

К МОДЕЛИРОВАНИЮ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ КРЕМНИЕВЫХ МЭМС/НЭМС-ПРИБОРОВ

А.В.Юхневич, И.А.Майер, А.Е.Усенко

*Учреждение Белорусского государственного университета
«Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», г. Минск*

Монокристаллический кремний является основным материалом современной микро-/нано-электроники и перспективным исходным материалом для изготовления других миниатюрных приборов и систем различного назначения, таких как электромеханические (МЭМС/НЭМС), оптические, химико-аналитические. По нашему мнению, поверхность совершенных монокристаллов можно рассматривать как наиболее перспективную исходную двумерную среду, которая позволяет обеспечить атомную точность при формировании на ней как отдельных микро-/нано-приборов, так и их упорядоченных множеств в сложных трехмерных устройствах [1]. На пути к естественному пределу миниатюризации – атомным размерам приборов, будет возрастать роль совершенства исходных монокристаллов. В этом и в других отношениях, благоприятствующих миниатюризации изделий, монокристаллический кремний находится в числе лидеров. Основные проблемы на этом пути связаны с разработкой соответствующих технологий.

Маскированное химическое растворение – ключевой этап в технологии изготовления многих современных и перспективных кремниевых миниатюрных приборов. Сущность этого процесса заключается в скульптурировании кристалла путем его растворения в окнах химической маски, нанесенной на поверхность. Общая форма результирующей структуры, качество ее деталей, определяется кристаллографической ориентацией исходной поверхности, формой и ориентацией маски, свойствами растворителя, условиями проведения процесса (температура, характер перемешивания раствора, освещение и др.). Пример такой структуры показан на рис. 1. Эта и большинство других разрабатываемых микроструктур представляют

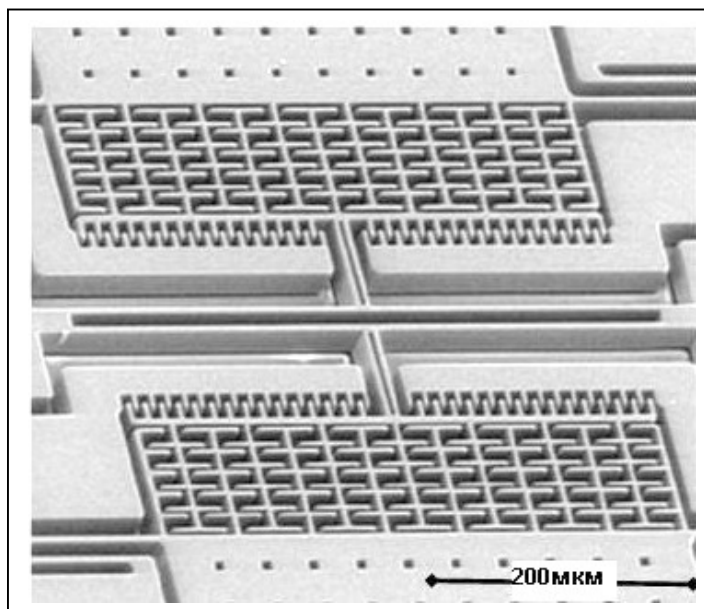


Рисунок 1. – Фрагмент конструкции резонансного микроакселерометра.

собой совокупность прямоугольных микро-/нано-деталей, форма и качество поверхности которых определяют эксплуатационные параметры соответствующих миниатюрных приборов.

С целью совершенствования технологии изготовления кремниевых микро-/нано-приборов в НИИ ФХП БГУ экспериментально и теоретически изучаются особенности маскированного растворения монокристаллического кремния. Некоторые результаты этой работы представлены в докладе. В частности, на рис.2 продемонстрирована полученная в натуральных опытах связь формы результирующей поверхности с условиями растворения. Определены зависимости ориентации, морфологии, скорости растворения самоформирующихся микро-/нано-поверхностей от химического состава и температуры растворителя, формы маски и от других условий травления кристалла [2].

В настоящее время основной метод оптимизации рассматриваемого технологического процесса – эмпирический подбор экспериментальных условий, при которых обеспечивается необходимое качество отдельных деталей и параметры микроприбора в целом. Современные теории растворения кристаллов не позволяют с желательной (атомной) точностью прогнозировать результаты натуральных опытов и производственных достижений при формировании 3D-структуры микро-/нано-объектов методом маскированного химического травления. Недостаточно изучены атомно-молекулярные физико-химические механизмы процесса растворения. Одним из перспективных путей изучения деталей этого процесса является его компьютерное моделирование на атомном уровне и сравнительный анализ результатов такого моделирования с результатами соответствующих натуральных экспериментов [3].

Основной результат нашего движения в данном направлении – разработка и испытание ряда оригинальных компьютерных программ Diamond (кинетический Монте-Карло-алгоритм, Borland C++ Builder, Windows XP), предназначенных для моделирования на атомном уровне маскированного растворения кристаллов типа алмаза [4]. В этих программах (моделях растворения) все физико-химические особенности процесса растворения и его элементарных стадий (удаление каждого атома с немаскированной части изучаемой поверхности) определяются набором вероятностей модели (НВМ) – рядом значений вероятности удаления поверхностных атомов различных типов.

В модели Diamond-3, которая рассматривается в данном сообщении, атомы поверхности классифицируются не только по числу первых и вторых соседей, но и по их принадлежности к поверхностным (число соседей меньше четырех), или к объемным (число соседей равно четырем). В этом случае НВМ включает 139 вероятностей – по числу различных типов поверхностных атомов.

Блок-схема программы Diamond-3 показана на рис. 3, где приняты следующие обозначения параметров программы: $[{}^0N_1 - {}^0N_{139}]$ – числа атомов различных типов на исходной поверхности, определяющие ее микро-/нано-рельеф; N – общее число атомов, удаляемых в компьютерном эксперименте; M – номер цикла, соответствующего удалению выбранного поверхностного атома; $[P_1 - P_{139}]$ – НВМ – вероятности удаления атомов различных типов; M_i – номер атома i -типа, удаляемого в M -ом цикле; $[{}^M N_1 - {}^M N_{139}]$ – числа атомов различных типов после удаления атома в M -ом цикле. Результат работы программы – изображение травленной поверхности с атомным разрешением. Программа позволяет выделять заданными цветами атомы различных типов.

На рис. 4 показаны примеры таких изображений, полученные в двух компьютерных экспериментах по маскированному травлению поверхности (001) кристалла кремния в изотропном и анизотропном

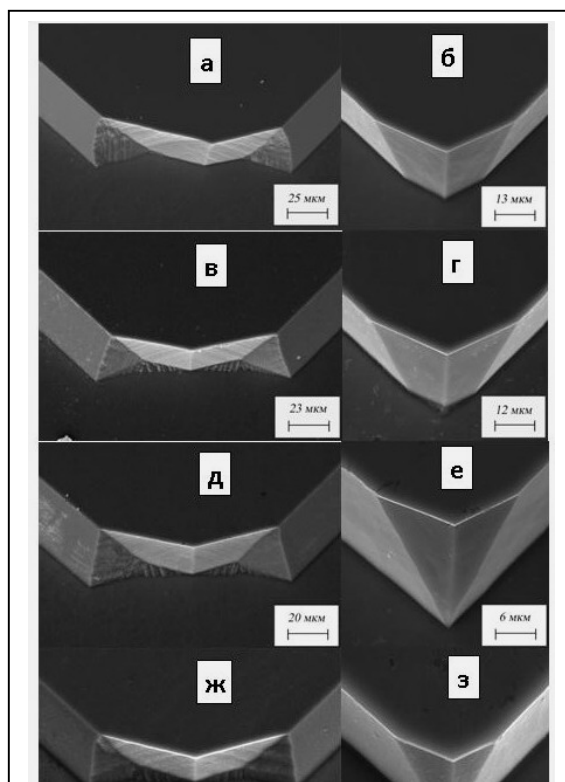


Рисунок 2. – Формы результирующего микро-рельефа вблизи прямого угла маски на поверхности (001) после травления кристалла в растворе КОН различных концентраций (моль/литр) при $T=80^\circ\text{C}$: а, б – 10; в, г – 12; д, е – 14; ж, з – 16 м/л. Левый ряд – тип ориентации краев угла маски $\langle 011 \rangle$, правый ряд – $\langle 001 \rangle$.

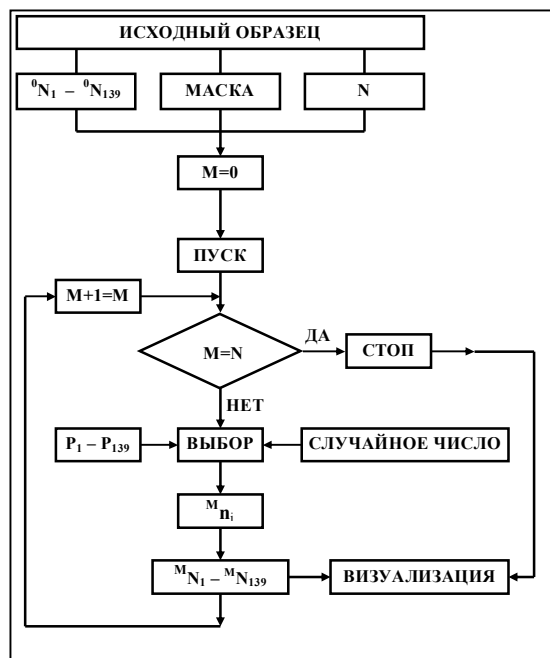


Рисунок 3. Блок-схема программы Diamond-3

тропном «растворителях». Красным, желтым, синим и зеленым цветом выделены, соответственно, атомы маски, двух-, трех- и четырех-связные атомы поверхности.

Нано-/микро-/макро-детали результирующего рельефа «травленной» поверхности определяет содержание НВМ. Очевидно, что соотношение вероятностей P_{1-139} в конкретном компьютерном эксперименте зависит как от энергий связи каждого атома с поверхностью, так и от особенностей взаимодействия атомов кристалла с ионами и молекулами растворителя (от «сорта» последнего). Энергии связи, в свою очередь, определяются числом и типом соседей каждого атома («сортом» кристалла).

Основной проблемой в каждом компьютерном эксперименте является нахождение набора НВМ – численных значений вероятностей $P_1 - P_{139}$, который давал бы результат, адекватный изучаемой технологической задаче. Эта проблема решается целенаправленным подбором в сочетании с использованием теоретических оценок энергий взаимодействия атомов кремния с соседними атомами кристалла и молекулами раствора.

Объектом наших исследований является процесс маскированного химического растворения монокристаллического кремния с прикладной целью совершенствования технологии (повышения точности) изготовления сложных предельно миниатюрных кремниевых приборов различного назначения, таких как акселерометры, гироскопы, инвазивные автономные медицинские роботы. В натуральных экспериментах, с использованием различных видов оптической, электронной, атомно-силовой микроскопии, мы изучаем особенности «самоформирования» отдельных элементов конструкции таких микро/нано-изделий.

В компьютерных экспериментах, целью которых является выяснение физико-химических деталей процесса растворения кристалла в конкретных экспериментальных условиях (ориентация исходной поверхности, форма маски, раствор определенного состава), подбираются параметры программы (N_{1-139} – характер исходной поверхности, форма маски, набор P_{1-139}), дающие результат (3D-форма результирующего «компьютерного» микро/нано-объекта), похожий в наибольшей мере на результат соответствующего натурального опыта. Выделенный таким образом набор вероятностей содержит информацию о тонких особенностях элементарных актов взаимодействия поверхностных атомов кремния с молекулами и ионами растворителя, которую затруднительно получить известными экспериментальными и теоретическими методами.

В компьютерных экспериментах, направленных на изучение возможности изготовления конкретного микро/нано-изделия, имеющего определенную 3D-форму, подбираются такие параметры программы Diamond, которые обеспечивают наилучшее соответствие «компьютерной» формы изделия с необходимой. Результаты такого подбора способствуют определению реальных экспериментальных и производственных условий изготовления изделий, имеющих ожидаемые параметры. В частности, найденные таким образом значения вероятностей $P_1 - P_{139}$ содержат информацию об оптимальном составе растворителя, который можно рекомендовать для разработки и использования в соответствующем технологическом процессе.

Сравнительный анализ имеющихся к настоящему времени результатов натуральных и компьютерных опытов по растворению важной для практики поверхности (001) кристалла кремния показал, что модель Diamond-3 способна передать основные особенности процесса растворения лучше, чем ее предшественники, в которых учитывалось только число первых и вторых соседей. Однако для наиболее адекватного согласования этих результатов на атомном уровне требуется совершенствование и этой модели в направлении более тонкого учета особенностей каждого поверхностного атома и его окружения. В настоящее время варианты такого совершенствования изучаются. Программа Diamond относительно просто может быть адаптирована к моделированию процесса растворения других кристаллов, имеющих структуру, отличную от алмазоподобной.

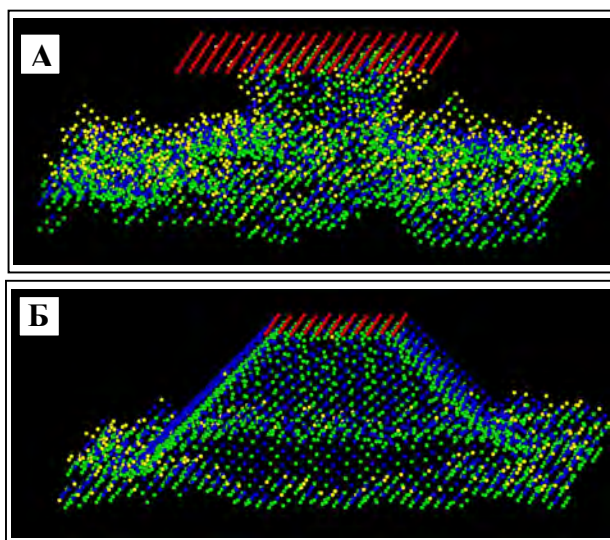


Рисунок.4. Примеры визуализации структур, сформированных при маскированном «травлении» поверхности (001): А – в изотропном «растворе»; Б – в анизотропном «растворе»

Резюме

В статье приводится описание оригинальной компьютерной программы, предназначенной для моделирования на атомном уровне процесса маскированного растворения монокристаллов типа алмаза. Этот процесс является ключевым в технологии изготовления большинства современных и перспективных кремниевых МЭМС/НЭМС-приборов. Сравнение результатов натуральных и компьютерных экспериментов позволяет уточнить детали процесса растворения кристалла кремния, а также наметить пути совершенствования технологии изготовления миниатюрных кремниевых приборов различного назначения. В основе программы – кинетический метод Монте-Карло и классификация атомов поверхности по числу и типу первых и вторых соседей поверхностного атома, удаляемого в каждом цикле работы программы.

Литература

1. Юхневич А. В.. Некоторые особенности атомной структуры монокристаллов кремния. /Сборник.: «Избранные научные труды Белорусского Государственного Университета». Т. 5.// А. В. Юхневич. –Мн.: БГУ. 2001. – С. 89-122.
2. Усенко А.Е. Анизотропное растворение монокристаллического кремния вблизи края химической маски на поверхности (001) / А.Е.Усенко, А.В.Юхневич, // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009, – №8. – С. 64-70.
3. Gosalvez, M.A. An atomistic introduction to anisotropic etching / M.A. Gosalvez, K. Sato, A.S. Foster, R.M. Nieminen and H. Tanaka // J. Micromech. Microeng. – 2007. – V.17, No.4. – P.S1–S26.
4. Юхневич А. В. Атомное моделирование процесса химического растворения кристаллов кремния. / А. В. Юхневич, И. А. Майер, А. Е. Усенко. //Тезисы докладов VIII-й Международной конференции и VII-й Школы ученых и молодых специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе «КРЕМНИЙ 2011», Москва, Россия, 05-08 июля 2011 г. М.: Изд. дом «МИСиС», 2011. – С.126.

SUMMARY

This paper considers an original computer program designed to simulate at the atomic level the process of diamond crystal etching with chemical masking. This process is a key technology in the manufacture of most modern and advanced silicon MEMS / NEMS devices. At the heart of the program - a kinetic Monte Carlo method and the classification of the surface atoms on the number and type of the first and second neighbors. Comparison of the results of computer and real experiments enables us to refine the details of the silicon crystal dissolution process, and identify ways to improve the technology of miniaturized silicon devices.

Поступила в редакцию 28.11.2012