

**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 реактивов. 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 одностороннего источника паровых частиц поток осаждаемых частиц подходит к поверхности только в одном направлении. В этом случае на затененных участках скорость роста пленки равна нулю.

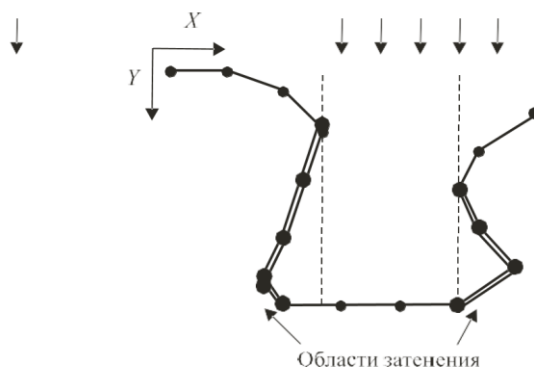


Рис. 1. Образование областей затенения

### *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, а  $n$  – единичный вектор нормали к поверхности. Уравнение (1) совместно с  $n = \Delta F / \Delta F'$  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 определяется 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 низкоэнергетичными 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 высокоэнергетичная частица может попасть в эту модифицированную поверхностную область и удалить ее.

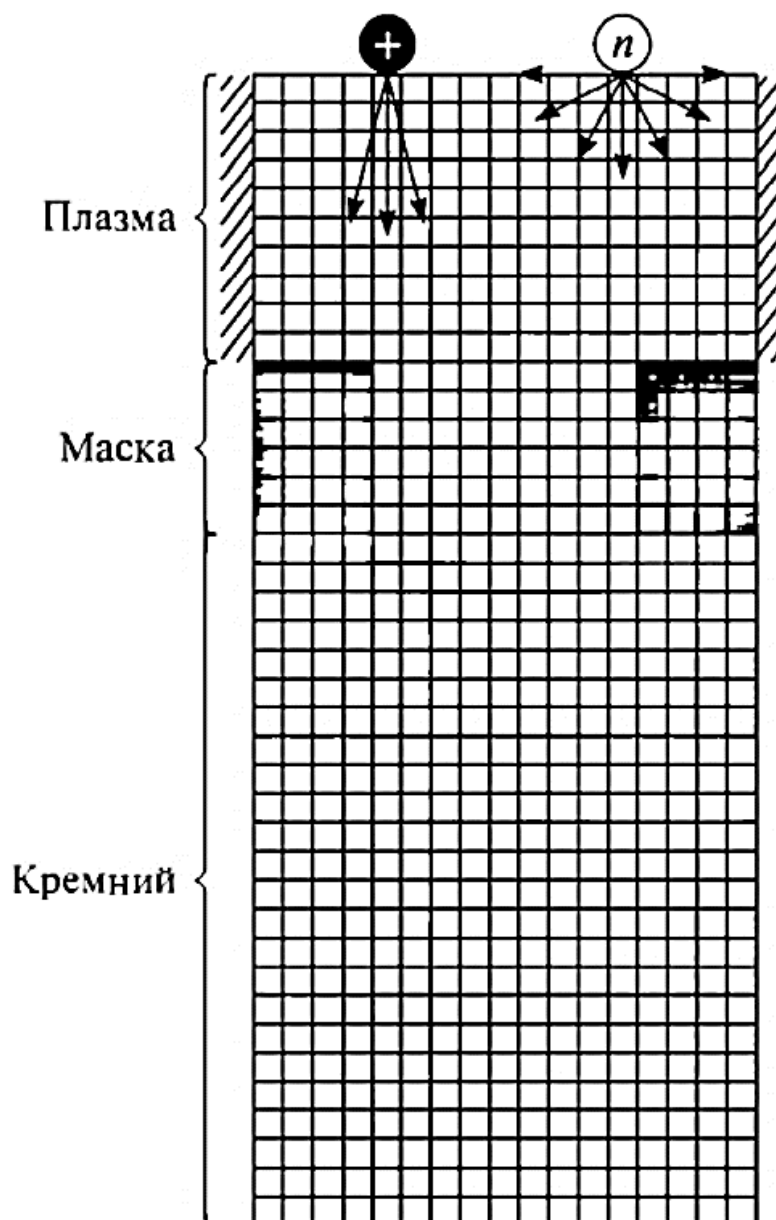


Рис. 2. Схема разбиения поверхности на ячейки. Ячейки разного цвета принадлежат разным материалам. Движение радикалов изотропно

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 ( $45^\circ$ ) 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).