

Computers. Kunnen we ze nog kleiner en beter maken?

Eva Vandaele

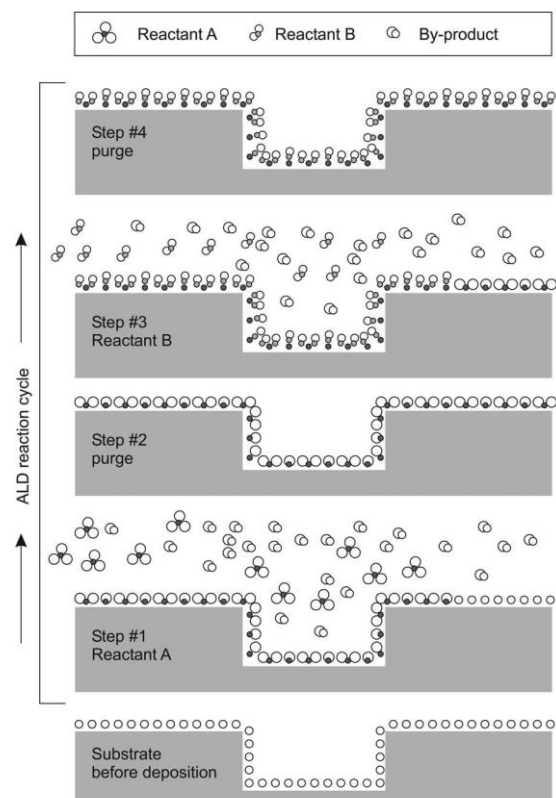
Computers, we gebruiken ze elke dag. En hoewel veel mensen niet weten hoe ze precies werken, zijn ze onmisbaar op ons werk, om te ontspannen thuis of om op de hoogte te blijven van ons sociaal netwerk. Een platte smartphonebatterij of een trage internetverbinding zijn een kleine wereldramp. Het is onvoorstelbaar hoezeer computers op korte tijd het dagdagelijkse leven veranderd hebben. Het is ook onvoorstelbaar hoeveel kleiner, sneller en slimmer de computer de voorbije vijftig jaar geworden is. Waar de eerste computer een kamer in beslag nam, passen de huidige smartphones in een achterzak. Complexe berekeningen, realistische simulaties of grote datasets verwerken? In de vorige eeuw nog een droom, nu de realiteit.

Deze vooruitgang is mogelijk doordat er steeds betere computerchips ontwikkeld worden. Elke twee jaar verdubbelt het aantal componenten op een chip [1]. Een belangrijke bijdrage hier is het verkleinen van de structuren op de chip, waardoor er steeds meer functies op passen. Dit kan echter niet blijven duren. Ondertussen wordt al op zo'n kleine schaal gewerkt dat nieuwe materialen en productiemethoden noodzakelijk zijn om de huidige chips te verbeteren [2]. Met dit onderzoek willen we bijdragen tot de verdere miniaturisatie van computerchips.

Een computerchip maken? Hoe begin je daaraan?

Interessante vraag, maar het antwoord is ingewikkeld, want computerchips worden gemaakt via een combinatie van verschillende technieken en materialen. Atoomlaagdepositie (ALD) en fotolithografie zijn twee belangrijke methoden om de kleinste structuren te vormen [3,4]. Via ALD kan een dunne laag materiaal afgezet worden op een onderliggend oppervlak. Vervolgens wordt een patroon gevormd in de afgezette laag met fotolithografie.

Bij ALD wordt een gas in contact gebracht met de onafgewerkte chip, waarop de gasmoleculen zich aan oppervlak binden, zoals geschetst in Figuur 1 [3]. Dan wordt het gas verwijderd en een tweede gas wordt toegevoegd. Dit zal reageren op het oppervlak met de eerder gebonden moleculen, resulterend in een dunne laag. Door het proces meermaals te herhalen kan een film met gekozen dikte gevormd worden. Bovendien zal deze film de structuur van het onderliggende oppervlak volgen, waardoor driedimensionale chips gemaakt kunnen worden. Daarna wordt een patroon in de film geëtst met behulp van UV licht en een lichtgevoelig materiaal [4].



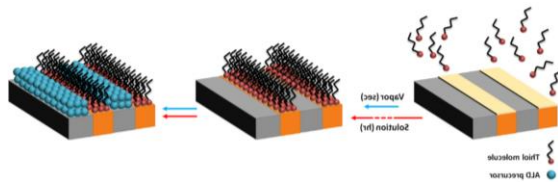
Figuur 1: Schets van het ALD-proces. De figuur is gekopieerd uit ref. 3.

Wanneer meerdere lagen op elkaar afgezet moeten worden, zoals bij een chip, kunnen er echter kleine verschuivingen in het patroon optreden, wat tot defecten kan leiden. Bovendien is fotolithografie relatief duur en de toepassing op nanomaterialen is beperkt door

de golflengte van het UV licht. De ontwikkeling van een nauwkeuriger, maar ook eenvoudiger en sneller alternatief voor fotolithografie is dus van groot belang.

Kan chemie de oplossing bieden?

Oppervlakte selectieve atoomlaagdepositie (AS-ALD) is een veelbelovende methode om fotolithografie te vervangen [5]. Startende vanaf een oppervlak bestaande uit twee materialen wordt op een van beide een beschermlaag afgezet, zoals geschetst in Figuur 2 [6]. Dit kan door moleculen te gebruiken die selectief binden op een van beide materialen. Dan wordt de onafgewerkte chip in een ALD-kamer geplaatst en het eerste gas wordt toegevoegd. De bedoeling is dat de beschermlaag verhindert dat de gasmoleculen op het materiaal binden, zodat de film enkel op het niet-beschermd oppervlak afgezet wordt. Zo kan het patroon eenvoudig en nauwkeurig voortgezet worden. In realiteit blijkt dit echter niet voor alle materialen even goed te werken [7]. Wij wilden uitzoeken hoe dat komt.



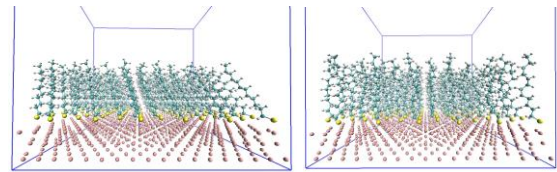
Figuur 2: Schets van het AS-ALD proces.
Figuur naar analogie met figuur uit ref. 6.

We zouden natuurlijk een groot aantal beschermlagen en ALD-gassen in een labo kunnen testen om dan de ideale combinaties voor te stellen, maar dit zou heel wat tijd kosten. Bovendien krijg je zo geen inzicht waarom de methode niet altijd even goed werkt. Computersimulaties kunnen de oplossing bieden. Een deel van het oppervlak en van de beschermlaag wordt atoom per atoom nagebouwd en vervolgens worden de interacties met de ALD-gasmoleculen berekend. Het nadeel van computersimulaties is echter de korte tijdsschaal en beperkte afmetingen die gesimuleerd kunnen worden, zijnde nanoseconden (10^{-9} s) en -meter. Bovendien kunnen we enkel benaderende inzichten krijgen en dit voor geïdealiseerde systemen. Niettemin bieden simulaties unieke

informatie over de beschermlaag op atomaire schaal.

Een beschermlaag? Hoe ziet dat er precies uit?

Vooraleer de interactie van de beschermlaag met het eerste ALD-gas berekend werd, is de laag bij verschillende temperaturen gesimuleerd. Experimenteel is namelijk gebleken dat de laag minder effectief is bij hogere temperaturen [7]. Inderdaad, simulaties toonden aan dat de beschermmoleculen zich bijna perfect ordenen bij zeer lage temperaturen, - 73 °C, waar de laag wanordelijk is bij hogere temperaturen, zoals getoond in Figuur 3.



Figuur 3: Het beschermde oppervlak bij -73 °C (links) en 327°C (rechts).

Kunnen moleculen, ondanks de beschermlaag, toch het oppervlak bereiken?

Om deze vraag te beantwoorden hebben we eerst atomen bovenaan de beschermlaag geplaatst en gedurende 100 nanoseconden gekeken of de atomen in de laag dringen. Dit bleek niet het geval te zijn. Logischerwijs konden ook de ALD-gasmoleculen niet in de perfecte laag dringen. Energetische berekeningen toonden bovendien aan dat dit niet te wijten is aan de korte simulatietijd. Indien we echter enkele moleculen uit de beschermlaag verwijderden, kon het ALD-gas vlot het onderliggende oppervlak bereiken. Een leemte van drie naast elkaar liggende beschermlaagmoleculen was hiervoor voldoende bij 127 °C.

Als conclusie ...

Kunnen we stellen dat een volledige, perfecte beschermlaag in staat is om het oppervlak te beschermen. Een klein defect is echter voldoende voor ALD-gasmoleculen om door de laag te dringen. Bovendien heeft temperatuur een grote invloed op de orde, en dus ook op de kwaliteit, van de laag. Hoe de

gasmoleculen dan precies interageren met het beschermde oppervlak is stof voor verder onderzoek.

Ik zou graag KU Leuven en imec willen bedanken en in het bijzonder prof. dr. J. Harvey, prof. dr. A. Delabie en dr. T Mihaylov die mij in dit onderzoek uitstekend begeleid hebben.

Referenties

1. Mack, C. A. (2011). *IEEE Trans. Semicond. Manufact.*, 24, 202.
2. Waldrop, M. M. (2016). *Nature*, 530, 145.
3. Puurunen, R. L. (2005). *J. Appl. Phys.*, 97, 121301.
4. Butt, H. J. et al. (2008). *Physics and chemistry of interfaces*, Wiley-VHC.
5. Jiang, X. et al. (2009). *J. Phys. Chem. C.*, 113, 41.
6. Hashemi, F. S. M. et al. (2016). *Appl. Mater. Interfaces*, 8, 33264.
7. Avila, J. R. et al. (2014). *Appl. Mater. Interfaces*, 6, 11891.