

Национальный исследовательский университет МИЭТ

Курсовая работа
по дисциплине
«Квантовая теория и статистическая физика»

Выполнил:
Студент группы ЭКТ-26
Чечетин П. Е.
Проверил:
Румянцев Александр

Москва – 2013

Содержание

I	Оценка аппроксимации для эффективной топографической симуляции ионно-лучевых процессов: 10 кэВ <i>Ar</i> на <i>Si</i>	2
1	Резюме	2
2	Введение	2
3	Симуляция	3
3.1	Топографическая симуляция	3
3.2	Бинарная симуляция столкновений	3
4	Результаты	4
4.1	Угловое распределение	4
4.2	Вторичное распыление	4
4.3	Не локальные эффекты	5
5	Выводы	6
6	Благодарности	6
II	Симуляция прямого ионного формирования 3D нанопечатей	6
7	Введение	7
8	Модель симуляции	7
9	Решения	9
10	Выводы	11

Часть I

Оценка аппроксимации для эффективной топографической симуляции ионно-лучевых процессов: 10 кэВ Ar на Si

1. Резюме

Основное предположение о существовании эффективной топографической симуляции состоит в том что распыление - это локальный процесс который зависит только от угла столкновения и не зависит от формы поверхности. Если учитывать переосаждение, распылённые атомы переосаждаются и не вызывают дальнейшего распыления когда они сталкиваются с другими участками поверхности. Более того угловое распределение распылённых атомов определяется законом косинуса. Если учитывать ионное отражение, тогда ионы не теряют энергию в процессе обратного рассеяния. Используя симуляцию бинарных столкновений (*IMSL*) и сравнивая их с результатами полученными с помощью топографического симулятора (*IonShaper*®) мы видим что всем этим предположениям нужны уточнения для симуляции наноструктур пренебрегая распыление распылённых атомов. Кроме того мы показываем что не локальные модели в основном справедливы для ионно-лучевого наведённого облучения внутренней структуры.

2. Введение

Ионные лучи это многостароннее и всё больше используемое средства для создания наноструктур либо с помощью прямого фрезерования либо путём процессов в газовой среде. Настоящее обучение мотивированно усилиями создать штампы для нано-литографии с массивными многоионными лазерными системами. Во всех приложениях симуляция может помочь понять физические процессы и оптимизировать форму структур.

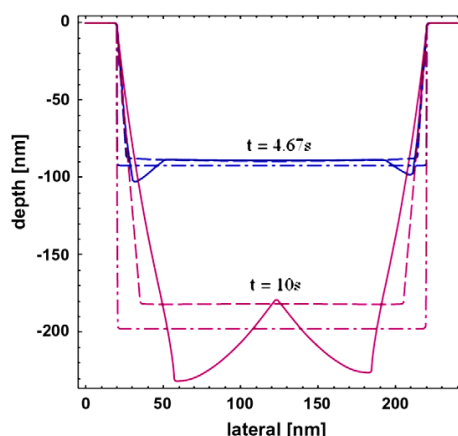


Рис. 1: Яма распылённая лучём 10 кэВ 200 нм шириной с плотностью тока $10 \frac{\text{kg mA}}{\text{cm}^2}$

Большинство существующих алгоритмов для численно эффективных топографических симуляции ионно-лазерных процессов моделирует поверхность проникновения явно, в соответствии с историей, точки поверхности считались соединёнными прямыми сегментами. Все алгоритмы базируются на предположении что рассеивание - это функция угла между направлением ионов и локальной нормалью поверхности. Обычно это хорошая аппроксимация для структур в диапазоне микрометров, но это становится под вопросом когда характерный размер становится меньше. Только некоторые алгоритмы включают переосаждение и только несколько распыление отраженных ионов. Эти эффекты в основном важны в структурах с большим отношением сторон как в глубоких ямах. Рис. 1 показывает контуры ям облучённых 200 нм широко однородным ионным лучём в два различных момента времени, посчитанных с помощью программного

обеспечения *IonShaper*[®]. В любое время симуляция без переосаждения и отражения (штрих-пунктирная линия) сравнима с симуляцией учитывающей только переосаждение (пунктирная линия) и учитывающей как переосаждение так и отражение (сплошная линия). Можно заметить что переосаждение атомов рассеянных из дна ямы ведёт к уменьшению ямы по направлению ко дну. На следующей стадии (не показано), переосаждение от граней ко дну и к другой грани ведёт к уменьшению эффективности фрезерования. Отражение ионов от граней ведёт к формированию микроям на дне ямы возле граней. Более того, увеличение излучения на наклонённую поверхность микротрещин ведёт к дополнительному переосаждению на грани.

В подсчёте переосаждённого потока, закон косинуса используется чтобы описать угловое распределение распылённых ионов. Обратное рассеяние предполагается без потери энергии. Далее, распылённые атомы которые достигают другую точку поверхности переосаждаясь там и не вызывают рассеяние. Эти предположения как и локальная аппроксимация рассеяния исследуются в этой статье используя симуляцию бинарных столкновений. Мы ограничиваем себя в 10 кэВ *Ar*-ионы и *Si*-мишени т.к. это наш текущий фокус интересов.

3. Симуляция

3.1. Топографическая симуляция

Двухмерная(2D) топографическая симуляция выполняется с *IonShaper*[®] программой. Коротко, поверхность описывается достаточным количеством точек которые движутся перпендикулярно к среднему наклону смежных сегментов. Скорость точек считается от потока атомов распылённых ионным лучом и от ионов отражённых от других частей поверхности и от потока переосаждённых атомов исходящих от распыления от остальных точек поверхности. Распыление считается локальным процессом, т.е. поток распылённых частиц в определённой точке пространства зависит только от потока падающих ионов в эту точку и их угла относительно нормали поверхности.

В действительности, из-за ограниченных пределов отскока, распылённые атомы испускаются из области вокруг точки падения. Чтобы исследовать этот эффект мы дополнительно реализовали не локальную модель потока распыления. Кол-во отскоков в определённой точке поверхности (точке назначения) от столкновения ионов в другой точке поверхности (источнике) рассчитывается от расстояния между двух точек и угла между прямой соединяющей эти точки и направлением падающих ионов.

Изначальная версия *IonShaper*[®] включала модель вынужденного лучевого напыления которое включало подсчёт предшествующей зоны наблюдения и простую реализацию нелокального эффекта ионов/напылении. Было показано что доля напыления пропорциональна количеству отскоков достигших поверхность. Поэтому мы улучшили модель напыления используя модель основанную на отскоках описанную выше.

3.2. Бинарная симуляция столкновений

Бинарная симуляция столкновений сделанна с IMSIL алгоритмом. IMSIL было использовано для имплантационных исследований для одна и двух мерных целей. В этой работе мы только используем аморфные цели, т.к. *Si* просто аморфируется при ионном бомбардировании. IMSIL был улучшен для расчётов распыления в двух аспектах. Первое, реализована планарная модель поверхностного потенциала. Хотя это достаточно очевидно для 1D целей, это более запутанно в случае поверхности данной в полигонах, в случае 2D из-за необходимости отслеживать траектории на некотором расстоянии вне цели и считать нормаль поверхности там. Мы делаем это путём охвата зоны симуляции прямоугольной сеткой и считаем расстояние от каждой ячейки до поверхности. В процессе симуляции траектории отскоков расстояния отскоков от поверхности считается с помощью интерполяции в табличных величинах. Если расстояние от новой точки отскока из поверхности превышает максимум параметра p_{max} , тогда отскок возвращается в точку предыдущего свободного полёта который есть расстояние p_{max} от поверхности. Нормаль поверхности в этой точке считается через градиент функции расстояния. В основном, отскоки покидающие поверхность проверяются путём помещения цели куда-нибудь ещё. В целях обучения, однако, отскоки останавливаются когда они покидают цель. Путём подгонки

экспериментального выхода распыления была определена эффективная поверхностная энергия связи в 4.1 эВ.

Второе, особое внимание должно быть уделено чтобы обработать всплески столкновений правильно. Чтобы избежать нереалистично близких столкновений когда помещаем цель, ионы должны начинать с расстояния p_{max} от поверхности. Только если внутри цели атомы цели настигаются тогда происходят столкновения. Однако, даже тогда результаты могут зависеть от предположения о путях свободного пролёта. Это потому что распределение пути свободного пролёта неявно определяет шероховатость поверхности. Поэтому мы используем распределение Пуассона для пути свободного пробега которое обеспечивает хорошую модель цели. Вместе с игнорированием столкновений вне цели это гарантирует постоянную атомную плотность внутри и нулевую плотность вне цели.

4. Результаты

4.1. Угловое распределение

Рис. 2 показывает угловое распределение распылённых и обратно рассеянных атомов полученное путём симуляции бинарных столкновений для углов наклона 0° , 40° , 70° и 87° .

С увеличением угла наклона распределение возрастающее отклоняется от закона косинуса (показанно на сфере). Отклонение важно в основном при фрезеровании глубоких ям т.к. поток в обратном направлении (направо Рис. 2) определяет сколько атомов могут покинуть яму. Угловое распределение обратно рассеянных электронов может быть только грубо описано зеркальным отражением (прямые пунктирные линии). Распределение более смещено по направлению *exit angles perpendicular to the surface* с большим стандартным отклонением в меньших углах наклона. Угловое распределение отраженных ионов определяет поверхность микроям показанных на Рис. 1 и поэтому должно быть описано точно.

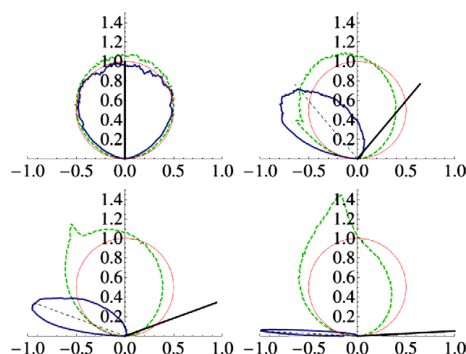


Рис. 2: Угловое распределение распылённых атомов (штрихпунктир) и отражённых ионов (сплошная) в сравнении с законом косинуса (круг) для углов падения 0° , 40° , 70° и 87° .

4.2. Вторичное распыление

IonShaper[®] предполагает что переосаждённые атомы не распыляются и что отражённые ионы распыляются с таким же выходом как и падающие ионы. Чтобы посчитать достоверность этого предположения мы подсчитали средний выход распыления распылённых и обратно рассеянных ионов для нормального наклона (Y_{ss} и Y_{sb} соответственно) беря во внимание энергию распространения распылённых ионов/обратно рассеянных ионов определённых симуляцией бинарных столкновений. Зависимость энергии нормально падающих распылённых ионов определена с помощью аналитической формулы. Т.к. в случае Y_{ss} мы заинтересованы только в грубой оценке, мы приближаем выход распылённых Si атомов распылением Ar ионов. Рис. 3 показывает выход вторичного распыления Y_{ss} и Y_{sb} . Для сильно наклонённых наклон Y_{sb} близок к распылению падающих ионов ($Y_s = 1.47$), но оно уменьшается значительно когда угол падения уменьшается (пример на 30% в 80; угол боковой стенки на Рис. 1 между 77 и 86). Для контраста, средний выход распыления Y_{ss} распылённых атомов скорее меньше и наверное незначителен в большинстве случаев.

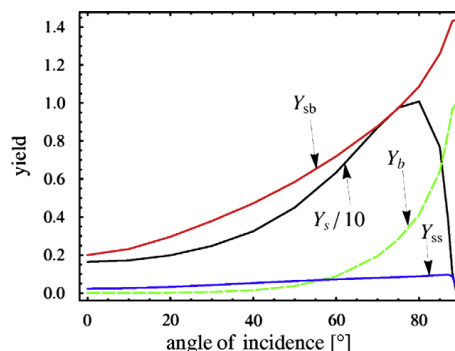


Рис. 3: Основной и вторичный выход как функция основного угла падения рассчитанная симуляцией бинарных столкновений

4.3. Не локальные эффекты

Чтобы исследовать не локальные эффекты мы взяли контур на Рис. 1 в 4.67с и посчитали основной поток распыления в соответствии с разными моделями. Результаты полученные с локальной моделью показанны штрих-пунктирной линией на Рис. 4, а результаты бинарного столкновения показанны сплошной линией. Можно заметить несколько удивительных отличий. Между 20нм и 50нм по абсциссе локальные результаты переоценивают поток. В первом случае это потому что луч ограничен >20нм и вклад каскад отскоков столкновений ионов <20нм пропущенно в результатах бинарного столкновения когда по иронии взято во внимание в локальной модели. В 50нм есть входящий поток >50нм, но точки падений глубже чем если контур был бы расширен >50нм с наклоном в <50нм. Поэтому сложнее породить отскоки от ионов >50нм чтобы вернуться к поверхности в <50нм. Это отражено в результатах бинарных столкновений но только в локальной модели. В 30нм видно два четких пика в локальной модели (положительный пик). Эти изминения в наклоне настолько стремительны что они не отражены в результатах бинарных столкновений из-за эффекта размытия конечного размера каскадов отскоков.

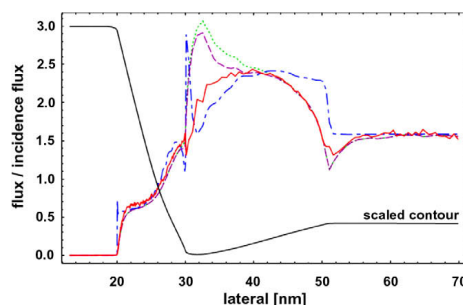


Рис. 4: Основной поток распыления

Штриховая линия соответствует *IonShaper*[®] результатам полученным с табличной моделью отскоков описанных вместе с осаждённой моделью. Так же можно заметить что они совпадают с результатами бинарных столкновений в большей части случаев. Пик не представленный в результате бинарных столкновений может быть замечен только на дне микроямы (>30нм). Это из-за того что путь от точки падения ион к точке назначения частично блокирован выгнутой поверхностью. Улучшенная модель описанная в конце секции 2.1 уменьшает этот пик, хотя некоторые отклонения от результатов бинарных столкновений остаются.

Наконец, Рис. 5 показывает *IonShaper*[®] результаты вынужденного ионно-лучевого результата осаждения в 25нм границей 10К эВ *Ar* лучём. Штриховая линия соответствует локальной модели когда сплошная линия представляет не локальную модель включая изменения отскоков. Так же нужно заметить что конечные размеры каскада отскоков значительно увеличивают ширину осаждённого столба. Этот эффект в основном выражен поскольку сравнительно низкая плотность отскоков вызывает значительный рост материала в ионно-лучевом осаждении.

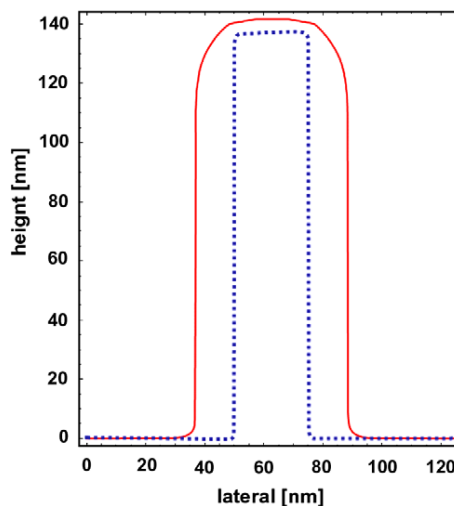


Рис. 5: Осаждение столба использующее локальную модель (точечная линия) и модель с отскоками (сплошная)

5. Выводы

Наша оценка модели использованна для топографической симуляции ионно-лучевых процессов для 10K эВ *Ar* ионов и *Si* целей позволяет нам заключить следующее:

1. Закон косинуса это только грубая аппроксимация углового распределения распылённых атомов. В особенности, распыление глубоких ям требует точного описания распределения на больших обратных углах. Так же, зеркальное отражение это только грубая аппроксимация для отражённых ионов. В обоих случаях реализация таблиц в топографическом симуляторе должна быть достаточно хорошей.
2. Как было показанно на Рис. 1 распыление отражённых ионов может быть важным эффектом. Распыление распылённых частиц похоже несущественно из-за не значительного средней энергии распылённых атомов.
3. Локальная модель распыления реализованная во всех топографических симуляторах на сегодня оказывается достаточно неточна. Была предложена модель основаная на пространственном распределении атомов на плоской поверхности и ожидается что она улучшает результаты на структурах малого размера. Нелокальная модель даже более важна для ионно-лучевого осаждения.

Мы планируем расширить эту работу на другие энергии и типы ионов, изучать влияние предложенных моделей на форму поверхностей.

6. Благодарности

Эта работа было частично поддержанна Европейской комиссией путём финансирования проекта CHARPAN и Австрийским агенством продвижения, Австрийской нано инновационной программой, проектом NILaustria.

Часть II

Симуляция прямого ионного формирования 3D нанопечатей

7. Введение

Проекция ионного луча было предложено многими группами как обнадёживающий вариант улучшить эффективность в производстве с использованием распыления по отношению к обычным технологиям фокусированного луча (**FIB**). Идея такова: использовать трафарет или программируемую щелевую подложку, предлагающую **2D** структурированный ионный профиль для ионного фрезерования, травления, и осаждения. Главное преимущество использовать **2D** структурированных лучей вместо фокусированных лучей (**FIB**) для определённых приложений в том что продуктивность может быть улучшена на более чем два порядка (как для всего потока так и для точечного отношения). Это в особенности справедливо для приложений где предварительный газ используется для химических улучшений процесса (травления и осаждения), хотя плотность потока у ширины луча достаточно мала чтобы избежать пространственного истощения газа. Более того, **2D** структурированный луч позволяет очень точно контролировать уровни ионного влияния. Последний играет роль в формировании **3D** поверхностей с требованиям нанометровой точности формы или для высоко чувствительных к облучению материалов, для примера, органические тонко плёночные структуры. Интегрированный европейский проект **CHARPAN** (**Charged Particle Nanotech**) был запущен чтобы использовать эти преимущества и с целью эксплуатировать ионно-лучевое средства для формирования образцов для наномасштабного производства.

8. Модель симуляции

Модель размытия, использованная для симуляции в программе *IonShaper*[®], подражает натуральному процессу описанному вектором скорости нормальным к поверхности и формой поверхностью с полной производной. Однако, последнее условие в основном не выполняется в базовой размытой симуляции. В реальности, существует предел для максимальной кривизны которая может быть развита из-за эффектов реальных размеров таких как пространственная диффузия или каскады столкновений пространственно разделяют падающих ионов и расплывших атомов. Размытые симуляции которые не включают естественное сглаживание или чья длина дискретизации больше чем упомянутый атомистичный эффект должны справляться с особенностями производной формы поверхности. Именно поэтому в модели размытия *IonShaper*[®] реализованна специальная обработка поверхностей границ: простейшие модели размытия описывают эволюцию поверхности либо как параллельное движение достаточно коротких участков либо движение индивидуальных точек перпендикулярно основной поверхности.

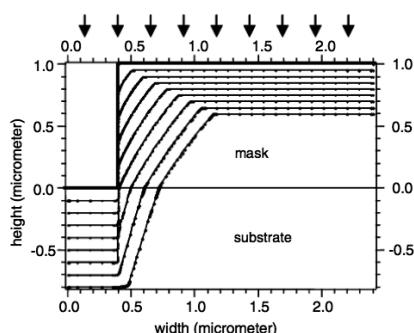


Рис. 6: *IonShaper*[®] симуляция

Наша модель сочетает оба метода чтобы гарантировать точную симуляцию "чётких" границ где наклон поверхности плохо определён. Первое, максимальный угол между смежными сегментами ограничен меньше $20^\circ - 45^\circ$. Второе, в дополнение к среднему наклону два индивидуальных наклона сегментов с обеих сторон поверхности указанных в вопросе также использовались для того чтобы определить наиболее быструю прямую траекторию движения и поверхность точек движется соответственно но всё равно перпендикулярно к среднему наклону. Включая эти корректировки, *IonShaper*[®] главная модель эрозии способна воспроизвести результаты математически более изощрённых подходов основанных на общей теории теории Гюгенса, которая может иметь дело с бесконечно острыми краями. Преимущества нашей модели эрозии - это очень простая реализация высокоуровневых эффектов таких как переосаждение и вторичная эрозия от отражённых ионов.

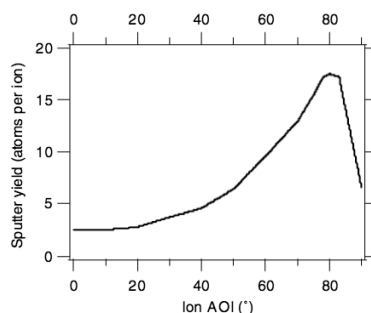


Рис. 7: Зависимость распылённого выхода от угла падения ионов основанное на экспериментальных данных

Атомические эффекты неявно включены изменением различных параметров симуляции в атомистической симуляции Монте-Карло, для примера, угол зависимый от ионного распыления. Критичные и экспериментально доступные параметры как угловая зависимость распылённого выхода взяты напрямую из эксперимента (Рис. 7).

(Рис. 6) показывает *IonShaper*[®] симуляцию приложенную к идеально бинарной, для примера, маск-подложка где распылённый выход на маск-уровне является половиной жтой подложки. Читатель поощряется сравнить эти результаты с "точными" численной симуляцией использующей обобщенную теорию Гюгенса данную в ссылке 5, откуда очевидна согласованность теории с симуляцией. Также нужно заметить сосредоточение сегментов около углов и пересечение двух слоёв маски и (подложки) из-за динамической сетки реализованной в *IonShaper*[®].

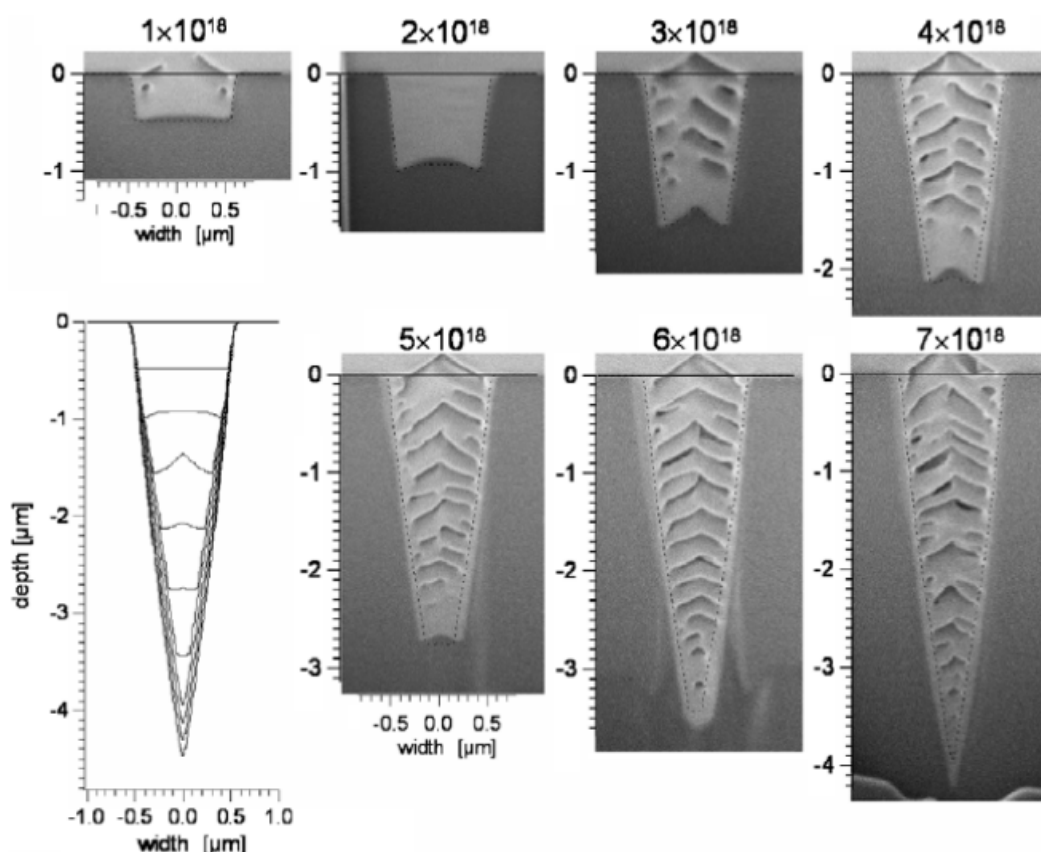


Рис. 8: Профили ямы

9. Решения

IonShaper[®] результаты также сравнимы с экспериментальными результатами полученными из фокусированных ионно-лучевых процессах распыления. Для этих целей, *Si* подложка была облучена 30 keV *Ga* ионами. Фокусированный ионный луч имел полную ширину 70 нм и был направлен на образец через прямоугольный фильтр с полосой пропускания 12.5 нм. На протяжении процесса этот растр повторяли много раз чтобы достиг локальный ионный поток $1 \times 10^{18} \frac{\text{ион}}{\text{см}^2}$ до $7 \times 10^{18} \frac{\text{ион}}{\text{см}^2}$. Это показано в распылённой яме шириной 1 мкм несколько микрометров глубиной и примерно 10 мкм длинной. После распыления они были наполнены металлом в *FIB* вынужденном процессе напыления. Чтобы проверить форму ямы, *FIB* меж-секции были сделаны перпендикулярно к ямам. На (Рис. 8), показана последовательность вторичных электронных картинок меж-секций ямы. После накопления ионного потока в $1 \times 10^{18} \frac{\text{ион}}{\text{см}^2}$ яма около 0.5 мкм глубиной с почти плоским дном. С увеличением потока наблюдается две характеристичные черты: яма становится более узкой а дно W-образным. Первый эффект из-за переосаждения распылённых атомов подложки. С увеличением отношения сторон ямы вероятность прилипнуть распылённым атомам к противоположенной стенке так же возрастает. W-образная форма вызвана увеличенным распылением в углах на дне из-за ионного рассеяния не вертикальной стороны. W-образная форма наиболее выражена когда яма достигает соотношение сторон 1.5-2.0. После этого характерная форма дна сглаживается из-за наложения интенсивностей рассеянных ионов с обеих стенок. Дно становится ровным с обеих стенок и процесс заканчивается с V-образной формой ямы с соотношением сторон равным 4.

При сравнении с экспериментальными данными, симуляция воспроизводит все основные особенности описанные выше как качественно так и количественно. Симулированные кривые на Рис. 8 не были получены путём подгонки, они результат подсчёта с одним набором параметров симуляции. Есть только одно не большое расхождение между симуляцией и реальным контуром осматриваем на высоком потоке $6.5 \times 10^{18} \frac{\text{ион}}{\text{см}^2}$. В таком режиме симуляция недооце-

нивает распылённую глубину. Мы предполагаем что этот эффект возникает от двойного или много разового рассеяния от стенок которое не включенно в *IonShaper*[®] модель симуляции, которое может вызывать усиление эффекта ионной фокусировки.

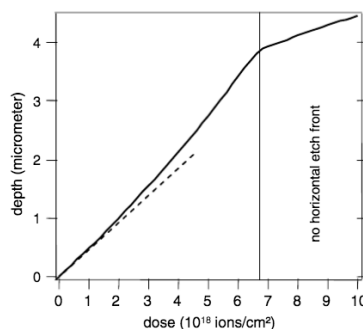


Рис. 9: Зависимость глубины от потока ионов

Начальное ускорение следующее за замедлением скорости эрозии на больших соотношения сторон является ещё одним интересным свойством, показано на Рис. 9. Когда яма становится глубже переосаждение материала расплывлённого в глубоких частях ямы приводит к более и более узкой яме. В начале, фокусировка ионов отраженных наклонённых стенок ямы усиливает частоту травления. Иногда, однако, близко к середине ямы фокус исчезает, что вызывает внезапное замедление процесса эрозии. Переосаждение и тем самым сжатие ямы может быть строго предотвращено путём использования травления в атмосфере газа, который препятствует переосаждению в следствии химических реакций. Это приводит к формированию прямоугольной ямы с высоким соотношением сторон.

В дополнение к распылённой симуляции, *IonShaper*[®] может быть использован для симуляции вынужденного ионного осаждения где энергия подающих ионов превращает абсорбированный предварительный газ на подложке в неизменный осадок похожий на процесс химического парового осаждения (*CVD*). Однако, использование упорядоченного ионного луча приводит к очень высокой пространственному разрешению процесса осаждения. Недавно было продемонстрировано автономный рост около 100 нм проводов. [6]. Рис. 10 показывает симуляцию роста вертикальных нанопроводов для трех различных пиковых плотностей ионов использующих ультра изкий ионный луч меньше чем 10 нм шириной (12 нм *FWYM*, с 1.0.1, и 0.01 pA током соответственно).

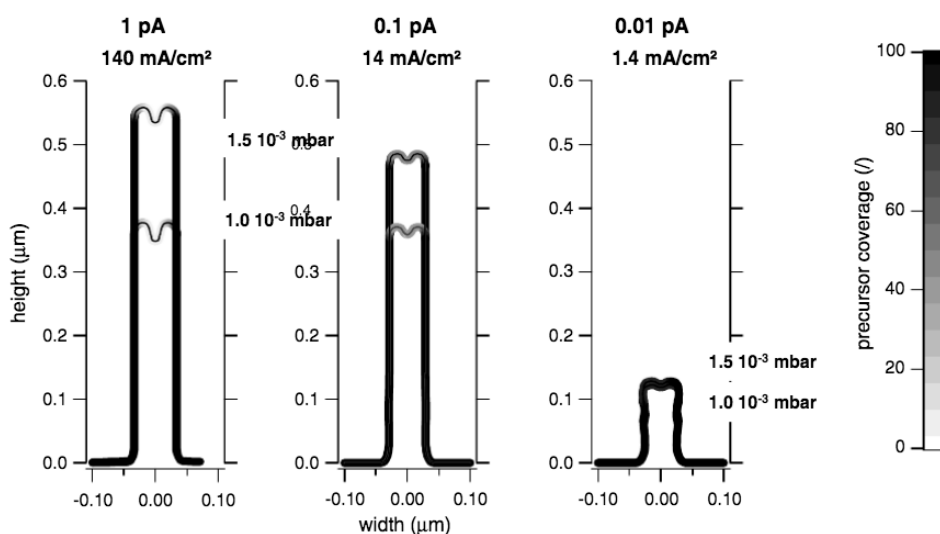


Рис. 10: Симуляция роста нановолокна

Этот пример показывает взаимодействие предварительного растворения, осаждения, и распыления. Разделение предварительного газа предполагается вызвана вторичными электронами. Мы берём это во внимание предполагая ширину ионного-лучевого действия радиусом 25 нм и выходом осаждения 10. Соответственно ионный луч гораздо уже чем нанопровод. Диаграммы показывают осаждение . Диаграммы показывают осаждение . Диаграммы показывают осаждение . Диаграммы показывают осаждение . Диаграммы показывают осаждение . Диаграммы показывают осаждение . Диаграммы показывают вынужденное осаждение от ионных лучей с высокими ионными токами в основном используемых для FIB процессов. Заметна строгая зависимость скорости роста от давления предварительного газа. В этих условиях рост ограничен растворением предварительного газа и тем фактом что большая часть потока ионов не имеет ни какого эффекта кроме как распыления изкой ямы ограниченного размера (Рис. 8) в центре нановолокна.

Однако, для технических приложений органического роста ионного тока может быть даже выгоден потому что очень сложно контролировать локально поглощение предварительного газа. Ещё одна диаграмма показывает текущую ограниченную натуру плотности процесса роста вынужденного сравнительно низкой плотностью потока используемой в средствах разработанных в **CHARPAN**. В этом режиме потока, предварительный газ, с его давление, почти что не имеет эффекта на частоту роста потому что сокращение газа не наблюдается.

Использование низкой плотности тока, для примера, плотность потока показанное в **CHAR-PAN** может обеспечить около 20кратно быстрый рост нановолокон в сравнении с *FIB* процессом. Это справедливо для больших площадей осаждения. Беря во внимание возросший общий допустимый ток с ионной проджекцией (более чем 2 раза) потенциал производства а наномасштабе более чем очевиден.

10. Выводы

Производство **3D** поверхностных структур путём прямой ионной-лучевой обработки - это интересная возможность для различных применений включая формирование наностампов. Контролируемое **3D** производство требует настройку симулятора на связанный процесс повторения. В этой статье, симуляционная программа *IonShaper*[®] предлагает превосходный контроль процесса для ионно-лучево распыления, вынужденного ионного травления, и осаждения.