

К ТЕХНОЛОГИИ ФОРМИРОВАНИЯ МЭМС/НЭМС–КОНСТРУКЦИЙ

к.ф.-м.н. Юхневич А.В., Майер И.А., маг. Усенко А.Е.

*Учреждение Белорусского государственного университета
«Научно-исследовательский институт физико-химических проблем»
(НИИ ФХП БГУ), Минск*

Миниатюризация различных приборов является одним из важных направлений развития техники. В настоящее время лидирующая область в этом деле – электроника. Основным материалом в современной микро-/нано-электронике – монокристаллический кремний. Совокупность его физико-химических свойств позволяет рассматривать этот полупроводник как подходящий материал для производства многих других приборов, в том числе – перспективных миниатюрных систем следующих поколений, например, электромеханических (МЭМС, НЭМС), оптических, химико-аналитических.

В статье рассматривается возможность использования компьютерного моделирования при совершенствовании процесса Маскированного Растворения Кристалла (МРК) – одного из эффективных и широко используемых технологических приемов в производстве миниатюрных кремниевых приборов. Такие изделия изготавливаются групповым методом в несколько этапов путем растворения кристалла в окнах масок, наносимых на поверхность. Необходимая топология масок на каждом этапе формируется методами микро-/нано-литографии. Данная технология может использоваться, например, при изготовлении сложных 3D-конструкций МЭМС/НЭМС-приборов типа гироскопов и акселерометров. Предельные технические параметры таких приборов зависят от точности изготовления формы деталей, от качества их поверхностей. Пример современной МЭМС-конструкции показан на рисунке 1. Отдельные ее детали имеют размер порядка микрометра и формируются с точностью порядка 50 нм.

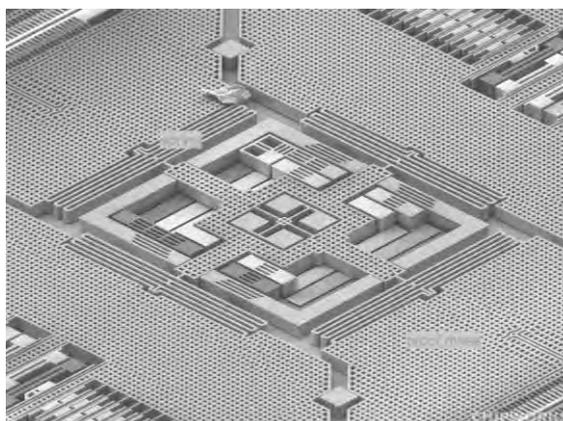


Рис. 1. Фрагмент конструкции чувствительного элемента вибрационного МЭМС-гироскопа типа L3G44200D, используемого, например, в смартфоне Apple iPhone 4 (<http://www.compel.ru/wordpress/wp-content/uploads/2011/03/L3G4200D.jpg>)

При совершенствовании технологий на пути к естественному пределу миниатюризации изделий – атомным размерам деталей, требуется соответствующее улучшение точности изготовления. Это возможно, например, при развитии подходов, основанных на поатомной сборке конструкций зондовыми методами [1, 2]. Однако такие технологии сложны в реализации и малопроизводительны. МРК-методики характеризуются наиболее высокой производительностью среди известных технологий. Атомная точность формирования конструкций с их использованием также возможна, но в настоя-

щее время труднодостижима вследствие недостаточной изученности механизма возникновения и развития дефектов поверхности кристалла при растворении в различных средах. Современные распространенные МРК-технологии основаны на плазменном и жидкостном растворении. Однако поверхности микродеталей, формирующиеся данными методами, недостаточно планарны, имеют сложный трудно контролируемый рельеф с деталями размером более 10 нм. Размер дефектов поверхности возрастает при увеличении глубины травления кристалла [3–6].

В перспективных микро-/нано-технологиях желательное формирование атомно-гладких поверхностей с определенной кристаллографической ориентацией. Одной из эффективных составляющих в деле изучения и совершенствования процесса растворения кристалла является его моделирование на атомном уровне. Такое моделирование применительно к кристаллам кремния осуществлялось в ряде работ (см., например, [7–15]). Модели реализуются в виде компьютерных программ, основанных на представлении процесса растворения как последовательности элементарных актов – удалений одного или нескольких поверхностных атомов, выбираемых случайным образом. В таких программах атомы классифицируются по типам в зависимости от особенностей расположения соседних атомов при тетраэдрической их координации. В компьютерных экспериментах задаются следующие основные исходные параметры процесса: вероятности (скорости) удаления атомов различных типов, кристаллографическая ориентация и микроструктура исходной поверхности, форма маски, глубина травления. Результирующие микро-/нано-структуры визуализируются с необходимой точностью, включая атомное разрешение.

Основное отличие моделей заключается в способах отнесения поверхностных атомов к различным типам и в особенностях выбора очередных атомов на удаление. Например, в модели, представленной в работе [12], рассматривается 139 типов атомов поверхности, классифицированных по числу первых и вторых прямых соседей, а также по их принадлежности к поверхностным (число соседей меньше четырех), или к объемным (число первых соседей равно четырем). При работе соответствующей компьютерной программы выполняется заданное число циклов – «удалений» одиночных атомов. Выбор конкретного атома на удаление в цикле осуществляется кинетическим методом Монте-Карло с использованием рассчитанного числа атомов каждого типа на данном этапе эксперимента и знания **НВМ** – **Набора значений Вероятности** удаления атомов каждого типа в **Модели**.

Адекватность модели реальному (натурному) МРК-процессу оценивается путем сравнения результирующих форм микро-/нано-объектов, полученных в компьютерных и в натуральных экспериментах, выполненных в похожих условиях. Степень подобия таких форм свидетельствует о степени адекватности рассматриваемой модели, включая атомно-молекулярный уровень соответствия реальных событий на поверхности кристалла их представлению в модели. Лучшее представление содержится в структуре **НВМ** наиболее адекватной модели, выделенной в ходе сравнительных компьютерных и натуральных экспериментов.

Определение и анализ такой модели способствует решению научно-практических задач двух типов: 1) уточнение физико-химических особенностей процесса растворения кристалла в конкретных экспериментальных и производственных условиях; 2) выявление условий проведения процесса (состав и температура раствора, структура исходной поверхности, форма маски и пр.), результатом которого будет получение объекта заданной формы с реализацией заданной точности. В известных работах по атомному моделированию растворения кристалла кремния решались, в основном, задачи первого типа. Определялись модели, наиболее адекватные процессу травления в широко используемых анизотропных растворителях, таких как растворы гидроксида калия (*КОН*) и тетраметиламмония (*ТМАН*). Степень идентичности результирующих микро-/нано-

объектов, сформированных в натуральных и компьютерных экспериментах, определялась в большинстве работ по внешнему сходству их форм без подробного сравнения атомной структуры поверхностей.

Цель данной работы – наметить путь решения некоторых перспективных задач второго типа. Методом атомного моделирования планируется выявлять основные технологические условия, позволяющие реализовать предельно возможную (атомную) точность формирования деталей кремниевых микро-/нано-объектов при их изготовлении МРК-методами. На данном этапе определяется возможность формирования атомно-гладких поверхностей с технологически востребованной ориентацией типа (001). Ключевым условием решения этой задачи является применение специальных анизотропных растворителей кристалла кремния. Результатом работы таких растворителей на участках поверхности кристалла с ориентацией близкой к (001), содержащих различные дефекты, должно быть формирование «идеальных» поверхностей Si(001). В настоящее время подходящие для этого составы (жидкости, газа, плазмы) не известны.

В статье рассматривается возможный начальный этап синтеза именно таких растворителей. Он основан на атомном моделировании элементарных процессов растворения и на выделении среди них тех, которые приводят к идеальному выглаживанию первоначально разупорядоченной поверхности. При испытаниях данного подхода нами разрабатываются различные варианты моделей *Diamond*, предназначенных для изучения растворения кристаллов типа алмаза [12, 14]. В каждой такой модели рассматривается процесс ликвидации различных дефектов поверхности (001). Первоначально было установлено, что в моделях, допускающих идеальную полировку поверхности, должно непременно учитываться влияние вторых не прямых соседей атома кристалла на скорость элементарных реакций с его участием. Далее осуществляется поиск подходящих для этого моделей растворителя.

Одна из простейших таких моделей представлена в данном сообщении (см. также [14]). В ней рассматривается 129 типов атомов поверхности, различающихся числом соседей. Каждый тип может быть обозначен тройкой чисел (f, ds, ns), где f – число первых соседей (связность атома), ds – число его прямых вторых соседей, ns – число не прямых вторых соседей. Например, атомы в первом слое идеальной поверхности (001) относятся к типу (262). Всего в модели 40 типов односвязных атомов ($f = 1$), 49 двухсвязных ($f = 2$) и 40 типов трехсвязных атомов ($f = 3$) без учета ориентационного различия структурных изомеров. Схема работы соответствующей компьютерной программы *Diamond-4* показана на рисунке 2, где отмечены ее основные параметры: $[{}^0N_1 - {}^0N_{129}]$ – набор чисел атомов всех типов на исходной поверхности (001) кристалла, характеризующий ее рельеф; $[P_1 - P_{129}]$ – НВМ рассматриваемой модели растворителя. N – число циклов равно числу атомов, удаляемых в компьютерном эксперименте. M – номер цикла, в котором удаляется атом Mn_i .

Компьютерный эксперимент включает 2 начальных этапа: а) - задание размера и формы исходного образца совершенного кристалла с решеткой типа алмаза и поверхностью (001); б) – разупорядочение этой поверхности путем формирования на ней различных дефектов. Целью исследования в серии экспериментов является поиск модели идеального полирующего растворителя, работа которого заключается в удалении **любых** дефектов поверхности (001) и завершается автоматической остановкой процесса при формировании атомно-гладкой поверхности. Особенности НВМ в такой модели будут содержать детальную информацию об элементарных актах, необходимых для реализации искомого атомно-молекулярного процесса. Знание этих особенностей позволит ориентироваться в ходе определения состава реального искомого полирующего растворителя и способа его применения.

Поиск такой модели и соответствующей НВМ является сложной задачей, особенно при большом числе типов поверхностных атомов. В нашем исследовании существенным является предложение начинать решение этой задачи с использования лишь двух предельных значений 1 и 0 для вероятностей удаления атомов всех сортов. В этом случае имеется доступная возможность найти **пробную модель** искомого полирующего растворителя (необходимые типы поверхностных атомов) и соответствующий НВМ (распределение данных значений вероятности по всем типам атомов). Для этого выполняются серии компьютерных экспериментов по удалению различных дефектов на поверхности (001) в различных пробных моделях полирующего растворения. Опыты начинаются с формирования и удаления простейших дефектов поверхности, таких, как одиночная вакансия в верхнем слое атомов. В последующих экспериментах атомная структура отдельных дефектов усложняется, увеличивается их число, изменяется характер их распределения на разупорядоченной (шероховатой) поверхности. Существенна необходимость рассмотрения всех видов дефектов, которые могут образовываться при реальном растворении реального кристалла. Программа *Diamond-4* позволяет формировать дефекты поверхности с атомной структурой любой сложности путем манипулирования атомами кристалла на изображении приповерхностной области.

В этих экспериментах относительно просто определяются типы атомов, которые в искомой модели должны иметь наибольшую и наименьшую вероятность удаления, равную, соответственно, 1 и 0. Найденная таким путем пробная модель включает информацию о природе тех элементарных стадий процесса растворения, реализация которых **принципиально необходима** для получения ожидаемого результата. Действительно, НВМ можно рассматривать как перечень всех возможных элементарных стадий (удалений атомов), с данными об их вероятности и содержании (локальная атомная структура до и после акта удаления). Существенно, что в НВМ предлагаемой пробной модели эти стадии разделяются на 2 вида: наиболее вероятные и наименее вероятные. Это разделение строго специфично (уникально) для различных моделей растворения. Оно открывает возможность определения состава искомого растворителя на следующем этапе его создания.

На этом этапе будет осуществляться теоретическая оценка пригодности различных новых растворителей, имеющих предположительно подходящий состав, на их способность выполнять идеальную полировку поверхности. Оценки могут быть основаны на расчете энергий взаимодействия атомов кристалла с молекулами, ионами, электронами искомого растворителя с учетом знания локальной структуры кристалла до и после удаления атома. Сравнение рассчитанных вероятностей с данными пробной модели позволит выделить наиболее подходящие составы из числа испытанных. Кандидатами в искомые растворители будут те, у которых рассчитанные вероятности удаления атомов различных типов в наибольшей мере соответствуют содержанию НВМ предлагаемой пробной модели.

При испытаниях модели *Diamond-4* были определены НВМ, подходящие для такой оценки. Входящие в них значения вероятности определялись следующим образом:

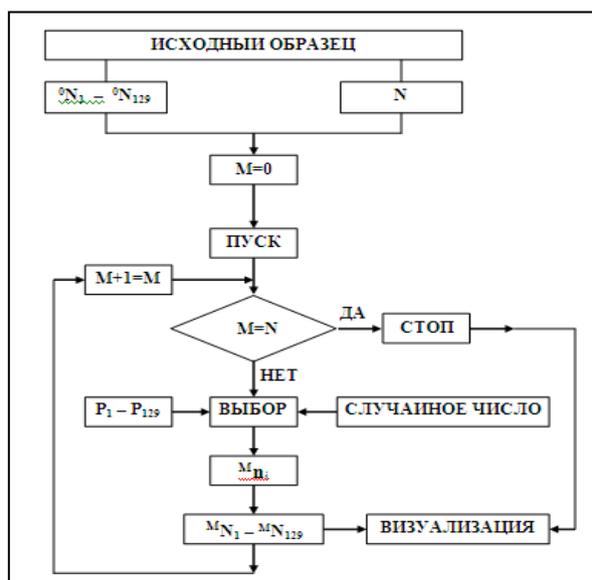


Рис. 2. Блок-схема программы *Diamond-4*

вероятностям удаления всех односвязных атомов придавалось значение равное 1. Вероятности удаления двухсвязных и трехсвязных атомов определялись в ходе компьютерных опытов по удалению различных дефектов поверхности (001), начиная с простейших, типа одиночной или парной вакансии. В каждом опыте на изображении поверхности вблизи дефекта выбирались атомы кристаллической решетки, которые должны удаляться в процессе растворения для того, чтобы рассматриваемый дефект «стравливался». Типу атомов, выбранных таким образом, присваивалось значение 1 в НВМ пробной модели. Это значение для данного типа атомов сохранялось в последующих опытах с более сложными дефектами. В ходе новых опытов определялись другие типы атомов, которым также присваивалось значение 1, необходимое для «стравливания» новых дефектов. В результате выделялась структура НВМ, оптимальная для реализации искомого процесса «идеальной» полировки поверхности. Оптимальным считался НВМ, содержащий **минимальное** число типов двухсвязных и трехсвязных атомов, которым придано значение 1.

В результате экспериментов с моделью растворения *Diamond-4* было найдено, что для нее оптимальным является пробный НВМ, в котором **из 49 типов** двухсвязных атомов **только 8** должны иметь значение вероятности удаления равное 1. Это типы (220), (230), (240), (241), (250), (251), (252) и (261). Остальные двухсвязные и все трехсвязные типы поверхностных атомов характеризуются нулевой вероятностью удаления. Пример работы данной пробной модели полирующего раствора показан на рисунке 3.

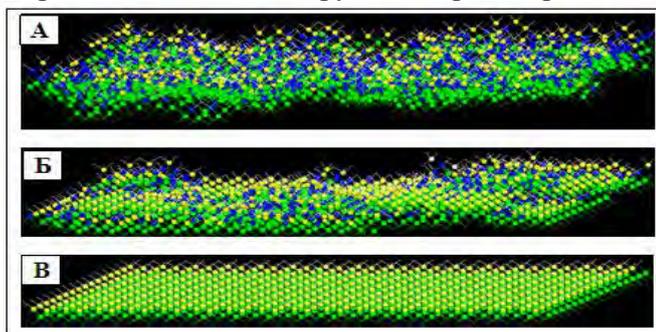


Рис. 3. Пример полировки поверхности (001) в пробной модели растворителя *Diamond-4*:
 А – структура исходной шероховатой поверхности; Б – промежуточный этап растворения;
 В – финал полировки – атомно-гладкая поверхность

Каждому типу атома соответствует определенная структура расположения соседних атомов в предположении сохранения их тетраэдрической координации до и после удаления, что является допустимым предположением на первом этапе разработки искомого растворителя. Эта структура должна быть учтена при поиске состава реального раствора. Предлагаемый подход к разработке полирующих растворителей для кристаллов типа алмаза может быть использован при рассмотрении кристаллов других сингоний.

РЕЗЮМЕ

Рассматривается возможность предельного уменьшения размеров МЭМС, НЭМС и других миниатюрных приборов в технологии их изготовления методами маскированного растворения кристалла. Для этого необходимо использование специальных растворителей, позволяющих осуществить «идеальную» полировку поверхностей. Создание таких пока неизвестных растворителей предлагается начинать с определения элементарных стадий процесса растворения, реализация которых принципиально необходима для удаления (стравливания) любых дефектов атомно-гладкой поверхности заданной кристаллографической ориентации. Предлагается способ выявления таких стадий при моделировании процесса на атомном уровне. Приводится пример разработки теоретической (компьютерной) модели растворителя, позволяющей осуществить идеальную полировку поверхности (001) кристаллов типа алмаза. Такая модель содержит информацию об особенностях соответствующего натурального процесса, которые необходимо реализовать при отработке перспективной технологии изготовления, например, миниатюрных кремниевых приборов и систем.

ЛІТЕРАТУРА

1. Saw Wai Hla. Atom-by atom assembly / Saw Wai Hla // Reports on Progress in Physics. – 2014. – V.77 (056502). – P.1–16.
2. Lee, W.C.T. Lithography and doping in strained Si towards atomically precise device fabrication / W.C.T. Lee, S.R. McKibbin, D.L. Thompson, K. Xue, G. Scappucci, N. Bishop, G.K. Celler, M.S. Carroll and M.Y. Simmons // Nanotechnology. – 2014. – V.25 (145302). – P.1–7.
3. Wu, B. High aspect ratio silicon etch: A review / B. Wu, A. Kumar, S. Pamarthy // Journal of Applied Physics. – 2010. – V.108 (051101). – P.1–20.
4. Chutani, R.K. Single-step deep reactive ion etching of ultra-deep silicon cavities with smooth sidewalls / R.K. Chutani, M. Hasegawa, V. Maurice, N. Passilly, C. Gorecki // Sensors and Actuators A: Physical. – 2014. – V.208. – P.66–72.
5. Lee, C.G.N. The grand challenges of plasma etching: a manufacturing perspective / C.G.N. Lee, K.J. Kanarik, R.A. Gottscho // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2014. – V.47 (273001). – P.1–9.
6. Meng L. Effect of process parameters on sidewall damage in deep silicon etch / L. Meng, J. Yan // Journal of Micromechanics and Microengineering. – 2015. – V.25 (035024). – P.1–8.
7. Gosalvez, M.A. Anisotropic wet chemical etching of crystalline silicon: atomistic Monte-Carlo simulations and experiments / M.A. Gosalvez, R.M. Nieminen, P. Kilpinen, E. Haimi, V. Lindroos // Applied Surface Science. – 2001. – V.178. – P.7–26.
8. Gosalvez, M.A. Atomistic simulations of surface coverage effects in anisotropic wet chemical etching of crystalline silicon / M.A. Gosalvez, A.S. Foster, R.M. Nieminen // Applied Surface Science. – 2002. – V.202. – P.160–182.
9. Gosalvez, M.A. An atomistic introduction to anisotropic etching / M.A. Gosalvez, K. Sato, A.S. Foster, R.M. Nieminen, H. Tanaka // Journal of Micromechanics and Microengineering. – 2007. – V.17. – P.S1–S26.
10. Zhou, Z.F. A cellular automaton-based simulator for silicon anisotropic etching processes considering high index planes / Z.F. Zhou, Q.A. Huang, W.H. Li, W. Deng // Journal of Micromechanics and Microengineering. – 2007. – V.17. – P.S38–S49.
11. Xing, Y. Evolutionary determination of kinetic Monte-Carlo rates for the simulation of evolving surfaces in anisotropic etching of silicon / Y. Xing, M.A. Gosalvez, K. Sato, M. Tian, H. Yi // Journal of Micromechanics and Microengineering. – 2012. – V.22 (085020). – P.S38–S49.
12. Юхневич, А.В. К моделированию технологии изготовления кремниевых МЭМС/НЭМС приборов / Юхневич А.В., Майер И.А., Усенко А.Е. // Теоретическая и прикладная механика: междунар. науч.-техн. сб. – Минск: БНТУ, 2013. – Вып. 28. – С.123–126.
13. Montoliu, C. Implementation and evaluation of the Level Set method: Towards efficient and accurate simulation of wet etching for microengineering applications / C. Montoliu, N. Ferrando, M.A. Gosalvez, J. Cerda, R.J. Colom // Computer Physics Communications. – 2013. – V.184. – P.2299–2309.
14. Юхневич, А.В. К моделированию технологии изготовления миниатюрных кремниевых приборов / А.В. Юхневич, И.А. Майер, А.Е. Усенко // Материалы и структуры современной электроники: сб. науч. тр. VI междунар. науч. конф. – Минск: БГУ, 2014. – С. 245–247.
15. Ferrando, N. Evolutionary Kinetic Monte Carlo: Atomistic Rates of Surface-Mediated Processes from Surface Morphologies / N. Ferrando, M.A. Gosalvez, A. Ayuela // The Journal of Physical Chemistry C. – 2014. – V.118. – P.11636–11648.

SUMMARY

The possibility of reducing the size of MEMS, NEMS and other miniature devices in the technology of their production by methods of masked crystal dissolution has been considered. This requires the use of special solvents that provide an ideal surface polishing. The creation of such yet unknown solvents is invited to start by identifying the elementary stages of the dissolution process, the implementation of which is fundamentally necessary for the removal (etching) any defects atomically smooth surface of a given crystallographic orientation. A method of identifying such stages by modeling the process at an atomic level is offered. An example of the solvent model, which allows the perfect polishing of the surface (001) of diamond-like crystals has been given. This model contains information about the features of the relevant natural process that need to be implemented when developing the promising technology, such as manufacturing of miniature silicon devices and systems.

E-mail: yukhnevich@bsu.by

Поступила в редакцию 21.09.2015