

**Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik  
der Technischen Universität München  
Lehrstuhl für Technische Elektrophysik**

# **Modellierung und Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse in Silizium**

**Anton Horn**

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines  
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)  
genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing. W. Hansch

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr. rer. nat. G. Wachutka
2. Univ.-Prof. Dr. rer. nat. H. Seidel,  
Universität des Saarlandes

Die Dissertation wurde am 31.03.2004 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik am 14.03.2005 angenommen.



## Zusammenfassung

Mit fortschreitender Entwicklung in der Mikrosystemtechnik gewinnt die physikalisch basierte Modellierung und prädiktive Simulation eine strategische Bedeutung, denn der Einsatz leistungsfähiger CAD-Werkzeuge reduziert die Zahl und verkürzt die Dauer der Entwicklungszyklen, die neue Mikrosystemtechnik-Komponenten von der ersten Idee bis zum funktionierenden Prototyp durchlaufen.

Die besondere Bedeutung der Modellierung und Simulation von Herstellungsprozessen für mikrostrukturierte Bauelemente besteht darin, daß die Ergebnisse als Grundlage und Eingangsgrößen für die nachfolgende Bauelemente- und Systemsimulation dienen. Daher ist es notwendig, mit der Prozeßsimulation alle für die Funktion der Bauelemente relevanten Größen mit ausreichender Genauigkeit zu bestimmen. Nur unter dieser Voraussetzung kann die nachfolgende Simulation auf Bauelemente- und Systemebene verlässliche Ergebnisse liefern.

Das naßchemische orientierungsabhängige Ätzen ist neben den Trockenätzprozessen eine Schlüsseltechnologie zur dreidimensionalen Strukturierung mikromechanischer Bauelemente. Trotz zahlreicher Untersuchungen ist der Ätzmechanismus zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht vollständig geklärt; Geometrie und Morphologie geätzter Strukturen können auf der Grundlage der bekannten Modelle im Allgemeinen nicht konsistent erklärt werden.

Vor diesem Hintergrund bestand das Ziel dieser Arbeit darin, aktuelle Erkenntnisse und neue experimentelle Ergebnisse über das orientierungsabhängige naßchemische Ätzen von Silizium auszuwerten und ein neues Simulationskonzept zu entwickeln, das sowohl ein realistisches physikalisches Modell verwendet als auch praxisrelevante Simulationsgebiete behandeln kann. Auf der Grundlage eines neuen Modells, das den orientierungsabhängigen Ätzprozeß als Stufenätzvorgang beschreibt, wurde ein numerisches Simulationsverfahren entwickelt und erstmals in ein allgemeines Konzept zur Topographiesimulation eingebettet. Bei der Entwicklung des Simulationskonzeptes wurde den Bedürfnissen des rechnergestützten Entwurfes moderner mikrostrukturierter Bauelemente besonders Rechnung getragen.

Anhand von Testsimulationen an typischen Grundstrukturen der Volumenmikromechanik und dem Vergleich mit experimentellen Ergebnissen konnte eine weitere Validierung des Stufenätzmodells vorgenommen werden.

Des Weiteren wurden beispielhaft für die reale, industrielle Fertigung von Bauelementen die mikromechanische Herstellung eines Inertialsensors und eines mechanischen Filters für mikrofluidische Anwendungen numerisch simuliert. Diese Strukturen erfordern eine dreidimensionale Simulation und die Berücksichtigung verschiedener Materialien mit unterschiedlichem Ätzverhalten.

Das im Rahmen dieser Arbeit implementierte Simulationswerkzeug bewies hierbei, daß es die wesentlichen Anforderungen für die Unterstützung des Entwurfs mikrostrukturierter Bauelemente erfüllt.



## Abstract

Physically based modeling and predictive simulation is getting more and more important for the design of modern MEMS-devices, since the application of CAD-tools reduces the design and fabrication cycles during the design and development process of new microstructures and systems.

Modeling and simulation of the fabrication process provides the geometrical and physical description of a complete device. Therefore, an accurate simulation on the process level is the basis and prerequisite for a reliable simulation on the following device and system level.

Wet chemical orientation-dependent etching is still a key technology for the three-dimensional structuring of MEMS. In spite of many investigations the etching mechanism remains quite unclear and the apparent shape and morphology of the etched structures cannot be satisfactorily explained on the basis of the present models.

In this thesis recent insights and new experimental results were evaluated and a new simulation approach was developed, which employs a realistic and physically based model and provides the capability of considering also real-world complex structures of modern micromachined devices.

The simulation approach on the basis of a new „step-flow-model“ for the orientation-dependent etching process was implemented in a general concept for efficient topography simulation.

Employing numerical simulation the applicability of the step flow model to basic elements and typical structures of bulk-micromachining could be demonstrated successfully. The simulated etch bodies showed a very good agreement with SEM micrographs of dedicated etched test structures even for structures resulting from a complex evolution of the etch front. These results served as a further validation for the step-flow-model.

The practical applicability of the new simulation approach is demonstrated by the “virtual fabrication” of an industrial inertial sensor and a mechanical filter device for microfluidic applications. These exemplary structures are challenging for numerical simulation, since they feature material layers exhibiting different etching properties and, additionally, require a three-dimensional simulation.

The numerical simulation tool which was developed in this thesis has proven to satisfy basic requirements necessary for the deliberate design of bulk-micromachined sensor and actuator elements.



---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen zum naßchemischen Kristallätzen</b>	<b>13</b>
2.1	Kristallographische Eigenschaften von Silizium	13
2.2	Spezifika des orientierungsabhängigen Naßätzens von Silizium	18
2.3	Mit orientierungsabhängiger Ätztechnik fertigmachbare charakteristische Strukturen	24
2.4	Modelle für die Anisotropie des Ätzprozesses (Literaturübersicht)	28
2.4.1	Thermodynamische Grundlagen für das Kristallätzen und Kristallwachstum.	28
2.4.2	Chemie/Elektrochemie der Ätzprozesse	31
2.4.3	Stufenätzprozesse / Stufenätzmechanismus	33
2.5	Verfahren zur Bestimmung orientierungsabhängiger Ätzraten	36
2.5.1	Direkte Messung der Oberflächenätzrate verschieden orientierter Wafer	36
2.5.2	Wagenrad Verfahren (Waggon-Wheel-Method)	37
2.5.3	Teststruktur mit dreidimensionalen „Speichen“	42
2.5.4	Sphärische Testkörper	44
2.5.5	Alternative Teststrukturen	45
2.6	Zusammenstellung weiterer Einflußfaktoren auf naßchemische Ätzprozesse	47
2.7	Andere Materialien mit anisotropem Ätzverhalten.	49

<b>3</b>	<b>Methodik der Modellbildung zur prädiktiven Simulation . . . . .</b>	<b>51</b>
3.1	Ansätze zur Modellierung der dreidimensionalen Strukturierung von Silizium . . . . .	53
3.1.1	Atomistische Modelle . . . . .	53
3.1.2	Differentialgeometrische Modelle . . . . .	55
3.1.3	Stufenätzmodell . . . . .	61
3.2	Diskussion der Modelle . . . . .	72
<b>4</b>	<b>Implementierung des Stufenätzmodells zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse . . . . .</b>	<b>75</b>
4.1	Überblick über Ansätze zur Topographiesimulation . . . . .	75
4.2	Oberflächenevolutionsalgorithmus mit strukturierenden Elementen . . . . .	84
4.3	Vektormodell zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse . . . . .	87
<b>5</b>	<b>Ergebnisse . . . . .</b>	<b>105</b>
5.1	Unterätzung einer einfachen konvexen Ecke . . . . .	107
5.2	Entartung konvexer Ecken und Unterätzung an beliebig orientierten Maskenkanten . . . . .	109
5.2.1	Prinzipieller Mechanismus . . . . .	109
5.2.2	Gitterverfeinerung zur Simulation schräger Maskenkanten . . . . .	114
5.3	Perforation und beidseitiges Ätzen von Wafern . . . . .	117
5.4	Grundelemente der (Volumen-) Mikromechanik . . . . .	121
5.4.1	Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken . . . . .	121
5.4.1.1	Rechteckige (Quadratische) Kompensationsstrukturen . . . . .	122
5.4.1.2	Dreieckige Kompensationsstruktur . . . . .	124



---

5.4.1.3	Balken in $\langle 110 \rangle$ -Richtung . . . . .	125
5.4.1.4	Balken in $\langle 100 \rangle$ -Richtung . . . . .	130
5.4.1.5	Zusammengesetzte Kompensationsstrukturen . . . . .	134
5.4.1.6	Kompensationsstrategien bei Waferperforation . . . . .	136
5.4.1.7	Flächenbedarf unterschiedlicher Kompensationsstrukturen . . . . .	137
5.4.2	Grundstrukturen für Fluidkanäle . . . . .	138
5.4.3	Ätzstopptechniken . . . . .	140
5.5	Einbeziehung isotrop ätzender Bereiche . . . . .	145
5.5.1	Schichten mit isotropem Charakter bei der Ätzung . . . . .	145
5.5.2	Dreidimensional vorstrukturierte Substrate . . . . .	146
5.6	Simulation typischer Bauelemente . . . . .	153
5.6.1	Feder-Masse-Systeme für Sensoren . . . . .	153
5.6.2	Filterstruktur für mikrofluidische Systeme . . . . .	156
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick . . . . .</b>	<b>159</b>
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis . . . . .</b>	<b>165</b>
	<b>Danksagung . . . . .</b>	<b>181</b>



# 1 Einleitung

## **Mikroelektronik, mikrostrukturierte Bauelemente und Mikrosystemtechnik**

Seit der Erfindung des Transistors im Jahre 1948 und der Entwicklung erster integrierter Schaltungen um 1958 hat die Mikroelektronik praktisch sämtliche Bereiche des modernen Berufs- und Privatlebens grundlegend mit gestaltet. Der immense Erfolg der Mikroelektronik gründet sich auf die Miniaturisierung und Integration vormals diskreter, großer und aufwendig herzustellender Bauteile. Dadurch konnten mit photolithographischen Strukturierungsmethoden auf kleinsten Silizium-Substraten komplexe Schaltungen in hoher Stückzahl zuverlässig, billig und mit verbesserter Funktionalität hergestellt werden.

Ab Mitte der 60er Jahre wurde dieses erfolgreiche Konzept der Mikroelektronik auch auf andere Systeme übertragen, zunächst auf mechanische, später auch auf optische, fluidische und chemische Bauteile und Komponenten. Ab den 80er Jahren wurde der Begriff MEMS (Mikro-Elektro-Mechanische-Systeme) für komplexe Sensor- und Aktorsysteme geprägt, die elektrische Energie und Signale in mechanische oder thermische, optische und sonstige Größen umwandeln und umgekehrt.

Die Verbindung vieler mikrostrukturierter Bauelemente zu komplexen Mikrosystemen, die zusammen mit elektronischer Signalverarbeitung eine riesige Vielfalt unterschiedlicher Funktionalität für völlig neue Anwendungsmöglichkeiten bereitstellen, prägte den Begriff der „Mikrosystemtechnik“.

Die gegenwärtigen Einsatzmöglichkeiten moderner Mikrosystemtechnik-Komponenten sind äußerst vielfältig. Ein umfangreicher Überblick findet sich z.B. in [143]. Die wichtigsten Anwendungsfelder liegen in den Bereichen:

- Medizintechnik: intelligente Dosiersysteme mit Mikropumpen;  
Sonden für minimalinvasive Chirurgie;
- Automobiltechnik: Sensor-Aktor-Systeme mit Druck und Beschleunigungssensoren für Airbags, Anti-Blockier-Systeme, Stabilitätsprogramme und Navigationsanwendungen;
- Unterhaltungselektronik: Großbildprojektoren;
- Haus- und Gebäudetechnik: Klimaregelung, Sicherheitstechnik;
- Umwelttechnik: chemische Mikroanalysesysteme auf einem Chip ( $\mu$ TAS),  
chemische Sensoren;

- Produktionstechnik: chemische Mikroreaktoren;
- Biotechnologie: Integrierte Mikroanalyse- und Prozeßtechnik;
- Nanotechnologie: Erzeugung und Manipulation von Nanostrukturen mit Mikrowerkzeugen;

Der Anfang der Entwicklung der Mikrosystemtechnik war oft noch dadurch charakterisiert, daß konventionell, also feinmechanisch hergestellte Bauteile in verkleinertem Maßstab mit den standardisierten Methoden der Halbleitertechnologie gefertigt wurden. Wenn große Stückzahlen gefordert waren, konnten so mikrostrukturierte Bauelemente wesentlich preisgünstiger, kleiner, leichter und mit besserer Leistungsfähigkeit und Funktionalität gebaut werden als ihre makroskopischen Gegenstücke. In der weiteren Entwicklung der Mikrosystemtechnik werden nun aber zunehmend neue, eigenständige Systeme entworfen, die nicht mehr nur verkleinerte Abbildungen bestehender Systeme darstellen, sondern völlig eigenständige Konzepte beinhalten. Diese haben damit keine direkten Gegenstücke in der Makrowelt als Vorbild, sondern sind auf die speziellen Eigenschaften der Mikrowelt maßgeschneidert. Damit könnten sich dann auch neue Anwendungen erschließen, die heute noch nicht realisierbar erscheinen (z.B. Mikroroboter in der Medizintechnik).

Die eindrucksvolle Entwicklung und rasche Verbreitung mikrostrukturierter Bauelemente und Systeme ist auch darin begründet, daß diese Komponenten ebenso wie integrierte Schaltkreise (ICs) mit den hochentwickelten Prozessen der Halbleitertechnologie im sogenannten Batch-Verfahren hergestellt werden können. Das bedeutet, daß viele gleiche Bauelemente auf einer Siliziumscheibe hergestellt werden und etliche dieser Scheiben werden gleichzeitig prozessiert. Ebenso wie mikroelektronische Bauelemente können Mikrosystemtechnik-Komponenten parallel strukturiert werden, was zu einem hohen Materialdurchsatz und niedrigen Stückkosten führt. Es ist daher anzunehmen, daß die Mikrosystemtechnik noch eine ähnliche Entwicklung wie die Mikroelektronik durchlaufen wird, und zukünftig eine Vielzahl neuer und billiger Mikrosystemtechnik-Komponenten ganz selbstverständlich unser tägliches Leben begleiten, ohne daß ihnen noch große Beachtung geschenkt wird.

Auf dem Weg dahin hat die Mikrosystemtechnik Herausforderungen in zwei Bereichen zu begegnen:

1. Zum einen müssen die technologischen Prozesse zur dreidimensionalen Strukturierung und Integration von Mikrosystemen weiter entwickelt und optimiert werden.
2. Zum anderen besteht nach wie vor ein großer Bedarf in der Entwicklung von Software-Werkzeugen für den Entwurf, die Modellierung und Simulation, sowie die Optimierung von Mikrobauelementen und -systemen. Das trifft im Besonderen auf Prozesse und Verfahren zu, die nicht in der Standard-IC-Technologie verwendet werden.

Diese Arbeit behandelt mit der Modellierung und Simulation des naßchemischen orientierungsabhängigen Ätzens einen wichtigen Prozeß bei der Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente und ist somit thematisch dem zweiten Punkt zuzuordnen. Ätzprozesse zur räumlichen Strukturierung sind prinzipiell eine zentrale Technologie bei der Herstellung mikromechanischer Komponenten, denn diese bestehen im Unterschied zu mikroelektronischen Bauelementen auch aus beweglichen, dreidimensional strukturierten und operierenden Teilstrukturen. Eine große Herausforderung beim Entwurf und der Herstellung von Mikrobauteilen besteht darin, daß diese als fertige, funktionierende Einheiten aus einem Stück hergestellt werden müssen. Eine lokale Materialbearbeitung mit Werkzeugmaschinen oder eine nachträgliche Montage verschiedener Komponenten ist meist nicht möglich oder kommt aus Kostengründen nicht in Frage. Bewegliche mechanische Strukturen und komplexe Geometrien müssen demnach mit anderen Mitteln aus dem Substratmaterial bzw. aus aufgetragenen dünnen Schichten herausgelöst werden. Dazu sind Ätztechniken als chemischer Materialabtrag, der durch photolithographisch strukturierte Maskierungsschichten gesteuert wird, das geeignete Mittel.

### **Ätzen als Schlüsseltechnologie für die dreidimensionale Mikrostrukturierung**

Die Anwendung von Ätztechniken zur Strukturierung von Materialien hat eine erstaunlich lange Tradition. So wurden bereits im späten 15. und 16. Jahrhundert Verzierungen an Rüstungen und Waffen mit Ätzverfahren angebracht, da die gehärteten Metalle nicht mehr mit der geforderten Präzision mit mechanischen Werkzeugen bearbeitet werden konnten. Im 17. Jahrhundert war das Ätzen von Verzierungen bereits eine Standardtechnik, mit der Strukturen mit einer Genauigkeit von 0,5 mm angefertigt werden konnten [56].

In der Elektrotechnik wurden Ätzverfahren in den 40er Jahren eingeführt, um Leiterbahnen auf Platinen zu strukturieren, wodurch die Verbindungstechnik wesentlich verbessert werden konnte. Mit der Entwicklung von Halbleitermaterialien und schließlich der integrierten Schaltungen wurden Ätzverfahren zu einem wesentlichen und unentbehrlichen Prozeßschritt [115,157]. Denn bei der Herstellung von mikroelektronischen Bauelementen mittels Planartechnologie müssen ganzflächig aufgetragene Schichten strukturiert und Maskierungsschichten teilweise geöffnet werden. Auch die Entwicklung von Fotolacken ist letztendlich ein Ätzprozeß, bei dem die belichteten Bereiche selektiv aufgelöst bzw. nicht aufgelöst werden.

Anisotropes Ätzen von Silizium mit wässrigen KOH-Lösungen begann etwa Mitte der sechziger Jahre, um dielektrisch isolierende Strukturen in integrierten Schaltungen herzustellen [15,164]. Später wurde der Prozeß zur Herstellung der sogenannten V-Graben Transistoren genutzt [116]. Zu Beginn der achtziger Jahre erlangten die hervorragenden mechanischen Eigenschaften von einkristallinem Silizium zunehmend Interesse [108] und bereiteten den Weg für die Mikrosystemtechnik auf Basis der Halbleitertechnologie.

Die Strukturierung dünner, planarer Schichten bei der Herstellung mikroelektronischer Bauelemente ist ein quasi-zweidimensionales Problem, das keine physikalisch basierte Modellierung im eigentlichen Sinne erfordert. Die geätzte Geometrie entspricht im Wesentlichen der Form der Ätzmaske, bis auf eine geringe Unterätzung der Kanten, die leicht empirisch zu ermitteln ist. Deshalb werden solche Ätzprozesse bei der Halbleiterprozeßsimulation meist nur emuliert, in dem die zu ätzenden Bereiche rein geometrisch aus der Schicht entfernt werden, was für die meisten Anwendungen eine ausreichende Näherung darstellt.

Auch in der Oberflächenmikromechanik werden nur dünne Schichten durch teilweises Ätzen strukturiert oder sogenannte Opferschichten selektiv entfernt. Bei diesen Techniken ist es ebenfalls nicht erforderlich, den eigentlichen Ätzprozeß detailliert und physikalisch basiert zu modellieren, da dieser nicht kritisch für die Funktion bzw. die Geometrie des fertigen Bauelementes ist. Probleme bereiten hier vielmehr Phänomene wie das sogenannte „Sticking“, d.h. das Zusammenhaften von Strukturen aufgrund der beachtlichen Oberflächenkräfte, die bei Mikrostrukturen auftreten. Den Ätzprozessen bei der Herstellung elektronischer Bauelemente (eine Ausnahme bilden die Speicherchips) und bei der Oberflächenmikromechanik ist gemeinsam, daß aufgrund der geringen Dicke der zu ätzenden Schichtstrukturen eine zweidimensionale Maskengeometrie quasi eins zu eins in die dritte Dimension übertragen werden kann.

Ganz anders verhält es sich mit den naßchemischen Ätzprozessen der Volumenmikromechanik, da hier das gesamte Siliziumsubstrat in die dreidimensionale Strukturbildung miteinbezogen wird und oft der Wafer in seiner gesamten Dicke durchgeätzt werden muß. Charakteristisch für die letztgenannten Ätzprozesse ist, daß sie ausgeprägte orientierungsabhängige Ätzraten aufweisen. Typischerweise werden sie in stark basischen, wässrigen Lösungen durchgeführt und zeigen folgende Eigenschaften:

1. Abhängig von der Orientierung der Maskenkanten treten schnell und langsam ätzende Bereiche auf. Konvexe Maskenecken werden stark unterätzt, während sich an konkaven Maskenecken stabile, d.h. sehr langsam ätzende kristallographische {111}-Ebenen ausbilden.
2. Die Strukturbildung der Ätzfront ist stark von den Prozeßparametern abhängig.
3. Der Prozeß weist relativ hohe Ätzraten auf, dadurch können auch sehr große und tiefe Strukturen in für die praktische Anwendung akzeptablen Prozeßzeiten hergestellt werden.
4. Die langsam ätzenden Oberflächen der {111}-Ebenengruppe können mit sehr guter Oberflächenqualität hergestellt werden.
5. Es treten bei der Ätzung ausgesprochen interessante Nebeneffekte auf, wie z.B. die Bildung von Mikropyramiden auf dem Boden von Ätzgruben.

6. Im Vergleich mit anderen Strukturierungstechniken sind die Prozesse einfach zu realisieren, erlauben einen hohen Waferdurchsatz und können damit sehr kostengünstig ausgeführt werden.

Einige dieser typischen Eigenschaften implizieren große Herausforderungen beim Entwurf von Mikrobauteilen:

- Die starke Unterätzung konvexer Maskenecken führt dazu, daß die erzeugten Strukturen im Querschnitt stark von der Maskengeometrie abweichen. Dieser Sachverhalt tritt am eindrucksvollsten in Erscheinung, wenn z.B. in Bereichen konvexer Maskenecken sogenannte Kompensationsstrukturen verwendet werden. Dies sind spezielle Strukturen in der Ätzmaske, die so entworfen und dimensioniert werden, daß sie in der fertigen dreidimensionalen Struktur gerade nicht mehr in Erscheinung treten.
- Die Abbildung von der Maske zur Struktur ist bei konstanten Prozeßparametern zwar eindeutig, nicht aber die Umkehrung, d.h. eine gegebene Struktur kann mit unterschiedlichen Maskengeometrien erzeugt werden. Im Allgemeinen können daher von einer dreidimensionalen Struktur keine eindeutigen Rückschlüsse auf die exakte Gestalt der Maske gezogen werden.
- Darüber hinaus ist der gesamte Ätzprozeß, besonders aber die Oberflächenrauheit und die Strukturbildung an schnell ätzenden Bereichen, in sehr empfindlicher Weise abhängig von einer Vielzahl von Prozeßparametern und die Zusammenhänge sind gegenwärtig weder vollständig verstanden noch erschöpfend untersucht.

Mit naßchemischen orientierungsabhängigen Ätzprozessen ist es nicht möglich, beliebige dreidimensionale Strukturen herzustellen, da die Wechselwirkung zwischen schnell und langsam ätzenden Bereichen maßgeblich die Geometrie der Bauelemente bestimmen. Diese Einschränkung der Freiheitsgrade bei der Strukturformung durch kristallographische Eigenschaften des Substratmaterials ist ein Nachteil des naßchemischen Ätzens. Die Trockenätzprozesse der Oberflächenmikromechanik haben diese Einschränkung nicht und sind somit universeller anwendbar. Dafür ist der maschinelle Aufwand für Trockenätzprozesse größer, denn die zu strukturierenden Schichten müssen zuerst abgeschieden werden, die Prozesse sind schwieriger zu kontrollieren und letztlich somit langsamer und teurer. Dagegen kann bei den naßchemischen Volumenätzprozessen das gesamte vorhandene Substrat zur dreidimensionalen Strukturierung genutzt werden.

Gerade wenn gefordert ist, große (im Millimeterbereich) und schwere Strukturen herzustellen, ganze Waferdicken durchzuätzen oder großvolumige Gruben und Kanäle für z.B. fluidische Anwendungen herzustellen, dann ist das naßchemische orientierungsabhängige Ätzen nach wie vor ein zuverlässiges, lange erprobtes und effektives Verfahren.

Trotz zahlreicher Arbeiten zum Verständnis des orientierungsabhängigen Ätzens zur Strukturbildung konnten Widersprüche zum experimentellen Befund nicht vollständig ausgeräumt werden [13,30,86,106,131]. Ein Grundproblem dabei liegt darin, daß von der chemischen Reaktion, die zur Auflösung des Siliziumkristalls führt, nur die Endprodukte bekannt sind, nicht aber der genaue Reaktionsweg. Eine weitere Schwierigkeit liegt in der scheinbar unüberschaubaren Menge der Parameter und Faktoren, die den Ätzprozeß in empfindlicher Weise bestimmen bzw. Einfluß auf das Anisotropieverhältnis und die Oberflächenmorphologie der Strukturen nehmen. Daher wird das naßchemische Ätzen manchmal – durchaus Ernst gemeint – auch mehr als alchemistische Kunst begriffen und weniger als ein physikalisch rigoros beschreibbarer Prozeß, dessen Ablauf verstanden ist und in transparenter Weise von den Prozeßparametern abhängt. Dieser Umstand wird noch dadurch verstärkt, daß gerade das Ätzen von Einkristallen ein sehr komplexes interdisziplinäres Gebiet darstellt und in den beteiligten Fachgebieten mit unterschiedlichen theoretischen Konzepten und Ansätzen behandelt wird. Da Ätzprozesse in der Halbleiterproduktion seit langem zur Reinigung und Planarisierung von Oberflächen verwendet werden, gibt es zahlreiche Untersuchungen zu chemischen und physikalisch-chemischen Vorgängen auf einzelnen Oberflächenorientierungen. Die Entwicklung der Mikrosystemtechnik brachte die Anwendungen von Ätzprozessen zur dreidimensionalen Strukturierung von komplexen Bauelementen mit sich. Die damit verbundene Notwendigkeit der Modellierung führte zu verschiedenen phänomenologischen Beschreibungsversuchen, die aus der Theorie des Kristallwachstums abgeleitet und für Ätzprozesse angepaßt wurden.

Um dem interdisziplinären Charakter des naßchemischen orientierungsabhängigen Ätzens Rechnung zu tragen, wurde im Jahr 1998 ein internationaler Workshop (PCWES [168]) ins Leben gerufen, um einschlägige Experten aus den Gebieten Chemie, Physik und Ingenieurwissenschaften zusammenzuführen, die sich aus verschiedenen Blickwinkeln mit dem Siliziumätzen beschäftigten. Die Motivation bestand darin, den Stand der Kenntnis in den unterschiedlichen Fachgebieten zusammenzuführen und, falls möglich, zu einem umfassenden, konsistenten Modell für den Ätzprozeß zusammenzufügen. Die grundlegende Zielsetzung besteht hier in einem Brückenschlag zwischen dem Verständnis der Ätzvorgänge auf atomistischer Ebene und einer für die technologische Praxis relevanten Modellbildung der dreidimensionalen Strukturierung auf makroskopischer Größenskala, wie sie bei der Ätzung ebener, maskierter Wafer bestimmend ist. Doch auch nach der dritten Veranstaltung des Workshops im Jahre 2002 sind letztlich mehr neue Fragen und Probleme aufgetaucht als alte beantwortet und gelöst werden konnten, und die Welt ist für die beteiligten Forscher (den Autor dieser Arbeit eingeschlossen) eher noch komplexer geworden. Dennoch konnten wesentliche Konzepte und Prinzipien zur dreidimensionalen Strukturbildung beim Ätzen erarbeitet werden, die auch in die vorliegende Arbeit eingeflossen sind. Letztendlich konnte ein neues Stufenätzmodell für die dreidimensionale Strukturbildung auf Silizium implementiert und durch Simulationen von Teststrukturen verifiziert werden.

Neben der Aufbereitung aktueller experimenteller Erkenntnisse lag die Motivation zur Entwicklung eines neuen Simulationsansatzes für das naßchemische orientierungsabhängige Ätzen auch in den steigenden Anforderungen an die Prozeßsimulation für



realistische mikromechanische Strukturen. Die Schwierigkeiten im Verständnis der Strukturbildung bei den Ätzprozessen wurde zum Teil dadurch umgangen, daß einige Simulationsansätze eher die algorithmische Umsetzung experimenteller Erfahrungen im Sinne eines programmierten Regelwerkes darstellen. Diese Simulationsansätze können Geometrie und Morphologie der Ätzfront bereits bei einfachen Maskengeometrien nicht korrekt wiedergeben und führen folglich zu inkorrekten Simulationsergebnissen bei dreidimensionalen Problemstellungen.

Für die effektive Unterstützung des Entwurfs neuer Bauelemente, die Verbesserung bestehender Konzepte und den Vergleich und die Bewertung von Design-Varianten ist jedoch eine prädiktive Simulation unerlässlich. Diese erfordert die Implementierung realistischer, physikalisch basierter Modelle und die Entwicklung flexibler Simulationskonzepte, die neben dem naßchemischen Ätzen auch andere Technologien zur Strukturierung behandeln können.

## **Modellierung und Simulation**

Im Allgemeinen bestehen die Ziele von Modellierung und Simulation einerseits darin, ein physikalisches Verständnis der Herstellungsprozesse und Funktionsprinzipien der Bauelemente (bzw. Systeme) zu gewinnen. Andererseits kann die Simulation wertvolle Hilfestellung beim Entwurf und bei der Optimierung bzw. beim Redesign von Bauelementestrukturen leisten.

Der Entwicklungsprozeß mikrostrukturierter Bauelemente und Systeme von der ersten Idee bis zum funktionierenden Prototyp durchläuft vier Ebenen, die in einer hierarchischen Struktur verschiedene Stufen während der Herstellung und den dazwischen liegenden Testphasen widerspiegeln [162]. Zu Beginn der Entwicklung stehen Layout und Design, mit dem die Geometrie und die Herstellungsprozesse der Bauelemente festgelegt werden. Die zweite Ebene, die Prozeßmodellierung, beschreibt die dem Layout entsprechenden Prozeßschritte, die im einzelnen zur Herstellung des Bauelements erforderlich sind. Danach folgen die Modellierung auf Bauelementebene als dritte und die Modellierung auf Systemebene als vierte Stufe.

Mit fortschreitender Entwicklung in der Mikrosystemtechnik geht der Trend von einzelnen Bauelementen zu komplexen Systemen, in denen gekoppelte Effekte eine wichtige Rolle spielen. Einzelne Teilsysteme beeinflussen sich gegenseitig durch Kopplung verschiedener Energie und Signalformen, weshalb sich eine rein experimentell gestützte Entwicklung zunehmend aufwendiger gestaltet und in naher Zukunft an ihre Grenzen stoßen wird.

Neben ihrer hohen Leistungsfähigkeit und Zuverlässigkeit müssen Mikrobauteile und -systeme vor allem auch billig sein, um auf den jeweiligen Märkten konkurrenzfähig sein zu können. Ohne fundiertes Wissen über ihr internes Betriebsverhalten wie auch über ihre Herstellungsprozesse ist eine zeit- und kostensparende systematische Weiterentwicklung ihrer Leistungsfähigkeit jedoch kaum möglich.

Vor diesem Hintergrund gewinnt die physikalisch basierte Modellierung und prädiktive Simulation auf allen Hierarchieebenen eine strategische Bedeutung, denn der Einsatz leistungsfähiger CAD-Werkzeuge reduziert die Zahl und verkürzt die Dauer der Entwicklungszyklen, die neue Mikrosystemtechnik-Komponenten vom ersten Entwurf bis zur Serienreife begleiten.

Die Bedeutung der Modellierung und Simulation auf der Ebene der Herstellungsprozesse besteht darin, daß die Ergebnisse als Grundlage und Eingangsgrößen für die nachfolgende Bauelemente- und Systemsimulation dienen. Daher ist es notwendig, daß mit der Prozeßsimulation alle für die Funktion der Bauelemente relevanten Größen exakt bestimmt werden. Nur unter dieser Voraussetzung kann die nachfolgende Simulation auf Bauelemente- und Systemebene verlässliche Ergebnisse liefern.

Im Unterschied zum rechnergestützten Entwurf bei der Herstellung elektronischer Bauelemente und integrierter Schaltungen stecken automatisiertes Design und Modellgenerierung in der Mikrosystemtechnik allerdings noch in den Kinderschuhen. Das betrifft in besonderer Weise die Modellierung sogenannter „Ad-on“-Prozeßschritte, die nicht in der Standard-IC-Technologie verwendet werden, wie der naßchemische orientierungsabhängige Ätzprozeß. Erste Arbeiten zu Modellimplementierungen in Simulationswerkzeuge für das Naßätzen wurden zu Beginn der 90er Jahre veröffentlicht [21,22,38,57,75,89,151,153], jedoch besteht seither ein unverminderter Bedarf an wirklich leistungsfähigen Simulationswerkzeugen, die den gestiegenen Anforderungen für den Entwurf neuer Bauelemente gerecht werden. Darüber hinaus gehen die Erwartungen an die Prozeßsimulation dahin, alle Prozesse zur Strukturbildung in einer einheitlichen Entwicklungsumgebung zusammenzufassen und auch das naßchemische orientierungsabhängige Ätzen miteinzubinden. Nur auf diese Weise kann der Entwurf neuer Bauelemente in einer durchgängigen Linie über alle Hierarchieebenen vom Layout bis zur kompletten Systemanalyse erfolgen.

### **Zielsetzung der vorliegenden Arbeit**

Die zentrale Problemstellung der vorliegenden Arbeit besteht darin, ein Modellierungskonzept und einen Simulationsansatz zu realisieren, die die für die Entwicklung mikrostrukturierter Bauelemente wesentlichen, fundamentalen Anforderungen erfüllen. Dieser Ansatz muß in sich konsistent und physikalisch basiert sein, ohne dabei den Anspruch zu erheben, alle Größen zu erfassen, die im Hinblick auf ihre Relevanz für die technologische Praxis nur eine untergeordnete Bedeutung für die prozessierten Strukturen haben. Vielmehr ist es erforderlich, eine adäquate Beschreibung des Prozesses zu formulieren, welche die für die dreidimensionale Strukturbildung entscheidenden Einflußfaktoren beinhaltet und weniger relevante Größen bewußt vernachlässigt. Dieser Ansatz entspricht dem Prinzip der „maßgeschneiderten Modellierung“ (engl.: „Tailored Modeling“, [162]), das sich auf alle Aufgabenstellungen zur Modellierung und Simulation anwenden läßt.

Das Simulationsverfahren sollte darüber hinaus hinsichtlich Konzept, numerischer Verfahren und Datenformat mit Standard-TCAD-Umgebungen kompatibel sein, um eine unproblematische Eingliederung des orientierungsabhängigen Ätzprozesses in den Entwurf von Mikrosystemen zu gewährleisten. Dies erscheint von zunehmender Bedeutung, da mit der rasant fortschreitenden Entwicklung auf dem Gebiet der Mikrosystemtechnik immer komplexere Bauelemente entworfen werden, für deren Herstellung der naßchemische Prozeß nur einer von vielen Schritten zur dreidimensionalen Strukturierung ist.

Die Bereitstellung flexibler Simulationswerkzeuge für den orientierungsabhängigen Ätzprozeß ist andererseits wesentlich für den Entwurf neuer mikrostrukturierter Bauelemente und Mikrosystemkomponenten, wenn es gilt, mit Hilfe dieser Technologie neuartige Problemlösungen finden zu können.

Die Entwicklung eines zukunftsorientierten Simulationskonzeptes muß daher unbedingt den Anforderungen der Herstellungsprozesse realer Bauelemente entsprechen und beispielsweise Substrate, die aus mehreren Schichten mit unterschiedlichem Ätzverhalten bestehen, ebenso berücksichtigen wie dreidimensional vorstrukturierte Substrate.

Die wesentlichen Anforderungen, die ein neues Simulationswerkzeug für den orientierungsabhängigen Ätzprozeß erfüllen muß, können folgendermaßen umrissen werden:

- Korrekte Reproduktion der dreidimensionalen Geometrie geätzter Strukturen
- Erfassen von Oberflächenrauheit und Morphologie der Strukturen
- Exakte Analyse von Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken
- Einbindung von Ätzstopptechniken in die Simulation
- Simulation von Mehrschichtsubstraten
- Kompatible Einbindung in Simulationsumgebungen für andere Strukturierungstechniken
- Automatische Extraktion charakteristischer Größen zur Analyse und zum Vergleich von Designvarianten und zur Optimierung von Mikrobaulementen
- Modellierung der Einflüsse von Zusätzen, deren Wirkung zur Zeit nur empirisch bzw. heuristisch zu beschreiben ist.

Zweitrangig oder sogar unerheblich für die Simulation von Bauelementen sind Effekte und Einflüsse, die durch exakte und reproduzierbare Prozeßführung soweit vermieden bzw. minimiert werden können, daß eine Modellierung und Implementierung in ein Simulationswerkzeug nicht zwingend erforderlich erscheint. Dazu gehören Effekte wie z.B. die Bildung von Mikropyramiden oder Einflüsse durch Verunreinigungen der Ätzlösung, wie auch die Berücksichtigung der steigenden Konzentration der gelösten Reaktionsprodukte in der Ätzlösung.

## **Inhalt der vorliegenden Arbeit**

Die Problemstellungen zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse können in zwei Teilbereiche gegliedert werden:

1. Die physikalisch und elektrochemisch basierte Modellierung des Ätzmechanismus.
2. Die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Grenzfläche zwischen Ätzlösung und Kristall („Evolution von Ätzfront und Ätzkörper“).

Dementsprechend beginnt die vorliegende Arbeit in Kapitel 2 mit einer Zusammenfassung der allgemeinen kristallographischen Eigenschaften von Silizium, die letztlich die Ursache für den orientierungsabhängigen Charakter des Ätzprozesses darstellen, und gibt eine Übersicht über bislang vorgeschlagene Modelle ausgehend von der chemischen bzw. elektrochemischen Natur der Kristallauflösung in basischen Lösungen. Danach werden die aus der Literatur bekannten Methoden zur Ätzratenbestimmung vorgestellt, die die anisotropen Eigenschaften des Ätzmechanismus qualitativ und quantitativ charakterisieren. Es werden auch einige Teststrukturen diskutiert, die bislang kaum in die Praxis Eingang gefunden haben, die jedoch zusätzliche Informationen zur Bildung und Entwicklung gestufter Bereiche liefern könnten. Danach werden alle Effekte und Parameter summarisch zusammengestellt, deren Auswirkung auf die Anisotropie des Ätzprozesses in der Literatur dokumentiert wurde. Schließlich werden dann auch noch andere Materialien mit orientierungsabhängigen Ätzeigenschaften kurz diskutiert.

Im Kapitel 3 werden verschiedene Möglichkeiten zur Modellbildung der naßchemischen Ätzprozesse dargestellt und die Grundlagen bereits existierender Implementierungen kurz skizziert. Hierbei aufgetretene Probleme werden analysiert und schließlich eine Bewertung dieser Modelle vorgenommen. Vor diesem Hintergrund wird schließlich die Motivation zur Implementierung eines Stufenätzmodells für das orientierungsabhängige Ätzen im Rahmen dieser Arbeit dargelegt.

Die Simulation von Ätzprozessen gehört thematisch zum umfangreichen Gebiet der Topographiesimulation, deren grundsätzliche Methoden in Kapitel 4 dargestellt werden. Die Aufgabenstellung der Topographiesimulation besteht ganz allgemein darin, die Bewegung einer Grenzfläche zwischen zwei Strukturelementen zu beschreiben, was für komplexe physikalischen Prozesse erhebliche Probleme aufwerfen kann. Bislang wurden eine Reihe von Verfahren entwickelt, diese Aufgaben numerisch robust, zuverlässig und hinsichtlich des Rechenaufwandes effizient zu beherrschen. Die in der Literatur dokumentierten Verfahren müssen entsprechend den problemspezifischen Anforderungen (und vom Benutzer definierten Eigenschaften) eingeordnet und gegebenenfalls angepaßt werden. Mit dem in dieser Arbeit entwickelten Simulationskonzept für orientierungsabhängige Ätzprozesse werden die beiden Gebiete Topographiesimulation und Modellierung naßchemischer Ätzprozesse zusammengeführt. An dieser Stelle werden auch die wesentlichen Vor- und Nachteile der vorgestellten Methode aufgezeigt.

Kapitel 5 zeigt die an ausgewählten Teststrukturen erzielten Simulationsergebnisse und stellt diese, soweit möglich, experimentellen Untersuchungen gegenüber. Dabei konnten einige interessante Ergebnisse gewonnen werden, die auch zur weiteren Validierung des Stufenätzmodells beitragen. Die ausgewählten Beispiele demonstrieren außerdem die Flexibilität und Anwendungstauglichkeit des Simulationskonzeptes hinsichtlich des Entwurfs mikrostrukturierter Bauelemente. Deshalb werden sowohl die in der Volumenmikromechanik üblichen Grundstrukturen (z.B. Kompensationstrukturen für konvexe Ecken und Ätzstoppschichten) behandelt als auch komplexere reale Bauelemente, die zur Herstellung neben dem naßchemischen Ätzen auch andere Techniken zur dreidimensionalen Strukturierung erfordern. Ferner wird die Einbeziehung realistischer Simulationsgebiete, die aus Schichten mit unterschiedlichen Ätzeigenschaften bestehen, demonstriert.

Kapitel 6 faßt schließlich die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick auf zukünftige Erfordernisse und Möglichkeiten der Modellierung und Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse.

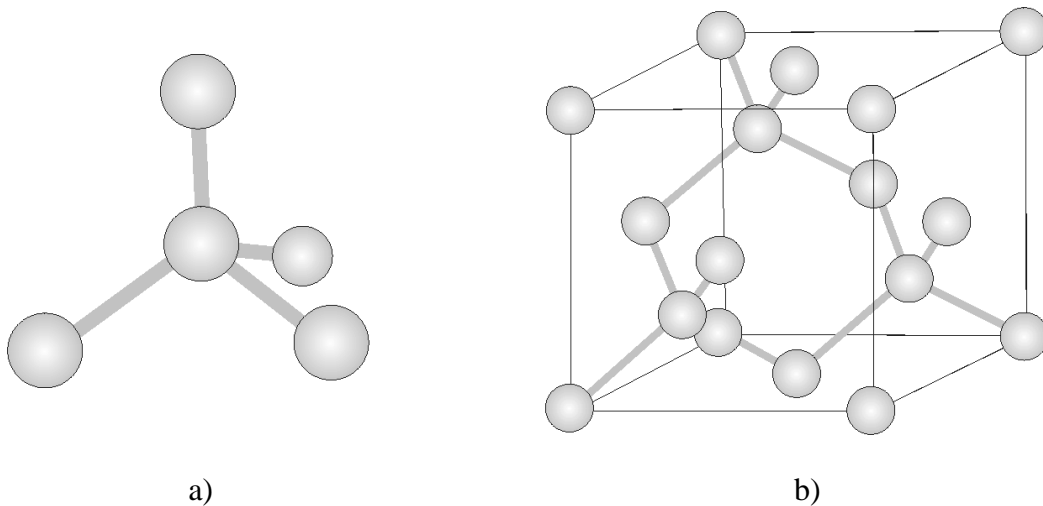
Vor dem Hintergrund der nach wie vor offenen Fragen und der methodisch recht unterschiedlichen Modellierungsansätze sowie der kontrovers diskutierten Interpretationen der Ätzmechanismen muß sich ein Simulationsansatz für das orientierungsabhängige Ätzen konsequenterweise auf ausgewählte Teilaspekte konzentrieren. In diesem Sinne liegt der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit in der Entwicklung eines flexiblen, anwendungsorientierten Konzeptes zur Simulation von naßchemischen Ätzprozessen, um den Entwurf von mikrostrukturierten Bauelementen bei exakter Prozeßführung zu unterstützen.



## 2 Theoretische Grundlagen zum naßchemischen Kristallätzen

### 2.1 Kristallographische Eigenschaften von Silizium

Die Einheitszelle des Siliziumkristalls ist nach der sogenannten Diamantstruktur aufgebaut, mit einer Gitterkonstanten von 0,543 nm. Ein Siliziumatom im Inneren eines ungestörten Kristalls hat, wie in der Abbildung 2.1 a) skizziert, vier nächste Nachbaratome, deren Positionen einen Tetraeder aufspannen, in dessen Zentrum das betrachtete Atom sitzt. Der Abstand eines Siliziumatoms zu seinen nächsten Nachbarn beträgt dabei etwa 0,235 nm. Die gleiche Anordnung der Atome ergibt sich auch, indem zwei kubisch flächenzentrierte Gitter um ein Viertel einer Raumdiagonale in dieser Richtung gegeneinander verschoben werden. Diese Anordnung ist in Abbildung 2.1 b) dargestellt.



**Abb. 2.1:** a) Siliziumatom mit vier nächsten Nachbarn.  
b) Einheitszelle des Siliziumkristalls.

Neben den bekannten elektronischen Halbleitereigenschaften zeigt einkristallines Silizium auch ein bemerkenswertes mechanisches Verhalten. Dies resultiert aus den stark anisotropen Potentialen der kovalenten Bindungen der  $sp^3$ -Hybridorbitale, die bei monokristallinem Material, wie es heute nahezu perfekt mit den ausgereiften Verfahren der Siliziumtechnologie hergestellt werden kann, eine sehr hohe Steifigkeit bewirken. Dadurch ergibt sich die besonders bemerkenswerte elastische Verformbarkeit bei Raumtemperatur (300 K), die auch bei extremen Auslenkungen keine bleibende plastische Komponente oder Hysterese aufweist. Die mechanischen Materialparameter sind sogar mit hochwertigem Stahl vergleichbar, weshalb Silizium ein außerordentlich attraktiver Werkstoff für mikromechanische Bauelemente ist. Ferner wurden in der Mikroelektronik viele inzwischen ausgereifte Technologien zur Strukturierung von Silizium entwickelt, die auch zur Herstellung von Mikrosystemtechnikkomponenten zur Verfügung stehen. Neben monokristallinem Silizium werden in der Mikrosystemtechnik häufig auch Schichten aus polykristallinem Silizium verwendet, das wegen der geringen Beweglichkeit von Kristallversetzungen und Korngrenzen ähnlich gute mechanische Eigenschaften wie einkristallines Material aufweist.

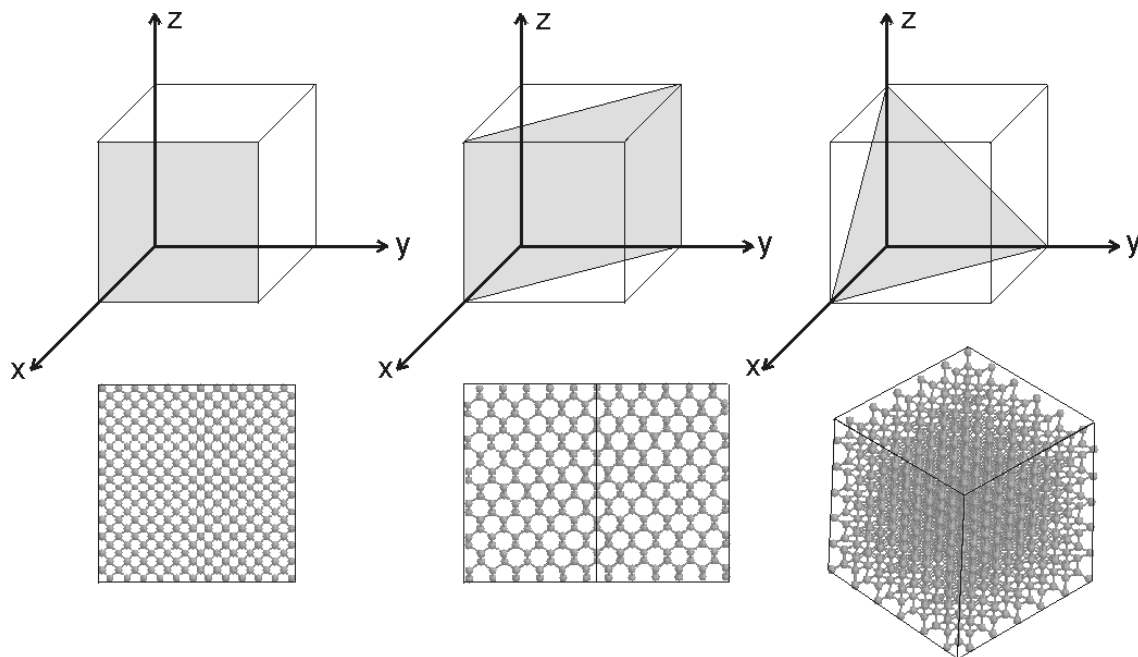
### **Bezeichnung kristallographischer Ebenen und Richtungen**

Kristallographische Flächen und Richtungen des Kristalls werden mit sogenannten Millerindizes  $\{hkl\}$  beschrieben. Die drei Parameter  $h$ ,  $k$  und  $l$  repräsentieren dabei die kartesischen Komponenten eines Normalenvektors auf der betrachteten Kristallebene. In kubischen Kristallstrukturen sind diese Komponenten identisch mit den reziproken Achsenabschnitten der dazu gehörigen Ebene (siehe Abbildung 2.2).

In dieser Arbeit bezeichnen geschweifte Klammern  $\{\dots\}$  eine Menge symmetrisch äquivalenter Ebenen, runde Klammern  $(\dots)$  beziehen sich auf eine im konkreten Beispiel betrachtete Kristallebene, die durch die Einführung eines Koordinatensystems eindeutig festgelegt werden muß, und eckige Klammern  $\langle \dots \rangle$  schließlich bezeichnen einen Normalenvektor auf einer Kristallebene. Bei der Verwendung der eckigen Klammern  $\langle hkl \rangle$  wird in dieser Arbeit nicht zwischen Vektoren auf einer bestimmten Kristallebene  $(hkl)$  und der Bezeichnung der Normalenvektoren einer Ebenengruppe  $\{hkl\}$  unterschieden.

Abbildung 2.2 zeigt die Lage der niedrig indizierten Hauptkristallebenen (100), (110) und (111) in einem kartesischen Koordinatensystem. Darunter ist in den entsprechenden Perspektiven die atomare Struktur eines Siliziumwürfels, mit den gedachten Kanten zur besseren Orientierung, dargestellt. Die Darstellung der atomaren Struktur veranschaulicht deutlich die unterschiedlichen Belegungsdichten der Atome auf verschiedenen Kristallebenen und vermittelt einen anschaulichen Eindruck des – in der atomistischen Betrachtung – anisotropen, d.h. richtungsabhängigen Charakters des einkristallinen Materials.

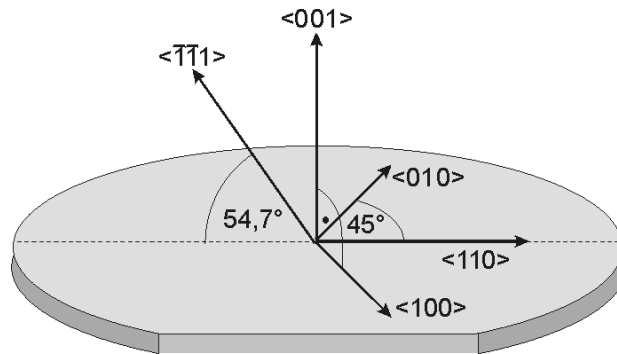




**Abb. 2.2:** a) Lage der Hauptebenen (100), (110) und (111) im kartesischen Koordinatensystem.  
 b) Darstellung der atomaren Kristallstruktur eines Silizium Würfels in  $\langle 100 \rangle$ -,  $\langle 110 \rangle$ - und  $\langle 111 \rangle$ -Richtung.

Wenn wir annehmen, daß eine dieser Kristallebenen zumindest stückweise die Facette eines aus Silizium geformten Ätzkörpers darstellt, so erkennen wir, daß die Atome der {100}- und {110}- Ebenengruppe jeweils zwei Bindungen zum Kristall haben und zwei freie Bindungen zur Ätzlösung, wo sie mit Wasserstoffatomen abgesättigt sind [156]. In  $\langle 110 \rangle$ - Richtung besitzt der Kristall eine sehr locker gepackte Struktur mit großen durchgehenden Kanälen. Die Atome der {111}-Ebenen haben drei Bindungen zum Kristall und nur eine freie Bindung, an der eine chemische Reaktion einsetzen kann. Unabhängig von Ätzlösung und anderen Prozeßparametern haben die Ebenen der {111}-Gruppe immer die geringsten Ätzraten, während die Ätzraten aller anderen Ebenen nicht in direkten Zusammenhang mit der Anzahl der freien Bindungen oder der Packungsdichte der Atome gebracht werden können.

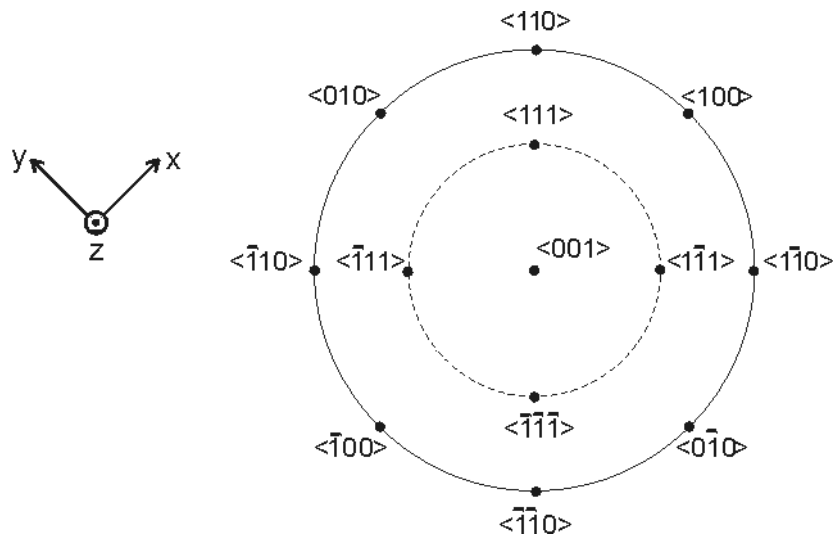
In Abbildung 2.3 ist schematisch eine Siliziumscheibe (in dieser Arbeit wird im Folgenden die in der Literatur übliche englische Bezeichnung „Wafer“ verwendet) skizziert, auf deren Oberfläche die wichtigsten Richtungen und Winkel der Hauptebenen eingezeichnet sind, die in dieser Arbeit immer wieder verwendet werden. Die kristallographische  $\langle 110 \rangle$ -Richtung wird auf den Wafern mit dem Hauptflat (vgl. Abb. 2.3) gekennzeichnet, nach dem auch die Masken justiert werden, wenn keine große Präzision gefordert ist.



**Abb. 2.3:** Silizium Wafer mit  $\langle 001 \rangle$ -Oberflächenorientierung und einigen ausgewählten Richtungsvektoren der Hauptkristallebenen  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  und  $\{111\}$ .

Der Winkel  $\alpha$  zwischen zwei Richtungsvektoren  $\vec{n}_1$  und  $\vec{n}_2$  ergibt sich zu:  

$$\alpha = \arccos \frac{\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2}{|\vec{n}_1| \cdot |\vec{n}_2|}$$
 Bezeichnen  $\vec{n}_1$  und  $\vec{n}_2$  Normalenvektoren zweier Ebenen, so entspricht dieser Winkel  $\alpha$  dem Zwischenwinkel dieser Ebenen.



**Abb. 2.4:** Stereographische Projektion der Richtungen der Hauptkristallebenen auf die  $(001)$ -Fläche und Koordinatensystem, aus dem die Millerindizes abgeleitet werden.

Wie aus der stereographischen Projektion der (001)-Ebene in Abbildung 2.4 zu entnehmen ist, weist die  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung eine vierfache Symmetrie auf, d.h. es gibt jeweils vier symmetrisch äquivalente Ebenen bzw. Richtungen der Hauptkristallebenen  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  und  $\{111\}$  auf einer  $\langle 001 \rangle$ -Oberfläche.

Die geometrische Anordnung der Hauptkristallebenen bezüglich der Waferoberfläche ist entscheidend für die Gestalt der mikromechanischen Strukturen, die auf der entsprechenden Waferorientierung hergestellt werden können, da mikromechanische Strukturen zumindest in großen Bereichen aus stabilen und (im Prinzip atomar) glatten  $\{111\}$ -Ebenen begrenzt werden sollten, um reproduzierbare Bauelementegeometrien mit guter Oberflächenqualität sicherzustellen.

Trotz des großen Einflusses der kristallographischen Charakteristika des Substratmaterials auf die herstellbaren Strukturen, können durch speziell gestaltete Prozeßführungen, z.B. mit Einbeziehung mehrstufiger Ätzschritte mit unterschiedlichen Masken, nicht nur eine Vielzahl ähnlicher Designvarianten, sondern auch qualitativ unterschiedliche Strukturen erzeugt werden. Eine ausführliche Übersicht über herstellbare Grundformen, wie z.B. mögliche Böschungswinkel oder verschiedene Realisierungen von Grundelementen der Mikromechanik, wie z.B. Federn und Balken, ist in [51] zusammengestellt. Für weitere Einblicke in die allgemeinen Eigenschaften von Kristallen sei auf die Literatur verwiesen, z.B. [87].

## 2.2 Spezifika des orientierungsabhängigen Naßätzens von Silizium

### Prozeßführung

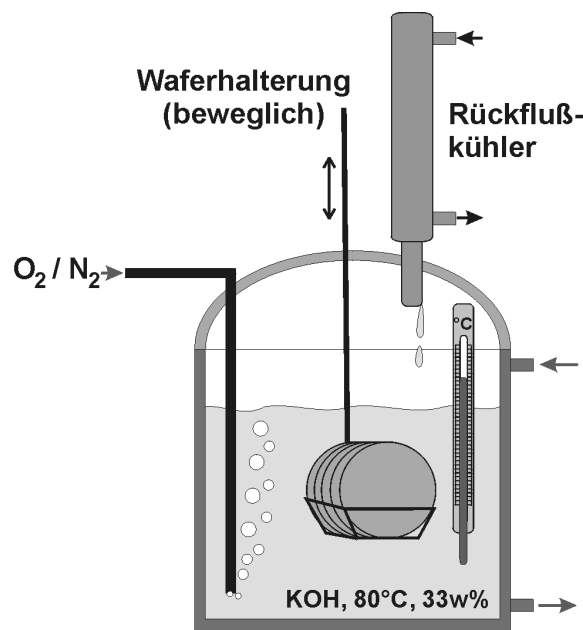
Der in dieser Arbeit behandelte orientierungsabhängige Ätzprozeß zur Herstellung dreidimensionaler Strukturen in monokristallinem Silizium ist ein naßchemischer Prozeß, bei dem beidseitig maskierte Wafer in einer geeigneten Halterung vollständig in eine wässrige Ätzlösung eingetaucht werden.

Um reproduzierbare Ergebnisse zu erzielen, müssen die Prozeßtemperatur und die Konzentration der Ätzlösung konstant gehalten werden, sowohl zeitlich während des Ablaufes des Prozesses als auch örtlich über allen zu behandelnden Waferoberflächen. Als Prozeßgefäß wird deshalb meist ein doppelwandiger Behälter aus Quarzglas verwendet, in dem die Temperatur durch eine Heizflüssigkeit zwischen Innen- und Außenwand auf bis zu 0,01 Grad genau eingestellt werden kann. Typische Prozeßtemperaturen liegen zwischen 60°C und 90°C. Ein Rückflußkühler stellt eine Rückführung verdunsteter Flüssigkeit sicher und trägt somit zu einer konstanten Konzentration der Ätzlösung bei.

Während des Ätzprozesses muß die Ätzlösung ständig durchmischt werden, um die Diffusion chemischer Stoffe in der Lösung zu unterstützen und um die Desorption der Reaktionsprodukte von der Waferoberfläche zu beschleunigen. Einerseits kann somit eine gleichmäßige Konzentration der chemischen Stoffe und eine homogene Prozeßtemperatur auf den Waferoberflächen bestmöglich gewährleistet werden. Andererseits ist es zwingend erforderlich, daß Wasserstoffblasen, die bei der Auflösung von Silizium entstehen, von der Waferoberfläche kontinuierlich entfernt werden, da an Stellen, an denen die Wasserstoffbläschen haften, die Ätzlösung nicht in Kontakt mit dem Silizium steht und die Auflösung des Materials zeitweise unterbrochen wird. Dies führt zu einer schlechten Oberflächenqualität der hergestellten Bauelemente bis hin zur Ausbildung charakteristischer Oberflächenstrukturen, den sogenannten Mikropyramiden, die am Ende dieses Abschnitts in Kapitel 2.6 kurz angesprochen werden.

Da der Prozeß sehr empfindlich von Verunreinigungen in der Ätzlösung beeinflusst wird, müssen alle Vorrichtungen und Geräte, die mit der Ätzlösung in Berührung kommen, wie Temperaturfühler, Waferhalterung, Rührmagnet usw., mit Quarzglas ummantelt sein und vor dem Ätzprozeß einer intensiven standardisierten Reinigung unterzogen werden. Eine rechnerunterstützte Kontrolle der Temperaturstabilität und des Einschwingverhaltens der Temperatur nach dem Einbringen der Wafer in die Ätzlösung ist ebenfalls vorteilhaft.

Eine prinzipielle Darstellung einer relativ aufwendigen experimentellen Anordnung zum naßchemischen Ätzen, entnommen aus z.B. [24,62,126], ist in Abbildung 2.5 dargestellt.



**Abb. 2.5:** Schematische Darstellung einer experimentellen Anordnung zum naßchemischen Ätzen nach [24,62,126].

### Terminologie

Die Bezeichnung „orientierungsabhängig“ resultiert aus der experimentellen Beobachtung, daß Kristallebenen verschiedener kristallographischer Orientierungen stark unterschiedliche Ätzraten aufweisen. Die Vorstellung, der kristalline Ätzkörper bestehe während des Ätzens aus prinzipiell identifizierbaren kristallographischen Facetten, wird in Kapitel 2.4.3 kritisch diskutiert und als Fazit sogar in Frage gestellt. Dennoch werden in Anlehnung an publizierte Literatur und wegen der allgemein üblichen und kompakten Ausdrucksweise auch in dieser Arbeit oft Begriffe wie „Facetten“, „ $\{hkl\}$ -Flächen“ und „Kristallebenen“ benutzt, auch wenn man bei exakter Formulierung besser von Einhüllenden gestufter Bereiche sprechen sollte. Ferner ist beim Entwurf und der konzeptionellen Gestaltung von Bauelementen die Berücksichtigung schnell bzw. langsam ätzender Bereiche und deren Wechselwirkung von entscheidender Bedeutung, unabhängig vom Modell für den realistischen physikalischen Ablauf des Prozesses, der zur Entstehung dieser Bereiche führt.

Häufig wird für den naßchemischen Ätzprozeß in basischen Lösungen auch die Bezeichnung „anisotropes Ätzen“ verwendet, wobei dies nicht zu verwechseln ist mit plasmaunterstützten Trockenätzprozessen (bzw. reaktivem Ionenätzen), bei denen, bedingt durch senkrecht gerichteten Ionenbeschuß auf den Wafer, die Ätzrate senkrecht zur Waferoberfläche wesentlich größer ist als in lateraler Richtung.

Zur Veranschaulichung dieser Begriffsklärung sind in Abbildung 2.6 idealisierte Querschnitte von typischen Ätzprofilformen eines isotropen (a), eines anisotropen (b) und eines orientierungsabhängigen (c) Ätzprozesses dargestellt.



**Abb. 2.6:** Typische (idealisierte) Profilformen verschiedener Ätztechnologien:

- Ideal isotropes Ätzprofil; der Materialabtrag erfolgt in alle Richtungen gleichmäßig.
- Ideal anisotropes Ätzprofil; der Materialabtrag senkrecht zur Waferoberfläche ist sehr viel größer als in lateraler Richtung.
- Orientierungsabhängiges Ätzprofil; Schnitt entlang einer  $\{110\}$ -Ebene eines Wafers mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung; typischer Querschnitt eines sogenannten V-Grabens, gebildet aus stabilen  $\{111\}$ -Flächen.

## Ätzlösungen

Nach gegenwärtigem Stand der Forschung zeigen alle wässrigen basischen Lösungen mit einem pH-Wert größer als 12 prinzipiell einen orientierungsabhängigen Charakter beim Ätzen von monokristallinem Silizium. Entscheidend für diesen Ätzprozeß ist demnach das Vorhandensein von OH<sup>-</sup>-Ionen und Wassermolekülen.

Die prinzipielle Abhängigkeit der Ätzrate der  $\{100\}$ -Ebenengruppe (wie auch der anderen Ebenengruppen) von Ätztemperatur und Konzentration der Ätzlösung ist in Abbildung 2.10 graphisch dargestellt. Für andere Ätzlösungen und Ebenengruppen gilt qualitativ der gleiche funktionale Zusammenhang.

Seit der Entdeckung der Richtungsabhängigkeit der Ätzraten vor mehr als 30 Jahren wurde eine Vielzahl von möglichen Ätzlösungen untersucht und auch technisch verwendet. Die am besten untersuchten Chemikalien sind Metall-Hydroxide wie NaOH [83], KOH [126,142], CsOH [82,171], organische Hydroxide wie NH<sub>4</sub>OH [123], TMAH [142,144,148] und auch die hoch giftigen und explosiven Stoffe Hydrazin [83,99] und Ethylendiamin (EDP) [83]. Entscheidend für die Auswahl einer Chemikalie sind Kriterien wie Handhabbarkeit, Toxizität, umweltgerechte Entsorgung der verbrauchten Ätzlösung, Ätzraten, Oberflächenqualität der Strukturen, IC-Kompatibilität, Anwendbarkeit von Ätzstopptechniken sowie Selektivität gegenüber

Maskierungsschichten und anderen Materialien (KOH ätzt z.B. auch Aluminium, das häufig für Metallisierungen verwendet wird). Qualitative Unterschiede im Hinblick auf die herstellbaren Strukturen treten bei den verschiedenen untersuchten Chemikalien nicht auf, wenn die Strukturen von den stabilen {111}-Ebenen gebildet werden. Allerdings unterscheiden sich die Chemikalien im Anisotropieverhältnis und eventuell in den Orientierungen der schnell ätzenden Bereiche, was beim Entwurf der Ätzmasken, insbesondere bei der Auslegung von Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken berücksichtigt werden muß (siehe dazu Kapitel 5.4.1). Einen großen Einfluß sowohl qualitativ als auch quantitativ haben dagegen Zusätze zu den Ätzlösungen, insbesondere Isopropanol (IPA) [10,126,175].

Am häufigsten werden gegenwärtig KOH (Kaliumhydroxid) und TMAH (Tetra-Methyl-Ammoniumhydroxid, chemische Formel:  $(\text{CH}_3)_4\text{NOH}$ ) verwendet, da diese einfach in der Handhabung und kostengünstig in hoher Reinheit erhältlich sind und gute Ergebnisse bezüglich Oberflächenqualität und Reproduzierbarkeit der hergestellten Strukturen liefern. TMAH ist zudem kompatibel zu industriellen CMOS-Prozessen, da es keine Alkalimetallatome enthält, die leicht in die Grenzschicht zwischen Oxidschichten (Gateoxid bei Transistoren) und Silizium diffundieren können und somit die Funktion elektronischer Bauelemente beeinträchtigen bzw. stören können. Dagegen weist KOH eine höhere Ätzrate auf, was das lokale Durchätzen ganzer Wafer erleichtert, und führt zu besseren, d.h. glatteren Oberflächen.

Eine Gegenüberstellung der technisch wichtigsten Ätzeigenschaften von KOH und TMAH wurde z.B. von Tabata durchgeführt [148] und ist in Tabelle 2.1 wiedergegeben. Graphisch hervorgehoben wurde das Verhältnis der Ätzraten der am langsamsten ätzenden Flächen des {111}-Zonenverbandes und der {100}-Ebenen, die ungefähr der Tiefenätzrate auf Wafern mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung entspricht. Dieser Quotient der Ätzraten der am langsamsten ätzenden Flächen (dies sind immer {111}-Ebenen) und der Tiefenätzrate, in diesem Fall ist das die  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung, wird als „Anisotropieverhältnis“ bezeichnet. Diese Größe ist bei einer gegebenen Oberflächenorientierung und Zusammensetzung der Ätzlösung abhängig von den Prozeßparametern Temperatur und eventuell Ätzzeit und kann zu einer ersten Charakterisierung eines Prozesses verwendet werden. Die genaue Zusammensetzung der Ätzlösung und darin enthaltener Verunreinigungen ist ein wichtiger Einflußfaktor für den Prozeß. Vor allem Anteile verschiedener Metalle, die in den Ätzlösungen unvermeidbar enthalten sind, können deutliche Auswirkungen auf den Ätzprozeß und somit auf die Qualität und Reproduzierbarkeit der erzeugten Strukturen haben.

Eine weiterführende Diskussion der Untersuchungen verschiedener Ätzlösungen soll an dieser Stelle nicht geführt werden. Es bleibt lediglich zu bemerken, daß dieselbe Chemikalie verschiedener Hersteller durchaus unterschiedliche Ätzergebnisse bei identischer Prozeßführung liefern kann, was wahrscheinlich auf kleinste Verunreinigungen der Ätzlösung z.B. mit Metallatomen zurückzuführen ist. Diese Eigenschaft erschwert den Vergleich experimenteller Daten aus verschiedenen Quellen erheblich und muß bei der Bewertung und Diskussion unterschiedlicher Ergebnisse berücksichtigt werden. Eine sehr umfangreiche Zusammenstellung experimenteller Daten findet sich in [129].

	TMAH (90°, 22w%)	KOH (90°, 20%)
{100} Ätzrate (µm/min)	1,0	2,5
{110} Ätzrate (µm/min)	1,4	3,8
Oberflächenrauheit (nm)	<100	<100
<b>{111}/{100} Ätzratenverhältnis</b>	<b>0,033</b>	<b>0,025</b>
SiO <sub>2</sub> Ätzrate	0,23	9,6
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> Ätzrate	<0,01	<0,01
Elektrochemischer Ätzstopp (pn-Übergang)	möglich	möglich
p <sup>+</sup> Ätzstopp	möglich	möglich
CMOS Kompatibilität	gegeben	nicht gegeben

**Tab. 2.1:** Vergleich charakteristischer Eigenschaften der Ätzlösungen TMAH und KOH nach [148].



## Wafermaterial

In praktisch allen technischen Anwendungen wird ein ebener, maskierter Siliziumwafer als Ausgangsmaterial verwendet. Im Allgemeinen werden n-dotierte (Phosphor) Wafer verwendet, die nach dem Czochralski-Verfahren hergestellt werden. Der spezifische Widerstand liegt typischerweise zwischen 1 bis 10  $\Omega\text{cm}$ , die Versetzungsdichte ist kleiner als  $100\text{ cm}^{-1}$ . Die Verkippung der (001)-Ebene zur tatsächlichen Oberfläche des Wafers beträgt maximal  $\pm 1^\circ$ . Die Fehlorientierung der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung zum Hauptflatt der {100}-Wafer beträgt ebenfalls  $\pm 1^\circ$ . Dieser relativ große Fehler ist eine Folge der Kantenverrundung nach dem Sägen der Wafer. Durch Justierfehler des Belichtungsgerätes (Maskaligner) bei der Photolithographie kann nochmals ein Fehler von  $\pm 1^\circ$  auftreten, so daß insgesamt eine Fehlorientierung einer Maskenkante bezüglich der kristallographischen  $\langle 110 \rangle$ -Richtung von bis zu  $\pm 2^\circ$  auftreten kann.

Um diesen relativ großen möglichen Fehler zu vermeiden, müssen aufwendige Methoden zur Präzisionsorientierung der Fotomasken angewendet werden, die dann allerdings eine mit einer Fehlorientierung kleiner als  $0,05^\circ$  beachtliche Genauigkeit erreichen [126].

## Maskierungsmaterial

Die Masken für einen Ätzprozeß müssen prinzipiell aus einem Material bestehen, das nicht oder nur mit vernachlässigbarer Rate von den verwendeten Chemikalien aufgelöst wird. Bevorzugt werden Schichtmaterialien aus der Standard-Siliziumtechnologie verwendet, da diese kostengünstig und in guter Qualität aufgebracht werden können. Hauptsächlich gewählt werden dünne Schichten aus Siliziumdioxid ( $\text{SiO}_2$ ) und Siliziumnitrit ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ), oder eine Kombination beider Schichten zur Reduzierung mechanischer Spannungen zwischen Maske und Substrat. Dabei ist allerdings zu beachten, daß Siliziumoxid von einigen Ätzlösungen, wie z.B. KOH, angegriffen wird (siehe Tabelle 2.1), allerdings mit einer Ätzrate, die deutlich geringer ist als bei einkristallinem Silizium.

Eine verstärkte Randkeimbildung durch mechanische Spannungen in der Maske oder die Auflösung der Maskenränder bei Oxid-/Nitrit-Masken führt zu einer stärkeren Auflösung der {111}-Flächen und damit zu einer Verringerung des Anisotropieverhältnisses, wobei allerdings der Effekt in absoluten Werten als relativ gering gewertet wird [126]. Kristalldefekte, wie z.B. Schraubenversetzungen, führen dagegen zu großen Kratern auf {111}-nahen Seitenflächen von V-Gräben und verringern das Anisotropieverhältnis deutlich, da diese Defekte den Ausgangspunkt für einen lateralen Abschälprozeß der stabilen {111}-Ebenen bilden.

Auf die Herstellung und photolithographische Strukturierung der Masken wird in dieser Arbeit nicht eingegangen. Ebenso wenig können Effekte behandelt werden, die von nicht idealen Maskeneigenschaften wie welligen Kanten oder mechanischen Spannungen zwischen Maske und Substrat herrühren. Mechanische Spannungen zwischen Maske

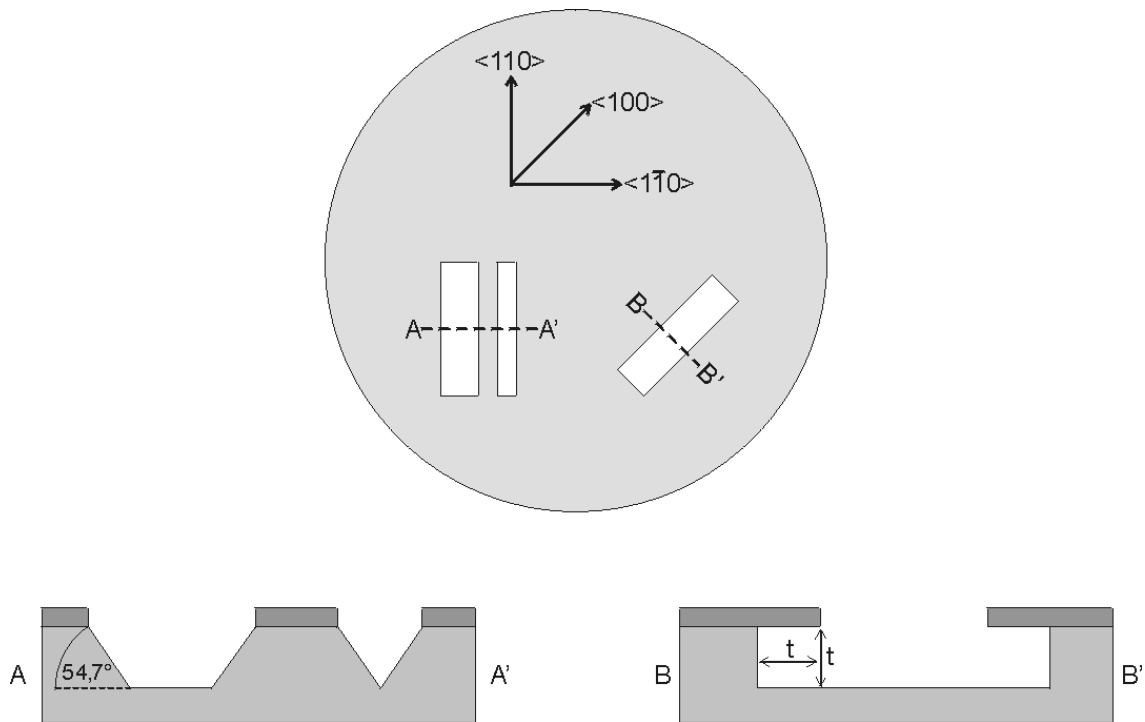
und Siliziumsubstrat verursachen eine verstärkte Randkeimbildung (vgl. Abschnitt 2.4.3, Abbildung 2.10) und beeinflussen somit Ätzraten und Anisotropieverhältnis und bestimmen damit bis zu einem gewissen Grad auch die Gestalt der prozessierten Mikrostrukturen.

### **2.3 Mit orientierungsabhängiger Ätztechnik fertigbare charakteristische Strukturen**

In diesem Abschnitt werden anhand einiger typischer Grundstrukturen, die mit naßchemischen Ätzverfahren hergestellt werden können, beispielhaft charakteristische Eigenschaften des Prozesses dargestellt, die bei der Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente berücksichtigt werden müssen bzw. gezielt genutzt werden können.

Für orientierungsabhängige Ätzprozesse sind zwei Phänomene charakteristisch und haben eine entscheidende Bedeutung für die Anwendung dieser Technologie zur Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente. Das ist zum einen die Stabilität der {111}-Ebenen und zum anderen die starke Unterätzung konvexer Maskenstrukturen.

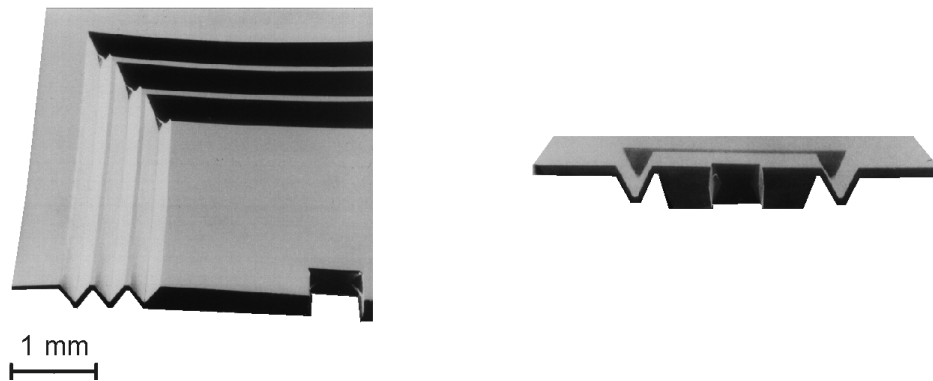
Die Abbildung 2.7 zeigt Ätzprofile, die mit verschiedenen orientierten rechteckigen, konkaven Maskenöffnungen auf einem Wafer mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung bei der Ätzung mit reiner KOH-Lösung erzeugt werden. Die Profile der Ätzgruben sind qualitativ nur abhängig von Oberflächenorientierung des Wafers, der Orientierung der Maskenkante und der Zusammensetzung der verwendeten Ätzlösung. Andere Prozeßparameter wie Temperatur und Konzentration der Ätzlösung haben keinen Einfluß auf die qualitative Form der Grubenprofile. Schräge Maskenkanten, deren Winkel nicht exakt mit der  $\langle 110 \rangle$ - oder  $\langle 100 \rangle$ -Richtung übereinstimmt führen zu unregelmäßig gestuften und terrassierten Bereichen, deren Morphologie in Kapitel 5.2 näher beschrieben wird.



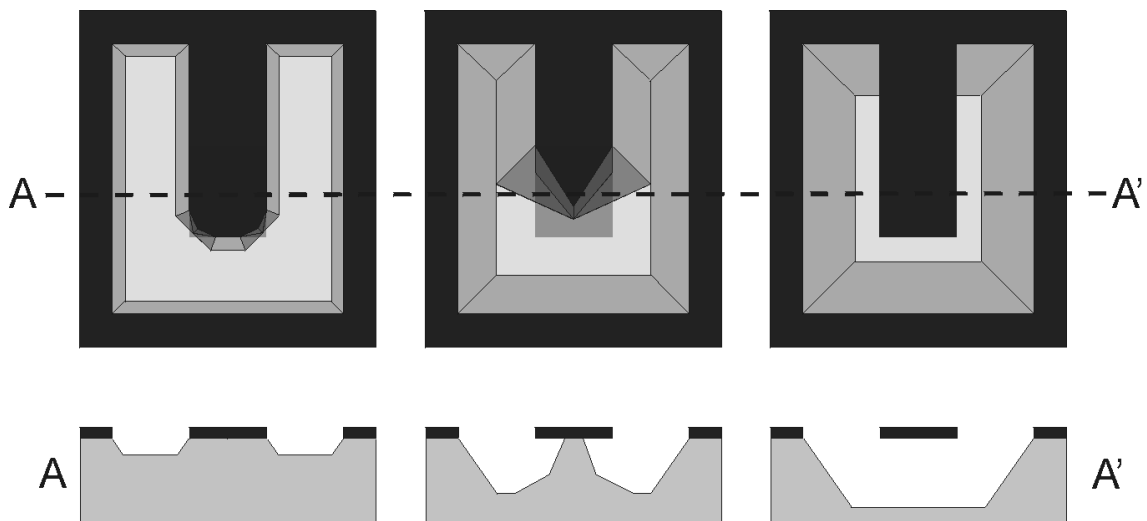
**Abb. 2.7:** Ätzprofile verschieden orientierter Maskenöffnungen auf einem Wafer mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung bei der Ätzung mit reiner KOH-Lösung.  
 Schnitt A-A': V-Gräben, sehr geringe Unterätzung der Maskecke.  
 Schnitt B-B': Graben mit  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Seitenwänden, die Unterätzung der Maske entspricht der Tiefenätzrate (idealisiert).

Die Abbildung 2.8 zeigt sehr interessante Strukturen, die in dieser Art wohl nur mit orientierungsabhängigen Ätzprozessen hergestellt werden können. Die abgebildeten quadratischen Platten sind an gefächerten Membranen aufgehängt, vergleichbar mit einem Faltenbalg, der von stabilen und im Prinzip beinahe atomar glatten  $\{111\}$ -Ebenen gebildet wird. Die Herstellung der konvexen Ecken, die entlang der Diagonalen der Struktur verlaufen, erfordern aufwendige zusätzliche Maskenstrukturen (sog. Kompensationsstrukturen, vgl. Kapitel 5.4.1), um eine Unterätzung dieser Ecken zu verhindern. Mit naßchemischen Ätzprozessen können auch für mikromechanische Verhältnisse bemerkenswert große Strukturen hergestellt werden, wie der Maßstab in Abbildung 2.8 verdeutlicht.

Die Unterätzung konvexer Maskenecken und die daraus folgenden Konsequenzen für mikromechanische Bauelemente ist in Abbildung 2.9 skizziert und kann als zweite charakteristische Eigenschaft der orientierungsabhängigen Ätzprozesse bezeichnet werden. Die dunkelgrau dargestellte Maske hat eine U-förmige Öffnung mit zwei konvexen Ecken.



**Abb. 2.8:** Platten, flexibel aufgehängt an gefächerten Membranen [98], die von beidseitig geätzten V-Gräben gebildet werden. Bemerkenswert sind die Strukturgrößen im Millimeterbereich.



**Abb. 2.9:** Unterätzung konvexer Maskenecken; Aufsicht auf die  $\langle 100 \rangle$ -Oberfläche und Querschnitt durch die Struktur, nach [108].

Der Begriff „konvexe Ecke“ bedeutet, daß zwei Maskenkanten einen Winkel kleiner als  $180^\circ$  einschließen. Beträgt der Winkel zwischen zwei Maskenkanten dagegen mehr als  $180^\circ$ , wird eine konkave Ecke gebildet. Die konvexe bzw. konkave Form einer

Maskenecke hat entscheidende Auswirkungen auf die Strukturbildung während der Ätzung. Denn an konvexen Maskenecken bilden sich immer schnell ätzende Bereiche aus (siehe Abbildung 2.9, links), deren charakteristische Gestalt und Morphologie abhängig ist von den Prozeßparametern und der Zusammensetzung der Ätzlösung, insbesondere der Zugabe von Zusätzen wie z.B. IPA. Diese schnell ätzenden Bereiche führen zu einer starken Unterätzung der konvexen Maskenecken, d.h. die dreidimensionale Struktur weicht erheblich von der Maskenform ab (siehe Abbildung 2.9, Mitte). Dies kann soweit gehen wie in Abbildung 2.9 rechts dargestellt, wo das gesamte Material unter dem Maskensteg weggeätzt wurde und die entstandene Grube nur von stabilen  $\{111\}$ -Flächen und dem  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Boden gebildet wird. Eine Maske mit nur einer rechteckigen Öffnung hätte unter sonst gleichen Bedingungen bei gleicher Ätzzeit zu demselben Ergebnis geführt, d.h. der Steg der Maske hat keinen Einfluß auf die geätzte Struktur. Dies ist der idealisierte Fall, wenn der in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientierte Boden der Grube als eben vorausgesetzt wird und von einer örtlich konstanten Äztiefe ausgegangen wird. Bei der experimentellen Durchführung dieser Ätzung wäre zu erwarten, daß der Boden im Bereich unter dem Maskensteg etwas höher ist als in den anderen Bereichen der Grube (siehe dazu Kapitel 5.3).

## **2.4 Modelle für die Anisotropie des Ätzprozesses (Literaturübersicht)**

In diesem Abschnitt werden in der Literatur vorgeschlagene Erklärungen für die beobachteten orientierungsabhängigen Ätzeigenschaften auf der Grundlage chemischer Reaktionen referiert. Die Darstellung ist bewußt knapp gehalten und erhebt nicht den Anspruch auf Vollständigkeit, da eine ausführliche Zusammenstellung der bislang veröffentlichten Modelle den Rahmen und die Zielsetzung dieser Arbeit bei weitem überschreiten würde. Vielmehr sollen schwerpunktmäßig die Grundlagen für das in Kapitel 3.1.3 entwickelte Stufenätzmodell dargelegt werden.

### **2.4.1 Thermodynamische Grundlagen für das Kristallätzen und Kristallwachstum**

Die klassische Thermodynamik ist die Grundlage für Modelle, die das Ätzen als Umkehrung des Kristallwachstums betrachten. Dabei wird vorausgesetzt, daß sich der Siliziumkristall bei der Auflösung in der Ätzlösung aus einer endlichen Anzahl definierter und prinzipiell identifizierbarer Facetten zusammensetzt (siehe Kapitel 3.1.2). Die charakteristische Unterätzung konvexer Ecken wird der Ausbildung schnell ätzender Facetten zugeschrieben, die allerdings experimentell nicht eindeutig und reproduzierbar identifiziert werden können [1,15,61,95,111,169]. Zahlreiche Veröffentlichungen gelangen zu verschiedenen Interpretationen der kristallographischen Orientierung und Struktur dieser schnell ätzenden Bereiche.

Bei der Anwendung thermodynamischer Betrachtungen auf naßchemische Ätzprozesse treten einige grundsätzliche Probleme auf, die im Folgenden kurz angesprochen werden sollen. Die klassische Thermodynamik liefert lediglich Aussagen über Gleichgewichtszustände eines Systems, aber keine Informationen über den zeitlichen Ablauf von Vorgängen, die Kinetik oder Zwischenzustände. Die atomare Natur der Prozesse bei den chemischen Reaktionen, die zur Auflösung der Kristalle führen, wird nicht berücksichtigt. Unabhängig von der konkreten chemischen Reaktionen führen die Vorgänge an der Phasengrenzfläche zwischen Kristall und Ätzlösung zum Übergang von Atomen aus dem Festkörper in die Ätzlösung.

Das thermodynamische Gesamtsystem, wie es bei naßchemischen Ätzvorgängen gegeben ist (siehe Abbildung 2.5), stellt dabei ein weitgehend geschlossenes System mit isothermer und isobarer Prozeßführung dar. Durch die geregelte Temperatur wird ein Energieaustausch ermöglicht, während ein Stoffaustausch mit der Umgebung durch die Verwendung des Rückflußkühlers weitgehend unterbunden wird. Lediglich der bei der

Ätzung entstehende Wasserstoff kann aus dem Ätzgefäß entweichen (isobare Prozeßführung). Es liegt ein heterogenes System vor mit dem Siliziumkristall als fester Phase und der Ätzlösung (KOH, H<sub>2</sub>O und eventueller Zusätze) als flüssiger Phase. Aufgrund der Prozeßführung ist die freie Enthalpie  $G$  nach Gibbs zur Beschreibung des Systems geeignet:

$$G(p, T, n_1, \dots, n_k) = H - TS \quad (2.1)$$

Wobei  $H$  die Enthalpie,  $S$  die Entropie,  $T$  die Temperatur,  $p$  den Druck, und  $n_1, \dots, n_k$  die Konzentrationen der beteiligten Reaktionspartner bezeichnen. Die freie Enthalpie hängt unter den vorliegenden Bedingungen über die elektrochemischen Potentiale  $\mu_i$  der beteiligten Stoffe von den Änderungen der Konzentrationen ab.

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_i^k \mu_i dn_i \quad (2.2)$$

Der Index  $i$  bezeichnet dabei eine der  $k$  Komponenten des Systems.

Die elektrochemischen Potentiale ergeben sich zu:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \cdot \ln a_i + q_i F \Phi \quad (2.3)$$

Hierbei bezeichnet  $\mu_i^0$  das Standardpotential der betrachteten Komponente in der festen Phase,  $R$  die allgemeine molare Gaskonstante,  $T$  die absolute Temperatur,  $a_i$  die chemische Aktivität,  $q_i$  die spezifische Ladung der Komponente  $i$ ,  $F$  die Faraday-Konstante, und  $\Phi$  das elektrische Potential der Ätzlösung. Die elektrochemischen Potentiale müssen wegen der Coulomb-Wechselwirkung der elektrisch geladenen Ionen in der Ätzlösung betrachtet werden.

Nach den Gesetzen der Thermodynamik ist das thermodynamische Gleichgewicht des aus Ätzlösung und Siliziumfestkörper gebildeten zusammengesetzten Systems durch ein Minimum der freien Enthalpie charakterisiert, d.h.  $dG = 0$ .

Solange  $dG < 0$  gilt, geht Silizium in Lösung, bis die elektrochemischen Potentiale aller Komponenten in beiden Phasen gleich sind. Diese Gleichgewichtsbedingung ist (nach Gleichung 2.3) durch Ausgleich der Aktivitäten  $a_i$  zu erreichen, die mit den Konzentrationen  $c_i$  der beteiligten Stoffe zusammenhängen gemäß  $a_i = \gamma_i c_i$ .

Bei Ausgleich der Aktivitäten ist die Ätzlösung mit Silizium gesättigt. Der Koeffizient  $\gamma_i$  ist ein Maß für die Abweichung der Lösung von dem Zustand idealer Verdünnung, in dem sich die gelösten Teilchen gegenseitig nicht beeinflussen. Dieser Faktor berücksichtigt die mit zunehmender Konzentration in der Lösung nicht mehr zu vernachlässigenden Wechselwirkungen der solvatisierten Ionen und der starken Anziehungskräfte der Ionen auf die Dipole der Wassermoleküle. Die Parameter  $\gamma_i$  sind nur für geringe Konzentrationen näherungsweise zu bestimmen, für die bei Ätzprozessen relevanten Konzentrationen von bis zu 6 mol/l (entspricht etwa 40 %iger KOH Lösung) sind Werte für  $\gamma_i$  nur mit großer Unsicherheit ermittelbar. Ohnehin wird

aber hier der Gültigkeitsbereich der Gleichgewichtsthermodynamik angesichts der bei der Ätzung vorliegenden Verhältnisse verlassen.

Die Änderung der Oberflächengestalt des Ätzkörpers wird mit der Einbeziehung der freien Oberflächenenergien  $\sigma_i$  in die thermodynamische Betrachtung eingebunden. Dieses Konzept ist vom Kristallwachstum abgeleitet, bei dem die freie Oberflächenenergie  $\sigma_i$  als diejenige Energie definiert wird, die zur Vergrößerung einer Oberfläche um den differentiellen Flächeninhalt  $dA$  aufgewendet werden muß. Bei isobarer und isothermer Prozeßführung geht Gleichung 2.2 in Gleichung 2.4 über, wenn die Kristallfläche  $i$  ausreichend groß ist, so daß die Beiträge der Kanten der Facetten zur freien Oberflächenenergie vernachlässigt werden können:

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_i^K \mu_i dn_i + \sigma_i \cdot dA_i \quad (2.4)$$

Die freie Oberflächenenergie  $\sigma_i$  ist im Kristall richtungsabhängig und nach dem Wulffschen Satz proportional zur Ätzrate der Kristallfläche, die aus experimentellen Untersuchungen extrahiert werden kann. Die Gleichgewichtsform eines Kristalls beim Wachstum aus einer gesättigten Lösung kann nach dem Wulffschen Theorem [170] bestimmt werden, wonach die Entfernung einer Kristallfacette von einem Zentralpunkt innerhalb des Kristalls proportional zu deren Oberflächenenergie ist. Diejenige Kristallform mit der geringsten freien Oberflächenenergie ist thermodynamisch stabil.

Bei Ätzprozessen ist die Konzentration des gelösten Siliziums im Allgemeinen vernachlässigbar gering gegenüber dem Silizium in der festen Phase, weshalb die Ätzprozesse sehr weit ab vom thermodynamischen Gleichgewicht des heterogenen Systems ablaufen. Deshalb ist die Voraussetzung für Aussagen, die aus thermodynamischen Betrachtungen abgeleitet werden, in der Praxis kaum erfüllt. Aufgrund des heftigen Reaktionsverlaufs in der gut durchmischten Ätzlösung ist selbst die Voraussetzung lokaler thermodynamischer Gleichgewichte fragwürdig, da nicht von einem diffusionsgesteuerten Reaktionsverlauf ausgegangen werden kann.

Ein weiteres Problem bei thermodynamischen Betrachtungen des Ätzprozesses besteht darin, daß chemische und elektrochemische Reaktionen an der Grenzschicht zwischen Halbleiter und Elektrolyt nicht im Detail berücksichtigt werden können. Diese Vorgänge werden von einer Vielzahl an Parametern beeinflusst und sind mitbestimmend für die orientierungsabhängigen Ätzprozesse.

Des Weiteren besteht ein grundsätzlicher Unterschied zwischen Kristallätzen und Kristallwachstum darin, daß beim Ätzen auch konkave Strukturen auftreten, während sich beim Kristallwachstum immer konvexe Körper ausbilden. Beim Ätzen ist zudem die resultierende Struktur abhängig von den (lokalen) Anfangsbedingungen. So wird die Entwicklung konkaver Körper wie z.B. Gräben oder Hohlkugeln von den langsam ätzenden Ebenen bestimmt, während die Ätzung konvexer Körper von schnell ätzenden Ebenen bestimmt wird. Diese experimentell verifizierte Beobachtung kann nicht direkt aus dem Wulffschen Theorem abgeleitet werden.

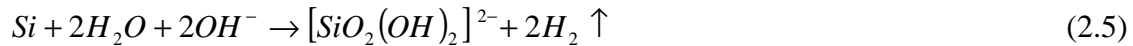


## 2.4.2 Chemie/Elektrochemie der Ätzprozesse

Die Untersuchungen über den chemischen Ablauf des Ätzprozesses haben immer auch die Zielsetzung, die Ursachen für die Richtungsabhängigkeit der Ätzraten zu erklären.

Ein möglicher und naheliegender Ansatz besteht darin, unterschiedliche Bindungsverhältnisse und damit die Bindungsenergien der Atome auf verschiedenen Facetten zur Erklärung des Ätzverhaltens heranzuziehen, was jedoch schon für die gemessenen Ätzraten für die niedrig indizierten Hauptkristallrichtungen zu Widersprüchen führt [96].

Gesichert scheint nur die Nettoreaktion in Gleichung 2.5, da die Reaktionsprodukte  $[SiO_2(OH)_2]^{2-}$  und Wasserstoff nachgewiesen werden können [104].



Der detaillierte Ablauf der Reaktionen, die zur Auflösung des Siliziums führen, ist Gegenstand einer durchaus kontroversen Diskussion, die in dieser Arbeit nicht ausführlich wiedergegeben und gewertet werden kann; hier sei nur auf die entsprechende Literatur verwiesen.

Das zentrale Problem bei der Klärung der detaillierten Teilreaktionsabläufe besteht darin, daß Zwischenprodukte mit kurzer Lebensdauer nicht nachgewiesen werden können, da eine orts aufgelöste in situ Analytik zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht durchführbar erscheint [104,106].

Bemerkenswert ist das Modell von *Palik* [107], das die charakteristische Ätzratenverteilung mit Hilfe mittlerer Hydratationszahlen beschreibt, da in dieses Modell auch die Kationen eingehen. Ein Einfluß der Kationen auf den Ätzprozeß ist experimentell bestätigt, da wässrige Lösungen verschiedener Alkalimetallhydroxide geringfügig unterschiedliche Ergebnisse bei den geätzten Strukturen bewirken.

Bei den Autoren *Seidel* [131] und *Palik* [105,106] ist das Redoxpaar KOH/H<sub>2</sub>O bestimmend für den Ätzprozeß. Die vorgeschlagene Reaktion mit einem Elektronenübergang zwischen Lösung und Kristall ist geeignet, die Funktionsweise von Ätzstoppschichten plausibel zu machen (siehe Kapitel 5.4.2).



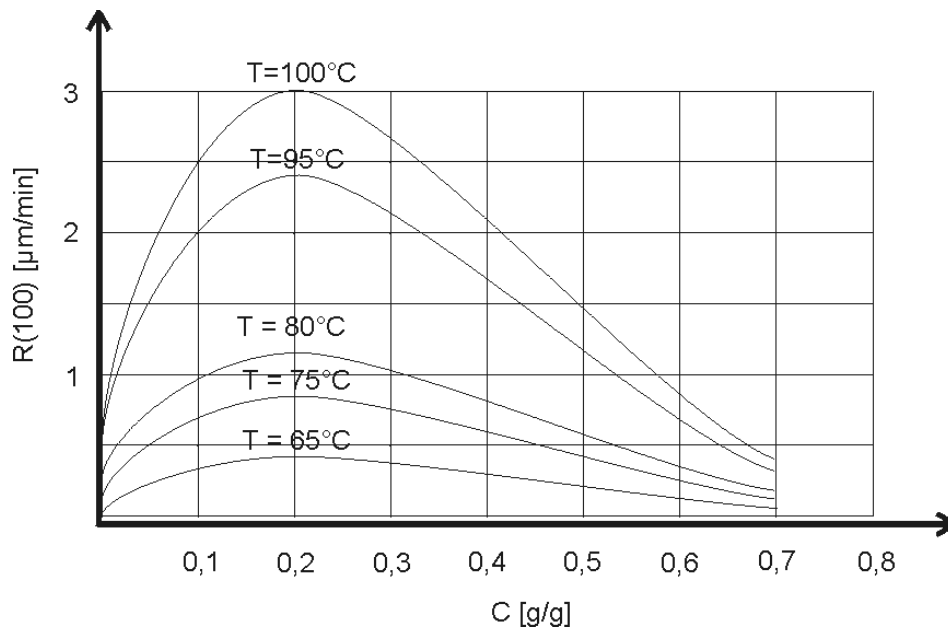
Dieses elektrochemische Modell liefert die Netto-Reaktionsgleichung 2.5. Die Si-Si Bindungen werden durch das OH<sup>-</sup>-Ion angegriffen und die Wassermoleküle nehmen die ins Leitungsband des Kristalls injizierten Elektronen auf und bilden neue OH<sup>-</sup>-Ionen und Wasserstoff. Die Tiefenätzrate auf <100>-Oberflächen wird mit dem Massenwirkungsgesetz beschrieben:

$$R_{\{100\}} = k_0 [H_2O]^r [KOH]^s \cdot e^{-E_a/kT} \quad (2.8)$$

Die Parameter für {100}-Ebenen werden wie folgt angegeben:

$$E_a = 0,595 \text{ eV}, r = 4, s = 0,25, k_0 = 2480 \mu\text{m h}^{-1} (\text{mol l})^{5/4}$$

Der Verlauf der Ätzrate der {100}-Ebenen über der KOH Konzentration nach Gleichung 2.8 ist in Abbildung 2.10 für unterschiedliche Temperaturen graphisch dargestellt.



**Abb. 2.10:** Tiefenätzrate der {100}-Ebenen als Funktion der KOH Konzentration C und der Temperatur T.

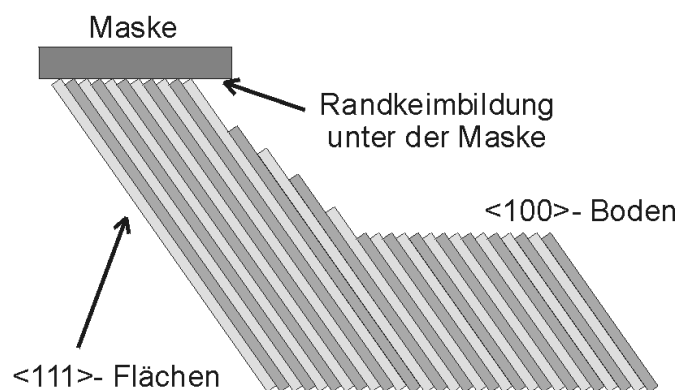
Die Aktivierungsenergie  $E_a$  der stabilen {111}-Flächen wird etwa 0,1 eV höher angegeben als die der {100}-Flächen. Dies ist konsistent mit der Beobachtung, daß die Anisotropie mit steigender Temperatur T abnimmt.

### Zusammenfassung:

Zusammenfassend ist festzustellen, daß der orientierungsabhängige Charakter der Ätzraten nicht allein auf die Dichte und Anordnung der freien Bindungen verschiedener Kristallfacetten zurückzuführen ist, weil damit die starken Unterschiede der Ätzraten verschiedener kristallographischer Ebenen nicht erklärbar sind. Es muß folglich auch die sterische Konfiguration der Bindungen in die Vorgänge bei der Auflösung des Kristalls eingehen. Diese Überlegungen führen zu dem Konzept, das orientierungsabhängige Ätzen als einen Stufenätzprozeß zu beschreiben.

### 2.4.3 Stufenätzprozesse / Stufenätzmechanismus

Die dreidimensionale Strukturbildung auf  $\langle 111 \rangle$ -Oberflächen kann durch Ätzkeimbildungsprozesse (Nukleation) und laterales Ätzen von  $\{111\}$ -Ebenen an Atomen in Halbkristallage erklärt werden [96]. Diese sogenannten „kink-sites“ werden als Keime bezeichnet und können durch verschiedene Vorgänge erzeugt werden. Die Stufenkeimbildung auf stabilen  $\{111\}$ -Flächen kann durch Kristalldefekte, Anlagerung von Verunreinigungen, Randkeimbildung durch (Fehl-) Orientierung und Grenzflächeneigenschaften des Materialübergangs zwischen Maske und Substrat (Abbildung 2.11) erfolgen.



**Abb. 2.11:** Schalenmodell der Randkeimbildung unter einer Maskenkante, Querschnitt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung.

Abbildung 2.11 zeigt in einem Schalenmodell einen Querschnitt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung durch einen Wafer. Schematisch dargestellt sind Schichten hintereinander liegender Flächen der  $\{111\}$ -Ebenengruppe derjenigen Orientierung, die den V-Graben unter der Maskenkante bilden. Am Übergang zwischen Maskenkante und der unmittelbar darunterliegenden  $\{111\}$ -Ebene besitzt diese Atome in Halbkristallage, die mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit von der Ätzlösung angegriffen werden können. Die auf diese Weise freigelegten Stufen auf den  $\{111\}$ -Ebenen werden dann in Richtung des Bodens der Ätzgrube abgeschält. Der in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientierte Boden der Ätzgrube wird in der Darstellung im Schalenmodell ebenfalls von gestuften  $\{111\}$ -Flächen gebildet. Jeder beliebige Punkt auf der  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Oberfläche kann als Schnittpunkt von vier  $\{111\}$ -Ebenen angesehen werden und stellt somit die Spitze einer aus diesen Ebenen gebildeten Pyramide dar.

Ist nun die Rate der Randkeimbildung sehr viel kleiner als die laterale Stufenätzrate (d.h. die Ätzrate senkrecht zur Zeichenebene in Abbildung 2.11), so entstehen glatte  $\{111\}$ -Flächen. Ursache für die Randkeimbildung können z.B. mechanische Spannungen an der Maskenkante sein, die technologiebedingt auftreten [134,125]. Mechanischen Spannungen entstehen sowohl durch verschiedene Gitterkonstanten von Maskierungsmaterial und Siliziumkristall als auch durch unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten der Schichten, die häufig bei wesentlich höheren Temperaturen als der Betriebstemperatur des Bauelementes hergestellt werden.

Auch an den Maskenöffnungen, die mit ihren Ecken und Kanten erhebliche Störungen in der Maskenschicht darstellen, entstehen große Spannungsfelder im Substrat [71], wodurch Kristalldefekte induziert oder bereits bestehende noch verstärkt werden [70,149]. Die Randkeimbildung tritt auch immer an konvexen Maskenecken, oder an fehlorientierten Maskenkanten auf. Die Bezeichnung „fehlorientiert“ bedeutet, daß die Maskenkante nicht exakt entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung verläuft. Diese Fälle sind in Abbildung 3.7 in der Aufsicht des Schalenmodells veranschaulicht.

*Allongue* hat Ergebnisse aus chemischen bzw. elektrochemischen Untersuchungen mit In-situ-RTM-Messungen verbunden [5,6,7,8] und kam unter anderem zu dem Ergebnis, daß die freien Si-Bindungen an der Kristalloberfläche mit Wasserstoff abgesättigt sind [156], was zur Folge hat, daß unterschiedliche Passivierungseigenschaften kristallographischer Ebenen, wie von *Kendall* [85] vorgeschlagen, als Ursache für die orientierungsabhängigen Ätzraten ausscheiden.

Das Ätzen an  $\{111\}$ -Ebenen findet stets an Atomen in Halbkristallage atomarer Stufen statt und führt zu einem lateralen Abschälen dieser Stufen Atomlage für Atomlage. Diese Stufen werden gebildet von den  $\{111\}$ -Flächen und dazu senkrecht stehenden Ebene des  $\{112\}$ -Zonenverbandes, die in zwei Gruppen mit unterschiedlicher Ätzrate eingeteilt werden können [158,159]. Obwohl diese Ebenen kristallographisch identisch sind, ergibt eine unterschiedliche Schnittposition mit den  $\{111\}$ -Ebenen ein unterschiedliches Aufbrechen der Si-Si Bindungen und damit ein unterschiedliches Ätzverhalten.

Nach [25,45] können sich atomare Stufen zu Bündeln vereinigen, die dann groß genug sind, um im REM beobachtet werden zu können. Diese Häufung von atomaren Stufen zu größeren Verbänden wird mit dem englischen Begriff „step bunching“ bezeichnet. Des Weiteren wird angenommen, daß Defekte im Kristall und an der Oberfläche

adsorbierte Verunreinigungen aus der Ätzlösung zu lokalen Abweichungen von der geraden Stufenform führen (englisch „defect pinning“ [109,173]), d.h. lokal an einer Stufe wird der Ätzprozeß kurzzeitig aufgehalten, worauf die Stufe an dieser Stelle sozusagen bricht und Bereiche von unregelmäßiger Morphologie entstehen.

### **Somit stellt sich der chemische bzw. elektrochemische Reaktionsweg folgendermaßen dar:**

Eine chemische Reaktion führt zum Aufbrechen der Si-H und Si-Si Bindungen durch Anlagerung von Wassermolekülen. Aus sterischen Gründen verläuft diese Anlagerung nur an Atomen in Halbkristallage atomarer Stufen von {111}-Flächen; ein direkter Angriff auf einer ungestörten {111}-Fläche ist unwahrscheinlich. Das OH-Ion ist an dieser Reaktion und somit am eigentlichen Ätzprozeß nicht direkt beteiligt, sondern ist nur zur Lösung der Reaktionsprodukte erforderlich. Der Siliziumkristall wird bemerkenswerterweise nur von den Wassermolekülen geätzt.

Im elektrochemischen Reaktionsweg erfolgt die Bildung einer Si-OH Bindung, die nicht sterisch verhindert ist. Es kommt zu einer Nukleation atomar ebener {111}-Flächen und der Bildung von Ätzgruben auf der glatten Oberfläche. Bei Ruhepotential (ohne extern angelegte Spannung) beträgt das Verhältnis zwischen chemischer und elektrochemischer Reaktion 9 zu 1, d.h. der chemische Reaktionsweg überwiegt bei weitem. Der rein chemische Reaktionsweg besitzt aus sterischen Gründen streng anisotropen Charakter, während der elektrochemische Reaktionsweg einen isotropen Beitrag zum Ätzprozeß leistet.

Entscheidend für den Simulationsansatz, der in dieser Arbeit vorgestellt wird, ist lediglich die Annahme, daß die Siliziumatome bevorzugt an bestimmten Stellen aus dem Kristallverband herausgelöst und in die Ätzlösung übergehen können, unabhängig vom genauen Verlauf der chemischen Reaktion. An diesen ausgezeichneten Stellen befinden sich die Atome in Halbkristallage (kink-sites). Sie sind demnach mit zwei Bindungen zum Kristall verbunden und haben zwei Bindungen in die Ätzlösung, die mit Wasserstoff abgesättigt sind und für den Ätzangriff zur Verfügung stehen.

Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß die Orientierungsabhängigkeit beim naßchemischen Ätzen von Silizium damit erklärt werden kann, daß bevorzugt Siliziumatome in Halbkristallage (Kink-Sites) herausgelöst werden, die an Stufen des {111}- und des {211}-Zonenverbandes auftreten.

## 2.5 Verfahren zur Bestimmung orientierungsabhängiger Ätzraten

Der orientierungsabhängige Charakter der Ätzung von einkristallinem Silizium in alkalischen Lösungen ist schon mit einfachsten Mitteln zu beobachten, in dem ein Stück Silizium mit beliebiger Maskenöffnung in eine beheizte Ätzlösung gebracht wird. Nach ausreichend langer Ätzzeit bildet sich eine Ätzgrube, die nur aus stabilen Flächen der  $\{111\}$ -Ebenengruppe gebildet wird.

Die quantitative Bestimmung der orientierungsabhängigen Ätzratenverteilung ist hingegen äußerst problematisch, da ein Meßverfahren immer vor dem Hintergrund einer bestimmten Modellvorstellung über den Ablauf des Ätzprozesses entwickelt wird. Ebenso wie über den Ätzmechanismus gibt es eine kontroverse Diskussion über die korrekte Bestimmung der richtungsabhängigen Ätzraten.

Die meßtechnische Bestimmung der Ätzratenverteilung hat allerdings eine zentrale Bedeutung sowohl für die qualitative Charakterisierung der orientierungsabhängigen Eigenschaften des Substratmaterials als auch für die Entwicklung und Validierung von Modellen zur Beschreibung des Ätzprozesses. Des Weiteren ist eine Kalibrierung der verwendeten Modelle zur prädiktiven Simulation unerlässlich.

In diesem Abschnitt wird ein Überblick über die wichtigsten Verfahren gegeben und deren wesentliche Vor- und Nachteile zusammengefaßt.

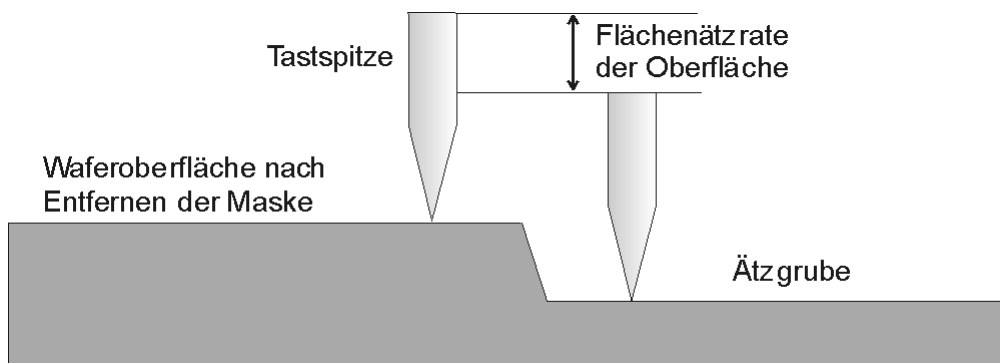
### 2.5.1 Direkte Messung der Oberflächenätzrate verschieden orientierter Wafer

Die einfachste Methode zur Ätzratenbestimmung besteht darin, die Ätzraten der Oberflächen vieler, in unterschiedlichem Winkel gesägter Wafer zu vermessen. Das kann mit mechanischen Tastinstrumenten, sogenannten Profilometern durchgeführt werden, oder mit aufwendigeren optischen Verfahren [144].

Diese Methoden benötigt keine spezielle Teststrukturen, denn es ist lediglich eine Grube oder Stufe in den Wafer zu ätzen und die Tiefe nach Entfernung der Maske bezüglich der ungeätzten Waferoberfläche zu messen, wie dies in Abbildung 2.12 schematisch dargestellt ist.

Dieses Verfahren ist einerseits zwar sehr genau, aber auch sehr zeitaufwendig und insbesondere kostenintensiv, da Wafer mit anderen Oberflächenorientierungen als den gebräuchlichen  $\{100\}$ -,  $\{110\}$ - und (eventuell)  $\{111\}$ -Richtungen sehr teuer sind. Einflüsse der Präparation der Oberflächen (sägen, polieren, usw.) auf die Ätzrate müssen durch ausreichend lange Ätzzeiten minimiert werden. Aus diesen Gründen

kommt diese Methode nur für Messungen auf wenigen Oberflächenorientierungen in Frage, bei denen höchste Genauigkeit gefordert ist.

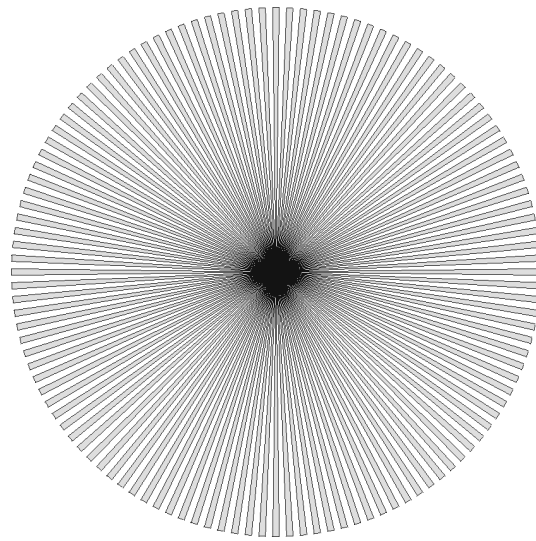


**Abb. 2.12:** Messung der Tiefe einer geätzten Stufe zur Bestimmung der Oberflächenätzrate.

## 2.5.2 Wagenrad Verfahren (Waggon-Wheel Method)

Die wohl bekannteste Struktur zur meßtechnischen Bestimmung der Ätzratenverteilung auf einem ebenen, maskierten Wafer ist die in Abbildung 2.13 dargestellte Wagenrad (engl.: waggon-wheel) oder Sonnenstruktur, die von den Autoren *Seidel* und *Csepregi* eingeführt wurde [129,131]. Die zugrundeliegende Idee besteht darin, daß sich unter einer beliebig orientierten Maskenkante eine Kristallfacette mit entsprechender Orientierung ausbildet und diese Maskenkante unterätzt, woraus die Ätzrate dieser Facette ausgewertet werden kann [131,133,174].

Bei der Ätzung dieser Testmaske verursacht die spitz zulaufende Form der „Speichen“ des Wagenrades den Effekt, daß durch die Unterätzung senkrecht zur Maskenkante (mit der Größe  $d$  in Abbildung 2.14 bezeichnet) die Spitze der geätzten Struktur um den Abstand  $L$  von der Spitze der Maske zurückweicht. Aus einfachen geometrischen Überlegungen ergibt sich die Beziehung:  $L = d/\sin(\varphi/2)$ ; dabei bezeichnet  $d$  die Unterätzung der Maskenkante in Normalenrichtung und  $\varphi$  den Öffnungswinkel des maskierten Segmentes bzw. der „Speiche“.

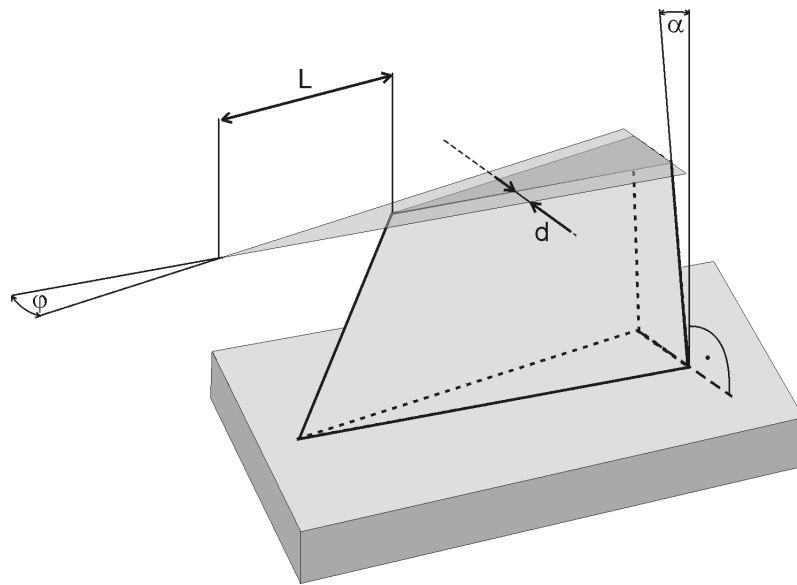


**Abb. 2.13:** Wagenrad-Maske mit einer Winkelauflösung der Speichen von  $1^\circ$ .

Die Grundidee dieses Verfahrens besteht darin, daß die relativ kleine Unterätzung  $d$  auf diese Weise zu dem größeren Abstand  $L$  zwischen Maskenspitze und Spitze der geätzten Struktur „verstärkt“ wird. Die Unterätzung  $d$  einer Maskenkante ist bei praktikablen Ätzeiten und Strukturgrößen relativ klein und mit hinreichender Genauigkeit auf direktem Wege nur mit aufwendigen laseroptischen Verfahren zu bestimmen. Dabei stößt man allerdings auf das Problem, daß die Bereiche unter schrägen Kanten (schräg bedeutet in diesem Zusammenhang jede Orientierung, die nicht exakt der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung entspricht) starke Stufungen und rauhe Oberflächenbeschaffenheit aufweisen und somit nur schlecht reproduzierbare Ergebnisse liefern [126], die schwierig auszuwerten sind.

Ein anderes Problem dieses Verfahrens ist prinzipieller Natur. Die Spitzen der Maske stellen konvexe Ecken dar, an denen sich schnell ätzende Bereiche ausbilden und ebenfalls einen Beitrag zum Abstand  $L$  (siehe Abbildung 2.14) liefern, der nicht grundsätzlich zu vernachlässigen ist. Dieser Effekt kann besonders bei denjenigen Richtungen eine entscheidende Rolle spielen, bei denen die Speichen von langsam ätzenden Flächen begrenzt werden. Bei ausreichend langen Ätzeiten wäre dadurch sogar die Ausbildung eines Knicks in der Oberkante der geätzten Struktur zu erwarten, d.h. die Unterätzung der Maske in der Längsrichtung einer Speiche wird an der Spitze von anderen Facetten bestimmt als an den Flanken.



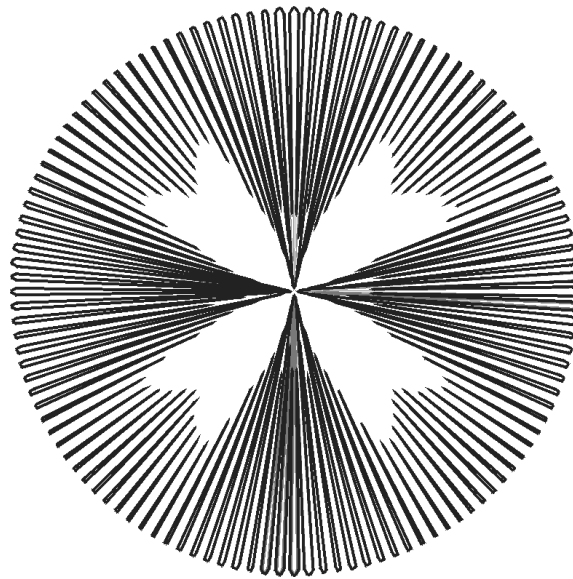


**Abb. 2.14:** Detailskizze der Spitze eines Segmentes mit Öffnungswinkel  $\varphi$  der unterätzten Wagenradmaske. Die Neigung der Flanke bezüglich der Waferoberfläche wird mit dem Winkel  $\alpha$  bezeichnet.

Die Seitenflanken der Speichen stehen für die meisten Orientierungen nicht senkrecht zur Waferoberfläche sondern schließen mit dieser einen Winkel  $\alpha$  ein (vgl. Abbildung 2.14). Aus der meßtechnisch bestimmten Unterätzung  $d$  einer Maskenkante kann die Ätzrate  $R$  der zugehörigen Facette nur exakt ermittelt werden, wenn dieser Winkel  $\alpha$  ebenfalls bestimmt werden kann ( $R = d/\sin(\alpha)$ ). Die Randbedingungen an der Maske können die Unterätzung ebenfalls beeinflussen.

Aus der stereographischen Projektion der Hauptkristallebenen auf eine  $\{100\}$ -Fläche in Abbildung 2.4 ist zu entnehmen, daß die Projektionen der  $\{110\}$ -Ebenen und der  $\{111\}$ -Ebenen die gleiche Richtung haben. Mit der Wagenrad-Methode kann deshalb nur die Unterätzung, die von der langsamer ätzenden Fläche herrührt, gemessen werden, das ist in diesem Fall die  $\{111\}$ -Ebene. Die Ätzrate der  $\{110\}$ -Ebenen kann mit dieser Methode auf Wafern mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung prinzipiell nicht bestimmt werden.

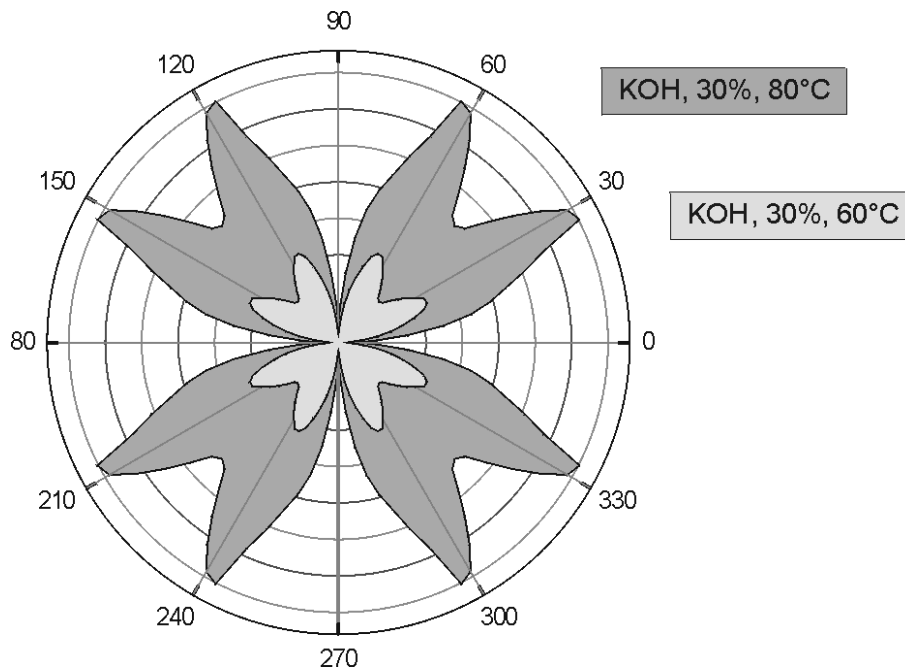
So problematisch die quantitativ exakte Bestimmung der Ätzratenverteilung mit der Wagenrad-Methode auch sein mag, sie liefert doch sehr anschauliche, charakteristische Eindrücke der orientierungsabhängigen Natur der Ätzprozesse. Dazu ist in Abbildung 2.15 eine Simulation der Wagenrad-Maske mit einem kommerziell erhältlichen Simulator („Simode“ [52], siehe Kapitel 3.1.3) dargestellt.



**Abb. 2.15:** Simulation der Wagenrad-Maske aus Abb. 2.13 mit „Simode“ [52] auf einem Wafer mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung, Ätzlösung KOH mit einer Konzentration von 30w% (Gewichtsprozent) und einer Prozeßtemperatur von  $80^\circ\text{C}$ .

Dieses Muster der unterätzten Speichen ist charakteristisch für einen Parametersatz der Ätzlösung und eine Waferorientierung. Ein umfangreicher Satz experimenteller Daten ist in [129] zusammengestellt.

Abbildung 2.16 zeigt qualitativ die Ätzratenverteilung von KOH mit einer Konzentration von 30w% („Gewichtsprozent“) bei den Prozeßtemperaturen  $60^\circ\text{C}$  (hellgrau) und  $80^\circ\text{C}$  (dunkelgrau). Die Daten wurden aus [52] entnommen. Deutlich veranschaulicht wird die allgemeine Zunahme der Ätzraten bei höheren Temperaturen und eine leichte Änderung der Form der Ratenverteilungen. Insgesamt sinkt das Anisotropieverhältnis bei höheren Temperaturen. Die relativ kleinen Ätzraten der  $\{111\}$ -Ebenengruppe bei  $0^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $180^\circ$  und  $270^\circ$  sind in dem Maßstab der Abbildung nicht zu quantifizieren.



**Abb. 2.16:** Qualitative und quantitative Änderung der Polardiagramme der Ätzratenverteilung von KOH mit einer Konzentration von 30w% bei den Prozeßtemperaturen 60°C und 80°C aus [52].

Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß mit der Wagenrad-Methode die winkelabhängige Verteilung der Unterätzung von Maskenkanten ermittelt werden kann. Weitergehende Aussagen über die Ätzeigenschaften kristallographischer Facetten können mit dieser Methode ohne zusätzliche Untersuchungen nicht abgeleitet werden. Allerdings wird mit der lateralen Unterätzung einer Maskenkante genau diejenige Größe gemessen, die auch bei der Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente vom Entwickler zu berücksichtigen ist.

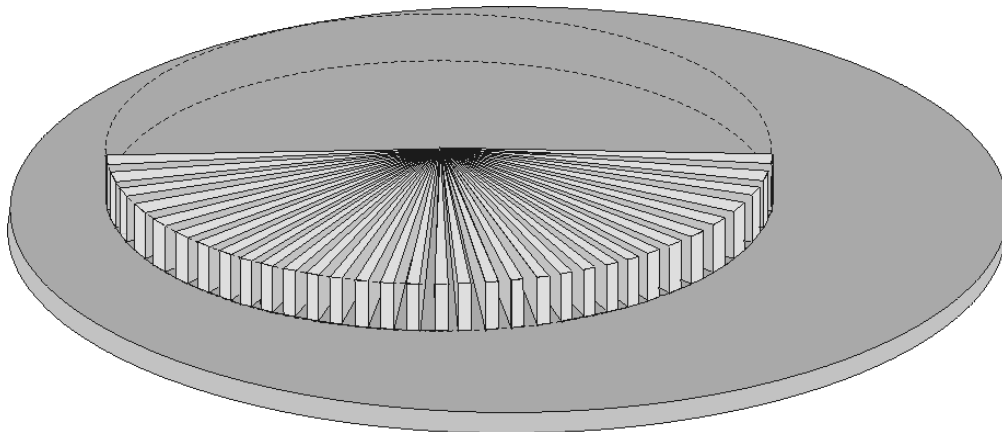
Im Vergleich zu anderen im Folgenden aufgeführten Verfahren ist die Wagenrad-Methode eine relativ einfache Möglichkeit, eine Ätzratenverteilung zu bestimmen. Ferner sind die Teststrukturen kostengünstig herzustellen und die Auswertung ist vergleichsweise einfach, wenn die geometrische Verstärkung genutzt und die Größe  $L$  (vgl. Abbildung 2.14) gemessen wird.

### 2.5.3 Teststruktur mit dreidimensionalen „Speichen“

Eine Teststruktur, die von *Hines et al.* [166] vorgeschlagen und verwendet wird, sieht auf den ersten Blick der Wagenrad-Maske sehr ähnlich und wurde auch von dieser inspiriert; das zugrunde liegende Verfahren ist aber völlig verschieden.

Abbildung 2.17 zeigt eine Grafik dieser Teststruktur, die aus dreidimensionalen Silizium-Speichen besteht, die relativ aufwendig mit Trockenätzverfahren hergestellt werden. So betrachtet stellt diese Teststruktur selbst schon ein mikrostrukturiertes Bauelement dar. Mit den dreidimensionalen Speichen/Segmenten der Struktur können die Oberflächenätzraten freier Flächen mit vielen unterschiedlichen Orientierungen bestimmt werden. Im Gegensatz dazu wird mit der Wagenrad-Methode, wie oben beschrieben, die laterale Unterätzung einer Maskenkante gemessen.

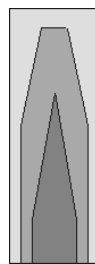
Die spitz zulaufende Form der dreidimensionalen Speichen bewirkt bei der Ätzung der Flanken einen ähnlichen Effekt wie bei der Wagenradmaske. Die Muster der geätzten Strukturen beider Verfahren können allerdings durchaus unterschiedlich aussehen.



**Abb. 2.17:** Dreidimensionale Teststruktur zur Bestimmung der Flächenätzraten vieler Oberflächenorientierungen nach [166].

Diese Methode wird im besonderen auch dazu verwendet, um spezielle morphologische Eigenschaften (z.B. glatte und raue Flächen und die Übergänge dazwischen) verschiedener Ätzlösungen auf vielen unterschiedlichen Oberflächenorientierungen zu untersuchen. Des Weiteren kann mit dieser Methode die Ätzrate einer freien Oberfläche ohne den Einfluß einer Ätzmaske untersucht werden.

Neben der relativ aufwendigen und somit teuren Herstellung der Teststruktur hat dieses Verfahren noch einen anderen Nachteil. Ebenso wie die Wagenrad-Methode ist dieses Verfahren nicht gut geeignet, sehr kleine Ätzzraten in stark anisotrop ätzenden Lösungen zu bestimmen, die z.B. in der Umgebung der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung auftreten. Dabei werden die Speichen vollständig von der Oberseite aufgelöst, bevor eine Ätzung der stabilen Seitenflächen beobachtet werden kann. Die Abbildung 2.18 skizziert einen Querschnitt durch ein Element der Teststruktur, wobei das Profil zu unterschiedlichen Zeitschritten durch die verschiedenen Grautöne symbolisch dargestellt ist.



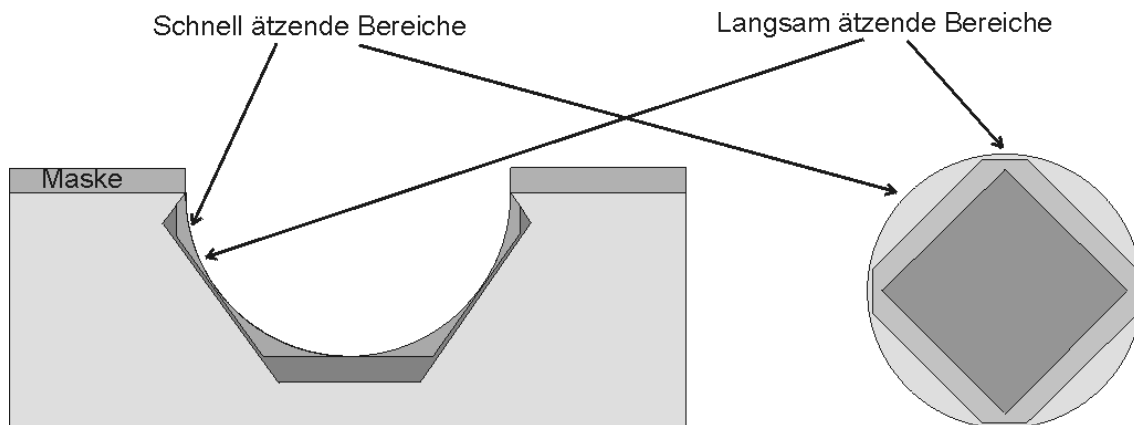
**Abb. 2.18:** Entwicklung des Querschnittsprofils eines Elements der Teststruktur während der Ätzung.

Zudem ist anzunehmen, daß Vorstrukturierung der Teststruktur mit Trockenätzverfahren Auswirkungen auf die Ätzzraten der Flanken aufweist, was beim Vergleich der Ergebnisse dieses Verfahrens mit anderen Methoden berücksichtigt werden muß.

## 2.5.4 Sphärische Testkörper

Ein besonders eindrucksvolles Experiment zur Bestimmung der dreidimensionalen Ätzratenverteilung ist das Ätzen von mechanisch hoch präzise gefertigten Siliziumkugeln bzw. kugelförmigen Vertiefungen in massiven Siliziumblöcken. Diese Verfahren werden z.B. in [82,118,165] beschrieben. Dabei werden die Kugeln solange geätzt, bis der stationäre Zustand erreicht ist und sich die Geometrie qualitativ nicht mehr verändert. Einfache geometrische Überlegungen mit der Wulff-Jaccodine Methode (siehe Kapitel 3.1.2) zeigen, daß ein konvexer Körper im stationären Zustand von den am schnellsten ätzenden Facetten begrenzt wird, während ein konkaver Körper von den am langsamsten ätzenden Facetten gebildet wird. Aus diesem Grund dürfen die kugelförmigen Vertiefungen nicht zu lange geätzt werden, da sonst die Ätzgrube ausschließlich von den am langsamsten ätzenden Ebenen des  $\{111\}$ -Zonenverbandes gebildet werden und die schneller ätzenden Bereiche aufgelöst und somit einer Messung nicht mehr zugänglich sind.

In Abbildung 2.19 sind schematisch die Profile im Querschnitt dargestellt, die sich bei der Ätzung dieser Teststrukturen ergeben. Die dunkleren Grautöne symbolisieren wieder die Profile zu fortgeschrittenen Ätzzeiten. Diese Grafik zeigt sehr anschaulich, daß im Gegensatz zum Kristallwachstum die stationäre Form eines Körpers beim Ätzen von den Anfangsbedingungen bestimmt wird.



**Abb. 2.19:** Entwicklung einer kugelförmigen Vertiefung und eines kugelförmigen Körpers während der Ätzung. Beide Strukturen sind im Querschnitt gezeichnet.

Die zugrunde liegende Idee dieser Methode besteht darin, alle Orientierungen ohne Maskeneinflüsse in gleicher Weise exakt demselben Ätzangriff auszusetzen und an dem geätzten Körper Maxima, Minima und Sattelpunkte mit mechanischen Tastinstrumenten hoch präzise zu vermessen [118]. Theoretisch können auf diese Weise die orientierungsabhängigen Ätzraten aller Richtungen bestimmt werden. In der Praxis ist jedoch die Bestimmung der Ätzraten von Sattelpunkten und von Flächen, die weder ausgeprägt schnell noch langsam ätzen, schwierig. Werden Kugeln geätzt, so entstehen Körper mit welligen bis rauhen Flächen, die nicht eben sind, sondern leicht konvexe Form annehmen. Das erschwert die Bestimmung der Ätzraten in Orientierungen, die außerhalb der Minima und Maxima liegen. Die detailliertesten Informationen über die Ätzratenverteilung kann deshalb aus den Teststrukturen mit kugelförmigen Vertiefungen gewonnen werden.

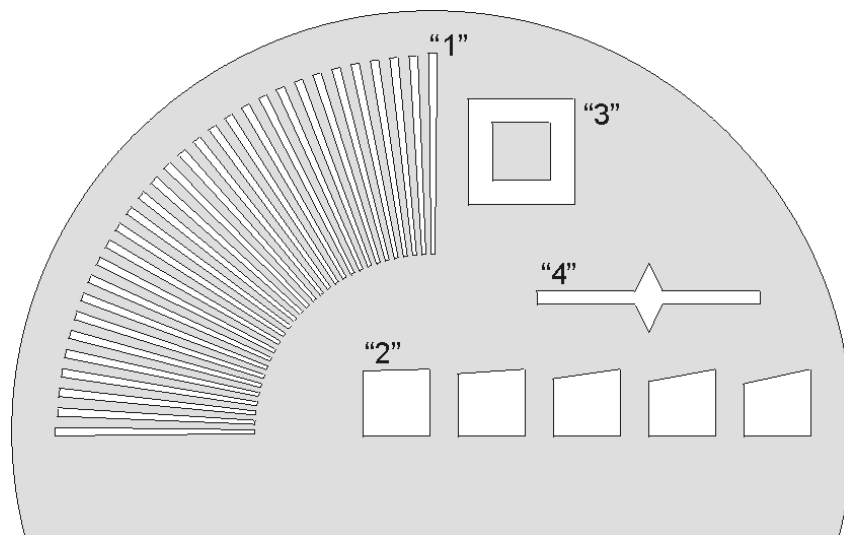
Neben der aufwendigen und damit teuren Herstellung der Testkörper ist die vergleichsweise aufwendige Auswertung ein wesentlicher Nachteil dieses Verfahrens. Allerdings liefert diese Methode eine vollständige dreidimensionale Information über den Ätzprozeß bzw. die Verteilung der Ätzraten. Man kann damit die Ätzeigenschaften freier Oberflächen ohne den Einfluß von Maskeneffekten studieren.

### 2.5.5 Alternative Teststrukturen

Neben den oben vorgestellten und bereits erprobten Verfahren zur Bestimmung der Ätzratenverteilung sind noch andere Teststrukturen denkbar, die neben der Extraktion der Unterätzung von Maskenkanten noch Informationen über die Morphologie der unterätzten Bereiche liefern können, bzw. die Untersuchung der Ausbildung von Stufen unter schrägen Kanten zum Ziel haben. Insbesondere die genaue Vermessung der Ätzraten in der Umgebung der stabilen  $\{111\}$ -Ebenen ist eine interessante Aufgabenstellung.

Die Abbildung 2.20 zeigt den Entwurf verschiedener Teststrukturen zur Analyse der Stufenbildung unter schrägen Kanten (1 und 2) sowie spezielle Strukturen (3 und 4) zur Parameterextraktion und Validierung des Stufenätzmodells, das in den Abschnitten 3.1.3 bzw. 4.3 dargestellt wird. Die Struktur „1“ stellt eine „inverse“ Wagenrad-Maske dar, bei der die „Speichen“ als konkave Maskenöffnungen ausgeführt sind. Die Stufenbildung und die Unterätzung an Orientierungen in der Umgebung der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung könnte mit dieser Teststruktur besser bestimmt werden als mit der konventionellen Wagenradmaske oder den dreidimensionalen Strukturen aus Abschnitt 2.5.3, da die konkaven Segmente die Ausbildung schnell ätzender Bereiche verhindern. Allerdings ist gerade deshalb die Unterätzung der Maskenkante nur durch die Größe  $d$  (vgl. Abbildung 2.14) zu bestimmen, da bei der konkaven Ausführung der Speichen keine geometrisch verstärkte Größe  $L$  auftritt.

Die großen, konkaven Maskenöffnungen der mit „2“ gekennzeichneten Struktur haben eine gegenüber der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung leicht verkippte Kante zur genauen Analyse der Stufenbildung im Bereich der  $\{111\}$ -Ebenen. Die konvexe quadratische Maske der Struktur „3“ dient zur Bestimmung der drei charakteristischen Parameter  $a$ ,  $b$  und  $\gamma$  (siehe Abschnitt 4.3) zur quantitativen Beschreibung der Unterätzung einer einfachen konvexen Ecke mit dem Stufenätzmodell nach Abschnitt 3.1.3. Aus der Struktur „4“ kann ebenfalls ein charakteristischer Parameter (Parameter  $a$  in Abbildung 3.11), der die Unterätzung einer einfachen konvexen Ecke beschreibt, ermittelt und mit dem Wert aus Struktur „3“ verglichen werden. Damit läßt sich der Ätzmechanismus, der bei schrägen Maskenkanten bestimmend ist, quantitativ verifizieren.

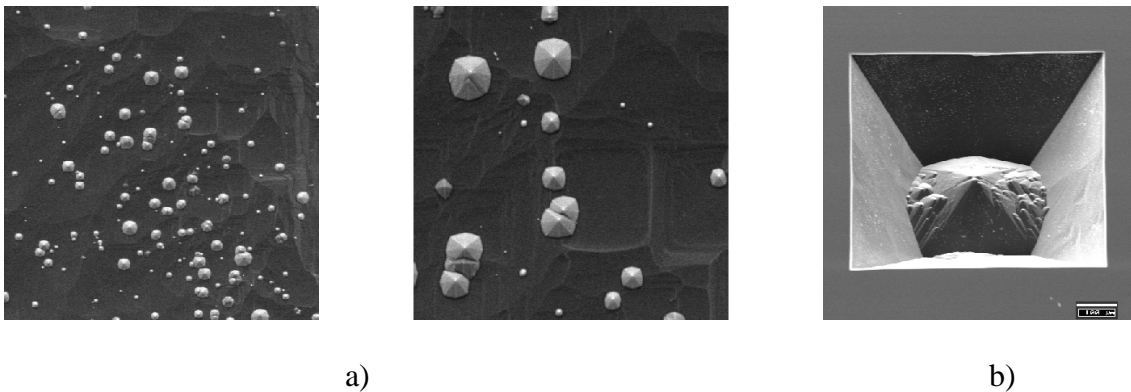


**Abb. 2.20:** Teststruktur zur Untersuchung der Ätzraten und Stufenbildung unter beliebig orientierten Kanten: „Inverse“ Wagenrad-Maske und Maskenöffnungen mit einer minimal verkippten Kante zur Analyse der Stufenbildung im Bereich der  $\{111\}$ -Ebenen (Strukturen „1“ und „2“), sowie Teststrukturen zur Bestimmung charakteristischer Parameter der Unterätzung konvexer Ecken (Strukturen „3“ und „4“).



## 2.6 Zusammenstellung weiterer Einflußfaktoren auf naßchemische Ätzprozesse

Ein gleichmäßiger Materialabtrag beim Ätzen, der zu ebenen Flächen und atomar glatten  $\{111\}$ -Ebenen führt, ist keineswegs so selbstverständlich wie dies bei vielen Simulationsansätzen idealisiert vorausgesetzt wird. Die wesentlichen Probleme bei der technologischen Beherrschung des Prozesses liegen nach Bewertung von Autoren experimenteller Arbeiten (z.B. [126]) in der präzisionsorientierten Photolithographie und der genauen Kenntnis der Daten des Ausgangsmaterials, d.h. der Wafer, der Maskenmaterialien und Maskenqualität und der genauen Zusammensetzung der Ätzlösung, insbesondere hinsichtlich der Spuren an enthaltenen metallischen Verunreinigungen. Dazu kommt noch die Vielzahl an Parametern, die das Anisotropieverhältnis und somit die Geometrie der hergestellten Strukturen oft empfindlich beeinflussen. So entstehen auf  $\{100\}$ -Böden oft die sogenannten Mikropyramiden (Abbildung 2.21) und  $\{111\}$ -Ebenen erscheinen zerklüftet und rauh. Mechanismen zur Erklärung der Bildung von Mikropyramiden sowie Techniken zur Vermeidung dieser meist unerwünschten Phänomene sind in der Literatur ausführlich diskutiert [17,19,44,91].



**Abb. 2.21:** a) Mikropyramiden auf einer  $\{100\}$ -Oberfläche [128].

b) Pyramidenartige Struktur, die den gesamten  $\{100\}$ -Boden einnimmt [128].

Neben Temperatur und Konzentration der Ätzlösung wurde in der Literatur der Einfluß einer Vielzahl von Parametern auf naßchemische Ätzprozesse beschrieben.

Es würde den Rahmen und die Zielsetzung dieser Arbeit bei Weitem überschreiten, darauf detailliert einzugehen. Einige wesentliche Parameter seien im Folgenden jedoch in Stichpunkten mit Literaturangaben wiedergegeben.

- Die in der Ätzlösung enthaltenen Kationen haben zwar nur einen untergeordneten, aber doch nachweisbaren Einfluß auf den Ätzprozeß [122,129].
- Kristalldefekte wie z.B. Sauerstoffpräzipitate bei der Substratherstellung führen zu lokal unterschiedlichen Ätzraten [126].
- Die Vorgeschichte von Wafern bei der Bauelementfertigung mit vielen Strukturierungsprozessen beeinflusst den Ätzprozeß. So könnte eine gelegentlich beobachtete Aufrauung eigentlich glatter {111}-Flächen auf eine SiO<sub>2</sub>-Präzipitation durch Oxidationsprozesse zurückzuführen sein, die zu Stapelfehlern und Versetzungen im Kristall führen [126].
- An Grenzflächen zwischen der Maske oder verschiedenen Schichten können prozeßbedingte mechanische Spannungen auftreten, die zu verstärkter Randkeimbildung führen [70,71,78,79,134,149].
- Zusätze zur Ätzlösung wie IPA oder sogenannte „Surfactants“ [10,118,175] beeinflussen die Gestalt der geätzten Körper.
- Verunreinigungen in der Ätzlösung wie z.B. gelöstes Silizium, oder Metallverunreinigungen [55,90,86], die an der Oberfläche absorbiert werden haben maßgeblichen Einfluß auf den Prozeß.
- Die Bildung und Anhaftung von Wasserstoffblasen an der Substratoberfläche beeinflusst die Ätzung durch lokale Mikromaskierung [31,126,107].
- Lichteinstrahlung beschleunigt die chemischen Reaktionen, die zur Kristallauflösung führen [161].
- Mikrowelleneinstrahlung und die damit verbundene Mikrowellenanregung der Ätzlösung beschleunigt den Ätzvorgang erheblich [41].
- Die Oberflächenqualität der Strukturen kann mit dem Einsatz von Ultraschall verbessert werden [12,34].
- Das Anisotropieverhältnis wird auch dadurch beeinflusst, ob zum besseren Durchmischen der Ätzlösung Sauerstoff oder Stickstoff eingeleitet wird (O<sub>2</sub> oder N<sub>2</sub> bubbling) [126].

- Das Ätzen als elektrochemischer Vorgang wird selbstverständlich durch an der Oberfläche des Ätzkörpers angelegte Potentiale beeinflusst (Elektrochemisches Ätzen) [161].
- Die Rate der lateralen Unterätzung, die Tiefenätzrate und die Rauheit der {111}-Seitenflächen steigt mit der Ätzzeit an. Die Rauheit des Bodens ist zeitunabhängig, allerdings immer größer als an {111}-nahen Seitenflächen. Die Rauheit von {111}-Flächen nimmt in der Tiefe ab, da die Bereiche nahe der Oberkanten der Strukturen der Ätzlösung länger ausgesetzt sind und somit die Wahrscheinlichkeit der elektrochemischen Ätzgrubenbildung an diesen Bereichen größer ist. Insgesamt nimmt die Rauheit der {111}-Ebenen mit langen Ätzzeiten zu [126].

Abschließend bleibt zu bemerken, daß raue Oberflächen für manche Anwendungen auch erwünscht sind und gezielt erzeugt werden, so z.B. zur Herstellung von Antireflexschichten für die Oberflächen von Solarzellen.

## 2.7 Andere Materialien mit anisotropem Ätzverhalten

Neben einkristallinem Silizium gibt es auch Kristalle anderer Materialien, die anisotropen Charakter bei naßchemischen Ätzprozessen aufweisen.

Prinzipiell betrachtet läßt sich jede Ätzung einer kristallinen Struktur sowohl in einen anisotropen, d.h. richtungsabhängigen, als auch einen isotropen Beitrag zerlegen. Die Begriffe „isotrop“ bzw. „anisotrop“ bezeichnen lediglich Idealisierungen, die in der experimentellen Beobachtung immer als Mischung auftreten. Aus diesen Grund kann jedes einkristalline Material zusammen mit einer geeigneten Ätzlösung ausgeprägte anisotrope Ätzeigenschaften aufweisen. Genauere Untersuchungen wurden bei Germanium [92,157], einkristallinem Quarz ( $\text{SiO}_2$ ) und Galliumarsenid (GaAs) angestellt. Aber auch die anisotropen Eigenschaften komplexer Materialsysteme wie InGaAs/InP können zur Herstellung spezieller Mikrosysteme genutzt werden.

### Galliumarsenid (GaAs)

Galliumarsenid besitzt im Vergleich zu Silizium vorteilhafte optische Eigenschaften und ist ebenfalls ein geeignetes Ausgangsmaterial für mikrostrukturierte Bauelemente, da viele prinzipielle technologische Verfahren, die in der Mikrosystemtechnik benötigt werden, auch auf Galliumarsenid angewendet werden können. Die wichtigsten Prozesse sind isotropes und richtungsabhängiges naßchemisches Ätzen, die Möglichkeit

Ätzstopptechniken zu realisieren und die Anwendung von Bondtechniken und Verfahren der Oberflächenmikromechanik.

Es sind (nach gegenwärtigem Wissensstand des Autors) zwei chemische Systeme bekannt, die GaAs anisotrop ätzen und in [65] beschrieben werden. Eine Kombination von Chemikalien erzeugt glatte {111}-Flächen, aber rauhe, unebene {100}-Flächen, das andere System bewirkt genau den komplementären Effekt, nämlich unregelmäßige {111}-Flächen und glatte, gut definierte {100}-Ebenen. Mit anisotropen Ätztechniken wurden auf GaAs-Substraten bereits mikromechanische Balkenstrukturen hergestellt [65].

### **Quarz (SiO<sub>2</sub>)**

Eine große technische Bedeutung hat monokristalliner Quarz, der industriell hergestellt in 3“ Wafern erhältlich ist und zur Fertigung piezoelektrischer Komponenten, wie Filter und Resonatoren und auch für Schwingquarze bei Uhren oder in der Hochfrequenztechnik verwendet wird. Wegen der hervorragenden mechanischen Eigenschaften kann Quarz ebenfalls für hoch präzise Beschleunigungs- oder Kraftsensoren verwendet werden. Quarz ist ein hoch anisotropes Material, dessen richtungsabhängige Ätzeigenschaften z.B. in [26,93,150] dokumentiert wurden.

### **InGaAs/InP**

In [39] wird ein thermoelektrischer Infrarot-Sensor vorgestellt, der nach dem Prinzip eines frei stehenden „Thermopile“ arbeitet. Die anisotropen Ätzeigenschaften werden verwendet, um eine tiefe Grube zu ätzen, um auf diese Weise die aktiven Sensorbereiche thermisch vom Substrat zu isolieren.

### 3 Methodik der Modellbildung zur prädiktiven Simulation

Wie in Kapitel 2.6 dargestellt, gibt es eine Vielzahl von Parametern, deren Einfluß auf den Ätzprozeß mehr oder weniger systematisch dokumentiert wurde. Um handhabbare Modelle zu entwickeln ist es notwendig, diesen hochdimensionalen Parameterraum zu reduzieren und sich bei der Implementierung eines Simulationswerkzeuges auf diejenigen Größen zu beschränken, die den Prozeß maßgeblich und reproduzierbar bestimmen. Störende Einflüsse, die auch zu statistischen Schwankungen der lokalen Ätzraten und somit zu veränderten Strukturen führen, sollten durch eine exakte Prozeßführung minimiert werden und müssen daher in der Simulation auch nicht vorrangig berücksichtigt werden.

Da bis dato kein wirklich physikalisch fundiertes, atomistisches rigoroses Modell für die Kristallauflösung verfügbar ist, ist die Vernachlässigung gewisser Einflußfaktoren und die Verwendung empirisch gewonnener Parameter eine pragmatische Notwendigkeit. Andererseits ist bei einem empirischen Ansatz die kritische Bewertung der Simulationsergebnisse durch einen sorgfältigen Vergleich mit dem experimentellen Kenntnisstand von fundamentaler Bedeutung.

Nach [132] müssen Modelle, die zur prädiktiven Simulation geeignet sind, drei fundamentale Kriterien erfüllen.

#### **Konsistenz**

Physikalisch basierte Modelle müssen konsistent sein mit den grundlegenden physikalischen Prinzipien der Mechanik, Elektrodynamik, Thermodynamik, mikroskopischen Transporttheorie, usw. Das erscheint auf den ersten Blick selbstverständlich, wenn jedoch verschiedene Modelle zusammen gefügt oder verschiedene Teilmodelle verwendet werden, müssen die für einzelne Modelle getroffenen Annahmen und Vereinfachungen sorgfältig auf Widerspruchsfreiheit geprüft werden.

#### **Transparenz**

Ein Modell wird als transparent bezeichnet, wenn alle Modellparameter eine intuitive Interpretation als physikalische Größen erlauben. Transparente Modelle basieren im Allgemeinen auf einer mikroskopischen Beschreibungsebene, von der sie durch Mittelung der mikroskopischen Zustandsgrößen abgeleitet werden. Auf diese Weise läßt

sich die enorm große Zahl mikroskopisch-atomistischer Freiheitsgrade auf wenige makroskopisch phänomenologische Zustandsvariable reduzieren, die die relevanten Eigenschaften der Systeme auf einer makroskopischen Beschreibungsebene eindeutig charakterisieren. In diesem Sinne sind alle Modellparameter idealerweise Mittelwerte von genau definierten mikroskopischen Größen (z.B. Stufenätzraten als Ablösewahrscheinlichkeiten/Ätzraten von Atomen an ausgezeichneten geometrischen Positionen im Kristall). Die Parameter transparenter Modelle können somit direkt aus Meßwerten an ausgewählten Teststrukturen extrahiert werden. Dies ist eine Voraussetzung für eine zuverlässige Validierung der Modelle.

### **Maßgeschneiderte Gültigkeit (engl.: Tailored Validity)**

Die sogenannte „maßgeschneiderte Modellierung“ nach [162] ist notwendig, um die Simulation komplexer Prozesse oder komplizierter Mikrosysteme mit den zur Verfügung stehenden rechentechnischen Ressourcen effizient ausführen zu können. Die Zahl der Freiheitsgrade muß systematisch den speziellen Erfordernissen der Aufgabenstellung angepaßt werden, indem geeignete Zustandsvariable und die relevanten Gleichungen gewählt werden. Daher ist dies der erste Schritt, der zu Beginn der Modellbildung erfolgen muß. Auf der Bauelemente und Systemebene wurde eine Methodik zur Ableitung konsistenter, maßgeschneiderter Modelle für MEMS entwickelt [162], das Prinzip ist jedoch in analoger Weise auch die Prozeßsimulation anzuwenden.

## 3.1 Ansätze zur Modellierung der dreidimensionalen Strukturierung von Silizium

Die folgende, nicht vollständige Zusammenstellung von Ansätzen zur Modellierung orientierungsabhängiger Ätzprozesse ist auf Verfahren beschränkt, die geeignet sind zum Entwurf und zur Analyse von mikrostrukturierten Bauelementen [67]. Darüber hinaus gibt es noch weitere Ansätze und Methoden zur Simulation von Prozessen auf Kristalloberflächen im Hinblick auf Oberflächenrauheit, Nukleation glatter Flächen, Bildung und Erosion von Mikropyramiden, sowie Modelle zu Stufenätzmechanismen auf bestimmten Hauptkristallebenen. Die Diskussion dieser Ansätze würde aber den Rahmen dieser Arbeit bei weitem überschreiten.

### 3.1.1 Atomistische Modelle

Ihrer Bezeichnung entsprechend legen atomistische Verfahren der Modellierung die atomare Struktur der zu ätzenden Materialien zugrunde. Die Modellierung des Ätzprozesses beinhaltet immer ein Verfahren, das Atome nacheinander, gesteuert durch berechnete Ätzwahrscheinlichkeiten, aus dem Festkörper herausnimmt und als lösliche Verbindung in die Ätzlösung überführt.

Es ist allerdings zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht möglich, die Dimensionen eines technisch relevanten Simulationsgebietes atomar aufzulösen. Da ein quaderförmiges Siliziumplättchen mit den Abmessungen  $1\text{mm} \cdot 1\text{mm} \cdot 0,5\text{mm}$  die Größenordnung von  $10^{19}$  Atomen enthält, ergäbe sich in der Simulation bei einer minimalen Repräsentation von einem Bit pro Atom bereits ein Speicherplatzbedarf in der Größenordnung von  $10^9$  Gigabyte, was gegenwärtig der Kapazität von 10 Millionen handelsüblichen Festplatten entsprechen würde. Deshalb ist es zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht möglich, das gesamte Volumen des zu simulierenden Gebietes aufzulösen, sondern es können lediglich die oberflächennahen Bereiche des zu ätzenden Körpers in der Datenstruktur der Simulationssoftware atomar repräsentiert werden. Das erfordert allerdings wiederum einen größeren Aufwand an Rechenzeit zur Organisation und Verwaltung der Datenstrukturen zur Erkennung von Nachbarschaftsbeziehungen der Zellen.

Für die Anwendung der Simulation zur Unterstützung des Entwurfs mikrostrukturierter Bauelemente ist es in der Praxis allerdings weder erforderlich noch sinnvoll, die atomare Oberflächenstruktur der zu untersuchenden Bauelemente detailliert aufzulösen. Es ist vielmehr ausreichend, eine sinnvoll erscheinende minimale Strukturgröße der geätzten Oberflächen aufzulösen, deren genaue Ausmaße sicher auch von der konkreten Anwendung abhängig ist.

Bei atomistischen Methoden werden deshalb im Sinne einer hierarchischen Modellierung meist nicht einzelne Atome, sondern Anordnungen (Cluster) aus vielen Millionen Atomen betrachtet, deren Eigenschaften und Ätzverhalten aber denen eines einzelnen Atoms gleichgesetzt werden.

Zur atomistischen Simulation von Ätzprozessen eignen sich Monte Carlo Verfahren [27,28,29,84,160], sowie Methoden mit zellulären Automaten [33,74,97,151,167].

Mit dem Ansatz von *Than* [151] wurde ein Simulationsprogramm entwickelt, das mittlerweile kommerziell erhältlich ist [76] und im Folgenden exemplarisch für atomistische Ansätze besprochen wird.

Eine Modellbildung mit zellulären Automaten wird vorzugsweise auf Systeme angewendet, die aus einer großen Zahl gleichartiger Teile bestehen. Diesen Teilen, auch Zellen genannt, wird eine endliche Zahl von möglichen Zuständen zugeordnet und es wird ein Satz von Regeln definiert, wie diese Zustände von einem Zeitschritt zum nächsten verändert werden können. Diese Regeln werden häufig aus den Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Zellen abgeleitet, wofür die Geometrie der Anordnung der Zellen festgelegt werden muß. Der Ansatz in [151] bildet die Nachbarschaftsverhältnisse der Zellen im Siliziumgitter nach und den Zellen werden lediglich die beiden Zustände „geätzt“ oder „nicht geätzt“, d.h. vorhanden oder nicht mehr vorhanden, zugeordnet.

Ein allgemeiner zellulärer Automat wird charakterisiert durch:

1. Geometrie der Zellanordnung
2. Definition der Nachbarschaftsverhältnisse der Zellen
3. Definition der vorgesehenen Zustände, die die Zellen annehmen können
4. Regeln, die den Übergang der Zellen von einem Zustand in einen anderen beschreiben

Ein grundsätzliches Problem bei der Modellierung mit zellulären Automaten liegt in der physikalisch basierten Ableitung des Regelwerkes, das den Übergang der Zellen von einem Zustand in einen anderen Zustand bestimmt. Im Fall der Modellierung von Ätzprozessen werden aus dem Regelwerk die Ablösewahrscheinlichkeiten ermittelt, die das Ätzen der Zellen steuern.

Bei der Entwicklung des Regelwerkes für das orientierungsabhängige Ätzen in [151] werden die Zellen gemäß ihren Nachbarn 1. bis 3. Ordnung entweder der {100}, {110} oder der {111}-Ebenengruppe zugeordnet. Als Begründung wird angegeben, daß sich höher indizierte Ebenen aus diesen Hauptebenen zusammensetzen lassen. Allerdings wurde ein physikalischer Hintergrund dieser Darstellung nicht näher ausgeführt.

Neben den Nachbarschaftsverhältnissen der Zellen („Atome“) müssen in das Regelwerk für die genannten Ebenen noch Ätzwahrscheinlichkeiten als zusätzliche Bedingung für das Herauslösen einer Zelle eingeführt werden, um einerseits die unterschiedlichen Ätzraten der Ebenen korrekt abbilden zu können und um andererseits die Abhängigkeit der Ätzraten von Temperatur und Konzentration der Ätzlösung zu berücksichtigen.



Letztlich bildet der in [151] vorgestellte Ansatz die Ätzzraten verschiedener Ebenen ab, d.h. die Atome bzw. Zellen der Oberfläche müssen einer der drei Hauptebenenruppen  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  oder  $\{111\}$  zugeordnet werden. Das phänomenologische Konzept der schnell bzw. langsam ätzenden Ebenen wird auf diese Weise auf atomare Verhältnisse übertragen. Das erscheint deshalb erforderlich, weil kein praktikables Verfahren zur Verfügung stand, um die benötigten Daten aus mikroskopischen Parametern des Kristalls abzuleiten oder anderweitig zu erfassen. Um die auf atomarer Ebene wirksamen Mechanismen in transparenter Weise aus makroskopischen Teststrukturen ableiten zu können, ist ein Modell erforderlich, das einen Brückenschlag zwischen atomaren Vorgängen und der Strukturbildung auf makroskopischer Größenskala herstellt.

### 3.1.2 Differentialgeometrische Modelle

Differentialgeometrische Ansätze zur Beschreibung orientierungsabhängiger Ätzprozesse sind von den ausführlich untersuchten Kristallwachstumsvorgängen abgeleitet und bilden die Grundlage einer Vielzahl verschiedener Simulationsmodelle [46,47,48,57,58,75,89,119,133,135,141,155]. Diese Methoden beruhen auf der Annahme, daß Kristallwachstum und Kristallätzen inverse Prozesse darstellen und nach dem Reziprozitätsprinzip mit analogen Modellen beschrieben werden können.

Dazu muß zumindest die Existenz lokaler thermodynamischer Gleichgewichtszustände vorausgesetzt werden, damit für die Gleichgewichtsform des Kristalles bei der Auflösung das Wulffsche Theorem in der Form  $\sigma_i/r_i = konst$  als gültig angenommen werden kann [170]. Dabei bezeichnet  $\sigma_i$  die freie Oberflächenenergie der Facette  $i$  und  $r_i$  ihren Abstand von einem Aufpunkt innerhalb des Kristalls. Da die freie Oberflächenenergie einer Facette proportional zu ihrer Ätzrate ist, kann mit einer gemessenen Ätzzratenverteilung im Prinzip die Form des Kristalls während der Ätzung bestimmt werden. Dazu werden im Allgemeinen die Wulff-Jaccodine Konstruktion [80,140], oder ähnliche Verfahren herangezogen, die ursprünglich zur Beschreibung des Kristallwachstums entwickelt und zur Modellierung von Kristallätzprozessen angepaßt und erweitert wurden.

Die Grundvoraussetzung aller differentialgeometrischen Modelle ist die Annahme, daß sich die Oberfläche des kristallinen Ätzkörpers aus einer gewissen Menge definierter und prinzipiell identifizierbarer Facetten zusammensetzt und daher die äußere Gestalt des Kristalls auf diese Art beschreibbar ist. Es wird ferner davon ausgegangen, daß diesen Kristallfacetten eine über die gesamte Fläche konstante Ätzrate zugeordnet werden kann, die sich während des Ätzprozesses nicht ändert und die alle physikalischen und chemischen Parameter berücksichtigt, die den Ätzvorgang maßgeblich bestimmen. Da sich der Kristall prinzipiell aus beliebig orientierten

Facetten zusammensetzen kann, muß die vollständige Ätzratenverteilung  $R_{hkl}$  zur Verfügung stehen. Für eine wohl definierte Ätzlösung und eine feste Prozeßtemperatur kann die Ätzratenverteilung  $R_{hkl}$  experimentell aus einer Vielzahl unterschiedlicher Teststrukturen extrahiert werden, wie in Kapitel 2.5 bereits beschrieben wurde. Eventuell fehlende Ätzraten können mit Interpolationsalgorithmen bestimmt werden.

Bei der Übertragung der Wulff-Jaccodine Konstruktion auf Ätzprozesse sind zusätzliche Annahmen nötig, die das Auftreten neuer Facetten und die Rekonstruktion der Ätzfront nach der Bewegung/Verschiebung aller Facetten eindeutig festlegen. Diese Zusatzannahmen sind erforderlich, da im Gegensatz zum Kristallwachstum beim Ätzen Masken beteiligt sind und auch konkave Strukturen auftreten.

Der Ätzvorgang läßt sich in fünf Teilschritte gliedern, die zu jedem Zeitschritt ausgeführt werden:

1. Neu auftretende Facetten an Ecken oder Kanten der Struktur sind gegebenenfalls zu identifizieren.
2. Der eigentliche Materialabtrag wird durch die Verschiebung der einzelnen Facetten entlang ihrer jeweiligen Oberflächennormalen mit der entsprechenden Ätzrate ausgeführt. Dieser Prozeß läßt sich mit einer Bewegungsgleichung für jede Facette formulieren:

$$\frac{\partial \vec{r}_i(t)}{\partial t} = R_i \cdot \vec{n}_i \quad (3.1)$$

Dabei bezeichnet  $\vec{r}_i(t)$  den Ortsvektor der Facette  $i$  zum Zeitpunkt  $t$ ,  $R_i$  ist die räumlich und zeitlich als konstant vorausgesetzte Ätzrate (Verschiebung pro Zeiteinheit) der Facette  $i$  und  $\vec{n}_i$  bezeichnet einen zugehörigen Normaleneinheitsvektor der Facette.

3. Nach der Verschiebung aller Facetten erfolgt die Rekonstruktion der neuen Ätzfront.
4. Facetten, die in der neuen Ätzfront nicht mehr auftreten, sind zu erkennen.
5. Unterstrukturen sind gegebenenfalls abzutrennen oder zu vereinigen.

Die Konstruktion der Ätzfront mit der Wulff-Jaccodine Methode wird in den Abbildungen 3.1 und 3.2 an zweidimensionalen Beispielen veranschaulicht. In einer zweidimensionalen Betrachtung werden nicht Facetten, sondern nur deren Schnittkanten mit der Waferoberfläche betrachtet.

In den Abbildungen 3.1 und 3.2 ist jeweils die Aufsicht auf einen Wafer dargestellt, zusammen mit einer Ätzratenverteilung, welche die Unterätzung der entsprechenden Maskenkanten in reiner KOH-Lösung auf einer  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Oberfläche

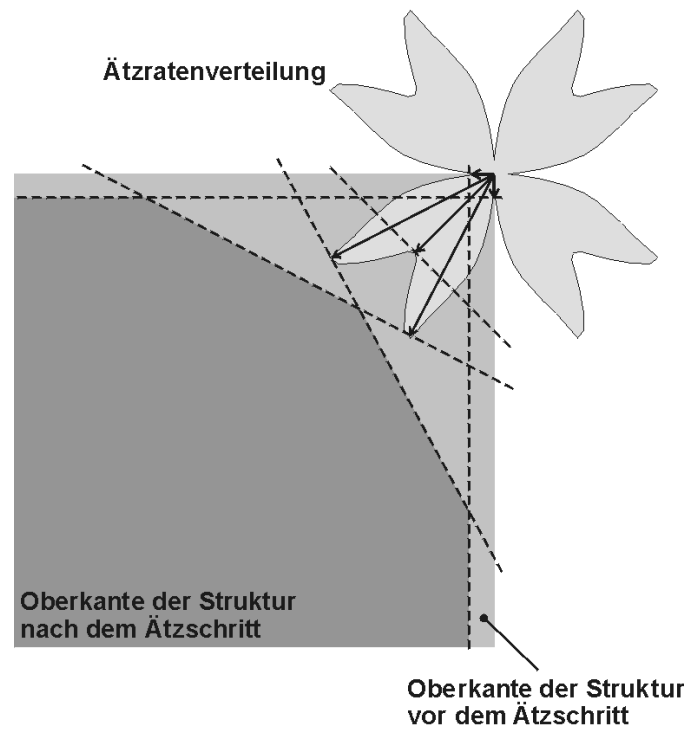
repräsentiert. Die in den Abbildungen gezeichnete „Oberkante der Struktur vor dem Ätzschritt“ entspricht der Geometrie der Ätzmaske zu Beginn des Ätzprozesses.

Zu jedem Zeitschritt wird die winkelabhängige Ätzratenverteilung an den Ecken der Struktur angetragen und mit den Normalenvektoren der zugehörigen Kanten der bestimmende Sektor der Ätzratenverteilung ausgewählt. In den gezeigten Beispielen ist dies der vierte Quadrant eines zugrunde liegenden kartesischen Koordinatensystems.

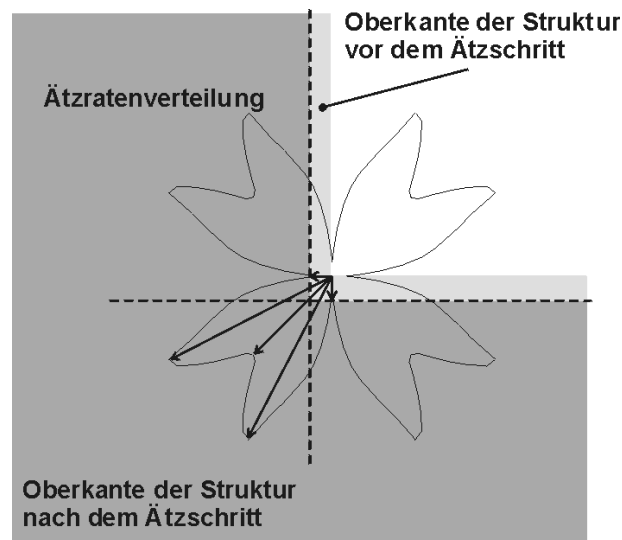
Die Kanten, die die Ecke bilden, werden entsprechend ihrer Ätzraten verschoben. Zusätzlich werden eventuell neu auftretende Kanten (oder Facetten im dreidimensionalen Raum) bestimmt. Dazu werden alle senkrecht zu den Ätzratenvektoren stehenden möglichen neuen Kanten angetragen. Die Kanten mit lokalen Extremwerten der zugehörigen Ätzraten wurden beispielhaft eingezeichnet.

An dieser Stelle muß zwischen konvexen und konkaven Ecken unterschieden werden, damit das Verfahren korrekte Ergebnisse liefert. An konvexen Ecken bestimmen diejenigen Kanten die neue Struktur, die zu einem maximalen Materialabtrag im Bereich der Ecke führen. In dem Beispiel in Abbildung 3.1 sind dies die beiden Kanten mit den größten Ätzraten und die Ätzraten der  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Kanten, die die konvexe Ecke ursprünglich bildeten. Diese sind hier die Oberkanten der  $\{111\}$ -Ebenengruppe. Die Kante in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung ( $45^\circ$  Winkel in der Abbildung) spielen bei der Konstruktion der Ätzfront keine Rolle.

Die Strukturbildung an konvexen Ecken wird zwar maßgeblich von den Kanten mit den maximalen Ätzraten bestimmt, allerdings müssen bei der exakten Konstruktion der Ätzfront alle Kanten berücksichtigt werden, die aufgrund ihrer geometrischen Lage zu einem Materialabtrag an der Struktur beitragen. Gerade bei dreidimensionaler numerischer Simulation werden häufig zur Reduktion von Daten und Rechenzeit nur wenige Facetten mit den Extremwerten der Ätzraten berücksichtigt, wodurch die Ätzfront unter Umständen nur ungenau wiedergegeben werden kann.



**Abb. 3.1:** Wulff-Jaccodine Konstruktion an einer konvexen Masken-Ecke. Aufsicht auf einen Wafer mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung. Eingezeichnet ist eine Ätzzellenverteilung, die reiner KOH-Lösung mit einer Konzentration von 30% bei einer Temperatur von  $80^\circ\text{C}$  entspricht.



**Abb. 3.2:** Wulff-Jaccodine Konstruktion an einer konkaven Masken-Ecke. Aufsicht auf einen Wafer.

Auch im Fall einer konkaven Ecke werden die bereits existierenden Kanten gemäß ihrer Ätzzraten verschoben. Zusätzlich treten neue Kanten auf, wenn deren Ätzzraten kleiner sind als die Ätzzraten der Kanten, die die konkave Ecke bilden. Die Entwicklung der Struktur an konkaven Ecken wird also von denjenigen Kanten bestimmt, die im Ergebnis einen minimalen Materialabtrag bewirken. In dem Beispiel in Abbildung 3.2 wird die konkave Ecke bereits von Kanten mit minimaler Ätzzrate gebildet, so daß in diesem Beispiel keine neuen Kanten auftreten.

Im zweidimensionalen Raum ist die Anwendung der Wulff-Jaccodine Konstruktion sehr einfach und ohne großen Aufwand durchzuführen, da die Unterscheidung konkaver und konvexer Ecken immer eindeutig zu treffen ist. Auch die benötigten Meßdaten für die Ätzzratenverteilungen können problemlos mit der in Abschnitt 2.5.1 beschriebenen Wagenrad-Methode gewonnen werden, da die Unterätzung einer Maskenkante exakt die Größe darstellt, die für die zweidimensionale Wulff-Jaccodine Konstruktion erforderlich ist. Mit der beschriebenen Methode wurde von *Frühauf* [69] das Simulationsprogramm „Simode“ [52] entwickelt, mit dem, ausgehend von einem ebenen maskierten Wafer, die Ober- und Unterkante der geätzten Struktur berechnet wird. Aus diesen zweidimensionalen Konturen wird die dreidimensionale Struktur näherungsweise rekonstruiert.

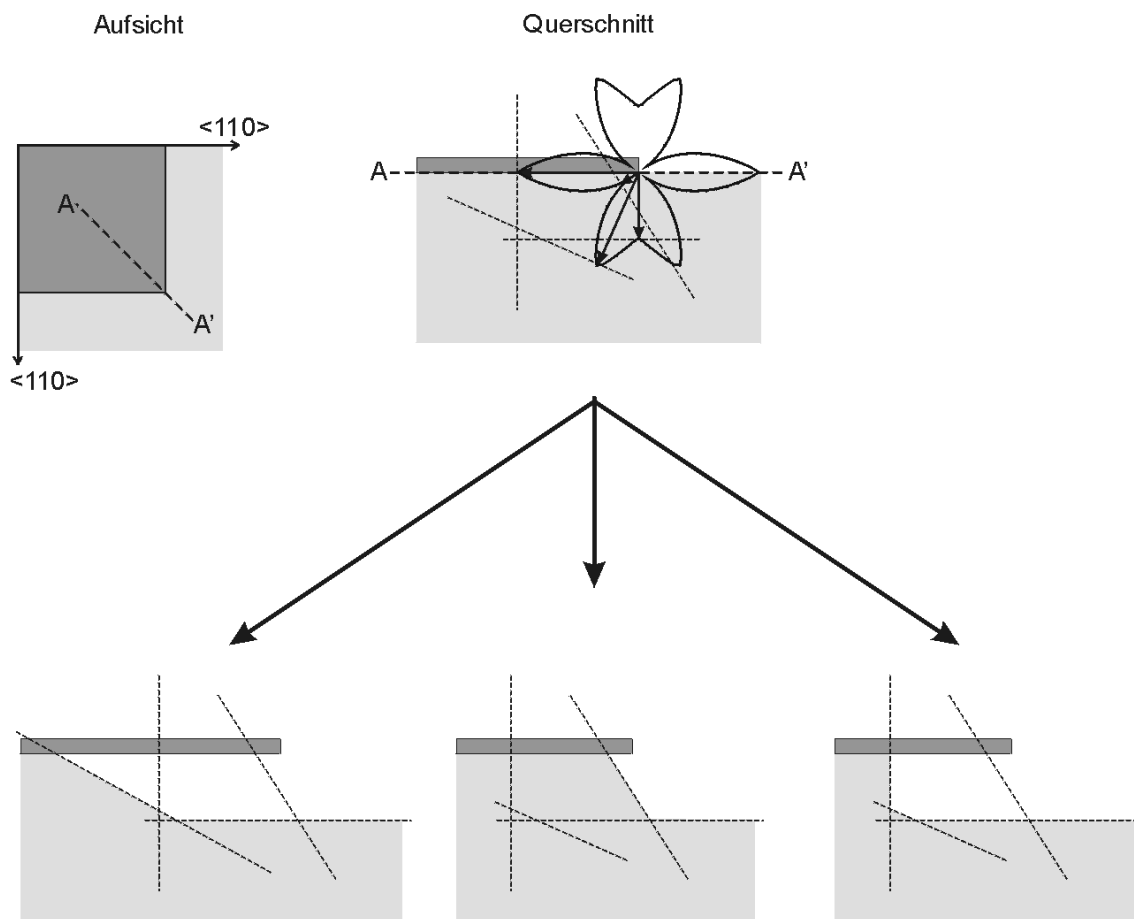
Die Anwendung differentialgeometrischer Modelle auf der Basis der Wulff-Jaccodine Konstruktion im dreidimensionalen Raum ist allerdings höchst problematisch, da eine direkte Erweiterung der zweidimensionalen Formulierung nicht möglich ist. Der Grund dafür liegt darin, daß bei dreidimensionalen Strukturen neben konkaven und konvexen Ecken auch Sattelpunkte auftreten, die sowohl konvexen als auch konkaven Charakter haben, je nachdem welche Richtung betrachtet wird. Da das Wulffsche Theorem jedoch keine Aussagen über Sattelpunkte liefert, müssen bei der Verwendung differentialgeometrischer Modelle im dreidimensionalen Raum neue Entscheidungskriterien entwickelt werden, die festlegen, welche Kristallfacetten im Verlauf der Ätzung neu auftreten. Darüber hinaus müssen im dreidimensionalen Raum bereits zu Beginn der Ätzung in einem Initialisierungsschritt die ersten Facetten erzeugt werden, wenn der Übergang von der zweidimensionalen Maske auf die dreidimensionale Struktur stattfindet.

Nach der Verschiebung aller Facetten nach Gleichung 3.1 und der Berücksichtigung eventuell neu auftretender Facetten stellt sich das Problem, die nun veränderte dreidimensionale Struktur in eindeutiger Weise zu bestimmen.

Die Schwierigkeiten, die bei der Strukturentwicklung an einem Sattelpunkt auftreten, sind in Abbildung 3.3 veranschaulicht. Als auf den ersten Blick einfach erscheinendes Beispiel wurde eine einfache konvexe Maskenecke gewählt, die bei dreidimensionaler Betrachtung einen Sattelpunkt darstellt und bereits ernsthafte Probleme bereiten kann.

Betrachten wir beispielsweise die Kante einer Struktur unter einer konvexen Maskenecke. Diese Kante ist in einer Ebene parallel zur Waferoberfläche konvex, in einer Ebene senkrecht zur Waferoberfläche bildet sie jedoch mit der Unterseite der Maske eine konkave Struktur, was in der Grafik in Abbildung 3.3 in Aufsicht und Querschnitt veranschaulicht wird. Die Anwendung der Wulff-Jaccodine Konstruktion

liefert keine eindeutige Aussage über die Entwicklung dieser Kante im weiteren Verlauf der Ätzung, da unbestimmt ist, ob schnell oder langsam ätzende Facetten die weitere Entwicklung der Struktur bestimmen.



**Abb. 3.3:** Nicht eindeutige Rekonstruierbarkeit der Ätzfront an einem Sattelpunkt. Aufsicht und Querschnitt in einer  $\{100\}$ -Ebene durch einen Wafer mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung.

Um eine Entscheidung treffen zu können, welche der in Abbildung 3.3 beispielhaft dargestellten geometrischen Konfigurationen tatsächlich realisiert wird, müssen zusätzliche Annahmen getroffen werden, die nicht aus dem Wulffschen Satz abgeleitet werden können. Das ist z.B. mit einem Regelwerk möglich, oder unter Einbeziehung thermodynamischer Stabilitätskriterien für die Gleichgewichtsformen eines Kristalls [58]. Letzteres erscheint nach heutigem Kenntnisstand fragwürdig, da der Ätzprozeß

kinetisch gesteuert ist, wie in Kapitel 2.4.3 beschrieben wurde, und auch die Annahme der Existenz lokalen thermodynamischen Gleichgewichtes bei den üblichen experimentellen Anordnungen nur sehr schwer zu begründen ist.

Des Weiteren wurde in [58] festgestellt, daß die Änderungen der Kristallgeometrie durch das Auftreten kleinster Facetten bestimmt wird, was zur Folge hat, daß die Kanten dieser Facetten einen nicht zu vernachlässigenden Beitrag zur freien Energie des Kristalls liefern, der allerdings noch nicht auf der Basis eines physikalischen Modells abgeleitet werden konnte.

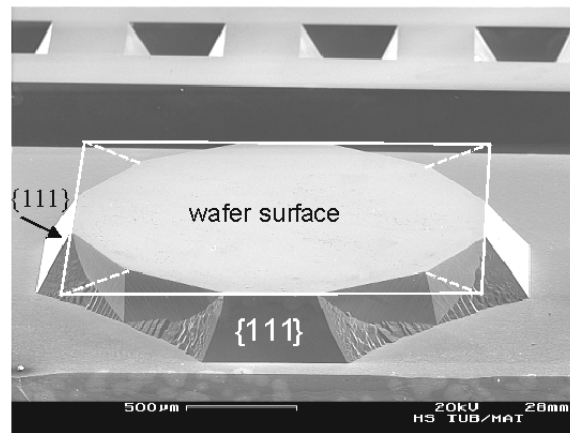
Ein weiteres Problem der differentialgeometrischen Modelle besteht in der Behandlung von rauen Bereichen mit unregelmäßiger Morphologie, die zwar in der Realität auftreten, für die aber weder eine konstante Ätzrate noch andere Parameter wie freie Oberflächenenergien bestimmt werden können. Bekannte Probleme, die bei Simulationen mit diesem Ansatz auftreten, sind wahrscheinlich auf diese Umstände zurückzuführen [58].

### 3.1.3 Stufenätzmodell

Die Grundlage zur Entwicklung eines Stufenätzmodells für die dreidimensionale Strukturbildung auf {100}-Wafers wurde von den Autoren *Allongue, van Enckevort* und *van der Putte* gelegt, die einen Stufenätzmechanismus auf <111>-orientierten Oberflächen nachgewiesen haben, wie in Kapitel 2.4.3 referiert wurde.

Aufbauend auf diesen Arbeiten und auf eigenen umfangreichen experimentellen Untersuchungen der Form und Morphologie unterätzter konvexer Ecken wurde von *Schröder* ein Modell vorgeschlagen, das - ausgehend von atomaren Stufenätzprozessen - die dreidimensionale Strukturbildung während der Ätzung maskierter Wafer mit <100>-Oberflächenorientierung konsistent beschreibt. Dazu wurde der durch In-situ-REM-Beobachtungen gesicherte Stufenätzvorgang auf {111}-Wafermaterial auf Substrate mit <100>-Oberflächenorientierung übertragen.

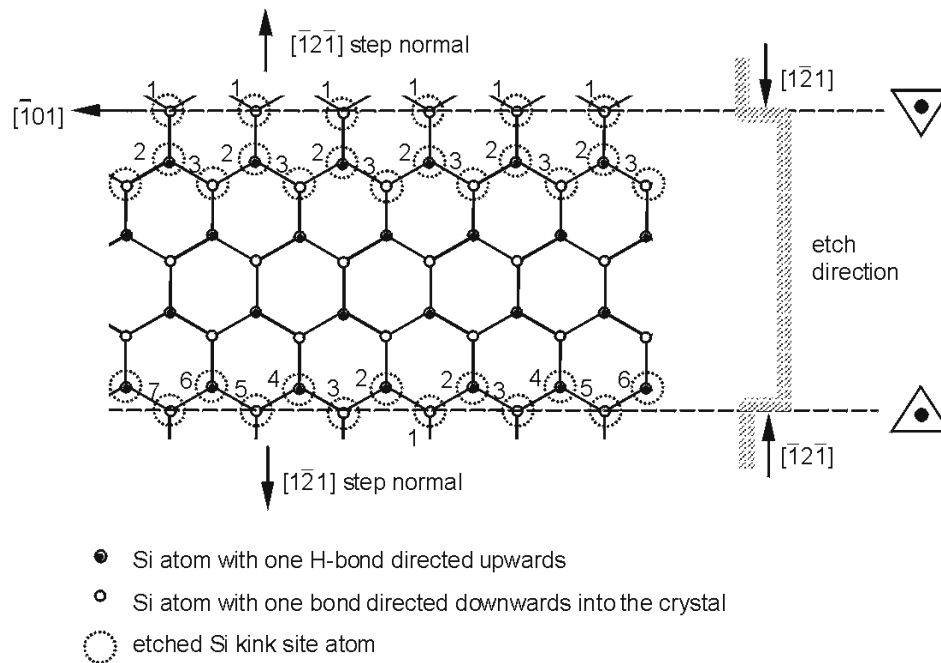
Die Abbildung 3.4 zeigt eine REM-Aufnahme einer Mesastruktur auf einem Wafer mit <100>-Oberflächenorientierung (aus [126,127]). Die quadratische, in <110>-Richtung orientierte Maske wurde entfernt und ist durch die weiße Linie angedeutet. Die vier konvexen Ecken zeigen eine charakteristische Unterätzung, die aus Bereichen mit unterschiedlicher Morphologie gebildet wird. Von der Oberkante der Struktur bildet sich zu beiden Seiten der Symmetrieebene der konvexen Ecke ({100}-Ebene) ein in etwa dreieckförmiger, sehr glatt erscheinender Bereich aus. Diese Fläche wird in der Literatur meist als schnell ätzende Facette bezeichnet, der eine kristallographische Orientierung zugeordnet wird. Daneben existiert ein rauher bzw. unregelmäßig gestufter Bereich, der den Boden des geätzten Gebietes mit der stabilen {111}-Ebene des angrenzenden V-Grabens verbindet. Diesem Bereich kann keine kristallographische Orientierung zugeordnet werden.



**Abb. 3.4:** Mesastruktur auf einem Wafer mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung mit der typischen Unterätzung konvexer Ecken (entnommen aus [126,127]).

Der wesentliche Unterschied zwischen Stufenätzmodellen und anderen, insbesondere differentialgeometrischen Modellen besteht darin, daß die Existenz verschiedener höher indizierter Kristallfacetten grundsätzlich in Frage gestellt wird. Diese nur oberflächlich glatt erscheinenden Flächen sind in der Betrachtungsweise des Stufenätzmodells Einhüllende einer Vielzahl von im Prinzip atomaren Stufen, die wegen verschiedener Effekte (step bunching, defect pinning, vgl. Abschnitt 2.4.3) während der Ätzung zu größeren Stufen in der Größenordnung von Mikrometern zusammenlaufen. Diese Stufen können in REM-Aufnahmen beobachtet werden und durch Messungen in verschiedenen Perspektiven konnte gezeigt werden, daß diese Stufen von Ebenen des  $\{111\}$ - und des  $\{211\}$ -Zonenverbandes gebildet werden. In der Anschauung eines Stufenätzmodells besteht der gesamte Kristall demnach aus im Prinzip atomar glatten  $\{111\}$ -Ebenen bzw. aus Stufen, die von Ebenen des  $\{111\}$ - und des  $\{211\}$ -Zonenverbandes gebildet werden. Andere, insbesondere höherindizierte Facetten, treten nicht auf, sondern sind nur als gedachte einhüllende Flächen gestufter Bereiche zu verstehen. Die Stufen können unterschiedlich fein bzw. grob ausgebildet sein und auf diese Weise die beobachteten unterschiedlichen Morphologien erzeugen. Der Ätzangriff der Stufen erfolgt an den  $\{211\}$ -Ebenen, wobei hier zwei Ätzmechanismen möglich sind, da Oberflächenatome von  $\{211\}$ -Ebenen unterschiedlicher Orientierung zwei unterschiedliche Bindungsarten aufweisen, was in der Skizze nach [159] in Abbildung 3.5 dargestellt wird.





**Abb. 3.5:** Unterschiedliche Bindungsverhältnisse der Atome auf Ebenen des  $\{211\}$ -Zonenverbandes [159].

In der Abbildung 3.5 fällt die Zeichenebene mit der  $\{111\}$ -Ebene zusammen, jeweils senkrecht dazu liegen die Ebenen mit  $\langle 1-21 \rangle$ - bzw.  $\langle -12-1 \rangle$ -Orientierung.

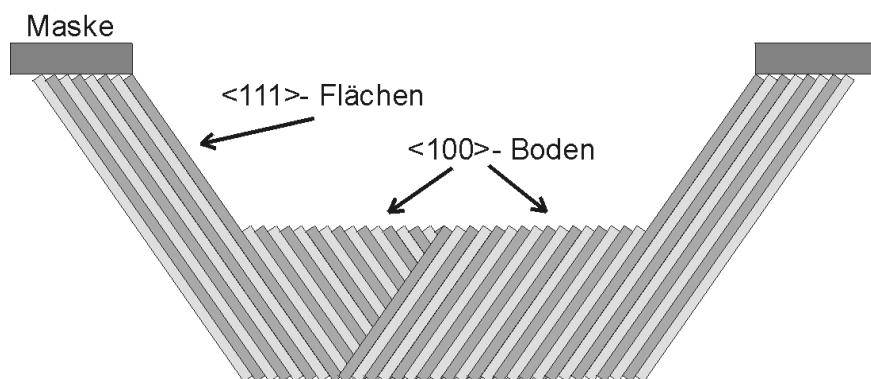
Wegen der tetraedrischen Anordnung der Siliziumatome besitzen die Oberflächenatome der  $\{1-21\}$ -Ebene zwei freie Bindungen (engl.: „dangling bonds“), während die Atome auf der  $\{-12-1\}$ -Ebene nur jeweils eine freie Bindungen aufweisen. Nach [159] kann eine gesamte Reihe von  $\{1-21\}$ -Oberflächenatomen (zwei freie Bindungen) quasi gleichzeitig geätzt werden, während in der  $\{-12-1\}$ -Ebene (eine freie Bindung) erst ein dreifach gebundenes Atom herausgelöst werden muß (die Reihe muß nukleiert werden), worauf die Nachbaratome dann jeweils zwei freie Bindungen aufweisen und damit leichter geätzt werden. Anschaulich wird eine Reihe von Atomen nach dem Reißverschlußmechanismus herausgelöst, wobei zunächst die Reihe durch Herauslösen eines dreifach gebundenen Atoms geöffnet wird und die Reihe dann lateral Atom für Atom aufgelöst wird. Daraus folgt unmittelbar, daß der erste Mechanismus energetisch günstiger ist und in reiner KOH bevorzugt abläuft. Wird dieser Prozeß allerdings durch Zusätze, wie Isopropanol (IPA) gehemmt, erfolgt die Strukturbildung bevorzugt nach der zweiten Möglichkeit, was dann zu qualitativ anderen Strukturen führt [126].

Die Entstehung der typischen Gestalt unterätzter konvexer Ecken auf Wafern mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung soll, ausgehend von diesem Stufenätzprozeß, im Folgenden kurz dargestellt werden, da dies die Grundlage für die Entwicklung des in Kapitel 4.3 beschriebenen Simulationsansatzes bildet.

### Schritt von mikroskopischer zu makroskopischer Strukturbildung

Ausgangspunkt für den Ätzangriff sind Atome in Halbkristallage, die einerseits an atomaren Stufen von  $\{111\}$ - und  $\{211\}$ -Ebenen auftreten. Andererseits weisen die Oberflächenatome einer  $\{100\}$ -Ebene ebenfalls Halbkristallage auf, denn in jedem gedachten Punkt einer  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Oberfläche treffen vier  $\{111\}$ -Ebenen zusammen. Anschaulich betrachtet wird eine  $\{100\}$ -Fläche gebildet aus den Spitzen ineinander liegender Pyramiden mit  $\{111\}$ -Ebenen als Seitenflächen. Eine auf atomarer Skala exakt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierte Maskenkante schützt nun eine in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierte Reihe dieser „Pyramidenspitzen“, während die unmittelbar benachbarten, unmaskierten Reihen erodiert werden. An der Maskenkante bildet sich im Idealfall eine durchgehende, atomar glatte  $\{111\}$ -Flanke aus, an deren unteres Ende sich der in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientierte Ätzgrund anschließt.

Diese Situation ist in Abbildung 3.6 in einem Schalenmodell dargestellt, in dem ein Querschnitt durch einen V-Graben gezeigt ist. Der Kristall wird nur von den symbolisch dargestellten  $\{111\}$ -Ebenen gebildet und der Ätzangriff erfolgt ausschließlich an den schmalen  $\langle 211 \rangle$ -orientierten Seiten der Schalen an den Stellen, die nicht von der Maske abgedeckt werden. Eine Randkeimbildung unter der Maske, die in Abbildung 2.9 beschrieben wurde, wird hierbei vernachlässigt.

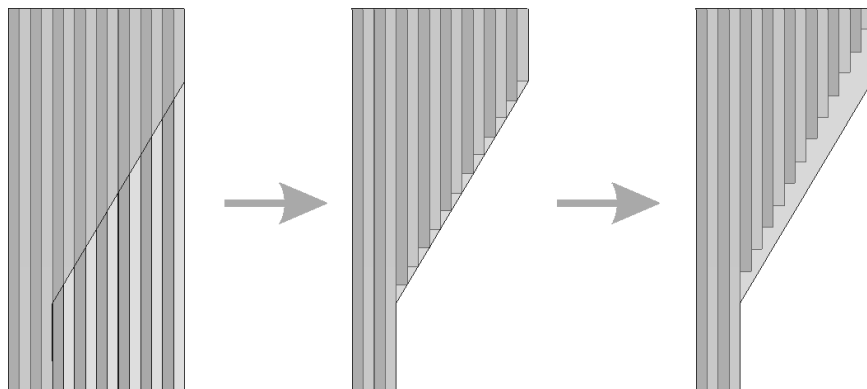


**Abb. 3.6:** Schalenmodell des Querschnitts durch einen V-Graben. Der  $\langle 100 \rangle$ -orientierte Boden der Grube setzt sich aus lateral geätzten  $\{111\}$ -Flächen zusammen.

Ist die Maskenkante nicht exakt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung justiert, sondern schließt einen (kleinen) Winkel mit der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung ein, so schneidet die Maskenkante einige der darunterliegenden  $\{111\}$ -Flächen. Das hat zur Folge, daß diese Flächen an ihrer Schnittkante mit der Waferoberfläche teilweise nicht maskiert sind und an diesen Stellen Atome in Halbkristallage exponieren, die dem Ätzangriff ausgesetzt sind.

Die  $\{111\}$ -Ebenen werden somit nicht nur von der Waferoberseite geätzt, sondern auch in lateraler Richtung unter der schrägen Maskenkante. Dadurch bildet sich unter der leicht schrägen Maskenkante ein Bereich gestufter, hintereinander liegender  $\{111\}$ -Ebenen. Dieses ist eine oft beobachtete und dokumentierte Folge von leicht fehljustierten Maskenkanten.

Die Abbildung 3.7 veranschaulicht diesen Zusammenhang mit einem Schalenmodell in senkrechter Aufsicht auf eine Waferoberfläche. Auf der linken Seite in Abbildung 3.7 ist die Waferoberfläche mit einer schrägen Maskenkante vor dem Ätzangriff dargestellt. In Abbildung 3.7 Mitte sind die sich ergebenden gestuften  $\{111\}$ -Flächen unter der schrägen Kante nach dem initialen Ätzangriff schematisch dargestellt, nachdem der unmaskierte Bereich tiefer geätzt wurde. Die rechte Seite von Abbildung 3.7 veranschaulicht das laterale Abschälen der „angeschnittenen“  $\{111\}$ -Ebenen im weiteren Verlauf der Ätzung.

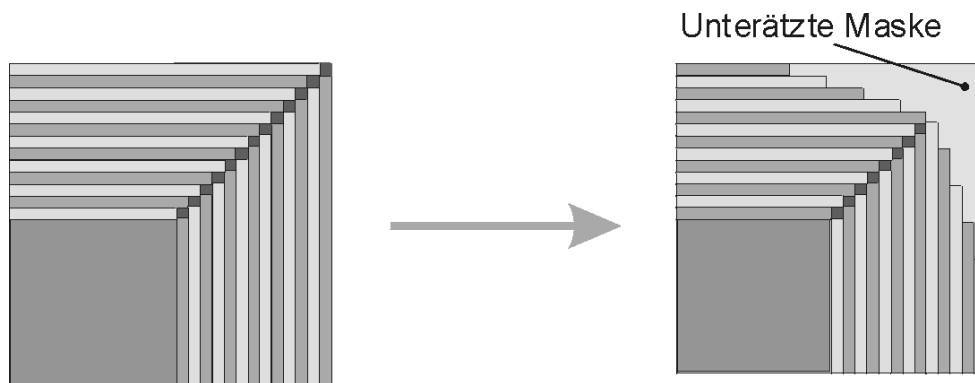


**Abb. 3.7:** Schalenmodell einer teilweise maskierten Waferoberfläche vor (linke Seite) und nach dem Ätzangriff (Mitte und rechte Seite).  
Zweidimensionale Aufsicht auf einen Wafer.

Eine Schlüsselstruktur zum Verständnis des Ätzprozesses ist die charakteristische Unterätzung einer konvexen Ecke, die von zwei exakt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierten, im rechten Winkel zueinander stehenden Maskenkanten gebildet wird.

Unter einer derart gebildeten Ecke liegt die gedachte Schnittkante zweier  $\{111\}$ -Flächen, auf der die Atome Halbkristallage aufweisen, nachdem die Oberfläche in der

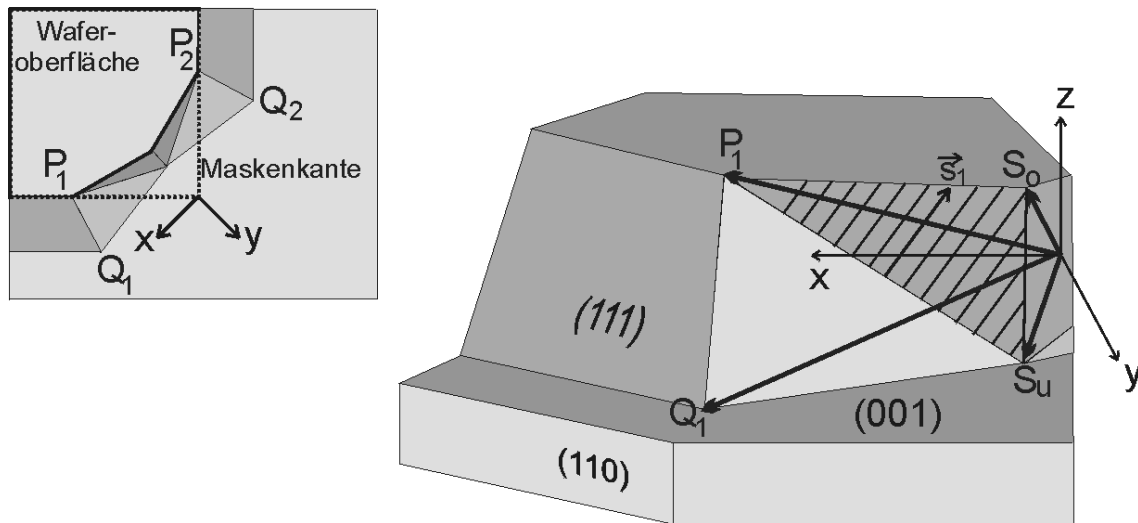
Umgebung unmittelbar zu Beginn der Ätzung tiefer geätzt wurde. Die Position der Atome an diesem Schnittpunkt sind in der zweidimensionalen Grafik in Abbildung 3.8 dunkelgrau eingezeichnet.



**Abb. 3.8:** Schalenmodell einer konvexen Maskenkante in Aufsicht. Anfangsbedingung vor dem Ätzangriff (links) und Entwicklung der Ecke während der Ätzung (rechts).

Diese Atome an der Kante der beiden gerade noch maskierten  $\{111\}$ -Ebenen (dunkelgrau unterlegt) können demnach geätzt werden und exponieren somit in lateraler Richtung ihre Nachbaratome, die sich nun ebenfalls in Halbkristallage befinden. Auf diese Weise werden die  $\{111\}$ -Ebenen, die von oben durch die Maske geschützt sind, lateral von der Ätzlösung angegriffen und somit werden immer neue Atome an der Schnittkante dahinter liegender  $\{111\}$ -Ebenen exponiert.

In der dreidimensionalen Betrachtung dieses Prozesses ergibt sich eine Gestalt der Unterätzung, die in der Grafik in Abbildung 3.9 dargestellt ist. Aufgrund der Kristallsymmetrie wird im Sinne einer kompakten Darstellung im Folgenden nur eine Seite der konvexen Ecke betrachtet. Wie schon erwähnt wurde, ist der entscheidende Punkt die Annahme, daß der Bereich, der durch die Punkte  $S_o$ ,  $S_u$  und  $P_1$  in Abbildung 3.9 aufgespannt wird, die einhüllende Fläche von Stufen darstellt, die von  $\{111\}$ - und  $\{121\}$ -Ebenen gebildet werden. Die räumliche Orientierung dieser Stufen wird während der Ätzung als konstant angenommen und ist in Abbildung 3.9 mit dem Vektor  $s_l$  angegeben. Die Breite dieser Stufen wird dabei festgelegt von der Ätzrate der  $\langle 121 \rangle$ -orientierten Stufen und den Mechanismen, die ein Zusammenlaufen dieser im Prinzip atomaren Stufen zu größeren Verbänden verursachen (z.B. „step-bunching“).

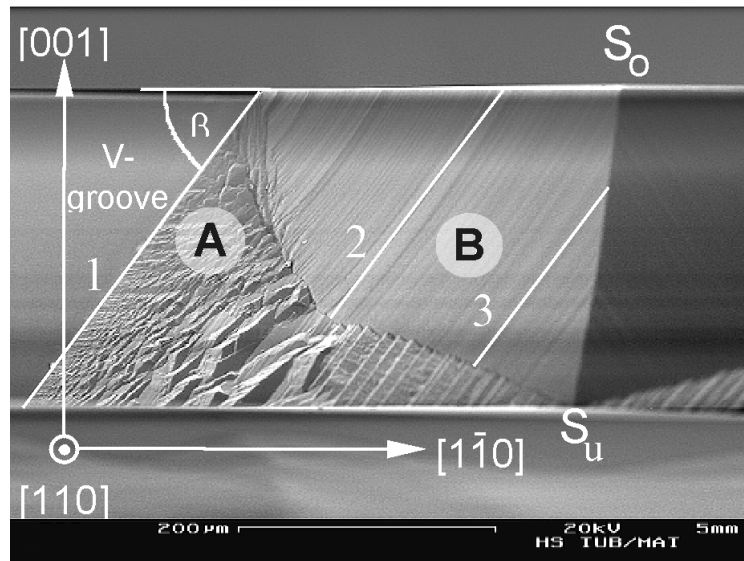


**Abb. 3.9:** Aufsicht auf eine unterätzte konvexe Maskenecke und dreidimensionale Grafik der Geometrie einer einfachen konvexen Ecke während der Ätzung. Eingezeichnet sind charakteristischen Punkte und Oberflächenorientierungen.

Ausgangspunkt für den Stufenätzprozeß an einer konvexen Maskenecke ist die geometrische Randbedingung, durch die Atome in Halbkristallage der Ätzlösung zu Beginn des Ätzvorganges ausgesetzt werden.

Da gleichzeitig der  $\langle 100 \rangle$ -orientierte Boden tiefer geätzt wird, werden entlang der Linie  $S_o$ - $S_u$  immer mehr Atome in Halbkristallage freigelegt, an denen ein laterales Abschälen der  $\{111\}$ -Ebenen beginnt. Die bereits bestehenden Stufen werden dabei immer weiter in  $\langle 121 \rangle$ -Richtung (senkrecht zu Vektor  $s_l$ ) abgeschält und somit wird der Bereich zwischen den Punkten  $S_o$ ,  $S_u$  und  $P_1$  geformt, der im Folgenden mit dem Symbol „B“ bezeichnet wird. Der mit  $S_u$  bezeichnete Punkt ist dabei die Stelle, an der neue Stufen erzeugt werden, der sich im Verlauf der Ätzung entlang der Trajektorie  $s_u$  bewegt. Die erste, zu Beginn der Ätzung erzeugte Stufe, hat sich entlang des Ortsvektors  $r_l$  des Punktes  $P_1$  vom Ursprung des Koordinatensystems zu dem Punkt  $P_1$  bewegt.

Die Abbildung 3.10 zeigt eine REM-Aufnahme einer einfachen konvexen Ecke in  $\langle 110 \rangle$ -Perspektive parallel zur Waferoberfläche, entnommen aus [126].

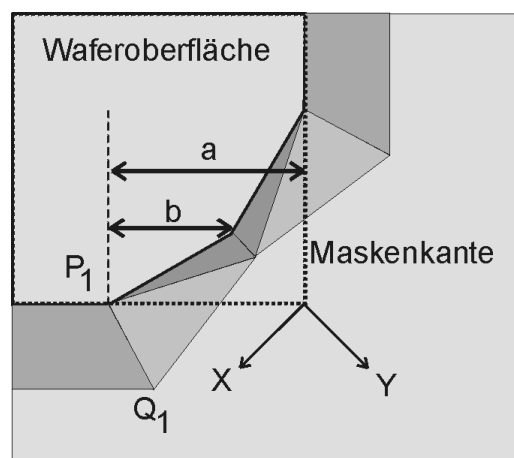


**Abb. 3.10:** REM-Aufnahme einer einfachen konvexen Ecke in  $\langle 110 \rangle$ -Perspektive parallel zur Waferoberfläche, entnommen aus [126].

In der Abbildung 3.10 sind drei der Stufen beispielhaft eingezeichnet, die am Punkt  $S_u$  generiert werden und von dort ausgehend durch laterales Abschälen die Struktur der unterätzten Ecke formen. Die mit „1“ bezeichnete Stufe wurde unmittelbar zu Beginn des Ätzprozesses gebildet, als sich der Punkt  $S_u$  direkt unter der konvexen Maskenecke befand. Diese „erste“ Stufe bildet unmittelbar den Übergang zu der noch ungestörten  $\{111\}$ -Fläche des anschließenden V-Grabens. Die Stufen „2“ und „3“ wurden entsprechend später erzeugt und wandern im weiteren Verlauf der Ätzung in Richtung der Stufe „1“. Durch diesen Prozeß werden die fein gestuften und damit glatt erscheinenden Bereiche vom Typ „B“ gebildet. Diese Bereiche werden in der Literatur oft als schnell ätzende Kristallfacetten bezeichnet und als solche in den differentialgeometrischen Simulationsmodellen verwendet.

Die rauhen und unregelmäßig gestuften Bereiche zwischen den Punkten  $S_u$ ,  $Q_1$  und  $P_1$ , die mit „A“ bezeichnet werden, sind Überreste des beschriebenen Stufenätzprozesses, die aufgrund der stabilen Kante zwischen den Punkten  $P_1$  und  $Q_1$  an der angrenzenden  $\{111\}$ -Ebene stehen bleiben. Die Orientierung der rauhen Strukturen des Bereiches vom A-Typ legt die Vermutung nahe, daß auch diese aus Stufen von  $\{111\}$ - und  $\{121\}$ -Ebenen gebildet werden und in  $\langle 112 \rangle$ -Richtung geätzt werden. Die Mechanismen, die zu der rauhen und unregelmäßigen Oberfläche führen, sind allerdings noch nicht endgültig geklärt. Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß die Bereiche vom B-Typ eindeutig festgelegt sind durch die Punkte  $S_0$ ,  $P_1$  und den Vektor  $s_l$ , der die Neigung der Fläche bestimmt und somit den Punkt  $S_u$  am Boden der Struktur festlegt. Der raue Bereich A ist zusätzlich durch den Punkt  $Q_1$  bestimmt.

Zur quantitativen Charakterisierung der Unterätzung einer konvexen Ecke ist es nach dem beschriebenen Ätzmodell ausreichend, neben der Ätztiefe  $z_u$  die in Abbildung 3.11 eingezeichneten Strecken  $a$  und  $b$  zu messen, deren Dimensionen durch die konkreten Bedingungen während der Ätzung bestimmt werden. Bei der Bestimmung der Tiefenätzrate ist zu beachten, daß der Boden zum Punkt  $S_u$  leicht ansteigt und somit die Ätztiefe in einem freien Bereich der Ätzgrube größer ist als an dem Punkt, an dem die Stufen erzeugt werden.



**Abb. 3.11:** Graphische Darstellung der Unterätzung eines {100}-Wafers in Aufsicht. Eingezeichnet sind die Parameter  $a$  und  $b$ , die zusammen mit der konstanten, kristallographisch festgelegten Stufenätzrichtung und der Ätztiefe die Unterätzung der Ecke vollständig charakterisieren.

Die Koordinaten der charakteristischen Punkte  $P_1$ ,  $Q_1$ ,  $S_0$  und  $S_u$  können bei konstanter Stufenorientierung  $s_l$  aus den Parametern  $a$ ,  $b$  und der Ätztiefe im Bereich der konvexen Ecke  $z_u$  durch rein geometrische Betrachtungen abgeleitet werden, was in [126] ausführlich dargestellt ist und in den Gleichungen (3.2)-(3.5) nur im Ergebnis wiedergegeben wird:

$$P_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} (a, -a, 0) \quad (3.2)$$

$$S_0 = (0, \sqrt{2}(b-a), 0) \quad (3.3)$$

$$S_u = \left( 0, \quad z_{Su} \left( 1 - \frac{2b}{a} \right) + y_{So}, \quad z_u \right) \quad (3.4)$$

$$Q_1 = \left( a \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad -a \frac{\sqrt{2}}{2} - z_{Q1}, \quad z \right) \quad (3.5)$$

Der Winkel  $\gamma$  zwischen den Oberkanten der Bereiche vom Typ B ist von den Parametern Temperatur und KOH-Konzentration des Ätzprozesses abhängig und ergibt sich aus der Stufenätzrate und der Stufenweite. Ein typischer Wert für den Winkel  $\gamma$  bei KOH mit einer Konzentration 33w% („Gewichtsprozent“) und einer Temperatur von 80°C liegt bei etwa 152° (der Winkel  $\gamma$  läßt sich mit einfachen geometrischen Betrachtungen aus den gemessenen Größen  $a$  und  $b$  ableiten).

Die Entstehung der charakteristischen Gestalt einer auf diese Art gebildeten konvexen Ecke ist ausführlich in [126] beschrieben und die räumliche Orientierung der Stufen, die zur kristallographischen Identifikation herangezogen wird, ist durch Vermessung von REM Aufnahmen belegt. Ebenso wird ein Modell für die Strukturbildung bei Zugabe von Isopropanol zur Ätzlösung vorgeschlagen, das die dann zu beobachtenden qualitativ anderen Strukturen ebenfalls mit einem Stufenätzprozeß erklären kann.

An dieser Stelle soll noch erwähnt werden, daß die Entstehung der verschiedenen Formen von Mikropyramiden, die häufig auf dem in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientierten Boden der Ätzgruben zu beobachten sind, mit diesem Modell konsistent erklärt werden kann, was ein weiteres wesentliches Argument für das Stufenätzmodell als physikalisch richtige Beschreibung des Ätzprozesses darstellt. Auf die Bildung von Mikropyramiden wird an dieser Stelle nicht weiter eingegangen, da hierzu in dieser Arbeit auch keine Simulationen durchgeführt wurden. Für detaillierte Untersuchungen zu dieser Thematik sei an dieser Stelle wiederum auf die entsprechende Literatur verwiesen (siehe Abschnitt 2.6).

## Zusammenfassung

Der Ätzprozeß an einfachen konvexen Ecken ist im Rahmen des Stufenätzmodells der strukturbildende Elementarprozeß. Damit lassen sich die während des orientierungsabhängigen Ätzprozesses entstehenden Strukturen bei beliebig geformten Maskenkanten erklären. Die bestimmenden Parameter für den Ätzprozeß sind die Tiefenätzrate  $R_{\{100\}}$  und die Stufenätzraten  $R_{\{112\}}$  und  $R_{\{-1-12\}}$ . Diese können mit einer einfachen konvexen Ecke als Teststruktur durch Messung der Größen  $a$ ,  $b$  und  $z_u$  bestimmt werden (siehe Abbildung 3.11). Der Ätzabtrag an den  $\{111\}$ -Ebenen wird durch die Rate der lateralen Unterätzung  $R_{\text{lat}}$  charakterisiert und ist, neben einer eventuell vorhandenen Fehlorientierung der Ätzmaske, empfindlich von Verunreinigungen in der Ätzlösung (Metalle, Stufenkeimbildung) abhängig; zu dem



wird er von den durch die Maske (Material, mechanische Spannungen, Randkeimbildung) gegebenen Randbedingungen beeinflusst. Die laterale Unterätzung  $R_{lat}$  bestimmt das Anisotropieverhältnis und die Oberflächengüte (Rauheit) der  $\{111\}$ -Flächen von V-Gräben. Die Dichte und Höhe der Stufen an fehlorientierten Maskenkanten können mit dem Stufenätzmodell allerdings nicht vorausgesagt werden, da diese wahrscheinlich von kinetischen Bedingungen wie „step-bunching“ und „defect pinning“ abhängen.

### Vom Kristallwachstum abgeleitetes Stufenätzmodell

Auf der Basis der hochentwickelten Modelle für das Kristallwachstum haben *Elwenspoek et al.* ein Modell für Ätzmechanismen entwickelt [42,43], das geeignet ist den anisotropen bzw. isotropen Charakter von Ätzlösungen zu erklären. Das Modell ist in seinen Konsequenzen für die Strukturbildung bei orientierungsabhängigen Ätzprozessen kompatibel mit dem hier ausgeführten Stufenätzmodell und soll deshalb, allerdings nur in aller Kürze, im Folgenden angesprochen werden. Ausgangspunkt ist die experimentelle Beobachtung, daß die Flächen der  $\{111\}$ -Ebenengruppe im Unterschied zu allen anderen Orientierungen während der Ätzung im Idealfall atomar glatt auftreten. Das erfordert zwingend, daß der Ätzangriff an Atomen in Halbkristallage (kink-sites) stattfindet und ungestörte  $\{111\}$ -Ebenen nicht oder nur wenig aufgelöst werden. Glatte Ebenen haben eine wesentlich kleinere Ätzrate als rauhe Flächen, was die Stabilität der  $\{111\}$ -Ebenengruppe bei der Ätzung erklärt. Für ungestörte  $\{111\}$ -Ebenen besteht eine sogenannte Nukleationsbarriere, denn zum Herauslösen eines Atoms aus der Kristallebene ist wesentlich mehr Energie erforderlich, als durch die Überführung des Atoms in die flüssige Phase freigesetzt werden kann, denn das elektrochemische Potential  $d\mu$  ist kleiner als die Bindungsenergie des Atoms. Da ein Ätzangriff auf einer ungestörten  $\{111\}$ -Fläche sehr unwahrscheinlich ist werden diese Flächen nur an Stufen angegriffen. Die Ursache für Stufen sind z.B. Schraubenversetzungen. Mechanismen, die zur Aufräuhung glatter Flächen führen spielen bei den betrachteten Prozessen keine Rolle. Zum einem ist die sogenannte „roughening transition Temperatur“  $T_R$ , bei der eine glatte Fläche durch thermisch erzeugte Gruben rau wird, für  $\{111\}$ -Ebenen deutlich über dem Temperaturbereich der Ätzprozesse. Das sogenannte „kinetic roughening“ [16] während der Ätzung tritt auf, wenn thermisch erzeugte Gruben mit atomarer Größenordnung durch den Ätzangriff vergrößert werden können. In diesem Fall ist die elektrochemische Potentialdifferenz  $d\mu \ll kT$  und eine vorhandene Nukleationsbarriere bricht zusammen, die Fläche wird rau und ätzt schnell. Dies ist bei den hier betrachteten Ätzprozessen für  $\{111\}$ -Ebenen nicht der Fall.

Zusammenfassend läßt sich die Anisotropie der Ätzprozesse in basischen Lösungen damit erklären, daß eine Nukleationsbarriere auf  $\{111\}$ -Ebenen vorhanden ist und während der Ätzung auch bestehen bleibt. Bei isotrop ätzenden Chemikalien existiert keine Nukleationsbarriere, d.h. alle Ebenen werden rau und können schnell geätzt werden.

## 3.2 Diskussion der Modelle

Die klare Ausbildung der charakteristischen Stufen, wie z.B. in Abbildung 3.10 am Beispiel einer unterätzten konvexen Ecke auf {100}-Silizium dokumentiert, tritt nur bei sehr sorgfältiger Prozeßführung in dieser Deutlichkeit auf. Verunreinigungen in der Ätzlösung, insbesondere Metallionen, oder zu große Konzentrationen an gelöstem Silizium können beispielsweise die scharfen Kanten der Stufen verwischen und somit schwer identifizierbar machen. Das hat zur Folge, daß lediglich unregelmäßige, rauhe Bereiche beobachtet werden, die sich einer näheren, systematischen Charakterisierung ihrer Morphologie entziehen. Allerdings berichten praktisch alle Autoren, die REM-Aufnahmen ausgewertet oder als Vergleich mit Simulationen herangezogen haben, in der einen oder anderen Weise von Stufen und gestuften, rauhen Bereichen, auch jene Autoren, die in ihrer Modellierung von der Existenz höher indizierter kristallographischer Ebenen ausgehen, z.B. [58,59].

Derzeit scheint das Stufenätzmodell nach *Schröder* [126] der konsistenteste und realistischste Ansatz zur Beschreibung orientierungsabhängiger Ätzprozesse zu sein, nicht zuletzt wegen der soliden experimentellen Untermauerung und der Übereinstimmung zu Grundlagenarbeiten anderer Autoren, die als gesichert angesehen werden. Besonders bemerkenswert erscheint der Umstand, daß dieser Ansatz eine unmittelbare Verbindung zwischen den elementaren mikroskopischen Vorgängen des Ätzens auf atomistischer Ebene und der daraus resultierenden makroskopischen Strukturbildung herstellen kann.

Dieser Brückenschlag zwischen mikroskopischer und makroskopischer Skala ist auch für atomistische Ansätze hilfreich. Denn damit könnten die Zellen einer realistisch auftretenden Stufe auf der Ätzfront zugeordnet werden und müßten nicht wie bisher über Nachbarschaftsbeziehungen als Element einer Hauptebene identifiziert werden. Ein zellulärer Automat könnte somit einen realistischen Ätzvorgang besser abbilden, als wenn er auf ein phänomenologisches Regelwerk zurückgeführt wird.

In der Vorstellung des Stufenätzmodells könnten die höher indizierten Facetten der differentialgeometrischen Modelle als einhüllende Flächen von in Wirklichkeit gestuften Bereichen interpretiert werden. Zur Simulation des Ätzprozesses ist es im Sinne einer hierarchischen Modellierung zulässig und zur Minimierung der benötigten numerischen Ressourcen auch erforderlich, die fein gestuften Bereiche zusammenzufassen und durch eine geeignete einhüllende Fläche zu beschreiben.

Problematisch wird es allerdings, wenn bei der Modellierung der Bewegung dieser Flächen im Verlauf der Ätzung der eigentliche physikalische Vorgang der Stufenätzung außer Acht gelassen wird. Eine mögliche Folge davon ist, daß zur korrekten Simulation bzw. Reproduktion der Strukturbildung durch den Ätzprozeß zusätzliche Annahmen gemacht, oder nur empirisch zu begründende Regeln aufgestellt werden müssen, deren physikalische Interpretation problematisch ist. Noch schwieriger wird die Argumentation, wenn Eigenschaften wie z.B. Oberflächenenergien oder die Anzahl

freier Bindungen abgeleitet werden, die ja voraussetzen würden, daß diese einhüllenden Flächen tatsächlich charakteristische Kristallflächen darstellen. Die nähere Untersuchung eines derartigen Ansatzes in [58,59] hat im Ergebnis gezeigt, daß die Einbeziehung der freien Energie der Kristallflächen alleine nicht zu qualitativ richtigen Aussagen über die Strukturentwicklung führt. Als Ausweg wurde die zusätzliche Verwendung von Kantenenergien vorgeschlagen, deren physikalische Begründung allerdings erhebliche Probleme bereitet.

Ungeachtet der Gültigkeit von Zusammenhängen, die vom Kristallwachstum übertragen wurden, gibt es weitere offenen Fragen bei der Beschreibung orientierungsabhängiger Ätzprozesse mit differentialgeometrischen Modellen. Die größten Probleme bereiten dabei die widersprüchlichen Arbeiten zur Identifikation der schnell ätzenden Facetten, die Behandlung kristallographisch nicht identifizierbarer rauher, grob gestufter Bereiche, sowie die konsistente Erklärung der verschiedenen Formen von Mikropyramiden.

Vor dem Hintergrund dieser in der Literatur dokumentierten und immer wieder diskutierten Probleme sollte mit dieser Arbeit ein neuartiger Simulationsansatz entwickelt werden, der dem derzeit am plausibelsten angenommenen Ablauf des Ätzmechanismus möglichst nahe kommt und mit einem Minimum zusätzlicher Annahmen zu realisieren ist. Neben den experimentellen Beobachtungen gibt es auch in theoretischen Betrachtungen zwingende Argumente, die die Existenz von Stufen nahelegen. Auch vor diesem Hintergrund erscheint die Implementierung eines Stufenätzmodells konsequent.

Trotz der geschilderten vielfältigen Schwierigkeiten gibt es leistungsfähige Implementierungen mit atomistischen und differentialgeometrischen Modellen, die erfolgreich zum Entwurf mikrostrukturierter Bauelemente eingesetzt werden. Die wesentlichen Eigenschaften der verschiedenen Modelle werden im Folgenden tabellarisch zusammengefaßt.

### **Differentialgeometrische Modelle**

Vorteile:

- Geringer Rechenaufwand;
- Einfache und direkte Bestimmung der Parameter aus Teststrukturen: Ätzrattendigramm;
- Geringer Speicherplatzbedarf;

Nachteile:

- Einbeziehung von Schichtstrukturen schwierig (Dotierung, Ätzstopp);
- Nur genäherte Wiedergabe der Oberflächenmorphologie;
- In drei Dimensionen ist ein zusätzliches Regelwerk nötig;

### **Atomistische Modelle**

Vorteile:

- Hohe Genauigkeit;
- Exakte Wiedergabe der Oberflächenmorphologie möglich;
- Einbeziehung von Schichtstrukturen möglich (Dotierung, Ätzstopp);
- Einbeziehung von Kristalldefekten;

Nachteile:

- Großer Rechenaufwand;
- Großer Speicherplatzbedarf;
- Problematische Bestimmung der Ätzparameter;
- Modellbildung schwierig;

### **Stufenätzmodell**

Vorteile:

- Realistisches Modell;
- Direkte Extraktion der bestimmenden Parameter aus Teststrukturen;
- Hohe Genauigkeit;
- Exakte Wiedergabe der Oberflächenmorphologie möglich;
- Einbeziehung von Schichtstrukturen möglich (Dotierung, Ätzstopp);
- Einbeziehung von Kristalldefekten;

Nachteile:

- Großer Rechenaufwand;
- Großer Speicherplatzbedarf;

## 4 Implementierung des Stufenätzmodells zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse

In diesem Kapitel wird die Entwicklung eines Simulationswerkzeuges für das orientierungsabhängige Ätzen auf der Basis des Stufenätzmodells aus Abschnitt 3.1.3 dargestellt. Unabhängig vom zugrundeliegenden Modell für den Ätzprozeß besteht hierbei ein wesentlicher Teil des Problems zunächst darin, die zeitliche Bewegung der Ätzfront zwischen Ätzlösung und kristallinem Ätzkörper numerisch korrekt umzusetzen.

Die in der Literatur beschriebenen Ansätze zur Bewegung einer Grenzfläche können in drei prinzipielle Verfahrensgruppen gegliedert werden:

- Marker-String Methoden,
- Zelluläre Verfahren (engl. „Method of Partial Fractions“) und
- Level-Set-Verfahren.

Die Grundzüge dieser drei Verfahren werden im Folgenden kurz skizziert und ihre charakteristischen Eigenschaften mit Vor- und Nachteilen genannt. Danach wird eine konkrete Implementierung eines effizienten Konzeptes zur Topographiesimulation vorgestellt (Methode mit „strukturierenden Elementen“), da das in dieser Arbeit entwickelte und implementierte Stufenätzmodell zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse sehr eng an diese Methode angelehnt ist. Um spezielle Eigenschaften dieses Prozesses effizient zu berücksichtigen, wurden auch typische Elemente der Marker-String Methoden und des Level-Set-Verfahrens übernommen.

### 4.1 Überblick über Ansätze zur Topographiesimulation

Unter dem Begriff Topographiesimulation versteht man die Simulation der zeitlichen Veränderung der Form eines Festkörpers durch Ätz- oder Depositionsprozesse. Betrachtet wird ganz allgemein die Grenzfläche zwischen zwei benachbarten Gebieten; dies ist im zweidimensionalen Raum typischerweise eine geschlossene Kurve, im dreidimensionalen Raum eine geschlossene (Hüll-) Fläche.

In der Topographiesimulation repräsentiert das Innere dieser Kurve bzw. Fläche das Gebiet, in dem Material in fester Phase vorhanden ist. Ätz- oder Wachstumsprozesse bewirken eine zeitliche Verschiebung der Grenzfläche. Oftmals wird die Bewegung der Grenzfläche an einem Punkt  $P$  auf die Richtung des Normalenvektors an diesem Punkt eingeschränkt. Die zeitliche Entwicklung der Fläche wird mit einer Geschwindigkeitsfunktion  $R$  beschrieben gemäß der Gleichung:

$$\frac{\partial \vec{r}_P(t)}{\partial t} = R_P \cdot \vec{n}_P \quad (4.1)$$

$\vec{n}_P$ : Normalenvektor der Fläche am Punkt  $P$ ,  $\vec{r}_P$ : Ortsvektor des Punktes  $P$ ,  $t$ : Zeit.

Die Gleichung 4.1, die für jeden Punkt der Grenzfläche gelöst werden muß, entspricht exakt der Gleichung 3.1, die allerdings für eine ganze kristallographische Facette gültig ist.

Die Geschwindigkeitsfunktion  $R$  kann im Prinzip von vielen Größen abhängen, die sich jedoch in drei Gruppen unterteilen lassen:

$R = R(L, G, I)$ , mit

$L$ : Lokale Eigenschaften der Grenzfläche (z.B. Oberflächennormale, Krümmung, konvexe und konkave Ecken)

$G$ : Globale Eigenschaften der Grenzfläche (z.B. Depositionsrate bei Epitaxieprozessen oder isotroper Anteil der Ätzrate)

$I$ : Von der Grenzfläche unabhängige Eigenschaften (z.B. Diffusionseffekte in einer Ätzlösung)

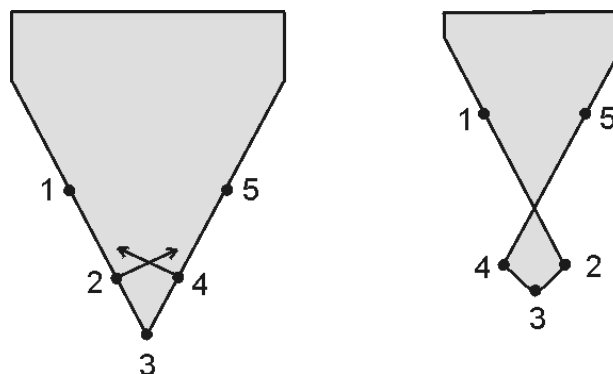
Im Allgemeinen ist es das zentrale Problem, ein physikalisch fundiertes phänomenologisches Modell für diese Geschwindigkeitsfunktion  $R$  zu entwickeln. Aber auch die sinnvolle, d.h. physikalisch richtige Verschiebung der Grenzfläche kann Probleme mit sich bringen, insbesondere bei dreidimensionalen Implementierungen.

### Marker-String-Methode

Wir wollen die Betrachtung zunächst auf zweidimensionale Probleme beschränken. Die kontinuierliche Grenzkurve wird zur numerischen Behandlung durch eine geeignete diskrete Darstellung approximiert. Der direkteste Zugang zu dieser Aufgabenstellung besteht darin, die Kurve mit einer Parameterdarstellung zu beschreiben und damit die Bewegungsgleichung 4.1 in Ort und Zeit zu diskretisieren. Diese Darstellung wird als Lagrange-Formulierung der Bewegungsgleichung bezeichnet. Dazu wird eine Menge

von Punkten (engl.: „Marker Particles“, daher der Name des Verfahrens) eingeführt, deren Position zu jedem Zeitschritt verwendet wird, um die Grenzkurve zu konstruieren. Im zweidimensionalen Simulationsgebiet werden zur Rekonstruktion der Kurve Liniensegmente verwendet, in drei Dimensionen ist die Verwendung von Dreiecken üblich. Das Parameterintervall  $[0, S]$ , das die Kurve der Grenzfläche beschreibt, wird in  $M$  Teilintervalle der Größe  $ds$  zerlegt, um  $M+1$  Stützstellen bzw. Gitterpunkte  $i$  zu erhalten. Ebenso wird der Parameter Zeit in Zeitschritte  $dt$  diskretisiert. Die Position jedes Gitterpunktes  $i$  (und damit die Kurve) zu jedem Zeitpunkt  $n \cdot dt$  ist durch den Marker-Punkt  $(x_i, y_i)$  gegeben. Das Fortschreiten der Kurve wird durch die Berechnung der neuen Werte aus der alten Position gemäß Gleichung 4.1 beschrieben.

Ein typisches Problem der Marker-String-Verfahren besteht darin, daß sich die Grenzfläche bei der Bewegung selbst durchdringen kann und einen sogenannten Schwabenschwanz ausbildet, wie dies in der Abbildung 4.1 schematisch dargestellt ist. Die Ursache liegt in einer Änderung der Nachbarschaftsverhältnisse der Marker-Punkte nach einer endlichen Verschiebung. In dem Beispiel in Abbildung 4.1 kreuzen sich die Verschiebungsvektoren der Punkte 2 und 4, wodurch diese Punkte bezüglich des Punktes 3 die Seiten wechseln, und der Schwabenschwanz entsteht.



**Abb. 4.1:** Ausbildung eines Schwabenschwanzes bei der Verschiebung von Marker-Punkten.

Dieser Schwabenschwanz ist durchaus eine mathematisch korrekte Lösung, wenn die Grenzfläche sich selbst durchdringen darf. Wenn die Kurve allerdings, wie in der vorliegenden Arbeit, als Ätzfront interpretiert werden soll, so ist die Ausbildung eines Schwabenschwanzes unphysikalisch. Bei konstant angenommener Ätzrate  $R$  kann die Grenzfläche zum Zeitpunkt  $t_0+dt$  nur aus derjenigen Menge von Punkten bestehen, die eine Strecke  $R \cdot dt$  von der ursprünglichen Front entfernt sind.

Um physikalisch sinnvolle Lösungen zu erhalten, muß der Schwalbenschwanz entfernt werden, was bei zweidimensionalen Problemen leicht ausgeführt werden kann [60], in drei Dimensionen jedoch äußerst kritisch ist. Eine anschauliche Begründung hierfür liegt darin, daß die Lösung ohne Schwalbenschwanz ein Prinzip berücksichtigt, das von *Sethian* [136,137] „Entropie-Bedingung“ genannt wird. Dieses Prinzip fordert, daß ein Punkt der Grenzkurve oder -fläche, der einmal geätzt wurde, auch geätzt bleibt. Die Einführung einer Entropie-Bedingung hat die weitreichende Konsequenz, daß die Lösung des Problems nicht mehr umkehrbar ist. Die Bewegung der Grenzfläche kann nicht mehr zurückverfolgt werden, d.h. die ursprüngliche Ausgangskurve kann nicht mehr rekonstruiert werden.

Trotz dieser Komplikationen, die sich letztlich aus den veränderlichen Nachbarschaftsbeziehungen der Punkte ergeben, können Marker-String-Verfahren im zweidimensionalen Raum sehr genaue Ergebnisse liefern. Eine Erweiterung auf drei Dimensionen gestaltet sich allerdings, wie angesprochen, höchst problematisch.

Anwendungen von Marker-String Verfahren zur Topographiesimulation finden sich beispielsweise für zweidimensionale Probleme in [172], sowie in [9,120,152,] für dreidimensionale Aufgabenstellungen.

Die differentialgeometrischen Methoden zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse aus Abschnitt 3.1.3 beinhalten ein Marker-String-Verfahren zur Verschiebung der Facetten und zur Rekonstruktion der Struktur nach einem Ätzschritt.

Die in diesen Modellen verwendeten kristallographischen Facetten liefern gleichzeitig eine höchst effiziente Diskretisierung der Oberfläche.

Neben den Schwierigkeiten bei der Bestimmung neu auftretender Facetten ist die korrekte Entwicklung der Ätzfront im dreidimensionalen Raum allerdings eine nicht zu unterschätzende Aufgabenstellung, die alle Schwierigkeiten der Marker-String Verfahren mit sich bringt.

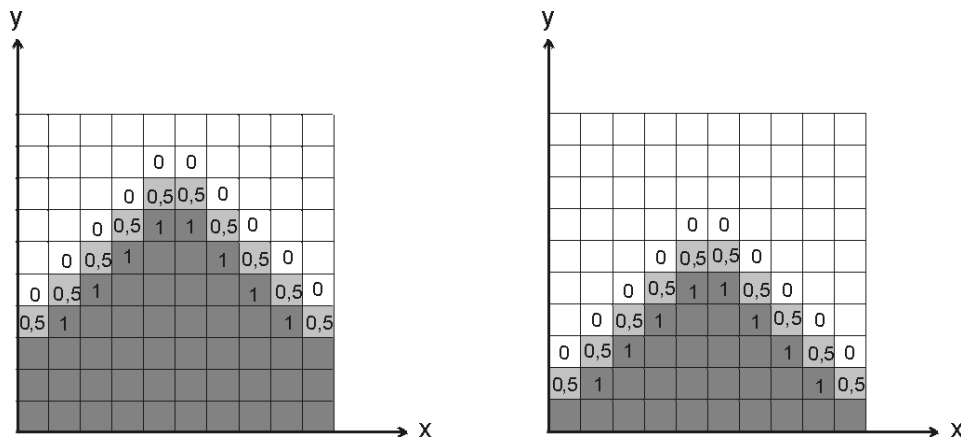
## Zelluläre Verfahren

Einen völlig anderen Ansatz zur Beschreibung bewegter Grenzflächen stellen zellbasierte Verfahren dar, die auch unter den englischen Bezeichnungen „Volume of Fluid Method“ oder „Method of Partial Fractions“ bekannt sind und in verschiedenen Varianten implementiert wurden [100]. Bei allen diesen Ansätzen wird das Simulationsgebiet durch ein ortsfestes Gitter in Materialzellen gleicher Form und Größe eingeteilt. Jeder dieser Zellen wird ein numerischer Wert zwischen Null und Eins zugeordnet, gemäß dem Bruchteil der Zelle, der von Material ausgefüllt ist. Die Grenzfläche zwischen den betrachteten Bereichen wird nicht mehr als Kurve dargestellt, sondern aus den Materialinhalten der Zellen rekonstruiert und umgekehrt.

Um das Fortschreiten der Grenzfläche zu beschreiben, werden die Materialinhalte der Zellen zu jedem Zeitschritt gemäß der Geschwindigkeitsfunktion  $R$  aktualisiert. In Abbildung 4.2 wird dies veranschaulicht, in dem beispielhaft die Materialgrenzfläche mit einer konstanten Verschiebung in  $y$ -Richtung mit Betrag 2 beaufschlagt wird. Aus



Betrag und Richtung der Verschiebung  $R \cdot \vec{n}$  in Gleichung (4.1) wird zusammen mit dem Materialinhalt einer Randzelle der neue Materialinhalt der Nachbarzellen berechnet. Nach Aktualisieren der Materialinhalte aller Zellen kann die neue Position der Ätzfront rekonstruiert werden.



**Abb. 4.2:** Schematische Darstellung für einen Ätzschritt mit der „Volume of Fluid Method“.

Im Gegensatz zu den Marker-String-Verfahren wird bei den zellbasierten Methoden die Grenzfläche zwischen zwei Bereichen nicht im eigentlichen Sinne bewegt, sondern es werden numerische Parameter der Zellen auf einem ortsfesten Gitter zu jedem Zeitschritt neu berechnet. Repräsentieren diese Parameter den Materialinhalt der Zellen, so kann aus denjenigen Zellen, deren Nachbarn gerade kein Material mehr enthalten, die Grenzfläche bzw. der Rand eines geometrischen Körpers konstruiert werden. Aufgrund des festen Materialgitters ist eine Neubestimmung der Nachbarschaftsverhältnisse der Elemente, die die Oberfläche repräsentieren, nicht erforderlich. Dadurch kann ohne zusätzlichen Aufwand ein Hauptproblem der Marker-String-Algorithmen per constructionem vermieden werden.

Allerdings haben zellbasierte Verfahren auch ihre Nachteile. Diese Methoden sind ungenauer und oft wird eine sehr große Anzahl an Zellen benötigt, um eine ausreichende Auflösung geometrischer Strukturen und damit brauchbare Ergebnisse zu erhalten. Gerade die Approximation von beliebig orientierten Flächen ist aufwendig und oft unpräzise, ebenso wie die Extraktion von geometrischen Eigenschaften der Grenzfläche wie Oberflächennormale oder Krümmung, besonders in der Umgebung kritischer Stellen (z.B. Sattelpunkte). Ebenso kann sich die Entwicklung von Grenzflächen nach komplexen Geschwindigkeitsfunktionen problematisch gestalten. Besonders bei stark anisotropen Geschwindigkeitsfunktionen kann es zu Artefakten

kommen, die ihre Ursache in der Orientierung des Gitters haben. Einen guten Überblick über die Anwendungen von Volume of Fluid Methoden erhält man in [35,54,64,110,139].

### Level-Set-Verfahren

Die Level-Set Methode wurde von den Autoren Osher und Sethian [102,137] vorgeschlagen und danach in verschiedenen Varianten für ein breites Anwendungsspektrum verwendet, z.B. [50,101,138]. Dieser Methode liegt eine sehr bemerkenswerte Überlegung zugrunde, wie die Bewegung einer Grenzfläche ganz allgemein beschrieben werden kann.

Bei den Marker-String-Verfahren wird eine explizite Beschreibung der Grenzfläche verwendet, d.h. jedes Element der diskretisierten Grenzfläche ist explizit durch die zugehörigen Ortskoordinaten bestimmt. Dagegen besteht die Grundidee der Level-Set-Formulierung darin, die Grenzfläche implizit als Nullstellengebilde einer Level-Set-Funktion  $\Phi$  zu definieren. Dieses Nullstellengebilde wird im Englischen als „zero level set“ bezeichnet und verleiht der Methode ihren Namen.

Bei den Level-Set-Verfahren wird das Simulationsgebiet mit einem ortsfesten Gitter diskretisiert, dessen Punkte Stützwerte der Level-Set-Funktion  $\Phi$  enthalten.

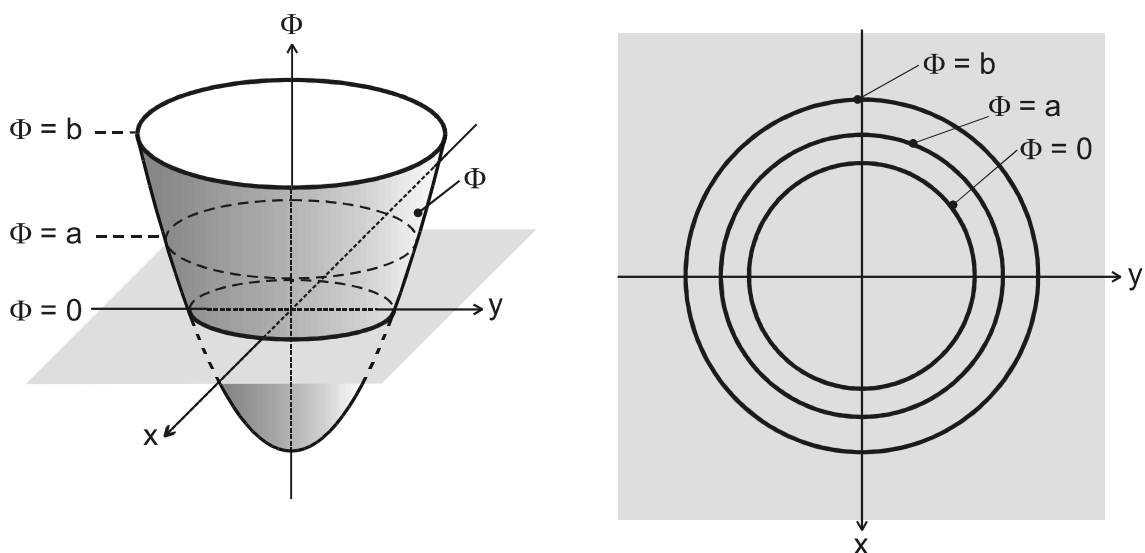
Im Fall einer eindimensionalen Grenzkurve in der x-y-Ebene enthalten die Stützstellen eines zweidimensionalen Gitters  $(x_i, y_i)$  Werte, die die Höhe  $h$  der Level-Set-Funktion  $h = \Phi(x, y)$  über dem Gitterpunkt  $(x_i, y_i)$  darstellen. Der Schnitt des Graphen der Level-Set-Funktion  $(x, y) \mapsto \Phi(x, y)$  mit der x-y-Ebene ergibt als Nullstellengebilde der Funktion die Kurve, die die betrachtete Grenzfläche darstellt. Zu jedem Zeitpunkt wird der Wert der Level-Set-Funktion an jedem Gitterpunkt aktualisiert und aus den neuen Nullstellen die veränderte Position der betrachteten Grenzkurve rekonstruiert. Man gelangt also zu einer zeitabhängigen Level-Set-Funktion  $\Phi(x, y, t)$ , sodaß die Grenzkurve in der x-y-Ebene zur Zeit  $t = t_0$  der Gleichung  $\Phi(x, y, t_0) = 0$  genügt.

In Verallgemeinerung der Situation im  $R^2$  kann die Oberfläche eines Ätzkörpers im  $R^3$  zu jedem Zeitpunkt als Nullstellengebilde  $\Phi(x, y, z, t) = 0$  dargestellt werden. Hierbei wird die Level-Set-Funktion  $\Phi(\vec{r}, t)$  als monotone Funktion des Abstandes des Punktes  $\vec{r}$  zur Ätzfront unter Berücksichtigung des Vorzeichens definiert (z.B.  $\Phi < 0$ : Innengebiet;  $\Phi > 0$ : Außenraum).

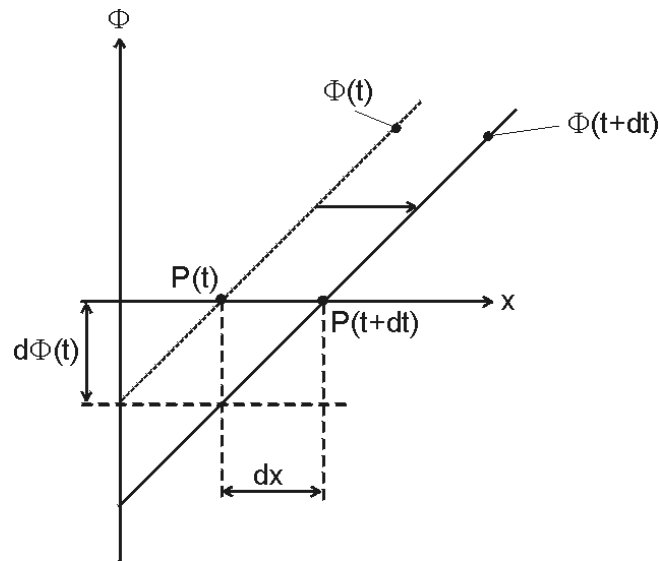
Es ist unmittelbar ersichtlich, daß nach dieser Definition die Level-Set-Funktion für das Beispiel einer zeitabhängigen Schar  $x^2 + y^2 = r(t)^2$  kreisförmiger Grenzkurven im  $R^2$  die Form eines Paraboloids  $\Phi(x, y, t) = x^2 + y^2 - r(t)^2$  annimmt, dessen Schnittkurve mit der x-y-Ebene eines kartesischen Koordinatensystems die kreisförmige Grenzfläche zum Zeitpunkt  $t$  repräsentiert, wie dies in Abbildung 4.3 dargestellt ist.

Die Formulierung der Level-Set-Funktion als monotone Funktion des vorzeichenbehafteten Abstandes zur Grenzfläche bringt einige vorteilhafte Eigenschaften mit sich.

Durch das Vorzeichen der Level-Set-Funktion  $\Phi$  lassen sich die Bereiche innerhalb und außerhalb der Grenzfläche ohne zusätzliche Berechnungen leicht unterscheiden. Die implizite Funktion  $\Phi(\vec{r}, t) = 0$  gestattet auch komplizierte Ätzfronten, die beim Auftreten von singulären Punkten wie einspringenden Ecken u.ä. keine explizite analytische Darstellung besitzen, dennoch in geschlossener analytischer Form darzustellen. Des weiteren läßt sich die Level-Set-Funktion  $\Phi$  stets so umeichen, daß ihr Betrag  $|\Phi(\vec{r}, t)|$  dem euklidischen Abstand des Punktes  $\vec{r}$  zur Grenzfläche entspricht. In diesem Fall gilt  $|\nabla\Phi| = 1$ , was zur Aufstellung und Interpretation der Bewegungsgleichung (4.2) der Ätzfront von Vorteil ist.



**Abb. 4.3:** Kreisförmige Grenzfläche mit Level-Set-Funktion  $\Phi$  als Quadrat der Abstandsfunktion von der Grenzfläche. Die Gleichung  $\Phi(x, y, t) = 0$  bestimmt die Lage der Grenzkurve zum Zeitpunkt  $t$ .



**Abb. 4.4:** Entwicklung der „Level-Set Gleichung“. Beispiel: Bewegung der Grenzfläche in Normalenrichtung mit der Geschwindigkeit  $v$ .

Die Abbildung 4.4 veranschaulicht dies am Beispiel einer kreisförmigen Grenzfläche, die sich mit der Geschwindigkeit  $v$  in der Normalenrichtung bewegt, in einem zweidimensionalen Schnitt in der  $x$ - $\Phi$ -Ebene. Der Punkt  $P$  bewegt sich im Zeitintervall  $dt$  von  $P(t)$  zu  $P(t+dt)$  um die Strecke  $dx = v dt$  in  $x$ -Richtung. Damit ändert sich der Wert der Level-Set-Funktion  $\Phi$  am festen Punkt  $P(t)$  um den Wert  $-dx$ , da sich der Abstand zur neuen Oberfläche ebenfalls um diesen Wert verändert hat. Damit gilt:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{dx}{dt} = -v.$$

Allgemein läßt sich die Gleichung 4.2 aufstellen, die in der Literatur als Level-Set-Gleichung bezeichnet wird und aus deren Lösung für eine gegebene Geschwindigkeitsfunktion  $\vec{R}$  die Bewegung der Grenzfläche bestimmt werden kann:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\vec{R} \cdot \nabla \Phi \quad (4.2)$$

Anstelle eines Satzes gewöhnlicher Differentialgleichungen bei den Marker-String-Verfahren führt die Level-Set-Methode auf eine partielle Differentialgleichung, mit der für die Level-Set-Funktion  $\Phi$  ein Anfangswertproblem formuliert wird, wenn man annimmt, daß die Ätzfront  $\Phi(\vec{r}; t = t_0) = 0$  zur Anfangszeit  $t = t_0$  bekannt ist.

**Die charakteristischen Eigenschaften der Level-Set-Verfahren lassen sich so zusammenfassen:**

Vorzüge:

- Festes Gitter, damit konstante Nachbarschaftsverhältnisse der Punkte;
- Einfache Berechnung von Oberflächennormalen ( $\nabla\Phi$ ) und Krümmungen ( $\Delta\Phi$ );

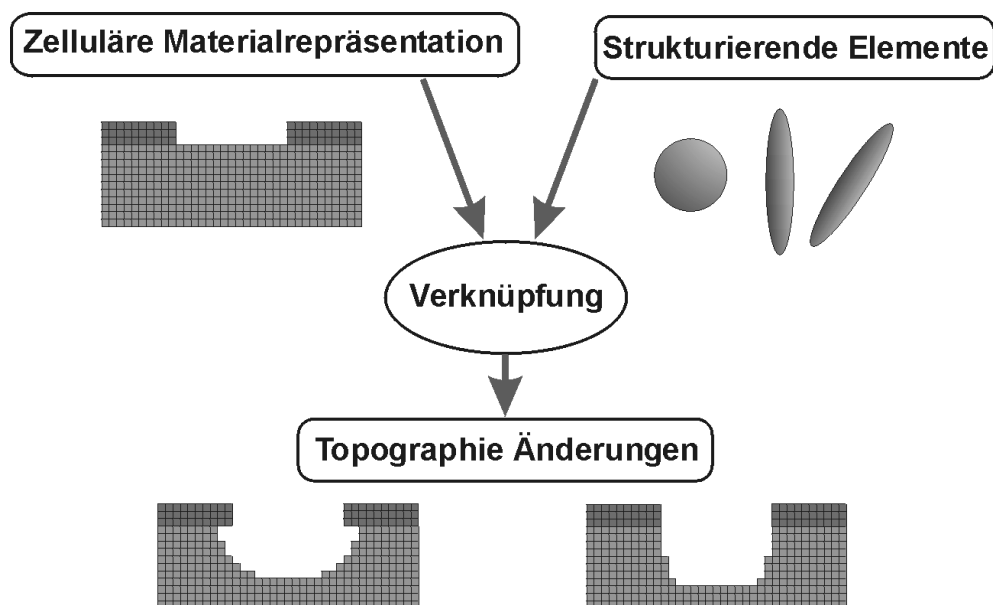
Nachteile:

- Numerisch aufwendig, da die Level-Set-Funktion  $\Phi$  eine um eins höhere Dimension als die Grenzfläche besitzt und außerdem nur die Nullstellen dieser Funktion eine Bedeutung haben.
- Zur Konstruktion der Grenzfläche ist eine Nullstellenbestimmung erforderlich.

In [103] wird eine charakteristische Funktion zu der Level-Set Funktion  $\Phi$  eingeführt. Diese Funktion hat den Wert Eins im Inneren des betrachteten Gebietes und den Wert Null außerhalb. Mit Hilfe dieser Funktion werden u.a. geometrische Parameter wie das Volumen des „inneren“ Gebietes bestimmt. Diese charakteristische Funktion kann allerdings auch direkt zur Materialrepräsentation bei der zeitlichen Entwicklung der Grenzfläche verwendet werden. Dies geschieht bei der Methode mit „Strukturierenden Elementen“, die im nächsten Abschnitt dargestellt wird.

## 4.2 Oberflächenevolutionsalgorithmus mit strukturierenden Elementen

Der in dieser Arbeit entwickelte Simulationsansatz ist eng angelehnt an die „Methode der Strukturierenden Elemente“, der von *Strasser* [145,146,147] für die Topographiesimulation eingeführt und von *Pyka* [112,113] optimiert, erweitert und in etlichen Veröffentlichungen für verschiedene Anwendungen verwendet wurde.



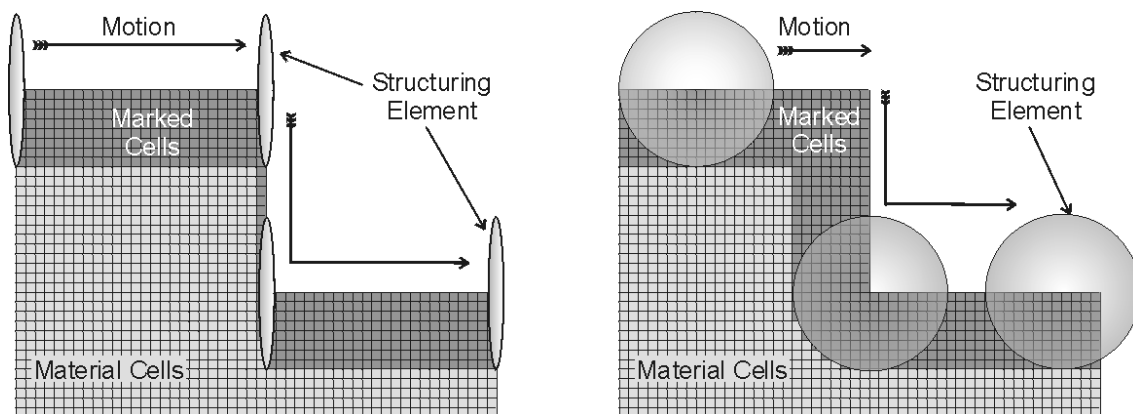
**Abb. 4.5:** Kompakte Darstellung des Oberflächenevolutionsalgorithmus mit strukturierenden Elementen.

Die mathematische Methode, die diesem Konzept zugrunde liegt, wurde ursprünglich für die digitale Bildverarbeitung entwickelt und später erst von *Strasser* zur effizienten Topographiesimulation angewendet [145]. Die grundlegende Idee besteht darin, das Simulationsgebiet als Anordnung von Zellen aufzufassen, die bestimmte Attribute tragen, welche mit bestimmten numerischen Operationen verändert werden kann.

Jeder Zeitschritt eines Ätz- oder Depositionsprozesses wird als sogenannte Minkowski Operation modelliert, in der ein geeignet gewähltes „Strukturierendes Element“ auf dem Simulationsgebiet diejenigen Bereiche markiert, in denen als nächstes Material entfernt bzw. hinzugefügt wird. Diese „Strukturierenden Elemente“ sind dreidimensionale

geometrische Körper wie z.B. Kugeln oder Ellipsoide, deren Form und Abmessungen dem zu modellierenden Prozeß angepaßt werden müssen. Dazu wird das Simulationsgebiet mit Volumenelementen, den sogenannten Zellen, diskretisiert, denen ein Materialindex zugeordnet wird. Die Materialrepräsentation wird mit den strukturierenden Elementen verknüpft und führt auf diese Weise zu einer veränderten Topographie, wie in Abbildung 4.5 schematisch vereinfacht dargestellt ist. Die zeitliche Entwicklung der Ätzfront wird durch die zeitliche Änderung der Materialindizes der Zellen repräsentiert, die wiederum von den Strukturierenden Elementen gesteuert wird. Dabei wird das Strukturierende Element über die Oberfläche der Struktur bewegt und jede Materialzelle markiert, die dabei überstrichen wird. In dem darauf folgenden Ätzschritt werden alle markierten Zellen „entfernt“, indem der Materialindex auf Null gesetzt wird.

Dieses Verfahren ist in Abbildung 4.6 an einen zweidimensionalen Beispiel für zwei unterschiedlich geformte Strukturierende Elemente dargestellt. Der Mittelpunkt der Strukturierenden Elemente wird, durch die Pfeile symbolisiert, über die Oberfläche der Strukturen geführt. Die dabei getroffenen und somit markierten Zellen sind in der Abbildung 4.6 dunkelgrau unterlegt. Wie zu erkennen ist, führt ein elliptisch geformtes Element links zu einem anisotropen Ätzabtrag mit höherer Ätzrate in vertikaler Richtung, während das kugelförmige Element rechts ein isotropes Ätzprofil erzeugt. Die konvexe Ecke der Struktur bleibt dabei als 90°-Ecke erhalten, wobei sich in der konkaven Ecke ein abgerundetes Profil ausbildet.



**Abb. 4.6:** Schematische Darstellung des Oberflächenbewegungsalgorithmus mit zwei unterschiedlichen strukturierenden Elementen.

Drei Besonderheiten dieser Methode sind bemerkenswert:

1. Der Algorithmus läßt sich in gleicher Weise auf Ätz- wie auf Depositionsprozesse anwenden. Der Unterschied besteht lediglich darin, ob bei der Bewegung der Strukturierenden Elemente über die Oberfläche die überstrichenen Material- oder die Vakuumzellen markiert werden.
2. Zum anderen können durch geeignete Wahl der Form, Orientierung und Größe der Strukturierenden Elemente eine Vielzahl verschiedener Prozesse modelliert werden, ohne daß eine weitere Anpassung des zugrundeliegenden Algorithmus nötig wäre.
3. Die Verwendung eines kugelförmigen Elementes zur Modellierung eines isotropen Ätz- oder Depositionsprozesses resultiert in einer Bewegung der Grenzfläche in Normalenrichtung mit einem Betrag, der dem Radius der Kugel entspricht. Die Verschiebung des Elementes über die Oberfläche, die einer mathematischen Faltungsoperation entspricht, bildet das Huyghens-Prinzip ab, dessen Bedeutung für eine physikalisch korrekte Bewegung der Grenzfläche in Abschnitt 4.1 beschrieben wurde.

Obwohl die Grenzfläche im Ergebnis in Normalenrichtung bewegt wird, muß die Oberflächennormale nicht explizit berechnet werden. Dadurch arbeitet dieses Verfahren auch robust an Ecken der Grenzfläche, an denen die Normalenrichtung nicht definiert ist. Durch diese Eigenschaften können typische Probleme anderer Verfahren elegant vermieden werden.



### 4.3 Vektormodell zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse

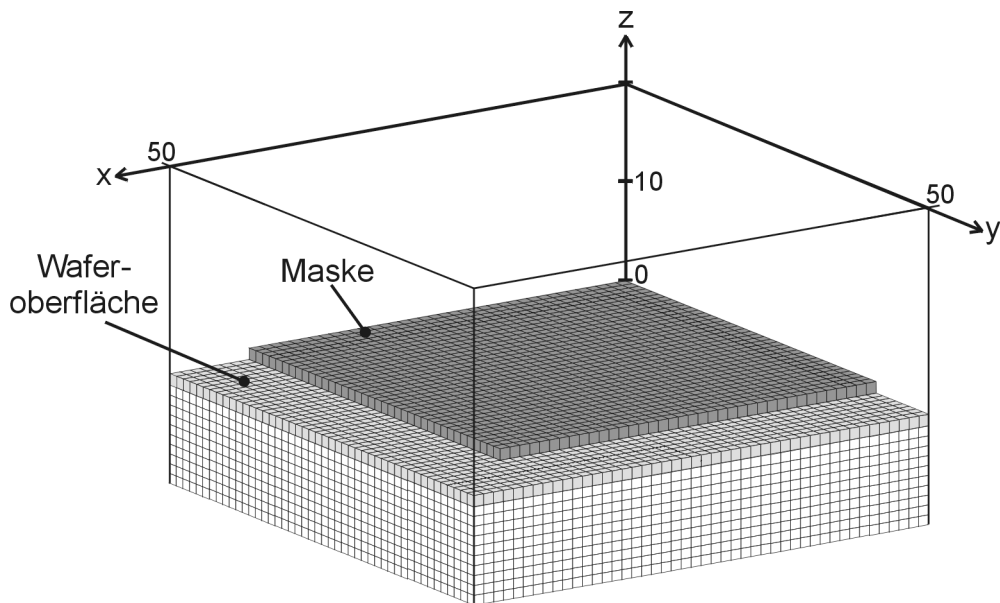
In diesem Abschnitt wird das Konzept und die algorithmische Umsetzung der Beschreibung des orientierungsabhängigen Ätzens mit einem Stufenätzmodell vorgestellt, das im Rahmen dieser Arbeit implementiert wurde. Das Simulationskonzept ist eng angelehnt an das im vorhergehenden Kapitel 4.2 vorgestellte Verfahren zur Topographiesimulation mit Strukturierenden Elementen. Allerdings mußten einige grundlegende Erweiterungen vorgenommen werden, um den speziellen Eigenschaften des orientierungsabhängigen Ätzens Rechnung tragen zu können.

Generell sind die hier vorgestellten Verfahren nicht als voneinander isolierte Methoden zu verstehen, die ausschließlich in einer unveränderlichen Formulierung verwendet werden. Konkrete Implementierungen können Elemente der verschiedenen, prinzipiellen Methoden kombinieren, um eine Anpassung an spezielle Aufgabenstellungen zu erzielen. In diesem Sinn enthält das in diesem Abschnitt beschriebene Vektormodell Elemente verschiedener Ansätze, um das Verfahren auf die speziellen Anforderungen und Eigenschaften des orientierungsabhängigen Ätzprozesses anzupassen.

#### Simulationsgebiet, Gitter, Koordinatensystem

Auch bei diesem Ansatz wird das Simulationsgebiet in Volumenelemente (Zellen) gleicher Form und Größe eingeteilt. Wie in Abbildung 4.7 dargestellt ist, wird ein kartesisches Koordinatensystem eingeführt, dessen  $z$ -Achse senkrecht zur Waferoberfläche gerichtet ist und dessen  $x$ - bzw.  $y$ - Achse mit einer der kristallographischen  $\langle 110 \rangle$ -Richtungen zusammenfällt, nach der die Maskierungsschichten ausgerichtet werden.

Bei den Simulationen wurden ausschließlich Wafer mit einer Oberflächenorientierung in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung behandelt, da nur für diese Orientierung experimentelle Ergebnisse zum Vergleich vorlagen. Die Anwendbarkeit des Stufenätzmodells, wie es in Kapitel 3.1.3 beschrieben wurde, auf andere Oberflächenorientierungen ist bislang noch nicht experimentell bestätigt worden, wenngleich seine Gültigkeit zu vermuten ist.



**Abb. 4.7:** Volumenmodell des Siliziumkristalls vor einer Ätzsimulation mit Maske und Koordinatensystem.

Das dreidimensionale Volumenmodell des Simulationsgebietes aus Abbildung 4.7 wird mit einem „Solid-Modeling“-Werkzeug erzeugt und als Geometriedatei vom Simulator eingelesen. Jeder Zelle wird über einen Index ein Material zugeordnet, wodurch die grundlegenden Ätzeigenschaften der Zelle bestimmt werden. Zellen mit unterschiedlichem Materialindex können prinzipiell beliebig in das Simulationsgebiet eingebaut werden, d.h. es können auch nicht ebene Strukturen bearbeitet werden.

An den Grenzen des Simulationsgebietes in lateraler Richtung und auf der Unterseite werden Zellen nicht als Oberflächen interpretiert, d.h. an diesen Stellen wird die Struktur nicht dem simulierten Ätzangriff ausgesetzt. Das Simulationsgebiet kann jedoch auch beidseitig, d.h. von oben und unten geätzt werden, wenn auf der Unterseite ebenfalls eine Ätzmaske aufgebracht wird.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden drei Materialien bzw. Materialklassen mit unterschiedlichem Ätzverhalten implementiert. Dies sind zum einen natürlich einkristallines Silizium, polykristallines Silizium, das isotrope Ätzeigenschaften in basischen Lösungen aufweist, und schließlich ein Material, das von der Ätzlösung nicht angegriffen wird. Mit diesem inerten Material werden Ätzmasken und Ätzstoppschichten modelliert.

Die Masken bestehen in diesem Modell in realistischer Weise aus einer dreidimensionalen, dünnen und chemisch inerten Schicht. Dadurch stellt das Simulationsgebiet zu Beginn der Ätzung bereits eine dreidimensionale Struktur dar.

Das Ätzen eines Materials mit isotropen Ätzeigenschaften wird nach dem im vorhergehenden Kapitel 4.2 beschriebenen Verfahren mit einer Kugel als „Strukturierendem Element“ durchgeführt.

Die folgenden Ausführungen bezieht sich auf die Modellierung der orientierungsabhängigen Ätzeigenschaften von einkristallinem Silizium.

Im Unterschied zu dem in Kapitel 4.2 dargestellten Ansatz besteht die Grundidee des in dieser Arbeit entwickelten Modells darin, die Ätzeigenschaften der Zellen nicht ausschließlich über den Materialindex zu determinieren. Das bedeutet, daß nicht alle Zellen, die das gleiche Material repräsentieren als identisch im Sinne von gleichwertig im Ätzverhalten betrachtet werden. Neben dem Materialindex werden diesen Zellen noch weitere Eigenschaften zugeordnet, aus denen definierte Funktionen während des Simulationsablaufes resultieren. Im Unterschied zu Ansätzen mit zellulären Automaten oder atomistischen Monte-Carlo Methoden (siehe dazu Kapitel 3.1.1) werden diese Eigenschaften nicht aus der lokalen Umgebung durch Bestimmung z.B. der Anzahl der nächsten Nachbarn oder der atomaren Bindungsverhältnisse abgeleitet. Diese Eigenschaften sind vielmehr das Ergebnis der Lösung eines Systems von zusätzlichen Bewegungsgleichungen, die das Fortschreiten der Ätzfront steuern. Konkret bedeutet das, daß atomistische Eigenschaften einer Gitterposition (z.B. „Stufe“ oder „Stufenquelle“) durch einen Satz von Gleichungen mit der Bewegung der Materialgrenzfläche mitgeführt werden. Deshalb ist es nicht nötig, die atomare Feinstruktur des Kristalls in der Datenstruktur der Anordnung der Zellen abzubilden, was eine Einbindung des Verfahrens in die Datenstrukturen bestehender TCAD-Umgebungen erleichtert.

Nach dem Stufenätzmodell aus Abschnitt 3.1.3 setzt sich der Kristall während der Ätzung aus Stufen zusammen, die aus Ebenen des  $\{111\}$ - und  $\{211\}$ -Zonenverbandes gebildet werden. Die Ätzung des Kristalls erfolgt durch laterale Auflösung der stabilen  $\{111\}$ -Ebenen an Stufen, die mit den  $\{211\}$ -Ebenen gebildet werden.

In Anlehnung an diesen Stufenätzprozeß besteht die Grundlage des Vektormodells zur Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse darin, den Kristall aus Flächenelementen aufzubauen, die mit  $\{111\}$ -Ebenen zusammenfallen. Diese Flächenelemente können von verschiedenen Seiten mit unterschiedlichen Mechanismen geätzt werden, welche die unterschiedlichen Bindungsverhältnisse der Ebenen des  $\{211\}$ -Zonenverbandes abbilden. Dazu werden verschiedene Klassen von Zellen bzw. Oberflächenelemente mit korrespondierenden Gleichungen definiert, die zu jedem Zeitschritt das Fortschreiten der Oberflächenelemente und damit der Ätzfront bestimmen.

Die Dynamik dieses Prozesses wird mit den folgenden Punkten beschrieben:

1. Einführung von Quelltermen für jedes Element.
2. Die Oberflächenelemente bewegen sich gemäß ihrer Bewegungsgleichung.
3. Die Bewegung der Oberflächenelemente stoppt an stabilen  $\{111\}$ -Ebenen, die als „Senken“ betrachtet werden können.
4. Einführung einer Abstandsfunktion der Oberflächenelemente zu den „Senken“ zur Steuerung der Bewegung bei der Ätzung.

Die Oberfläche des Kristalls in der Simulation wird aus den in Tabelle 4.1 aufgeführten Oberflächenelementen konstruiert.

Nummer	Bezeichnung	Formelsymbol	Beschreibung
1	Stufenquellen	K	Diese Elemente bilden die Symmetriekante einer konvexen Ecke, an der die Stufen erzeugt werden.
2	Stufen vom Typ „A“	A	Diese Elemente bilden die unregelmäßig gestuften Bereiche an konvexen Ecken.
3	Stufen vom Typ „B“	B	Diese Elemente bilden die fein gestuften Bereiche an konvexen Ecken.
4	Boden/Ätzgrund	F1	Mit diesen Elementen werden die Bodenzellen zusammengefaßt.
5	{111}-Fläche	F2	Diese Elemente bilden die stabilen {111}-Flächen, an denen Stufen auslaufen.
6	Stufen auf {100}-Fläche	F3	Diese Elemente bilden die senkrechten Flächen unter <100>-orientierten Kanten.
7	Stufen auf {110}-Fläche	F4	Diese Elemente treten in Fall der Waferperforation an der Kante zwischen zwei {111}-Ebenen auf.

**Tab. 4.1:** Oberflächenelemente zur Darstellung des Kristalls in der Simulation.

Diese Oberflächenelemente oder Elementtypen sind im Simulationsgebiet definiert als Funktionen von Ort und Zeit, deren Vereinigungsmenge das Gebiet ergibt, in dem Material vorhanden ist. Die Belegung der Oberflächenelemente mit den entsprechenden Attributen erfolgt in einem Initialisierungsschritt zu Beginn der Ätzsimulation.

Mit der zeitlichen Entwicklung der Grenzfläche während des Ätzprozesses werden die Elementtypen sowie die Eigenschaften der Elemente mit der Oberfläche mitgeführt, indem sie gemäß der entsprechenden Bewegungsgleichung auf neue Zellen übergeben werden. Danach werden die dazwischen liegenden Zellen „geätzt“, d.h. der Materialindex wird auf Null gesetzt.

Jedem dieser Oberflächenelemente wird eine charakteristische Gleichung zugeordnet, die die Bewegung des Oberflächenelementes und damit die Übertragung der Elementtyps während der Ätzung abbildet.

Die Bewegungsgleichungen der Elemente sind gewöhnliche Differentialgleichungen der Form:

$$\frac{\partial \vec{r}_{k,i}(t)}{\partial t} = R_k \cdot \vec{e}_{k,i} \quad (4.3)$$

Der Index  $k$  bezeichnet einen der Elementtypen, die in Tabelle 4.1 aufgeführt sind, und mit dem Index  $i$  werden die Elemente numeriert, also ein bestimmtes Element identifiziert.

Mit einer Diskretisierung nach dem Vorwärts-Euler-Verfahren ergibt sich die neue Position des Elementes nach dem Zeitschritt  $\Delta t$ :

$$\vec{r}_{k,i}(t + \Delta t) = \vec{r}_{k,i}(t) + R_k \Delta t \cdot \vec{e}_{k,i} \quad (4.3a)$$

Bei konstanter Zeitschrittweite  $\Delta t$  und der Zeit  $t = n \cdot \Delta t$  ergibt sich die kompaktere Form:

$$\vec{r}_{k,i}^{n+1} = \vec{r}_{k,i}^n + R_k \Delta t \cdot \vec{e}_{k,i} \quad (i = 1 \dots N) \quad (4.3b)$$

Eine Bewegungsgleichung dieser Form wird zu jedem Zeitschritt für alle  $N$  Oberflächenelemente gelöst.

Der Parameter  $R_k$  ist für die lateralen Stufen als Stufenätzrate interpretierbar, die als konstant angenommen wird. Allerdings kann dieser Parameter mit lokalen Modellen erweitert werden ( $R_k \rightarrow R_{k,i}$ ), um z.B. Effekte wie das „step-bunching“ zu modellieren.

Nach jedem Zeitschritt verändert sich sowohl die Oberfläche der Struktur als auch die Position und Anzahl der Oberflächenelemente. Die zeitliche Veränderung resultiert aus der Bewegung der Ätzfront und dem Auslaufen von Stufen und Stufenquellen an den entsprechenden Senken, also an stabilen  $\{111\}$ -Flächen und der Generation neuer Oberflächenelemente.

Die Ätzung von Stufenquellen generiert neue Stufen, indem die dabei freigelegten neuen Oberflächenelemente mit dem entsprechenden Elementtyp belegt werden und im nächsten Ätzschritt als Stufe in Erscheinung treten. Die Ätzung des Bodens generiert neue Stufen, Stufenquellen sowie Elemente der stabilen  $\{111\}$ -Ebenen.

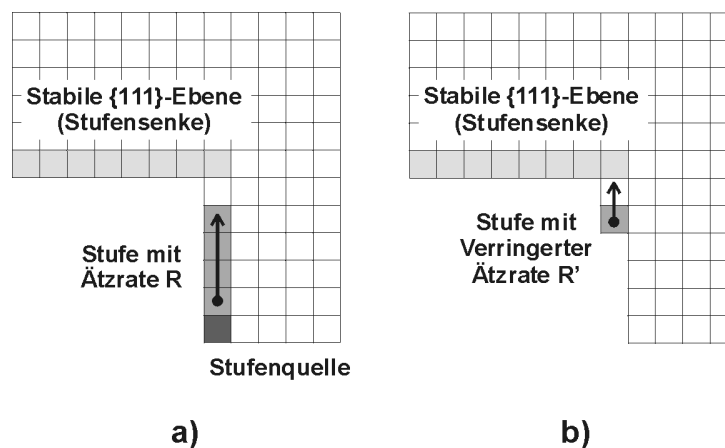
Die Generation neuer Elemente wird durch die einfache vektorielle Gleichung 4.4 beschrieben:

$$\vec{r}_{k,j}^{n+1} = \vec{r}_{k,i}^n + \vec{G}_{k,i} \quad (j > N) \quad (4.4)$$

Dabei bezeichnet  $\vec{r}_{k,j}^{n+1}$  den Ortsvektor des zum Zeitpunkt  $n+1$  neu erzeugten Elementes vom Typ  $k$ ,  $\vec{r}_{k,i}^n$  ist der Ortsvektor der Quelle zum Zeitpunkt  $n$ , die das neue Element erzeugt und der Vektor  $\vec{G}_{k,i}$  ist der Richtungsvektor, der bestimmt, in welcher Position bezüglich der Quelle das neue Element generiert wird.

Treffen Stufen auf stabile  $\{111\}$ -Ebenen, die senkrecht zu ihrer Bewegungsrichtung stehen, dann laufen die Stufen an diesen Ebenen aus und verschwinden.

Diese Situation ist in Abbildung 4.8 an einem zweidimensionalen Beispiel veranschaulicht. Die Stufenquelle erzeugt nach ihrer Ätzung eine Stufe, die selbst wiederum in lateraler Richtung zur Oberfläche mit der als konstant angenommenen Rate  $R$  geätzt wird. Vor der Verschiebung der Stufe wird der Abstand zur Senke bestimmt, um sicherzustellen, daß die Ätzung der Stufe an der stabilen  $\{111\}$ -Ebene stoppt. Solange der Abstand der Stufe zur stabilen  $\{111\}$ -Ebene größer ist als die Verschiebung  $dx$  der Stufe in nächsten Zeitschritt ( $dx = R \cdot dt$ ), kann sich die Stufe frei bewegen. Falls der Abstand zur Senke jedoch kleiner ist als die Verschiebung des Elementes, wird die Ätzrate verringert, so daß eine  $\{111\}$ -Ebene, die senkrecht zur Bewegungsrichtung des Elementes steht, nicht durchbrochen wird.



**Abb. 4.8:** Zweidimensionales Beispiel zur Wechselwirkung zwischen Stufen und stabilen  $\{111\}$ -Ebenen (Stufensenke).

- Stufe mit Ätzrate  $R$  wird vollständig geätzt.
- Abstand der Stufe ist kleiner als Verschiebung; die Stufe wird mit verringerter Ätzrate  $R'$  geätzt und stoppt an der  $\{111\}$ -Ebene.

Die Materialzellen, die eine Stufe bei der Verschiebung überstreicht, werden nicht sofort entfernt, sondern zunächst markiert. Erst nach der Bestimmung der neuen Positionen aller Elemente werden die markierten Zellen entfernt. Dieses Verfahren ist erforderlich, damit alle Elemente in einem Zeitschritt dieselbe Umgebung haben.

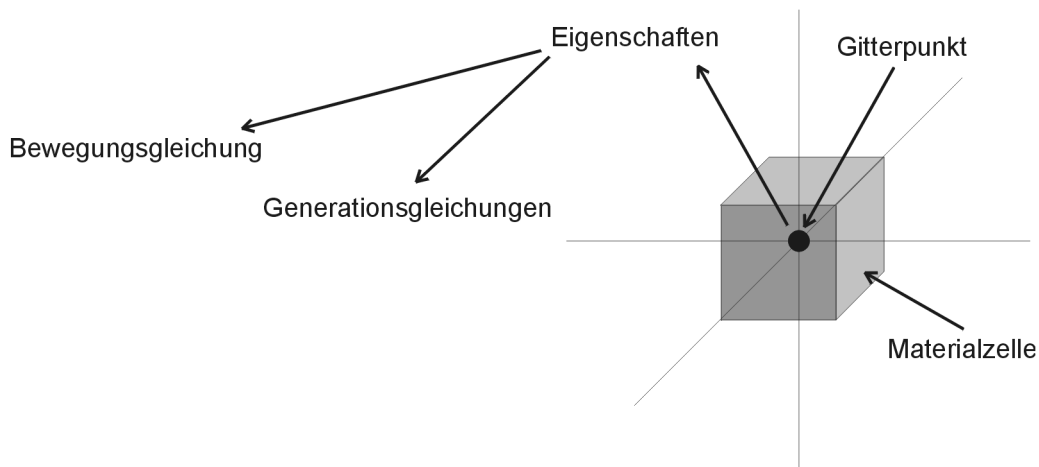
Die Unterscheidung konvexer, konkaver und (in drei Dimensionen) Sattellecken, die von zentraler Bedeutung bei den differentialgeometrischen Modellen ist und bei dreidimensionalen Implementierungen erhebliche Probleme bereiten kann, ist im konzeptionellen Rahmen eines Stufenätzmodells unnötig. An dessen Stelle tritt die korrekte Initialisierung von Stufenquellen und Stufensenken.

Die Stufenquellen haben (in der hier vorgestellten Implementierung) rein geometrische Ursachen. Zu Beginn der Simulation werden die Stufenquellen von der Maske induziert. Im Verlauf der Simulation können Stufenquellen generiert werden, wenn durch die Bewegung der Ätzfont Zellen in Halbkristallage auf  $\{111\}$ -Ebenen auftreten. Dies ist z.B. der Fall, wenn Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken verwendet werden (Kapitel 5.4.1) und die Ätzung nach Erreichen der Kompensation fortgesetzt wird.

Stufenquellen können auch durch Störungen auf stabilen  $\{111\}$ -Ebenen auftreten, wenn z.B. Kristalldefekte implementiert werden. Diese Störungen können in der zellbasierten Materialrepräsentation leicht abgebildet werden.

**Zusammenfassend läßt sich das hier entwickelte Simulationskonzept kompakt formulieren:**

Aus den kristallographischen Eigenschaften eines Gitterpunktes der Materialzellen auf der Oberfläche werden die Parameter einer Bewegungsgleichung und eventuell mehr als einer Generationsgleichung abgeleitet. Die Bewegungsgleichung beschreibt die zeitliche Fortbewegung eines Punktes und damit der lokalen Ätzfront, was durch die Übertragung der Eigenschaften des betrachteten Punktes auf andere Gitterpunkte entsprechend seiner Ätzrate abgebildet wird. Die Ätzung legt neue Oberflächenelemente frei, denen entsprechend der Generationsgleichungen des geätzten Punktes charakteristische Eigenschaften übertragen werden.



**Abb. 4.9:** Graphische Veranschaulichung des Simulationskonzepts: Jede Materialzelle an einem Gitterpunkt besitzt charakteristische Eigenschaften, aus denen eine Bewegungsgleichung und Generationsgleichungen abgeleitet werden. Diese Gleichungen beschreiben die zeitliche Entwicklung der Ätzfront.

### Extraktion der Stufenätzraten aus Teststrukturen und Diskretisierung der Kristallstrukturen

Die Ätzraten der Stufen und der Stufenquellen werden direkt aus den in Abbildung 3.11 eingeführten Parametern  $a$  und  $b$  durch einfache geometrische Umrechnung abgeleitet. Die Ätzrate des Bodens entspricht direkt der meßbaren Tiefenätzrate, die auch als sehr gute Näherung für die Ätzraten der senkrecht zur Waferoberfläche stehenden  $\{100\}$ -Ebenen verwendet wird.

Die resultierenden Ätzraten der  $\{111\}$ -Ebenen sowie die Ätzraten der Bereiche, die mit  $\{110\}$ -Ebenen als Einhüllende beschrieben werden, können ebenfalls aus Meßdaten bzw. aus Literaturangaben, z.B. in Tabelle 2.1, entnommen werden.

Die Positionen der Punkte  $S_u$  und  $Q$  an einer konvexen Ecke resultieren in der Simulation aus dem Richtungsvektor  $\vec{G}_k$ , entsprechend dem die Zellattribute der Oberflächenelemente „Stufenquellen“ bzw. „Stufen vom A-Typ“ bei der Ätzung des Bodens weitergegeben werden. Dieser Richtungsvektor wird gemäß der Gleichungen 3.2-3.5 aus den Parametern  $a$ ,  $b$  und der Kristallstruktur bestimmt.

Die Neigung der  $\{111\}$ -Ebenen ( $54,7^\circ$  bei Vernachlässigung von Randkeimbildung) wird durch das Verhältnis von Zellenbreite zu Zellenhöhe nachgebildet.



## Hierarchische Modellierung

Ätzzvorgänge sind in ihrer Natur atomare Prozesse, die aufgrund der extrem großen Datenmenge bei mikromechanischen Strukturen nicht auf atomarer Skala modelliert werden können. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt ist es für alle technischen Aufgabenstellungen nicht erforderlich, atomare Strukturen in der Simulation abzubilden. Im Hinblick auf eine effiziente Nutzung der rechen-technischen Ressourcen und dem Prinzip der „maßgeschneiderten Modellierung“ ist es sinnvoll, Feinstrukturen der Ätzfront in der Simulation nur soweit aufzulösen wie es für die konkrete Anwendung erforderlich erscheint.

Aus diesem Grund werden die feinen Stufen der Bereiche von Typ „B“ (Abbildung 3.4) in der Simulation nicht aufgelöst, sondern durch größere Stufen abgebildet, die an das Materialgitter angepaßt sind. Dasselbe gilt für die Stufen, die die Bereiche von Typ „A“ bilden.

Nach dem Stufenätzmodell resultiert die Ätzfront unter einer in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung liegenden Maskenkante durch Überlagerung der Struktur vieler, sehr dicht beieinander liegender konvexer Ecken, die auf diese Weise eine  $\{100\}$ -Fläche bilden. Für diese senkrecht zur Waferoberfläche stehenden  $\{100\}$ -Flächen wurde ein eigenes Oberflächenelement eingeführt (Elementtyp 6), da in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientierte Maskenkanten häufig verwendet werden. Dadurch müssen die konvexen Ecken entlang der Kante nicht aufgelöst werden und es können mit größerer Diskretisierung (weniger Zellen) bereits gute Ergebnisse erzielt werden.

Gemäß dem elektrochemischen Modell, das in Abschnitt 2.4.3 dargestellt wurde, erfolgt die Ätzung der stabilen  $\{111\}$ -Ebenen, in dem zunächst atomare Gruben gebildet werden, die sich durch laterales Ätzen der Ränder vergrößern und schließlich einen Abtrag einer Schicht der  $\{111\}$ -Ebenengruppe bewirken.

Abweichend von diesem realen Ätzmechanismus werden die Zellen einer  $\{111\}$ -Ebene in der Simulation simultan geätzt, sobald das Produkt aus Ätzzeit und Ätzrate der  $\{111\}$ -Ebenengruppe mit der Materialdiskretisierung aufgelöst werden kann. Es ist allerdings ohne weiteres möglich, den Prozeß der Grubenbildung auf stabilen  $\{111\}$ -Ebenen in das Simulationsmodell zu implementieren, ebenso wie Effekte der Randkeimbildung unter der Maskenkante.

## Beschreibung des Algorithmus zur Implementierung des Stufenätzmodells

Auf den Gitterpunkten, die auch die Mittelpunkte der Materialzellen repräsentieren, wird eine Funktion definiert, die den Elementtyp der Zellen enthält.

Zu jedem Zeitschritt wird auf jedem Gitterpunkt die zum jeweiligen Elementtyp gehörige Bewegungsgleichung bzw. die Generationsgleichung gelöst. Dazu werden die Richtungsvektoren für die Verschiebung des Elementes  $\vec{e}_{k,i}$  und für die Generation  $\vec{G}_k$

berechnet. Damit wird die Verschiebung der Oberflächenelemente und die Ätzung des dazwischen liegenden Materials, sowie die Generation neuer Elemente bestimmt.

Der derzeit implementierte Algorithmus zum orientierungsabhängigen Ätzen geht von einer Situation aus, bei der das Simulationsgebiet aus einem ebenen Wafer mit einer maskierten Ober- und Unterseite besteht. Deshalb wird jeder Ätzschritt aufgeteilt in einen Tiefenätzschritt und einen Ätzschritt in lateraler Richtung.

Diese Aufteilung ist nicht zwingend, erscheint aber besonders zu Beginn der Ätzung sinnvoll, wenn das Simulationsgebiet aus der Maske und der noch ebenen zweidimensionalen Waferoberfläche besteht. Auf einen speziellen Initialisierungsschritt für den Übergang von der Maske auf die dreidimensionale Struktur kann somit verzichtet werden.

Prinzipiell ist allerdings das Ätzen des „Bodens“ bzw. der Waferoberfläche nicht ausgezeichnet gegenüber der lateralen Ätzung anderer Bereiche.

Der Algorithmus für das Material „einkristallines Silizium“ untergliedert sich in folgende Teile:

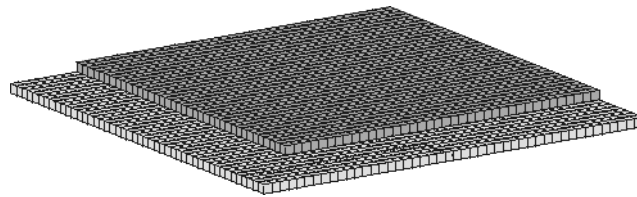
1. Ätzen Bodenzellen mit Abstand von {111}-Elementen größer Eins und Generation neuer Elemente
2. Für alle Elemente:
  - 2.1 Verschieben, wenn Abstand zu Senken größer als  $R \cdot \Delta t$
  - 2.2 Sonst Verschiebung berechnen
  - 2.3 Generation neuer Elemente
  - 2.4 Markieren zu ätzender Zellen
  - 2.5 Übertragung der Elementeigenschaften
3. Überprüfen der neuen Ätzfront auf abgetrennte und unterschrittene Bereiche
4. Ätzen markierter Zellen

In Punkt 3 wird geprüft, ob die Ätzfront eine geschlossene Fläche darstellt, ob allen Oberflächen ein Elementtyp zugeordnet werden kann und ob sich Elemente über den Rand des Simulationsgebietes hinaus bewegen.

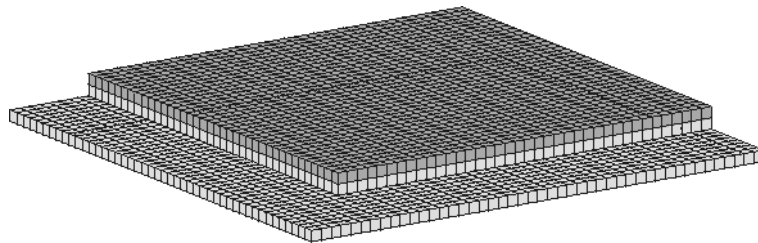
Die etwas abstrakte Beschreibung dieses Stufenätzalgorithmus soll im Folgenden am Beispiel der Strukturbildung einer einfachen konvexen Ecke veranschaulicht werden. Eine Simulation dieser Struktur ist in Kapitel 5.1 mit REM-Aufnahmen gegenübergestellt.

Wie in Kapitel 3.1.3 referiert wurde, kann die Unterätzung einer konvexen Maskenecke durch Bestimmung der charakteristischen Punkte P, Q, S<sub>u</sub>, S<sub>o</sub> vollständig beschrieben werden. Voraussetzung dafür war die Konstanz der Stufenorientierung während der Ätzung.

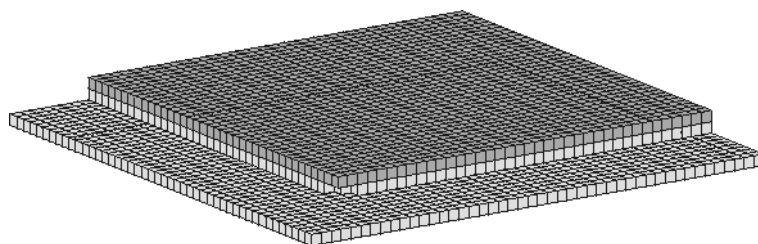
Die Entwicklung dieser charakteristischen Punkte während der ersten Ätzschritte wird in den folgenden Abbildungen dargestellt. Zur besseren Übersicht wird vom Simulationsgebiet nur die Oberfläche gezeigt und das Koordinatensystem ausgeblendet.



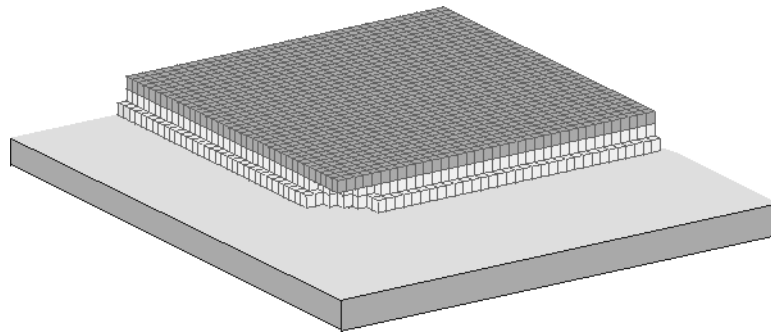
**Abb. 4.10:** Simulationsgebiet zu Beginn der Ätzung: ebene Siliziumoberfläche mit Maskierungsschicht.



**Abb. 4.11:** Beim 1. Ätzschritt sind nur Bodenzellen vorhanden, die nach der Ätzung eine Zelle freilegen, die die Eigenschaft einer Stufenquelle annimmt. Dieser 1. Ätzschritt beim Übergang von der Maske zur dreidimensionalen Struktur ist kein Initialisierungsschritt, da im Algorithmus kein Unterschied zu den folgenden Ätzschritten besteht. Die Zelle unter der Maskenecke ist vom Typ „Stufenquelle“, die anderen Zellen unter den Maskenkanten werden dem Typ „ $\{111\}$ -Ebene“ zugeordnet.

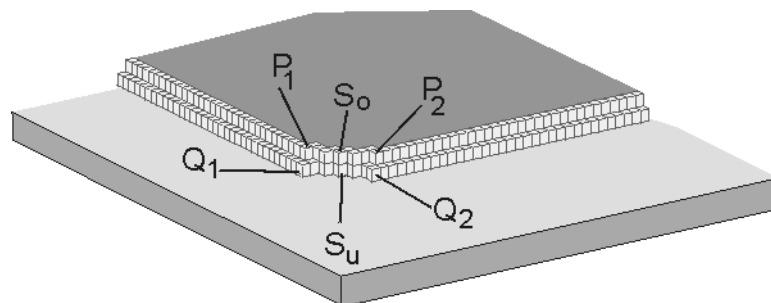


**Abb. 4.12:** Die Ätzung der Stufenquelle erzeugt zwei Stufen in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung. Die Punkte P und Q können noch nicht getrennt werden und somit sind die Stufen nicht eindeutig den Bereichen A bzw. B zuzuordnen.

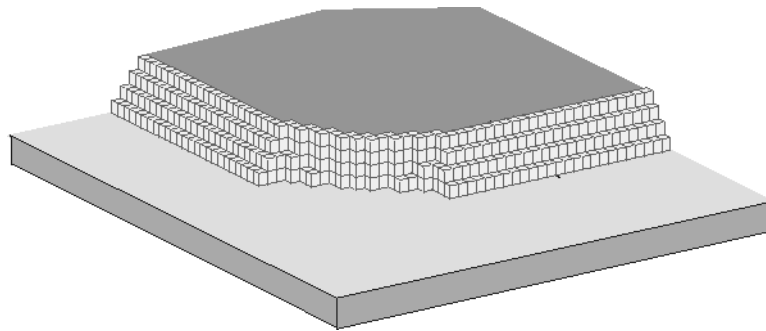


**Abb. 4.13:** Das tiefer Ätzen des Bodens erzeugt eine neue Stufenquelle an der Symmetriekante der konvexen Ecke. Auch die  $\{111\}$ -Ebenen bilden sich aus.

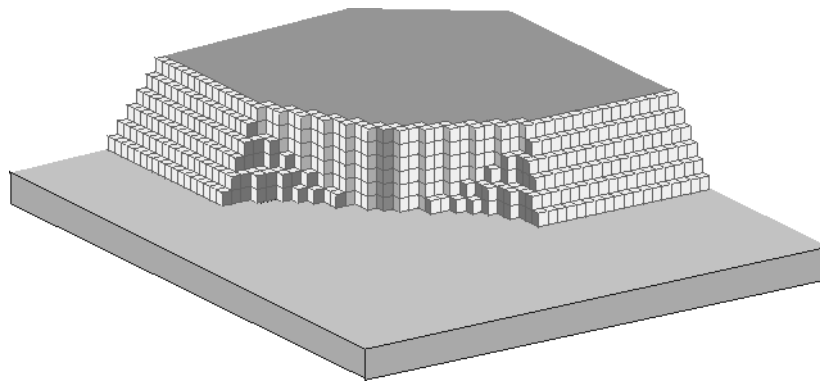
Aus Gründen der besseren Übersichtlichkeit sind in den nachfolgenden Darstellungen die Maskenzellen entfernt.



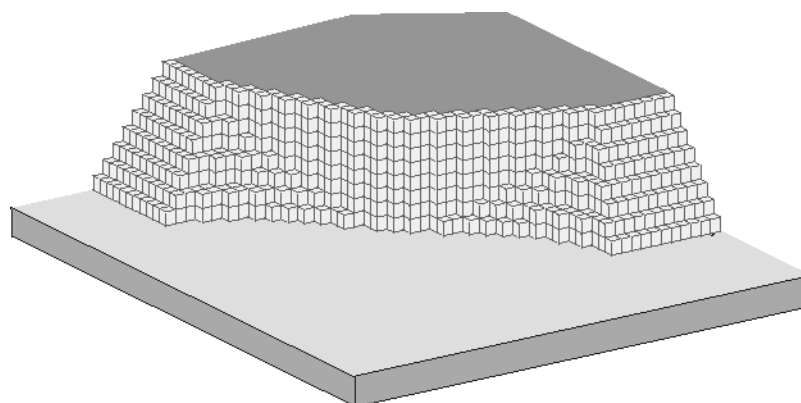
**Abb. 4.14:** Gleiche Struktur wie in der vorigen Abbildung. Die Punkte P und Q können von der Materialdiskretisierung bereits aufgelöst werden.



**Abb. 4.15:** Hier bilden sich die Bereiche vom Typ „A“ und „B“ trotz der relativ groben Diskretisierung im Ansatz bereits aus.



**Abb. 4.16:** Die Stufen des „A“-Bereiches und des „B“-Bereiches sind an den Stirnseiten, von denen sie geätzt werden farblich markiert, ebenso die Zellen an der Symmetrielinie der Struktur zwischen den Punkten  $S_0$  und  $S_u$ .



**Abb. 4.17:** Die typische Gestalt einer unterätzten einfachen konvexen Ecke ist schon zu erkennen.

In Abbildung 4.18 ist ein Flußdiagramm des Algorithmus des Ätzsimulators dargestellt. Der Simulator wird mit den beiden Schnittstellen für die Ein- und Ausgabedateien mit einer Simulationsumgebung verbunden.

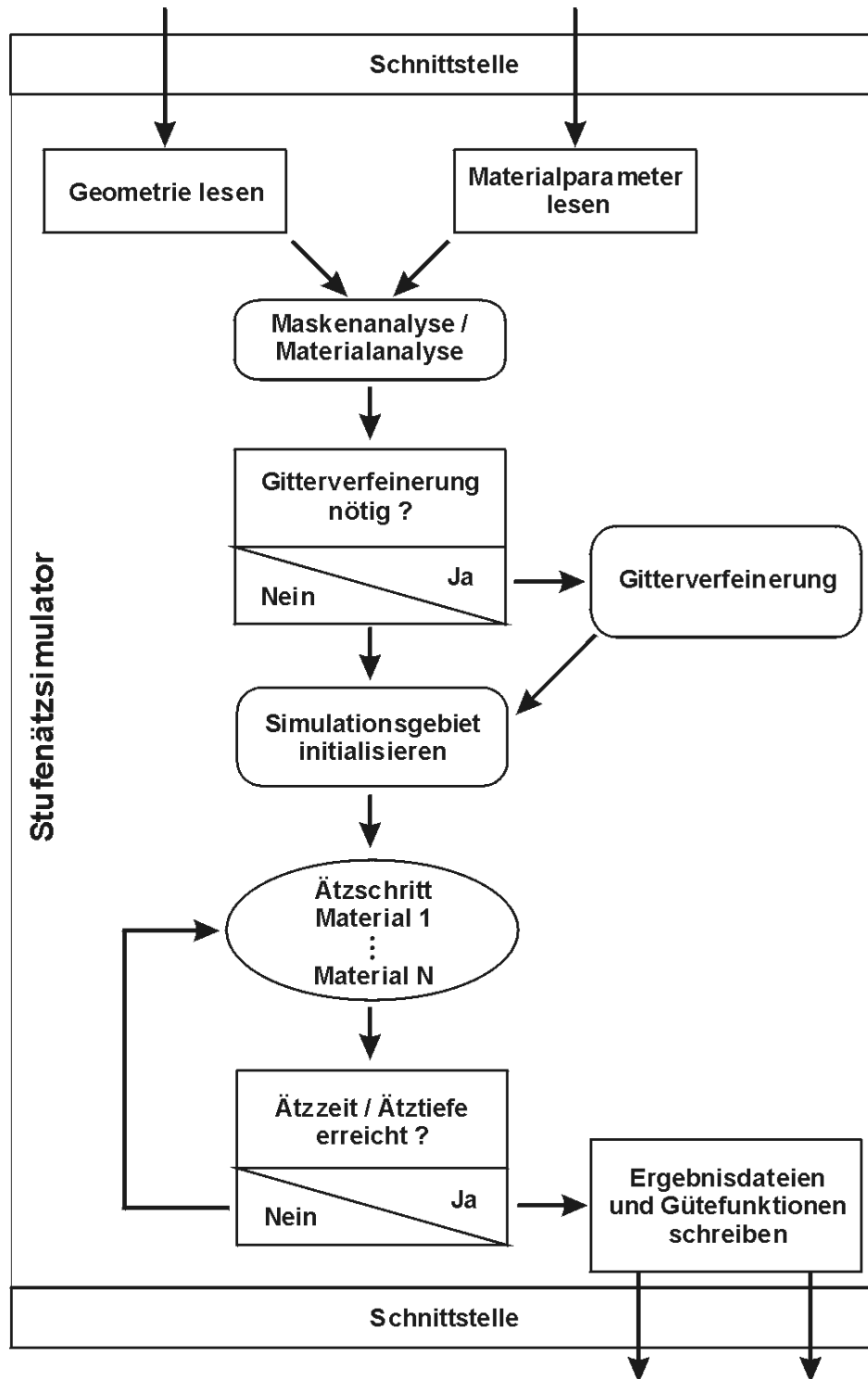
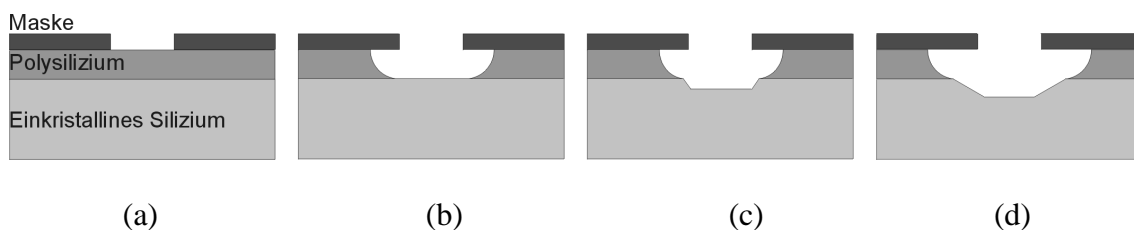


Abb. 4.18: Flußdiagramm des Ätzsimulators.

Mit dem Schritt „Geometriedatei lesen“ und „Materialdatei lesen“ wird die zelluläre Materialbeschreibung der Eingabedateien zusammen mit den für den Ätzprozeß benötigten Oberflächenelementtypen in die für die Simulation notwendige Datenstruktur übertragen. Danach wird die Maskengeometrie analysiert und entschieden, ob z.B. an schrägen Kanten eine Verfeinerung des Materialgitters notwendig ist bzw. ob die maskierten Bereiche ausreichend fein diskretisiert sind, um eine Simulation nach dem Stufenätzmodell zu ermöglichen. Eine weitergehende Überprüfung des Maskenlayouts, z.B. auf Überschneidungen von Kanten, wie es bei differentialgeometrischen Modellen sinnvoll ist, wird aufgrund der zellulären Darstellung der Masken nicht erforderlich. Jede Maskengeometrie ist in einer zellulären Darstellung grundsätzlich erlaubt, jedenfalls im rein physikalischen Sinn. Prozeßbedingte Designregeln, wie z.B. minimale Strukturgrößen der Maske bzw. minimale Abstände zwischen Maskenkanten werden nicht automatisiert überprüft. Es hat sich herausgestellt, daß Maskenstrukturen mindestens mit 8 bis 10 Zellen diskretisiert werden sollten.

Die Gitterverfeinerung bei schrägen Kanten wird im Abschnitt 5.2.2 näher beschrieben. Danach wird das Simulationsgebiet initialisiert, d.h. entsprechend dem Maskenlayout werden die Materialzellen der ersten Materialschicht mit den entsprechenden Elementtypen belegt. Danach folgen die Ätzschritte aller vorhandenen Materialien, bis die vorgegebene Ätzzeit bzw. Äztiefe erreicht ist. Zuletzt werden die Ergebnisse in Dateien ausgegeben, die zur weiteren Bearbeitung zur Verfügung stehen.

Verschiedene Materialien im Simulationsgebiet werden mit einem iterativen Verfahren geätzt. Als Beispiel dazu ist in Abbildung 4.19 eine Schichtstruktur aus Maske, Polysilizium und einkristallinem Silizium dargestellt. Zuerst (a) wird nur das Polysilizium isotrop aufgelöst. In Abbildung 4.19 b) ist das einkristalline Siliziumsubstrat freigelegt und wird im darauffolgenden Ätzschritt bearbeitet, worauf sich zunächst ein V-Graben  $\{111\}$ -Ebenen ausbildet (c). Da aber im selben Zeitschritt das Polysilizium ebenfalls geätzt wird, werden die Oberkanten dieser  $\{111\}$ -Ebenen freigelegt und im nächsten Zeitschritt schälen sich die  $\{111\}$ -Ebenen zum Ätzboden hin ab. Auf diese Weise entsteht nach einigen weiteren Zeitschritten im einkristallinen Siliziumsubstrat ein Graben mit deutlich flacheren Böschungswinkeln (Abbildung 4.19 d).



**Abb. 4.19:** Iterative Ätzung von Materialschichten. Unterschiedliche Materialgebiete decken sich teilweise ab und wirken als Maskierung.

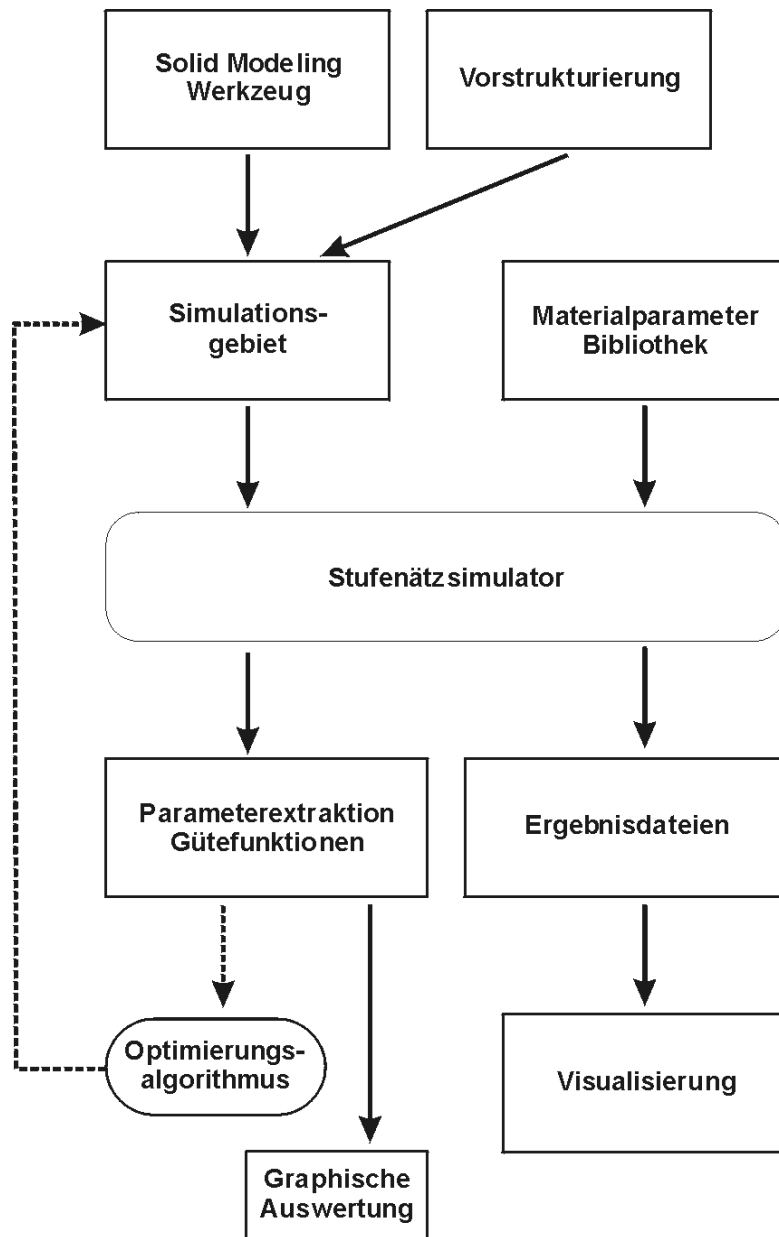
Die Abbildung 4.20 zeigt die Einbindung des Ätzsimmers in eine Simulationsumgebung. Die Geometriedatei, die das Simulationsgebiet mit den verschiedenen Materialien (Masken, einkristallines Silizium, polykristallines Silizium, Ätzstoppschichten, usw.) enthält, wird entweder mit einem geeigneten Solid-Modeling-Werkzeug erstellt oder kann als Ergebnisdatei eines anderen Topographiesimmers vorliegen. Als Datenbasis für die Ätzprozesse benötigt der Ätzsimmulator für jedes Material die Elementtypen, zusammen mit den entsprechenden Ätzraten und Richtungsvektoren. Diese Daten müssen für jeden einzelnen Prozeß extrahiert werden. Der Ätzsimmulator liefert als Ausgabe die Ergebnisdateien in verschiedenen Formaten, die dann mit entsprechenden Visualisierungsprogrammen dreidimensional dargestellt und ausgewertet werden können. Es wird z.B. auch eine Geometriedatei im .cdf-Format ausgegeben, das in einer TCAD-Umgebung verwendet wird, die an der TU Wien entwickelten wurde [113].

In der derzeitigen Implementierung sind alle Voraussetzungen gegeben, um eine geätzte Struktur in einem iterativen Optimierungsprozeß gemäß vorab festgelegter Gütekriterien zu optimieren.

Während in den Ergebnisdateien lediglich die Geometrie des Simulationsgebietes nach der Simulation (also nur für jede Zelle bzw. jeden Gitterpunkt nur die Information Material oder kein Material) ausgegeben wird, können zur Extraktion der Gütefunktionen auch interne Parameter der Datenstruktur, wie z.B. Bereiche vom Typ A oder B, herangezogen werden, die zusätzliche charakteristische Informationen der geätzten Strukturen enthalten.

Das Ergebnis der Auswertung gewisser Gütefunktionale („target functions“) als Postprocessing-Schritt kann dann im Folgenden als Eingabedatei für ein Optimierungsmodul verwendet werden, das die extrahierten Werte mit vorab festgelegten Sollwerten vergleicht und das Maskenlayout in der Eingabedatei des Ätzsimmers nach definierten Regeln abändert. Parallel dazu können die Gütefunktionale und charakteristischen Parameter auch graphisch ausgewertet und dokumentiert werden, um diese eventuell mit Spezifikationen der herzustellenden Strukturen vergleichen zu können.





**Abb. 4.20:** Flußdiagramm der Simulationsumgebung des Stufenätzsimulators.

### **Vorzüge und Probleme des verwendeten Simulationsansatzes**

Zum Abschluß dieses Abschnitts sollen die Vorzüge und auch die problematischen Aspekte des implementierten Simulationansatzes stichpunktartig zusammengefaßt werden.

#### **Probleme:**

- Anpassung auf andere Waferorientierungen erfordert zum Teil neue Definition der Elementtypen mit charakteristischen Gleichungen.
- Diskretisierungsfehler durch zelluläre Materialrepräsentation sind schlecht kontrollierbar.
- Adaptive Gitteranpassungen an die Geometrie der Strukturen ist mangels geeigneter Adaptionskriterien kaum möglich.

#### **Vorzüge:**

- Realitäts- und detailgetreue Simulation von anwendungsrelevanten Mikrostrukturen;
- Modellierung lokaler Effekte möglich;
- Hohe numerische Effizienz und Robustheit;
- Kompatibilität zu Standard-TCAD-Umgebung;
- Modellierung komplexer Simulationsgebiete möglich (siehe Kapitel 5);
- Modellierung verwandter Ätztechniken und Materialien in Anlehnung an den Oberflächenbewegungsalgorithmus (Kapitel 4.2) leicht möglich;
- Einfache Extraktion von Geometrie- und Strukturparametern des Ätzkörpers durch zelluläre Materialrepräsentation;

## 5 Ergebnisse

### Vorbemerkungen zur Visualisierung der Simulationsergebnisse

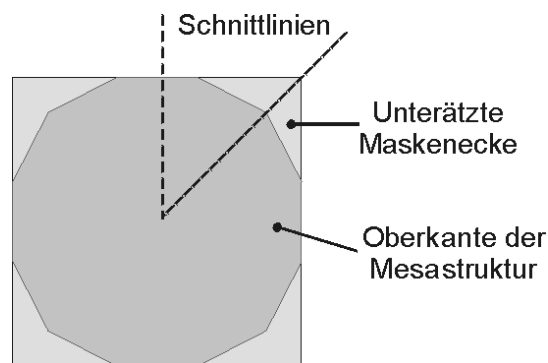
Den anschaulichsten Eindruck von der Übereinstimmung zwischen simulierten und tatsächlich hergestellten Mikrostrukturen erhält man durch optischen Vergleich entsprechender Bilder. Die Qualität eines Ätzprozesses und einer korrespondierenden Simulation läßt sich dadurch oft leichter und aussagekräftiger beurteilen als dies durch Diagramme und quantitativen Vergleich charakteristischer Dimensionen möglich wäre. Eine aussagekräftige Visualisierung der Simulationsergebnisse ist daher zwingend notwendig. Einige wesentliche Aspekte zur Visualisierung sollen im Folgenden kurz angesprochen werden.

Die Ergebnisdateien der Simulationen werden direkt mit der zellulären Materialrepräsentation visualisiert, genau so wie sie nach der Ätzsimulation vorliegen. Dadurch soll ein möglichst authentischer Eindruck der geometrischen Strukturen vermittelt werden, wie sie intern im Simulationsprogramm vorliegen und bearbeitet werden. Das hat zur Folge, daß die Materialdiskretisierung in den Bildern erkennbar ist und dadurch auch Stufen in Bereichen auftreten, die in der Realität glatt erscheinen. Es wurde bewußt darauf verzichtet, durch nachträgliches Aufbereiten der Ergebnisdateien besonders spektakuläre oder fotorealistische Bilder zu erzeugen, weil dadurch wesentliche Eigenschaften und der Charakter des Simulationskonzeptes als Implementierung eines Stufenätzmodells verfälscht würden.

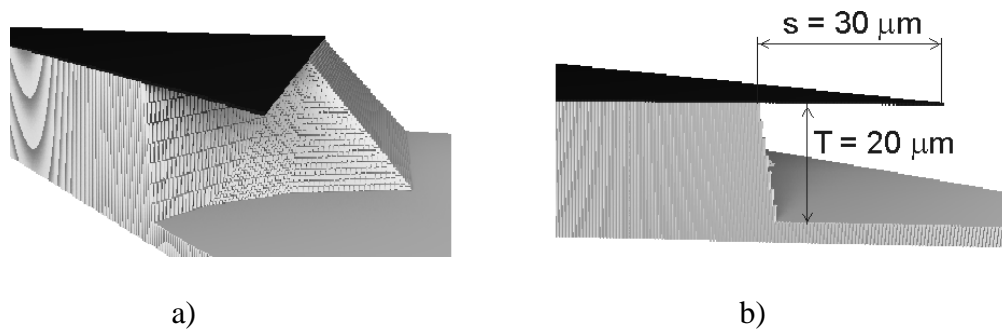
Es existieren eine Reihe hochentwickelter Verfahren, um aus zellulär diskretisierten Gebieten die zugehörigen Oberflächen zu rekonstruieren, wobei auch gekrümmte Oberflächen gut berücksichtigt werden können, z.B. in [35,64].

Die in diesem Kapitel dargestellten Simulationsergebnisse wurden mit dem Raytracing Programm „Povray“ visualisiert, das als Public-Domain Software frei verfügbar ist. Bei den Darstellungen wurde der Schwerpunkt auf gute Kontraste und Plastizität der dreidimensionalen Strukturen gelegt, was zur Folge hat, daß die perspektivische Erscheinung der simulierten Strukturen nicht immer genau den Perspektiven der zum Vergleich herangezogenen REM Aufnahmen entspricht. Wegen der Darstellung in Zentralperspektive können auch nicht ohne weiteres Dimensionen oder Winkel direkt aus den visualisierten Bildern heraus abgemessen werden. Zu diesem Zweck können jedoch im Postprocessing-Modul des Ätzsimulators beliebige Schnittebenen durch die Strukturen gelegt und als Datei bzw. Grafik ausgegeben werden, aus denen sich dann die interessierenden Größen extrahieren lassen. Alternativ dazu kann auch das Ergebnisfile, das die dreidimensionale Struktur enthält, mit geeigneten Softwaretools ausgewertet und nachbearbeitet werden.

Zur Illustration des Visualisierungsprozesses wird im Folgenden die quantitative Auswertung der Unterätzung einer einfachen konvexen Maskenecke dargestellt. Dazu wird aus einer Mesastruktur mit quadratischer Maske ein Segment mit  $45^\circ$  Öffnungswinkel herausgeschnitten, wie in Abbildung 5.1 dargestellt ist. Dabei liegt eine Schnittebene in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung, die andere ist in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung durch eine konvexe Ecke der Struktur geführt. Abbildung 5.2 a) zeigt eine perspektivische Darstellung dieses Segments und Abbildung 5.2 b) eine Ansicht mit etwa senkrechter Blickrichtung auf die Schnittebene in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung. In dieser Ansicht werden die Dimensionen der Struktur in maßstabsgetreuen Längenverhältnissen abgebildet, so daß mit Hilfe der bekannten Ätztiefe von  $20\ \mu\text{m}$ , in diesem Beispiel, die Unterätzung der Spitze Maskenecke aus der Darstellung heraus abgemessen werden kann. Es ergibt sich ein Wert von etwa  $30\ \mu\text{m}$ , der sehr genau mit einer aus experimentellen Daten errechneten Unterätzung übereinstimmt (Werte  $a$  und  $b$  in Kapitel 3, Abbildung 3.11). In der Perspektive von Abbildung 5.2 ist auch die Neigung der Strecke  $S_o$ - $S_u$  gut zu erkennen.



**Abb. 5.1:** Mesastruktur mit quadratischer Maske (Aufsicht). Die in Abbildung 5.2 dargestellten Simulationsergebnisse wurden entlang der eingezeichneten Linien geschnitten.



**Abb. 5.2:** Simulation einer einfachen konvexen Ecke einer Mesastruktur:  
 a) Schnitt in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung durch die Symmetrieebene der Struktur, die Maske ist dargestellt.  
 b) Blickrichtung etwa senkrecht auf die Schnittebene, in der die Dimensionen maßstabsgetreu abgebildet werden.

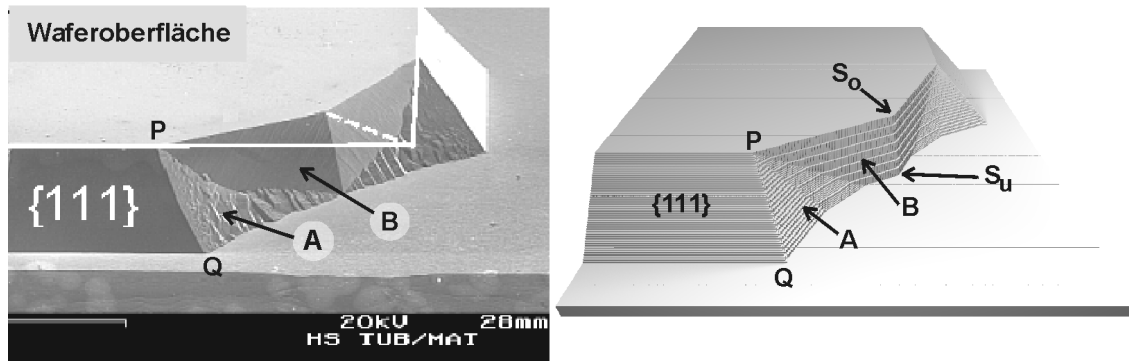
In den folgenden Abbildungen der Simulationsergebnisse in diesem Kapitel wird aus Gründen der besseren Übersicht meist auf eine Darstellung der Ätzmasken verzichtet.

## 5.1 Unterätzung einer einfachen konvexen Ecke

Die charakteristische Unterätzung einer einfachen konvexen Maskenecke kann als Schlüsselstruktur zum Verständnis des Ätzmechanismus als Stufenätzprozeß bezeichnet werden, denn die Vermessung dieser Struktur lieferte, wie in Kapitel 3.1.3 dargestellt wurde, die entscheidenden Argumente zur Entwicklung des Stufenätzmodells auf Silizium mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung nach *Schröder* [124,126].

Daher ist diese einfache konvexe Maskenecke besonders geeignet, um als erste Teststruktur das gemäß Kapitel 4.3 implementierte Vektormodell zu validieren.

In der Gegenüberstellung der simulierten Struktur mit einer REM Aufnahme in Abbildung 5.3 sind jeweils die charakteristischen Punkte in der in Kapitel 3.1.3 eingeführten Nomenklatur sowie die Bezeichnung der Flächen „A“ und „B“ eingezeichnet. In den Abbildungen ist zur besseren Übersicht die Maske nicht dargestellt.



**Abb. 5.3:** REM-Aufnahme und Simulation einer einfachen konvexen Ecke (KOH 33 w%, Prozeßtemperatur 80°C,  $\langle 100 \rangle$ -Waferorientierung).

Die im Experiment unregelmäßig gestuften Bereiche von Typ „A“ erscheinen in dieser und in allen im Folgenden gezeigten Simulationen ebenso regelmäßig wie die Bereiche „B“, da die Mechanismen, die zur vergrößerten und gröberen Stufenbildung in diesen Bereichen führen, nicht in dem Simulationsmodell implementiert sind [69].

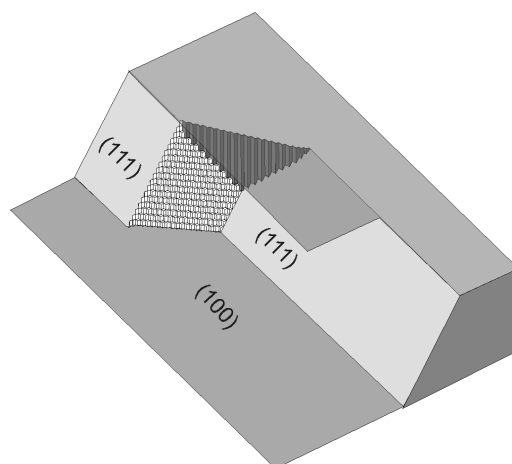
Experiment und Simulation in Abbildung 5.3 zeigen sehr gute Übereinstimmung bezüglich Gestalt und Lage der Flächentypen „A“ und „B“, die durch die Punkte S, P, Q festgelegt sind. Wie in Kapitel 4.4 ausgeführt wurde, wird die Feinstruktur der Stufen im Submikrometerbereich in der Simulation nicht aufgelöst, was durch genauen Vergleich der Bereiche „B“ besonders deutlich zu erkennen ist, da hier die Materialdiskretisierung am auffälligsten in Erscheinung tritt und die Bereiche „A“ und „B“ in der Simulation als Einhüllende von gröber bzw. feiner gestuften realen Flächen zu verstehen sind. Der wesentliche Charakter des Stufenätzprozesses wird durch das zugrundeliegende Modell jedoch trotzdem von der Simulation abgebildet. Die Entwicklung der Bereiche „A“ und „B“ kann in Serien zeitlich aufeinanderfolgender Simulationen dargestellt werden, wie dies im weiteren Verlauf dieses Kapitels noch gezeigt werden wird. Dadurch können rauhe und glatte Bereiche vom A- bzw. B-Typ in den simulierten Strukturen identifiziert werden und in die Bewertung der zu untersuchenden Strukturen eingehen. Dies ist auch dann noch möglich, wenn aufgrund geometrischer Randbedingungen die Form und Symmetrie der charakteristischen Bereiche deutlich verändert wird.

## 5.2 Entartung konvexer Ecken und Unterätzung an beliebig orientierten Maskenkanten

Die Entwicklung der Ätzfront unter schrägen bzw. beliebig orientierten Maskenkanten wird nach dem Stufenätzmodell durch die sogenannte Entartung einer konvexen Ecke bestimmt. In diesem Abschnitt wird die qualitative Ausbildung einer solchen Struktur und die Bearbeitung beliebig orientierten Maskenkanten in der Simulation beschrieben.

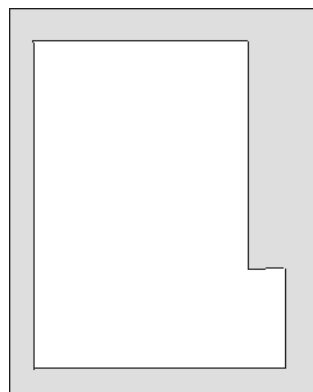
### 5.2.1 Prinzipieller Mechanismus

Unter der sogenannten „Entartung einer konvexen Ecke“ wird die Abweichung von der symmetrischen Ausbildung der charakteristischen Unterätzung einer ungestörten konvexen Ecke verstanden [126]. Eine solche Abweichung von der kristallographisch begründeten Symmetrie kann auftreten, wenn aufgrund geometrischer Randbedingungen die Ausbildung der Stufen in einer Richtung eingeschränkt wird, z.B. wenn die Stufen auf eine zu ihrer Ätzrichtung senkrecht stehende, ungestörte  $\{111\}$ -Ebene treffen. Diese Situation ist in der Grafik in Abbildung 5.4 dargestellt. Die beiden ungestörten  $\{111\}$ -Ebenen werden durch gestufte Bereiche von A- und B-Typ miteinander verbunden, die sich aus der Unterätzung der konvexen Maskenecke entwickelt haben.

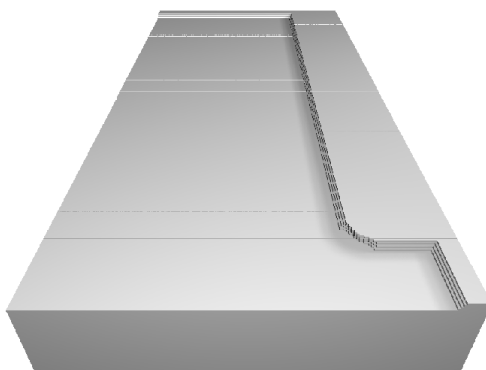


**Abb. 5.4:** Schematische Darstellung der sogenannten „Entartung einer konvexen Ecke“.

Die Abbildung 5.5 zeigt in einer Simulationssequenz die Entwicklung der in Abbildung 5.4 dargestellten konvexen Ecke, in deren Nähe sich eine stabile  $\{111\}$ -Fläche befindet. Die Entwicklung der Stufen einer Seite (der rechten Seite in Abb. 5.5) der konvexen Ecke wird durch diese Randbedingung beeinflusst, denn das Abschälen der Stufen, die an der konvexen Ecke gebildet wurden, stoppt an der ungestörten  $\{111\}$ -Fläche, da hier keine Atome in Halbkristallage vorhanden sind und die Stufen an dieser Fläche auslaufen. Die Nähe der  $\{111\}$ -Fläche hat auch Auswirkungen auf die linke Seite der konvexen Ecke, da sich die Bereiche der Stufengenerierung (entlang der Strecke  $S_o$ - $S_u$  in Abbildung 5.3) nicht mehr ungestört in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung bewegen können, sondern ebenfalls von der stabilen Fläche beeinflusst werden und an dieser entlang laufen. Für diese qualitative Änderung der Gestalt einer konvexen Ecke wird in [126] der Begriff „Entartung“ eingeführt. Allerdings führen Wechselwirkungen zwischen Stufen, die von verschiedenen konvexen Ecken ausgehen, ebenfalls zu deutlichen Abweichungen in der Erscheinung der Strukturen, wie im Abschnitt 5.4 anhand von Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken gezeigt wird.

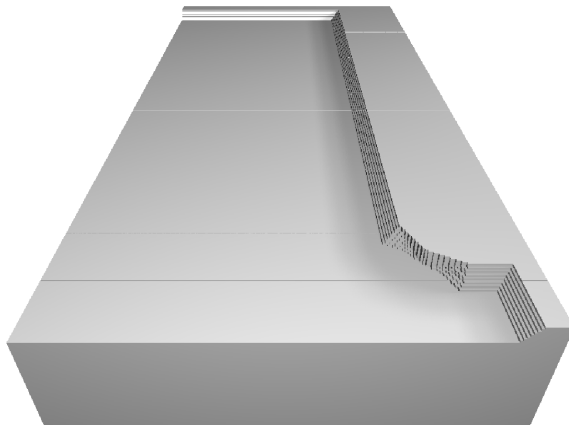


**Abb. 5.5 a):** Maske zur Simulation der Entartung konvexer Ecken.

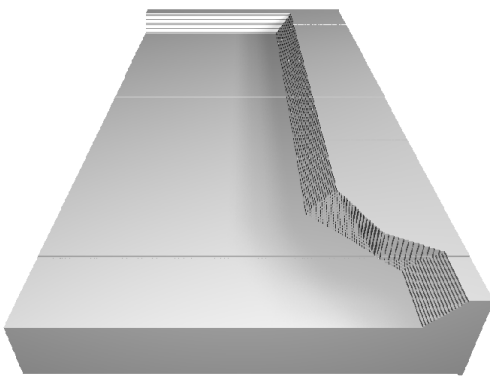


**Abb. 5.5 b):** Zu Beginn der Ätzung entwickelt sich die konvexe Ecke ungestört.

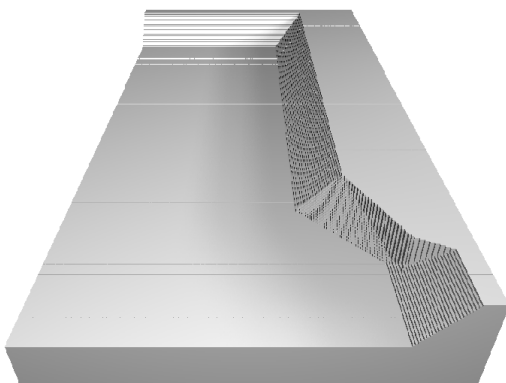




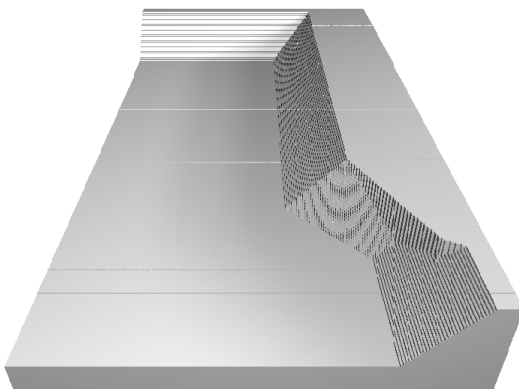
**Abb. 5.5 c):** Die „rechte“ Seite der konvexen Ecke bewegt sich auf die stabile  $\{111\}$ -Fläche zu.



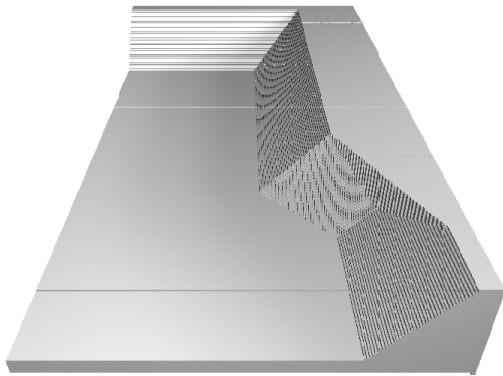
**Abb. 5.5 d):** Die Stufen laufen an der stabilen, ungestörten  $\{111\}$ -Flanke aus, da hier keine Atome in Halbkristallage vorhanden sind, an denen ein Ätzangriff erfolgen könnte.



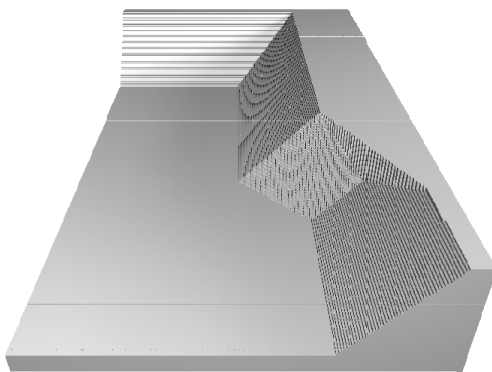
**Abb. 5.5 e):** Mit zunehmender Ätzzeit verschiebt sich die Linie der Stufengenerierung, die vormalige Symmetriekante  $S_o-S_u$ , auf die begrenzende  $\{111\}$ -Fläche. Der Bereich von A-Typ, der rechten Seite der konvexen Ecke, ist zu diesem Zeitpunkt schon nicht mehr vorhanden.



**Abb. 5.5 f):** Die Strecke zwischen den Punkten  $S_o-S_u$ , wird immer kleiner, ebenso wie der Bereich von B-Typ, der rechten Seite der konvexen Ecke. Die linke Seite der konvexen Ecke schiebt sich nun ebenfalls gegen die begrenzende  $\{111\}$ -Fläche.

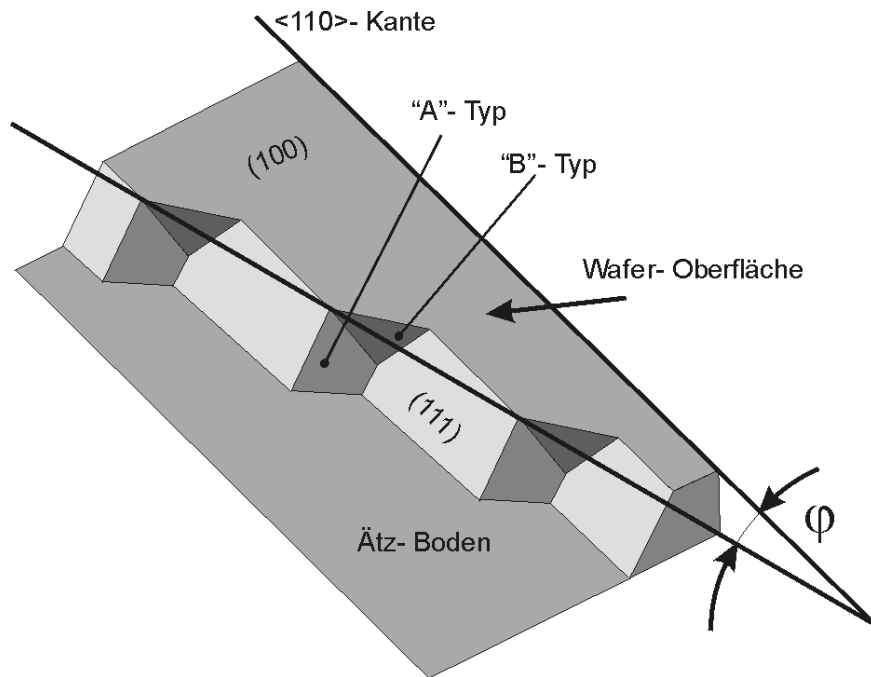


**Abb. 5.5 g):** Zu diesem Zeitpunkt ist die Strecke zwischen den Punkten  $S_o$ - $S_u$  auf einen Punkt am oberen Rand der  $\{111\}$ -Fläche zusammen gezogen. Die gesamte rechte Seite der ursprünglichen konvexen Ecke ist verschwunden. Der Bereich von B-Typ, der rechten Seite hat seine Gestalt verändert und sich auf den oberen Bereich der Struktur zurückgezogen.



**Abb. 5.5 h):** Die Struktur ändert sich qualitativ nicht mehr. Der Übergang zwischen den beiden stabilen  $\{111\}$ -Flächen wird von einem großen Bereich von A-Typ und einem kleineren, glatten Bereich von B-Typ gebildet.

An schrägen Kanten der Ätzmaske, die nicht exakt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientiert sind, werden hintereinander liegende  $\{111\}$ -Ebenen geschnitten, wie in Abbildung 3.7 im Schalenmodell dargestellt wurde. Das führt in der Anschauung des Stufenätzmodells bei einem Ätzangriff zur Ausbildung dicht nebeneinander liegender entarteter konvexer Ecken und damit zu der typischen Ausbildung von terrasierten Rippenstrukturen unter der Maskenkante. Abbildung 5.6 verdeutlicht diese Situation in einer Grafik. In den Übergangsbereichen, die die ungestörten  $\{111\}$ -Ebenen verbinden können die Bereiche von A- und B-Typ identifiziert werden. Reale Strukturen unter schrägen Kanten weisen meist eine unregelmäßige Morphologie auf, da Unregelmäßigkeiten an den Rändern der Maske zu statistischen Abweichungen in der Strukturbildung der Ätzfront führen.



**Abb. 5.6:** Schematische Darstellung der Terrassenbildung unter einer schrägen Maskenkante.

Mit zunehmendem Winkel  $\varphi$  werden die Stufen höher und die ungestörten  $\{111\}$ -Flächen kürzer, bis bei einem Winkel von  $45^\circ$  (die Maskenkante ist dann in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientiert) der Fall eintritt, daß sehr viele konvexe Ecken maximal dicht nebeneinander liegen. Die Überlagerung der Stufen, die von diesen Ecken ausgehen, ergeben eine fast senkrechte Flanke, die in der Orientierung einer  $\{100\}$ -Ebene entspricht.

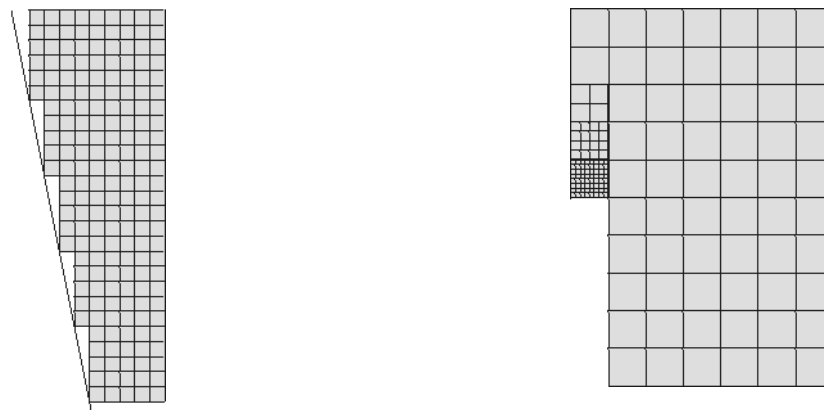
In [126] wurden experimentelle Untersuchungen zu entarteten konvexen Ecken durchgeführt, deren Ergebnisse mit den hier gezeigten Simulationen sehr gut übereinstimmen.

## 5.2.2 Gitterverfeinerung zur Simulation schräger Maskenkanten

Um die Entwicklung der Ätzfront unter einer schrägen Kante als Ergebnis der Überlagerung einfacher konvexer Ecken in der Simulation behandeln zu können, müssen schräge oder beliebig geformte Kanten vor der Simulation detektiert und das darunter liegende Materialgitter verfeinert werden.

Die Approximation einer schrägen Maskenkante in der zellulären Materialrepräsentation der Ätzmaske erzeugt eine Reihe konvexer Ecken an der Maske, wie in Abbildung 5.7 dargestellt ist. Nach dem Stufenätzmodell müssen diese Ecken in der Simulation in den ersten Zeitschritten wie einfache konvexe Ecken behandelt werden, die im weiteren Verlauf der Ätzung entarten und somit die charakteristische Unterätzung der schrägen Masken erzeugen. Dazu muß das Materialgitter unter der Maske verfeinert werden, um eine ausreichende Diskretisierung sicherzustellen, die die Entwicklung einer einfachen konvexen Ecke zu Beginn der Simulation ermöglicht. Dazu werden die Zellen in drei Schritten jeweils in kleinere Zellen gleicher Geometrie unterteilt. In der zweidimensionalen Darstellung in Abbildung 5.7 links ergeben sich auf diese Weise aus einer Zelle 4 dann 16 und schließlich 64 Zellen, in drei Dimensionen wird eine Zelle also in 512 Zellen unterteilt.

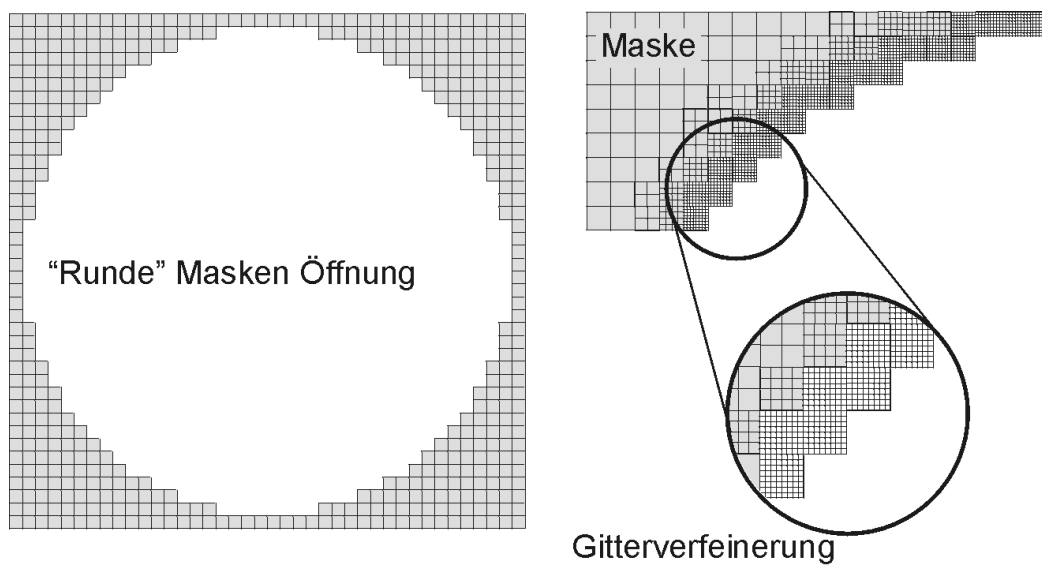
Die weitere Entwicklung der Struktur im Verlauf der Ätzung ergibt sich aus der Wechselwirkung der Stufen, die von diesen konvexen Ecken ausgehen mit den angrenzenden stabilen  $\{111\}$ -Flächen.



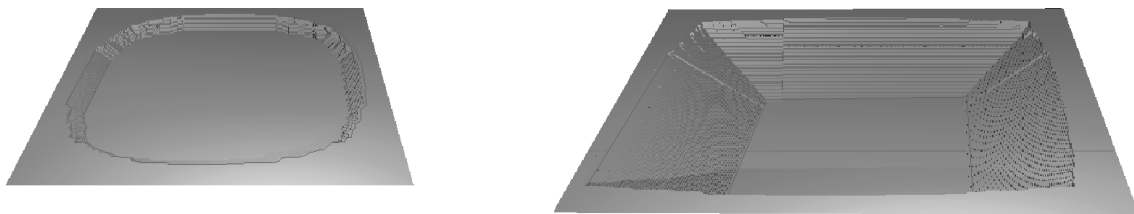
**Abb. 5.7:** Approximation einer schrägen Maskenkante in der zellulären Materialrepräsentation (linke Seite) und Verfeinerung des Materialgitters für die Simulation (rechte Seite).

Die Auflösung einer konvexen Ecke mit 8 mal 8 Zellen ist die minimale Diskretisierung, die in der Simulation verwendet wird, um eine korrekte Entwicklung der Bereiche A und B sicherzustellen.

Eine derartige Gitterverfeinerung ist auch an beliebig geformten, d.h. gekrümmten Maskenkanten erforderlich. Als Beispiel dazu wurde in Abbildung 5.8 eine kreisförmige Maske angenommen und auf die beschriebene Weise ein verfeinertes Materialgitter erzeugt, dessen Ätzsimulation in Abbildung 5.9 für verschiedene Äztiefen gezeigt ist.



**Abb. 5.8:** Kreisförmige Maske in der zellulären Materialrepräsentation und Gitterverfeinerung.



**Abb. 5.9:** Simulation der kreisförmigen Maske aus Abbildung 5.8 zu verschiedenen Zeitschritten.

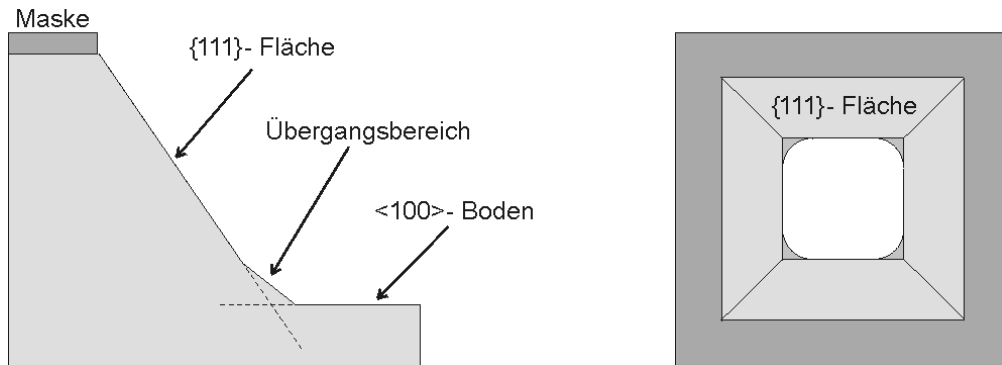
Die Verwendung schräger oder gekrümmter Maskenkanten ist bei der Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente ungewöhnlich und sollte beim Entwurf und bei der Entwicklung neuer Strukturen nach Möglichkeit auch vermieden werden, da die Ausbildung der terrasierten Strukturen an schrägen Kanten sehr empfindlich von den speziellen Prozeßparametern und den Eigenschaften der Maskenkante abhängt, die auch vom Herstellungsprozeß der Masken beeinflußt werden. Dadurch entwickeln sich unter schrägen Kanten in der Praxis meist unregelmäßig gestufte und somit schlecht reproduzierbare Flanken.

### 5.3 Perforation und beidseitiges Ätzen von Wafern

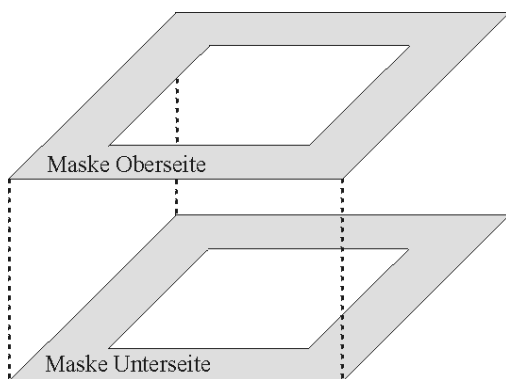
Aufgrund der hohen Ätzraten von typischerweise  $1 \mu\text{m}/\text{min}$  in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung lassen sich mit naßchemischen Verfahren vergleichsweise große Strukturen kostengünstig herstellen und es ist sogar möglich und üblich, lokal die gesamte Waferdicke von 350-500  $\mu\text{m}$  durchzuätzen [37], was als Perforation des Wafers bezeichnet wird. Somit lassen sich auf vergleichsweise einfache Weise freistehende Strukturen wie Ventilkappen oder bewegliche Elektroden herstellen, wie die in Abbildung 5.31 dargestellte Struktur. Mehrere vorstrukturierte Wafer werden dann z.B. mit Bondverfahren zu fertigen Mikrosystemen verbunden.

Besonders interessant bei der Perforation eines Substrates ist der Moment, in dem der Wafer durchbrochen wird, denn dabei treten „plötzlich“ neue, typischerweise konvexe Kanten auf, wodurch in der weiteren Entwicklung der Ätzfront qualitativ neue Strukturen induziert werden. In Abbildung 5.11 c) ist im Querschnitt die Entstehung einer solchen Kante gezeigt, die von zwei  $\{111\}$ -Ebenen gebildet wird. Von dieser Kante aus werden die  $\{111\}$ -Ebenen nun ebenfalls aufgelöst, so daß sich jeweils ein senkrecht zur Waferoberfläche stehender Bereich bildet, dessen Einhüllende mit einer kristallographischen  $\{110\}$ -Ebene beschrieben werden kann. Dieser Bereich vergrößert sich über die gesamte Substratdicke, bis sich an den konkaven Kanten zwischen den Masken der Ober- und Unterseiten wieder stabile  $\{111\}$ -Ebenen bilden, die dann den Ätzvorgang beenden.

In der Realität ist der Ätzboden nicht exakt eben, sondern weist in der Regel eine Welligkeit bzw. sogar feine Strukturen auf [126]. Auch ein leichtes Ansteigen des Bodens zu den von den  $\{111\}$ -Flächen gebildeten Ecken ist oftmals festzustellen. Deshalb bleibt in den vier konkaven Ecken beim Durchbruch zwischen Ober- und Unterseite noch Material stehen, was dazu führt, daß das durch die Perforation entstandene Loch nicht quadratisch ist, sondern gerundete Ecken aufweist, wie dies in der Grafik in Abbildung 5.10 veranschaulicht ist. In der Simulation dagegen ist der Boden ideal eben, ohne Anstieg zu den  $\{111\}$ -Flächen, deshalb ist auch das bei der Perforation entstehende Loch genau quadratisch und Materialreste in den konkaven Ecken werden nicht wiedergegeben.



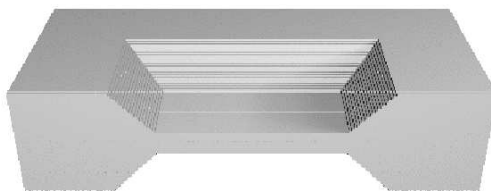
**Abb. 5.10:** Zu den {111}-Flächen ansteigender Ätzboden (linke Seite) und Durchbruch zwischen Ober- und Unterseite mit abgerundeten Ecken (rechte Seite).



**Abb. 5.11:** Die Masken mit identischer quadratischer Öffnung werden auf der Ober- und Unterseite des Simulationsgebietes exakt zueinander justiert.

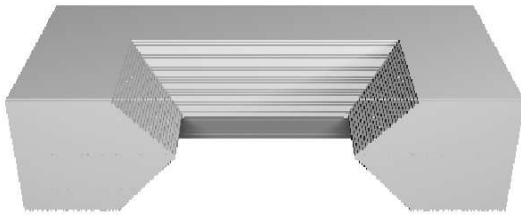


**Abb. 5.11 a):** Auf der Ober- und Unterseite des Wafers bildet sich eine Ätzgrube mit dem {100}-Boden und stabilen {111}-Seitenflächen.



**Abb. 5.11 b):** Die Gruben ätzen tiefer, der Boden wird immer dünner.





**Abb. 5.11 c):** Zu diesem Zeitpunkt ist der 100-Boden der Ätzgruben gerade weggeätzt. Die entstandene Struktur wird von stabilen  $\{111\}$ -Flächen geformt, die vier konvexe Kanten bilden. Die vier Ecken zwischen diesen Kanten stellen Sattelpunkte dar, an denen bei einer realen Struktur noch Reste von der Auflösung des Bodens vorhanden sind.



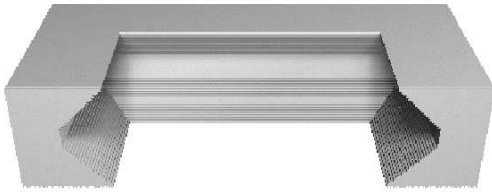
**Abb. 5.11 d):** An den vier konvexen Kanten zwischen den  $\{111\}$ -Flächen gibt es Atome in Halbkristallage, die einem verstärktem Ätzangriff ausgesetzt sind. Von diesen Punkten ausgehend werden die stabilen  $\{111\}$ -Flächen lateral abgelöst und es bilden sich senkrecht zur Waferoberseite stehende  $\{110\}$ -orientierte Flächen aus.



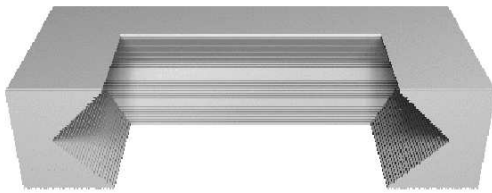
**Abb. 5.11 e):** Zu diesem Zeitpunkt haben die bei der Perforation entstandenen  $\{110\}$ -Flächen die  $\{111\}$ -Ebene vollständig aufgelöst. Wie oben beschrieben, ist zu erwarten, daß die  $\{110\}$ -Flächen eine hohe Rauigkeit aufweisen. In der Simulation erscheinen  $\{110\}$ -Ebenen ideal glatt, da das Simulationsgitter ebenfalls in  $\{110\}$ -Richtung orientiert ist und diese Flächen deshalb ohne Approximation dargestellt werden können.



**Abb. 5.11 f):** An den Maskenkanten auf Ober- und Unterseite bilden sich wieder langsam ätzende  $\{111\}$ -Flächen aus. Die Ätzung der  $\{110\}$ -Flächen stoppt an diesen Kanten, da keine Atome in Halbkristallage der Ätzlösung ausgesetzt sind.



**Abb. 5.11 g):** Im Bereich der  $\{110\}$ -Ebenen wird das Material zwischen den stabilen  $\{111\}$ -Flächen aufgelöst.



**Abb. 5.11 h):** Zu diesem Zeitpunkt wird die Struktur nur aus stabilen  $\{111\}$ -Flächen gebildet, die miteinander nur konkave Kanten einschließen. Da keine Atome in Halbkristallage freigelegt sind, stoppt die schnelle Ätzung der Struktur. Die einzig vorhandenen  $\{111\}$ -Flächen werden entsprechend ihrer sehr geringen Flächenätzrate aufgelöst, d. h. die Struktur ist quasi stabil.

## 5.4 Grundelemente der (Volumen-) Mikromechanik

Unter den im Folgenden untersuchten Grundelementen der Mikromechanik sind Strukturen zu verstehen, die für sich alleine betrachtet noch keine Anwendung als Bauelement besitzen, aber wesentliche Bestandteile zur Herstellung von Bauelementen darstellen. Darüber hinaus werden im Besonderen die in der Literatur ausführlich diskutierten, klassischen Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken zur weiteren Validierung des Stufenätzmodells herangezogen, da an diesen Strukturen eine Wechselwirkung von gestuften Bereichen beobachtet werden kann, die zu Beginn der Ätzung an verschiedenen, zunächst getrennten Ecken entstanden sind und mit zunehmender Äztiefe immer weiter zusammenlaufen und sich überlagern.

### 5.4.1 Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken

Wie in Kapitel 2.3 ausgeführt wurde, ist - neben der Bildung von V-Gräben - die Unterätzung konvexer Maskenecken eine der charakteristischen Eigenschaften von orientierungsabhängigen naßchemischen Ätzprozessen. Diese Unterätzung ist in den meisten Anwendungen unerwünscht, weshalb eine Vielzahl von Strategien entwickelt wurde, um diese Unterätzung zu vermeiden, also den Effekt zu kompensieren.

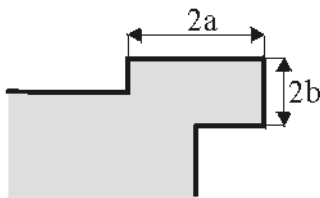
Die in der Literatur [1,49,98,111,117,121,169,] dokumentierten Methoden fügen sogenannte Kompensationsstrukturen in die Maske ein, so daß die in der herzustellenden Struktur gewünschte konvexe Ecke in der Maske nicht mehr auftritt, sondern durch die Kompensationsstruktur überlagert und dadurch vor einer direkten Unterätzung geschützt wird. Von den vielen möglichen Kompensationsstrukturen werden nachfolgend einige exemplarisch untersucht, die sich auch in der Praxis durch geringen Platzbedarf und gute Kompensationsergebnisse bewährt haben.

Der Entwicklung von Kompensationsstrukturen liegen die differentialgeometrischen Modelle zugrunde, weshalb in den Designregeln die Ätzraten der schnell ätzenden Facetten sowie deren Winkel zur  $\langle 110 \rangle$ -Richtung die wesentlichen Designparameter darstellen. Die Geometrien der verschiedenen Kompensationsstrukturen sind somit nicht universell einsetzbar, sondern abhängig von der Waferorientierung und anderen Prozeßparametern, die Ätzraten und Orientierung der schnell ätzenden Facetten bestimmen.

In der Anschauung des Stufenätzmodells stellen die klassischen Kompensationsstrukturen interessante Teststrukturen dar, da die zeitliche Entwicklung der Ätzfront unter diesen Strukturen meist durch komplexe Wechselwirkungen zwischen gestuften Bereichen bestimmt wird, die an unterschiedlichen Maskenecken entstanden sind.

### 5.4.1.1 Rechteckige (Quadratische) Kompensationsstrukturen

Bei dieser Kompensationsstruktur wird auf die zu kompensierende Ecke der Mittelpunkt eines Quadrats gelegt, so daß sich eine zur  $\langle 100 \rangle$ -Richtung symmetrische Maskenstruktur ergibt und sich somit auch die geätzte Struktur symmetrisch zu einer entsprechenden  $\langle 100 \rangle$ -Ebene entwickelt. Für die Kantenlänge des Quadrats bezogen auf eine gegebene Ätztiefe kann die mit Gleichung 5.1 bezeichnete Designregel analytisch abgeleitet werden, so daß beim Erreichen der Zieltiefe die Oberkante der Struktur einen rechten Winkel bildet.



**Abb. 5.12:** Rechteckige Kompensationsstruktur

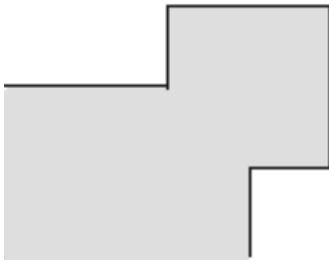
$$d_t = \frac{1}{v} (a \cdot \sin(\alpha_{\max}) + b \cdot \cos(\alpha_{\max}))$$

**Gleichung 5.1:** Designregel

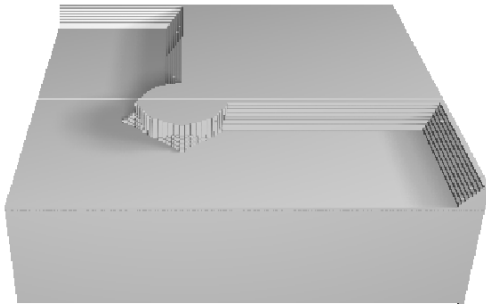
Dabei bezeichnet  $d_t$  die Ätztiefe,  $v$  das Verhältnis der Ätzrate der am schnellsten ätzenden Fläche zur Ätzrate des Bodens (also der  $\{100\}$ -Ebene) und  $\alpha_{\max}$  den Winkel, den die Fläche mit der größten Ätzrate mit der Waferoberfläche einschließt.

In Gleichung 5.1 wird lediglich die Facette mit der größten Ätzrate zur Auslegung der Kompensationsstruktur herangezogen und zwar in der Weise, daß bei Erreichen der vorgegebenen Ätztiefe zwei schnell ätzende Facetten an der Oberkante der Struktur eine konvexe Ecke bilden. Auf dem Ätzgrund bleibt dann aber noch ein Bereich mit groben Stufen stehen, so daß man nur unmittelbar unter der Maske von Kompensation sprechen kann. Für sehr schmale Seiten  $b$  ergibt sich eine Struktur, die vergleichbar ist mit einem  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Balken, wie in Abschnitt 5.4.1.3 diskutiert wird.

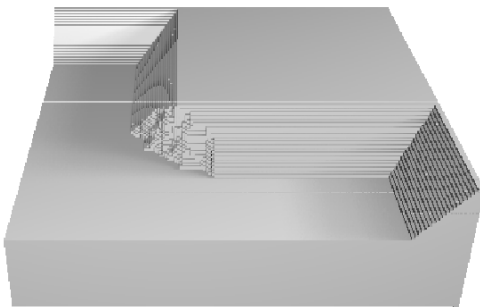
Abbildung 5.13 zeigt die Simulation der Ätzung mit Verwendung einer quadratischen Kompensationsstruktur ( $a = b$ ) zu verschiedenen Zeitschritten. Wird die Struktur überätzt, d.h. tiefer geätzt als die Dimensionen der Kompensationsstruktur vorgeben, ist eine ähnliche Gestalt wie bei einer unkompensierten Ecke zu beobachten, wobei allerdings die Flächen vom Typ „B“ auf den oberen Bereich der Struktur beschränkt bleiben und nicht bis zum Ätzboden hinab reichen.



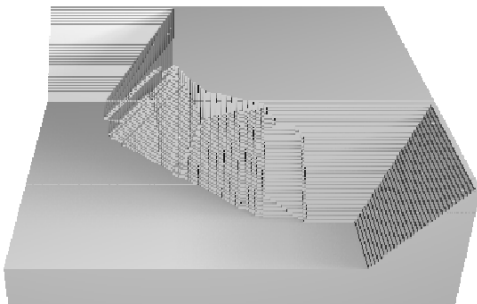
**Abb. 5.13:** Maske mit quadratischer Kompensationsstruktur.



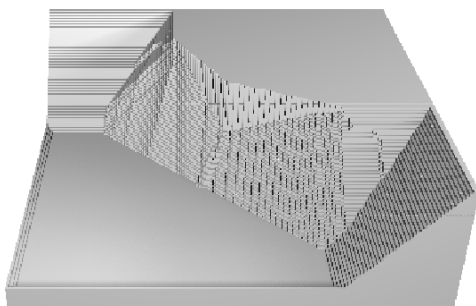
**Abb. 5.13 a):** An den drei konvexen Ecken der Maske entwickelt sich die charakteristische Unterätzung. Mit zunehmender Ätztiefe überlagern sich die Bereiche der vormals getrennten Ecken.



**Abb. 5.13 b):** Eine gute Kompensation der Unterätzung der konvexen Ecke ist nur an der Oberkante der Struktur zu erreichen.



**Abb. 5.13 c):** Bei einem Überätzen der Struktur bilden sich an der Oberkante zwei Bereiche von B-Typ aus, symmetrisch zur  $\langle 100 \rangle$ -Richtung.



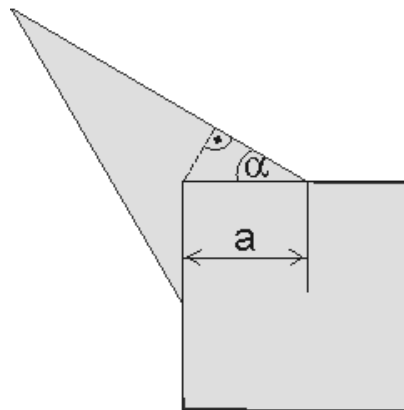
**Abb. 5.13 d):** In der weiteren Entwicklung der Struktur vergrößern sich die Bereiche von B-Typ. Die Form der Unterätzung entwickelt sich ähnlich einer unkompenzierten konvexen Ecke, allerdings reichen die Bereiche von B-Typ nicht bis zum Boden.

### 5.4.1.2 Dreieckige Kompensationsstruktur

Die einfachste Struktur, die dieselbe Symmetrie wie eine einfache konvexe Ecke aufweist, ist ein gleichschenkliges Dreieck, dessen Symmetrieachse in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung liegt. Auch diese Kompensationsstruktur wurde vor dem Hintergrund der differentialgeometrischen Modelle entwickelt, weshalb die Orientierung der Schenkel möglichst mit den Oberkanten der schnell ätzenden Facetten zusammenfallen sollten. Damit ergibt sich die folgende Designregel zur Kompensation der Ecke:

$$d_t = \frac{1}{v} \cdot a \cdot \sin \alpha \quad (5.2)$$

Der Winkel  $\alpha$  entspricht dabei dem Winkel der am schnellsten ätzenden Facette bezüglich der  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung.

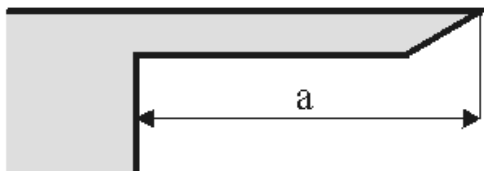


**Abb. 5.14:** Dreieckige Kompensationsstruktur gebildet aus „schnellätzenden“ Kanten.

Die schrägen Kanten führen zu sehr unregelmäßigen und zerklüfteten Flanken. Daraus resultieren die relativ schlechten Kompensationseigenschaften in der Nähe des Ätzbodens. Zusammen mit dem großen Platzbedarf der Struktur führt dies dazu, daß diese Kompensationsstruktur nur selten verwendet wird.

### 5.4.1.3 Balken in $\langle 110 \rangle$ -Richtung

Eine einfache und zuverlässige Kompensationsstruktur besteht aus einem in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierten Balken. Auch diese Struktur wurde vor dem Hintergrund differentialgeometrischer Modelle für den Ätzprozeß entwickelt, weshalb der Balken mit einer schrägen Kante abgeschlossen wird, die der Orientierung der am schnellsten ätzenden Facette entsprechen sollte. An dieser Kante soll sich dem Modell entsprechend die glatte, schnell ätzende Facette ausbilden und den Balken von der Spitze her auflösen, bis die Facette auf die senkrecht zur Ätzrichtung liegende  $\{111\}$ -Fläche trifft und an dieser ausläuft. Wenn die Spitze der schrägen Kante die zu kompensierende Ecke erreicht, ist die bestmögliche Kompensation gewährleistet.



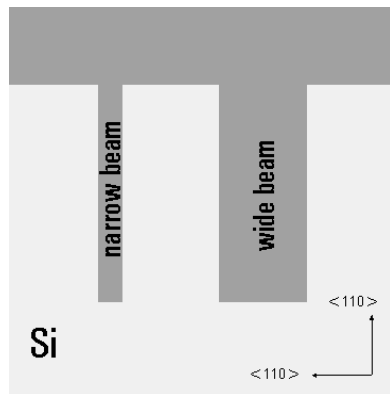
$$d_t = \frac{a}{v} \cdot \sin(\alpha_{\max})$$

**Abb. 5.15:** Kompensationsstruktur: Balken in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung. **Gleichung 5.3:** Designregel

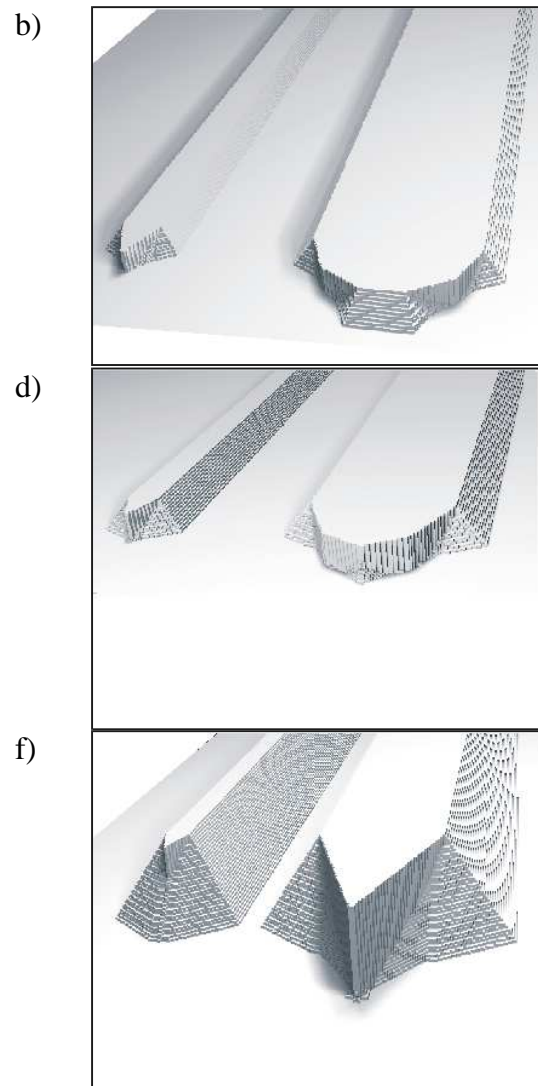
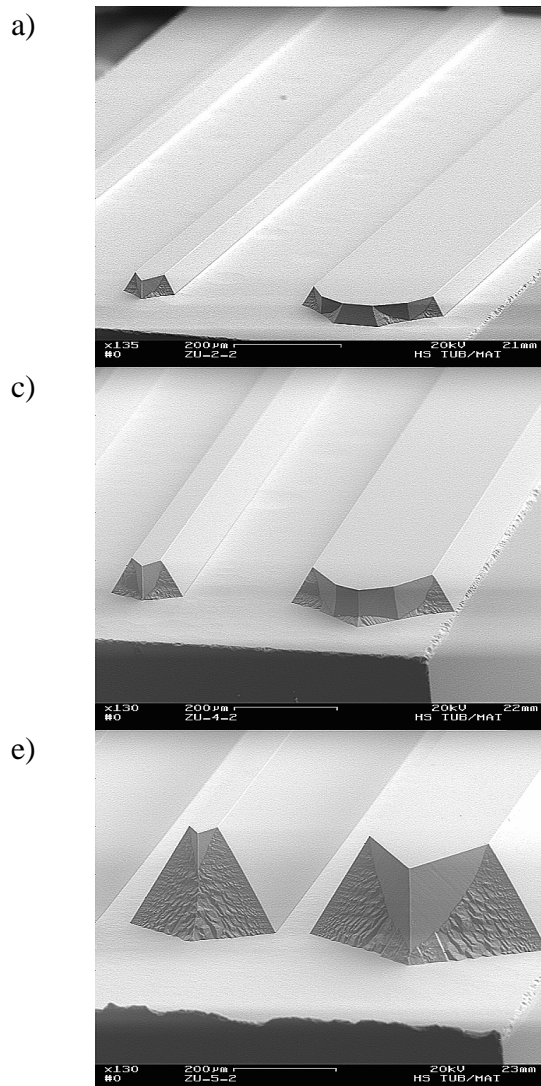
Für die Simulationen mit dem Stufenätzmodell wird der Balken nicht mit einer schrägen, sondern mit einer in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierten Kante abgeschlossen, da für diese Maskengeometrie auch REM-Aufnahmen zur Verfügung standen. Das Simulationsgebiet enthält etwa  $5 \cdot 10^6$  Zellen.

Die Abbildungen 5.16 a und b zeigen Simulationsergebnisse und entsprechende REM-Aufnahmen von zwei  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Balkenstrukturen mit gleicher Länge und verschiedener Breite [66,127]. An dem breiteren der Balken ist gut zu erkennen, wie sich an beiden Ecken zunächst die charakteristische Gestalt unter einer freien konvexen Maskenecke ausbildet. Nach einer gewissen Zeitdauer sind beide Ecken soweit unterätzt und abgeschält, daß sie sich an der schmalen Seite des Balkens überlagern (Abb. 5.16 c, d). Nach weiterem Ätzen hat sich das Aussehen so stark verändert, daß sich die Struktur nur noch aus den beiden äußeren Gebieten der vormals getrennten konvexen Ecken zusammensetzt (Abb. 5.16 e, f).

An dem schmalen Balken war dieser Zustand schon zum Zeitpunkt der ersten Aufnahme erreicht (Abb. 5.16 e).



Maskenstruktur: Zwei Balken in  $\langle 110 \rangle$  Richtung orientiert.



**Abb. 5.16:** Vergleich zwischen REM-Aufnahmen und Simulationen  $\langle 110 \rangle$ -orientierter Balkenstrukturen während der Ätzung (KOH/H<sub>2</sub>O, 33%, 80°C). Ätzzeit: a), b) 30 min.; c), d) 60 min.; e), f) 167 min.

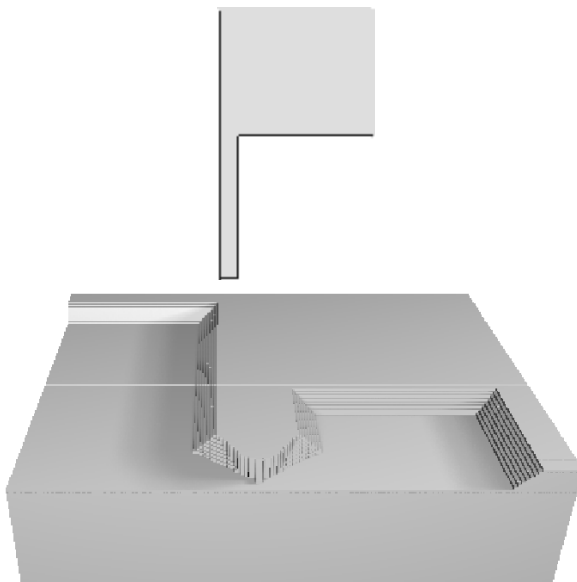


Wie anhand der Ergebnisse für den schmalen Balken zu erkennen ist, wird diese Struktur mit zunehmender Ätzzeit von rauen Bereichen vom Typ A dominiert, was ohne Simulation bzw. Experiment auf analytischem Wege nicht ohne weiteres zu erkennen ist.

Des Weiteren ist zu bemerken, daß an dieser Struktur die Überlagerung der zu Beginn getrennten konvexen Ecken von der Simulation richtig wiedergegeben wird.

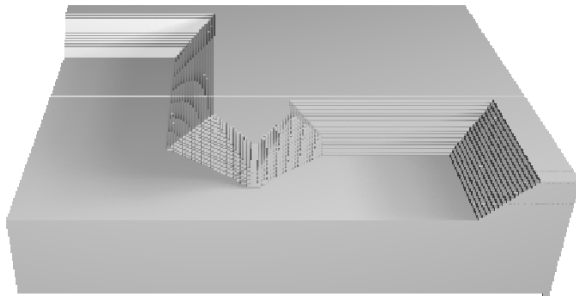
Bei der Anwendung der Designregel sollte beachtet werden, daß diese nur die schnell ätzenden Facetten an der Oberkante der Struktur berücksichtigt. Wie die Simulation zeigt, gibt es einen nicht zu vernachlässigenden Bereich grober Stufen, der sich vom Ätzgrund zur Oberkante der Struktur erstreckt und unter Umständen die Funktion des Bauelementes stören kann, obwohl die Designregel für die Kompensationsstruktur beachtet wurde. Der Grund dafür liegt darin, daß die Designregel nur die Entwicklung der Oberkante der Struktur erfaßt. Eine realistische dreidimensionale Simulation ermöglicht hier eine detailliertere Analyse der Kompensationsstruktur, indem sie diese Bereiche sichtbar und somit einer Diskussion zugänglich macht.

In den Abbildungen 5.17 a)- e) werden die Eigenschaften eines in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierten Balkens als Kompensationsstruktur in der Simulation untersucht. Es ergibt sich an der Oberkante keine perfekte Ecke im  $90^\circ$  Winkel, sondern die schräge Oberkante eines Bereiches vom B-Typ formt zusammen mit einer  $\{111\}$ -Fläche den oberen Bereich der Struktur.

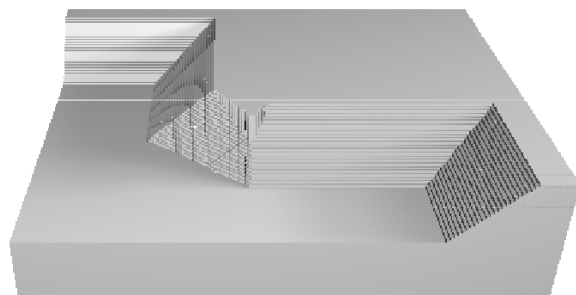


**Abb. 5.17:** Maske mit einem Balken in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung.

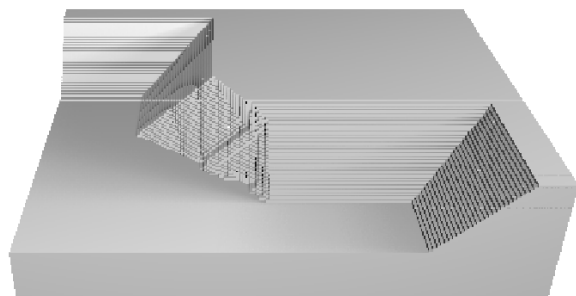
**Abb. 5.17 a):** Die Stufen, die von den beiden konvexen Ecken ausgehen überlagern sich.



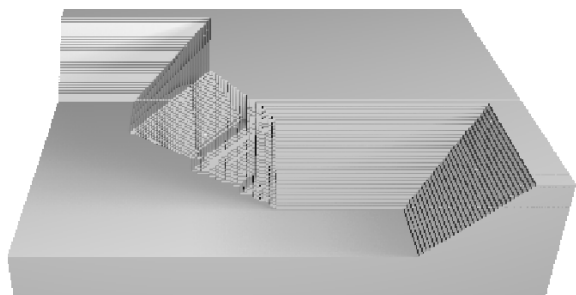
**Abb. 5.17 b):** Die Stufen der „rechten Seite“ laufen an der stabilen  $\{111\}$ -Ebene aus.



**Abb. 5.17 c):** Während immer mehr Stufen der „rechten“ Seite auslaufen, bewegen sich die Stufen der „linken“ Seite ungestört.

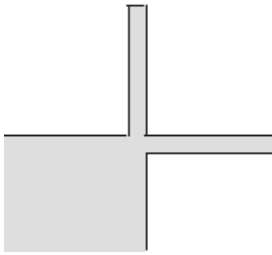


**Abb. 5.17 d):** Die Symmetriekante des Balkens ist vollständig verschwunden. Die Stufen der „linken“ Seite bilden eine schräge Kante an der Waferoberseite. Die bestmögliche Kompensation der Ecke ist erreicht.

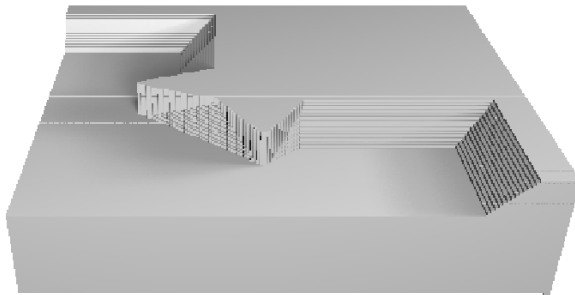


**Abb. 5.17 e):** Wird der Ätzprozeß fortgesetzt, dann wird zunehmend auch die  $\{111\}$ -Ebene auf der „rechten“ Seite lateral abgeschält.

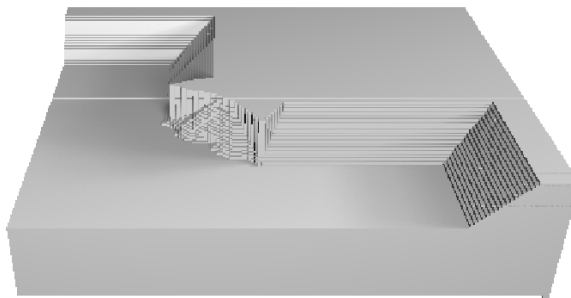
Werden zwei  $\langle 110 \rangle$ -orientierte Balken verwendet, die im rechten Winkel zueinander stehen, ergibt sich ein Verlauf der Ätzung wie in den Abbildungen 5.18 a)- c) dargestellt ist. Auch in diesem Fall besitzt die kompensierte Ecke keinen  $90^\circ$  Winkel an der Oberkante, sondern es bildet sich eine Kante in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung aus. Die geätzte Struktur ist symmetrisch bezüglich einer senkrecht zur Waferoberfläche stehenden  $\{100\}$ -Fläche, da auch die Maske diese Symmetrie aufweist.



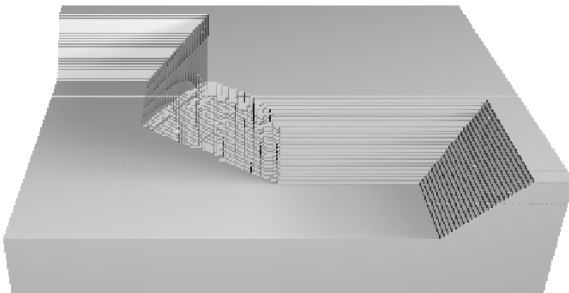
**Abb. 5.18:** Maske mit zwei Balken in 110-Richtung.



**Abb. 5.18 a):** Im Bereich zwischen den Balken überlagern sich die Stufen.



**Abb. 5.18 b):** Die Bereiche von B-Typ ziehen sich auf die {111}-Flächen zurück. Der konkave Bereich zwischen den Balken bleibt noch erhalten.



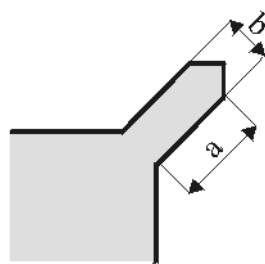
**Abb. 5.18 c):** Die bestmögliche Kompensation der Ecke ist erreicht. An der Waferoberkante bildet sich eine Fläche in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung aus. Die ursprüngliche Symmetrie der Maske bleibt in der geätzten Struktur erhalten.

#### 5.4.1.4 Balken in $\langle 100 \rangle$ -Richtung

Besonders gute Ergebnisse liefert eine Kompensationsstruktur, die aus einem in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientierten Balken besteht, dessen Spitze von zwei senkrecht aufeinander stehenden in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierten Kanten gebildet wird. Das Maskenlayout dieser Struktur mit den bestimmenden Parametern Balkenlänge  $a$  und Balkenbreite  $b$  ist in Abbildung 5.19 abgebildet, die dazugehörigen Designregeln liefern die Gleichungen 5.4 a) und b).

Abbildung 5.20 zeigt in einer Grafik die Entwicklung der Oberkante der Struktur während der Ätzung. Die Punkte  $x$  und  $y$  sind charakteristische Stellen, die den Übergang zwischen zwei Bereichen markieren. Die Verschiebungsvektoren  $r_x$  und  $r_y$  beschreiben jene Linien, auf denen sich die Punkte  $x$  bzw.  $y$  während der Ätzung bewegen. An den beiden  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Kanten der Kompensationsstruktur bilden sich senkrecht zur Waferoberfläche stehende  $\{100\}$ -Flächen aus, die sich im Verlauf der Ätzung aufeinander zu bewegen, bis sie sich schließlich in der Symmetrieachse ( $\langle 100 \rangle$ -Richtung) treffen und die beiden angrenzenden  $\{111\}$ -Flächen eine praktisch perfekte konvexe Kante bilden. Das setzt voraus, daß die Kompensationsstruktur eine ausreichende Länge besitzt, so daß die schnell ätzenden Bereiche an der Spitze der Struktur die zu kompensierende Ecke nicht erreichen. Da die Flanken der Struktur während der Ätzung von glatten  $\{100\}$ -Flächen gebildet werden, entstehen auch keine groben Stufen im Bereich des Ätzbodens, die nach Erreichen der Zieltiefe noch vorhanden wären.

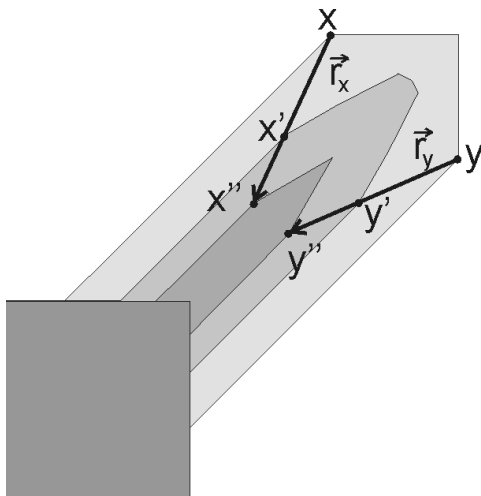
Aus diesen Überlegungen folgen die beiden Gleichungen 5.4 zur Auslegung dieser Kompensationsstruktur.



$$\text{a) } d_t = b/2$$

$$\text{b) } \frac{a}{b} = \frac{\frac{v}{2} - \frac{\sin(\alpha_{\max})}{\sqrt{2}}}{\sin\left(\frac{\pi}{8} - \alpha_{\max}\right)}$$

**Abb. 5.19:** Maske mit Kompensationsstruktur **Gleichungen 5.4:** Designregeln für  $a$  und  $b$  in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung.



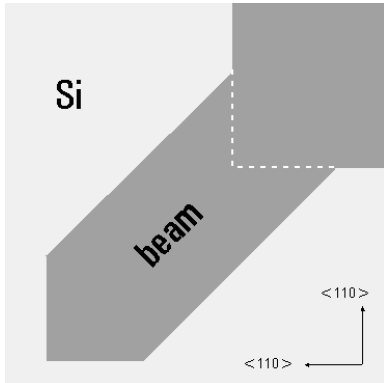
**Abb. 5.20:** Entwicklung der Oberkante der Ätzfront unter einem in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung orientierten Balken. Die Punkte  $x$  bzw.  $y$  bezeichnen Übergang einer senkrechten  $\{100\}$ -Fläche zu den gestuften Bereichen die von der Spitze der Struktur ausgehen.

Abbildung 5.21 zeigt Simulationsergebnisse und entsprechende REM-Aufnahmen dieser Struktur zu verschiedenen Zeitpunkten bis die Tiefe (bzw. Ätzzeit) erreicht ist, die für eine Kompensation der Unterätzung der konvexen Ecke errechnet wurde [66,127].

Das Simulationsgebiet enthält etwa  $5 \cdot 10^6$  Zellen.

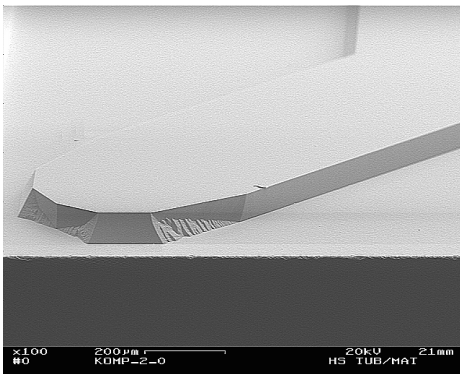
Die Temperatur während der Ätzung wurde konstant auf  $(80 \pm 0,01)^\circ\text{C}$  gehalten, das Wafermaterial ist  $\{100\}$  CZ, 1-10  $\Omega\text{cm}$  und die Ätzlösung bestand aus 0,33 % KOH/H<sub>2</sub>O der Firma Merck („Selectipur“).

An der Spitze der Struktur entwickelt sich zunächst die charakteristische Unterätzung einer freien konvexen Ecke. An den Punkten  $x$  und  $y$ , die von einer  $\langle 110 \rangle$ - und einer  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Kante gebildet werden, entwickelt sich eine ähnliche Struktur wie auf einer Seite einer einfachen konvexen Ecke. Die andere Seite dieser Ecke kann sich durch die schnelle Auflösung der senkrechten  $\{100\}$ -Fläche gar nicht erst ausbilden.

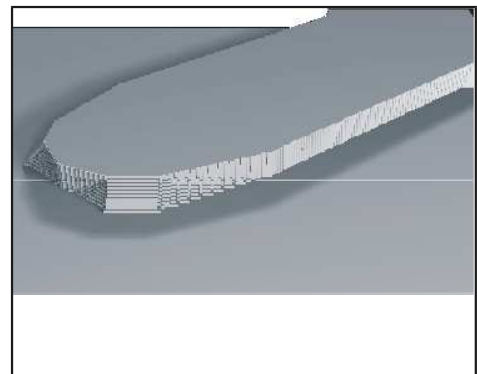


Maskenstruktur: Balken in  $\langle 100 \rangle$ -  
Richtung orientiert.

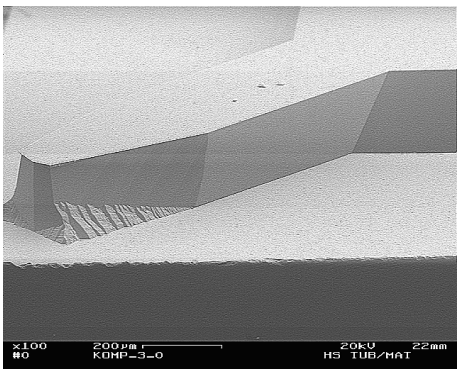
a)



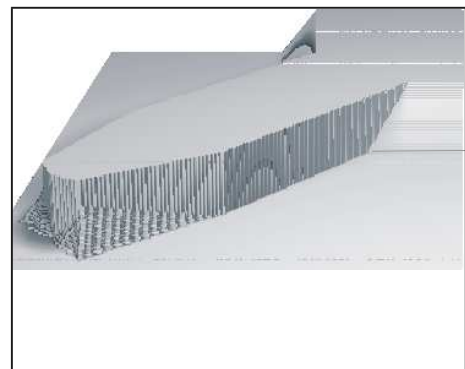
b)



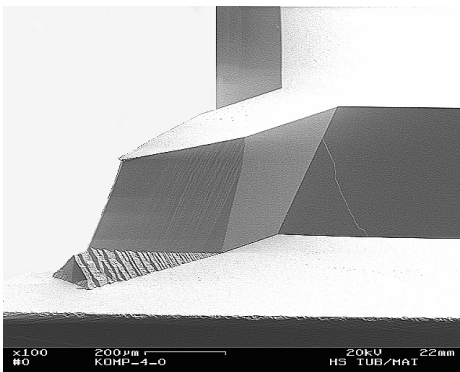
c)



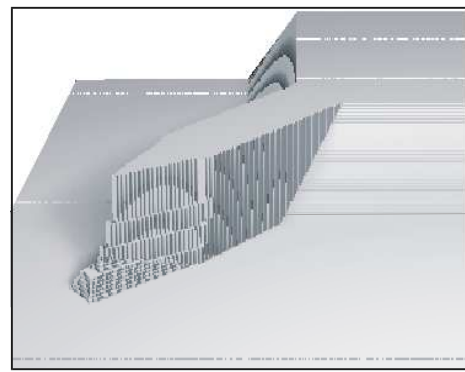
d)

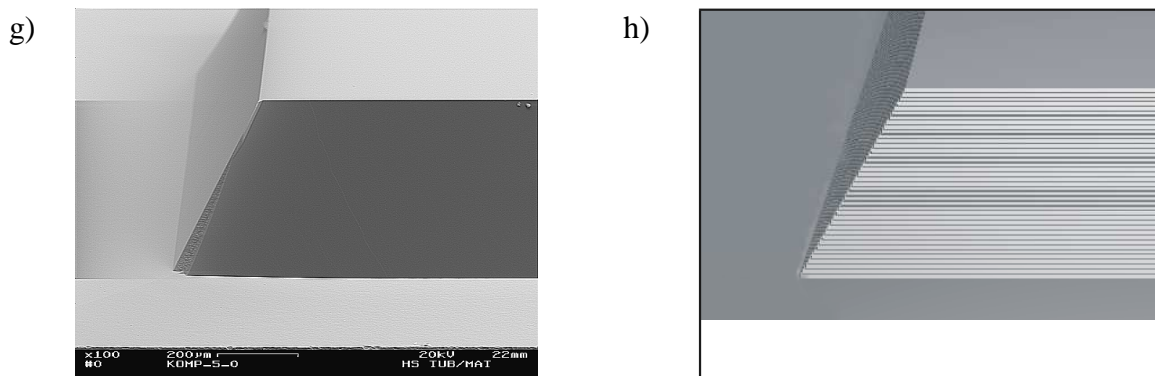


e)



f)





**Abb. 5.21:** Vergleich zwischen REM-Aufnahmen und Simulationen einer  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Kompensationsstruktur während der Ätzung (KOH/H<sub>2</sub>O, 33%, 80°C).  
 Ätzzeit: a), b) 60 min; c), d) 167 min; e), f) 258 min; g), h) 352 min.

Die Morphologie mit den Bereichen von Typ A und B ist die gleiche wie an einer einfachen konvexen Ecke, aber deutlich gestreckt, da die Kante zwischen  $\{100\}$ -Fläche und B-Bereich durch die schnelle Ätzung der  $\{100\}$ -Fläche nicht nur Richtung Bulk, sondern auch in Richtung von Punkt  $x'$  bzw.  $x''$  wandert, wie durch den Verschiebungsvektor  $r$  in der Grafik in Abbildung 5.22 angedeutet ist.

Zu dem Zeitpunkt, an dem die „Schnappschüsse“ 5.21 c) bzw. d) gemacht wurden, hat sich auch die Gestalt der Ecke  $x$  dahingehend geändert, daß die Außenbereiche durch Überlagerung mit den Flächen von Punkt  $x$  aufgelöst wurden. In den Bildern e und f sind von der Ecke  $x$  nur noch am Ätzboden Reste zu erkennen, die Struktur wird jetzt bestimmt von den  $\{100\}$ -Flächen und den Bereichen von Typ B, die zu Beginn der Ätzung an Punkt  $x$  und  $y$  entstanden sind. Schließlich zeigen die Abbildungen g und h die fast perfekt ausgebildete konvexe Kante zwischen zwei  $\{111\}$ -Flächen, die mit dieser Kompensationsstruktur erzeugt werden kann, vorausgesetzt eine exakte Prozeßführung ist gegeben.

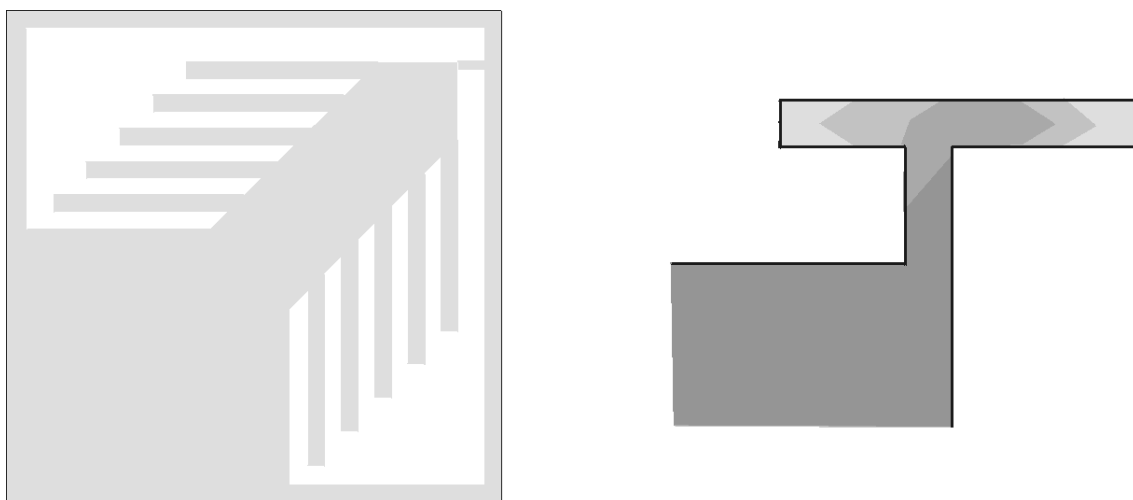
Die Analyse dieser Kompensationsstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten bzw. Ätztiefen zeigt sehr anschaulich, wie erheblich sich die Gestalt und Morphologie der dreidimensionalen Struktur unter der Maske während der Ätzung verändern kann. Eindrucksvoll zeigen dies die Abbildungen 5.21 e) bzw. f), deren Aussehen ohne Vorwissen praktisch nicht aus dem Maskenlayout erschlossen werden kann. Bei den „perfekten“ Kanten in Abbildung g bzw. h sind keine Spuren von früheren Zeitschritten mehr auszumachen, da diese vollständig aufgelöst wurden. Die fertige Struktur läßt demnach keine Rückschlüsse auf ein mögliches Maskenlayout zu, d.h. die aus {111}-Flächen gebildete Kante liefert keine Information darüber, wie sie zustande gekommen ist. Dies ist ein Hauptproblem beim Entwurf von Mikrostrukturen mit orientierungsabhängigen Ätzprozessen. Aus einer vom Bauelementedesigner entworfenen dreidimensionalen Struktur können direkt keine allgemeingültigen (und damit automatisierbaren) Rückschlüsse auf ein geeignetes Maskenlayout gezogen werden. Diese für Entwickler von Bauelementen besonders wichtige Problematik soll an dieser Stelle anhand eines plakativen Beispiels nur angesprochen werden, um im Kapitel 6 daran anknüpfen zu können und damit zusammenhängende Schlußfolgerungen zu unterstützen.

#### 5.4.1.5 Zusammengesetzte Kompensationsstrukturen

Wie zu Beginn dieses Abschnitts erwähnt wurde, sind auch beliebige Kombinationen verschiedener Kompensationsstrukturen denkbar, wie z.B. die in Abbildung 5.22 a) gezeigte baumartige Struktur, die aus einem  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Balken mit angesetzten, schmalen  $\langle 110 \rangle$ -Balken zusammengesetzt wird. Die Struktur in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung liefert - wie oben demonstriert - sehr gute Kompensationsergebnisse, hat aber den Nachteil, daß die Seitenflächen relativ schnell unterätzt werden, da sie als  $\langle 100 \rangle$ -orientierte Flächen ungefähr die gleiche Ätzrate wie die Waferoberfläche aufweisen. Um eine größere Ätztiefe zu erreichen, sollten zu Beginn der Ätzung die angesetzten  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Balken die Seiten der  $\langle 100 \rangle$ -Struktur vor dem Ätzangriff schützen, während gegen Ende der Ätzung die noch verbleibende  $\langle 100 \rangle$ -orientierte Struktur eine möglichst präzise konvexe Kante erzeugen soll.

Ein Balken in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung kann am Ende mit zwei weiteren querliegenden Balken versehen werden, um die konvexen Ecken zu schützen, wie in Abbildung 5.22 b) dargestellt ist. Die zusätzlichen Balken sollten unterschiedlich lang sein und der kürzere parallel zu einer Kante der zu kompensierenden Ecke liegen. Auf diese Weise entwickelt sich die Struktur unter der Maskenkante, wie es in der Abbildung durch die unterschiedlichen Grautöne symbolisiert ist. Mit dieser zusammengesetzten Kompensationsstruktur kann der Platzbedarf eines geraden Balkens bei vergleichbaren Kompensationsergebnissen reduziert werden.



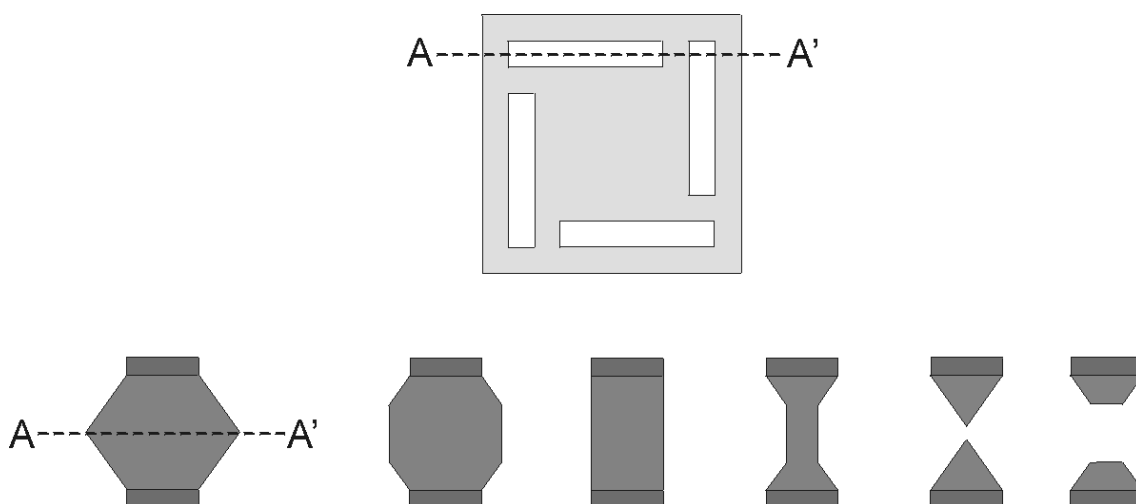


**Abb. 5.22:** Zwei Beispiele für zusammengesetzte Kompensationsstrukturen.

### 5.4.1.6 Kompensationsstrategien bei Waferperforation

Neben den hier beispielhaft aufgeführten und analysierten Kompensationsstrukturen sind beliebige Kombinationen aus diesen und auch völlig andere Konzepte möglich. Prinzipiell wirkt jede Abdeckung einer konvexen Ecke solange kompensierend, bis das Material darunter aufgelöst ist. In der Praxis ist allerdings in der Regel der zur Verfügung stehende Platz in der Umgebung der konvexen Ecke begrenzt, da andere Strukturen anschließen, oder es müssen aus Gründen der Rentabilität des Herstellungsprozesses die einzelnen Bauelemente sehr dicht auf dem Wafer angeordnet werden, um hohe Ausbeuten zu erzielen. Aus diesen Gründen wurden vielversprechende alternative Kompensationsstrategien entwickelt, wie die in [23] vorgestellte Methode, deren Prinzip in Abbildung 5.23 dargestellt ist.

Die zu kompensierenden Ecken werden durch einen Balken mit dem angrenzenden Maskenrand verbunden. Diese Maske wird identisch auf der Ober- und der Unterseite des Wafers aufgebracht. An den in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierten Kanten der Balken bilden sich zunächst stabile  $\{111\}$ -Ebenen aus. Beim vollständigen beidseitigen Durchätzen des Wafers wird der Effekt ausnutzt, daß jeweils eine dieser  $\{111\}$ -Ebenen mit der entsprechenden Ebene auf der Unterseite des Wafers eine konvexe Kante bildet, die zur Auflösung dieser stabilen  $\{111\}$ -Flächen führt. Es ist evident, daß gerade zum Entwurf und zur Analyse solcher dreidimensionalen Prozesse die Verwendung geeigneter Simulationssoftware wie der hier entwickelten äußerst hilfreich ist.



**Abb. 5.23:** Oben: Eine quadratische Maske ist an den konvexen Ecken mit vier Balken mit einem Rahmen verbunden.

Unten: Querschnitt eines  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Balkens beim beidseitigen Ätzen.

### 5.4.1.7 Flächenbedarf unterschiedlicher Kompensationsstrukturen

Die in diesem Abschnitt gezeigten Kompensationsstrukturen zeigen erhebliche Unterschiede nicht nur hinsichtlich der Genauigkeit und Qualität der herstellbaren konvexen Kante zwischen zwei  $\{111\}$ -Flächen, sondern insbesondere auch bezüglich des benötigten Platzbedarfs.

Abbildung 5.24 zeigt schematisch eine Maske, deren vier konvexe Ecken jeweils mit unterschiedlichen Kompensationsstrukturen versehen sind.

Diese Kompensationsstrukturen sind so dimensioniert, daß sie für dieselbe Ätztiefe die jeweils bestmögliche Kompensation der Unterätzung der Ecke gewährleisten.

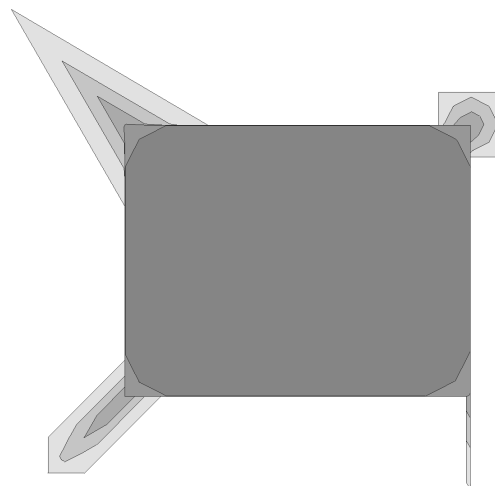
Die Entwicklung der Oberkante der Ätzfront während der Ätzung wurde anhand von Meßdaten rekonstruiert und ist durch unterschiedliche Grautöne graphisch dargestellt.

Die dreieckige Geometrie benötigt die größte Fläche, ohne herausragend gute Kompensationsergebnisse zu liefern.

Der Balken in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung, der - wie in Abschnitt 5.4.1.4 gezeigt - die beste Kompensation der Ecke liefert, benötigt etwas kleinere Abmessungen. Durch die Orientierung in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung wird allerdings auf beiden Seiten der Ecke Waferfläche beansprucht.

In Gegensatz dazu nimmt ein Balken in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung nur auf einer Seite der Ecke Raum in Anspruch, da an der Längsseite des Balkens schon in geringem Abstand die nächste Struktur anschließen könnte.

Die kompakteste Kompensationsstruktur stellt in diesem Vergleich das Quadrat dar, mit dem, wie in Abbildung 5.13 gezeigt wurde, an der Oberkante der Ätzfront eine Ecke mit  $90^\circ$  Winkel erzeugt werden kann.



**Abb. 5.24:** Vergleich des Flächenbedarfs verschiedener Kompensationsstrukturen.

Beim Überätzen entwickeln sich die Oberkanten der Strukturen in dieser zweidimensionalen Konstruktion praktisch gleichartig. In der Tiefe weisen die gestuften Bereiche allerdings Unterschiede auf.

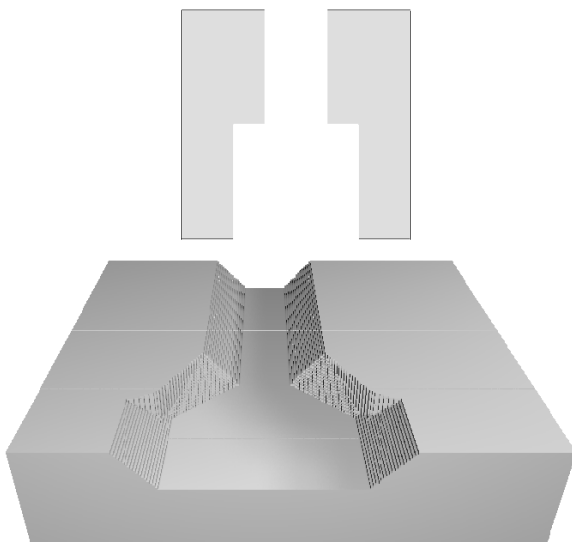
## 5.4.2 Grundstrukturen für Fluidkanäle

Zur Herstellung mikrofluidischer Bauelemente eignen sich naßchemische Ätzprozesse besonders gut, da damit sehr einfach Kanäle und Kammern mit großen Querschnitten hergestellt werden können. Auch die leicht zu realisierende Waferperforation ist, wie in Abschnitt 5.3 beschrieben, ein erprobtes Verfahren zur Herstellung von Ventilklappen oder Druckkopfdüsen. Eine realistische Simulation des Ätzprozesses mit der genauen Nachbildung rauher und glatter Bereiche erleichtert auch in diesem Gebiet den Entwurf und die Analyse von Bauteilen und Systemkomponenten.

Als Beispiel hierzu ist in Abbildung 5.25 die zeitliche Entwicklung von zwei V-Gräben unterschiedlicher Breite dargestellt, die als Grundstruktur für Mikrofluidkanäle dienen können.

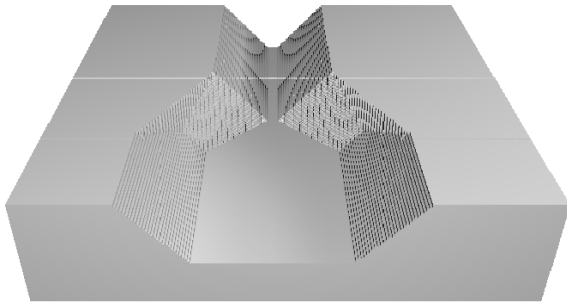
Ein realistisches Simulationsmodell liefert neben der Geometrie auch die Oberflächenmorphologie der geätzten Strukturen.

Das Auftreten der Bereiche mit rauher Oberflächenstruktur beim Übergang von verschiedenen Kanalquerschnitten ist mit Kenntnis des Stufenätzmodells unmittelbar zu verstehen, es sind die Bereiche vom Typ A, die sich bei der Entartung einfacher konvexer Ecken entwickeln. Mit einer Reihe aufeinanderfolgender Simulationen können diese Bereiche aufgrund ihres Entstehungsortes und ihrer zeitlichen Entwicklung leicht identifiziert werden. Die Zellen, die einem Bereich von A-Typ (bzw. B-Typ) zuzuordnen sind, werden auch in den Ergebnisdateien entsprechend gekennzeichnet und können somit vom Benutzer des Simulationsprogrammes gezielt extrahiert werden.

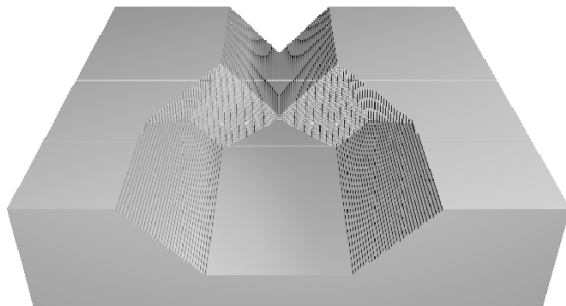


**Abb. 5.25:** Maske mit zwei konvexen Ecken, deren Ätzung zu unterschiedlichen breiten V-Gräben führt.

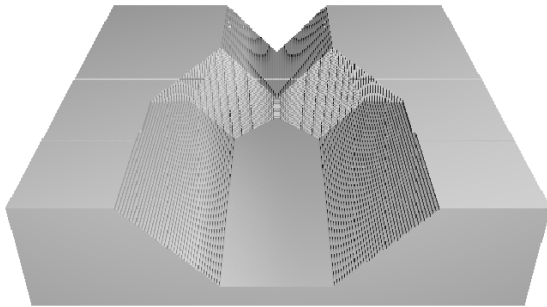
**Abb. 5.25 a):** Die konvexen Ecken beginnen zu entarten.



**Abb. 5.25 b):** Die glatten Bereiche von B-Typ ziehen sich auf die  $\{111\}$ -Flächen zurück. Die rauhen Bereiche werden dagegen größer.



**Abb. 5.25 c):** Im hinteren Bereich hat sich der V-Graben vollständig ausgebildet. Zwei Bereiche vom A-Typ treffen zusammen.



**Abb. 5.25 d):** Mit zunehmender Ätztiefe vergrößern sich die Bereiche vom A-Typ am Übergang zwischen den V-Gräben. Die glatten Bereiche vom B-Typ ziehen sich auf die Oberkante zurück.

Das Simulationsprogramm bietet zudem die Möglichkeit, die Querschnittsflächen bzw. die Volumina der Kanäle zu extrahieren, was aufgrund der zellulären Materialrepräsentation praktisch ohne zusätzlichen Rechenaufwand bewerkstelligt werden kann.

### 5.4.3 Ätzstopptechniken

Eine in der Produktion mikrostrukturierter Bauelemente häufig benötigte Technologie ist die Anwendung von Ätzstoppschichten [36].

Die Einbeziehung von Ätzstopptechniken in den Herstellungsprozeß ist für praktisch alle Strukturen erforderlich, die nicht ausschließlich von stabilen, d.h. die Ätzung begrenzenden {111}-Flächen gebildet werden, oder wenn eine vorgegebene Äztiefe präzise eingehalten werden muß, wie dies beispielsweise bei der Herstellung dünner Membranen der Fall ist.

In der Literatur sind vier Möglichkeiten zur Realisierung von Ätzstopps dokumentiert, das sind der Zeitätzstopp, der Ätzstopp mit vergrabenen inerten Schichten, der Ätzstopp durch Dotierung ausgewählter Bereiche mit Bor und der elektrochemische Ätzstopp mit einer speziellen experimentellen Anordnung.

Im Folgenden werden diese Techniken kurz vorgestellt und deren Möglichkeiten zur Einbindung in die Simulation beschrieben.

#### Zeitätzstopp

Das Beenden der Ätzung nach einer festgelegten Zeit (daher die Bezeichnung Zeitätzstopp) ist zusammen mit der optischen Begutachtung der Ätzung natürlich die einfachste Möglichkeit, die Entwicklung der Strukturen während der Ätzung zu kontrollieren. Dieses Verfahren wird oft in der Forschung und bei der Entwicklung von Prototypen eingesetzt, wenn einzelne Strukturen manuell hergestellt werden. Allerdings sind diese Methoden nur dann sinnvoll einzusetzen, wenn eine Mindestätzzeit bzw. Mindestätztiefe überschritten werden kann, bzw. wenn nur einzelne Strukturen angefertigt werden.

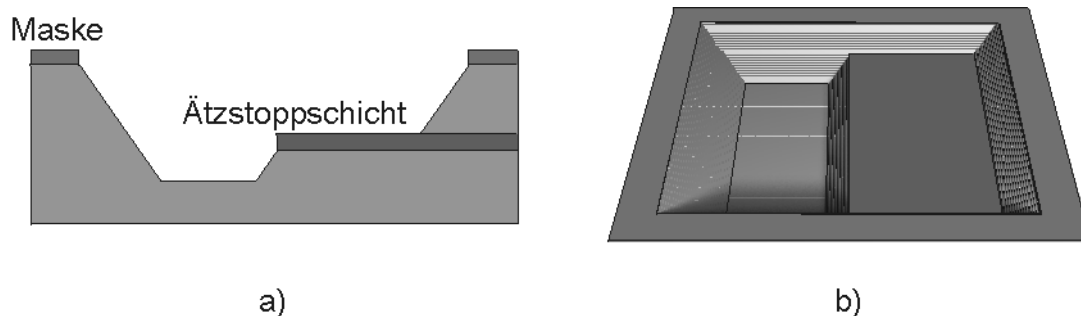
Die Anwendung des Zeitätzstopps ist trivial, bringt aber in der Praxis Probleme mit sich. Besonders bei der Batch-Produktion kann der Transport der reaktiven Chemikalien zur Waferoberfläche bzw. der Abtransport der Reaktionsprodukte trotz guter Durchmischung der Ätzlösung lokal unterschiedlich sein und somit können Ätzrate und Anisotropie von Wafer zu Wafer unterschiedlich ausfallen, ebenso wie die Dicke verschiedener Wafer im Allgemeinen unterschiedlich ausfällt (typische Toleranzen für einen 4“ Wafer betragen 5-10 µm). Aus diesen Gründen ist ein zeitlicher Ätzstopp in der Serienproduktion mikrostrukturierter Bauelemente problematisch und für eine hohe Ausbeute ungeeignet.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, daß die in Kapitel 5.4.1 vorgestellten Kompensationsstrukturen die Anwendung eines Zeitätzstopps voraussetzen, da die Strukturen für eine bestimmte Äztiefe entworfen werden und somit das Beenden der Ätzung nach der korrespondierenden Prozeßzeit erfordern.

### Dünne Schichten aus inertem Material

Einige in der Halbleitertechnologie gebräuchliche Materialien werden von stark basischen Ätzlösungen nicht aufgelöst und können somit als dünne Schichten in das Substratmaterial eingebaut werden, um einen Ätzstopp zu bewirken. Damit besteht das Substrat (und somit auch das Simulationsgebiet) nicht mehr nur aus maskiertem monokristallinem Silizium, sondern stellt eine sogenannte Sandwichstruktur aus verschiedenen Materialien dar. Eine derartige dünne Ätzstoppschicht kann z.B. durch Ionenimplantation mit Sauerstoff bzw. Stickstoff und anschließendes Ausheilen der Kristallstruktur hergestellt werden. Eine andere Möglichkeit besteht in der Verwendung einer SOI-Struktur als Substrat.

In der Simulation werden diese inerten Schichten mit geeigneten Werkzeugen für Solid-Modeling in das Simulationsgebiet eingebaut und während der Simulation wie eine Ätzmaske behandelt. Ein prinzipielles Beispiel dazu ist in Abbildung 5.26 angegeben.



**Abb. 5.26:** a) Schematische Darstellung einer vergrabenen dünnen Schicht als Ätzstopp  
b) Simulation dieser Struktur

### Ätzstopp durch starke Bordotierung ( $B^+$ -Ätzstopp)

Eine oft verwendete Ätzstopptechnik beruht auf dem Effekt, daß die Ätzrate von stark bordotiertem Silizium (stark bedeutet  $2-3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) nahezu unabhängig von der Kristallrichtung deutlich abnimmt (siehe *Seidel* [129,132]). Andere Dotierstoffe zeigen diesen Ätzstopp-Effekt nur sehr schwach ausgeprägt, so daß nur Bor in der Praxis zur Anwendung kommt.

Die hohe Bordotierung hat allerdings auch zwei gravierende Nachteile. Zum einen entartet dadurch das Halbleitermaterial und nimmt metallartige elektrische Eigenschaften an, was z.B. ein Eindiffundieren von definierten elektrischen Widerständen in diesen Bereichen ausschließt. Zum anderen entstehen starke mechanische Verspannungen, da die Boratome kleiner sind als Siliziumatome und dadurch bei den benötigten hohen Dotierungen die Gitterkonstante des Kristalls

verändert wird. Da diese Spannungen meist unerwünscht sind, müssen sie aufwendig durch Dotierung mit Germanium wieder verringert werden.

### **Funktion des B<sup>+</sup> Ätzstopps**

Das elektrochemische Modell von *Seidel*, das in Kapitel 2.4.2 beschrieben wurde, liefert die Erklärung für die Funktionsweise des B<sup>+</sup>-Ätzstopps. Bei Dotierkonzentrationen von  $2,2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  sinkt das Fermi-niveau des Halbleiters bis zum Valenzband ab. Dies hat zur Folge, daß diejenigen Elektronen, die während der Reaktion mit den OH<sup>-</sup> Ionen in den Siliziumkristall injiziert werden, nicht mehr an der Grenzschicht zwischen Festkörper und Ätzlösung (Elektrolyt) lokalisiert sind, sondern vom Halbleiter „abgesaugt“ werden und damit nicht mehr für den Reduktionsschritt an der Kristalloberfläche zur Verfügung stehen. Wie die Gleichung 2.6 in Kapitel 2.4.2 zeigt, sind an der Überführung eines Siliziumatoms vom Festkörper in die Ätzlösung vier Elektronen beteiligt, somit wäre die Reaktionsrate für die Ätzung proportional zur vierten Potenz der Elektronendichte und reziprok-proportional zur vierten Potenz der Borkonzentration, was mit der experimentellen Beobachtung übereinstimmt [129,132].

Soll ein B<sup>+</sup> Ätzstopp in der Simulation berücksichtigt werden, so muß das Dotierprofil im Silizium bekannt sein, bzw. durch Prozeßsimulation ermittelt werden. Die Bereiche, in denen die Borkonzentration den kritischen Wert von ca.  $2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  erreicht, müssen aus dieser Simulation extrahiert werden und können dann mit einem Solid-Modeling Werkzeug in der Materialrepräsentation der Ätzsimulation als Material mit Ätzrate Null eingefügt werden (auch die Ätzmaske der Simulation besteht aus diesem „Material“). Eine besondere Filterstruktur für Anwendungen in mikrofluidischen Systemen, die mit einem Bor-Ätzstopp gefertigt wird, ist in Kapitel 5.5.3, Abbildung 5.34 gezeigt. Der Bereich des Ätzstopps ist in diesem Beispiel keine ebene Schicht, sondern entsprechend dem Dotierprofil eine nicht planare dreidimensionale Region. Weitere interessante Anwendungen zu dieser Art von Ätzstopp-Technik finden sich z.B. in [73].

### **Elektrochemischer Ätzstopp**

Die Probleme, die eine sehr starke Bordotierung mit sich bringt, können durch die Anwendung elektrochemischer Ätzstopptechniken vermieden werden. Dazu wird auf einem p-dotierten Substrat eine n-dotierte Epitaxieschicht aufgebracht oder es wird durch Diffusion oder Implantation ein p-n-Übergang im Silizium hergestellt.

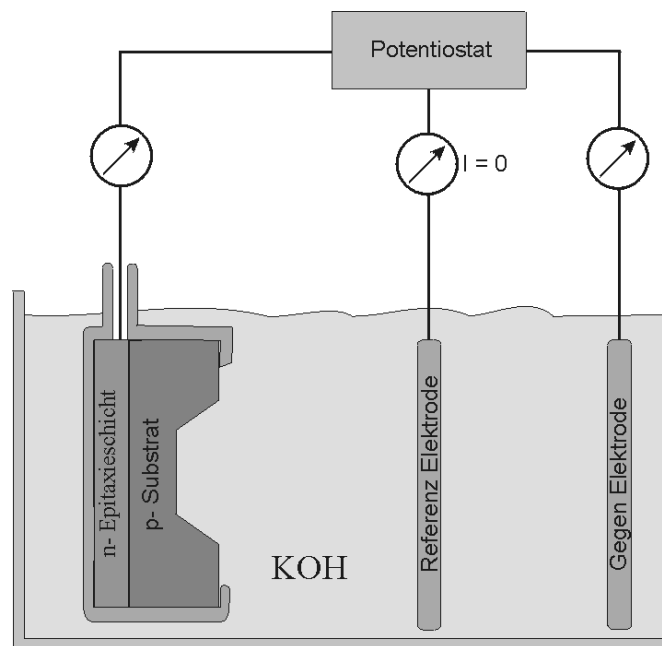
Mit einer relativ aufwendigen Anordnung, die schematisch in Abbildung 5.27 dargestellt ist, kann ein Wafer während der Ätzung auf ein definiertes elektrisches Potential gegenüber der Ätzlösung gebracht und die Ätzung gezielt am p-n-Übergang beendet werden. Dazu wird für die n-dotierte Schicht ein positives Potential bezüglich



der Ätzlösung eingestellt. Das Potential der Ätzlösung wird durch die Referenzelektrode festgelegt, in dem die Spannung der Referenzelektrode auf einen Wert geregelt wird, bei dem der elektrische Strom durch diese zu Null wird. Ein positives Potential der n-dotierten Schicht gegenüber der Ätzlösung verhindert die Auflösung dieses Bereiches (Passivierungspotential). Dadurch wird der p-n-Übergang in Sperrichtung gepolt, so daß zwischen Substrat und Elektrolyt nur der vernachlässigbar kleine Sperrstrom fließen kann. Das Substrat liegt somit auf dem OCP (open circuit potential) und wird dabei geätzt, da bei diesem Potential keine Passivierung auftritt. Sobald die Ätzfront den p-n-Übergang erreicht, stoppt die Auflösung des Kristalls an dieser Stelle. Die Dicke einer auf diese Weise hergestellten Siliziummembran entspricht genau der Lage des elektrisch wirksamen p-n-Überganges, bzw. der Dicke der Epitaxieschicht. Diese Methode ist zwar aufwendig, liefert aber sehr präzise und reproduzierbare Ergebnisse. Für weitergehende Ausführungen zum elektrochemischen Ätzstopp sei an dieser Stelle auf die entsprechende Literatur verwiesen.

Ein echter elektrochemischer Ätzstopp, der aus einem in Sperrichtung gepolten p-n-Übergang besteht, konnte zum Zeitpunkt der Fertigstellung dieser Arbeit nicht in die Simulation einbezogen werden. Denn dazu müßte die Poissongleichung im Substrat und in der Ätzlösung gelöst werden (z.B. mit einem Bauelementesimulator), um die lokale Position des Passivierungspotentials zu bestimmen, bei der die Ätzung stoppt.

Es ist lediglich möglich, vor der Ätzsimulation die Tiefe des elektrochemisch wirksamen Ätzstopps zu bestimmen und an dieser Position einen Ätzstopp in Form einer inerten Ätzstoppschicht in das Simulationsgebiet einzufügen. Die Erweiterung des Simulationsmodells um diese Option stellt allerdings kein wesentliches Problem dar.



**Abb. 5.27:** Potentiostat zur elektrochemischen Ätzung von Silizium bei einstellbaren Oberflächenpotentialen.

Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß der in dieser Arbeit entwickelte Simulationsansatz die Möglichkeit bietet, prinzipiell alle hier beschriebenen Ätzstopptechniken in der Simulation zu berücksichtigen und die für den Ätzangriff passivierten Bereiche mit der Genauigkeit der Materialdiskretisierung aufzulösen, und dies auch für Ätzkörper, die die komplexe dreidimensionale Geometrie realistischer Mikrostrukturelemente aufweisen.

## 5.5 Einbeziehung isotrop ätzender Bereiche

Substrate, aus denen mikrostrukturierte Bauelemente hergestellt werden, enthalten manchmal auch Schichten oder dreidimensionale Bereiche aus Materialien, die einen isotropen Charakter bei der Ätzung in basischen Lösungen aufweisen und ebenso wie das einkristalline Silizium der Ätzlösung ausgesetzt sind. In diesem Fall muß die Auflösung dieser Bereiche in der Simulation prinzipiell berücksichtigt werden. Das gilt in besonderer Weise, wenn isotrop ätzende Bereiche einkristallines Material bedecken und dieses mit fortschreitender Auflösung immer mehr der Ätzlösung ausgesetzt wird. Ein Beispiel dazu wird in Abschnitt 5.5.2 vorgestellt.

### 5.5.1 Schichten mit isotropem Charakter bei der Ätzung

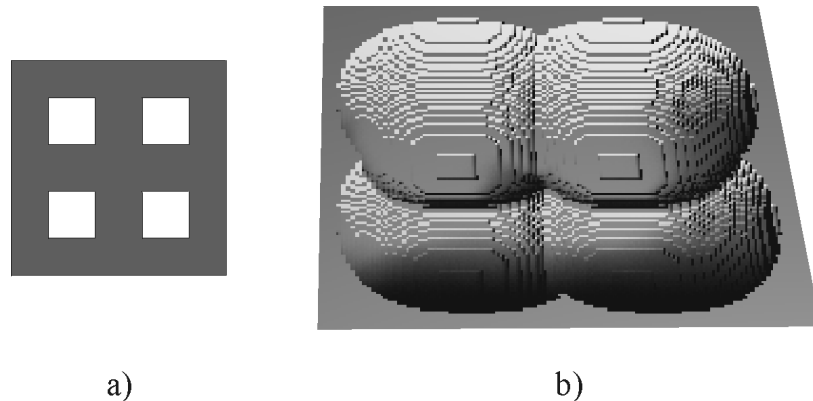
Ein Material mit isotropen Eigenschaften bei der Ätzung in basischen Lösungen ist Siliziumdioxid, das entweder direkt als Maske verwendet werden kann oder als Schicht in kombinierten Siliziumdioxid und -nitrit Masken enthalten ist.

Eine endliche Ätzrate der Maskenmaterialien wurde in den Simulationen bisher immer vernachlässigt, wie auch in praktisch allen zur Zeit bekannten kommerziell erhältlichen Simulationsprogrammen. Die Berücksichtigung der Auflösung der Maske, besonders an Rändern, kann jedoch ohne weiteres mit der Simulation geleistet werden, sofern dies bei bestimmten Strukturen notwendig erscheint. Dazu muß dem Maskenmaterial über den Materialindex eine Ätzeigenschaft (isotrop) zugewiesen und das entsprechende Funktionsmodul im Simulationsprogramm aktiviert werden. Wenn der Rand der Maske aufgrund der Ätzung zurückweicht und das darunterliegende Material freilegt, werden an dieser Stelle Stufenquellen induziert, die einen Materialabtrag bewirken. Die freigelegten Schnittkanten der  $\{111\}$ -Flächen mit der Waferoberfläche werden von oben abgeschält, wie dies auch bei der Randkeimbildung unter Maskenkanten geschieht (vgl. Kapitel 2.4.3). Das Simulationsprogramm überprüft zu jedem Zeitschritt die Oberfläche der Struktur, um neu erzeugte Stufenquellen zu erfassen.

Ein anderes Material mit isotropen Ätzeigenschaften in basischen Lösungen ist Polysilizium, bei dem aufgrund der polykristallinen Struktur keine stabilen, d.h. die Ätzung begrenzenden geschlossenen  $\{111\}$ -Flächen über ausreichend große Bereiche vorhanden sind, und somit immer Atome in Halbkristallage vorhanden sind, von denen aus die Auflösung des Kristalles erfolgen kann.

Die Simulation eines isotrop ätzenden Materials kann in sehr einfacher Weise mit der Methode der strukturierenden Elemente erfolgen, die in Kapitel 4.2 beschrieben ist.

Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 5.28 eine dreidimensionale Simulation der Ätzung eines isotropen Materials durch eine Maske mit vier quadratischen Öffnungen dargestellt.



**Abb. 5.28:** a) Maske mit vier quadratischen Öffnungen.  
b) Simulation der isotropen Ätzung.

### 5.5.2 Dreidimensional vorstrukturierte Substrate

Der Einsatz leistungsfähiger Laser bietet vielfältige Möglichkeiten in der Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente (siehe dazu z.B. [2,3,24,62]). Eine intensive Infrarot-Einstrahlung kann lokal die kristalline Struktur des Siliziums stören, indem das Material in örtlich definierten Bereichen aufschmilzt und anschließend in polykristalliner Form rekristallisiert. Polykristallines Silizium zeigt isotropen Charakter bei der Ätzung mit basischen Lösungen, wie im vorhergehenden Abschnitt dargelegt wurde.

Die Tiefe der gestörten Bereiche im Kristall hängt von der Intensität und der zeitlichen Dauer der Bestrahlung ab. Für „Lasermicromachining“ in Silizium eignen sich besonders Nd:YAG Laser, deren Wellenlänge einer Energie (1,17 eV) entspricht, die knapp über dem Bandabstand von Silizium liegt.

In Abbildung 5.29 a) ist ein Querschnitt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung eines Wafers mit  $\langle 100 \rangle$ -orientierter Oberfläche dargestellt. Die Bereiche, in denen das Material polykristallin vorliegt, sind dunkelgrau unterlegt. Es wurden exemplarisch verschiedene Profilformen dieser Bereiche angenommen. Gestrichelt eingezeichnet sind die  $\{111\}$ -Flächen, die von dem Laserpuls gerade nicht mehr gestört wurden und deshalb die Ätzung mit KOH

begrenzen können. Diese Profile sind in der schematischen Darstellung der Ätzgruben in Abbildung 5.29 b) wieder zuerkennen. Die Geometrie der auf diese Weise erzeugten Ätzgruben bzw. Kanäle sind festgelegt durch den Durchmesser des aufgeschmolzenen Bereiches auf der Waferoberseite und die Tiefe dieses gestörten Bereiches.

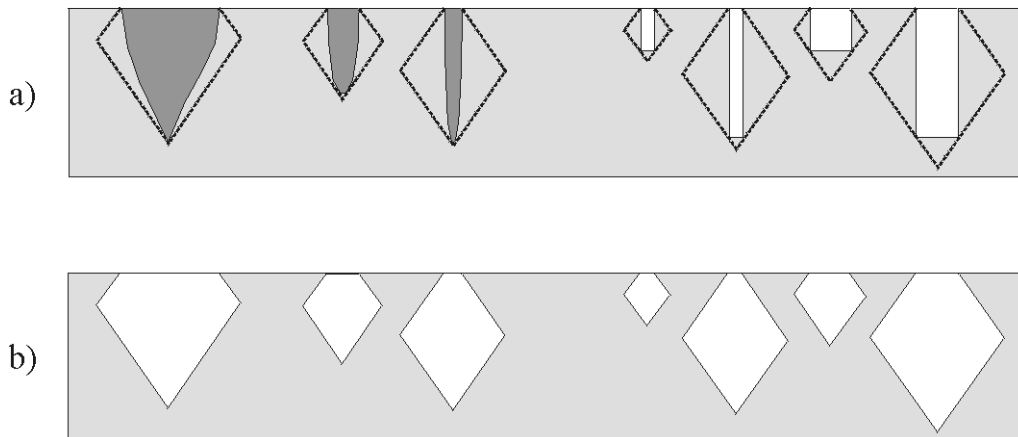
Es können auch Gräben (engl. „trenches“), die mit Trockenätztechniken erzeugt wurden, mit dem naßchemischen Prozeß erweitert werden, wie dies in Abbildung 5.29 a) auf der rechten Seite schematisch dargestellt ist. Auch in diesem Fall hat der Querschnitt in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung der Gruben die Form einer Raute, die von den entsprechend orientierten  $\{111\}$ -Flächen gebildet wird.

Die Strukturbildung eines auf diese Weise vorstrukturierten Wafers läßt sich anschaulich mit einem Schalenmodell beschreiben. In Abbildung 5.30 a) sind in einem Querschnitt der zylinderförmige polykristalline Bereich und die für die Strukturbildung maßgeblichen  $\{111\}$ -Flächen schematisch eingezeichnet.

Der polykristalline Bereich unterbricht die  $\{111\}$ -Ebenen, die vom Maskenrand ausgehend unterhalb der Maskenöffnung liegen, an deren unteren Kanten. Wird der polykristalline Bereich während der Ätzung aufgelöst, so werden am Übergang zu diesen  $\{111\}$ -Ebenen Atome in Halbkristallage freigelegt, vergleichbar mit der Randkeimbildung unter Maskenkanten in Kapitel 2.4.3. Die  $\{111\}$ -Ebenen werden ausgehend von den unteren Kanten abgeschält, wie in Abbildung 5.30 b) dargestellt ist. Gleichzeitig wird der polykristalline Bereich immer tiefer geätzt und legt die Unterkanten weiterer  $\{111\}$ -Ebenen frei, solange bis die ersten  $\{111\}$ -Ebenen unter dem polykristallinen Bereich, die gerade nicht mehr gestört sind, die Ätzung begrenzen. Für die naßchemische Ätzung der vorstrukturierten Substrate muß die Waferoberfläche mit einer Maske versehen werden, um die ungestörte Kristalloberfläche vor der Auflösung zu schützen.

Die exakte Berücksichtigung eines derartig vorstrukturierten Wafers in der Simulation stellt eine beachtliche Herausforderung dar, denn die physikalisch basierte Einbeziehung dieser Technik in die Simulation erfordert eine eingehendere Modellierung der Strukturierung mit dem Laser, um Form und Ausdehnung des polykristallinen Bereiches genau zu bestimmen. Es ist zu vermuten, daß an den Rändern des polykristallinen Bereiches noch eine Störung der Kristallstruktur induziert wird, woraus ein abweichendes Ätzverhalten in diesen Bereichen folgt.

Als erste Näherung muß der Übergang von polykristallinem Bereich zum ungestörten Kristall abgeschätzt bzw. aus Erfahrungswerten übernommen werden.



**Abb. 5.29:** Ätzung vorstrukturierter Wafer.

- a) Schematische Darstellung der rekristallisierten Bereiche (dunkelgrau) und der angrenzenden, ungestörten  $\{111\}$ -Flächen.
- b) zu erwartende Formen der Strukturen nach dem Ätzen.

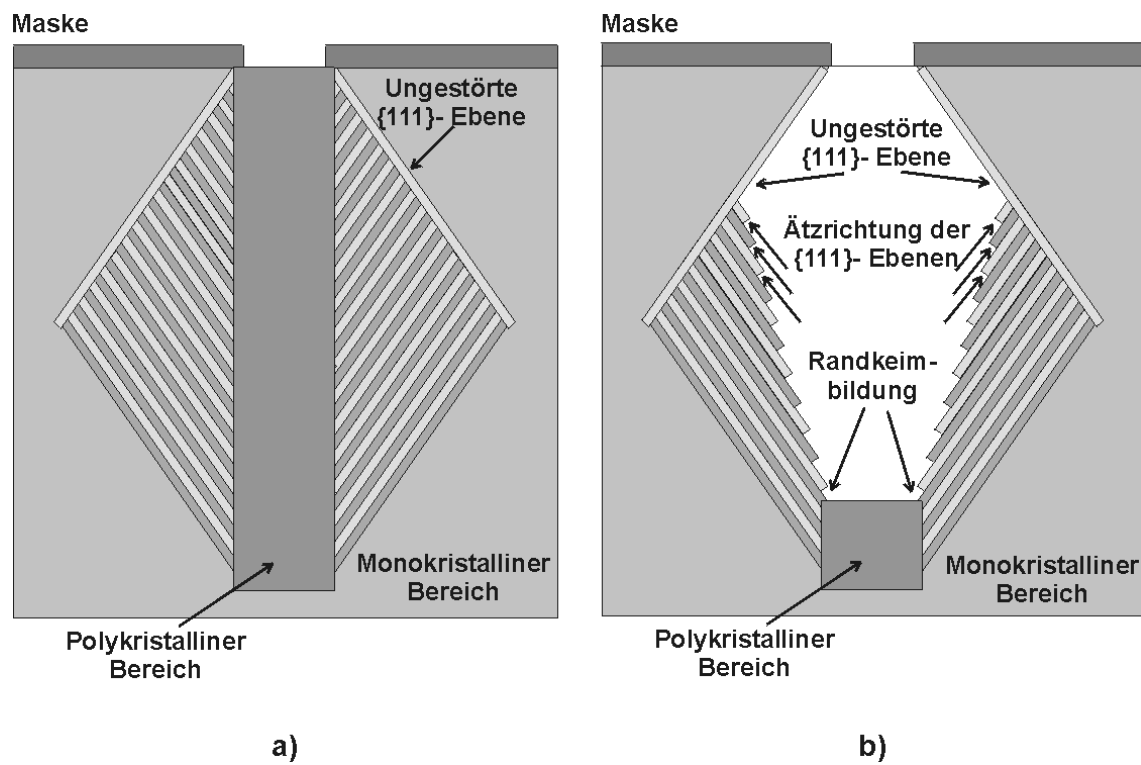
Ein zweites Problem besteht darin, daß bei einigen in Abbildung 5.29 b) gezeigten Strukturen eine relativ großvolumige Kammer durch eine kleine Maskenöffnung geätzt wird. In diesen Fällen müßten Diffusionsvorgänge der Ätzlösung durch die Maskenöffnung berücksichtigt werden, da nicht ohne weiteres von einer konstanten Konzentration der Ätzlösung und der gelösten Reaktionsprodukte in der Kammer ausgegangen werden kann. Des Weiteren kann sich in diesen Kammern der bei der chemischen Reaktion entstehende Wasserstoff sammeln und größere Blasen bilden, wodurch die Ätzlösung nicht ständig die gesamte Kammer ausfüllen kann.

Aufgrund dieser Schwierigkeiten in der Modellierung ist die in Abbildung 5.31 gezeigte Simulation eines vorstrukturierten Wafers lediglich als qualitative Näherung der real auftretenden Verhältnisse zu verstehen. Dieses Beispiel kann aber die Flexibilität des Simulationskonzeptes demonstrieren, das es ermöglicht, zusätzliche physikalische Modelle für lokale Bereiche zu erstellen und einzufügen.

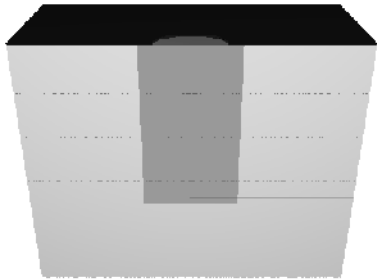
Der in idealisierter Weise zylinderförmig angenommene polykristalline Bereich wurde mit einem Solid-Modeling Werkzeug in das Simulationsgebiet eingefügt und die Materialzellen dieses Bereichs in der Ergebnisdatei dunkelgrau dargestellt. Die Ätzmaske hat ebenfalls eine runde Öffnung, die etwas kleiner gewählt wurde als der polykristalline Bereich, um den isotropen Charakter dieses Bereiches zu Beginn der Ätzung demonstrieren zu können.

Für die Ätzrate des polykristallinen Bereiches wurde willkürlich der doppelte Wert der Ätzrate der  $\{100\}$ -Ebenen angenommen. Diese Vorgehensweise erschien angemessen,

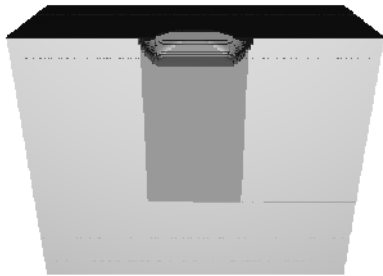
da die Simulation in diesem Beispiel die Strukturbildung nur qualitativ wiedergeben sollte und der exakte Wert der Polysiliziumätzrate dafür nicht entscheidend ist.



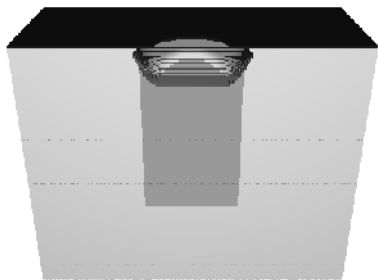
**Abb. 5.30:** Schalenmodell zur Beschreibung der Ätzung vorstrukturierter Wafer.  
a) Struktur des Substrates vor der Ätzung.  
b) Abschälen der gestörten {111}-Ebenen während der Ätzung.



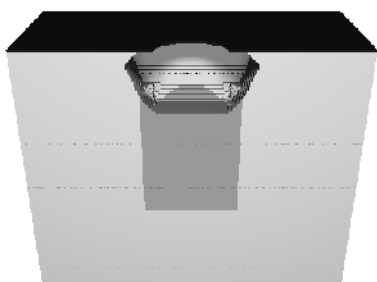
**Abb. 5.31 a):** Simulationsgebiet mit runder Maskenöffnung und zylinderförmigem, dunkelgrau unterlegtem polykristallinem Bereich



**Abb. 5.31 b):** Zu Beginn der Ätzung wird der polykristalline Bereich isotrop aufgelöst.

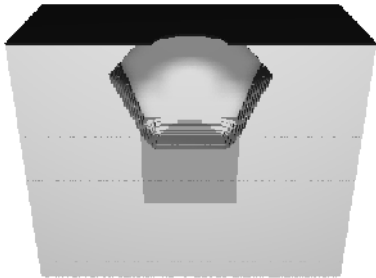


**Abb. 5.31 c):** Unter der Maske bilden sich im monokristallinen Material stabile {111}-Ebenen aus, die an diesen Stellen das Ätzprofil begrenzen.

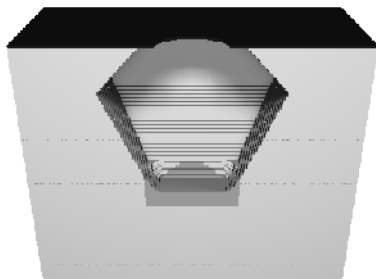


**Abb. 5.31 d):** Die {111}-Ebenen unmittelbar unter der Maske vergrößern sich nach unten bis zu einem „Knick“ an dem diejenigen {111}-Ebenen auslaufen, die am Übergang zum polykristallinen Bereich angegriffen werden.

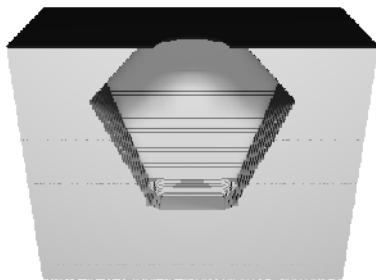




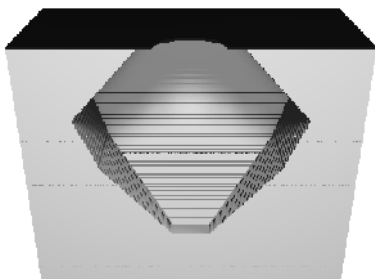
**Abb. 5.31 e):** Der polykristalline Bereich wird tiefer geätzt. Dadurch werden immer mehr  $\{111\}$ -Ebenen an ihrer unteren Kante angegriffen.



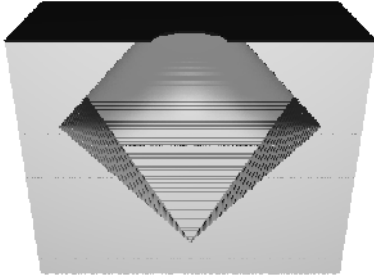
**Abb. 5.31 f):** Die  $\{111\}$ -Ebene im oberen Bereich der Struktur vergrößern sich, da immer mehr Stufen im unteren Bereich abgeschält werden.



**Abb. 5.31 g):** Der polykristalline Bereich ist fast ganz aufgelöst und legt dadurch die darunterliegende  $\{100\}$ -Ebene frei, die ebenfalls aufgelöst wird.



**Abb. 5.31 h):** Das Simulationsgebiet besteht nur noch aus einkristallinem Silizium. Der  $\langle 100 \rangle$ -orientierte Boden wird in die Tiefe geätzt und die restlichen Stufen auf den  $\{111\}$ -Ebenen werden abgeschält.



**Abb. 5.31 i):** Jetzt wird das Ätzprofil nur noch von stabilen  $\{111\}$ -Ebenen begrenzt und ändert sich qualitativ nicht mehr.

## 5.6 Simulation typischer Bauelemente

In diesem Abschnitt wird die Simulation von zwei Bauelementstrukturen diskutiert, die aufgrund ihrer Eigenschaften sehr gut mit naßchemischen Prozessen hergestellt werden können. Beide Bauelemente erfordern das Durchätzen der gesamten Waferdicke und sind insgesamt bemerkenswert groß. Darüber hinaus sind diese Strukturen relativ komplex und erfordern eine dreidimensionale Simulation.

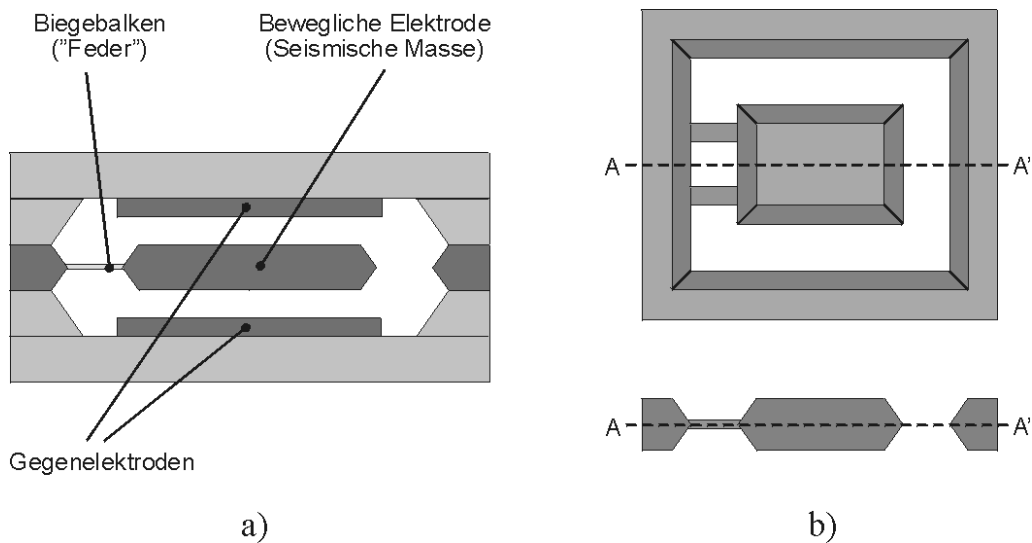
### 5.6.1 Feder-Masse-Systeme für Sensoren

Eine wichtige Anwendung für naßchemisch geätzte Strukturen stellen hochpräzise Beschleunigungssensoren bzw. Neigungssensoren dar. Durch die Anwendung der naßchemischen Ätztechnik können sehr einfach relativ große seismische Massen hergestellt werden, indem die gesamte Waferdicke zur Herstellung der Struktur mit einbezogen wird.

In Abbildung 5.32 a) ist der prinzipielle Aufbau eines Beschleunigungs- bzw. Neigungssensors dargestellt, der typischerweise aus mehreren strukturierten Wafern besteht, die mit Bondtechniken zu der Gesamtanordnung verbunden werden. Der skizzierte Aufbau bildet einen Differentialkondensator mit einer beweglichen Mittelelektrode. Diese mechanische Struktur wird durch beidseitiges Ätzen eines Wafers hergestellt und ist in Abbildung 5.32 b) auf der rechten Seite in Aufsicht und Querschnitt dargestellt.

Wichtig für die reproduzierbare Einhaltung der spezifizierten Parameter des Feder-Masse-Systems ist die präzise Herstellung einer definierten Geometrie der Federn (insbesondere der Federquerschnitte) und (weniger kritisch) eine genau einstellbare seismische Masse.

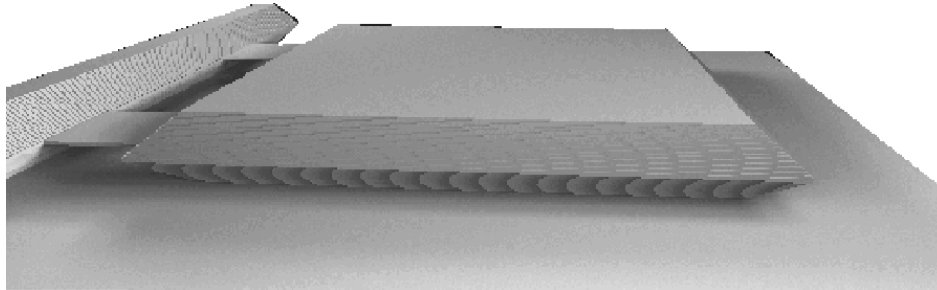
Die Verwendung von Kompensationsstrukturen für die konvexen Ecken ermöglicht zum einen ein flächensparendes Design und eine gute Reproduzierbarkeit der Größe der seismischen Massen. Eine besonders große Masse ist für Anwendungen günstig, bei denen der Sensor hochfrequent schwingenden Störungen ausgesetzt ist, da diese bedingt durch die hohe Trägheit der Masse das Meßsignal nicht beeinträchtigen. Bei Sensoren mit wesentlich kleinerer Masse, die z.B. mit Techniken der Oberflächenmikromechanik gefertigt werden, müssen solche überlagerten Störungen aufwendig mit Hilfe elektronischer Signalverarbeitung vom Meßsignal getrennt werden.



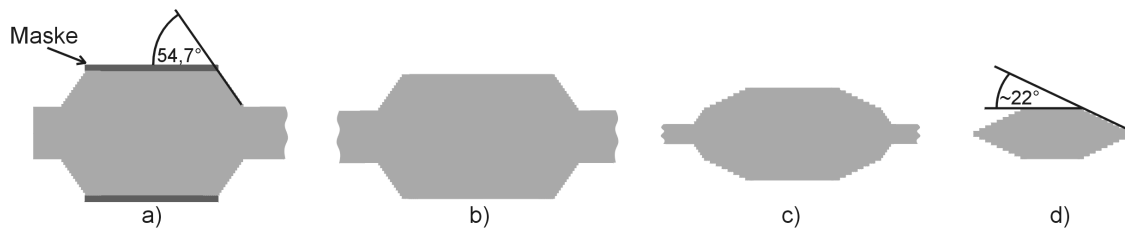
**Abb. 5.32:** a) Schematische Darstellung eines kapazitiven Beschleunigungssensors.  
 b) Mikromechanisches Feder-Masse-System des Sensors in Aufsicht und Querschnitt.

Bei dem von *Seidel* [130] vorgestellten Sensordesign werden die Federn durch lokal implantierte Ätzstoppschichten hergestellt. Dazu wird das Silizium in den entsprechenden Bereichen auf der Ober- und Unterseite des Wafers stark mit Bor dotiert, so daß diese Bereiche bei der Freitäzung der seismischen Masse nicht aufgelöst werden und eine elastische Verbindung zum Substrat erhalten bleibt.

Die Federn können auch wie in dem in Abbildung 5.33 gezeigten Beispiel aus reinem (Bulk-) Silizium in der Mitte des Wafers mit einem zweistufigen Ätzprozeß hergestellt werden [68]. Die Ätzung wird mit identischer Maskierung auf der Ober- und Unterseite des Wafers ausgeführt und ist im Querschnitt in der Abbildung 5.34 dargestellt. Die Bereiche in denen die Federn prozessiert werden sind zunächst maskiert (Abb. 5.34 a), während ein Graben um die seismische Masse geätzt wird, dessen Tiefe der etwa der Hälfte der gewünschten Dicke der Feder entspricht. Dann wird die Maskierung im Bereich der Federn entfernt und der Ätzprozeß fortgesetzt (Abb. 5.34 b). Die jetzt frei liegende {100}-Oberfläche wird ebenso wie der schon bestehende Graben mit der Tiefenätzrate aufgelöst. Zusätzlich werden die {111}-Flächen von der Waferoberseite (bzw. Unterseite) aus abgeschält, da deren unmaskierte Oberkanten aufgelöst werden (Abb. 5.34 c). Auf diese Weise bilden sich an den Seiten der Federn Böschungen, deren Winkel mit ungefähr  $20^\circ$ - $22^\circ$  deutlich flacher ist als der Böschungswinkel der {111}-Ebenengruppe (Abb. 5.34 d). Eine exakte Modellierung der dreidimensionalen Effekte an den Übergängen der Feder zum Substrat bzw. zur seismischen Masse erfordert noch weitere experimentelle Untersuchungen.



**Abb. 5.33:** Simulation der Ätzung des mikromechanischen Feder-Masse-Systems aus Abbildung 5.32 b).



**Abb. 5.34:** Simulation der Ätzung des Querschnitts einer Feder aus Abbildung 5.33.

- Der Bereich der Feder ist im ersten Ätzschritt maskiert.
- Nach entfernen der Maske wird die Ätzung fortgesetzt.
- An den jetzt unmaskierten Kanten zwischen der Waferoberfläche und den  $\{111\}$ -Ebenen werden diese abgeschält. Dadurch bildet sich ein Böschungswinkel mit etwa  $20^\circ$ - $22^\circ$ .
- Mit der Perforation des Wafers ist die Feder fertiggestellt.

Die Simulation der Ätzung dieser mikromechanischen Struktur erlaubt eine Analyse geeigneter Kompensationsstrukturen im Hinblick auf den Flächenbedarf auf dem Wafer, sowie eine genaue Betrachtung der Federn, insbesondere der Federquerschnitte, die die Biegesteifigkeit und somit die Schwingungsmoden des Feder-Masse-Systems maßgeblich bestimmen. Das Simulationsprogramm beinhaltet selbstverständlich die Möglichkeit, die Geometrie der Struktur zu extrahieren (siehe auch Kapitel 5.6) und somit die Weiterbearbeitung der Ergebnisse aus der Prozeßsimulation mit FEM-Werkzeugen unproblematisch zu ermöglichen.

Die Bestimmung der Masse der Struktur ist prinzipiell mit der Genauigkeit der Materialdiskretisierung möglich, auch wenn bei unzureichender Kompensation der

konvexen Ecken eine Unterätzung mit entsprechend komplexer Geometrie auftritt. Voraussetzung dafür ist, daß die Unterätzung richtig von der Simulation wiedergegeben wird.

## 5.6.2 Filterstruktur für mikrofluidische Systeme

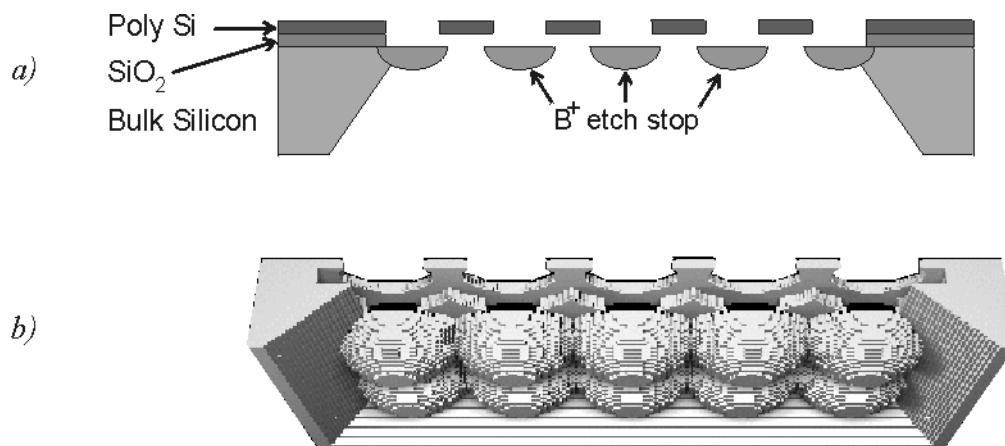
Viele mikrostrukturierte Bauelemente, die in der aktuellen Literatur diskutiert werden, sind zunehmend komplexer aufgebaute Strukturen, die Schichten aus unterschiedlichen Materialien enthalten. Für Simulationswerkzeuge wird es daher in naher Zukunft immer wichtiger dieser Entwicklung Rechnung zu tragen und Mehrschichtstrukturen, aus denen die Substrate für die zu prozessierenden Bauelemente bestehen, direkt in die Simulation einbeziehen zu können.

Eine besonders ungewöhnliche Filterstruktur, die in [88] vorgestellt und in Abbildung 5.34 schematisch wiedergegeben wird, soll als Beispiel für Bauelemente dienen, die Schichten aus verschiedenen Materialien enthalten. In diesem Beispiel wird eine Anordnung aus gelochten Membranen mit unterschiedlichen Schichten realisiert.

Gelochte Membranen haben weit verbreitete Anwendungen in der Mikrosystemtechnik und werden z.B. sowohl in Mikrofonen als auch in (Partikel/Teilchen-) Filtern verwendet, die für den praktischen Einsatz von mikrofluidischen Systemen eine entscheidende Rolle spielen.

Der hier gezeigte Filter besteht aus zwei gelochten Membranen, deren Öffnungen gegeneinander versetzt angeordnet sind und von einer ebenfalls perforierten Schicht auf einem definierten Abstand gehalten werden. Im Gegensatz zu den bekannten einfachen Filtern ist bei dieser Anordnung die Größe der Partikel, die den Filter gerade noch passieren können, nicht bestimmt durch die Größe der Öffnungen der Membranen, sondern durch den Abstand der beiden Membranen, der der Dicke der Zwischenschicht entspricht. Der Vorteil dieser Eigenschaft liegt darin, daß die Dicke dieser Oxidschicht mit geringem Aufwand präziser und somit reproduzierbarer hergestellt werden kann als die Größe der Löcher der Membranen.

Zur Herstellung dieser Struktur wird durch kreisförmige Öffnungen in den oberen Schichten das Bulk-Silizium stark mit Bor dotiert. Das Dotierprofil wird so eingestellt, daß sich die Bereiche hoher Borkonzentration unter den Öffnungen überlappen. Beim Ätzen von der Rückseite wirken diese Bereiche als Ätzstopp (vgl. Kap. 5.4.2) und durch Auflösen der undotierten Bereiche entsteht eine perforierte Membran. Durch Nachätzen der Zwischenschicht wird der Filter fertiggestellt.



**Abb. 5.34:** Partikelfilter für mikrofluidische Anwendungen.  
a) Schematische Darstellung der perforierten Schichten.  
b) Simulation der Ätzung dieser Struktur.

Diese Struktur ist ein interessantes Beispiel, die Flexibilität des Konzeptes für die Ätzsimulation zu testen. Bei diesem Filterbauteil sind die bordotierten Bereiche deutlich kugelförmig ausgeprägt und können nicht einfach durch eine ebene Schicht angenähert werden. Das Simulationskonzept kann die geometrischen Details des Filters korrekt abbilden und mit ausreichender Genauigkeit auflösen. Die Ätzung der Polysiliziumschicht in dieser geometrischen Anordnung erweist sich als unkritisch und kann ohne zusätzlichen Aufwand vom Simulationsprogramm geleistet werden. Die Simulation dieses Beispiels zeigt anschaulich die praktische Anwendbarkeit der Simulationemethode für Substrate, die aus mehreren Schichten mit unterschiedlichem Ätzverhalten bestehen.





## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Neben den Trockenätzprozessen ist das naßchemische orientierungsabhängige Ätzen eine Schlüsseltechnologie zur dreidimensionalen Strukturierung mikromechanischer Bauelemente. Trotz zahlreicher Untersuchungen ist der Ätzmechanismus noch nicht vollständig geklärt; Geometrie und Morphologie geätzter Strukturen können auf der Grundlage der bekannten Modelle nicht konsistent erklärt werden [4,5,6,7]. Etliche Ansätze zur Modellierung und Simulation weisen Probleme in der korrekten Wiedergabe der Ätzfront auf und haben zusätzlich Unzulänglichkeiten bei der Berücksichtigung realistischer Aufgabenstellungen, die bei der Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente auftreten.

Gerade in den letzten Jahren wurde durch interdisziplinäre Forschungsarbeiten zu diesem Thema die Vertiefung des Verständnisses und die systematische Sammlung, Dokumentation und kritische Diskussion der vielschichtigen Phänomene dieses für die Mikrosystemtechnik nach wie vor hochrelevanten Prozesses vorangetrieben.

Vor diesem Hintergrund bestand das Ziel dieser Arbeit darin, aktuelle Erkenntnisse und neue experimentelle Ergebnisse über das orientierungsabhängige naßchemische Ätzen von Silizium auszuwerten und ein neues Simulationskonzept zu entwickeln, das sowohl ein realistisches physikalisches Modell verwendet als auch Simulationsgebiete behandeln kann, die aus mehreren Schichten mit unterschiedlichem Ätzverhalten bestehen, die eventuell durch andere Technologien dreidimensional vorstrukturiert sind. Dies erscheint erforderlich, da im Zuge der rasanten Entwicklung der Mikrosystemtechnik zunehmend komplexere Bauelemente und Systeme entworfen und hergestellt werden müssen, deren Substrate nicht mehr aus reinem, einkristallinem Silizium bestehen und bei deren Herstellung der naßchemische Ätzprozeß nur einer von mehreren Prozeßschritten zur dreidimensionalen Strukturierung ist.

In die vorliegende Arbeit sind neue Erkenntnisse über die Strukturbildung auf ebenen, maskierten Wafern eingeflossen. Ein Modell, das den orientierungsabhängigen Ätzprozeß als Stufenätzvorgang beschreibt [126], wurde erstmals in ein allgemeines Konzept zur Topographiesimulation eingebettet.

Die grundlegenden Aspekte des in dieser Arbeit vorgestellten Stufenätzmodells lassen sich vereinfacht wie folgt zusammenfassen:

1. Der Kristall setzt sich während der Ätzung nur aus im Prinzip atomar glatten  $\{111\}$ -Flächen und aus Stufen zusammen, die von den Ebenen des  $\{111\}$ - und des  $\{211\}$ -Zonenverbandes gebildet werden. Andere, insbesondere höher indizierte Facetten werden als Einhüllende von gestuften Bereichen interpretiert.

2. Der Ätzzvorgang des Kristalls erfolgt durch das laterale Abschälen dieser Stufen, ausgehend von den  $\{211\}$ -Ebenen.
3. Die Entwicklung der Ätzfront, die an einer einfachen konvexen Maskenecke auftritt, ist der strukturbildende Grundprozeß mit dem sich auch die Ausbildung der Ätzfront an beliebig geformten Maskenkanten beschreiben läßt.

Die Beschreibung des Ätzprozesses mit diesem Modell hat zur Folge, daß die Strukturbildung während der Ätzung neben den Stufenätzraten ausschließlich von Stufenquellen und Stufensenken bestimmt wird. Die Unterscheidung konkaver, konvexer und Sattelcken, die bei der dreidimensionalen Implementierung von differentialgeometrischen Modellen erhebliche Probleme verursacht, tritt im Stufenätzmodell in dieser Form nicht auf. Dadurch müssen in der Simulation keine zusätzlichen, empirisch aufgestellten Regeln verwendet werden, die eine eindeutige Entwicklung der Ätzfront bei problematischen geometrischen Konfigurationen ermöglichen.

Ein wichtige Etappe auf dem Weg zur Umsetzung eines neuen Simulationsmodells besteht darin, die allgemein bekannten und in der Literatur ausführlich diskutierten Methoden zur Topographiesimulation zu evaluieren, ihre Anwendbarkeit auf die betrachtete Problemstellung zu bewerten und vor diesem Hintergrund schließlich ein Verfahren zur Simulation des orientierungsabhängigen Ätzprozesses zu entwickeln. Dazu war es zwingend erforderlich, sowohl die physikalisch-technischen Grundlagen des Prozesses zu dokumentieren, als auch auf spezielle Problemstellungen und Anforderungen bei der Herstellung mikrostrukturierter Bauelemente einzugehen und diese in einem neuen Simulationsansatz zu berücksichtigen.

Als Ergebnis dieser Überlegungen wurden Aspekte verschiedener Verfahren zur Topographiesimulation kombiniert und daraus ein neues, problemangepaßtes Simulationskonzept entwickelt.

Bei der numerischen Implementierung des Simulationsmodells wird eine zellbasierte Beschreibung des Ätzkörpers mit einer impliziten Darstellung seiner Oberfläche verwendet. Die Oberfläche des Kristalls wird mit Elementen verschiedenen Typs dargestellt, die das charakteristische Verhalten der realen Stufen während der Ätzung abbilden. Die Bewegung der Grenzfläche zwischen Kristall und Ätzlösung wird, wie bei Marker-String Verfahren, von charakteristischen Gleichungen gesteuert, die für jedes Oberflächenelement gelöst werden. Diese Gleichungen sind gewöhnliche Differentialgleichungen, deren Koeffizienten im Sinne der Transparenten Modellierung aus Teststrukturen bzw. aus kristallographischen Größen abgeleitet werden können. Zusätzlich werden weitere Attribute auf den Oberflächenelementen definiert, die typische Eigenschaften des Ätzprozesses abbilden, wie z.B. das Auftreffen der Stufen auf Stufensenken.

Wegen der vielen nach wie vor ungeklärten Fragen über die Natur des Ätzmechanismus sollte das Simulationskonzept, das in dieser Arbeit entworfen wurde, gezielt offen

gehalten und ausbaufähig gestaltet werden, so daß es mit der größtmöglichen Flexibilität mit neuen Modellen erweitert und auf besondere Anforderungen angepaßt werden kann.

Ebenso sollte die Möglichkeit berücksichtigt werden, nachträglich Effekte und Verfahren einbinden zu können, die wissenschaftlich noch nicht erschöpfend untersucht sind und daher nicht implementiert wurden. Als Beispiele wären zu nennen die Effekte der Randkeimbildung unter Maskenkanten, sowie das sogenannte „defect pinning“ und „step bunching“. Es wäre ebenfalls eine interessante Aufgabenstellung, den Einfluß von Lichteinstrahlung auf den Ätzprozeß oder das Ätzen unter extern aufgeprägten elektrischen Potentialen in ein Simulationswerkzeug zu implementieren.

Bei der Entwicklung des Simulationskonzeptes wurde den Bedürfnissen des rechnergestützten Entwurfes moderner mikrostrukturierter Bauelemente besonders Rechnung getragen.

Aufgrund dieser Überlegungen hat sich der zelluläre Ansatz als optimal geeignet erwiesen, da damit gerade lokale Effekte leicht modelliert und in den Algorithmus eingebaut werden können, ohne das zugrunde liegende Konzept in Frage stellen bzw. aufwendig überarbeiten zu müssen. Auch die Einbeziehung verschiedener Materialien mit unterschiedlichen Ätzeigenschaften und beliebiger Geometrie läßt sich mit einem zellbasierten Ansatz elegant realisieren. Diese Eigenschaften überwiegen die bekannten Nachteile zellulärer Verfahren, wie z.B. die ungenaue Approximation allgemein orientierter Oberflächen.

Mit der beschriebenen Implementierung konnten eine Reihe interessanter Ergebnisse erzielt werden, die im Folgenden noch einmal knapp zusammengefaßt sind.

Die typische Strukturbildung an einer einfachen konvexen Ecke wird von der Simulation korrekt wiedergegeben. Bereiche unterschiedlicher Oberflächenmorphologie (Bereiche vom Typ „A“ und „B“) können identifiziert werden, obwohl Effekte, die zu statistischen Unregelmäßigkeiten in den Strukturen führen, nicht implementiert sind.

Die Entwicklung von typischen Kompensationsstrukturen für konvexe Ecken, bei denen die Ätzfront durch komplexe Wechselwirkungen unterschiedlicher Bereiche bestimmt wird, kann in der Simulation richtig behandelt werden. Dadurch konnte eine weitere Validierung des Stufenätzmodells vorgenommen werden.

Auch die Unterätzung beliebig geformter Maskenkanten kann mit der Simulation grundsätzlich behandelt werden, ebenso wie die Perforation von Wafern. Die quantitative Beschreibung der Entwicklung der Ätzfront unter schrägen Kanten erfordert allerdings noch weitere Untersuchungen, ebenso wie dreidimensionale Effekte, die bei der Perforation von Wafern auftreten.

Die zelluläre Materialrepräsentation ermöglicht die einfache Einbeziehung von Bereichen mit unterschiedlichem Ätzverhalten, die nicht eben sein müssen, sondern eine beliebige dreidimensionale Geometrie aufweisen können. Konkret implementiert wurde ein inertes Material, das von der Ätzlösung nicht aufgelöst wird und zur Modellierung von Ätzstopps verwendet wird, sowie ein Material, das in basischen Lösungen isotrope Ätzeigenschaften aufweist, wie z.B. polykristallines Silizium. Damit können nicht nur

Polysiliziumschichten modelliert werden, sondern auch Bereiche, bei denen die monokristalline Struktur durch Bestrahlung mit Lasern gezielt geschädigt wurden, um ein verändertes Ätzverhalten zu erreichen.

Als Beispiel für reale, industriell gefertigte Bauelemente wurde die mikromechanische Herstellung eines Inertialsensors und eines mechanischen Filters für mikrofluidische Anwendungen numerisch simuliert. Diese Strukturen erfordern eine dreidimensionale Simulation mit Berücksichtigung der Perforation des Substrates und Einbeziehung verschiedener Materialien.

Das im Rahmen dieser Arbeit implementierte Simulationswerkzeug bewies hierbei, daß es die im ersten Kapitel formulierten Anforderungen für die Unterstützung des Entwurfs mikrostrukturierter Bauelemente voll erfüllt.

## Ausblick

Auch nach Abschluß dieser Arbeit bleiben noch Herausforderungen bestehen, die es zu meistern gilt, sowohl auf dem Gebiet der Simulationstechnik, als auch bei der weiteren Verfeinerung des Stufenätzmodells.

Besonders relevant erscheint die quantitative Untersuchung der Ätzraten schräger Kanten, die Übertragung des Stufenätzmodells auf andere Waferorientierungen (insbesondere  $\langle 110 \rangle$ -Wafer) sowie die detailliertere Untersuchung der rauhen Bereiche vom „A“-Typ. Auch der Zusammenhang zwischen der Tiefenätzrate und der Stufenätzrate der  $\{211\}$ -Ebenengruppe bedarf noch weiterer Forschungsarbeiten.

Die Optimierung des Simulationsprogramms im Hinblick auf die effiziente Nutzung rechen technischer Ressourcen konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr geleistet werden. So wäre es wünschenswert, eine adaptive Vernetzung einzuführen, mit der lediglich die oberflächennahen Bereiche des Simulationsgebietes fein aufgelöst werden und eine Gitterverfeinerung mit fortschreitender Ätzfront mitgeführt wird. Dadurch könnte der relativ hohe Speicherplatzbedarf, den zelluläre Verfahren mit sich bringen, gemindert werden, ohne daß auf eine feine Auflösung der Morphologie der Strukturen verzichtet werden muß.

Bauelemente, die in großen Stückzahlen in den einschlägigen Anwendungsbereichen eingesetzt werden, sind praktisch immer das Ergebnis eines Optimierungsprozesses, ohne den die geforderte Funktionalität, Robustheit und Zuverlässigkeit nicht erreicht werden kann.

Bei der Optimierung der Geometrie von Bauelementen, die mit naßchemischen Ätzprozessen hergestellt werden, treten einige grundsätzliche Probleme auf. Die direkte Bestimmung der Ätzmaske aus einer gegebenen bzw. vom Bauelemente-Designer gewünschten Struktur erscheint in der Praxis für allgemeine Fälle nicht durchführbar. Die Ursache ist darin begründet, daß diese Aufgabenstellung ein mathematisch

inkorrekt gestelltes Problem beinhaltet, denn die Existenz der Lösung ist nicht gesichert, die Eindeutigkeit der Lösung ist nicht gesichert und zudem besteht eine empfindliche Abhängigkeit der Lösung von den Parametern, die den Ätzprozeß bestimmen.

Eine Optimierung der geforderten Eigenschaften eines Bauelementes kann deshalb in der Praxis nur auf iterativem Wege erlangt werden. Dazu müssen aus dem Ergebnis der „Vorwärtssimulation“ vorab definierte Gütefunktionen extrahiert und bewertet werden, um daraus eine (automatisierte) Variation des Maskenlayouts nach festgelegten Strategien abzuleiten. Dieser Prozeß wird dann solange durchgeführt, bis die Abweichungen der Gütefunktionen von den Sollwerten ein (globales) Minimum erreichen und das Bauelement die Vorgaben bestmöglich erfüllt.

Ein zukunftsorientiertes Simulationskonzept muß deshalb darauf ausgelegt sein, die für Optimierungsalgorithmen nötigen Geometrieparameter und vom Anwender definierten Gütefunktionen extrahieren zu können. Diese Anforderungen wurden bei der Konzeption der hier dargestellten Simulationsmethode bereits berücksichtigt.

Mit Abschluß dieser Arbeit ist das Konzept der Umsetzung eines Stufenätzmodells und die Simulation mittels zellulärer Verfahren keineswegs erschöpfend und abschließend behandelt. Vielmehr ist nur ein Stand erreicht, bei dem ein neuer, vielversprechender Weg aufgezeigt wurde und der erste Abschnitt dieses Weges auch durchschritten wurde, dessen Ende aber noch nicht abzusehen ist. Vielfältige Möglichkeiten der Simulation wurden erst eröffnet und das Verständnis und die Modellierung der vielfältigen Facetten der orientierungsabhängigen Ätzprozesse sind noch lange nicht ausgeschöpft.



## 7 Literaturverzeichnis

- [1] M.M. Abu-Zeid, *Corner undercutting in anisotropically etched isolation contours*, J. Electrochem. Soc., 131, 9, 1984, S. 2138-2142.
- [2] M. Alavi, S. Büttgenbach, A. Schumacher, H.-J. Wagner, *Fabrication of microchannels by laser machining and anisotropic etching*, Sensors and Actuators A, 32 (1992), S. 299-302.
- [3] M. Alavi, S. Büttgenbach, A. Schumacher, H.-J. Wagner, *Laser machining of silicon for fabrication of new microstructures*, 6<sup>th</sup> Int. Conf. Solid-State Sensors and Actuators (Transducers '91), San Francisco, CA, USA, 1991, S. 512-515.
- [4] P. Allongue, H. Brune, H. Gerischer, *In situ observations of the etching of n-Si(111) in NaOH solutions*, Surf. Sci., 275, 1992, S. 414.
- [5] P. Allongue, *In-Situ Scanning-Tunneling-Microscopy of the Semiconductor Electrolyte Interface*, Jour. De Physique IV, 4, (1994) C1, S. 323-327.
- [6] P. Allongue, *Molecular Imaging and Local-Density of States Characterization at the Si(111)/NaOH Interface*, Phys. Rev. Lett., 77, (1996), 10, S.1986-1989.
- [7] P. Allongue, V. Costa-Kieling, H. Gerischer, *Etching of silicon in NaOH solutions 1. In situ scanning tunneling microscopic investigation of n-Si(111)*, J. Electrochem. Soc., 140, 1993, S. 1009-1018.
- [8] P. Allongue, V. Costa-Kieling, H. Gerischer, *Etching of silicon in NaOH solutions 2. Electrochemical studies of n-Si(111) and n-Si(100) and mechanism of the dissolution*, J. Electrochem. Soc., 140, 1993, S. 1018-1026.
- [9] E. Bär, J. Lorenz, *3-D Simulation of LPCVD Using Segment-Based Topography Discretization*, IEEE Trans. Semiconductor Manufacturing, 9, 1, 1996, S. 67-73.
- [10] I. Barycka, I. Zubel, *Silicon Anisotropic Etching in KOH-Isopropanol Etchant*, Sensors and Actuators A, 48, 3, (1995), S. 229-238.

- [11] I. Barycka, I. Zubel, *Silicon Etching in alkaline solutions I: The geometric description of figures developed under etching Si(100) in various solutions*, Sensors and Actuators A, 70, (1998), S. 250-259.
- [12] T. Baum, D.J. Schiffrin, *AFM Study of Surface Finish Improvement by Ultrasound in the Anisotropic Etching of Si <100> in KOH for Micromachining Applications*, J. of Micromech. Microeng. Vol. 7, 1997, S. 338-342.
- [13] T. Baum, *The physical chemistry of the anisotropic dissolution mechanism of single crystal silicon*, Thesis, Chemistry Dept., University of Liverpool, 1997.
- [14] K.E. Bean, *Anisotropic etching of silicon*, IEEE Transactions on Electron Devices, ED-25, (1978), 10, S 1185-1193.
- [15] K.E. Bean, W.R. Runyan, *Dielectric isolation: comprehensive current future*, J. Electrochem. Soc., 124, 1, 1977, S. 5C - 12C.
- [16] P. Bennema, *Spiral Growth and Surface Roughening: Developments since Burton, Cabrera, and Frank*, J Cryst. Growth, Vol 69, 1984, S. 182-197.
- [17] Y. K. Bhatnagar, A. Nathan, *On pyramidal protrusions in anisotropic etching of (100) silicon*, Sensors and Actuators A, 36 (1993), 3, S. 233-240.
- [18] A. Brahim-Bounab, J. Y. Amaudrut, C. R. Tellier, *Dissolution slowness surfaces of cubic crystals*, Journal Mat. Science, 26, 1991, S. 5585-5607.
- [19] P.M.M.C. Bressers, J.J. Kelly, J.G.E. Gardeniers, M. Elwenspoek, *Surface-Morphology of p-Type (100)Silicon Etched in Aqueous Alkaline-Solution*, J. Electrochem. Soc., 143, (1996), 5, S. 1744-1750.
- [20] P.M.M.C. Bressers, *Silicon Etching - An Electrochemical Study*, Thesis, University of Utrecht, Netherlands, 1998.
- [21] R.A. Buser, N. F. De Rooij, *ASEP: A CAD Program for Silicon Anisotropic Etching*, Sensors and Actuators A, 28 (1991), S. 71-78.
- [22] R.A. Buser, N.F. de Rooij, *From the mask layout to the performance of a device: a complete CAD system for micromachined monocrystalline silicon structures*, MME '90, Micromechanics Europe 1990, 2<sup>nd</sup> Workshop on Micromachining, Micromechanics and Microsystems, Berlin, 1990, S. 7-13.
- [23] S. Bütetfisch, A. Schoft, S. Büttgenbach, *Three-Axes Monolithic Silicon Low-g Accelerometer*, Jour. of Microelectromechanical Systems, Vol. 9, No. 4, (2000), S. 551-556.



- [24] S. Büttgenbach, *Mikromechanik*, Teubner Verlag, Stuttgart, 1991.
- [25] N. Cabrera, D. A. Vermilyea, *The growth of crystals from solution*, in: Growth and perfection of crystals, Wiley, New York, 1958, S. 393-410.
- [26] O. Cambon, M. Deleuze, J.P. Michel, J.P. Aubry, A. Goiffon, E. Philippot, *Controlled Dissolution of Quartz Material .2. Quartz Chemical Etching Applied to Blanks Industrial Manufacturing*, J. Pysique IV , 4, C2, 1994, S. 85-91.
- [27] H. Camon et al., *Micromachining: First Development of An Atomic Scale Chemical Etching Simulator*, MME '90, Micromechanics Europe 1990, 2<sup>nd</sup> Workshop on Micromachining, Micromechanics and Microsystems, Berlin, 1990, S. 13-19.
- [28] H. Camon, M.A. Gue, *Modelling of anisotropic etching in silicon-based sensor application*, Sensors and Actuators A, 33 (1992), S. 103-105.
- [29] H. Camon, Z. Moktadir, *Atomic scale simulation of silicon etched in aqueous KOH solution*, Sensors and Actuators A, 46-47 (1995), S. 27-29.
- [30] S.A. Campbell, D.J. Schiffrin, P.J. Tufton, *Chemical and electrochemical anisotropic dissolution of silicon in ethylenediamine + pyrocatechol + water media*, J. Electroanal. Chem., 344, 1993, S. 211-233.
- [31] S.A. Campbell, K. Cooper, L. Dixon, R. Earwaker, S.N. Port, D.J. Schiffrin, *Inhibition of pyramid formation in the etching of Si p<100> in aqueous potassium hydroxide-isopropanol*, J. Micromech. Microeng., 5, (1995), S. 209-218.
- [32] G.F. Cerofolini, L. Meda, *Chemistry at silicon crystalline surfaces*, Appl. Surf. Sci., 89, (1995), S. 351-360.
- [33] M. Chauhoud, H.-H. Wehmann, A. Schlachetzki, *Anisotropic-etching simulation on InP and Si*, Sensors and Actuators A, 56 (1996), S. 251-254.
- [34] J. Chen, L. Liu, Z. Li, Z. Tan, Q. Jiang, H. Fang, Y. Xu, Y. Liu, *Study of anisotropic etching of (100) Si with ultrasonic agitation*, Sensors and Actuators A, 96 (2002), S. 152-156.
- [35] A.J. Chorin, *Flame Advection and Propagating Algorithms*, J. of Comp. Phys., 35, 1980, S. 1-11.
- [36] S.D. Collins, *Etch Stop Techniques for Micromachining*, J. Electrochem. Soc., 144, 6, 1997, S. 2242-2262.

- [37] D. Craven, K. Yu, T. Pandhumsoporn, *Etching Technology for Through-the-Wafer Silicon Etching*, in: Micromachining and Microfabrication Process Technology (Proceedings of the SPIE), Austin, Tex., USA, 1995, S. 259-263.
- [38] J.S. Danel, G. Delapierre, *Anisotropic crystal etching: A simulation program*, Sensors and Actuators A, 31 (1992), S. 267-274.
- [39] A. Dehé, D. Pavlidis, K. Hong, H. Hartnagel, *InGaAs/InP Thermoelectric Infrared Sensor Utilizing Surface Bulk Micromachining Technology*, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 44, No. 7, 1997, S. 1052-1059.
- [40] G. Delapierre, *Micro-Machining: a survey of the most commonly used processes*, Sensors and Actuators A, 17 (1989), S. 139-143.
- [41] J. Dziuban, R. Walczak, *Microwave enhanced wet anisotropic etching of silicon utilizing a memory effect of KOH activation – a remote E2MSi process*, Proc. of 16<sup>th</sup> European Conference on Solid-State Transducers (EUROSENSORS XVI), Prague, Czech Republic, 2002, S. 237-238.
- [42] M. Elwenspoek, J.P. van der Eerden, *Kinetic Roughening and Step Free Energy in the Solid-on-Solid Model and on Naphtalene Crystals*, J. Phys., A 20, (1987), S. 669-678.
- [43] M. Elwenspoek, *On the mechanism of anisotropic etching of silicon*, J. Electrochem. Soc., 140, (1993), 7, S. 2075-2080.
- [44] M. Elwenspoek, *Stationary hillocks on etching silicon*, MME '98, Micromechanics Europe 1998, 7<sup>th</sup> Workshop on Micromachining, Micromechanics and Microsystems, Ulvik, Norway, (1998), S. 70-73.
- [45] F.C. Frank, *On the kinematik theory of crystal growth and dissolution processes* in: Growth and perfection of crystals, Wiley, New York, 1958, S. 411-420.
- [46] J. Frühauf, *A Simulation Tool for Orientation-Dependent Etching*, J. Micromech. and Microeng., 3, 1993, S. 113-115.
- [47] J. Frühauf, B. Hannemann, *Anisotropic multi-step etch process of silicon*, J. Micromech. and Microeng., 7, 1997, S. 137-140.
- [48] J. Frühauf, K. Trautmann, J. Wittig, D. Zielke, *Thermomechanical Modeling of an Actuated Micromirror*, J. Micromech. and Microeng., 3, 1993, S. 113-115.
- [49] J. Frühauf, *Kompensation der Unterätzung konvexer Maskenecken*, Preprint Nr. 130, 4. Jg., TU Chemnitz, 1990.

- [50] M. Fujinaga, N. Kotani, *3-D Topography Simulator (3-D MULSS) Based on a Physical Description of Material Topography*, IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 44, No. 2, 1997, S. 226-238.
- [51] GEMAC (Gesellschaft für Mikroelektronikanwendungen Chemnitz mbH), *Shape- and Funktional-Elements of Bulk-Silicon-Microtechnique*, 1999, <http://www.gemac-chemnitz.de>
- [52] GEMAC (Gesellschaft für Mikroelektronikanwendungen Chemnitz mbH), *SIMODE*, <http://www.gemac-chemnitz.de>
- [53] H. Gerischer, P. Allongue, V.C. Kieling, *The mechanism of the anodic-oxidation of silicon in Acidic Fluoride Solutions Revisited*
- [54] A.F. Ghoniem, A.J. Chorin, A.K. Oppenheim, *Numerical Modeling of Turbulent Flow in a Combustion Tunnel*, Philos. Trans. Roy. Soc. London A., 304, 1982, S. 303-325.
- [55] O.J. Glembocki, E.D. Palik, G.R. de Guel, D.L. Kendall, *Hydration model for the molarity dependence of etch rate of Si in aqueous alkali hydroxides*, J. Electrochem. Soc., 138, 4, 1991, S. 1055-1063.
- [56] T.W. Harris, *Chemical Milling*, Oxford: Clarendon Press, 1976.
- [57] U. Heim, *A new approach for the determination of the shape of etched devives*, J. Micromech. and Microeng., 3, 1993, S. 116-117.
- [58] U. Heim, *Untersuchungen zur Simulation des naßchemisch anisotropen Ätzens von Einkristallen*, Dissertation, Technische Universität Ilmenau, 1996.
- [59] U. Heim, *Some aspects of the mechanism of the wet anisotropic etching of crystals and their consequences for a process simulation*, Sensors and Actuators A, 64 (1998), S. 191-196.
- [60] J.J. Helmsen, *A Comparison of Three-Dimensional Photolithography Development Methods*, Ph.D. Dissertation, EECS, University of California, Berkeley, CA, 1994.
- [61] E. Herr, H. Baltes, *KOH etching of high-index crystal planes in silicon*, Sensors and Actuators A, 31 (1992), S. 283-287.
- [62] A. Heuberger, *Mikromechanik*, Springer Verlag, Berlin, 1989.
- [63] A. Heuberger, *Mikromechanik: Mikrofertigung mit Methoden der Halbleitertechnologie*, Springer Verlag, Berlin, 1991.

- [64] C.W. Hirt, B.D. Nicholls, *Volume of Fluid (VOF) Method for Dynamics of Free Boundaries*, J. of Comp. Phys., 39, 1981, S. 201-225.
- [65] K. Hjort, J-A. Schweiz, B. Hök, Proc. of MEMS 90, (1990), S. 73.
- [66] A. Horn, H. Schröder, E. Obermeier, G. Wachutka, *Simulation of Orientation-Dependent Etching of Silicon Using a New Step Flow Model of 3D Structuring*, Proc. of 3<sup>rd</sup> Int. Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, Sensors and Actuators (MSM-2000), San Diego, CA, USA, 2000, S. 63-66.
- [67] A. Horn, G. Wachutka, *Microscopic and Phenomenological Approaches to the Numerical Modeling of Anisotropic Wet Etching: Current Status and Challenges*, Proc. of 1<sup>st</sup> International Workshop on Physical Chemistry of Wet Etching of Silicon, Holten, Netherlands, 1998, S. 49.
- [68] A. Horn, G. Wachutka, *Modeling of Orientation-Dependent Wet Etching of Silicon: Application to Complex MEMS-Structures*, Proc. of 16<sup>th</sup> European Conference on Solid State Transducers, „Eurosensors XVI“, Prague, Czech Republic, 2002, S. 115-116.
- [69] A. Horn, F. Wittmann, G. Wachutka, *Realistic Step-Flow Model for Orientation Dependent Wet Chemical Etching Implemented in a Modular TCAD Environment*, Sensors and Materials, Vol. 13, No. 6 (2001), S. 315-323.
- [70] S.M. Hu, *Dislocation propagation and emitter edge defects in silicon wafers*, J. Appl. Phys., 47, (1976), 9, S. 4098-4106.
- [71] S.M. Hu, *Stress-related problems in silicon technology*, J. Appl. Phys., 70, (1991), 6, R53-R79.
- [72] Y.C. Huang, J. Flidr, T. A. Newton, M. A. Hines, *Effects of dynamic step-step repulsion and autocatalysis on the morphology of etched Si(111) surfaces*, Phys. Rev. Lett., 80, 20, 1998, S. 4462-4465.
- [73] C. Huang, K. Najafi, *Fabrication of Ultrathin  $p^{++}$  Silicon Microstructures Using Ion Implantation and Boron Etch-Stop*, J. of Microelectromechanical Systems, Vol. 10, No. 4, 2001, S. 532-537.
- [74] T.J. Hubbard, E.K. Antonsson, *Cellular Automata Modeling in MEMS Design*, Sensors and Materials, Vol. 9, No. 7, (1997), S. 437-448.
- [75] T.J. Hubbard, K.A. Erik, *Emergent faces on crystal etching*, J. Microelectromechanical Systems, Vol. 3, No. 1, (1994), S. 19-28.

- [76] IntelliSense Corporation, 16 Upton Drive, Wilmington, MA 01887 (USA), <http://www.intellisense.com/productsservice/products/anise.asp>
- [77] R. Iosub, C. Moldovan, M. Modreanu, *Silicon membranes fabrication by wet anisotropic etching*, Sensors and Actuators A, 99 (2002), S. 104-111.
- [78] S. Isomae, *Stress distributions in silicon crystal substrates with thin films*, J. Appl. Phys., 52, (1980), 4, S. 2782-2791.
- [79] S. Isomae, *Stress in silicon at Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub>-film edges and viscoelastic behavior of SiO<sub>2</sub> films*, J. Appl. Phys., 57, (1984), 2, S. 216-223.
- [80] R.A. Jaccodine, *Use modified free energy theorems to predict equilibrium growing and etching shapes*, J. Appl. Phys. , 33, 8, 1962, S. 2643-2647.
- [81] K.A. Jackson, *A Review of the Fundamental Aspects of Crystal Growth*, Crystal Growth, Boston, 1966, S. 17-24.
- [82] C. Ju, J. Hesketh, *Measurements of the anisotropic etching of a single crystal silicon sphere in aqueous cesium hydroxide*, Sensors and Actuators A, 33 (1992), S. 191-196.
- [83] V. Karanassios, G. Mew, *Anisotropic Wet Chemical Etching of Si for Chemical Analysis Applications*, Sensors and Materials, Vol. 9, No. 7, (1997), S. 395-416.
- [84] J. Kasparin, M. Elwenspoek, P. Allongue, *Digital computation and in situ RTM approach of silicon anisotropic etching*, J. Surf. Sci., 388, (1997), S. 50-62.
- [85] D.L. Kendall, *Vertical etching of silicon at very high aspect ratios*, Ann Rev. Mater. Sci., 9, (1997), S. 373-403.
- [86] D.L. Kendall, *A new theory for the anisotropic etching of silicon and some underdeveloped chemical micromachining concepts*, Vac. Sci. Technol., Part A Vacuum surfaces and films , 8, 4, 1990, S. 3598-3605.
- [87] C. Kittel, *Introduction into Solid State Physics*, J. Wiley and Sons, New York, 1996.
- [88] G. Kittilsland , G. Stemme, B. Norden, Sensors and Actuators, A21-A23, (1990), S. 904.

- [89] A. Koide, K. Sato, S. Tanaka, *Simulation of two-dimensional etch profile of silicon during orientation-dependent anisotropic etching*, Proc. IEEE Micro Electro Mechanical Systems, MEMS, Nara, Japan, 1992, S. 216-220.
- [90] T.A. Kwa, P.J. French, R.F. Wolfenbüttel, *Anisotropically etched Silicon mirrors for optical applications*, J. Electrochem. Soc., 142, (1995), 4, S. 1226-1233.
- [91] L.M. Landsberger, *On hillock generation during anisotropic etching of Si in TMAH*, J. Microelectromechanical Systems, 5, (1996), 2, S. 106-116.
- [92] R. Leancu, N. Moldovan, L. Csepregi, W. Lang, *Anisotropic etching of germanium*, Sensors and Actuators A, 46-47 (1995) S. 35-37.
- [93] T. Leblois, C.R. Tellier, T. Messaoudi, *Chemical etching of Y-rotated quartz plates: experiments and theoretical approach*, Sensors and Actuators A, 61 (1997) S. 405-414.
- [94] D.B. Lee, *Anisotropic etching of silicon*, J Appl. Phys., 40, (1969), 11, S 4569.
- [95] S. Linder, H. Baltes, P. Roggwiler, J. Voboril, *High-Index-Plane Etch Rates and Micromechanics of Power Devices*, MME '90, Micromechanics Europe 1990, 2<sup>nd</sup> Workshop on Micromachining, Micromechanics and Microsystems, Berlin, 26-27.11.1990, Tech. Digest, S. 226-228.
- [96] H. Löwe, P. Keppel, D. Zach, *Halbleiterätzverfahren*, Akademie Verlag Berlin, Berlin, 1990, ISBN 3-05-500706-9.
- [97] J. Marchetti, Y. He, O. Than, S. Akkaraju, *Efficient process development for bulk silicon etching using cellular automate simulation techniques*, SPIE Conference on Micromachined Devices and Components IV, Santa Clara, (1998), SPIE Vol. 3514, S. 287-295.
- [98] G.K. Mayer, H.L. Offereins, H. Sandmeier, K. Kühl, *Fabrication of Non-Underetched Convex Corners in Anisotropic Etching of 100 Silicon in Aqueous KOH with Respect to Novel Micromechanic Elements*, J. Electrochem. Soc, 137, 12, 1990, S. 3947-395.
- [99] M. Mehregany, S.D. Senturia, *Anisotropic Etching of Silicon in Hydrazine*, Sensors and Actuators, A, 13, (1988), S. 375-390.
- [100] W. Noh, P. Woodward, *A Simple Line Interface Calculation*, Proceedings of Fifth Int. Conference on Fluid Dynamics, Eds, A.I. Van de Vooran, P.J. Zandberger, Springer Verlag, 1976.

- [101] P.L. O'Sullivan, F.H. Baumann, G.H. Gilmer, *Numerical Simulations of Sputter Deposition and Etching in Trenches using the Level Set Technique*, Proc. 2<sup>nd</sup> Int Conf. On Modeling and Simulation of Microsystems (MSM), San Juan, Puerto Rico, USA, 1999, S. 449-451.
- [102] S. Osher, J.A. Sethian, *Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulation*, J. of Com. Phys., 79, 1988, S. 12-49.
- [103] S. Osher, R. Fedkiw, *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, Springer-Verlag New York, 2003.
- [104] E.D. Palik, F. H. Gray, P. B. Klein, *A Raman study of etching silicon in aqueous KOH*, J. Electrochem. Soc., 130, (1983), 4, S. 956-959.
- [105] E.D. Palik, O. J Glembocki, J.R. Heard, *Study of bias-dependent etching of Si in aqueous KOH*, J. Electrochem. Soc., 134, (1987), S. 404-409.
- [106] E.D. Palik, V.M. Bermudez, O.J. Glembocki, *Ellipsometric study of orientation dependent etching of silicon in aqueous KOH*, J. Electrochem. Soc. , 132, (1985), S. 871.
- [107] E.D. Palik, O.J. Glembocki, I. Heard, P.S. BurnoL.Tenerez, *Etching roughness for(100) silicon surfaces in aqueous KOH*, J. Appl. Phys., 70, (1991), Vol. 6, S. 3291-3300.
- [108] K.E. Petersen, *Silicon as a mechanical material*, Proc. of the IEEE, 70 (1982), S. 420-457.
- [109] G.J. Pietsch, U. Kohler, M. Henzler, *Anisotropic Etching Versus Interaction of Atomic Steps – Scanning-Tunneling-Microscopy Observations on HF/NH<sub>4</sub>F-Treated Si(111)*, J. Appl. Phys., 73, (1993), 10, S. 4797-4807.
- [110] E.G. Puckett, *A Volume-of-Fluid Interface Tracking Algorithm with Applications to Computing Shock Wave Refraction*, Proceedings of the 4<sup>th</sup> Int. Symposium on Computational Fluid Dynamics, Davis, California, 1991.
- [111] B. Puers, E. Peeters, W. Sansen, *Compensation structures to prevent convex corner undercutting*, MME '90, Micromechanics Europe 1990, 2<sup>nd</sup> Workshop on Micromachining, Micromechanics and Microsystems, Berlin, 1990, S. 226-228.

- [112] W. Pyka, R. Martins, S. Selberherr, *Efficient Algorithms for Three-Dimensional Etching and Deposition Simulation*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices (Eds. K. DeMeyer, S. Biesemans), Leuven, Belgium Springer, 1998, S. 16-19.
- [113] W. Pyka, *Feature Scale Modeling for Etching and Deposition Processes in Semiconductor Manufacturing*, Ph.D. Thesis, Technical University Vienna, 2000.
- [114] J. Rappich, H.J. Lewerenz, H. Gerischer, *The surface of Si(111) during etching in NaOH studied by FTIR Spectroscopy in the ATR Technique*, J. Electrochem. Soc., 140, (1993), 12, S. L187-L189.
- [115] H. Robbins, B. Schwartz, *Chemical Etching of Silicon-I: The System HF, HNO<sub>3</sub>, and H<sub>2</sub>O*, J. Electrochem. Soc. Vol. 106, (1959), S. 505-508.
- [116] T.J. Rodgers, W.R. Hiltbold, J.W. Zimmer, G. Marr, J.D. Trotter, *VMOS ROM*, IEEE J. Solid-State Circuits, vol. SC-11, 1976, S. 614-622.
- [117] H. Sandmeier, H.L. Offereins, K. Köhl, W. Lang, *Corner compensation techniques in anisotropic etching of (100) silicon using aqueous KOH*, Transducers '91, 1991, S. 456-459.
- [118] K. Sato, *Change in Orientation-Dependent Etching Properties of Single-Crystal Silicon Caused by a Surfactant Added to TMAH*, Proc. of 2<sup>nd</sup> International Workshop on Physical Chemistry of Wet Etching of Silicon, Toulouse, France, (2000).
- [119] K. Sato, *Development of an Orientation-Dependent Anisotropic Etching Simulation System MICROCAD*, Electronics and Communications in Japan, Part 2, Vol. 83, No.4, (2000).
- [120] E.W. Scheckler, A.R. Neureuther, *Models and Algorithms for Three-Dimensional Topography Simulation with SAMPLE-3D*, IEEE Trans. Computer-Aided Design, 13, 2, 1994, S. 219-230.
- [121] C. Schibe, E. Obermeier, *Compensation corner undercutting in anisotropic etching of (100)-Silicon for chip separation*, J. Micromech. and Microeng., 5, (1995), S. 109-111.
- [122] U. Schnakenberg, *IC-Prozeßkompatible anisotrop wirkende Ätzlösungen zur Herstellung integrierter Mikrosysteme in Silizium*, Dissertation, TU Berlin, 1993.



- [123] U. Schnakenberg, W. Benecke, B. Löchel, *NH<sub>4</sub>OH for silicon Micromachining*, Sensors and Actuators A, 21 (1990) S. 1031-1035.
- [124] H. Schröder, E. Obermeier, *A new model for Si{100} convex corner undercutting in anisotropic KOH etching*, J. Micromech. and Microeng., 10, 2000, S. 163-170.
- [125] H. Schröder, E. Obermeier, A. Steckenborn, *Effects of the etchmask properties on the anisotropy ratio in anisotropic etching of {100} silicon in aqueous KOH*, J. Micromech. and Microeng., 8, 1998, S. 99-103.
- [126] H. Schröder, *Modell des anisotropen Ätzens von einkristallinem Silizium in wässrigen KOH-Lösungen*, Dissertation TU Berlin, 2000.
- [127] H. Schröder, E. Obermeier, A. Horn, G. Wachutka, *Convex Corner Undercutting of {100} Silicon in Anisotropic KOH Etching: The New Step-Flow Model of 3-D Structuring and First Simulation Results*, Journal of Microelectromechanical Systems, Vol. 10 (2001), S. 88-97.
- [128] N. Schwesinger, persönliche Mitteilungen.
- [129] H. Seidel, *Der Mechanismus des Siliziumätzens in Alkalischen Lösungen*, Dissertation, FU Berlin, 1986.
- [130] H. Seidel, H. Riedel, R. Kolbeck, G. Mück, W. Kupke, M. Königer, *Capacitive Silicon Accelerometer with High Symmetrical Design*, Sensors and Actuators A21-A23, (1990), S. 312-315.
- [131] H. Seidel, L. Csepregi, A. Heuberger, H. Baumgärtel, *Anisotropic etching of crystalline silicon in alkaline solutions I. Orientation dependence and behavior of passivation layers*, J. Electrochem. Soc., 137, (1990), 11, S. 3612-3626.
- [132] H. Seidel, L. Csepregi, A. Heuberger, H. Baumgärtel, *Anisotropic etching of crystalline silicon in alkaline solutions II. Influence of dopants*, J. Electrochem. Soc., 137, (1990), 11, S. 3626-3632.
- [133] H. Seidel, L. Csepregi, *Three-dimensional structuring of silicon for sensor applications*, Sensors and Actuators, 4 (1983), S. 455-463.
- [134] S.D. Senturia, *Mechanical properties of microsensor materials*, Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 239, (1992).
- [135] C.H. Séquin, *Computer simulation of anisotropic crystal etching*, Sensors and Actuators A, 34 (1992), S. 225-241.

- [136] J.A. Sethian, *An Analysis of Flame Propagation*, Ph.D. Dissertation, Dept. of Mathematics, University of California, Berkeley, CA, 1982.
- [137] J.A. Sethian, *Curvature and the Evolution of Fronts*, Comm. In Math. Phys., 101, 1987, S. 487-499.
- [138] J.A. Sethian, D. Adalsteinsson, *An Overview of Level Set Methods for Etching, Deposition and Lithography Development*, IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, 10, 1997, S. 167-184.
- [139] J.A. Sethian, *Turbulent Combustion in Open and Closed Vessels*, J. of Comp. Phys., 54, S. 425-456, 1984.
- [140] D.W. Shaw, *Morphology analysis in localized crystal-growth and dissolution*, J. Crystal Growth, 47, 1979, S. 509-517.
- [141] J.N. Shepherd, *Prediction of anisotropic etching in (100) silicon*, MME '90, Micromechanics Europe 1990, 2<sup>nd</sup> Workshop on Micromachining, Micromechanics and Microsystems, Berlin, 1990, S. 241-246.
- [142] M. Shikida, K. Sato, K. Tokoro, D. Uchikawa, *Differences in anisotropic etching properties of KOH and TMAH solutions*, Sensors and Actuators A, 80 (2000), S. 179-188.
- [143] Spektrum der Wissenschaft, Sonderheft: Dossier 4 "Mikrosystemtechnik", Spektrum Verlagsgesellschaft mbH, Heidelberg, 1996.
- [144] E. Steinsland, T. Finstad, A. Hanneborg, *Etch rates of (100), (111) and (110) single-crystal silicon in TMAH measured in situ by laser reflectance interferometry*, Sensors and Actuators A, 86 (2000), S. 73-80.
- [145] E. Strasser, G. Schrom, K. Wimmer, S. Selberherr, *Accurate Simulation of Pattern Transfer Processes using Minkowski Operations*, IEICE Trans. Electron., E77-C, 2, 1994, S. 92-97.
- [146] E. Strasser, S. Selberherr, *A General Simulation Method for Etching and Deposition Processes*, Proceedings, Proc. Simulation of Semiconductor Devices and Processes, Vienna, 1993, S. 357-360.
- [147] E. Strasser, S. Selberherr, *Algorithms and Models for Cellular Based Topography Simulation*, IEEE Trans. On Computer Aided Design of Integrated Circuits and Systems, 14, 9, S. 1104-1114, 1995

- [148] O. Tabata, *Anisotropic Etching of Si in TMAH Solutions*, Proc. of 2<sup>nd</sup> International Workshop on Physical Chemistry of Wet Etching of Silicon, Toulouse, France, (2000)
- [149] M. Tamura, H. Sunami, *Generation of dislocations induced by LPCVD-deposited Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> films on silicon*, Jap. J. Appl. Phys., 11, (1972), 8, S. 1097-1105.
- [150] C.R. Tellier, F. Jouffroy, *Orientation effects in chemical etching of quartz plates*, Journal of Material Science, vol. 18, (1983), S. 3621-2632.
- [151] O. Than, S. Büttgenbach, *Simulation of anisotropic chemical etching of crystalline silicon using a cellular-automata model*, Sensors and Actuators A, 45 (1994), S. 85-89.
- [152] K.K.H. Tho, A.R. Neureuther, E.W. Scheckler, *Algorithms for Simulation of Three-Dimensional Etching*, IEEE Trans. Computer-Aided Design, 13, 5, 1994, S. 616-624.
- [153] T. Thurgate, *Segment-Based Etch Algorithm and Modeling*, IEEE Trans. Comp.-Aided Design 10, 1991, S. 1101-1109.
- [154] K.K.H. Toh, A. R. Neureuther, E. W. Scheckler, *Algorithms for Simulation of Three-Dimensional Etching*, IEEE Trans. Comp.-Aided Design 13, 1994, S. 616-624.
- [155] H.K. Trieu, W. Mokwa, *A generalized model describing corner undercutting by the experimental analysis of TMAH/IPA*, MME '97, Micromechanics Europe 1997, 8<sup>th</sup> Workshop on Micromachining, Microelectronics and Microsystems, Southamton, (1997), S 51-54.
- [156] H. Ubara, T. Imura, A. Hiraki, *Formation of Si-H bonds on the surface of microcrystalline silicon covered with SiO<sub>x</sub> by HF treatment*, Solid State Communications, 50, (1984), 7, S 673-675.
- [157] A. Uhler, *Electrolytic Shaping of Germanium an Silicon*, Bell Syst. Tech. J., vol 35, (1956), S. 333-347.
- [158] P. van der Putte, W. J. P. van Enckevort, L.J. Giling, J. Bloem, *Surface morphology of HCl etched silicon wafers - II. Bunch formation*, J. Crystal Growth, 43, 1978, S. 659-675.
- [159] W.J.P. van Enckevort, L. J. Giling, *The influence of adsorption and step reconstruction on the growth and etching vectors of silicon (111)*, J. Crystal Growth, 45, 1978, S. 90-96.

- [160] D.G. Vlachos, L.D. Schmitt, R. Aris, *Kinetic of faceting of crystals in growth, etching and equilibrium*, Phys. Rev. B., 47, (1993), 9, S 4896-4909.
- [161] R. Voß, *Der Einfluß von elektrochemischen Potentialen und Licht auf das anisotrope Ätzen von Silizium*, Dissertation, Freie Universität Berlin, 1992.
- [162] G. Wachutka, *Tailored Modeling of Miniaturized Electrothermomechanical Systems Using Thermodynamic Methods*, in: Micromechanical Sensors, Actuators, and Systems, Eds.: D. Cho, J. P. Peterson, A. P. Pisano, C. Friedrich, DSC-40, ASME, New York, 1992, S. 183-197.
- [163] G. Wachutka, *Tailored Modeling: a way to the "virtual microtransducer fab"?*, Sensors and Actuators A, 46-47 (1995), S. 603-612.
- [164] H.A. Waggener, R.C. Kragness, A.L. Tyler, *Anisotropic Etching for Forming Isolation Slots in Silicon Beam Leded Integrated Circuits*, Technical Digest: IEEE International Electron Devices Meeting, Washington, D.C., 1967, S. 68.
- [165] D.F. Weihrauch, *Correlation of the anisotropic etching of single-crystal silicon spheres and wafers*, J. Appl. Phys., 46, 1975, S. 1478-1483.
- [166] R.A. Wind, M. A. Hines, *Macroscopic etch anisotropies and microscopic reaction mechanisms: A micromachined structure for the rapid assay of etchant anisotropy*, Surf. Sci. 460, 21 (2000).
- [167] S. Wolfram, *Universality and complexity in cellular automata*, Physica, 10D, (1984), S. 1-35.
- [168] Workshop on Physical Chemistry of Wet Etching of Silicon, PCWES, Holten, Netherlands, 1998.
- [169] X. Wu, W.H. Ko, *Compensating corner undercutting in anisotropic etching of 100 silicon*, Sensors and Actuators, 18 (1989), S. 207-215.
- [170] G. Wulff, *Zur Frage der Geschwindigkeit des Wachstums und der Auflösung von Kristallflächen*, Z. Krist., 34, 1901, S. 449-530.
- [171] J.D. Yam, A.J.J. Santiago, J.N. Zemel, *An investigation of anisotropic etching of 100 silicon using cesium hydroxide*, Sensors and Actuators A, 29 (1991), 2, S. 121-126.
- [172] S. Yamamoto, T. Kure, M. Ohgo, T. Matsuzama, S. Tachi, H. Sunami, *A Two-Dimensional Etching Profile Simulator: ESPRIT*, IEEE Trans. Computer-Aided Design, CAD-6, 3, 1987, S. 417-422.

- 
- [173] Y.N. Yang, E.D. Willams, *The role of carbon in the faceting of silicon on the (111) to (001) azimuth*, J. Vac. Sci. Technol., A8, (1996), 3, S. 2481-2488.
- [174] D. Zielke, J. Fruehauf, *Determination of Rates for Orientation- Dependent Etching*, Sensors and Actuators A, 48 (1995), 2, S. 151-156.
- [175] I. Zubel, M. Kramkowska, *The effect of alcohol additives on etching characteristics in KOH solutions*, Sensors and Actuators A, 101 (2002), S. 255-261.



## **Mein Dank...**

... gilt allen, die durch ihre großartige Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

An erster Stelle bedanke ich mich herzlich bei meinem Doktorvater Prof. Dr. G. Wachutka, der mir die Bearbeitung dieses herausfordernden Themengebietes ermöglichte, für die Bereitstellung einer guten Infrastruktur sorgte und mich fachlich und mental mit großer Erfahrung und wertvollem praktischem Rat jederzeit tatkräftig unterstützt hat. Herrn Prof. Dr. H. Seidel danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit, die Übernahme des Zweitgutachtens, sowie für wertvolle persönliche Gespräche. Nicht zuletzt haben mich seine umfangreichen Arbeiten zu orientierungsabhängigen Ätzprozessen lange Zeit begleitet.

Ein besonders herzlicher Dank gebührt allen ehemaligen und aktiven Mitarbeitern des Lehrstuhls für Technische Elektrophysik. Die familiäre Atmosphäre hat mir über lange Jahre eine gute und wertvolle Zeit bereitet.

Einen besonders großen Dank möchte ich Herrn Dr. W. Pyka und Herrn Prof. Dr. S. Selberherr vom Institut für Mikroelektronik der Technischen Universität Wien aussprechen, die mir mit umfangreichem Know-How und nützlichen Software-Werkzeugen den Einstieg in die Topographiesimulation sehr erleichtert haben.

Ebenso bedanke ich mich herzlichst bei Herrn Dr. H. Schröder für eine hervorragende Zusammenarbeit. Von ihm habe ich sehr viel über Ätzprozesse und das „Drumherum“ gelernt.

Ein großes Dankeschön möchte ich allen Kollegen aussprechen, mit denen ich fachlich enger zusammenarbeiten durfte. Im Besonderen sind zu nennen Franz Wittmann, Frank Hille, Basam Elia, Peter Meßerer und Gabriele Schrag.

Zu allerletzt noch ein Dank an meine Freunde und meine Familie für die großartige Unterstützung und die wertvolle Zeit, die wir gemeinsam verbringen durften.