

Земнов Кирилл Эдуардович

аспирант

Чащин Евгений Дмитриевич

аспирант

Белова Ирина Михайловна

канд. физ.-мат. наук, доцент

ФГБОУ ВО «Московский политехнический университет»

г. Москва

ОБЗОР МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ТРАВЛЕНИЯ

Аннотация: как отмечают авторы данной статьи, продвижение фронта травления представляет собой в основном геометрическую задачу. Выбор способа описания эволюции определяет точность аппроксимации профиля и затраты машинного времени. Для моделирования используются три основных способа и их модификации: метод струны; метод характеристик; метод ячеек.

Ключевые слова: метод струны, метод характеристик, метод ячеек, моделирование травления.

Травление – это группа технологических приёмов для управляемого удаления поверхностного слоя материала с заготовки под действием специально подбираемых химических реагентов. Ряд способов травления предусматривает активацию травящих реагентов посредством других физических явлений, например, наложением внешнего электрического поля при электрохимическом травлении, ионизацией атомов и молекул реагентов при ионно-плазменном травлении и т. п.

Продвижение фронта травления представляет собой в основном геометрическую задачу. Выбор способа описания эволюции определяет точность аппроксимации профиля и затраты машинного времени. Для моделирования используются три основных способа и их модификации: 1) метод струны; 2) метод характеристик; 3) метод ячеек. Рассмотрим каждый из этих способов.

Метод струны

В методе струны поверхность профиля разделена на узлы, которые связаны линейными отрезками. Начальное расстояние между узлами / (размер сегмента) задается одинаковым, что определяет пространственную разрешающую способность метода. Время травления делится на малые конечные приращения или интервалы dt . Скорость движения поверхности является скоростью травления V , и движение поверхности происходит каждый интервал времени с образованием продукта Vdt . Узлы рассматриваются как объекты, которые хранят информацию о своем положении на поверхности материала (кремний или маска из фоторезиста) и о свойствах материала. В процессе эволюции узлы передвигаются со скоростями, определяемыми локальными переменными. По мере эволюции профиля происходит добавление точек (если длина сегмента превышает максимальную $I + dl$), либо их исключение (если длина сегмента становится меньше минимального значения $I - dl$) для поддержания точности вычислений. Модели, использующие метод струны, отличаются лишь способом вычисления этих скоростей.

Для того чтобы расчеты процессов травления или осаждения были точными и эффективными, необходимо учитывать особенности моделируемой структуры, свойства используемых материалов, механизмы моделируемых процессов и соответствующие граничные условия. С этой целью выделено большое количество модификаций, которые адаптируют простой алгоритм продвижения струны для решения конкретных задач.

Важный момент, который требуется учитывать при моделировании травления или осаждения – наличие затененных участков. Пример границы с затененными участками показан на рис. 1. Скорость травления точек, которые затенены другими отрезками, принимается равной фоновой изотропной скорости травления. Области затенения определяются путем сравнения координат точек (x_i, y_i) с вертикальными направляющими, проходящими через те точки перегиба, которые формируют границу тени. Такие точки перегиба можно выделить при последовательном обходе границы раздела, начиная с $X \Delta 0$. Тенеобразующими будут

точки, расположенные на участках монотонного возрастания (убывания) координаты y , в которых отношение $\Delta y / \Delta x$ меняет знак с плюса на минус. На участках возрастания y вертикальная линия, проведенная через такую точку перегиба, отделяет в качестве затененных отрезки границы с меньшими значениями координаты x . На участках убывания y , наоборот, затеняются отрезки с большими, чем в точке перегиба, значениями координаты x .

Если затененные участки возникают при проведении процесса осаждения, то результат будет зависеть от типа используемого источника. Например, для однонаправленного источника парообразных частиц поток осаждаемых частиц подходит к поверхности только в одном направлении. В этом случае на затененных участках скорость роста пленки равна нулю.

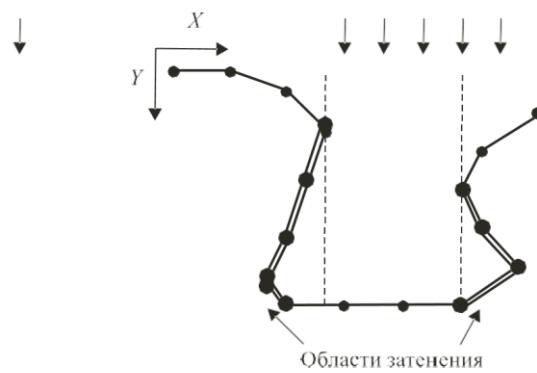


Рис. 1. Образование областей затемнения

Метод характеристик

Эволюция границы раздела двух фаз, хорошо известная из термодинамики, может быть применена для описания развития профиля травления в плазме. Пусть $F(x, t) = 0$ определяет профиль травления в момент времени t , тогда в момент $t + \Delta t$ он определяется уравнением

$$F(x + n(vn)\Delta t, t + \Delta t) = 0 \quad (1)$$

где v – скорость движения границы, n – единичный вектор нормали к поверхности. Уравнение (1) совместно с $n = \nabla F / |\nabla F|$ дает уравнение эволюции профиля

$$vn = -\frac{1}{|\nabla F|} \frac{\partial F}{\partial t} \quad (2)$$

где $vn = V$ – скорость травления. Вводя вектор эффективного потока

$$vn = Gn \quad (3)$$

получаем уравнение эволюции профиля

$$\frac{\partial F}{\partial t} + G \nabla F = 0 \quad (4)$$

В случае бесконечного в одном направлении профиля можно рассмотреть двухмерное поперечное сечение. Тогда, определяя $F(z, Y, t) = z - \mu(y, t)$, получаем

$$\frac{\partial \dot{\eta}}{\partial t} + G_y \frac{\partial \dot{\eta}}{\partial y} = G_z \quad (5)$$

где $z - \mu(y, t)$ определяет границу раздела в координатной системе, показанной на рис. 2; G_y и G_z – соответственно y - и z -координаты вектора G . Уравнение (5) методом характеристик может быть сведено к следующей системе обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = G_y(\dot{\eta}, y) \quad (6)$$

$$\frac{\partial \dot{\eta}}{\partial t} = G_z(\dot{\eta}, y) \quad (7)$$

Эти уравнения описывают кривую в плоскости (y, z) , параметризованной временем t . Вектор эффективного потока G выбирается в зависимости от принимаемой модели травления.

Метод характеристик описывает эволюцию точного профиля, в то время как метод струны оперирует с продвижением изначально линейно-приближенного профиля. Последнее приводит к большим ошибкам при быстром изменении травящейся поверхности, например, когда появляются нарушения непрерывности профиля травления (разрывы в наклоне) поверхности. В методе характеристик такая проблема исключена, так как траектории не движутся вдоль нормали к поверхности, и первоначальное уравнение в частных производных точно сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Таким образом, преимущество метода характеристик в том, что точки, движущиеся вдоль траекторий, всегда лежат на травящейся границе раздела с той точностью, с которой решаются исходные уравнения.

Метод ячеек

Третьим основным методом эволюции профилей при моделировании является метод ячеек. В противоположность обоим рассмотренным выше методам

весь объем подложки, подлежащий моделированию, разбивается на матрицу малых ячеек (рис. 2).

Каждая ячейка представлена счетчиком, который уменьшает свое значение в соответствии со временем, скоростью травления и свободной поверхностью. Если значение счетчика достигает нуля, ячейка удаляется. При рассмотрении структур малых размеров ячейки достигают размеров одного порядка с элементарной ячейкой кристалла, комплексом молекул и даже с атомом поверхности. Таким образом, удаление ячеек не требует описания с помощью макроскопических скоростей и можно моделировать элементарные процессы на поверхности.

Обычно подложка рассматривается состоящей из ряда ячеек. Свойства каждой ячейки определяются набором характеристик (ее содержимым): видом атома или молекулы, их соседями и состоянием поверхности (она может быть гладкой, шероховатой или заряженной). Можно рассматривать упрощенную модель, в которой массив атомов подложки бомбардируется низкоэнергетическими реактивными частицами. Эти частицы адсорбируются на поверхности, образуя некоторые продукты реакции, состоящие из поверхностного атома и адсорбированной частицы. Энергия связи такого модифицированного атома подложки уменьшается. На следующей стадии высокоэнергетическая частица может попасть в эту модифицированную поверхностную область и удалить ее.

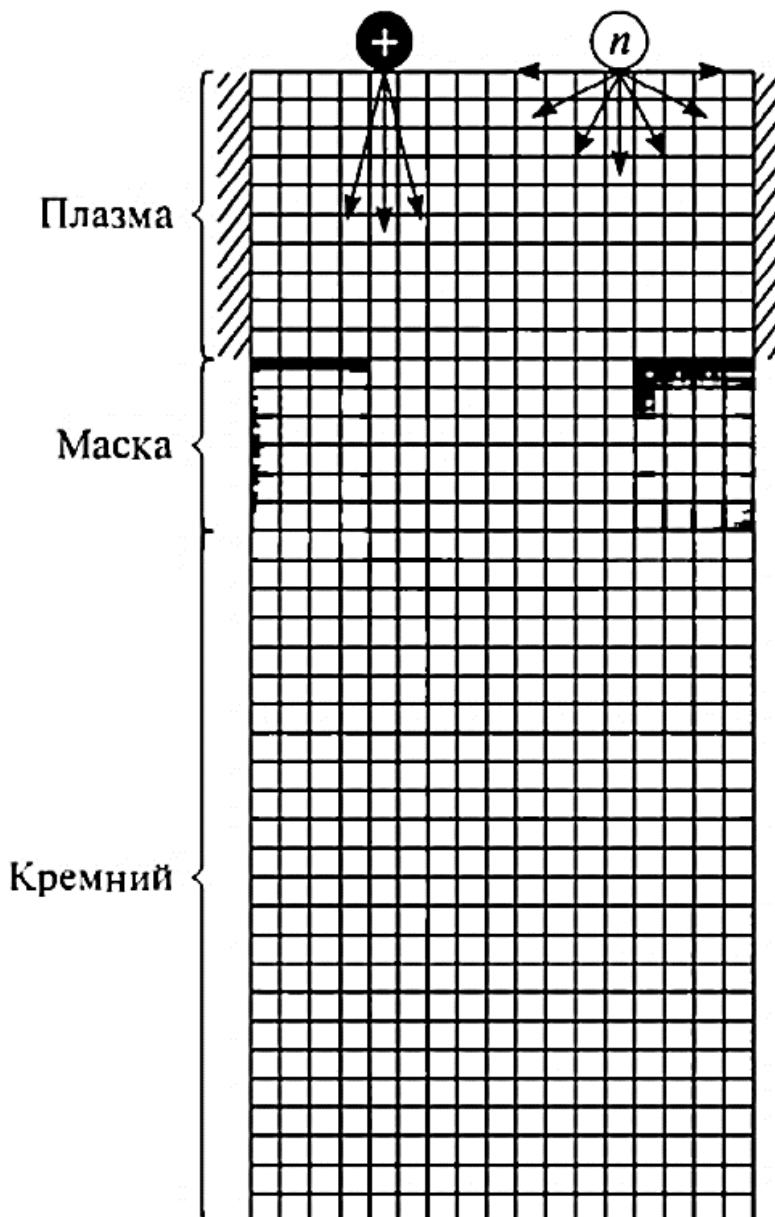


Рис. 2. Схема разбиения поверхности на ячейки. Ячейки разного цвета принадлежат разным материалам. Движение радикалов изотропно

В целях программной реализации эта модель еще более упрощается без ограничения общности. Матрица поверхностных атомов заменяется массивом ячеек, содержащих целые числа N . Изменение состояния ячейки за счет адсорбированной частицы или уменьшения энергии связи отмечается различными числами в соответствующем месте массива. Удаление ячейки отмечается обнулением ее содержимого. Добавление ячейки происходит, если количество атомов в ячейке становится $2N$.

Для уменьшения количества недостатков вышеописанных методов, существуют варианты их объединения. В случае удаления клетки всегда возникает вопрос целостности поверхности при сохранении достаточной для расчетов производительности. В любой момент времени должна быть известна цепочка смежных поверхностных клеток, составляющих поверхностный реакционный слой модели. Данная цепочка используется для расчета места попадания и угла падения частиц плазмы на поверхность профиля, а также для быстрой локальной модификации геометрии профиля при добавлении и удалении клеток. Поверхностная цепочка клеток аппроксимируется линией (струной), по которой определяется точка пересечения профиля с траекторией падающей частицы.

В простом струнном методе на неровных участках профиля канавки возникают трудно устранимые запутанные петли, что является существенным недостатком метода. Клеточно-струнный метод лишен данного недостатка. Как и в случае образования выступающих клеток, так и в случае образования наклонных стенок (45°) струна идет по линии, соединяющей середины боковых сторон клеток. Струна позволяет уменьшить погрешность неровности поверхности при использовании клеточного метода, при этом обеспечивается оптимальное соотношение качества и скорости расчетов. Построение струны по линии соединяющей только центры клеток приводит к излишним вычислительным сложностям, неправильному распределению локальных потоков частиц плазмы на поверхности профиля и, как следствие, ошибкам в оценке профиля канавки.

Для травления некоторых материалов, методы моделирования комбинируют, для достижения более точного результата. В случае моделирования процессов травления, в которых существует два типа частиц – направленные и ненаправленные, например, ионы и радикалы, наиболее оптимально использовать комбинацию метода Монте-Карло и метода струны. К таким процессам травления можно отнести реактивное ионное травление и Bosch-процесс.

Список литературы

1. Галперин В.А. Процессы плазменного травления в микро- и нанотехнологиях / В.А. Галперин, Е.В. Данилкин, А.И. Мочалов. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. – 285 с.
2. Королев М.А. Технология, конструкции и методы кремниевых интегральных микросхем / М.А. Королев, Т.Ю. Крупкина, М.А. Ревелева. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 399 с.
3. Мухамадеев Р.А. Моделирование процессов травления микро- и наноструктур с использованием программного модуля «NEMO etching». Доклады ТУСУРа / Р.А. Мухамадеев, Т.И. Данилина. – 2014. – №1 (31). – С. 95–98.
4. Травление [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Травление> (дата обращения: 12.01.2017).