Chapitre 2
Extension du modèle de Wulff-Jaccodine en dimension 3

Nous proposons dans ce chapitre une extension du modèle de Wulff-Jaccodine en dimension 3. Le modèle proposé met en jeu les mêmes notions que le modèle bidimensionnel, et rend compte des phénomènes observés en dimension 3. Nous présentons les contraintes que doit vérifier un modèle tridimensionnel, l'analyse des expérimentations réalisées et enfin nous décrivons un modèle tridimensionnel qui prend en compte ces deux aspects. Le modèle présente deux principaux inconvénients : sa validité dans les cas les plus complexes repose sur une conjecture que nous exposerons et il ne s'applique que sur un nombre restreint de conformations géométriques. Les cas étudiés permettent toutefois, dans un cadre industriel, de prévoir qualitativement le résultat d'une gravure.

1 - Compatibilité avec le modèle bidimensionnel

Un modèle tridimensionnel doit être tel que, sur une arête et suffisamment loin des sommets, la modification de la géométrie due à la gravure chimique soit prévisible grâce à une modélisation bidimensionnelle du phénomène. En effet, la construction de Wulff-Jaccodine décrit la forme observable en coupant une arête du substrat gravé par un plan orthogonal à cette arête.

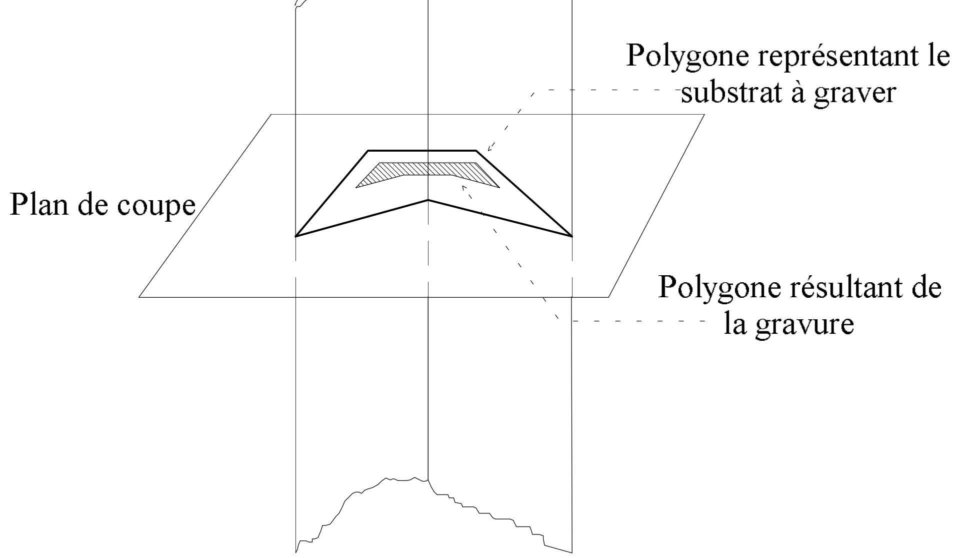

Fig 1 - Le résultat de la gravure d'un tel prisme sera donné par le prisme dont la base est le résultat de la construction bidimensionnelle appliquée à la base du premier prisme.

La modélisation bidimensionnelle décrite dans le chapitre précédent tenait compte des observations suivantes :

- le substrat peut être décrit en deux dimensions (en général par un polygone),
- les sommets du substrat nécessitent un traitement particulier,
- loin des sommets, les côtés du substrat sont simplement déplacés.

La modélisation tridimensionnelle que nous proposons tient compte, de la même façon, des observations suivantes :

- le substrat peut être décrit en trois dimensions (en général par un polyèdre),
- les sommets du substrat nécessitent un traitement particulier,
- les arêtes du substrat nécessitent un traitement particulier,
- loin des sommets et des arêtes, les facettes du substrat sont simplement déplacées.

• les expérimentations ont été réalisées avec un couple (substrat, bain d'attaque) conduisant à une gravure isotrope (comportement identique dans toutes les directions). La gravure isotrope (gravure d'un substrat de silicium par HF à 50% + 19 HNO_3 à 65% à température ambiante) a été choisie parce qu'appliquée à un substrat de départ comportant uniquement des faces planes, elle ne produit que des faces planes ou des portions de sphères et de cylindres facilement repérables.

• Alors qu'en dimension 2 on ne distinguait que deux types de sommets suivant l'angle formé par les faces adjacentes, on peut rencontrer en dimension 3 une infinité de singularités. En effet, un sommet appartient en dimension 3 à un nombre quelconque de faces. Nous avons donc limité notre étude aux configurations géométriques les plus fréquemment rencontrées dans la pratique :

• un coin rentrant comportant trois faces. Les faces forment deux à deux des angles rentrants (voir *Fig 2*),

• un coin sortant comportant trois faces Les faces forment deux à deux des angles sortants (voir *Fig 3*),

• un coin complexe comportant trois faces. Les faces forment deux à deux un angle rentrant et deux angles sortants (voir *Fig 4*),

• un coin complexe comportant trois faces. Les faces forment deux à deux un angle sortant et deux angles rentrants (voir *Fig 5*),

• un coin complexe (selle de cheval) comportant quatre faces Les faces forment deux à deux des angles alternativement rentrants et sortants (voir *Fig 6*).

Dans tous les cas, la tendance observée est l'arrondissement des arêtes rentrantes (apparition de portions de cylindre, tandis que les arêtes sortantes restent inchangées loin des sommets). Dans le voisinage des sommets, la forme résulte du type des arêtes auxquelles appartient le sommet.

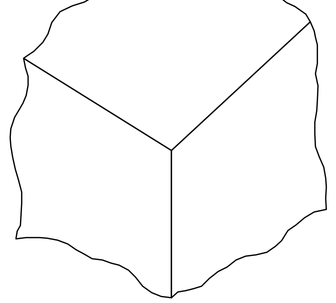

Fig 2 - Un coin sortant reste inchangé après une gravure isotrope

- l'apparition d'une portion de sphère et de portions de cylindre si toutes les arêtes sont rentrantes (coin rentrant)

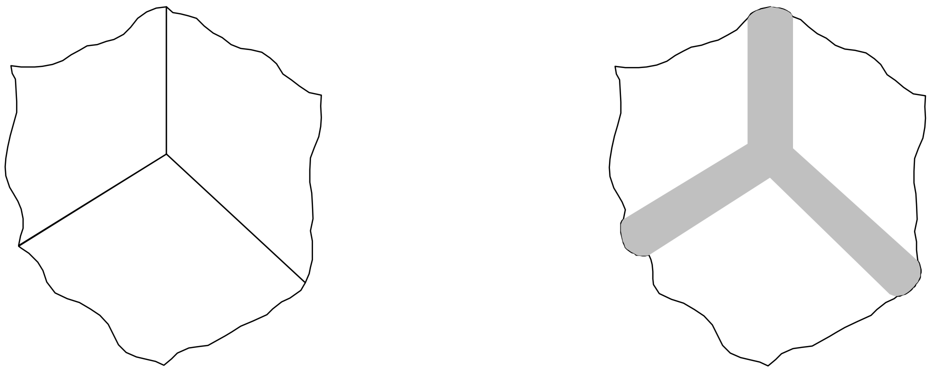

Fig 3 - Un coin rentrant s'arrondit après une gravure isotrope

- une combinaison de portions de cylindres et de déplacements de faces si le sommet appartient à la fois à des arêtes rentrantes et sortantes (coin complexe)

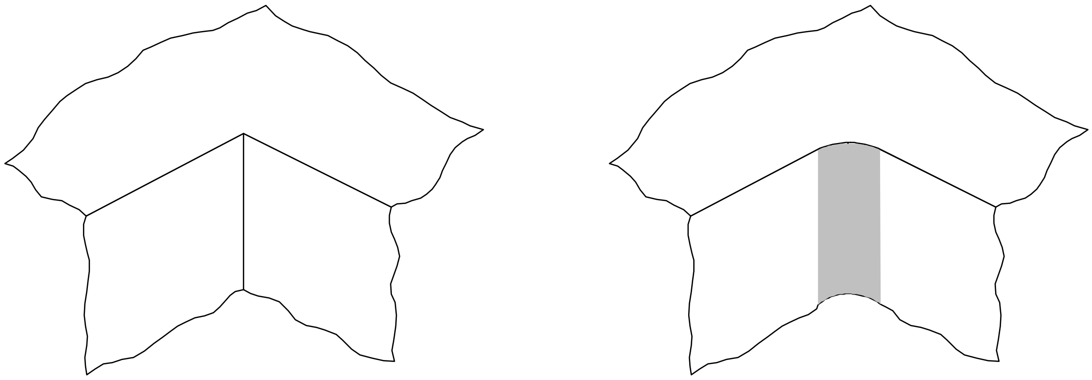

Fig 4 - Résultat de la gravure au voisinage d'un coin complexe comportant deux arêtes sortantes et une arête rentrante : portion arrondie autour de l'arête rentrante

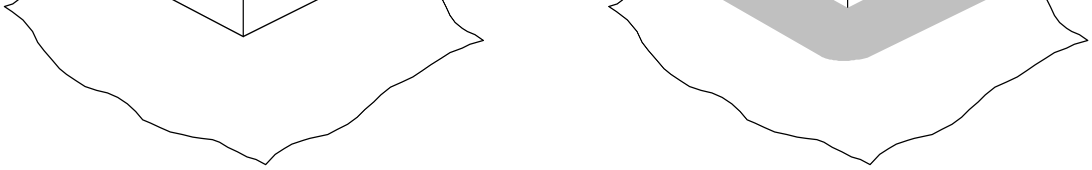

Fig 5 - Résultat de la gravure au voisinage d'un coin complexe comportant deux arêtes rentrantes et une arête sortante : portions arrondies autour des arêtes rentrantes

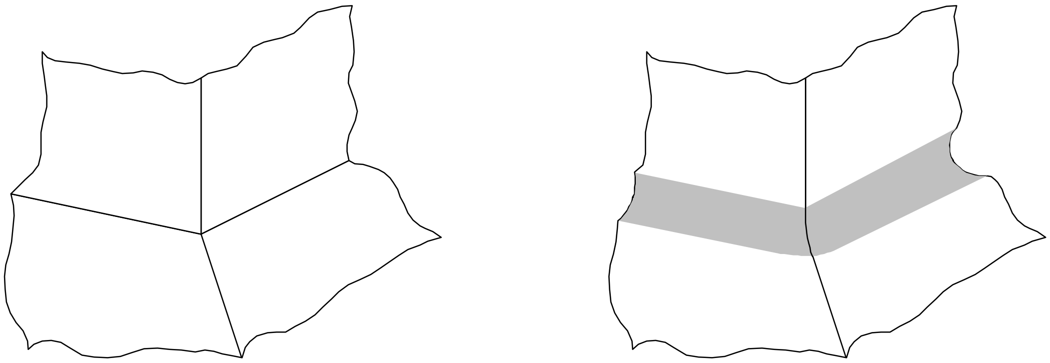

Fig 6 - Résultat de la gravure au voisinage d'un coin complexe comportant deux arêtes rentrantes et deux arêtes sortantes : portions arrondies autour des arêtes rentrantes

La tendance observée (apparition de portions arrondies autours de certaines arêtes) met en évidence l'influence des directions intermédiaires, comme dans l'étude bidimensionnelle. Autour des arêtes rentrantes apparaissent des portions de cylindre, tandis que les arêtes sortantes se déplacent sans variation de forme.

3 - Description d'un modèle tridimensionnel

Nous présentons ici une extension en dimension 3 du modèle de Wulff-Jaccodine. La méthode proposée rend compte de l'arrondissement du substrat autour de certaines arêtes, observées lors de gravures isotropes. La validité du modèle dans les cas les plus complexes s'appuie sur une conjecture que nous exposerons plus loin.

intersection des demi-espaces délimités par les droites de construction :

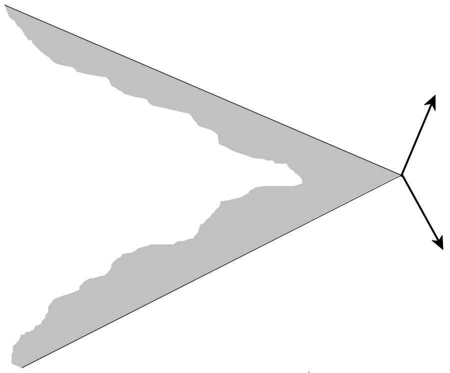

Fig 7 - Angle sortant (les deux normales extrêmes sont représentées)

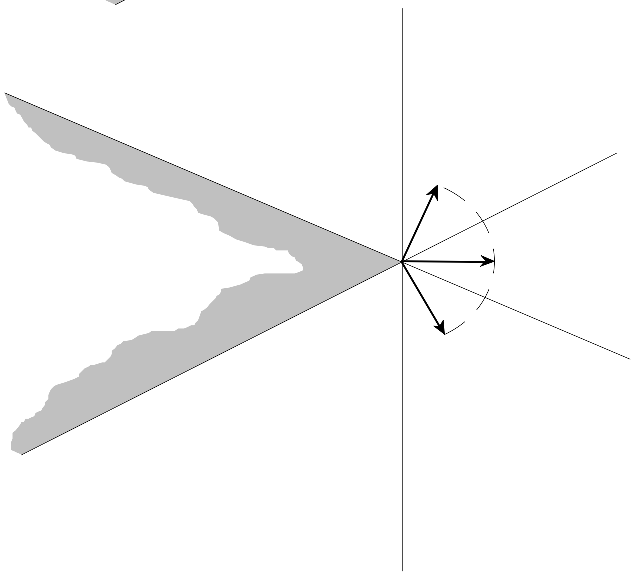

Fig 8 - Cet angle sortant peut être décrit comme l'intersection de tous les demi-espaces dont la normale est comprise entre les deux normales extrêmes de l'angle (les deux demi-espaces extrêmes et un demi-espace intermédiaire sont représentés).

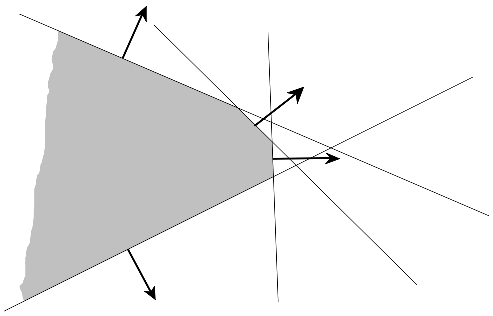

Fig 9 - Le résultat de la gravure est constitué de l'intersection des demi-espaces dont la normale est comprise entre les normales extrêmes de l'angle initial. Ces demi-espaces sont les demi-espaces qui interviennent dans la décomposition précédente, déplacés suivant la vitesse normale correspondant à leur direction (la forme représentée ici est le résultat d'une gravure anisotrope).

- toutes les directions comprises entre les directions extrêmes peuvent intervenir,

- le résultat est constitué d'unions ou d'intersections de demi-espaces, selon le type d'angle traité (rentrant ou sortant).

Nous allons maintenant montrer comment cette approche permet de modéliser le phénomène en 3 dimensions.

3.2 - Représentation des coins en unions et intersections de demi-espaces

Pour tenir compte de l'aspect local de la dissolution chimique, nous avons établi pour chaque type de coin (c'est-à-dire pour chaque conformation géométrique autour d'un sommet) une méthode de décomposition par opérations booléennes (unions, intersections).

Chaque conformation est représentée par une suite d'opérations qui permettra de construire, de façon naturelle, une nouvelle conformation représentant le résultat local de la gravure. Ce résultat de la gravure sera obtenu en appliquant la même composition d'unions et d'intersection aux demi-espaces déplacés :

- décomposition en unions et/ou intersections de demi-espaces (en dimension 3, un demi-espace est délimité par un plan orienté),

- déplacement des demi-espaces intervenant dans la décomposition suivant la vitesse qui correspond à leur orientation (dans le cas d'une gravure isotrope, tous les demi-espaces sont déplacés de la même façon),

- recomposition des demi-espaces déplacés pour engendrer le résultat local de la gravure.

Comme pour la construction de Wulff-Jaccodine, lors de la modélisation de la gravure sur un sommet donné, les demi-espaces qui interviennent sont ceux dont la normale est comprise entre les normales extrêmes en 3D.

- les normales du coin considéré, représentées par trois points,

- les directions intermédiaires, représentées par la surface de la sphère dont les sommets sont les trois points précédents.

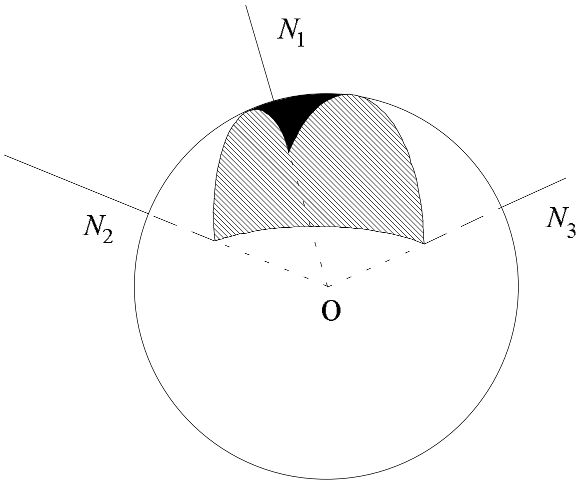

Fig 10 - Normales des demi-espaces intervenant pour un coin comportant trois faces de normales respectives N_1, N_2 et N_3

Nous donnons pour chaque coin étudié une liste (non exhaustive) de décompositions faisant intervenir toutes ces directions intermédiaires, avec les notations suivantes :

- $\bigcup_{P=P_1}^{P=P_2} P$ représente l'union de tous les demi-espaces P dont l'orientation est comprise entre celles des demi-espaces P_1 et P_2.

- $\bigcap_{P=P_1}^{P=P_2} P$ représente l'intersection de tous les demi-espaces P dont l'orientation est comprise entre celles des demi-espaces P_1 et P_2.

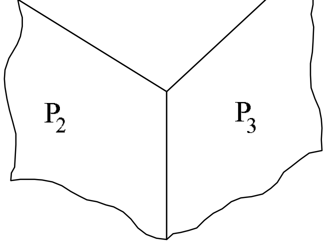

Fig 11 - Coin sortant

- $\bigcap_{P=P_2}^{P=P_3}\left[\bigcap_{Q=P}^{Q=P_1} Q\right]$

- $\bigcap_{P=P_3}^{P=P_1}\left[\bigcap_{Q=P}^{Q=P_2} Q\right]$

Décompositions possibles :

- $\bigcup_{P=P_1}^{P=P_2}\left[\bigcup_{Q=P}^{Q=P_3} Q\right]$

- $\bigcup_{P=P_2}^{P=P_3}\left[\bigcup_{Q=P}^{Q=P_1} Q\right]$

- $\bigcup_{P=P_3}^{P=P_1}\left[\bigcup_{Q=P}^{Q=P_2} Q\right]$

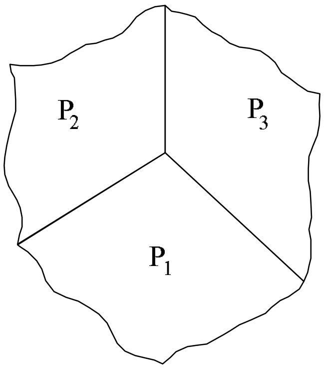

Fig 12 - Coin rentrant

Décompositions possibles :

- $\bigcup_{P=P_2}^{P=P_3}\left[\bigcap_{Q=P}^{Q=P_1} Q\right]$

- $\bigcap_{P=P_2,Q=P_3}^{P=P_1,Q=P_1}\left[\bigcup_{R=P}^{R=Q} R\right]$

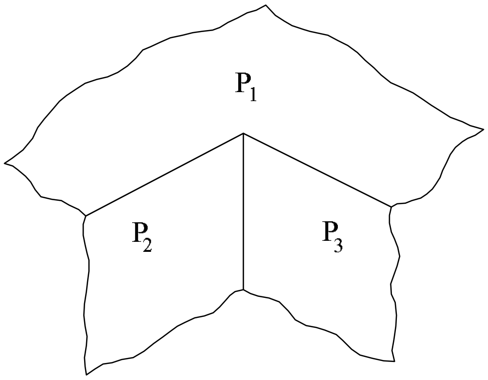

Fig 13 - Coin complexe
(deux arêtes sortantes, une arête rentrante)

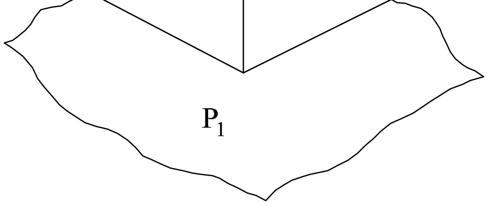

Fig 14 - Coin complexe
(deux arêtes rentrantes, une arête sortante)

- $\bigcap_{P=P_2}\left[\bigcup_{Q=P_1} Q\right]$
- $\bigcup_{P=P_2,Q=P_3}^{P=P_1,Q=P_1}\left[\bigcap_{R=P}^{R=Q} R\right]$

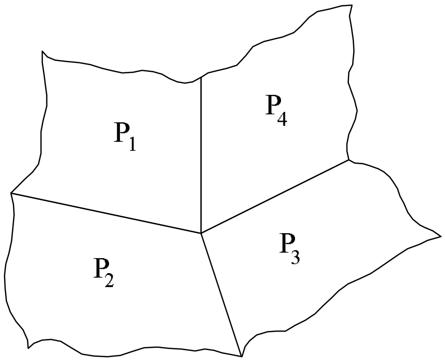

Fig 15 - Coin complexe (deux arêtes rentrantes et deux arêtes sortantes alternées)

Décompositions possibles :

- $\bigcup_{P=P_2,Q=P_3}^{P=P_1,Q=P_4}\left[\bigcap_{R=P}^{R=Q} R\right]$
- $\bigcap_{P=P_4,Q=P_3}^{P=P_1,Q=P_2}\left[\bigcup_{R=P}^{R=Q} R\right]$

3.3 - Modélisation de la gravure par des unions et intersections de demi-espaces

Dans les 5 cas évoqués précédemment, la recomposition des demi-espaces déplacés donne la forme observée expérimentalement, pour une gravure isotrope, quelle que soit la décomposition choisie pour la conformation initiale. Par contre, nous n'avons pas pu démontrer que dans le cas d'une gravure anisotrope, toutes les décompositions menaient au même résultat pour un coin complexe. Nous poserons donc la conjecture suivante :

Conjecture 1 : Toutes les décompositions d'un coin en unions et intersections de demi-espaces qui font intervenir toutes les directions intermédiaires conduisent au même résultat après recomposition des demi-espaces déplacés.

- un temps de calcul important résultant du nombre de directions étudiées et de l'implémentation des opérations booléennes,

- une ambiguïté liée à la multiplicité des décompositions pour une conformation géométrique donnée.

4.1 - Complexité et temps de calcul

Pour chaque sommet étudié, le modèle proposé exige un nombre d'opérations important : pour chaque direction étudiée, au moins une opération booléenne (union ou intersection) est effectuée. Pour chaque opération il faut déterminer la position de tous les sommets par rapport à la frontière des demi-espaces mis en jeu et créer au besoin de nouveaux sommets et arêtes. Le nombre important d'opérations à réaliser et la complexité de ces opérations rend vite le temps de calcul prohibitif : avec le modeleur décrit dans le chapitre suivant, le traitement d'un cas de complexité moyenne (objets comportant une vingtaine de sommets) nécessite plus d'une heure sur une station Sun Sparc 1+.

4.2 - Décompositions multiples

De plus, nous avons souligné qu'une conformation géométrique complexe (ici un coin formé par trois faces) pouvait être décomposée de plusieurs façons. Lors du passage à l'implémentation, la nécessité de discrétiser le balayage des directions ne permet de considérer qu'un nombre limité de directions. Ces directions peuvent différer d'une décomposition à l'autre. Deux décompositions différentes peuvent alors conduire à deux résultats différents lors de la recomposition des demi-espaces déplacés.

Nous avons montré que l'on pouvait associer à un coin complexe une surface sur la sphère unitaire, chaque point de cette surface représentant une direction à traiter. Dans le cas présenté ici, les directions à étudier sont représentées par un polygone à trois côtés sur la sphère, les sommets du polygone représentant les trois normales des faces. N_1, N_2 et N_3 sont respectivement les normales des faces portées par les plans P_1, P_2 et P_3.

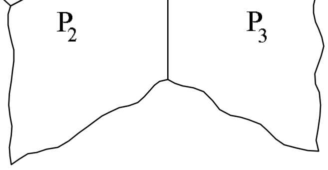

Fig 16 - Coin complexe comportant trois faces

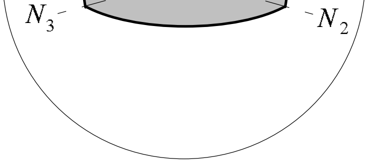

Fig 17 - Représentation sur la sphère unitaire des directions à étudier

Nous avons donné pour ce coin deux décompositions possibles. Ces décompositions correspondent à deux façons différentes de parcourir sur la sphère unitaire la surface représentant les directions à étudier.

- première décomposition : $\bigcup_{P=P_2}^{P=P_3}\left[\bigcap_{Q=P}^{Q=P_1} Q\right]$. La surface est parcourue par balayage d'un arc de cercle dont une extrémité est N_1 et dont l'autre extrémité varie de N_2 à N_3. Chaque arc de cercle représente les directions comprises entre deux vecteurs extrêmes.

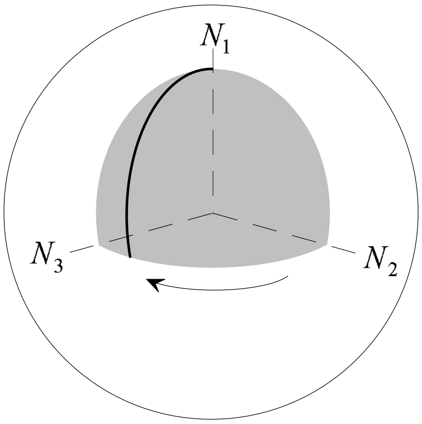

Fig 18 - Balayage de la surface de la sphère unitaire représentant la première décomposition

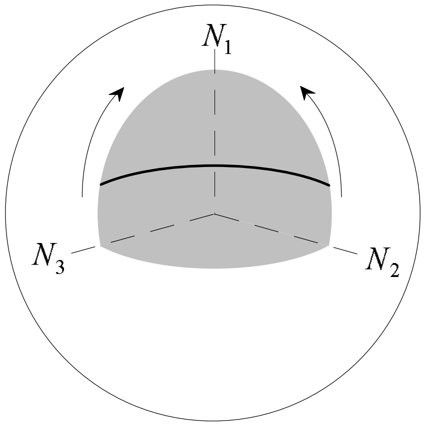

Fig 19 - Balayage de la surface de la sphère unitaire représentant la seconde décomposition

Dans des cas où l'anisotropie est forte (importante variation de la vitesse en fonction de la direction), nous avons constaté d'importantes différences entre les deux formes produites. En effet, il est impossible d'étudier toutes les directions comprises entre les directions extrêmes. Pour conserver un temps de calcul raisonnable, il est nécessaire de discrétiser le balayage des directions pour n'en étudier qu'un nombre limité. Deux méthodes de discrétisation ont été utilisées (détermination parmi un ensemble de direction connues de celles qui appartiennent à l'angle solide et projection de l'angle solide sur une sphère pour obtenir un polygone, puis diminution de la taille du polygone). Dans le second cas, les plans intervenant dans l'une ou l'autre décomposition peuvent être différents. Les résultats sont alors différents, et ce d'autant plus que le nombre de directions étudiées est faible.

5 - Autres modèles tridimensionnels

Nous décrivons ci-dessous deux types de modèles actuellement développés par d'autres équipes. Le premier ([FOOTE 1990], [SEQUIN 1991] et [SEQUIN 1992]) étudie les faces susceptibles d'apparaître lors de la gravure d'un coin et sélectionne celles qui interviennent dans le résultat. Le second ([HEIM 1991], [HEIM 1993] d'une part, [BUSER - De ROOIJ 1990], [BUSER - De ROOIJ 1991], [FRÜHAUF *et al* 1993] d'autre part) décrit la variation de la forme d'un substrat autour d'un masque.

- génération de toutes les faces possibles. Comme pour le modèle de Wulff-Jaccodine ou l'extension que nous proposons, cette phase nécessite la connaissance de la vitesse de déplacement en fonction de l'orientation d'une face.

- sélection des faces devant intervenir dans le résultat en fonction de règles déduites de l'observation et de la connaissance des interactions entre les atomes constituant le cristal. Selon la configuration géométrique, une base de données permet de déterminer si la face étudiée interviendra dans la forme finale.

D'après les auteurs, cette méthode donne un résultat très rapidement. En effet, seules les orientations des faces qui apparaissent dans la pratique sont étudiées (plans cristallins connus). Par contre, elle est pour l'instant limitée à certains couples (substrat, bain d'attaque) pour lesquels un grand nombre de mesures ont été réalisées.

5.2 - Evolution de la surgravure

La méthode développée par Heim étudie l'évolution de la forme au voisinage d'un masque. Pour chaque arête d'un masque (bord de masque), tous les plans d'orientations intermédiaires sont envisagés (construction bidimensionnelle).

L'auteur étudie trois critères pour sélectionner les faces apparaissant lors de la gravure. Ces critères sont d'ordre géométrique (position d'une face par rapport aux autres faces) et d'ordre physique (énergie associée à la face envisagée).

Il existe une autre méthode, développée par Buser et De Rooij, décrivant l'évolution au cours du temps de la surgravure apparaissant autour d'un masque. A un instant donné et pour une hauteur donnée, une coupe du substrat gravé définit un polygone résultant de la surgravure. Les arêtes de ce polygone peuvent être déplacées en fonction de l'orientation du plan auquel elles appartiennent. Il est nécessaire de connaître les conditions initiales, à savoir l'orientation des faces résultant du début de la surgravure. Ce modèle est donc également limité aux couples (substrat, bain d'attaque) pour lesquels les faces susceptibles d'apparaître ont été mesurées.

BUSER R. A. - De ROOIJ N. F. (1991)
"ASEP : a CAD program for silicon anisotropic etching", *Sensors and Actuators (A)* N° 28, pp 71-78

DANEL J. S. - DELAPIERRE G. (1992)
"Anisotropic crystal etching : a simulation program", *Sensors and Actuators (A)* N° 31, pp 267-274

FOOTE B. (1990)
"Simulation of anisotropic crystal etching", report n° UCB/CSD 90/595 Computer Science Division (EECS), University of California, Berkeley

FRÜHAUF J. - TRAUTMANN K. - WITTIG J. - ZIELKE D. (1993)
"A simulation tool for orientation dependent etching", *Journal of Micromechanics and Microengineering*, N° 3, pp 113-115

HEIM U. (1991)
"Simulation of wet anisotropic etching in silicon", *Proceedings of Micro System Technologies '91*, Berlin 1991, pp 197-202

HEIM U. (1993)
"A new approach for the determination of the shape of etched devices", *Journal of Micromechanics and Microengineering*, n° 3, pp 116-117.

SEQUIN C. H. (1991)
"Computer simulation of anisotropic crystal etching", Technical Digest, *6th international conference on Solid-State Sensors and Actuators (Transducers '91), San Francisco, June 24-28*, pp 801-806

SEQUIN C. H. (1992)
"Computer simulation of anisotropic crystal etching", *Sensors and Actuators (A)* n° 34, pp 225-241