

УДК 544.558

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ДЕФЕКТОВ ПРОФИЛЯ ТРЕНЧА В ПРОЦЕССЕ ГЛУБОКОГО КРИОГЕННОГО ТРАВЛЕНИЯ КРЕМНИЯ

© 2019 г. М. К. Руденко<sup>1, \*</sup>, А. В. Мьяконьких<sup>1, \*\*</sup>, В. Ф. Лукичев<sup>1, \*\*\*</sup>

<sup>1</sup>Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН  
Нахимовский проспект, 36, корп. 1, Москва, 117218 Россия

\*E-mail: mikhail.rudenko@ftian.ru

\*\*E-mail: miakonkikh@ftian.ru

\*\*\*E-mail: lukichev@ftian.ru

Поступила в редакцию 07.12.2018 г.

После доработки 17.12.2018 г.

Принята к публикации 24.12.2018 г.

Предложена и реализована численная модель эволюции двумерного профиля при криогенном травлении Si в плазме SF<sub>6</sub>/O<sub>2</sub>. Для расчета потоков частиц используется метод Монте-Карло. Профиль травления представляется с помощью квадратных ячеек. Модель предназначена для изучения различных дефектов профиля стохастической природы. С этой целью состояние модельной ячейки представляется как комбинация состояний нескольких подъячеек, случайно выбираемых при каждом взаимодействии частиц с поверхностью, что позволяет изучать мелкомасштабные дефекты профиля без потери производительности расчета. Результаты моделирования сопоставлены с экспериментальными данными; наблюдается хорошее качественное согласие. Численно исследованы поверхностные дефекты, характерные для высокоаспектного криогенного травления. Среди них шероховатость стенки, зависящая от глубины, образование каверн, расщепление тренча и образование “нанотравы”.

DOI: 10.1134/S0544126919030098

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Процесс непрерывного криогенного травления кремния является распространенным типом процессов глубокого реактивного травления (DRIE), используемых в областях производства DRAM и MEMS/NEMS, структур для трехмерной интеграции ИС и рентгеновской микроскопии [1]. Эти приложения накладывают жесткие требования на качество поверхности создаваемых структур, что создает необходимость тщательной оптимизации технологических процессов. Для рентгеновских линз требуется отсутствие наклона стенки профиля и масштаб шероховатости менее 10 нм. Нарушение этих требований приводит к возникновению аберраций. Профиль сквозных отверстий (TSV), используемых для изготовления ИС с трехмерной интеграцией, должен обладать наклоном 88°–89° и отсутствием зазубрин (scalloping). Перспективные структуры DRAM также требуются к отсутствию зазубрин и загрязнения стенок.

Особенностью криогенного травления является высокая чувствительность результатов процесса к таким параметрам, как потоки частиц из плазмы, температура образца, мощность смеще-

ния и давление в камере. Это делает экспериментальную процедуру определения оптимальных параметров процесса травления весьма трудоемкой [2]. В таких обстоятельствах численное моделирование становится важным инструментом оптимизации процессов криогенного травления.

Авторы предыдущих работ в основном уделяли внимание изучению гладких профилей различных характерных масштабов и объяснению механизмов формирования их особенностей. Широкое распространение получили такие методы моделирования, как метод клеток [3] и метод струны [4]. В настоящей работе развит метод макроскопических ячеек, основанный на методе Монте-Карло. Его главной отличительной особенностью является подробный учет состояния входящих в макроскопическую ячейку подъячеек и взаимодействия ионов с подъячейками. Он позволяет адекватно моделировать режимы травления, в которых существенную роль играет стохастическая природа потока частиц из плазмы, такие как образование шероховатости стенок, каверн, “нанотравы” и расщепления профиля. Полученные в результате моделирования профили были сопоставлены с результатами экспериментов по трав-

Таблица 1. Параметры модели

Параметр	Описание	Типичное значение
$V_{dc}$ , В	Напряжение смещения	80
$T$ , К	Температура нейтральных частиц	600
$a$ , нм	Размер ячейки	100
$n$	Количество подъячеек в ячейке	85
$E_{th,(Si/O)}$ , эВ	Пороговая энергия распыления Si/O*	15/10
$\sigma_\alpha$ , рад	Угол расходимости ионов	0.1
$A_{(Si/O)}$	Абсолютный выход распыления Si/O*	4.0/1.0
$S_{(F/O)}$	Коэффициент прилипания F/O*	0.75/1.0
$\theta_{(Si/O)}$ , °	Первый угловой параметр распыления Si/O*	60/36
$\Psi_{(Si/O)}$ , °	Второй угловой параметр распыления Si/O*	86/67
$\Phi_{(O^*/F^*)}$ , см <sup>-2</sup> с <sup>-1</sup>	Потоки нейтральных частиц	—
$\Phi_i$ , см <sup>-2</sup> с <sup>-1</sup>	Поток ионов	—

лению кремниевых пластин с маской из оксида кремния. Структуры формировались методом фотолитографии; ширина тренчей составляла от 8 до 16 мкм.

## 2. МОДЕЛЬ

### 2.1. Общие положения

Предложенная в работе модель основывается на совместном использовании метода Монте-Карло для определения потока частиц и представления профиля с помощью ячеек/подъячеек. Основные допущения, используемые при моделировании, таковы:

- 1) маска не подвержена травлению;
- 2) частицы в расчетной области не сталкиваются друг с другом;
- 3) потоки частиц и распределения их скоростей не зависят от времени и текущего состояния модельной системы;
- 4) используется  $2 + \frac{1}{2}$  фазовое пространство: состояние каждой частицы описывается вектором  $(x, y, z, v_x, v_y)$ ;
- 5) воздействие слоя объемного заряда на распределение скоростей ионов представлено эмпирическими параметрами  $V_{dc}$  (напряжение смещения) и  $\sigma_\alpha$  (угол расходимости ионов). Параметры модели приведены в табл. 1; взятые из литературных источников [5, 6] отмечены (\*).

В модели рассматривается три вида частиц: радикалы кислорода (O\*), радикалы фтора (F\*) и ионы фтора (F<sup>+</sup>). Построение макроскопических моделей плазменного разряда и слоя объемного заряда находится за рамками данной работы, и потоки частиц в приповерхностной области явля-

ются внешними параметрами модели. Вычислительная область (двухмерный прямоугольник) разделяется на сетку из квадратных ячеек размера  $a$  (рис. 1). Ячейки могут быть нескольких типов: пустые, ячейки маски, ячейки кремния и ячейки-маркеры границы вычислительной области. Первоначально все ячейки с координатой  $y > y_{mask}$  являются пустыми. Ячейки маски остаются неизменными и отражают все падающие на них частицы, что соответствует предположению о высокой селективности травления. В ходе процесса травления ячейки кремния могут стать пустыми, если все их подъячейки будут удалены в актах травления.

Каждая ячейка кремния состоит из  $n$  подъячеек. Подъячейки не обладают определенным пространственным положением внутри ячейки: каждая подъячейка имеет равную вероятность провзаимодействовать с падающей частицей. Следует отметить, что подъячейка соответствует не одиночному атому кремния, а группе атомов. В то же время, подъячейка взаимодействует с частицей как целое. Для того, чтобы обеспечить корректную скорость травления, потоки частиц в модели соответствующим образом перенормируются относительно реальных потоков. Состояние подъячейки описывается двумя целочисленными счетчиками: счетчик фтора  $n_F$  и счетчик кислорода  $n_O$ . В некоторых условиях, перечисленных ниже, в подъячейке происходит акт травления. Такая подъячейка удаляется из ячейки, и не рассматривается при моделировании дальнейших взаимодействий ячейки с частицами.

### 2.2. Генерация и транспорт частиц

Представленная модель включает в себя три основные компоненты: генерация частиц, по-

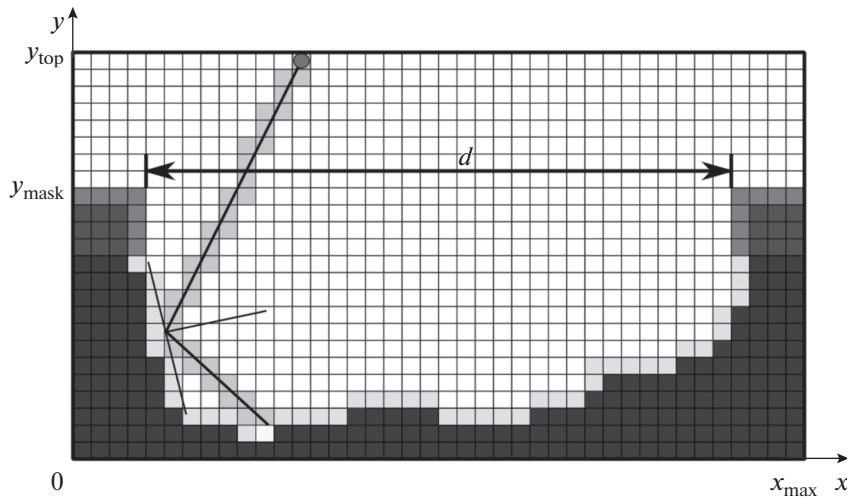


Рис. 1. Дискретизация вычислительной области, расчет траектории частицы и аппроксимация локальной нормали.

строение траекторий частиц и анализ столкновений частиц с поверхностью (ячейками). Так как после первого столкновения частица может отразиться, две последние компоненты могут циклически чередоваться до тех пор, пока частица не будет уничтожена в акте взаимодействия с ячейкой или не покинет вычислительную область.

Генерация частиц осуществляется следующим образом. В первую очередь случайным образом определяется вид частицы, при этом вероятности задаются пропорциональными потокам частиц  $\Phi_{O^*}, \Phi_{F^*}, \Phi_i$ . Затем задается начальное положение частицы

$$x \sim U(0, x_{\max}), \quad y = y_{\text{top}},$$

где  $U(a, b)$  – равномерное распределение. Способ генерации компонент скорости зависит от вида частицы. Нейтральные радикалы подчиняются Максвелловскому распределению скоростей

$$v_x, v_y, v_z \sim N\left(0, \frac{kT}{m_i}\right),$$

где  $N(\mu, \sigma)$  – нормальное распределение; частицы с положительными  $v_y$  исключаются из дальнейшего рассмотрения. В модели предполагается, что достигающие границ расчетной области ионы моноэнергетичны и их скорости обладают узким (шириной  $\sigma_\alpha$ ) угловым распределением скоростей. Компоненты скорости иона определяются следующим образом:

$$v_x = v \sin \alpha \cos \phi, \quad v_y = v \cos \alpha, \\ v_z = v \sin \alpha \sin \phi,$$

где  $\alpha \sim N(0, \sigma_\alpha^2)$ ,  $\phi \sim U(0, 2\pi)$  – полярный и азимутальный углы, а  $v = \sqrt{\frac{2eV_{dc}}{m}}$  – абсолютная величина скорости.

После генерации начального состояния частицы прослеживается ее траектория вплоть до столкновения. Для этого применяется алгоритм Брезенхэма. Исходя из двухмерного вектора направления движения частицы

$$\left( \frac{v_x}{\sqrt{v_x^2 + v_y^2}}, \frac{v_y}{\sqrt{v_x^2 + v_y^2}} \right)$$

и ее начального положения  $(x, y)$  он вычисляет последовательность пустых ячеек, посещаемых частицей вплоть до столкновения с непустой ячейкой. В зависимости от типа и положения ячейки возможны несколько вариантов. Если это ячейка-маркер верхней границы, частица считается покинувшей вычислительную область и алгоритм переходит к следующей частице. При столкновении с ячейками-маркерами левой и правой границ реализуются периодические граничные условия: частица, столкнувшаяся с маркером левой границы, переносится на правую границу вычислительной области с сохранением вектора скорости, и наоборот. Если происходит столкновение с ячейкой маски, частица отражается.

Для вычисления направления отражения частицы от поверхности, необходимо определить три величины: аппроксимацию локальной нормали к поверхности, угол падения и закон отражения. В нашей модели ионы подчиняются зеркальному закону отражения, а нейтралы – диффузному (косинусному). При расчетах, для построения приближенной локальной нормали используется связанный список поверхностных ячеек (т.е. ячеек,

**Таблица 2.** Параметры экспериментов

№ эксперимента	1	2	3	4	5	6	7
Поток кислорода, ст. см <sup>3</sup> /мин	0	7	8.5	6	9	7.3	10
Поток SF <sub>6</sub> , ст. см <sup>3</sup> /мин	50	60	60	60	60	60	72
Мощность ИСР, Вт	1750	800	800	800	800	800	800
Мощность смещения, Вт	4	4	8	4	4	4	13
Напряжение смещения, В	61	59	55	55	53	36	90
Температура образца, °С	25	-110	-110	-110	-110	-110	-110
Давление, мТорр	30	10	10	12.5	10	10	10
Продолжительность процесса, с	100	300	300	270	300	4380	480

имеющих среди четырех ближайших соседей по меньшей мере одну пустую ячейку). Вектор локальной касательной к поверхности восстанавливается с помощью аппроксимации положений 8 ячеек из списка, ближайших к данной. После этого нормаль  $\mathbf{n}$  вычисляется из условия ортогональности; ее  $z$ -компонента полагается равной нулю. Зная нормализованный трехмерный вектор направления падающей частицы  $\mathbf{d}_i$  и вектор нормали, мы можем выразить угол падения и вектор направления отраженной частицы (в случае зеркального рассеяния) как  $\alpha = \arccos(-\mathbf{n} \cdot \mathbf{d}_i)$ ,  $\mathbf{d}_o = \mathbf{d}_i - 2\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d}_i)$ . Важно отметить, что хотя  $z$ -компонента вектора направления всегда сохраняется при отражениях и не влияет на алгоритм расчета траектории, она, тем не менее, играет важную роль во взаимодействии ионов с поверхностью, влияя

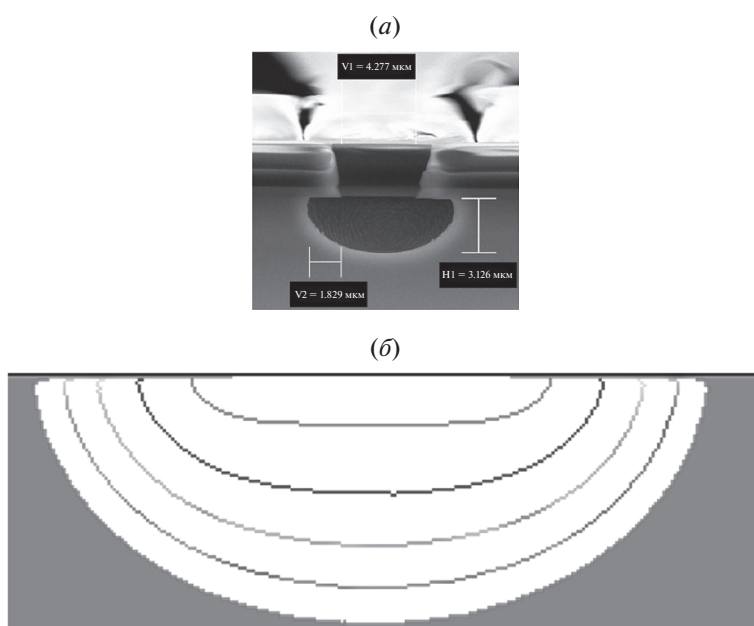
на значение угла падения и, следовательно, вероятности распыления.

Результат столкновения с клеткой кремния определяется алгоритмам столкновения частица-поверхность, приведенными в последующих разделах, и может состоять как в отражении, так и в поглощении частицы с изменением состояния клетки.

### 2.3. Взаимодействие нейтральных частиц с поверхностью

Взаимодействие каждого из типов частиц с поверхностью реализуется с помощью отдельного алгоритма, хотя алгоритмы для нейтральных частиц (радикалов фтора и кислорода) имеют много общего.

При столкновении радикала фтора с поверхностью проверяются несколько условий. Если любое из них не выполняется, частица отражается по диффузному закону. Во-первых, случайное



**Рис. 2.** Изотропный профиль: эксперимент № 1 (а), моделирование (б).

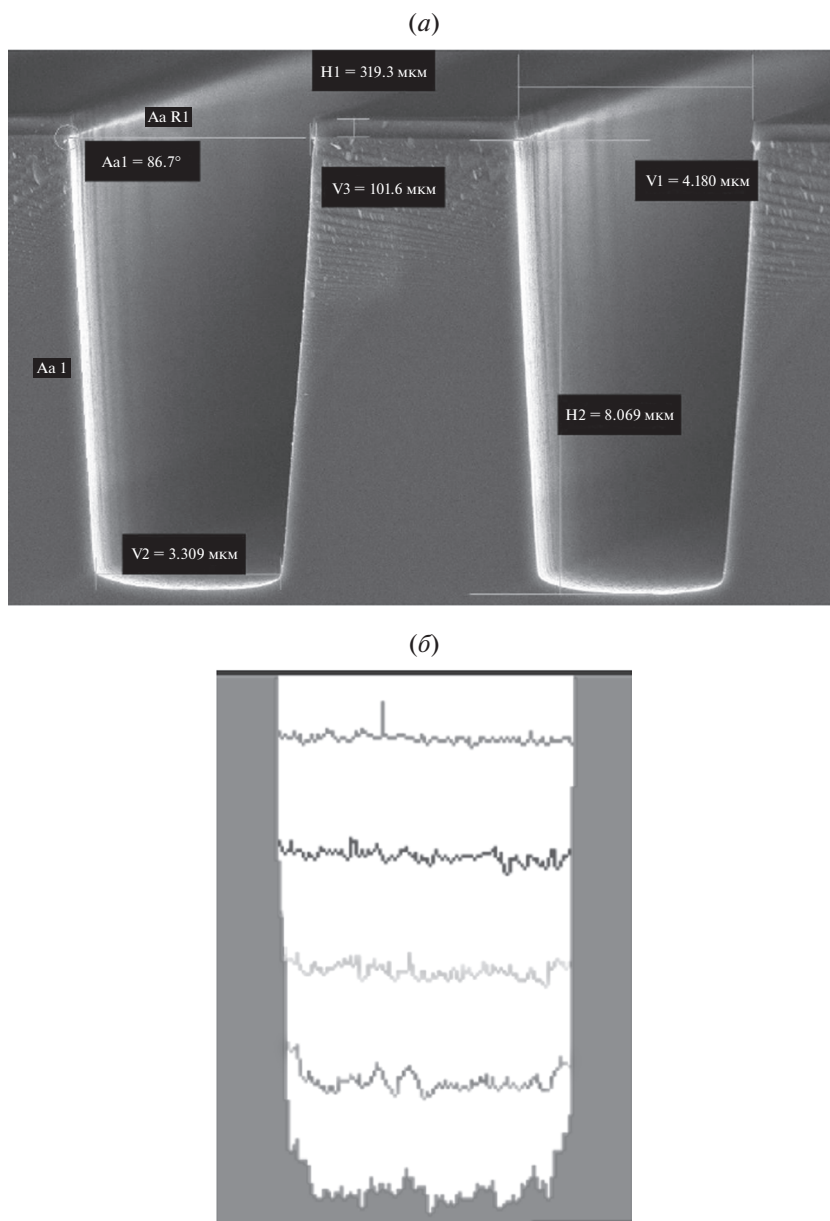


Рис. 3. Оптимальный анизотропный профиль: эксперимент № 2 (а), моделирование (б).

число  $x$ , полученное из распределения  $U(0,1)$  сравнивается с коэффициентом прилипания  $S_F$ . Если оно превосходит коэффициент по величине, частица отражается. В противном случае, случайным образом выбирается непустая подъячейка, принадлежащая данной. Если ее счетчик кислорода  $n_O$  имеет положительное значение, подъячейка считается пассивированной и частица отражается. Если отражения не произошло, частица считается поглощенной, и счетчик  $n_F$  инкрементируется. Если при этом оказывается, что  $n_F > 3$ , происходит акт спонтанного травления и подъячейка целиком удаляется из ячейки.

В случае радикала кислорода используется сходная схема. Проводится вероятностная проверка с коэффициентом прилипания  $S_O$ . Затем выбирается подъячейка и проверяется ее счетчик  $n_O$ . В случае  $n_O > 1$  частица адсорбируется и счетчик инкрементируется. В противном случае частица отражается.

#### 2.4. Взаимодействие ионов с поверхностью

Алгоритм взаимодействия ионов с поверхностью сложнее алгоритма для нейтральных частиц в силу того, что один ион может расплыть несколько подъячеек.

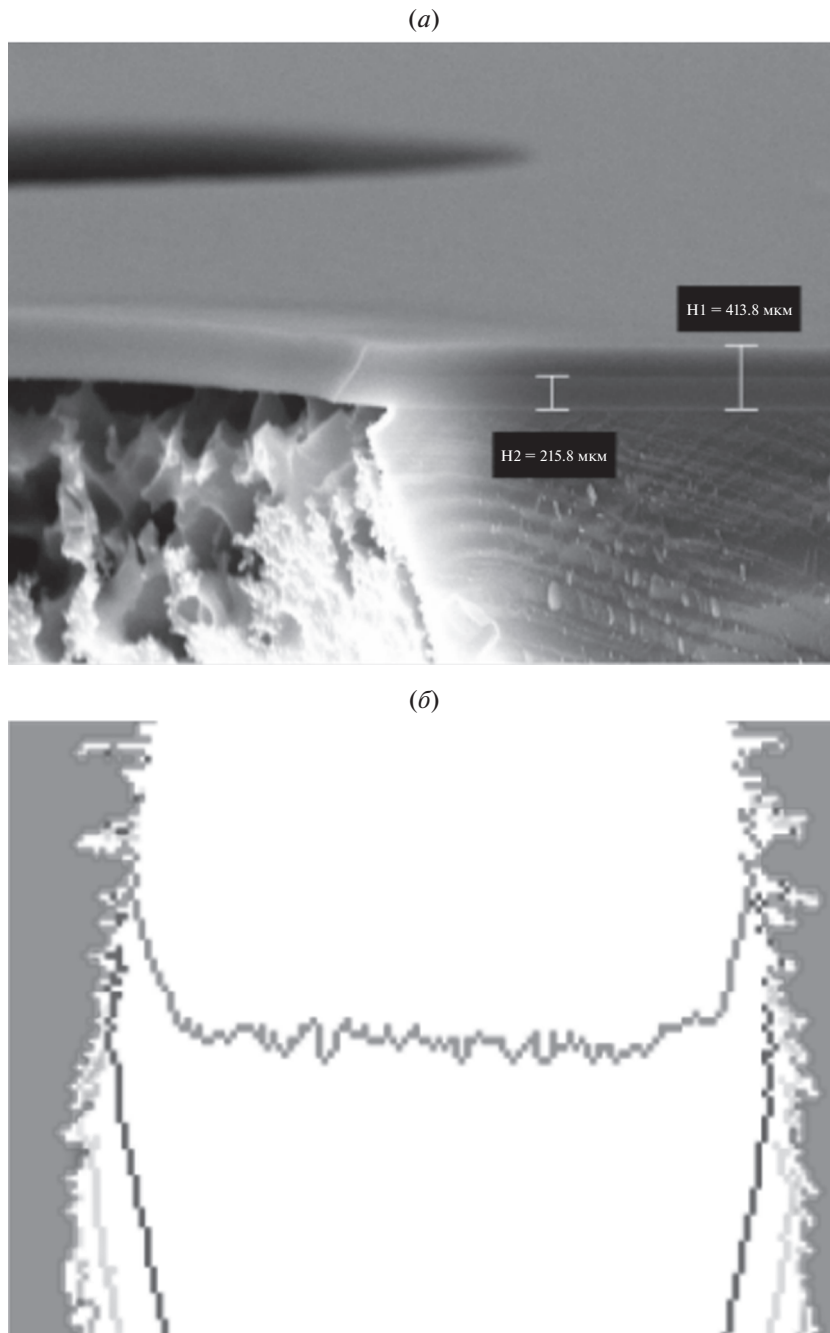


Рис. 4. Образование каверн: эксперимент № 3 (а), моделирование (б, в).

$$f_{[Si,O]}(\alpha) = \begin{cases} 1, & \alpha < \theta_{[Si,O]} \\ \frac{\psi_{[Si,O]} - \alpha}{\psi_{[Si,O]} - \theta_{[Si,O]}}, & \theta_{[Si,O]} < \alpha < \psi_{[Si,O]} \\ 0, & \alpha > \psi_{[Si,O]} \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} Y_{Si}(\alpha, E) &= f_{Si}(\alpha)(\sqrt{E} - \sqrt{E_{th,Si}}) \\ Y_O(\alpha, E) &= f_O(\alpha)(\sqrt{E} - \sqrt{E_{th,O}}). \end{aligned} \quad (2)$$

Коэффициент ионного распыления  $Y$  для O и  $SiF_x$  определяется формулами (1) и (2). Важно отметить, что существует критическое значение угла падения  $\alpha_{max} = \max(\psi_{Si}, \psi_O)$ , при превышении которого коэффициент распыления равен нулю при любой энергии. В этом случае ионы отражаются зеркально. Если величина угла падения не превосходит  $\alpha_{max}$ , реализуется итерационный ал-

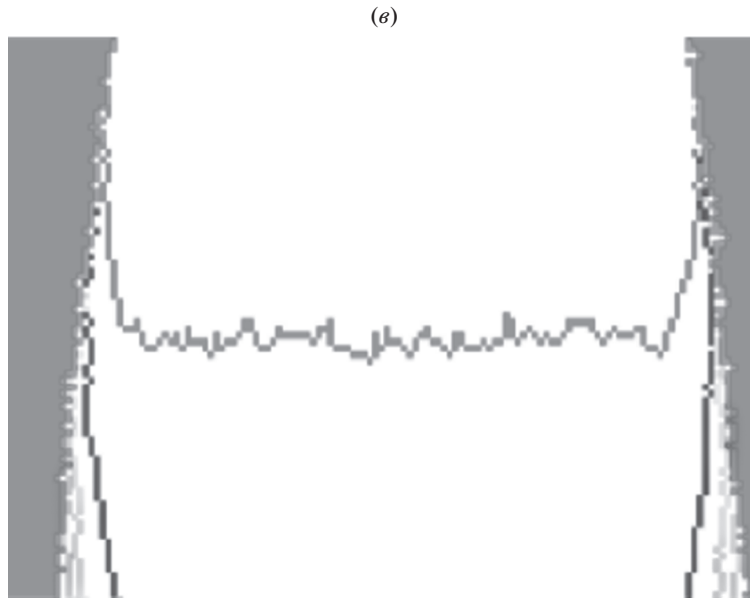


Рис. 4. Окончание.

горитм распыления. На каждой итерации случайно выбираются подъячейка и режим распыления (распыление O или распыление  $\text{SiF}_x$ , причем вероятность выбора распыления O пропорциональна  $n_O$ ). Распыление  $\text{SiF}_x$  приводит к полному уничтожению подъячейки, а распыление O декрементирует счетчик  $n_O$ . После этого энергия иона уменьшается в соответствии с формулой (2) с учетом количества и режимов осуществленных актов распыления. Если она оказывается ниже  $E_{\min} = \min(E_{th,O}, E_{th,Si})$ , процедура травления завершается. Иначе выполняется следующая итерация.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

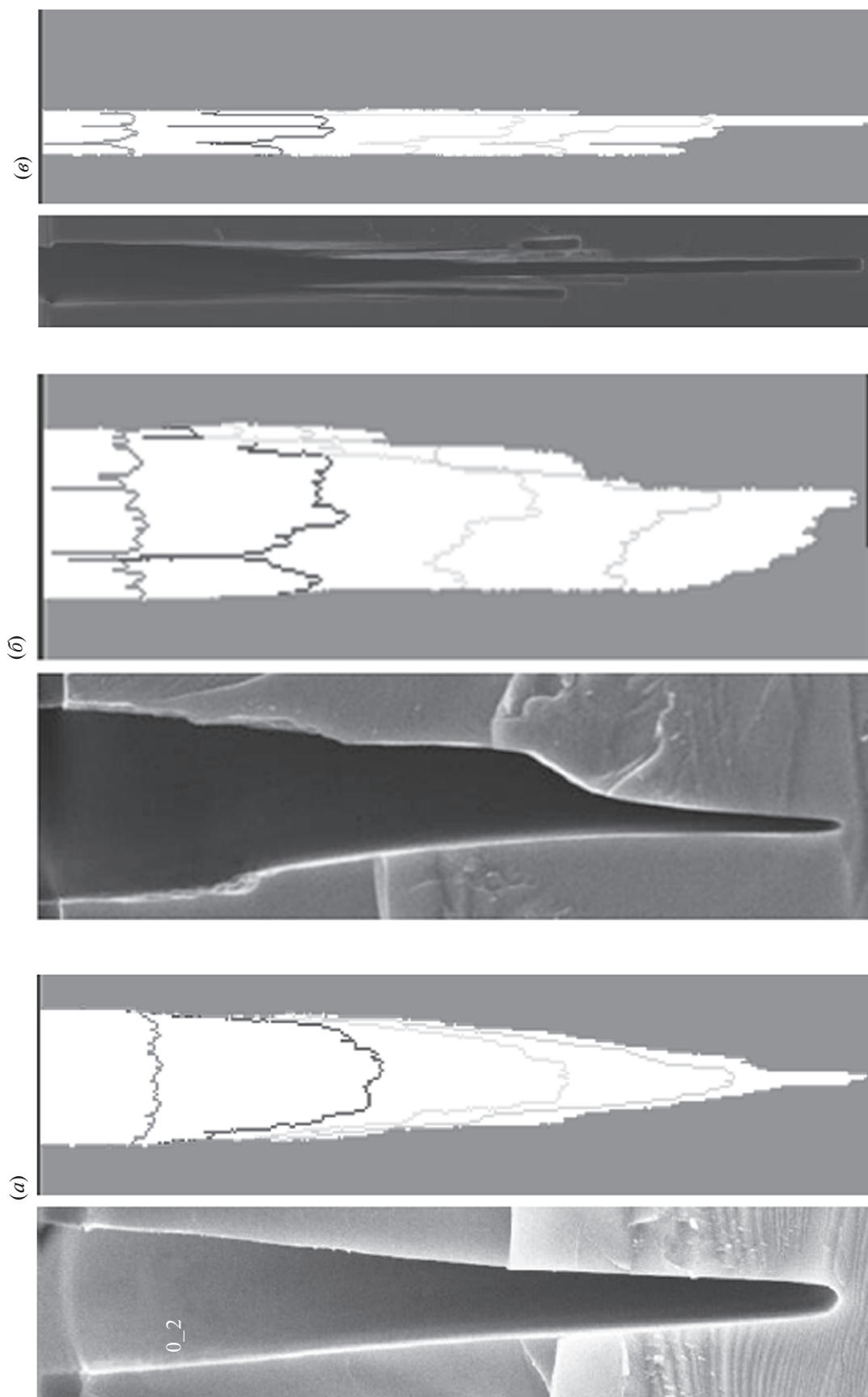
Описанная модель была реализована с помощью компьютерной программы. Типовые параметры численных экспериментов приведены в табл. 1. При получении всех приведенных ниже результатов ширина апертуры маски составляла 10 мкм. Результаты численных экспериментов сопоставлялись с экспериментальными данными, полученными на установке плазмохимического травления Plasmalab System 100 (ОИРТ). Рецепты использованных процессов представлены в табл. 2.

В первую очередь было необходимо проверить общую состоятельность модели. Для это использовалось несколько особых наборов параметров. В первом численном эксперименте  $V_{dc}$  и  $\Phi_O$  были приняты равными нулю. Это соответствует режиму полностью изотропного травления без пассивации. Его результаты приведены на рис. 2. Видно, что модель воспроизводит экспериментальный профиль с высокой точностью. Также стоит

отметить, что получающийся в таких условиях профиль имеет гладкую поверхность без шероховатостей. Это замечание будет важным в дальнейшем, при обсуждении происхождения шероховатости стенок.

Затем было смоделирован режим анизотропного травления с ненулевыми напряжением смещения и потоком кислорода. Варьируя потоки частиц, удалось получить близкий к оптимальному профиль травления (рис. 3), характеризующийся гладкими стенками, небольшим положительным наклоном и полным отсутствием эффекта “бочки” (bowing) и подтравы. Ширина профиля составила 8.6 мкм на глубине 10 мкм, и 8.2 мкм на глубине 14.3 мкм, при ширине апертуры 10 мкм. Использовались следующие значения параметров модельных потоков частиц:  $\Phi_i = 15 \times 10^{16}$ ,  $\Phi_O = 2.7 \times 10^{16}$ ,  $\Phi_F = 1.84 \times 10^{18}$ . В дальнейшем этот набор параметров использовался при исследованиях образования дефектов в неоптимальных режимах травления.

В случае недостаточного потока кислорода становится возможным возникновение каверн и шероховатости в верхней части профиля. Было обнаружено, что условием образования каверн в нашей модели является  $\varphi_O = \frac{\Phi_O}{\Phi_F} < 0.0014$ . В таких условиях пассивация стенки профиля кислородными радикалами приводит к значительному сокращению подтравы, но оказывается недостаточной для полного предотвращения травления. Типичный результат численного эксперимента приведен на рис. 4. Наблюдаемый размер каверн



**Рис. 5.** Перепассивация: (а) V-образный профиль (эксперимент № 4, моделирование), (б) асимметричный профиль (эксперимент № 5, моделирование), (в) расщепление профиля (эксперимент № 6, моделирование).



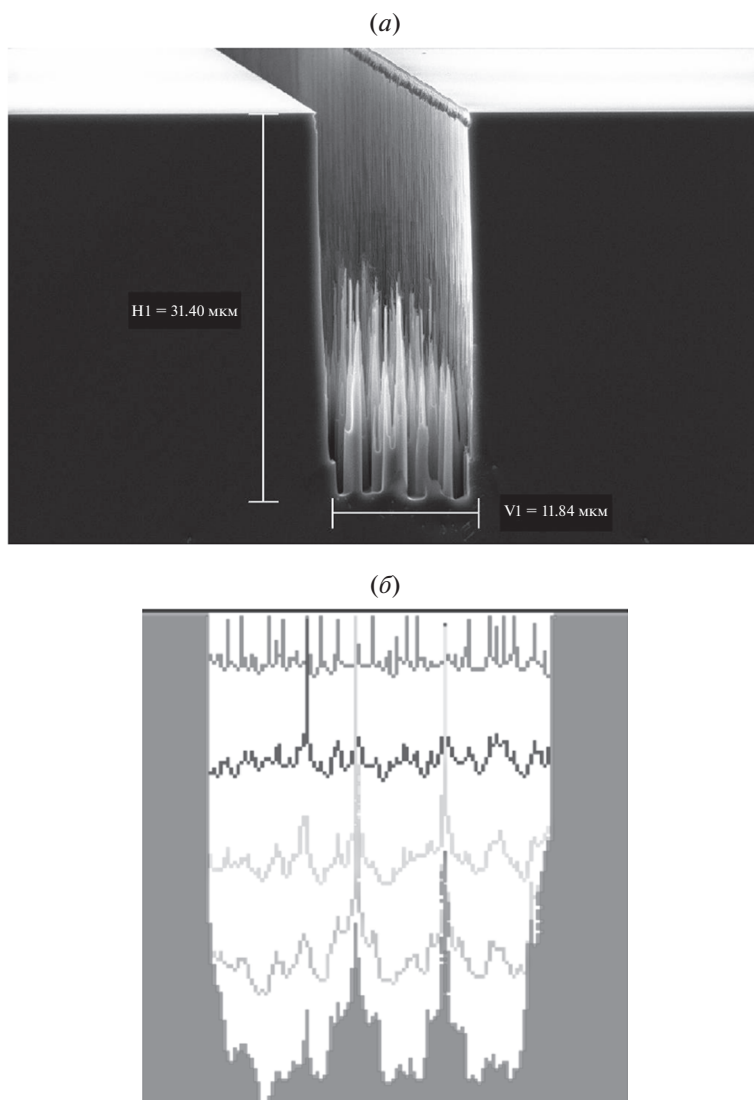


Рис. 6. “Нанотрава”: эксперимент № 8 (а), моделирование (б).

лежит в диапазоне 100–900 нм. Образование таких каверн можно объяснить бомбардировкой верхней части стенки профиля ионами, отразившимися от участков с отрицательным наклоном или изначально имеющими высокую  $u$ -компоненту скорости, приводящей к возникновению дефектов пассивационного слоя, которые могут развиваться в каверны. Внутренняя поверхность каверн пассивируется слабо из-за геометрического ограничения потока радикалов, что приводит к их неограниченному росту на протяжении всего процесса травления. Следовательно, данный дефект должен быть наиболее выражен в процессах глубокого травления. Когда поток кислорода немного превосходит порог образования каверн, но все еще недостаточен для образования оптимального пассивационного слоя, можно наблюдать на их месте участки с высокой шероховатостью.

Пример такой шероховатости при  $\varphi_0 = 0.0015$  показан на рис. 4в.

Рассмотрим теперь эффекты, возникающие при избыточном потоке кислорода (перепассивация). При  $\varphi_0 = 0.010$  (рис. 5а) можно наблюдать симметричный V-образный профиль. Дальнейшее увеличение потока кислорода ( $\varphi_0 = 0.010$ ) приводит к возникновению сильно асимметричных профилей (рис. 5б). Когда  $\varphi_0$  достигает 0.08 при высокоаспектном травлении, профиль может расщепляться на несколько подтrenchей (рис. 5в). В случае более широких trenchей на дне структуры начинается формирование “нанотравы” (рис. 6). Основной причиной этого является превышение скорости пассивации над скоростью ионно-сти-

мулированного травления. Условие образования “нанотравы” имеет вид  $\frac{\Phi_o}{\Phi_i} > 3$ .

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Была предложена и реализована численная модель эволюции двухмерного профиля в ходе криогенного травления кремния в плазме  $\text{SF}_6/\text{O}_2$ . Модель предназначена для изучения различных дефектов профиля стохастической природы. Для расчета потоков частиц использовался метод Монте-Карло. Профиль травления представлялся с помощью квадратных ячеек, каждая из которых представляла собой совокупность подъячеек, случайно выбираемых при каждом взаимодействии частиц с ячейкой, что позволило отразить в модели мелкомасштабные явления, сохранив при этом высокую производительность расчетов. С использованием модели были на качественном уровне исследованы профили травления, их дефекты и временная эволюция. Были численно изучены такие явления, как образование каверн и шероховатости поверхности, асимметрия и расщепление тренчей, образование “нанотравы”. Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными показало качественное согласие во всех случаях. Анализ результатов позволил дать объяснение механизмов образования дефектов. Дальнейшее развитие модели в рамках многомасштабного моделирования, сочетающего метод струны для моделирования профиля и клеточного подхода для моделирования мелкомасштабных отклонений позволит получить адекват-

ные результаты для тренчей с аспектными отношениями вплоть до 20.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-07-01190.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Miakonkikh A.V., Rogozhin A.E., Rudenko K.V., Lukichev V.F., Yunkin V.A., Snigirev, A.A.* Elements for hard x-ray optics produced by cryogenic plasma etching of silicon // Proc. of SPIE. 2016. V. 10224. № 1022421.
2. *Jansen H.V., de Boer M.J., Unnikrishnan S., Louwse M.C., Elwenspoek M.C.* Black silicon method: X. a review on high speed and selective plasma etching of silicon with profile control: an in-depth comparison between bosch and cryostat drier processes as a roadmap to next generation equipment // J. Micromechanics and Microengineering. 2009. V. 19. P. 033001.
3. *Haidar Y., Rhallabi A., Pateau A., Mokrani A., Taher F., Roqueta F., Boufnichel, M.* Simulation of cryogenic silicon etching under  $\text{SF}_6/\text{O}_2/\text{Ar}$  plasma discharge // J. Vacuum Science & Technology A. 2016. V. 34. P. 061306.
4. *Lukichev V., Yunkin, V.* Scaling of silicon trench etch rates and profiles in plasma etching // Microelectronic Engineering. 1999. V. 46. P. 315–318.
5. *Ishchuk V., Olynick D.L., Liu Z., Rangelow I.W.* Profile simulation model for sub-50 nm cryogenic etching of silicon using  $\text{SF}_6/\text{O}_2$  inductively coupled plasma // J. Applied Physics. 2015. V. 118. P. 053302.
6. *Blauw M.A., van der Drift E., Marcos G., Rhallabi A.* Modeling of fluorine-based high-density plasma etching of anisotropic silicon trenches with oxygen sidewall passivation // J. Applied Physics. 2003. V. 94. P. 6311–6318.