

На правах рукописи



ШУМИЛОВ АНДРЕЙ СТАНИСЛАВОВИЧ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ
ГЛУБОКИХ КАНАВОК В КРЕМНИИ
В BOSCH-ПРОЦЕССЕ**

Специальность
05.27.01. – твердотельная электроника,
радиоэлектронные компоненты,
микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых
эффектах

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2009

Работа выполнена в Ярославском филиале Учреждения
Российской академии наук Физико-технологический
институт (ФТИАН)

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук И.И.Амиров.

Официальные оппоненты:

доктор технических наук, А.А.Мельников

кандидат физико-математических наук В.П.Кудря

Ведущая организация:

Государственный научный центр РФ ГУ НПК
«Технологический центр» МИЭТ

Защита диссертации состоится “17” декабря 2009 г. в
14.00 на заседании диссертационного совета Д.002.204.01 при
Учреждении Российской академии наук
Физико-технологический институт по адресу: 117218,
Москва, Нахимовский проспект, 36/1

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИАН.

Автореферат разослан “16” ноября 2009г.

Ученый секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук
В.В.Вьюрков



ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Создание кремниевых высокоаспектных микроструктур является актуальной задачей в технологии микроэлектроники и микросистемной техники. Их формирование осуществляется в специально разработанном циклическом, двухстадийном травление/пассивация процессе в плазме SF_6/C_4F_8 или SF_6/O_2 ВЧ индукционного разряда (Bosch-процесс). Моделирование такого процесса является необходимым методом исследования, так как позволяет проверить правильность понимания механизмов их формирования и несёт в себе предсказательную способность. Кроме того, характеристики процесса зависят от многих параметров, и поэтому численное моделирование может заменить дорогостоящие эксперименты для проверки влияния различных факторов на формирование микроструктур.

Основной целью моделирования является создание совершенной модели, способной предсказывать новые эффекты формирования микроструктур. Для этого в нее необходимо включать все физико-химические факторы, определяющие процесс. В циклическом процессе чередование стадий травления и противоположной ей стадии осаждения (пассивации) может привести к появлению различных эффектов структурирования поверхности. Накопление малых возмущений на отдельных стадиях в циклических процессах является причиной образования нано- и микроструктур. Моделирование многостадийных циклических процессов гораздо сложнее одностадийного моделирования, именно поэтому представленных работ по многостадийному моделированию не так много. Симуляция часто-чередующихся стадий процесса требует от модели более высокой вычислительной точности. В настоящее время ввиду сложности описания плазмохимических процессов травления и осаждения разработаны только упрощенные модели их формирования. Поэтому создание метода моделирования плазменных процессов формирования микроканалов в циклическом процессе является актуальной задачей микро-и наноструктурирования поверхности.

Цель работы

Целью работы являлась разработка $2^{1/2}$ метода моделирования формирования глубоких, высокоаспектных канавок субмикронной ширины в Si в циклическом двухстадийном травление/пассивация процессе в плазме SF₆/C₄F₈.

Для решения поставленной цели необходимо было решить ряд задач, которые можно условно разделить на следующие части:

1. Изучить существующие концепции моделирования процессов плазменного травления Si и предложить модель нового метода моделирования;
2. Разработать математические алгоритмы метода: алгоритмы расчёта потоков частиц плазмы, траектории частиц, алгоритмы взаимодействия частицы с поверхностью, алгоритмы изменения геометрии профиля, расчёта нормали поверхности;
3. Осуществить программную реализацию математических алгоритмов метода. Создать комплекс программ для расчётов формирования профиля микроструктур в одностадийных и двухстадийных циклических процессах травления и осаждения во фторсодержащей плазме, обеспечение приемлемой скорости расчётов. Провести верификацию и калибровку метода;
4. Провести исследование формирования глубоких канавок в Si в зависимости от внешних и внутренних параметров модели. Определить чувствительность модели к наиболее важным параметрам. Провести моделирование различных эффектов формирования микроканавок и провести сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

Научная новизна

Научная новизна результатов, полученных в диссертационной работе, заключается в следующем:

- Разработан новый гибридный метод $2^{1/2}$ -мерного моделирования циклического травление/пассивация процесса формирования глубоких канавок в Si. В методе использовался метод ячеек для описания и динамики профиля поверхности и метод Монте Карло для генерации потоков плазмы.
- Метод моделирования реализован в созданном интерактивном программном комплексе EDPS (Etch-deposition profile

simulator). Комплекс предоставляет широкие возможности для проведения численных экспериментов моделирования.

- В методе реализована модель травления Si в плазме SF₆ и ионно-стимулированного осаждения фторуглеродной полимерной пленки (ФУП) в плазме C₄F₈ и ее травления в плазме SF₆. На основе экспериментальных данных проведена верификация и определены основные параметры моделирования.
- С помощью разработанного метода впервые было осуществлено моделирование формирования глубоких высокоаспектных (A>10) канавок субмикронных размеров в Si в Bosch-процессе в плазме SF₆/C₄F₈. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными подтверждает правильность модели. Показано, что в условиях аспектнозависимого (АЗ) травления глубоких канавок в Si скорость процесса определяется доставкой атомов фтора на их дно.
- Моделирование подтверждает существование широкого ряда эффектов искажения профиля канавок при травлении Si в Bosh-процессе в плазме SF₆/C₄F₈. Показано, что, изменяя управляющие параметры в течение процесса можно варьировать форму субмикронных канавок. Определены условия формирования канавок с разным углом наклона боковых стенок, возникновения апертурного эффекта, достижения аспектнонезависимого (АНЗ) травления.
- Впервые при моделировании формирования глубоких канавок в Si впервые было обнаружено, что в условиях сильной пассивации на дне широких канавок возможно образование наноигол. Вероятными причинами их образования могут быть: неоднородное по поверхности осаждение и травление ФУП и разница в скоростях травления ФУП и Si. В соответствии с экспериментальными данными наноструктуры образуются на дне широких канавок и отсутствуют в узких.

Положения, выносимые на защиту

- Метод 2^{1/2}-мерного, основанного на клеточно-струнных алгоритмах представления и динамики профиля поверхности, методе Монте-Карло для генерации потоков плазмы. моделей

травления Si в плазме SF₆ и ионно-стимулированного осаждения ФУП в плазме C₄F₈ и ее травления в плазме SF₆.

- Результаты моделирования апертурного эффекта формирования глубоких высокоаспектных ($A > 10$) канавок субмикронных размеров в Si в Bosch-процессе в плазме SF₆/C₄F₈. Показано, что в условиях АЗ-травления глубоких канавок в Si скорость процесса определяется доставкой атомов фтора на дно глубоких канавок.
- Результаты моделирования эффектов искажения профиля канавок при травлении Si в Bosch-процессе в плазме SF₆/C₄F₈. Показано, что, изменяя управляющие параметры в течение процесса, можно варьировать форму субмикронных канавок. Условия формирования канавок с разным углом наклона боковых стенок, возникновения апертурного эффекта, достижения АНЗ-травления.
- Результаты моделирования эффекта возникновения Si наноигл на поверхности Si. Он возникает в условиях сильной пассивации, когда на дне широких канавок ввиду неоднородности осаждения и травления ФУП возникает ФУП наномаска и и затем наноиглы.

Практическая ценность

Созданный программный комплекс для моделирования плазменных процессов травления и осаждения, двухстадийных, циклических процессов формирования высокоаспектных субмикронных канавок имеет большое практическое значение. Проведенные с его помощью численные эксперименты позволяют заменить дорогостоящие на практике эксперименты. Полученные результаты могут быть использованы для разработки новых плазменных процессов микротехнологии.

Апробация работы

Материалы диссертации докладывались на следующих конференциях:

- XVI Международная конференция «Взаимодействие ионов с поверхностью». Москва, 2003.
- International Conference "Micro- and nanoelectronics - ICMNE" 2003, 2005, 2007. Moscow, Zvenigorod, Russia.
- Семинар «Получение, исследование и применение низкотемпературной плазмы им.Л.С.Полака». Москва, январь 2008.
- 5-ый Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии, Иваного, 3-8 сентября 2008г.
- «Квантовые компьютеры, микро- и наноэлектроника». Ярославль, 22-23 сентября 2008г.

Вопросы авторства и публикаций

Результаты описанных в диссертации исследований автора были опубликованы в 2003-2008 годах. Список публикаций приведен в конце реферата. Большинство из работ было выполнено автором в соавторстве с научным руководителем.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, списка цитируемых книжных, литературных и электронных источников.

Общий объем текста составляет ____ страниц, включая список цитированной литературы. Диссертация содержит ____ рисунков и ____ таблицу. Библиография содержит ____ ссылок.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность и практическая значимость темы диссертационной работы.

В **первой главе** приводится обзор работ по моделированию плазменных процессов травления и осаждения.

На основе литературных данных обсуждаются достоинства, недостатки и пределы применимости для существующих на момент начала работы методов и систем моделирования. При моделировании необходимо рассматривать все процессы взаимодействия химически-активной плазмы с поверхностью. Эти процессы влияют на изменение профиля канавки травления. Универсальность и приближенность модели к реальности зависит от количества закладываемых в неё процессов. Модель плазмохимического травления микроструктур можно представить следующей схемой: модель транспорта частиц плазмы, модель поверхностных взаимодействий, метод представления и алгоритмы динамики профиля (рис. 1). Моделирование гетерогенной стадии процесса формирования микроструктур в плазме осуществляется в основном тремя методами: струнный, клеточный, а также метод характеристик, развитием которого является метод уровней «level set». Методы расчёта потоков частиц плазмы представлены Монте-Карло-итерациями или аналитическими интегральными уравнениями. На основе анализа существующих моделей формирования профиля канавок в плазменных процессах травления был сделан вывод, что по отдельности клеточный или струнный методы развития профиля не могут обеспечить необходимую точность расчетов. Необходим новый метод, сочетающий преимущества обоих. Поэтому было решено использовать комбинирование метода Монте-Карло для представления плазмы и сочетание клеточного и струнного алгоритма развития профиля.

В конце главы приведена постановка задачи и определены основные цели диссертационной работы.

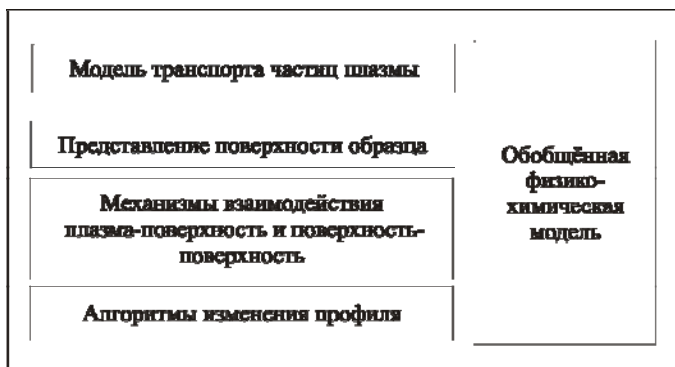


Рис. 1. Структура модели процессов плазменного травления и осаждения.

Вторая глава диссертации посвящена изложению предлагаемого метода моделирования. Указываются достоинства выбранного подхода моделирования. Клеточное представление профиля канавки травления даёт возможность работать с несколькими материалами, рассчитывать поверхностные химические реакции и предсказывать образование пустот. Сочетание метода Монте-Карло для расчёта потока частиц плазмы с клеточным представлением профиля наглядно в реализации и позволяет моделировать циклические процессы травления сложных микроструктур.

В начале главы даётся подробное описание структурных компонентов и приводится блок-схема основного алгоритма метода. Для уменьшения ошибки расчёта точки пересечения частицы плазмы с поверхностью и нормали к ячейкам поверхности, приведено обоснование выбора аппроксимации построение струны на клеточной поверхности. Описывается схема генерации потоков частиц плазмы методом Монте-Карло. Линия частиц плазмы, с которой происходит генерация случайного потока частиц, находится на уровне границы поверхности профиля. Длина свободного пробега частиц плазмы была много больше размеров профиля. Ионы падали на поверхность с линейной границы области пространственного заряда.

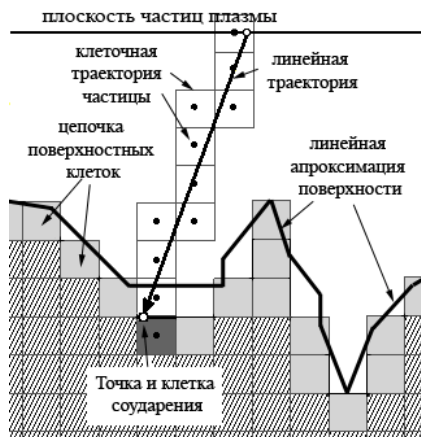


Рис. 2. Траектория падения частицы плазмы на поверхность профиля, построение аппроксимации и определение точки и клетки пересечения.

Предлагаемая модель учитывает три сорта частиц: 1) травящие радикалы - атомы фтора, 2) осаждающиеся частицы – CF_x радикалы и ионы SF_5^+ (плазма SF_6) и CF_x^+ (плазма C_4F_8). В начале алгоритма находится точка и направление траектории падения частицы плазмы (рис. 2). Далее вычисляется точка её пересечения с границей поверхности травления. Зная точку и угол попадания частицы, на основе заложенной модели проводится расчет частиц в клетке. Данная частица может адсорбироваться, отразиться или выбить из поверхностного слоя другую частицу.

Подробно исследована и описана проблема аппроксимации клеточной поверхности для нахождения точек пересечения и вылета отражённых частиц, приведены и разобраны разные способы её построения (поверхностной струны) (рис. 2) Найдены оптимальные алгоритмы. Предложено строить две аппроксимации – для падающих частиц и для отражённых частиц, таким образом, точки пересечения при падении на поверхность и начальная точка вылета отражённой частицы с поверхности могут различаться.

Далее приводится способ представления домена моделирования. В клеточном методе моделирования гетерогенных

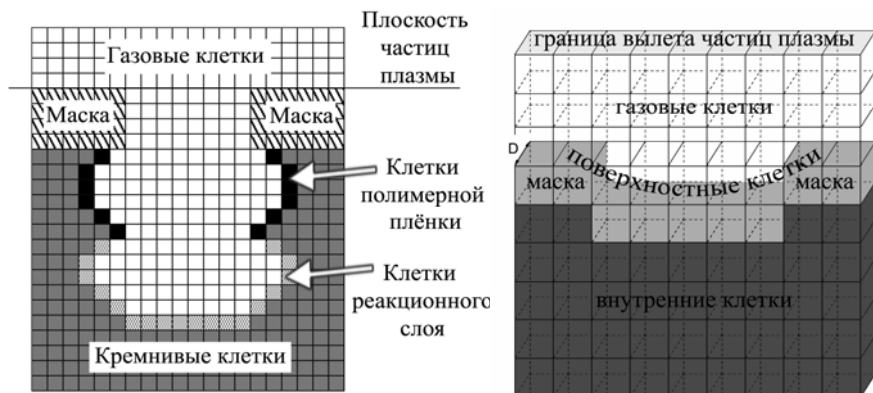


Рис. 3. Клеточное $2^{1/2}$ -мерное представление профиля канавки травления.

процессов в плазме поверхность раздела разбивается на клетки (рис. 3). На рисунке показаны газовые и поверхностные клетки, клетки маски, плёнки и кремния. В начальном состоянии есть 3 вида клеток – газовые (пустые), клетки исходного материала (Si , CF_x) и клетки материала маски (Me) (они неподвержены травлению и далее не рассматриваются в цепи реакций). В Si клетке содержится 30 атомов Si . При падении на поверхность реакционных радикалов CF_2 и атомов F , в зависимости от их вероятности прилипания, они остаются в них или отражаются по косинусному закону распределения. В случае прилипания образуются реакционные клетки, содержащие атомы Si , F , C или только Si и F . Они составляют поверхностный реакционный слой. Реакционные клетки могут превращаться также в полимерные клетки, содержащие атомы F и C . Выбранное количество атомов и размер клетки соответствуют толщине реакционного слоя, приблизительно равного 2.5 нм.

При попадании активной частицы в клетку в ней рассчитывались химические реакции, в результате которых мог измениться её атомный состав. Считалось, что летучие продукты химических реакций не принимали дальнейшего участия в расчётах и беспрепятственно удалялись из пределов домена. Для контроля атомной плотности в *поверхностных* клетках профиля

требовался пересчёт атомного баланса внутри клеток и их соседей. При переполнении клетки (количество атомов $\geq N_{\max}$) клетка делилась и рядом с ней возникала новая клетка. Содержимое переполнившейся клетки делилось между ней и новой клеткой по определённым законам. Так осуществлялся процесс осаждения. При истощении клетки (количество атомов $< N_{\min}$) клетка удалялась, а её содержимое по определённым законам распределялось в соседние с нею клетки. Так осуществлялся процесс травления. Алгоритмы расчёта атомного баланса в клетках являются очень важными и непосредственно отвечают за правильность динамики профиля канавки травления. Этой проблеме выделен отдельный параграф в данной главе, где также приводятся подробные блок-схемы этих алгоритмов. Проведено численное исследование формирования профилей травления при разных алгоритмах расчёта баланса при травлении и осаждении материалов. Исследовано изменение параметра значения средней атомной плотности в клетках (N_{mid}) и пороговых значений для удаления и добавления новых клеток (N_{\min} и N_{\max}). Найдено оптимальное значение для порога удаления клетки в 15 атомов и для порога добавления клетки в 60 атомов.

Приводятся различные математические алгоритмы метода, например, схема систем координат для представления и работы с данными профиля, алгоритм генерации потоков частиц плазмы методом Монте-Карло с определённым процентным соотношением частиц разного типа, алгоритмы аппроксимации клеточной поверхности для нахождения точки пересечения и отражения частиц с поверхностью. Для ускорения расчетов были проведены тесты моделирования при увеличении количества генерируемых частиц за один такт (до 2 и 3 атомов фтора при травлении Si).

Исследованы алгоритмы для расчёта точки пересечения траектории частицы с поверхностью. Ввиду того, что со временем профиль поверхности травления приобретает сильно шероховатый и непредсказуемый вид, обычный линейный алгоритм нахождения пересечения луча падения с ломаной линией профиля оказался малоэффективным. Было предложено несколько альтернативных алгоритмов расчёта точки пересечения и в итоге реализован алгоритм на основе метода Брезенхема.

Отдельный параграф посвящён исследованию механизма отражения частиц от поверхности моделирования. Приводятся и

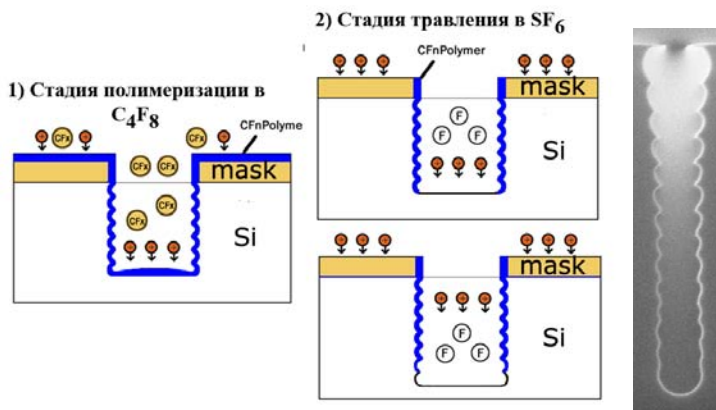


Рис. 4. Схематичное представление Bosh-процесса.
Пример глубокого травления канавки.

исследуются разные алгоритмы для расчёта нормали поверхности, угла падения и направления вылета отражённой частицы. Следует отметить, что быстро и точно посчитать нормаль к клеточной поверхности достаточно тяжело, и, на наш взгляд, не существует идеального алгоритма для её расчёта. Чем меньше радиус окрестности для определения нормали поверхности, тем больше ошибки на плавных изменениях рельефа поверхности канавки, но меньше ошибки на резких изменениях рельефа. При моделировании использовалось значение радиуса для измерения нормали поверхности в 6 клеток.

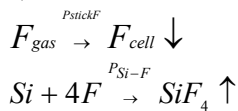
Таким образом, во второй главе детально рассмотрены и представлены основные задачи и алгоритмы предлагаемого метода.

В третьей главе приведены описания установки и условий проведения глубокого анизотропного процесса травления Si в двухстадийном, циклическом режиме (Bosh-процессе) в реакторе плотной плазмы SF₆/C₄F₈ ВЧ-индукционного разряда. Рассмотрены основные факторы, определяющие характер процессов на каждой из стадий: стадии осаждения (пассивации) ФУП в плазме C₄F₈ и стадии травления ФУП и Si в плазме SF₆ (рис. 4).

Представлены основные параметры Bosh-процесса: 1) длительность стадий; 2) плотность потока ионов; 3) плотность

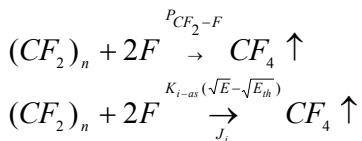
потока радикалов; 4) напряжение смещения. Последние три параметра определялись внешними параметрами разряда, которые были следующими: стадия травления: $Q(SF_6) = 100 \text{ нсм}^3/\text{мин.}$, $Q(C_4F_8) = 0-10 \text{ нсм}^3/\text{мин.}$, $-U_{см} = 5-70 \text{ В}$, $P = 4.5 \text{ Па}$, $W = 700 \text{ Вт}$. Стадия пассивации: $Q(C_4F_8) = 40 \text{ нсм}^3/\text{мин.}$, $Q(SF_6) = 5 \text{ нсм}^3/\text{мин.}$, $-U_{см} = 5-20 \text{ В}$, $P = 1.2 \text{ Па}$, $W = 700 \text{ Вт}$. При таких параметрах разряда плотность потока атомов фтора на подложку J_F на стадии травления равнялась $1-5 \times 10^{17}/\text{см}^2 \text{ с}$, плотность ионного потока $J_1^+ - 0.2-1 \times 10^{15}/\text{см}^2 \text{ с}$. На стадии пассивации $J(CF_2)$ радикалов составлял $1 \times 10^{18}/\text{см}^2 \text{ с}$, $J_2^+ - 1 \times 10^{15}/\text{см}^2 \text{ с}$.

Приведены модели травления Si и ионно-стимулированного травления ФУП в плазме SF_6 , а также ионно-стимулированного осаждения ФУП в плазме C_4F_8 . Для описания травления Si была использована наиболее простая модель. При попадании частиц фтора в клетку рассчитывались цепочки химических реакций травления Si. Полагали, что летучие продукты SiF_4 образуются в реакциях $Si - F$ с некоторой вероятностью реакции:



Вероятность реакции P_{Si-F} была переменным параметром при моделировании. Она изменялась в диапазоне 0.1-0.8.

В отличие от травления Si травление ФУП было ионно-стимулированным. Оно описывалось более сложной схемой. В случае попадания иона в клетку вероятность реакции атомов фтора с элементом (CF_2) увеличивалась пропорционально энергии и углу падения иона.



Скорость травления ФУП в SF_6 -плазме изменяется обратноквадратично напряжению смещения. При энергии ионов 80 эВ скорость составляет примерно 1,2 мкм/мин., при энергии плавающего потенциала 20 эВ – около 0,2 мкм/мин. Можно отметить, что ФУП практически не травится радикалами фтора без участия ионов. Ионно-стимулированное травление ФУП моделировали путем увеличения вероятности реакции атомов

фтора при их падении на возбужденную клетку, состоящую из структурных единиц - радикалов CF_2 . Клетка считалась возбужденной, если в нее упал ион с энергией больше пороговой энергии E_{th} . Вероятность реакции с возбужденной клеткой последующих N атомов сильно возрастала до тех пор, пока выход молекул CF_4 не достигал значения Y . После реакции с N атомами фтора клетка считалась уже невозбужденной, и вероятность реакции с ней фтора уменьшалась до начального значения 0.005 - 0.002. Функция Y зависела от энергии и угла падения иона и обозначала количество выхода молекул CF_4 на один ион:

$$Y(E_i, \phi) = f(E_i)g(\phi), \text{ где}$$

$$f(E_i) = \min(0, K_{i-as}(\sqrt{E_i} - \sqrt{E_{th}})),$$

$$g(\phi) = 0.9*(1.1-0.31*|\phi|+1.61*\phi^2-2.13*|\phi^3|+0.6*\phi^4).$$

При отражении ион теряет часть своей энергии, которая переходит к поверхности. Чем выше энергия иона и чем ближе угол падения иона к 90° , тем больше эффект травления ФУП. Функцию угловой зависимости $g(\phi)$ определяли согласно литературным данным. Вклад энергии иона в процесс регулировали коэффициентом ионно-стимулированного травления K_{i-as} и значением пороговой энергии E_{th} . Хорошее совпадение с экспериментальными данными получали при значениях $K_{i-as} = 0.9 - 2.0$, и $E_{th} = 5 - 10$ эВ.

Удаление ФУП происходило также в результате ионно-химического процесса, который заключался в том, что ионы SF_5^+ (основной ион в плазме SF_6) сами являлись поставщиками реагентов – атомов фтора. При столкновении ионов с ФУП на дне канавки происходила их диссоциация с образованием «горячих» атомов фтора, которые реагировали с полимерными цепочками $(CF_2)_n$.

В модели были использованы следующие параметры: E_i - энергия ионов, R/i - соотношение радикалов и ионов, σ_i - угловое распределение ионов, P_{CF_2-F} - вероятность реакции атомов фтора с ФУП, $K_{i-as \text{ etch}}$ - коэффициент анизотропного травления ФУП, параметры зеркального отражения ионов (функция $g(\phi)$). Угловое распределение ионов описывалось гауссовым распределением $\xi(\alpha)$ со средним угловым отклонением, определяемым выражением:

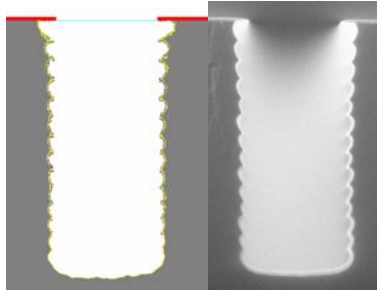


Рис. 5. Профили канавок, получившихся в результате моделирования (слева) и эксперимента (справа).

подбирались таким образом, чтобы длительности стадий травления и пассивации соответствовали условиям эксперимента. Длительность цикла составляла 10 с (6 с травление, 4 с пассивация), число циклов -14.

При моделировании осуществляли варьирование вероятности реакции прилипания CF_2 на стадии пассивации и количество падающих частиц на каждой стадии. В численном эксперименте параметром моделирования для связи с длительностью времени является линейный поток, равный числу частиц (атомов фтора, CF_2 , ионов), падающих на 1 \AA длины профиля $F_\gamma (\text{\AA}^{-1})$. 1 \AA по ширине длины профиля при моделировании $\sim 0.5 \text{ \AA}^2$ реальной площади. Отсюда $\text{\AA}^{-1} \sim 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$. Таким образом, плотность потока атомов фтора, равная $1,7 \cdot 10^{18} / \text{см}^2 \text{ с}$, в единицах плотности линейного потока равняется $\sim 84 / \text{\AA} \text{ с}$. Варьируя линейный поток соответствующих частиц, можно посчитать реальное время стадий травления и осаждения

Моделирование профиля канавки травления шириной 0.5 мкм (200 клеток) и глубиной 1.6 мкм показало хорошее согласие с экспериментом (рис. 5). Число циклов травления Bosh-процесса равнялось 14, $F_{\gamma_etch} = 500 \text{ н/}\text{\AA}$, $F_{\gamma_dep} = 90 \text{ н/}\text{\AA}$, $t_{etch} = 6 \text{ с}$, $t_{dep} = 4 \text{ с}$. Таким образом, была проведена «привязка» результатов моделирования к экспериментальным данным. В результате были определены следующие диапазоны значений для параметров модели при фиксированной вероятности реакции атомов F с поверхностью кремния $P_{\text{F-поверх. Si}} = 0.5$; $R/i = 200:1$; $P_{\text{F-CF}_2} = 0.002 -$

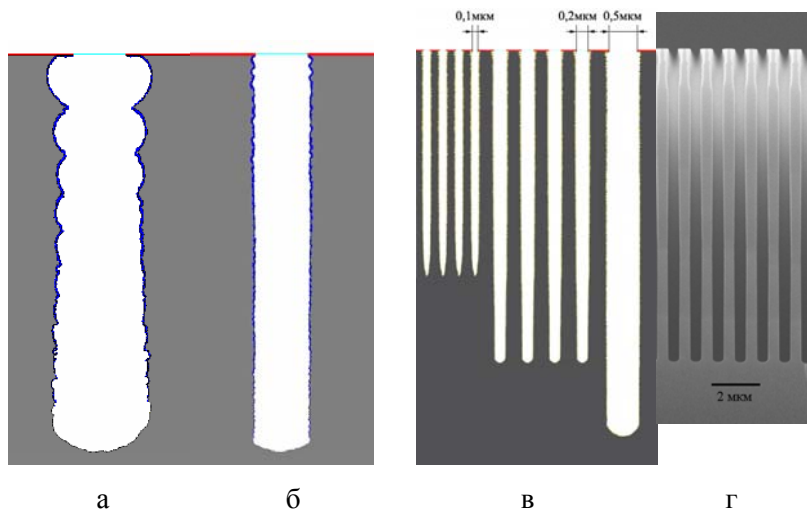


Рис. 6. Влияние частоты циклов процесса на геометрию канавки (а, б). Результаты моделирования профилей высокоаспектных канавок (в) и их сравнение с профилем канавки шириной 0.5 мкм, полученной экспериментально (г).

0.009; $P_{CF_2-Si} = 0.01 - 0.1$; $K_{i-as \text{ etching}} = 0.8 - 2.0$; $K_{i-as \text{ deposition}} = 0.23 - 2.0$.

С установленными параметрами было проведено моделирование глубоких с высоким аспектным отношением канавок в Si. Длительность стадии травления (t_{etch}) была уменьшена до 5 с. Это обусловлено требованием сохранения гладкости боковой стенки.

Чем меньше t_{etch} при одинаковом отношении t_{etch}/t_{dep} , тем более гладкими получаются стенки (рис. 6, а, б), однако при этом уменьшается скорость травления Si. На экспериментах а) и б) Bosh-процесс занял 15 и 52 циклов при соотношении $F_{\gamma_{etch}}/F_{\gamma_{dep}} = 1000/200$ (а) и $200/50$ (б). В виду этого, для тестов (рис. 6, в) была выбрана оптимальная величина t_{etch} равная 5 с. Результаты моделирования находились в хорошем согласии с экспериментально полученным профилем (рис. 6, г). Ширина канавок равнялась 0.1, 0.2 и 0.5 мкм соответственно. Время вычислений составило 6 ч для 0.2 мкм ($AO = 25$) и 10 ч для 0.5 мкм. ($AO = 12.5$) 195 циклов Bosh-процесса на процессоре AMD Athlon

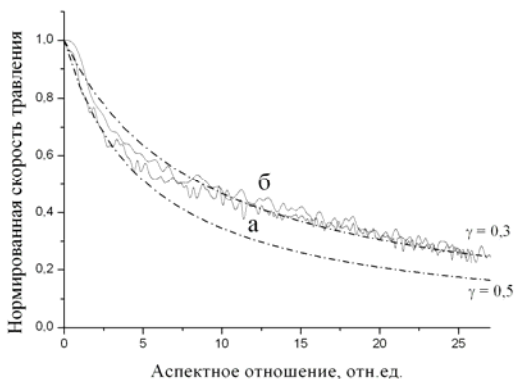


Рис. 7. Зависимость нормированной скорости травления канавок шириной 0.1 мкм (а), 0.2 мкм (б) от аспектного отношения и падение скорости травления на дне канавки в соответствии с моделью Кнудсена при разной вероятности реакции $\gamma=0.3$ и 0.5 .

64 4000+. На рис. 7 представлена зависимость нормированной скорости травления от аспектного отношения. Моделирование показало, что падение скорости травления Si с увеличением аспектного отношения происходило в соответствии с падением потока частиц на дно канавки, которое описывается моделью Кнудсена.

Четвёртая глава посвящена определению чувствительности модели, исследованию условий формирования канавок с разным профилем, моделированию АЗ- и АНЗ-травления, а также эффекту образования нано-микроигл на дне канавки.

Определение чувствительности модели к изменению внутренних и внешних параметров моделирования проводилось по результатам исследования степени влияния длительности стадии пассивации, коэффициентов вероятности травления ФУП атомами F и вероятность прилипания радикалов CF_2 на профиль канавки.

Продолжительность стадии пассивации является одним из ключевых параметров Bosh-процесса. Изучалось его влияние на формирование профиля канавки при времени стадии травления равной 5 с. Параметры проведённых численных экспериментов

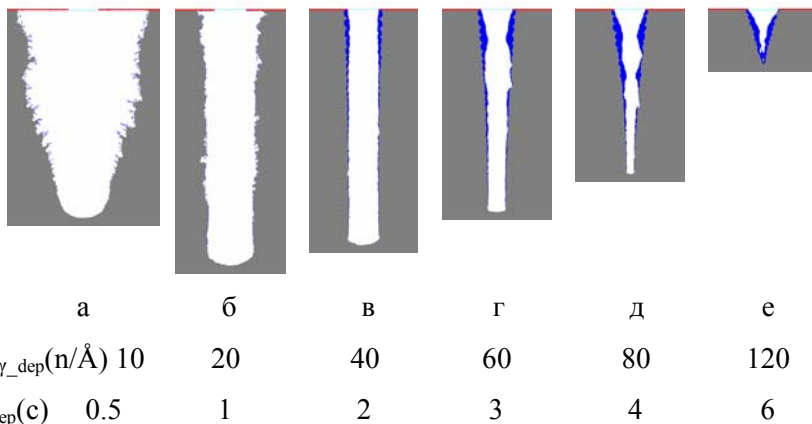


Рис. 8. Чувствительность модели к изменению времени полимеризации, где F_{γ_dep} ($n/\text{Å}$) – поток стадии осаждения, а t_{dep} – длительность стадии осаждения.

были следующими: ширина канавки - 0.2мкм, 40 циклов, $U_{etch} = 60$ В, $U_{dep} = 5$ В, $F_{\gamma_etch} = 300 \text{ Å}^{-1}$, $P_{F-Si} = 0.8$, $P_{F-CF_2} = 0.009$, $P_{dep CF_2} = 0.1$, $Ki-as = 2.0$. При условии слабой пассивации ($t_{dep} = 0.5$ с) профиль канавки был близок к изотропному (рис. 8, а). С увеличением t_{dep} до 1 с канавка начинала выравниваться, и при $t_{dep} = 2$ с получалась канавка уже с вертикальными стенками. С дальнейшим увеличением t_{dep} глубина канавки уменьшалась, происходило ее сужение, и на боковой стенке накапливалась полимерная пленка. В условиях сильной полимеризации происходило прекращение травления (тест е). В эксперименте такое изменение профиля канавки наблюдалось при варьировании длительности стадии осаждения с 2 до 12 с.

В другом численном эксперименте, когда P_{F-CF_2} был меньше в 2,5 раза, изменение профиля канавок было менее сильным. Профили канавок в первом и втором тесте были подобными при $t_{dep} = 4$ и 2 с, соответственно. Если теперь увеличить вероятность травления полимерной пленки в 3.5 раза, то профили канавок в первом и последнем случае будут также подобными. Эти данные свидетельствовали, что чувствительность модели к изменению вероятности реакции P_{F-CF_2} приблизительно такая же, как к $P_{stick CF_2}$.

Чувствительность модели к параметру t_{dep} увеличивалась с увеличением данных вероятностей реакций.

Численные эксперименты показали, что при увеличении времени стадии пассивации наблюдается изменение угла наклона канавки (рис. 8, в, г). Слабо расширяющаяся канавка (канавка с отрицательным углом наклона стенок) становится сужающейся (положительный угол). Для точного контроля угла наклона стенки необходимо правильно подобрать не только время пассивации, но и другие параметры моделирования. Такие же изменения в профиле канавки наблюдались и в реальном эксперименте. Анализ условий формирования канавок с разным углом наклона стенок показал, что расширяющаяся канавка возникает в случае быстрого удаления ФУП вблизи боковой стенки канавки при интенсивной ионной бомбардировке дна. В случае сильной пассивации, когда ФУП не удаляется полностью на дне в углу канавки, возникал положительный угол наклона стенки. Более сильно эффект изменения наклона стенки проявился при проведении численных экспериментов, показанных на рисунке (рис. 9, а-в).

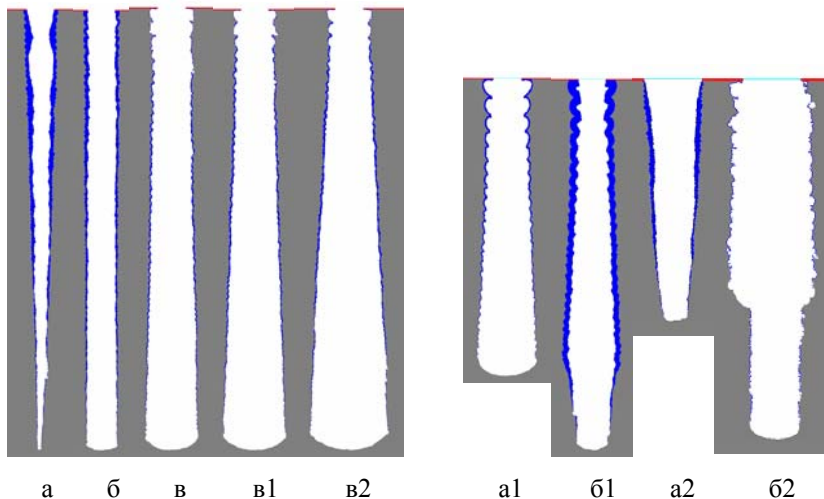


Рис. 9. Управление углом наклона канавки (а-в). Зависимость формы канавки от температуры ионов (в1-в3) Демонстрация возможности по управлению процессом (а1-б1 и а2-б2).

В отличие от условий формирования вертикальной канавки (рис. 8, в), для получения сужающейся высокоаспектной канавки ($A=16$) были уменьшены энергия ионов на стадии травления до 35 эВ и отношение t_{etch}/t_{dep} до 5/2 (рис. 9, а). С увеличением t_{etch}/t_{dep} (5/1.5) и при небольшом увеличении энергии ионов (45 эВ) стенки канавки были уже вертикальными (рис. 9, б). С повышением энергии ионов до 95 эВ и увеличением t_{etch}/t_{dep} до 6 канавка стала расширяющейся. Отрицательный угол наклона стенки равнялся 1.4 градуса, при этом для достижения такой же глубины канавки потребовалось в два раза меньше циклов. ФУП на боковой стенке при этом практически не было, что свидетельствовало о слабой пассивации, поэтому расширяющаяся канавка образовывалась даже при узком угловом распределении ионов ($\Gamma_i=0.1$ эВ).

С повышением температуры ионов до 0.2, 0.4 эВ ($E_i=95$ эВ), что соответствует увеличению σ_i с 2.4 до 3.6 градусов, происходило увеличение отрицательного угла наклона стенки формируемой канавки до 2.08 и 2.75 градуса (рис. 9, в1, в2). Величина отрицательного угла наклона стенки была пропорциональна σ_i . Эти результаты свидетельствовали о том, что

угловое распределение ионов является важным фактором, определяющим угол наклона стенки. Чтобы получить канавку с вертикальными стенками при таком широком угловом распределении ионов, необходимо сильно увеличить стадию пассивации.

Показана способность модели управлять формой профиля канавки в Bosh-процессе. Для формирования канавок с переменным наклоном боковых стенок был проведён тест травления в два этапа. На рис. 9, а1-б2 показано, как изменяется форма первоначально сформированной расширяющейся канавки (рис. 9, а1) после изменения условий процесса для формирования канавки с сужающимися стенками (рис. 9, б1). При этом на боковых стенках расширяющейся канавки осаждается ФУП заметной толщины. В другом численном эксперименте показано, как сужающаяся канавка (рис. 9, а2) после изменения параметров для получения канавки с расширяющимися стенками превращается в канавку переменной ширины (рис. 9, б2).

В эксперименте при формировании узких и широких канавок наблюдаются различные аспектные эффекты. Эти эффекты возникают и при моделировании (рис. 6 в, рис. 10 а). Обычно при оптимальных условиях травление является аспектнозависимым. Реализация АНЗ- травления сталкивается с большими трудностями. Экспериментально для получения АНЗ-травления необходимо резко усилить стадию пассивации и увеличить скорость травления ФУП на дне канавки. Это достигается путем увеличения времени стадии пассивации и повышением энергии ионов на стадии травления. В этом случае на дне широкой канавки образуется более толстая ФУП, чем на дне узкой канавки. Ее удаление на стадии травления занимает некоторое время, и поэтому глубина травления Si в широкой и узкой канавках может быть одинаковой или даже больше (обратный апертурный эффект). Скорость травления канавок при этом уменьшается.

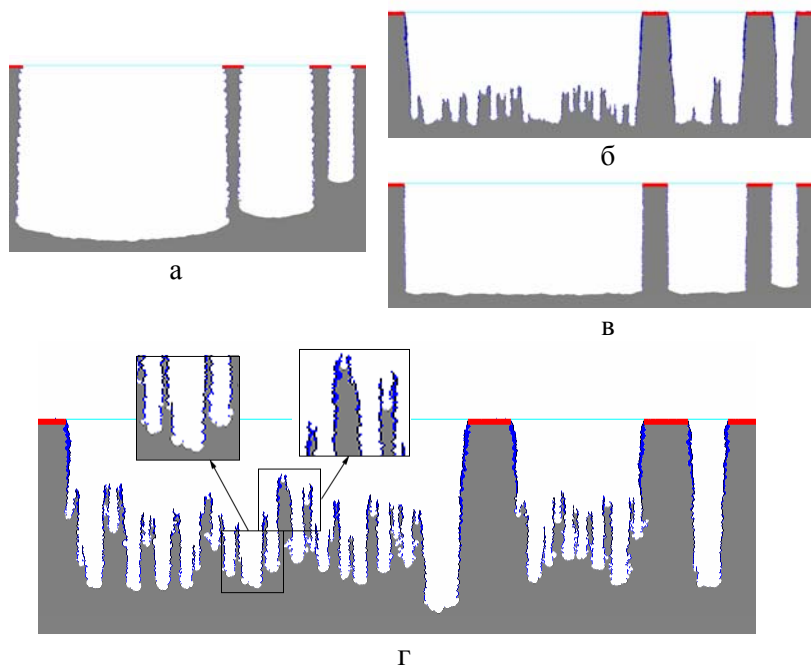


Рис. 10. Моделирование АЗ- и АНЗ-травления.
 Вероятность реакции $P_{F-поверх.Si}$: 0.8 (а, б, г); 0.1 (а).
 Образование микро-наноигл.

При моделировании условия реализации АНЗ-травления были такими же. Они достигались путем уменьшения вероятности реакции радикалов фтора с поверхностью кремния и уменьшения энергии ионов на стадии травления и увеличения времени полимеризации.

Моделирование показывает, что при таких условиях можно добиться эффекта АНЗ-травления со снижением скорости травления (рис. 10, в). Однако при условии сильной пассивации и высокой энергии ионов наблюдалось образование наноигл на дне Si канавок (рис. 10, б, г). Микроиглы возникают на дне широкой канавки (более 1 мкм) и не образуются на дне узкой (менее 0.1 мкм) канавки. Анализ показал, что возникновение микроигл обусловлено неоднородным по поверхности образованием и травлением ФУП и большой разницей в скоростях травления ФУП

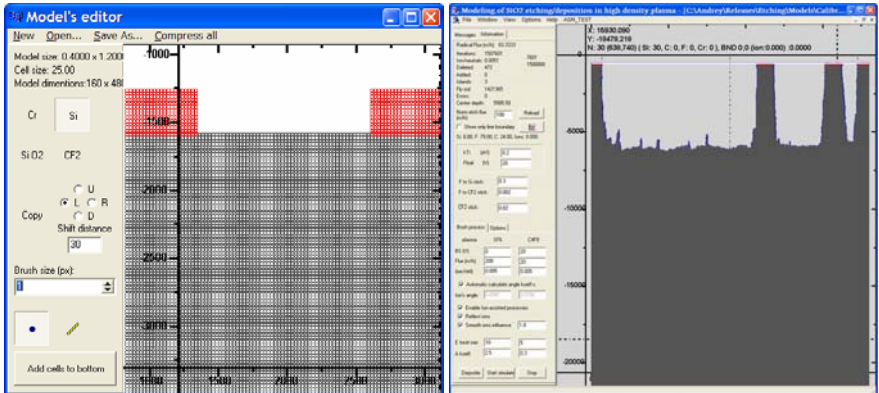


Рис. 11. Программная реализация предложенного метода в комплексе EDPS. Программа создания профилей (слева) и программа расчёта моделирования (справа).

и Si (рис. 10, б, в, г). При повторении циклов Т/О толщина ФУП на стенках наноигол увеличивается. Эта наноразмерная вертикально стоящая стенка из ФУП не поддается травлению в плазме SF_6 и может быть ядром образования нано, а затем микромаски (вставка на рис. 10, г). В узких канавках осаждение ФУП, ее травление и травление Si более однородно и поэтому микроиглы не образуются.

В пятой главе приводится программная реализация предложенной модели и описываются основные её особенности.

Метод моделирования реализован в созданном интерактивном программном комплексе EDPS (Etch-deposition profile simulator). Комплекс предоставляет широкие возможности для проведения численных экспериментов моделирования и состоит из двух программ: 1) программа создания и редактирования начальных профилей канавок (рис. 11, слева); 2) программа расчёта процесса моделирования (рис. 11, справа).

Отметим основные особенности комплекса моделирования:

- гибкий инструмент создания начальных профилей;
- полуавтоматический расчёт параметров моделирования;
- визуализация данных моделирования посредством библиотеки OpenGL;

- градиентная раскраска клеток профиля в зависимости от их материала;
- построение графиков скоростей и других статистических данных процесса в реальном времени;
- сохранение параметров моделирования и создание серии снимков хода процесса моделирования;
- достаточно высокая скорость расчётов.

Разработан формат хранения исходных данных с использованием алгоритма сжатия, подобного RLE.

Разработаны алгоритмы начального измерения ширины и глубины канавки, а также методы расчёта скорости процесса, средней и нормированной скорости процесса. Перечисленные показатели хода процесса записывались в специальном текстовом формате DAT программы Origin v6.1.

В алгоритмах отрисовки применялась цветовая интерполяция поверхностных клеток в зависимости от их наполненности теми или иными атомами или молекулами.

Оценена трудоёмкость вычислений и зависимость её от различных параметров. Оказалось, что трудоёмкость квадратично зависит от размеров домена моделирования и напрямую зависит от скорости алгоритма нахождения точки пересечения траектории падающей частицы с поверхностью. Предлагаются варианты дальнейшего ускорения работы комплекса с применением распараллеливания вычислений, использованием многоядерной архитектуры процессоров, применением низкоуровневой и программной оптимизации кода и оптимизации математических алгоритмов. На данном этапе комплекс позволяет рассчитывать структуры общей площадью около 7 мкм (эквивалентно $\sim 1.12 \times 10^6$ клеток с шириной 25 Å) за время в пределах 18 часов в зависимости от выбора платформы.

При разработке программного комплекса закладывалась перспектива поддержки трёхмерного моделирования процессов с построением плоских сечений и проекций.

В **заключении** сделаны основные выводы и приведены результаты проделанной работы, выделена научная новизна работы, показано, что предложенный метод имеет большое прикладное значение.

Работы автора по теме диссертации

Основные результаты диссертации представлены в следующих публикациях:

1. Амиров И.И., Шумилов А.С. Влияние ионной бомбардировки на травление канавок в кремнии в высокоплотной фторуглеродной плазме. Эксперимент и модель. Материалы XVI Международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью» Москва. 2003. Т. 2. С.302-305.
2. I.Amirov, M.Izyumov, O.Morozov, A.Shumilov. Formation of micro- and nanostructures in Si and SiO₂ using plasma etching and deposition process. Abstracts. ICMNE -2003” Moscow, Zvenigorod,Russia. P.O2-50.
3. Shumilov A.S.,Amirov I.I. Simulation of feature profile evolution during deep plasma etching of Si by cell-string hybrid method. // Book of abstr. Int. Conf. “Micro- and nanoelectronics 2005” ICMNE - 2005. October 3-7th, 2005. Moscow Zvenigorod, Russia. P. O2-17.
4. Shumilov A.S.,Amirov I.I. Simulation of feature profile evolution during the cyclic etching/passivation process of deep plasma Si etching by the cell-string hybrid method. // Book of abstr. Int. Conf. “Micro- and nanoelectronics 2007” ICMNE - 2007. October 3-7th, 2007. Moscow Zvenigorod, Russia. P. O3-12.
5. Шумилов А.С., Амиров И.И. Моделирование формирования глубоких канавок в Si в плазмохимическом, циклическом травление/пассивация процессе. // Микроэлектроника. 2007. Т. 36. № 4. С. 277-287.
6. Амиров И.И., Шумилов А.С. Механизм формирования микроигл на поверхности кремния во фторосодержащей плазме в циклическом травление/осаждение процессе. // Химия высоких энергий. 2008. Т. 42. №5. С.446-450.
7. Шумилов А.С., Амиров И.И., Лукичев В.Ф. Моделирование формирования глубоких с разным профилем канавок в кремнии в плазмохимическом, циклическом процессе //Стендовый доклад конференции 5-го Международного симпозиума по теоретической и прикладной плазмохимии, Иваного, 3-8 сентября 2008г.

8. Шумилов А.С., Амиров И.И. Моделирование процессов формирования наноструктур на поверхности кремния в плазмохимическом, циклическом процессе травление/осаждение. //Материалы конференции «Квантовые компьютеры, микро- и нанoeлектроника» Ярославль, 22-23 сентября 2008г. С.140-146.