

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ФОРМИРОВАНИЯ НЭМС-КОНСТРУКЦИЙ

А. В. Юхневич, И. А. Майер, А. Е. Усенко

---

*НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета,  
yukhnevich@bsu.by*

Уменьшение размеров изделий – актуальное направление развития различных областей науки и техники. Миниатюризация не только электронных, но и других приборов (оптических, механических, химико-аналитических, комбинированных) продолжается в направлении к естественному пределу – *атомным размерам* изделий и к соответствующей точности их изготовления.

Одна из перспективных технологий изготовления предельно миниатюрных приборов включает использование в качестве исходного материала совершенного кристалла нужного вещества в сочетании с применением Маскированного Растворения Кристалла (МРК) при формировании атомной структуры таких изделий [1]. Существенным, но недостаточно изученным фактором, определяющим точность изготовления микро-/нано-приборов в МРК-технологиях, является рациональный выбор растворителя (травителя) исходного кристалла. Такой растворитель при его действии в окнах масок на каждом этапе изготовления сложного изделия должен обеспечить образование совершенной формы каждой детали. В настоящее время неизвестны составы растворителей, позволяющих реализовать атомную точность при изготовлении микро-/нано-деталей. В данной статье рассмотрен очередной этап в разработке таких перспективных растворителей, основанный на использовании атомного моделирования процесса, ориентированный на применение в кремниевой микро-/нано-технологии.

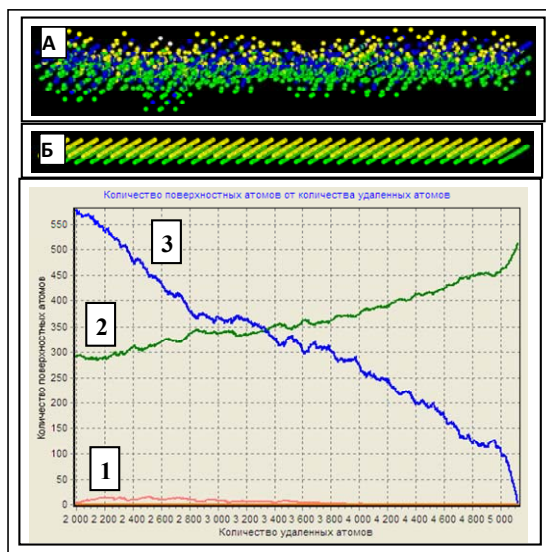
В НИИ ФХП БГУ разрабатываются варианты атомной модели растворения, предназначенной для анализа и совершенствования процесса растворения алмазоподобных кристаллов. Например, в работах [2, 3] представлен один из последних вариантов – *Diamond-4*, рассмотрены его основные математические и технологические особенности. Эта модель, как и предшествующие варианты, реализуется при работе соответствующей компьютерной программы, основанной на кинетическом методе Монте-Карло [4–6]. Здесь сведения о деталях процесса растворения содержатся в особенностях Набора Вероятностей Модели (НВМ). Данная составляющая модели представляет собой совокупность значений вероятности удаления поверхностных атомов кристалла различных типов, включенных в модель. Тип атомов определяется структурой их окружения – числом и сортом соседей в кристаллической решетке.

Модель *Diamond-4* отличается от предыдущих моделей растворения включением в классификацию типов атомов числа *непрямых вторых соседей*. Именно это отличие позволило моделировать с атомной точностью процесс формирования «идеальных» (атомно-гладких) поверхностей с ориентацией (001), технически востребованных в кремниевой микротехнологии. Эффективность данной модели была продемонстрирована в компьютерных экспериментах по полировке разупорядоченных (шероховатых) поверхностей (001).

В данном сообщении представлен новый вариант модели МРК-растворения *Diamond-4.1*. Он отличается от простейшего [2, 3] реализацией возможности более

подробного изучения хода процесса растворения кристалла. Это достигается за счет включения в алгоритм соответствующей компьютерной программы процедуры получения и сравнения зависимостей количества атомов любого из 129 рассматриваемых типов от числа элементарных актов растворения – удалений одиночных атомов. Особенности формы этих зависимостей содержат информацию о деталях процесса в конкретных условиях.

Например, процесс идеальной полировки шероховатой поверхности (001), может быть представлен зависимостями числа одно-, двух- и трех-связных атомов от общего числа удаленных атомов (рисунок 1).



**Рисунок 2. – Вид поверхности (001) 16×16 ячеек, разупорядоченной на глубину 8 элементарных слоев (А), и полированной (Б); ниже – соответствующие зависимости числа односвязных (1), двухсвязных (2), и трехсвязных (3) поверхностных атомов в ходе «идеальной» полировки**

Особенности формы этих графиков чувствительно зависят от конкретных условий эксперимента, таких как общая кристаллографическая ориентация исходной поверхности, глубина и характер шероховатости, параметры модели полирующего раствора. Программу *Diamond-4.1* можно рассматривать как *инструмент* для выполнения экспериментов по выявлению условий создания МРК-технологий формирования предельно миниатюрных сложных НЭМС-изделий с деталями, поверхность которых сформирована с атомной точностью. В частности, в опытах с данной моделью была подтверждена эффективность уникальной пробной модели раствора, идеально полирующего поверхность (001), в НВМ которой из 49 двухсвязных атомов только 8 определенных типов должны характеризоваться большой вероятностью удаления [2, 3].

В понятиях теории динамических систем процесс растворения кристалла можно рассматривать как эволюцию *дискретной стохастической динамической системы* – атомной структуры приповерхностной области. С этой позиции отмеченный процесс идеальной полировки поверхности кристалла представляет собой эволюцию такой системы от исходного шероховатого к финальному атомно-гладкому состоянию.

В данном случае цель компьютерного моделирования – найти условия (параметры компьютерной модели идеального полирующего раствора), при которых система будет самопроизвольно эволюционировать от любого исходного к необходимому состоянию – к структуре атомно-гладкой поверхности. Такое финальное состояние можно считать *точечным аттрактором* данного динамического процесса с координатами в фазовом пространстве:  $N(1) = 0$ ,  $N(2) = 512$ ,  $N(3) = 0$ , где  $N$  число одно-, двух- и трех-связных атомов, соответственно, на идеальной поверхности (001).

В ходе создания эффективных МРК-технологий изготовления НЭМС-изделий, имеющих *любую заданную конструкцию*, на этапе моделирования необходимо осуществить поиск параметров модели подходящего растворителя. Оптимальной моделью такого растворителя следует считать вариант, действие которого на исходное состояние рассматриваемой динамической системы (маскированная поверхность кристалла), приведет к аттрактору – финальной структуре кристалла, которая с атомной точностью будет соответствовать планируемой НЭМС-конструкции.

*Геометрические элементы* прямоугольных микро-/нано-деталей такой конструкции (поверхности, двугранные углы, вершины) могут быть представлены *с атомной точностью*, если правильно построена модель растворения (определены типы поверхностных атомов, принимаемых в расчет для адекватного моделирования процесса). Для этого также должны быть выбраны правильные численные значения основных параметров модели растворителя – *вероятности удаления атомов каждого типа, обеспечивающие формирование необходимой структуры аттрактора*. Этот выбор является основной трудностью моделирования, в особенности при большом числе типов атомов. Предлагается ускорить данный выбор путем построения и испытания *пробных моделей* растворителя с НВМ, включающих только 2 значения вероятностей 0 (ноль) и 1 (единица). Такие модели растворителей, формирующих идеальные детали НЭМС-конструкций, могут быть относительно просто созданы по результатам специальных экспериментов. В них по конкретному виду атомной структуры кристалла определяется тип атомов, удаление которых принципиально необходимо для ликвидации (сравливания) различных одиночных дефектов поверхности кристалла. В НВМ искомой модели таким типам атомов приписывается значение вероятности удаления равное 1. Именно таким путем был определен состав НВМ, входящего в отмеченную выше модель раствора, идеально полирующего поверхность (001). Поскольку каждому типу атомов соответствует определенная локальная атомная структура, выявленный набор вероятностей может служить ориентиром для определения химического состава искомого растворителя. На следующем этапе его создания при выборе конкретного состава предпочтение будет отдано тем компонентам, которые обеспечат соотношение энергии взаимодействия раствора с атомами поверхности, соответствующее найденному набору вероятностей.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Юхневич А.В. Формирование нанорельефа поверхности монокристаллов кремния в химически активных средах. / А.В. Юхневич. // Двадцать конкурсных лет (БРФФИ: 1991–2011): Юбилейный сборник материалов; ред. В.А. Орлович. – Минск: Беларуская навука, 941с., 2012. – С. 502–520.
2. Юхневич, А.В. К моделированию технологии изготовления миниатюрных кремниевых приборов / А.В. Юхневич, И.А. Майер, А.Е. Усенко // Материалы и структуры современной электроники: Сб. науч. тр. VI междунар. науч. конф. – Минск: БГУ, 2014. С. 245–247.

3. Юхневич, А.В. К технологии формирования МЭМС/НЭМС–конструкций / А.В. Юхневич, И.А.Майер, А.Е.Усенко. // Теоретическая и прикладная механика: междунар. науч.-техн. сб. Минск: БНТУ, 2016. Вып. 31. С.50–55.
4. Gosalvez, M.A. An atomistic introduction to anisotropic etching / M.A. Gosalvez, K. Sato, A.S. Foster, R.M. Nieminen, H. Tanaka // J. Micromech. Microeng.– 2007. – V.17. – P.S1–S26.
5. Gosalvez M.A. Atomistic methods for the simulation of evolving surfaces. / M.A. Gosalvez, Y. Xing, K. Sato, R.M. Nieminen. // J. Micromech. Microeng.– 2008. – V.18. – P.1–17.
6. Zhang, H. Removal probability function for Kinetic Monte Carlo simulations of anisotropic etching of silicon in alkaline etchants containing additives. / Y. Xing, M.A. Gosalvez, P. Pal, K. Sato. // Sensors and Actuators A: Physical – 2015. V.233. – P.451–459.

## **СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПЛЕНОК ОКСИДОВ ОЛОВА ПРИ ОТЖИГЕ НА ВОЗДУХЕ**

**Д. В. Адамчук, В. К. Ксеневиц**

---

*Белорусский государственный университет, AdamchukDV@bsu.by*

Поликристаллические металлооксидные полупроводники (такие как оксиды олова, титана, цинка, индия и др.) являются перспективными материалами благодаря возможностям использования в различных областях современной микроэлектроники и оптоэлектроники [1, 2]. Оксиды олова SnO и SnO<sub>2</sub> существуют в тетрагональной кристаллографической форме. SnO<sub>2</sub> является термодинамически стабильным электронным полупроводником с шириной запрещенной зоны ~ 3,6 эВ [1]. SnO метастабилен и при нагревании на воздухе может происходить его преобразование в SnO<sub>2</sub>. [3] Тонкие пленки оксидов олова используются в качестве прозрачных проводящих покрытий благодаря высоким значениям электропроводности и высокой прозрачности в видимой области спектра [2]. Подобное сочетание свойств обуславливается наличием собственных дефектов (в диоксиде олова – в основном это вакансии в подрешетке кислорода), обеспечивающих электронный тип проводимости. Сопротивление пленок зависит от концентрации кислородных вакансий. Основными факторами, которые определяет электрофизические свойства пленок SnO<sub>2</sub>, являются отклонение от стехиометрии и поликристаллическая структура. Таким образом, понимание взаимосвязи между стехиометрическим составом, кристаллической структурой и электрофизическими свойствами тонких пленок имеет важное практическое и теоретическое значение. Целью настоящей работы является исследование структурно-фазовых изменений пленок оксидов олова при отжиге на воздухе.

Тонкие пленки SnO<sub>2</sub> получали методом магнетронного распыления на постоянном токе в плазме аргона. Напыление производилось на подложки поликристаллического Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В качестве мишени использовалось металлическое олово чистотой 99,99%. Затем полученные пленки олова подвергали двухстадийному окислительному отжигу на воздухе. Первая стадия заключалась в нагреве пленки (со скоростью ≈ 10 °С/мин) до температуры 200 °С (около точки плавления Sn) и изотермическом отжиге на протяжении 2 часов. На второй стадии образцы нагревались до температур 400 – 700 °С, затем подвергались изотермическому отжигу в течение 1 часа. Вариация температуры окисления слоев металлического олова позволяет изменять стехиометрический и фазовый состав пленок, а также их кристаллическую структуру, так как в процессе окисления происходят фазовые превращения от металлического