的拟合精度。这样每个元胞需要存储的信息包括材质属性值和刻蚀信息,刻蚀信息包括该元胞当前包含原子数、各方向的刻蚀量以及6个相邻元胞的状态信息。如果直接采用三维数组进行信息存储,随着三维元胞数量的增多,所需的存储空间将急剧膨胀。由于刻蚀只发生在表面,在进行表面演化的过程中,非表面元胞并未

受到影响,因此这些非表面元胞并不需要存储相关的刻蚀信息。为了减少内存的使用量,我们采用三维静态数组和动态双向链表相结合实现整个模型的信息存储,三维静态数组只存储每个元胞的材质信息和指向双向链表的指针,双向链表只用于存储每个表面元胞的刻蚀信息。

当对三维刻蚀表面演化模型进行初始化时,根据沟槽的形状设置三维静态数组中每个数组单元的材质属性值,当三维数组指向的元胞为表面元胞时,则申请一个刻蚀信息存储体,将其加入到双向链表尾部,同时将数组单元中的指针指向该链表位置;若不为表面元胞,则将数组单元中的指针置为空。在刻蚀过程中,当一个表面元胞被刻蚀掉时,将该元胞数组单元中指针所指向的刻蚀信息存储体移至链表的尾部,作为待使用的存储体,而后将指针置空。同时由于表面元胞被刻蚀掉,导致产生新的表面元胞,需要为新的表面元胞申请刻蚀信息存储体,首先是查看链表中是否有待使用的存储体,有则将数组单元中的指针指向该存储体,并更新链表信息;没有则按初始化操作步骤申请新的刻蚀信息存储体。通过使用该存储方式,对于一个 $400 \times 400 \times 200$ 的三维模型,所需的存储空间将从原来的 960MB 降到 166MB 左右。

1.3 刻蚀离子的入射过程

在离子增强刻蚀仿真中,表面演化过程是通过刻蚀离子对刻蚀表面的溅射作用来实现的,因此需要通过对刻蚀离子在刻蚀凹槽内运动轨迹的模拟,从而找到离子在刻蚀表面的作用点,即入射元胞。由于未考虑电场的影响,离子在刻蚀凹槽内作匀速运动,通常采用等时间步长推进离子的入射过程^[16,17],但是由于离子每步前进的距离是固定的,这对于入射元胞的选取将存在错误的风险。如图 4 所示,当离子运动到点 A_1 时,按等时间步长该离子下一步将运动到点 A_2 ,而点 A_2 所在元胞为空,该离

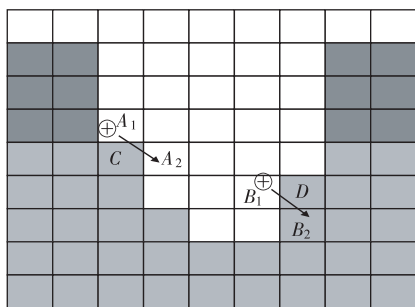


图 4 刻蚀离子入射元胞的选择

子将继续运动,而实际上该离子应该入射到元胞 C ;对于运动到点 B_1 的另一离子,按等时间步长推进的话,该离子的入射元胞将是点 B_2 所在的元胞,而非实际先撞击到的元胞 D 。

对于上述情况,一种减少错误风险的办法是尽量缩短推进的等时间步长,但是这并不能真正规避这种错误的风险,同时会导致入射轨迹计算量的急剧增大。假设离子经过的前后两个元胞单元分别为 $C_1(x_1, y_1, z_1)$ 和 $C_2(x_2, y_2, z_2)$, 元胞单元的坐标值是指元胞在三维数组中的单元指示值,都为整数数值。当其坐标值不满足公式

$$|x_1 - x_2| + |y_1 - y_2| + |z_1 - z_2| \leq 1 \quad (1)$$

时,可以断定在这运动过程中离子至少穿过了一个元胞。因此为了保证每步前进至多经过一个元胞,只能有一维坐标值发生变化,且至多相差 1。

为了满足公式(1),我们设计了边界时间最短优先移动法,具体操作如下:

(1) 找出到达元胞边界时间最短的方向:如图 5 所示,当前离子 P 运动到的元胞 C_0 内,该元胞在三维数组中的存储单元为 $C_0(x_0, y_0, z_0)$ 。根据各维方向上的速度分量 v_x 、 v_y 、 v_z , 计算出离子前进到该元胞各维方向上的边界所需的时间 t_1 、 t_2 、 t_3 , 并对这 3 个时间进行排序,假设排序结果为 $t_1 < t_2 < t_3$ 。

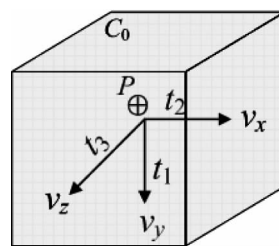


图 5 到各维边界的时间示意图

(2) 离子在 t_2 时间内前进:如图 6 所示,其中点 P_0 为离子在二维平面中的投影,在 t_2 时间内 X 轴方

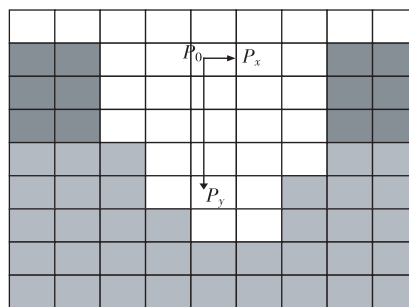


图 6 边界时间最短优先移动

向上前进的距离 $\overrightarrow{P_0P_x} = v_x \times t_2$, Y 轴方向上前进的距离 $\overrightarrow{P_0P_y} = v_y \times t_2$ 。由于 Z 轴方向上到达边界的时间大于 t_2 , 所以在 t_2 时间内, 离子经过的元胞单元的坐标值在 X 轴和 Z 轴方向上不会发生变化, 只有在 Y 轴方向上发生了变化;

(3) 寻找入射的表面元胞: 由于只有 Y 轴方向上的坐标值发生变化, 每次将 Y 轴的坐标值前进一个元胞单元, 并确保前进距离之和小于 $\overrightarrow{P_0P_y}$ 。同时每经过一个元胞就判断其是否为表面元胞。若是表面元胞, 即离子到达刻蚀表面, 结束离子的入射运动, 进入轰击行为的处理。若没有入射到表面元胞, 则将离子的各维浮点坐标值按各自的速度分量前进 t_2 的时间, 然后返回步骤(1), 继续寻找入射的表面元胞。

1.4 计算离子的入射角度

在模拟过程中, 离子的入射角度, 如图 1 中所示的角度 θ , 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^[11,14,15], 入射角度是仿真中的重要参数。离子的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 $10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, 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。

本文针对表面法向量的求解问题, 提出了一种降维分量拟合方法, 即将一个三维曲面拟合问题转化为两个二维曲线拟合再合成进行求解。本方法首先根据刻蚀离子的入射方向选择两个与入射面垂直的切平面; 然后分别在两个切平面上选取入射点周围的表面元胞, 将其位置坐标作为数据采样点采用二维曲线拟合方法进行拟合计算, 进而求得入射点在两个坐标轴方向上的切向量; 最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, 从而获得刻蚀离子的入射角度。

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^[11]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。当刻蚀离子的入射元胞为图 7 中的交叉线方格, 根据固定半径搜索法可以获得如图 7 中所示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应入射点周围的曲线轮廓。

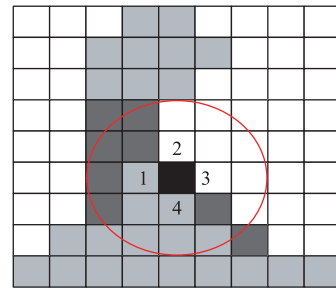


图 7 固定半径搜索法选取表面元胞

在本文中, 我们设计了一种滚轮搜索法, 即从入射元胞的入射边分别向两端, 像滚轮一样沿着表面边界前进, 按顺序选取遇到的每个表面元胞。在建立三维刻蚀表面演化模型时, 将每个元胞的 6 个面分别从 1 到 6 进行标号(对应关系为 1: 左面; 2: 上面; 3: 右面; 4: 下面; 5: 前面; 6: 后面), 在记录表面元胞的刻蚀信息时分别记录每个面所对的相邻元胞是否为空。在垂直 Z 轴的切平面上, 每个元胞的边界编号分别是 1、2、3、4, 如图 7 所示。我们在垂直 Z 轴的切平面上讲解本方法的搜索过程, 如图 8 所示, 分别为各边按坐标轴正/负方向前进搜索的状态分类, 具体实施如下: 当滚轮沿 1 号边前进可以分为三种情况, 如图 8(1a)(1b)(1c) 所示, 图中交叉线方格为当前滚轮所在元胞, 斜线方格为按负方向前进选取的表面元胞, 竖线方格为按正方向前进选取的表面元胞。在(1a)图中将滚轮前进到选取的表面元胞的 1 号边, 并继续针对 1 号边的搜索; 在(1b)图中, 根据前进方向正/负, 将滚轮前进到选取的表面元胞的 2/4 号边, 将前进方向改为负/正方向并转到针对 2/4 号边的搜索; 在(1c)图中, 根据前进方向正/负, 将滚轮前进到当前元胞的 4/2 号边, 将前进方向改为正方向并转到针对 4/2 号边的搜索。对于其他边的搜索过程与针对 1 号边的搜索相似。使用该滚轮搜索法, 可以获得如图 9 中所示的表面元胞, 能够较好地反应入射点周围的曲线轮廓。

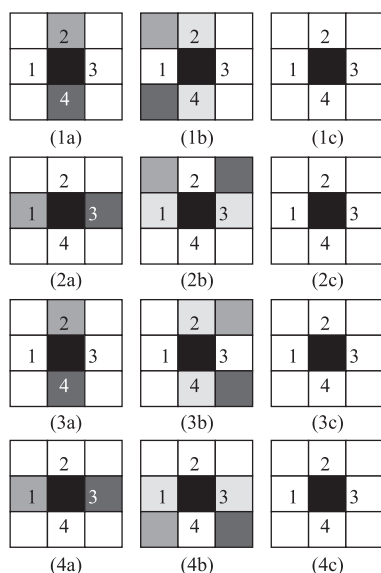


图 8 各条边的 3 种搜索状态分类

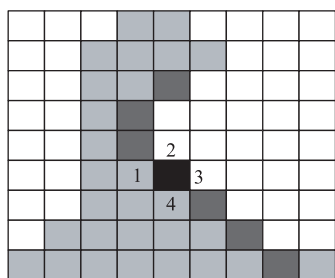


图 9 滚轮搜索法选取表面元胞

2 算法效率对比

2.1 离子入射轨迹的计算效率

在实验中,我们进行了本文设计的边界时间最短优先移动法与等步长时间法的离子入射轨迹计算效率的对比。离子的入射速度统一为 1,采用正态分布产生初始的入射方向,等步长时间法采用的步长时间为 0.5。如图 10 所示为两种方法的计算效率对比。

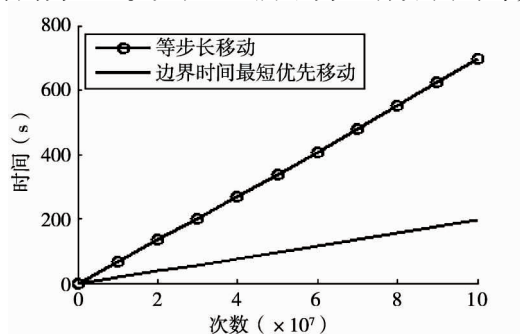


图 10 入射轨迹计算效率对比

率对比示意图,从图中可以看出本文提出的方法在计算效率方法明显优于等步长时间法。并且边界时间最短优先移动法的计算时间增长趋势更加平缓,使得其不会随着槽的加深而使计算量急剧增大,这对于深槽刻蚀的仿真有重要意义。

2.2 入射角度的计算精度与计算效率

我们选择了 5 个曲面方程用于计算精度的比较,假设入射向量为 $\alpha(2,8,1)$,与各曲面相交于点 $P(3,3,z)$, z 分别为各方程在 $x=3$ 和 $y=3$ 时获得的数值。通过数值计算方法获得精确的入射角度 θ_0 ;再通过数据采样,分别利用 3 种拟合方法:降维分量拟合方法、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,各自获得入射角度 θ_s 、 θ_2 和 θ_3 ;4 个入射角度的对比如图 11 所示,纵坐标为角度(单位为弧度)。

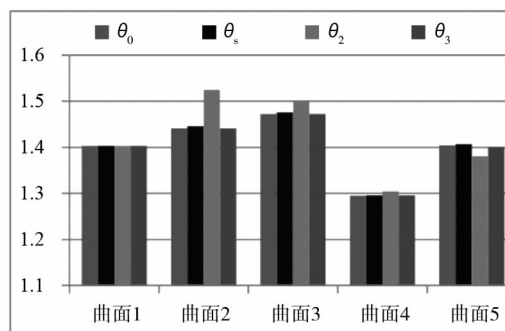


图 11 计算精度对比示意图

从图 11 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°)。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° ,与三次多项式拟合的最大偏差相当)。

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 12 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。

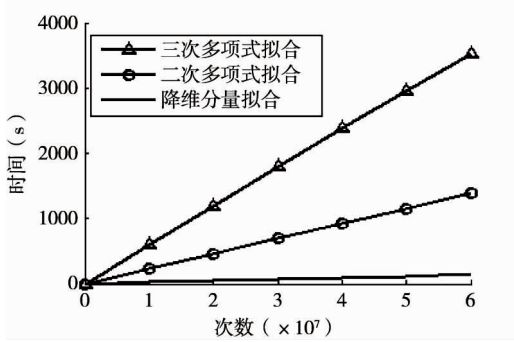


图 12 计算效率对比示意图

10nm,与实际工艺的刻蚀结果比较一致,表明该三维表面演化方法对刻蚀表面描述的良好效果。

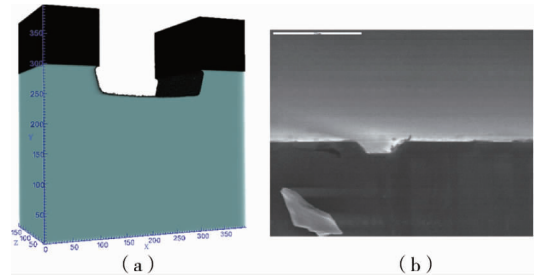
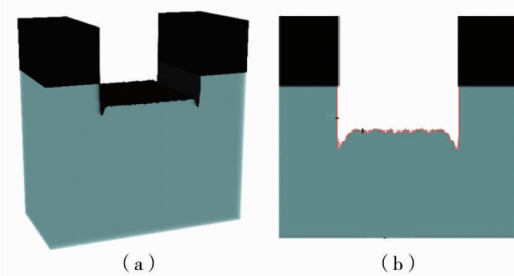


图 14 结果对比 (a) 三维仿真结果; (b) SEM 照片

3 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 10nm;刻蚀离子的入射流量为 $9.812 \times 10^{14} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$,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° ;采用文献[8]中刻蚀产额、反射概率与入射角度的依赖关系;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 13(a) 所示,其二维剖面轮廓与 Saussac 等人^[11]的二维仿真结果(如图 13(b)所示)较为一致。


 图 13 结果对比 (a) 三维仿真结果;
(b) 二维仿真结果^[11]

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 SEM 照片如图 14(b) 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,我们利用本文的刻蚀表面演化方法,获得了如图 14(a) 所示的仿真结果,其坐标精度为

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。通过采用静态数组和双向链表相结合的方式进行信息存储,减少了内存使用量;通过两项有益的改进方法提高了三维元胞模型仿真运算效率和计算精度:一是提出了边界时间最短优先移动法,改进刻蚀离子入射轨迹计算量大的问题;二是提出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;并重点对用于拟合计算的表面元胞的选取方法进行了改进,提出了滚轮搜索法,提高了拟合的准确度。同时将该模型应用到硅刻蚀工艺三维仿真中,把模拟结果与相关实验结果进行了对比,验证了该模型对刻蚀工艺描述的有效性。

参考文献

- [1] 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. 电子学报,2002,30(11):1577-1584
- [2] Zhou Z F, Huang Q A, Li W H, et al. A novel 3-D dynamic cellular automata model for photoresist-etching process simulation. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 2007, 26(1):100-114
- [3] Toh K K H, Neureuther A R, Scheckler E W. Algorithms for simulation of three-dimensional etching. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 1994, 13(5):616-624
- [4] 张鉴,戚昊琛,徐栋梁等. 一种可用于硅刻蚀工艺模拟的三维表面演化算法. 电子学报,2011,39(8):1869-

- 1872
- [5] Jewett R E, Hagouel P I, Neureuther A R, et al. Line-profile resist development simulation techniques. *Polymer Engineering & Science*, 1977, 17(6): 381-384
 - [6] Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton. *Journal of Computational Physics*, 1988, 79: 12-49
 - [7] Osher S, Fedkiw R P. Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results. *Journal of Computational Physics*, 2001, 169: 463-502
 - [8] Kawai H. 3-Dimensional Modeling and Simulation of Surface and Sidewall Roughening During Plasma Etching [Ph. D dissertation]. Cambridge: MIT Press, 2008. 20-76
 - [9] 周再发. 基于元胞自动机方法的 MEMS 加工工艺模拟研究[博士学位论文]. 南京: 东南大学, 2009. 1-91
 - [10] 吴凡. 微尺度仿真的计算方法研究与实现[学士学位论文]. 北京: 清华大学, 2012. 10-18
 - [11] Saussac J, Margot J, Chaker M. Profile evolution simulator for sputtering and ion-enhanced chemical etching. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 2009, 27(1): 130-138
 - [12] Dai Z L, Guang Y, Wang Y N. Study on mechanism of etching in low pressure radio-frequency plasmas. *Current Applied Physics*, 2011, 11: 121-125
 - [13] Guo W, Sawin H H. Review of profile and roughening simulation in microelectronics plasma etching. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2009, 42: 194014 (17pp)
 - [14] Chang J P, Arnold J C, Zau G C H, et al. Kinetic study of low energy argon ion-enhanced plasma etching of polysilicon with atomic/molecular chlorine. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 1997, 15(4): 1853-1863
 - [15] Chang J P, Mahorowala A P, Sawin H H. Plasma -surface kinetics and feature profile evolution in chlorine etching of polysilicon. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 1998, 16(1): 217-224
 - [16] McVittie J P, Rey J C, Cheng L Y, et al. LPCVD profile simulation using a re-emission model. In: Proceedings of the International Electron Devices Meeting, Technical Digest, 1990. 917-920; 10. 1109/IEDM. 1990. 237014
 - [17] Keller G, Rude U, Stals L, et al. Simulation of trench homogeneity in plasma immersion ion implantation. *Journal of Applied Physics*, 2000, 88(2): 1111-1117

Three-dimensional cellular model for profile simulation of ion etching process

Zheng Shulin, Song Yixu, Sun Xiaomin

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

Abstract

The surface evolution of ion etching processes was investigated by using a 3D cellular model to get a better understanding of etching mechanisms and provide optimization guidance for MEMS manufacturing. A method of combining static arrays and bi-directional linked lists was applied to storing the information of the 3D cellular model and reducing the memory usage. The method of “the shortest reach time to boundary of cellular for first move”, was proposed to reduce the calculation for the incident trajectories of many ions. And the component fitting-based dimension reduction method was introduced to fast gain the ion incident angle. A rolling search algorithm was emphatically presented to improve the accuracy of fitting, which is an improved surface cellular selection method for fitting. The cellular model was applied to the 3D simulation of a silicon etching process, and the simulation results verified the validity of the simulated surface compared with relevant experimental results.

Key words: ion etching, three-dimensional cellular model, shortest reach time first move, rolling search algorithm