

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Химический факультет

Кафедра физической и коллоидной химии

Работа допущена к защите

зав. кафедрой

_____ В.В. Паньков

«_____» _____ 2009 г.

Дипломная работа

**Тема: Компьютерное моделирование процесса растворения
кристаллов типа алмаза**

Выполнил студент гр. 13 _____ А.В. Молчанов

Научный руководитель,

кандидат физ-мат наук, доцент _____ А.В. Юхневич

Рецензент,

кандидат хим наук, доцент _____ М.П. Гилевич

Аннотация

На основе мировых достижений в области моделирования процесса растворения кристаллов типа алмаза была разработана компьютерная программа GRES. С её помощью был сделан шаг в направлении изучения механизма растворения кристаллов типа алмаза. При сопоставлении результатов проведённых натурных и компьютерных экспериментов был сделан вывод о путях совершенствования разработанной компьютерной программы.

На аснове сусветных дасягненняў у вобласці мадэлявання працэсу растварэння крышталёў тыпу алмаза была распрацавана камп'ютэрная праграма GRES. З яе дапамогай быў зроблены крок у напрамку вывучэння механізму растварэння крышталёў тыпу алмаза. Пры супастаўленні вынікаў праведзеных натурных і камп'ютэрных эксперыментаў быў зроблены вывады а шляхах удасканалвання распрацаванай камп'ютэрнай праграмы.

On the basis of world achievements in the field of modeling of process of dissolution of diamond-lattice crystals computer program GRES has been developed. With its help the step to a direction of studying the mechanism of dissolution of diamond-lattice crystals have been taken. By comparison results of natural and computer experiments have been concluded on ways to improve the developed computer program.

Содержание

Введение	4
Глава 1. Обзор литературы	9
1.1. Процесс растворения	9
1.2. Алгоритмы моделирования	10
1.2.1. Метод Монте-Карло	10
1.2.2. Метод клеточного автомата	15
1.3. Программы для моделирования	15
1.3.1. Программа Visual TAPAS	17
Глава 2. Результаты работы	19
2.1. Разработка компьютерной программы	19
2.1.1. Алгоритм	19
2.1.2. Реализация	19
2.1.3. Интерфейс	20
2.1.4. Функциональность	21
2.2. Натурный эксперимент	22
2.3. Сравнение результатов натурального и компьютерных эксперимен- тов	24
2.3.1. Моделирование по методу МК	27
2.3.2. Моделирование по методу КА	27
Выводы	32
Литература	34
Приложение А. Вероятность отрыва некоторых групп атомов . . .	35

Введение

Анизотропное травление (АТ) широко используется при производстве кремниевых приборов. В сочетании с другими технологиями АТ применяется при создании микроэлектромеханических устройств (MEMS). На сегодняшний день, по данным IC Insights, на рынке датчиков и актюаторов с оборотом в 5 млрд. долл. присутствует 80% устройств, в которых применена MEMS-технология. Встроенные в них MEMS-структуры выполняют функции датчиков и микроприводов. К подобным микроэлектромеханическим приборам относятся полупроводниковые датчики давления, акселерометры, гироскопы, микрофоны, кремниевые микровибраторы, а также широкий ряд актюаторов, в том числе сопла головок струйных принтеров, матрицы микрозеркал, биочипы, радиочастотные (RF) и акустические (SAW) фильтры. Пример MEMS прибора приведён на рис. 1.

Широкое применение АТ обусловлено рядом причин:

- низкая себестоимость
- отсутствие деструктивного воздействия на объёмную структуру кристалла
- высокая воспроизводимость
- нанометровая точность

Более подробно о практической ценности АТ можно прочитать в [2].

Анизотропное травление основано на большом различии в скоростях травления разных кристаллографических плоскостей кристаллов. Так при использовании в качестве травителя водный раствор КОН травление в плоскости (100) происходит в 400 раз быстрее чем в плоскости (111).

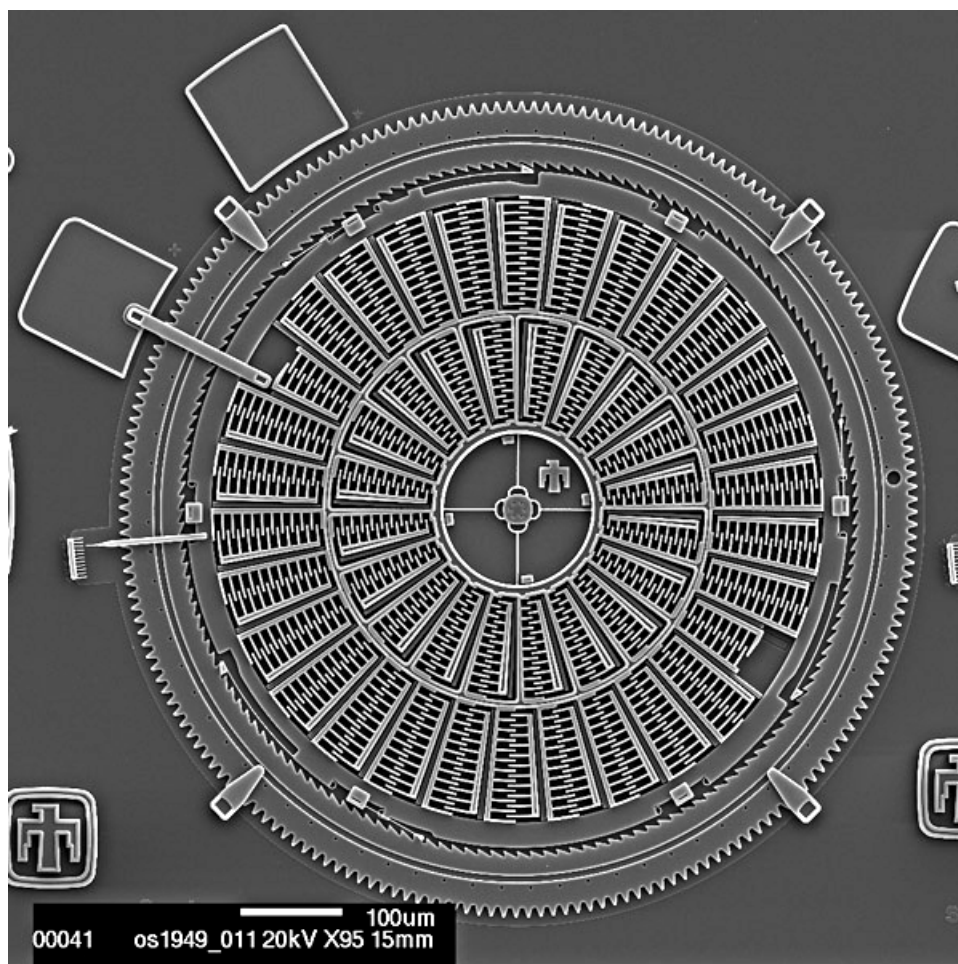


Рис. 1. Микродвигатель [1]

Экспериментально полученные данные о скоростях травления кремния различных кристаллографических ориентаций [3] приведены в табл. 1.

Несмотря на высокую значимость для полупроводниковой техники АТ, его использование затруднялось недостаточной изученностью. АТ – сложный процесс, состоящий из множества химических и электрохимических реакций. Значимый прогресс в этой области произошел лишь в последнее десятилетие, благодаря развитию техники исследования поверхности, а также возросшим мощностям компьютеров, которые позволили моделировать протекающие при АТ процессы.

Большой вклад в развитие методов компьютерного моделирования процес-

Таблица 1. Скорости травления кремния различных кристаллографических ориентаций

Кристаллографическая ориентация	Скорость травления при различных концентрациях КОН, мкм/мин		
	30%	40%	50%
100	0.797	0.599	0.539
110	1.455	1.294	0.870
210	1.561	1.233	0.959
211	1.319	0.950	0.621
221	0.714	0.544	0.322
310	1.456	1.088	0.757
311	1.436	1.067	0.746
320	1.543	1.287	1.013
331	1.160	0.800	0.489
530	1.556	1.280	1.033
540	1.512	1.287	0.914
111	0.005	0.009	0.009

са растворения кремния сделал Gosálvez [4].

Компьютерное моделирование процесса «мокрого» травления дает возможность оптимизировать все необходимые параметры травления без обращения к реальному производству, значительно сократить время выхода изделия на рынок и материальные затраты.

Существует несколько программных продуктов для моделирования процесса травления кремния. Вот некоторые из них:

Visual TAPAS — разработка Miguel A. Gosálvez. Yan Xing в университете Нагоя, Япония.

<http://www.fyslab.hut.fi/mag/VisualTAPAS>

AnisE — продукт фирмы PhoeniX, Голландия.

<http://www.phoenixbv.com>

Etch3D — продукт фирмы ЕвроИнтех, Москва.

<http://www.eurointech.ru>

ASECA— пакет для программы Mathematica для моделирования травления методом клеточного автомата, разработка Kazume Nishidate, Mamoru Baba, университет Iwate, Япония.

Цель данной работы:

1. ознакомиться с процессом растворения кремния
2. подытожить наработки в мире в области моделирования растворения
3. оценить особенности доступных программ
4. на основе изученных моделей растворения кристаллов разработать свою компьютерную программу для моделирования травления кремния с целью изучения механизма растворения кристаллов типа алмаза
5. провести серию натурных и компьютерных экспериментов по изучению рельефа, формирующегося вблизи вершины прямого угла маски со сто-

ронами, ориентированными в направлениях типа $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ в плоскости (001)

6. на основании сравнения результатов натуральных и компьютерных экспериментов сделать вывод об особенностях использованных алгоритмов для моделирования
7. наметить пути совершенствования разработанной программы

План работы:

1. Процесс растворения кремния
2. Алгоритмы моделирования
3. Программы для моделирования
4. Натурный эксперимент
5. Компьютерный эксперимент

Глава 1

Обзор литературы

1.1. Процесс растворения

Травление – контролируемое удаление материала поверхности твёрдого тела. Травление является частным случаем растворения. Травитель состоит из 2-х компонентов:

окислитель неорганические кислоты (HNO_3 , H_2SO_4), пероксиды (H_2O_2 , Na_2O_2), комплексные соли ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$, KMnO_4)

растворитель галоидные кислоты (HCl , HF), гидроксиды (KOH , NaOH)

Могут применяться регуляторы скорости:

замедлители карбоновые кислоты (CH_3COOH)

ускорители тяжёлые галогены (Br_2 , I_2)

По виду зависимости скорости травления от кристаллографической ориентации существуют два вида химического растворения:

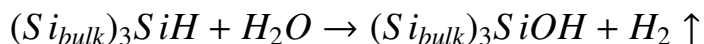
- изотропное
- анизотропное

Изотропное травление происходит неупорядоченно, с одинаковой скоростью по всем пространственным направлениям. Анизотропное травление, напротив, происходит с различными скоростями для разных кристаллографических плоскостей кристаллов.

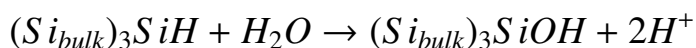
Далее рассмотрим анизотропное травление в системе $\text{KOH} - \text{H}_2\text{O}$. Выбор травителя связан с его наибольшей распространённостью и изученностью.

Растворение – сложный процесс, включающий в себя химические и электрохимические реакции. Упрощенно его можно представить в виде 2-х стадий: окисление и травление (рис. 1.1).

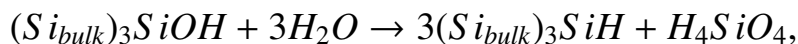
Окисление



ЭХ окисление



Травление



где Si_{bulk} – атом кремния, лежащий в объёме кристалла.

1.2. Алгоритмы моделирования

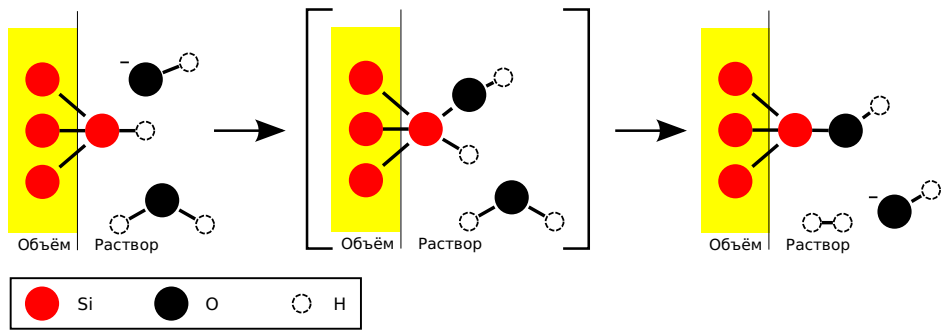
1.2.1. Метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло (МК) относится к т.н. атомистичным (микроскопическим) методам моделирования АТ. Микроскопические методы основаны на предположении, что зависимость скорости травления от ориентации поверхности связана с различием скоростей реакции для различных групп атомов.

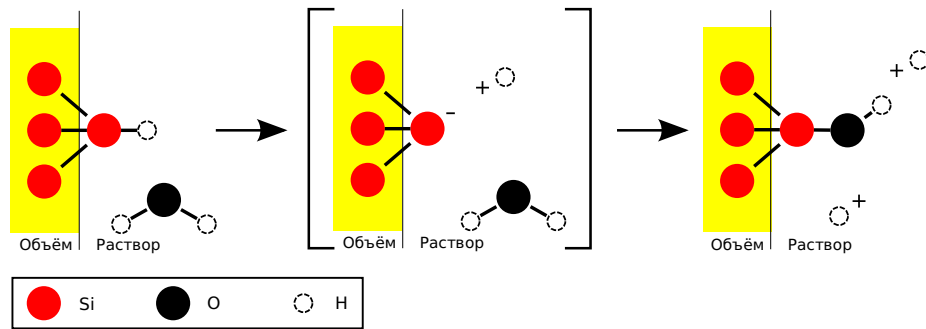
Скорость реакции для разных групп атомов связана с энергией связи данного атома (ТА) с первыми соседями¹ и взаимодействием между присоединенными группами -Н(-ОН). Энергия связи между атомом Si с присоединенными i -ОН группами и атомом Si с присоединенными j -ОН группами численно равна:

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_o - (i + j) \cdot \epsilon, \quad (1.1)$$

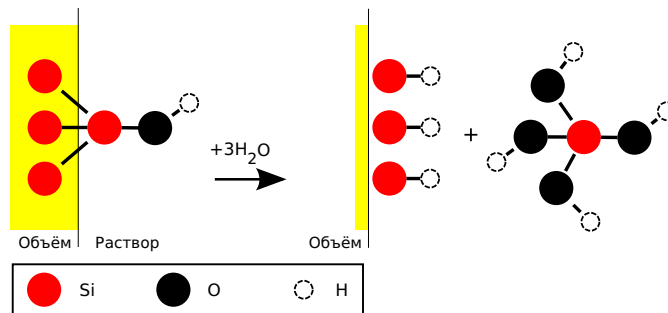
¹ атомы кремния, с которыми непосредственно связан данный атом



(a) Химическое окисление



(b) Электрохимическое окисление



(c) Травление

Рис. 1.1. Описание некоторых реакций при анизотропном травлении [5]

где $\epsilon_o \approx 2.7$ эВ – энергия связи между атомами в объёме кристалла, $\epsilon \approx 0.4$ эВ – энергия связи Si-OH.

Полная связи между поверхностным атомом и n первыми соседями равна сумме энергий связей:

$$E_{bonds} = \sum_{j=1}^n \epsilon_{m_i m_j} \quad (1.2)$$

С учётом геометрических затруднений возникающих в связи с присоединенными группами -H (-OH):

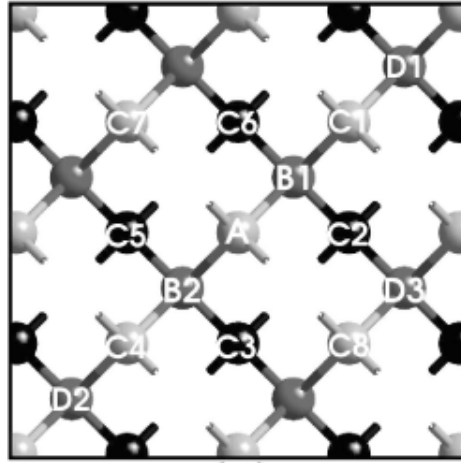


Рис. 1.2. Атом А на поверхности (100), имеющий 2 первых соседа (В1-В2) и 8 вторых соседей (С1-С8). Атомы С1-С6 — это прямые вторые соседи, С7-С8 — не прямые вторые соседи [4]

$$E = E_{bonds} + \sum (\epsilon_{OH/H}^{TA} + \epsilon_{OH/OH}^{TA}) + \sum (\epsilon_{OH/H}^{FN} + \epsilon_{OH/OH}^{FN}), \quad (1.3)$$

где $\sum (\epsilon_{OH/H}^{TA} + \epsilon_{OH/OH}^{TA})$ и $\sum (\epsilon_{OH/H}^{FN} + \epsilon_{OH/OH}^{FN})$ – символическое обозначение полной энергии взаимодействия между -ОН группами, присоединенных к данному атому (ТА) или первому соседу (FN), и группами -Н и/или -ОН, присоединенных к непрямым вторым соседям² атома ТА или FN.

Пример первых и вторых соседей атома в решётке типа алмаза приведён на рис. 1.2.

Изменение поверхности во времени происходит вследствие случайного удаление атомов с вероятностью:

$$p_{\alpha} = p_{o\alpha} e^{-\Delta E_{\alpha}/k_B T}, \quad (1.4)$$

где энергия активации ΔE_{α} определяется как:

²прямые вторые соседи – атомы кремния, с которыми связаны первые соседи
 не прямые вторые соседи – атомы, присоединение к которым групп -Н или -ОН вызывает геометрическое затруднение для присоединения групп -ОН к данному атому

$$\Delta E_{\alpha} = \max(0, E - E_{\alpha}) \quad (1.5)$$

p_{α} и E_{α} – параметры описывающие разные типы поверхностных атомов.

Вероятность отрыва атома Si с числом первых соседей n_1 и числом вторых соседей n_2 равна:

$$p(n_1, n_2) = p_0 \frac{1}{1 + e^{\beta \epsilon_1 (n_1 - n_1^0)}} \frac{1}{1 + e^{\beta \epsilon_2 (n_2 - n_2^0)}}, \quad (1.6)$$

где $\beta = 1/k_B T$, $p_0 = (1 + e^{-\beta \epsilon_1 n_1^0})(1 + e^{-\beta \epsilon_2 n_2^0})$ и ϵ_1 , ϵ_2 , n_1^0 и n_2^0 – параметры модели. ϵ_1 и ϵ_2 – средние энергии связи с первыми и вторыми соседями соответственно. n_1^0 – максимальное число связей с первыми соседями, при котором атом не имея вторых соседей будет оторван при $T=0K$ в результате взаимодействия с травителем. n_2^0 – максимальное число связей со вторыми соседями, при котором атом не имея первых соседей будет оторван при $T=0K$ в результате взаимодействия с травителем.

При моделировании процесс диффузии не учитывается.

Классификация и вероятности отрыва разных групп атомов приведены в табл. А.1.

Блок-схема алгоритма МК [4] приведена на рис. 1.3.

При инициализации данные о поверхностных атомах записываются в массивы, и рассчитывается вероятность отрыва, которая записывается в третий массив. Далее случайным образом выбирается поверхностный атом, не выбиранный ранее на данном шаге времени, и генерируется случайное число, если оно меньше чем вероятность отрыва данного атома то последний отрывается от поверхности. Число рассмотренных атомов n увеличивается на единицу. Если атом удаляется, то происходит следующее:

- Обновляется информация у его бывших первых и вторых соседей.

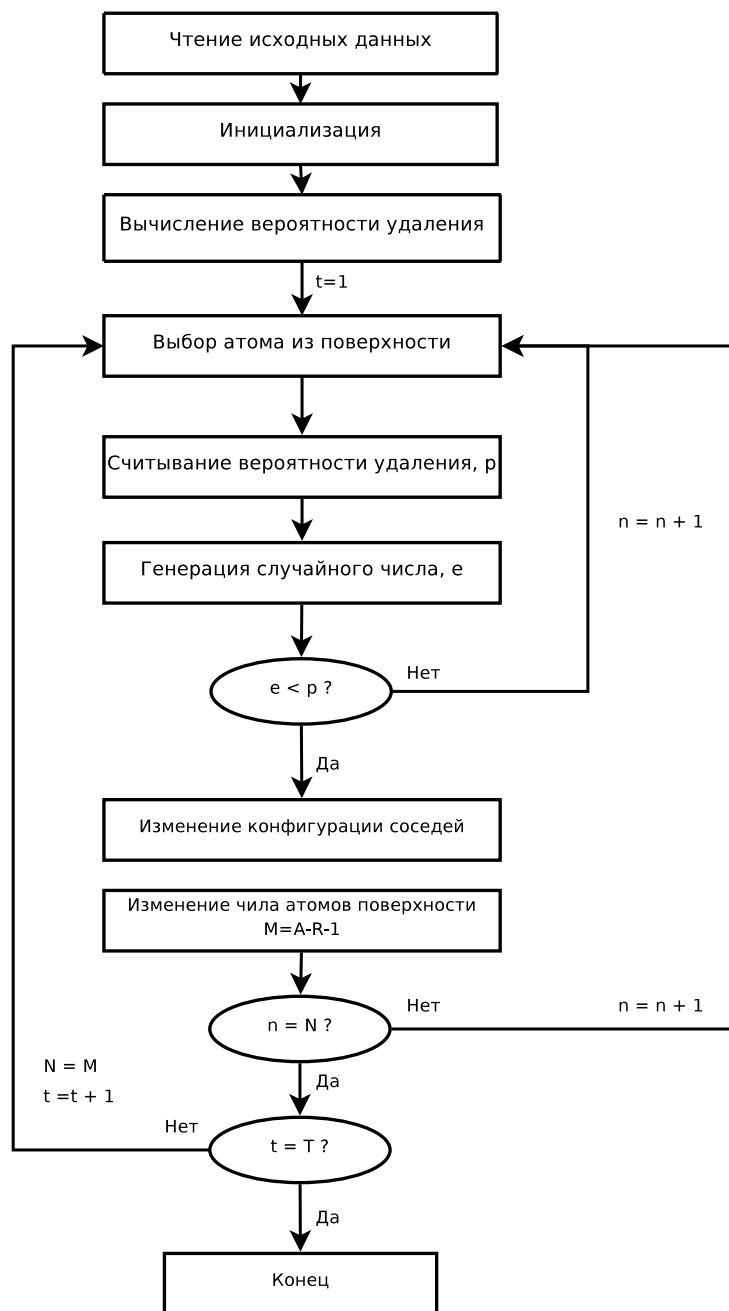


Рис. 1.3. Диаграмма алгоритма МК (N – число всех атомов поверхности, T – время конца травления, M – число атомов поверхности на данном шаге времени, n – число рассмотренных атомов, t – текущий шаг время) [4]

- Первые соседи, которые были связаны лишь с ТА также удаляются (число R).
- Первые соседи, которые были связаны с 4-мя атомами (т.е. находились в объёме) становятся поверхностными атомами (число A).
- Таким образом число поверхностных атомов становится равным $M = A - R - 1$
- Если были рассмотрены все атомы поверхности, то начинается следующий шаг времени (t).

1.2.2. Метод клеточного автомата

Блок-схема алгоритма клеточного автомата (КА) приведена на рис. 1.4. Метод КА также как и МК относится к атомистичным методам моделирования АТ. Отличие его от МК заключается в том, что на каждом шаге времени принимается решение об удалении каждого атома поверхности, но до наступления следующего момента времени удаление не происходит.

В следствие этого метод Монте-Карло лучше описывает мелкие детали (морфологию) поверхности, а КА точнее описывает систему в целом. Также КА является более быстрым алгоритмом. Он даёт близкий к алгоритму МК о результат, но при этом позволяет реализовать многопоточность.

1.3. Программы для моделирования

Для сравнения результатов компьютерного моделирования выполненного в программе GRES использовалась программа Visual TAPAS. Этот выбор обусловлен её наибольшей функциональностью из доступных программ.

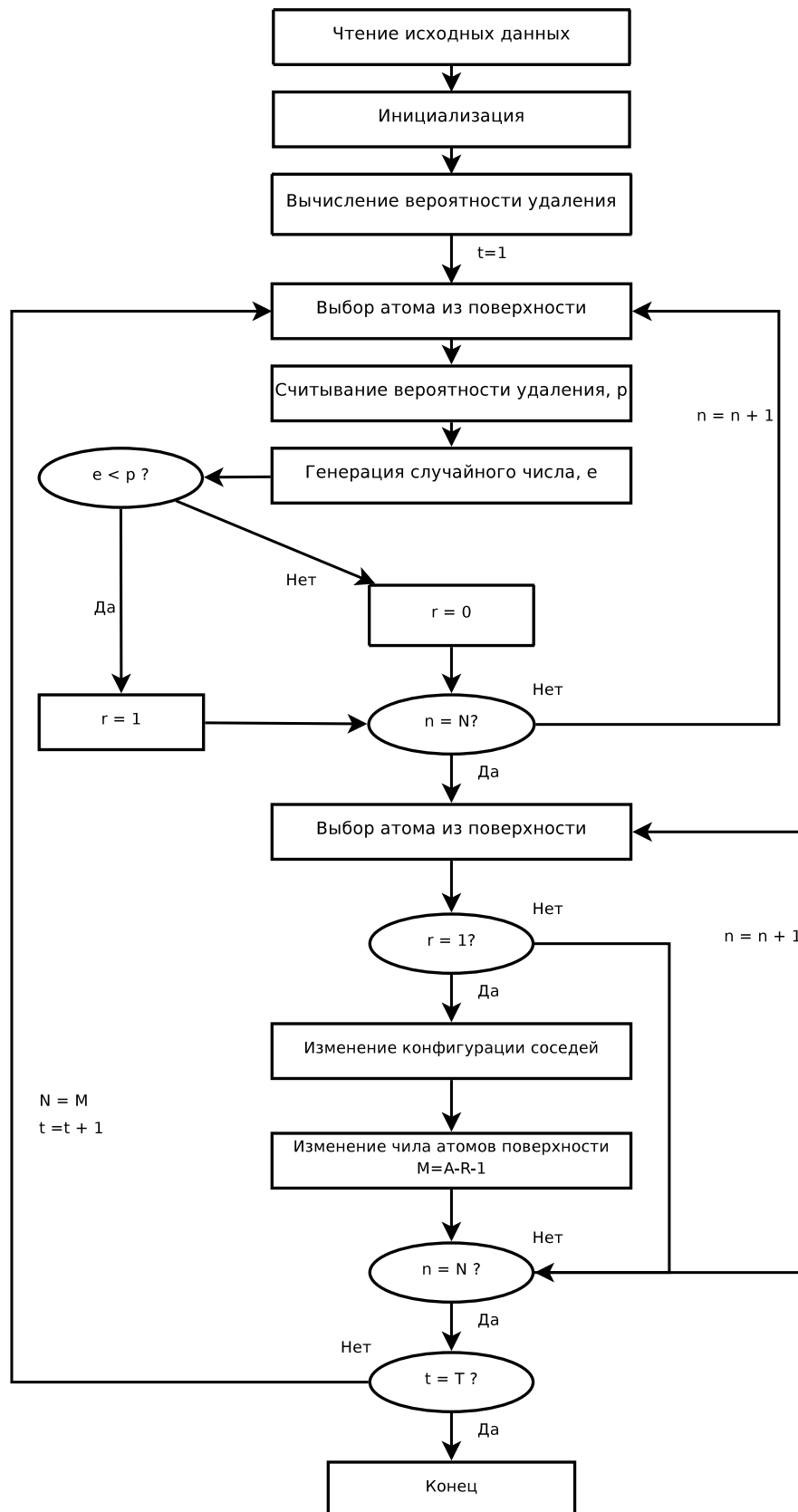


Рис. 1.4. Алгоритм метода КА (N – число всех атомов поверхности, T – время конца травления, M – число атомов поверхности на данном шаге времени, n – число рассмотренных атомов, t – текущий шаг время) [4]

1.3.1. Программа Visual TAPAS

Программа Visual TAPAS, автором которой является Gosálvez позволяет проводить моделирование:

1. мокрое травление «wet etching»
2. глубокое ионное реактивное травление «DRIE etching»

Моделирование можно проводить по двум алгоритмам:

1. КМС – кинетический Монте-Карло
2. СА – клеточный автомат

Исходная поверхность имеет прямоугольную либо сферическую форму с задаваемой высотой, длиной и шириной в микронах, либо в элементарных ячейках. Кристаллографическая ориентация поверхности задается при помощи индексов Миллера без ограничения на диапазон их значений.

В программе можно задавать вероятности отрыва атомов из любой группы, либо воспользоваться уже готовыми параметрами для некоторых травителей.

Программа позволяет накладывать маски из Si_3N_4 и SiO_2 на нижнюю и/или верхнюю поверхность. Накладывать и снимать маски можно в любой момент времени.

Полученный результат можно визуализировать различными способами;

- атомы в виде точек
- атомы и связи
- поверхности

Также представляется возможным экспортировать результат в форматы VRML или XYZ, для последующей обработки их в сторонних программах.

Программа предназначена для работы в ОС Windows. Доступную версию программы (2beta) можно запустить лишь 10 раз.

Глава 2

Результаты работы

2.1. Разработка компьютерной программы

Разработанная программа получила название GRES. Ниже будут описаны алгоритмы, лежащие в её основе, реализация, внешний интерфейс и функциональность.

2.1.1. Алгоритм

GRES позволяет проводить моделирование по двум алгоритмам:

1. КМС – кинетический Монте-Карло
2. СА – клеточный автомат

Выполнение программы состоит из следующих этапов (рис. 2.1):

1. поиск ячейки для заданной кристаллографической ориентации
2. инициализация данных
3. перебор поверхностных атомов и (возможно) удаления
4. визуализация

Алгоритмы моделирования СА и КМС приведены на рис. 1.3 и рис. 1.4.

2.1.2. Реализация

Программа написана на языке программирования C++. Для визуализации используется компьютерная библиотека OpenGL. Для создания пользовательского интерфейса применяется компьютерная библиотека Qt. В операционной

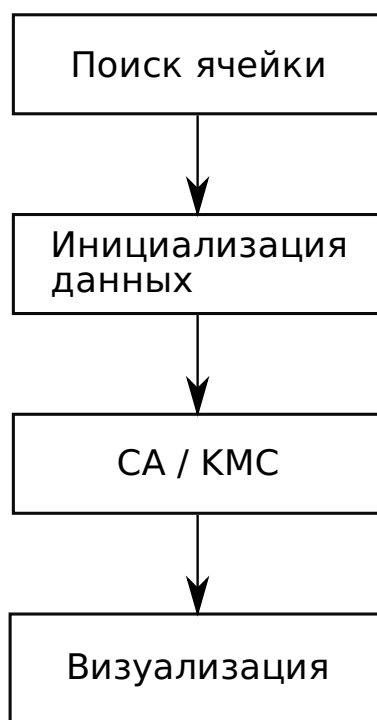


Рис. 2.1. Общий алгоритм программы GRES

системе Linux GRES была скомпилирована при помощи компилятора GCC версии 4.3.3 и Qt 4.5.1. В операционной системе Windows была скомпилирована при помощи компилятора GCC версии 4.3.0 и Qt 4.5.1.

Для ускорения отрисовки большого числа атомов и связей используется расширение OpenGL VBO. Это позволяет значительно снизить нагрузку на центральный процессор компьютера.

2.1.3. Интерфейс

Интерфейс программы приведен на рис. 2.2. Благодаря использованию компьютерной библиотеки Qt внешний интерфейс программы в операционных системах Linux и Windows выглядит одинаково.

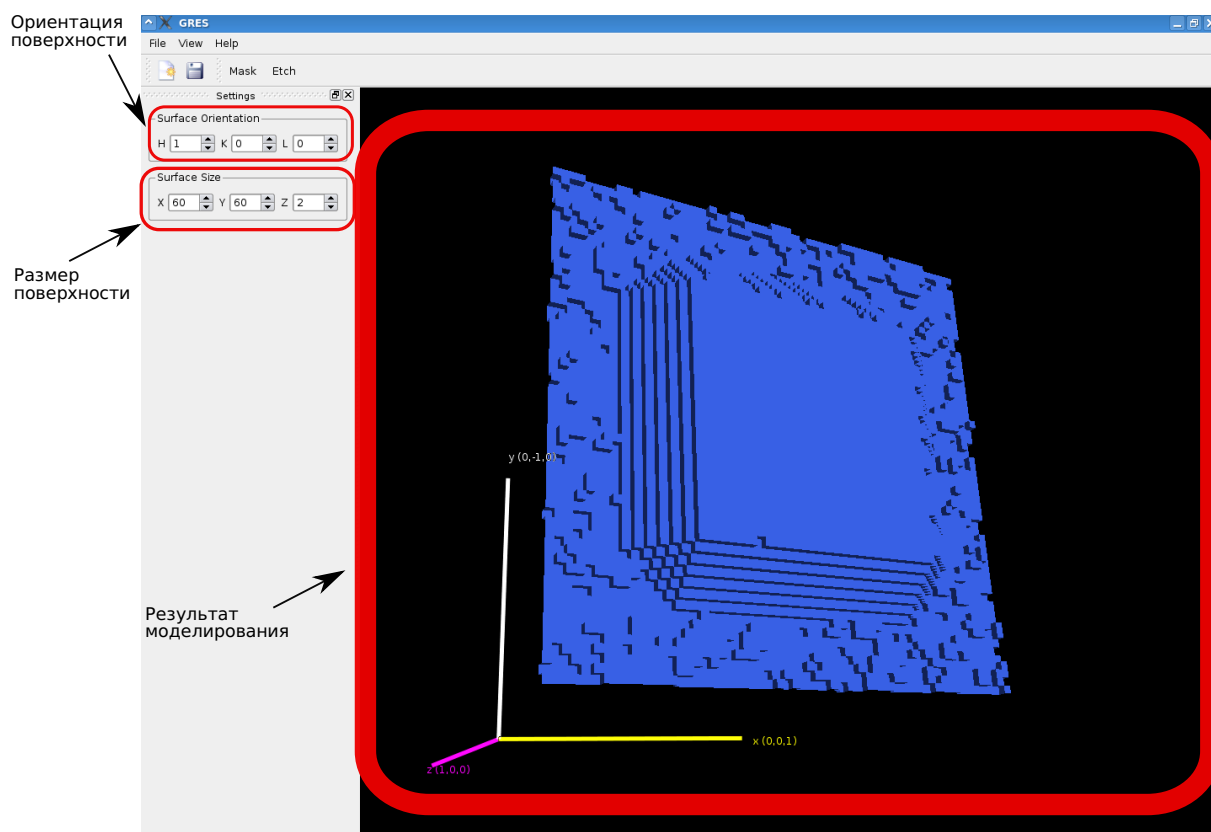


Рис. 2.2. Интерфейс программы

2.1.4. Функциональность

Исходная поверхность имеет прямоугольную форму с задаваемой высотой, длиной и шириной в элементарных ячейках. Кристаллографическая ориентация поверхности задается при помощи индексов Миллера без ограничения на диапазон их значений.

В программе можно задавать вероятности отрыва атомов с различным числом первых соседей.

Программа позволяет накладывать маски на верхнюю поверхность. Накладывать маску можно в любой момент времени. Маски задаются при помощи графических файлов в форматах GIF, BMP, TIFF, PNG или JPEG. Ограничений на разрешение и глубину цвета нет.

Полученный результат можно визуализировать различными способами;

- атомы
- атомы и связи
- поверхности ячеек

Визуализировать можно как поверхность образца так и объём. Визуализация результата моделирования различными способами приведена на рис. 2.3

В режимах визуализации атомы атомы и связи можно выбирать любой атом и получить сведения о координатах ячейки, в которой тот находится, его тип и количество первых соседей.

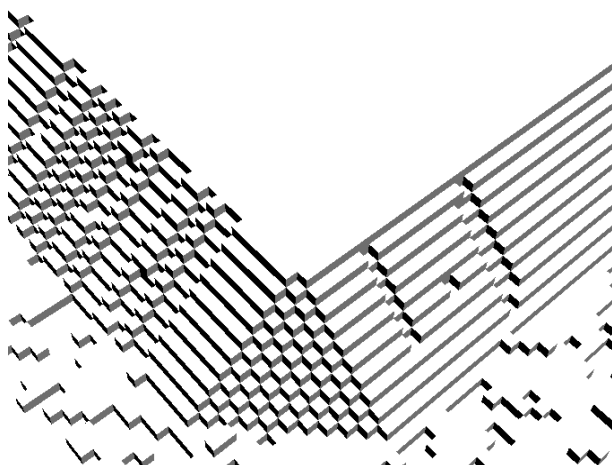
Результат моделирования можно сохранить в графических файлах в форматах BMP, TIFF, PNG или JPEG.

2.2. Натурный эксперимент

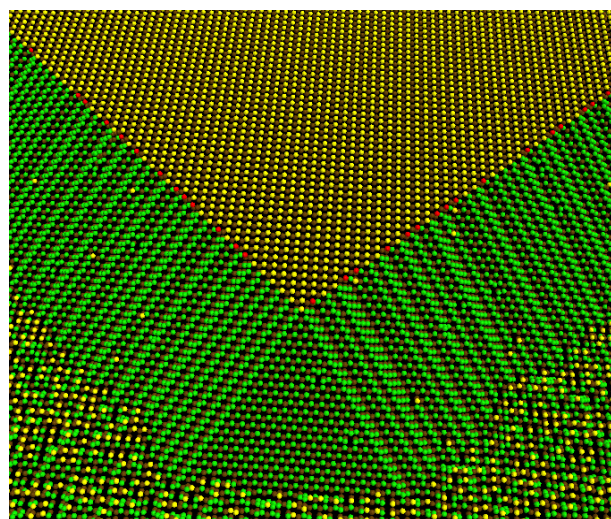
На поверхности (001) бездислокационного монокристаллического кремния методом микрофотографии были изготовлены оксидные маски толщиной 0,2 мкм. На рис. 2.4 представлена топология используемых типов маски. Такая топология позволяет в одном опыте выявить характер зависимости микро- и нанорельефа исследуемой поверхности от формы и кристаллографической ориентации края маски, от толщины травленого слоя (времени растворения).

После процедуры гидромеханической чистки образцы травят в водных растворах КОН с концентрациями из диапазона 8–14 моль/л (приготовленных с точностью $\pm 0,1$ моль/л) при температурах 60–80°C (заданных с точностью $\pm 0,1$ °C) в режиме постоянного перемешивания. Схема реактора травления приведена на рис. 2.5.

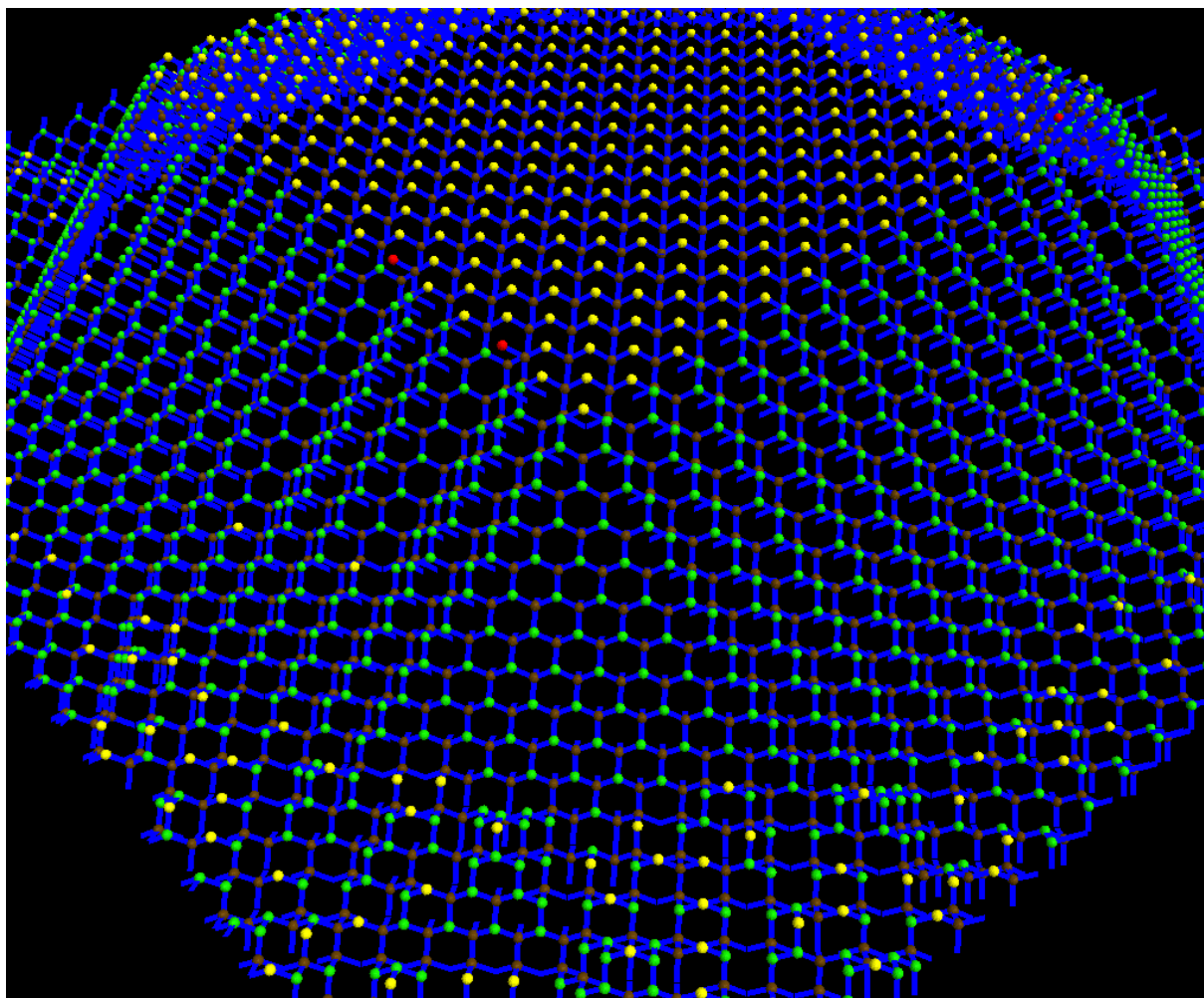
Структура поверхности образца после травления определялась при помощи сканирующего электронного микроскопа типа LEO-1420. Пример резуль-



а) Визуализация в виде поверхности ячеек



б) Визуализация в виде атомов



в) Визуализация в виде атомов и связей

Рис. 2.3. Способы визуализации результата моделирования в программе GRES: коричневым цветом обозначены атомы с 4 первыми соседями, зелёным – 3, желтым – 2, красным – 1

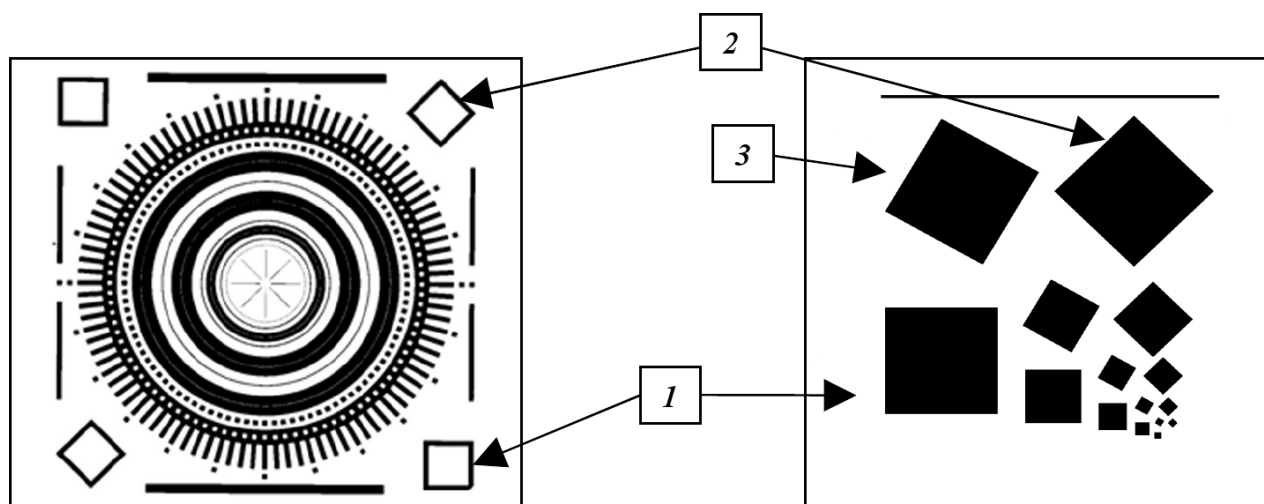


Рис. 2.4. Топология масок: 1 – квадраты с ориентацией краев в направлении типа $\langle 011 \rangle$; 2 – ориентация краев маски типа $\langle 001 \rangle$; 3 – ориентация краев маски 30° к направлению $\langle 011 \rangle$

тата, полученного при концентрации КОН 14М и температуре 70°C приведён на рис. 2.6.

Более подробно с методикой натурного эксперимента можно ознакомиться в [6]

2.3. Сравнение результатов натурального и компьютерных экспериментов

При моделировании исходный образец представлял собой квадрат со стороной 90×90 элементарных ячеек с ориентацией поверхности (001). Было произведено 3000 итераций. Моделирование проводилось по методам Монте-Карло и клеточного автомата в программах GRES и VT.

При работе с программой Visual TAPAS было установлено, что присутствующая в ней возможность задавать травители и температуру, либо вероятности отрыва атомов не работает.

Визуализация результата моделирования травления Visual TAPAS затруднена низкой скоростью и неудобством в целом. По этой причине полученная

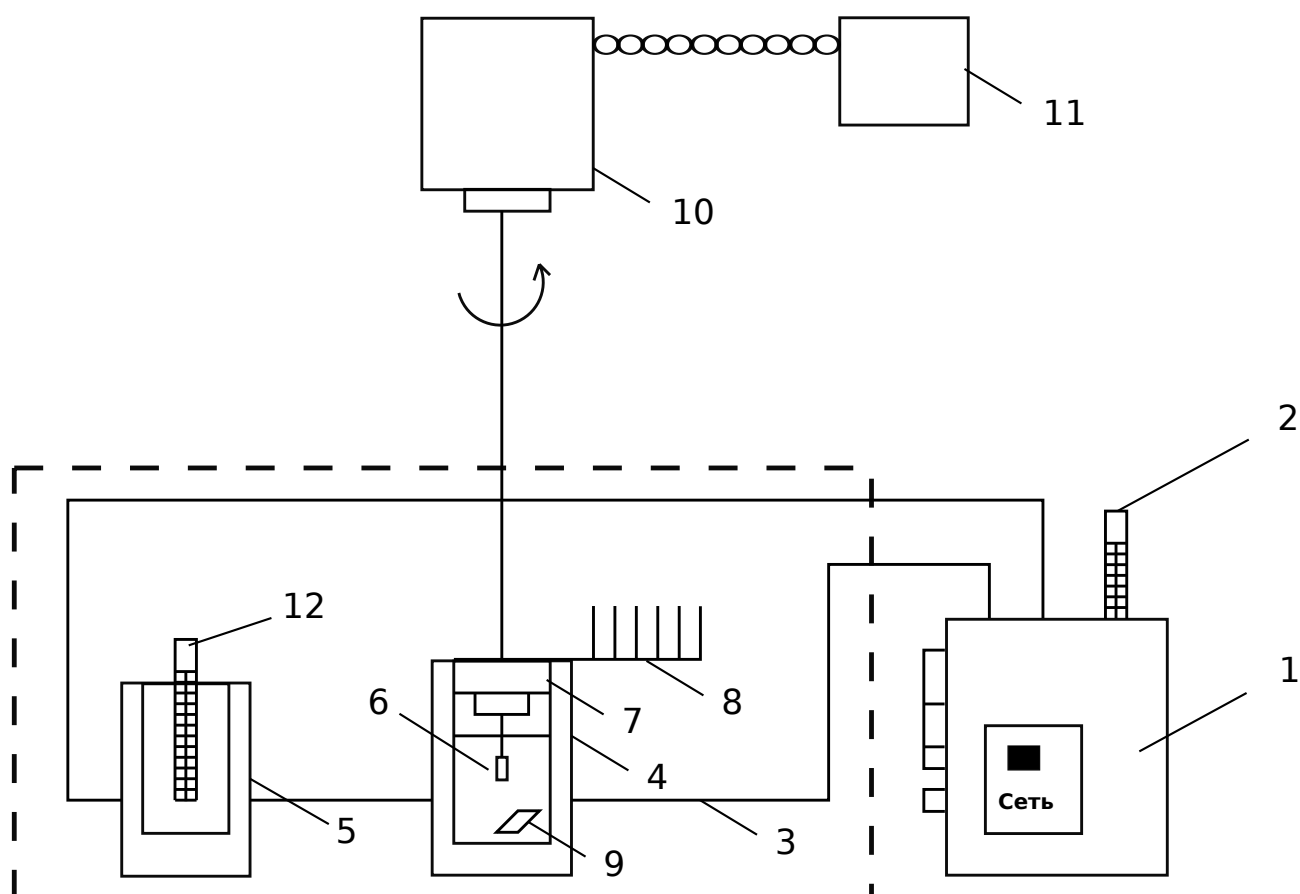
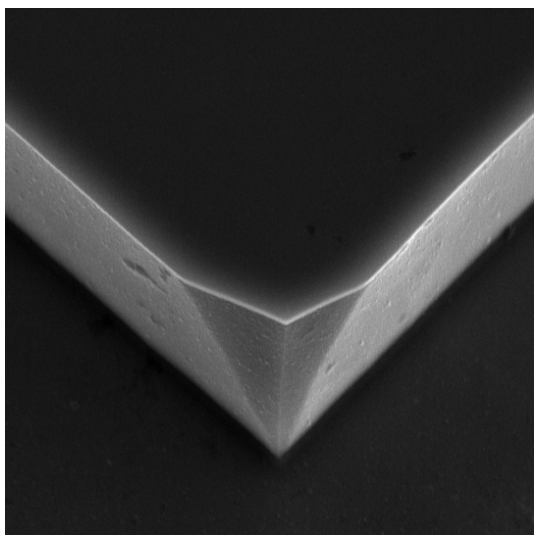
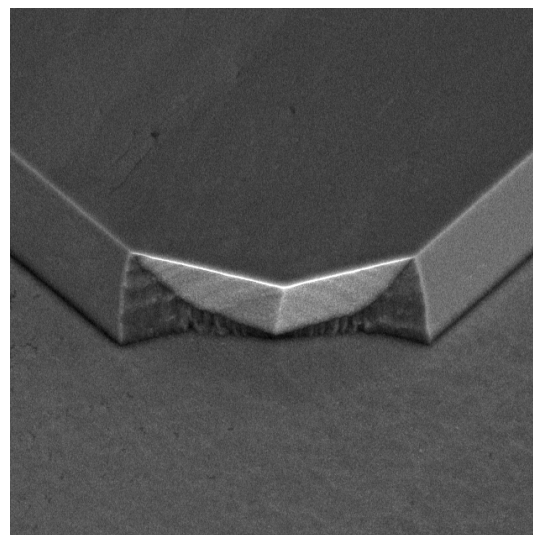


Рис. 2.5. Схема реактора травления: 1 – термостат; 2 и 12 – термометр; 3 – трубопровод; 4 – реактор для травления образцов; 5 – контрольный сосуд для определения температуры растворения; 6 – платиновая мешалка; 7 – медный обратный холодильник; 8 – радиатор обратного холодильника; 9 – образец; 10 – электродвигатель мешалки; 11 – источник постоянного тока



а) под прямоугольной маской с ориентацией сторон типа $\langle 100 \rangle$



б) под прямоугольной маской с ориентацией сторон типа $\langle 110 \rangle$

Рис. 2.6. Результат анизотропного травления кремния в плоскости (001)

трехмерная модель была экспортирована в файл формата VRML и визуализирована при помощи программы ParaView [7].

В разработанной программе GRES разница в результатах моделирования по методам Монте-Карло и клеточного автомата не заметна. В программе VT напротив разница весьма существенна, что является скорее всего особенностями использованных в ней алгоритмов.

Различие в результате моделирования программой GRES травления кремния в плоскости (001) под прямоугольной маской с ориентацией сторон типа $\langle 110 \rangle$ с натурным экспериментом обусловлено не достаточностью учёта лишь первых соседей.

Вероятности удаления атомов в программе GRES были заданы, исходя из данных в табл. 1.

2.3.1. Моделирование по методу МК

Сравнение результатов натурального эксперимента и компьютерного моделирования по методу Монте-Карло приведено на рис. 2.7 и рис. 2.8.

На рис. 2.7 видно, что в случае ориентации сторон маски типа $\langle 100 \rangle$ обе программы при использовании алгоритма МК дают результат близкий к натурному, но отобразить формирующиеся вблизи вершины прямого угла маски плоскости не удалось. Это является следствием не достаточной дифференциации вероятностей отрыва атомов, лежащих вблизи вершины прямого угла.

На рис. 2.8 видно, что в случае ориентации сторон маски типа $\langle 110 \rangle$ программа GRES не позволяет отобразить все формирующиеся вблизи вершины прямого угла маски плоскости. Это является следствием учёта лишь первых соседей. Как видно из рис. 2.3 формирующаяся под краем маски плоскость состоит из атомов с 3-мя первыми соседями. И-за учёта лишь первых соседей вероятности отрыва этих атомов одинаковы, что по всей видимости является ошибочным.

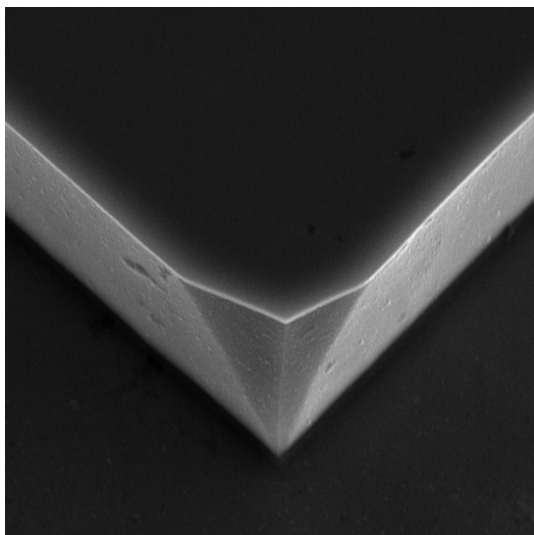
В случае программы VT можно обнаружить все формирующиеся плоскости, но они не достаточно чётко выражены. Это является следствием особенности реализации алгоритма в данной программе.

2.3.2. Моделирование по методу КА

Сравнение результатов натурального эксперимента и компьютерного моделирования по методу клеточного автомата приведено на рис. 2.9 и рис. 2.10.

На рис. 2.9 видно, что метод клеточного автомата в обеих программах в данном случае даёт схожий с методом МК результат.

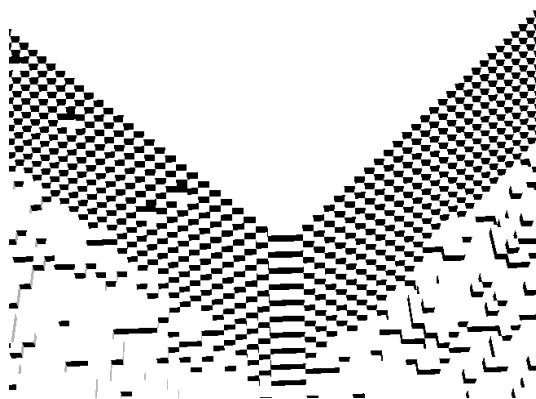
На рис. 2.10 видно, что метод клеточного автомата в обеих программах в данном случае даёт схожий с методом МК результат.



а) Результат травления на практике

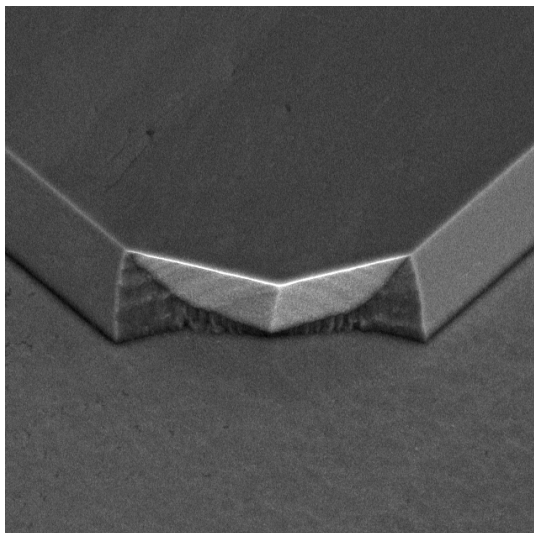


б) Моделирование при помощи VT

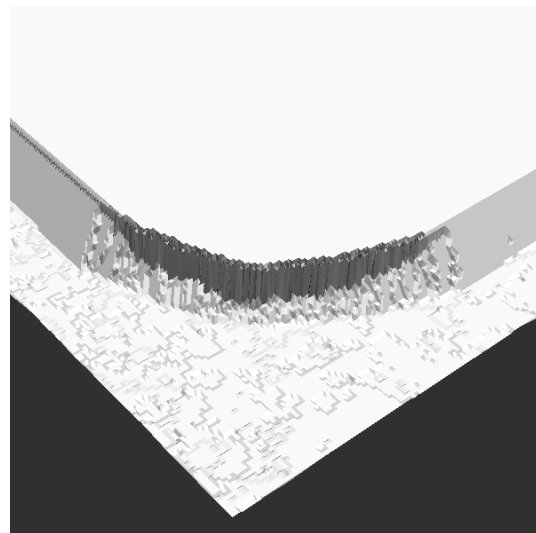


в) Моделирование при помощи GRES

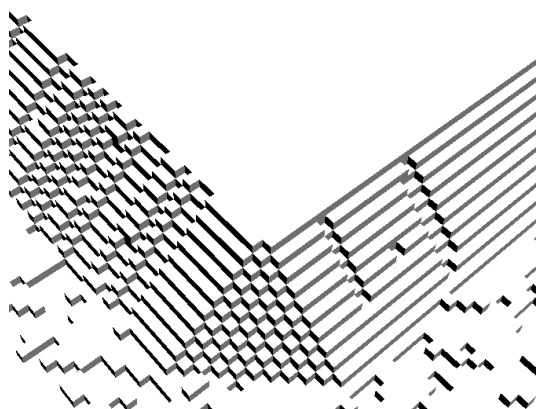
Рис. 2.7. Результат анизотропного травления кремния в плоскости (001) под прямоугольной маской с ориентацией сторон типа $\langle 100 \rangle$ в натурном эксперименте и моделировании по методу Монте-Карло



а) Результат травления на практике

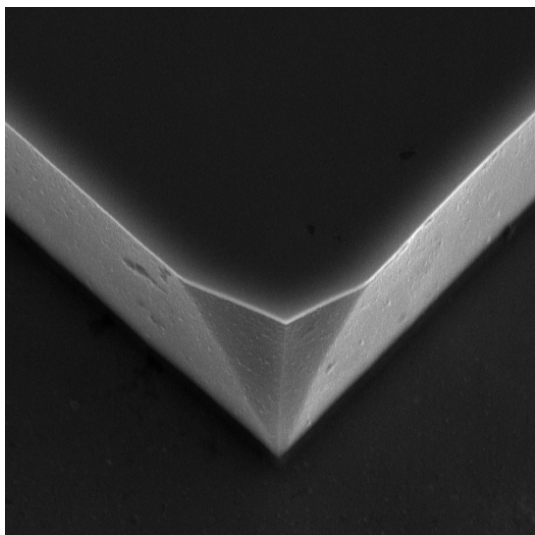


б) Моделирование при помощи VT

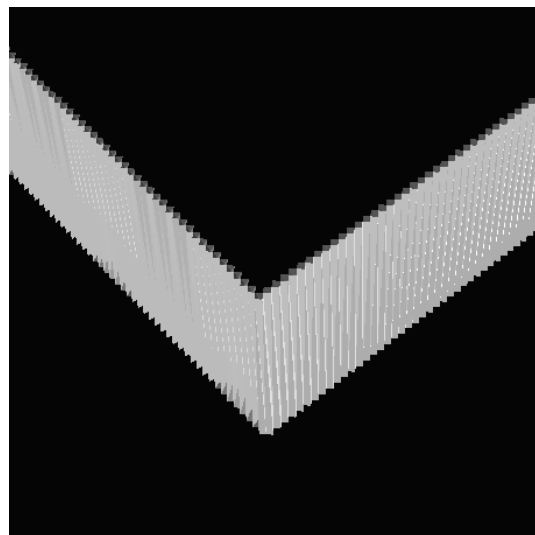


в) Моделирование при помощи GRES

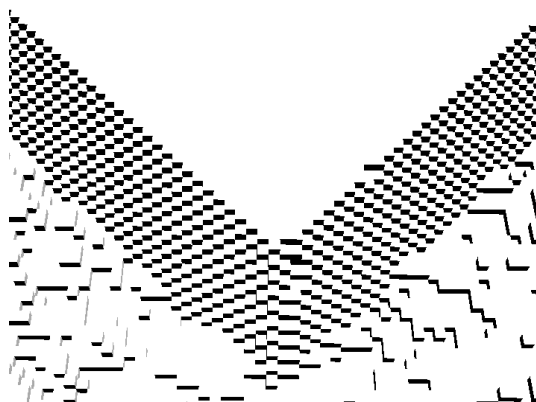
Рис. 2.8. Анизотропное травление кремния в плоскости (001) под прямоугольной маской с ориентацией сторон типа $\langle 110 \rangle$ в натурном эксперименте и моделировании по методу Монте-Карло



а) Результат травления на практике

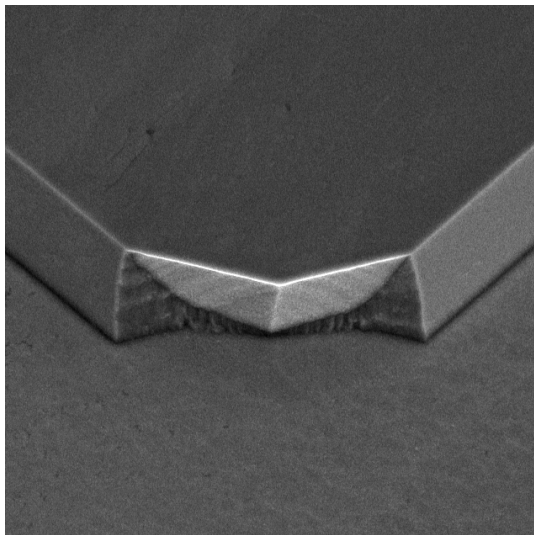


б) Моделирование при помощи VT

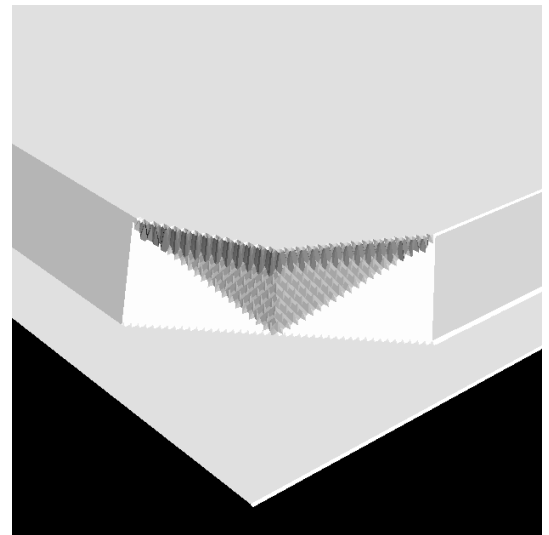


в) Моделирование при помощи GRES

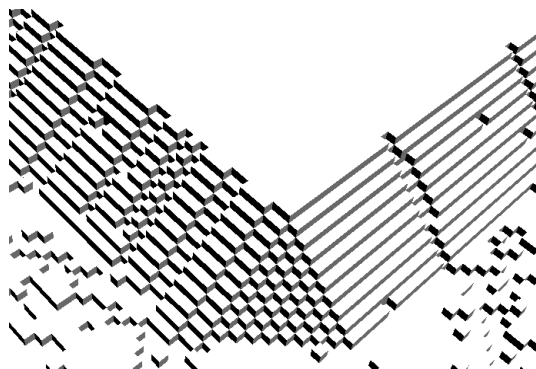
Рис. 2.9. Анизотропное травление кремния в плоскости (001) под прямоугольной маской с ориентацией сторон типа $\langle 100 \rangle$ в натурном эксперименте и моделировании по методу клеточного автомата



а) Результат травления на практике



б) Моделирование при помощи VT



в) Моделирование при помощи GRES

Рис. 2.10. Анизотропное травление кремния в плоскости (001) под прямоугольной маской с ориентацией сторон типа $\langle 110 \rangle$ в натурном эксперименте и моделировании по методу клеточного автомата

Выводы

1. На основе изученных моделей растворения кристаллов была разработана программа GRES, позволяющая моделировать процесс растворения кристаллов типа алмаза с целью изучения его механизма.

Достоинства разработанной программы:

- возможность задавать вероятности отрыва атомов
 - отсутствие ограничений на формат файла с маской
 - кроссплатформенность
 - доступность исходного кода для дальнейшего усовершенствования
 - скорость вывода 3D модели результата
2. На основании сравнения результатов проведённых натуральных и компьютерных экспериментов по травлению монокристаллического кремния, было установлено, что используемые компьютерные модели могут быть применены для описания механизма растворения, однако учёта лишь первых соседей атомов не достаточно.
 3. Были намечены пути совершенствования разработанной программы:
 - добавить учёт вторых соседей
 - реализовать автоматическую калибровку вероятностей отрыва групп атомов исходя из экспериментальных данных
 - реализовать определение вероятностей отрыва групп атомов для произвольных концентрации и температуры травителя
 - добавить новые способы визуализации и доработать существующие

Учитывая актуальность данной работы имеет смысл продолжить разработку программы GRES.

Литература

- [1] Courtesy sandia national laboratories and summittm technologies.
www.mems.sandia.gov.
- [2] Юхневич А. В. Некоторые особенности атомной структуры монокристаллов кремния // Избранные научные труды Белорусского Государственного Университета. — Минск: БГУ, 2001. — Т. 5. — С. 89–122.
- [3] Sato K. Characterization of orientation-dependent etching properties of single-crystal silicon: effects of koh concetration // *Sensors and Actuators*. — 1988.
- [4] Gosálvez M. Atomistic modelling of anisotropic etching of crystalline silicon: Ph.D. thesis / Laboratory of Physics Helsinki University of Technology. — 2003.
- [5] M.A. Gosálvez K. Sato A. F. R. N. H. T. An atomistic introduction to anisotropic etching // *Journal of micromechanics and microengineering*. — 2007.
- [6] Усенко А. Е., Юхневич А. В. Формирование микро- и нанорельефа поверхности (001) монокристаллов кремния вблизи края химической маски при анизотропном травлении // Материалы первой международной научной конференции «Наноструктурные материалы — 2008: Беларусь, Россия, Украина (НАНО-2008)». — Минск: Белорусская наука, 2008. — С. 638.
- [7] Parallel visualization application. www.paraview.org.
- [8] Gosálvez M. Analytical solution of the continuous cellular automaton for anisotropic etching // *Journal of Microelectromechanical Systems*. — 2008.

Приложение А

Вероятность отрыва некоторых групп атомов

Gosálvez выделяет 33 группы атомов [8].

Таблица А.1. Классификация атомов по вероятности их отрыва. Значения вероятности отрыва приведены для травителя 50% КОН при 70 °С

	Символ	(n_1, n_2)	(n_1, n_2^d, n_2^i)	$(n_1^s, n_1^b, n_2^s, n_2^b)$	$p \cdot 10^4$
1	$T^{L,H}$	(3,11)	(3,9,2)	(0,3,4,7)	4.7870
2	T^L	(3,11)	(3,9,2)	(0,3,6,5)	4.7870
3	$T^{M,V}$	(3,10)	(3,9,1)	(0,3,3,7)	4.7870
4	T^V	(3,10)	(3,9,1)	(0,3,5,5)	4.7870
5	$T^{M,H}$	(3,9)	(3,9,0)	(0,3,2,7)	4.7870
6	T^M	(3,9)	(3,9,0)	(0,3,4,5)	4.7870
	T^H				
7	T	(3,9)	(3,9,0)	(0,3,6,3)	4.7870
8	M^{K1}	(3,9)	(3,8,1)	(1,2,3,6)	661.76
9	M_V^{K1}	(3,8)	(3,7,1)	(1,2,2,6)	146.01
10	T_H^V	(3,8)	(3,7,1)	(1,2,3,5)	661.76
11	A	(3,7)	(3,7,0)	(1,2,2,5)	381.51
	T_H^H				
12	T_H	(3,7)	(3,7,0)	(1,2,4,3)	862.13
13	T_M^L	(3,9)	(3,7,2)	(2,1,4,5)	755.29
	M^L				
14	M^{K2}	(3,7)	(3,7,0)	(2,1,1,6)	755.29
15	M	(3,7)	(3,7,0)	(2,1,2,5)	755.29
	T_M^M				

Продолжение на следующей странице

	СИМВОЛ	(n_1, n_2)	(n_1, n_2^d, n_2^i)	$(n_1^s, n_1^b, n_2^s, n_2^b)$	$p \cdot 10^4$
16	T_M	(3,7)	(3,7,0)	(2,1,4,3)	131.19
17	M_K^{K2}	(3,6)	(3,6,0)	(2,1,0,6)	647.50
18	M_K	(3,6)	(3,6,0)	(2,1,1,5)	647.50
19	D^L	(2,10)	(2,6,4)	(0,2,5,5)	661.76
20	$D^{A,A}$	(2,8)	(2,6,2)	(0,2,2,6)	661.76
21	D^A	(2,8)	(2,6,2)	(0,2,3,5)	661.76
22	D	(2,8)	(2,6,2)	(0,2,4,4)	661.76
	V^V				
	K^{K1}				
23	V^H	(2,7)	(2,6,1)	(0,2,3,4)	1985.3
24	V	(2,7)	(2,6,1)	(0,2,5,2)	1985.3
25	H^L	(2,9)	(2,5,4)	(1,1,4,5)	992.63
26	H	(2,7)	(2,5,2)	(1,1,2,5)	992.63
	D_A^A				
27	D_A	(2,7)	(2,5,2)	(1,1,3,4)	1000.0
28	K^{K2}	(2,6)	(2,5,1)	(1,1,2,4)	1323.5
29	K	(2,6)	(2,5,1)	(1,1,3,3)	1323.5
30	$L(T)$	(1,9)	(1,3,6)	(0,1,6,3)	10000
31	$L(T_M)$	(1,7)	(1,3,4)	(0,1,4,3)	10000
32	$L(T_H)$	(1,7)	(1,3,4)	(0,1,5,2)	10000
33	$L(M)$	(1,7)	(1,3,4)	(0,1,6,1)	4000.0

n_1 – число первых соседей, n_2 – число вторых соседей, n_2^d – прямые вторые соседи, n_2^i – косвенные вторые соседи. n_1^s, n_2^s – соседи из поверхности кристалла, n_1^b, n_2^b – соседи из объёма кристалла. Вероятность отрыва атомов из каждой группы зависит от температуры и рода травителя. Устанавливают эти вероятности опытным путем.