

# Оценка аппроксимации для эффективной топографической симуляции ионно-лучевых процессов: 10К эВ аргон на кремний

П. Е. Чечетин \*

2013

---

\*e-mail : paulche@yandex.ru

# 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 *\*redeposition\**, распылённые атомы *\*redeposited\** и не вызывают дальнейшего распыления когда они сталкиваются с другим 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 (IMSIL) 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 справедлива для ионно-лучевого наведённого облучения внутренней структуры.

## 2. Введение

Ионные лучи это многостороннее 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.

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 порядка *\*the ion projected range\** или ниже. Только некоторые алгоритмы включают *\*redeposition\** и только несколько распыление отраженных ионов. Эти эффекты в основном важны в структурах с большим отношением сторон как в глубоких ямах. Рисунок 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 *\*redeposition\** и отражения (штрих-пунктирная линии) сравнима с симуляцией учитывающей только *\*redeposition\** (пунктирная линия) и учитывающей как *\*redeposition\** так и отражение (сплошная линия). Можно заметить что *\*redeposition\** атомов рассеянных из дна ямы ведёт к уменьшению ямы по направлению ко дну. На следующей стадии (не показано), *\*redeposition\** 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 излучение на наклонённую поверхность микротрещин ведёт к дополнительной *\*redeposition\** от граней.

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

## 3. Симуляция

### 3.1. Топографическая симуляция

Двухмерная(2D) топографические симуляции выполняются с IonShaper® программой. Коротко, поверхность описывается достаточным кол-вом 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 *\*redeposited\** атомоов 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 относительной 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 на-

значения) 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 посчёт предшествующей зоны наблюдения и простую реализацию не локального эффекта ионов/напылении. Было показано что доля напыления пропорциональна кол-ву 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 аморфизуется 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 запатентовано в случае поверхности данной в полигонах в случае 2D из-за необходимости отслеживать траектории на некотором расстоянии вне цели и считать нормаль поверхности таю. Мы делаем это путём охвата зона симуляции правильной 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  $r_{max}$ , тогда отскок возвращается в точку предыдущего свободного полёта который есть расстояние  $r_{max}$  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 eV.

Второе, особое внимание должно быть уделено чтобы обработать всплески столкновений правильно. Чтобы избежать нереалистичных близких столкновений когда помещаем цель, ионы должны начинать с расстояния  $r_{max}$  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 отклонением столкновений \*partners\* от цели это гарантирует постоянную атомную плотность внутри и нулевую плотность вне цели.

## 4. Результаты

### 4.1. Угловое распределение

Рис.1 показывает угловое распределение распылённых и обратно рассеянных атомов полученное путём симуляции бинарных столкновений для углов наклона 0, 40, 70, 87. С увеличением угла наклона распределение возрастающее отклоняется от закона косинуса (показанно на сфере). Отклонение можно 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 смещанно по направлению \*exit angles perpendicular to the surface\* с большей стандартным отклонением в меньших углах наклона. Угловое распределение отраженных ионов определяет поверхность микроям показанных на Рис. 1 и поэтому должно быть описано точно.

### 4.2. Вторичное распыление

IonShaper® предполагает что \*redeposited\* атомы не распыляются и что отражённые ионы распыляются с таким же выходом как и падающие ионы. Чтобы посчитать достоверность этого предположения мы посчитали средних 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 Ag ионов. Рис.3 показывает выход вторичного распыления  $Y_{ss}$  и  $Y_{sb}$ . Для сильно \*grazing\* наклон  $Y_{sb}$  близок к распылению падающих ионов ( $Y_s = 1.47$ ), но оно уменьшается значительно когда угол падения уменьшается (пример на 30

### 4.3. Не локальные эффекты

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

Штриховая линия соответствует IonShaper® результатом полученным с табличной моделью отскоков описанных вместе с \*deposition\* 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 ( $>30$  нм). 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 вынужденной ионно-лучевой \*deposition\* в 25 нм границей 10 keV Ar лучём. Штриховая линия соответствует локальной модели когда сплошная линия представляет не локальную модель включая изменения отскока. Так же нужно заметить что конечные размеры каскада отскоков значительно увеличивают ширину \*deposited\* столба. Этот эффект в основном выражен поскольку сравнительно низкая плотность отскоков вызывает значительный рост материала в \*beam assisted deposition\*.

## 5. Выводы

Наша оценка модели использованна для топографической симуляции ионно-лучевых процессов для 10 keV 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 должно быть достаточно хорошим. (2) Как было показано 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 основанная на пространственном распределении атомов на плоской поверхности и ожидается что она улучшает результаты на структурах малого размера. Нелокальная модель даже более важна для \*ion beam assisted deposition\*.

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.