

Национальный исследовательский университет МИЭТ

Курсовая работа

по дисциплине
«Квантовая теория и статистическая физика»

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

Выполнил:

Студент группы ЭКТ-26

Чечетин П. Е.

Проверил:

учёная степень, учёное звание

ФИО преподавателя

Москва – 2013

Содержание

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	4
5 Выводы	5
6 Благодарности	5

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 (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 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.

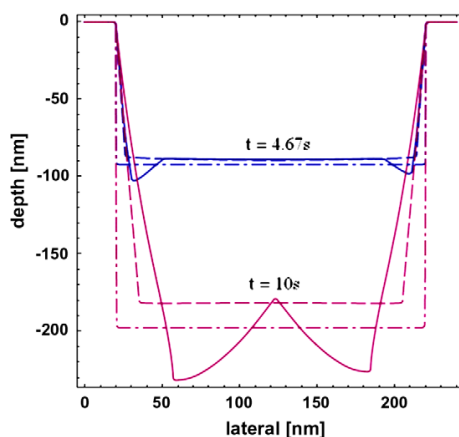


Рис. 1: This is a demo figure

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. 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 переосаждения и отражения (штрихпунктирная 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 излучение 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 10к эВ *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 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 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 посчёт предшествующей зоны наблюдения и простую реализацию нелокального 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 ионом 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 предидущего 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 достигаются 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.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 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 описанно зеркальным отражением (прямые пунктирные линии). Распределение более смещенно 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.

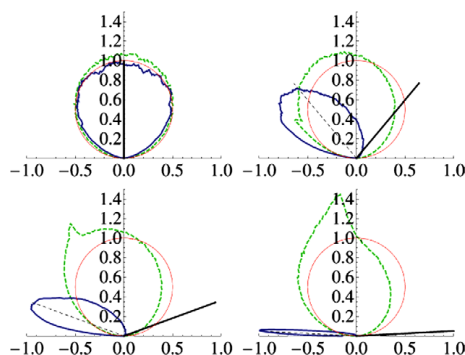


Рис. 2: This is a demo figure

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 определено 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.

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 $>20\text{нм}$ и вклад каскад отскоков столкновений ионов $<20\text{нм}$

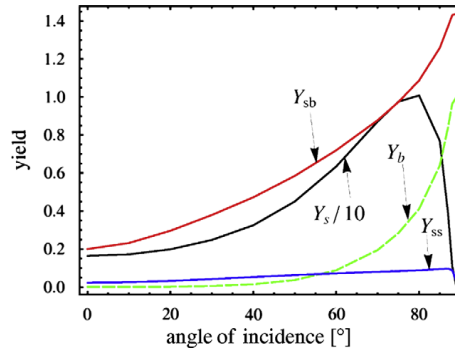


Рис. 3: This is a demo figure

пропущенно в результатах бинарного столкновения когда по иронии взято во внимание в локальной модели. В 50nm есть входящий поток >50nm, но точки падений глубже чем если контур был бы расширен >50nm с наклоном в <50nm. Поэтому сложнее породить отскоки от ионов в >50nm чтобы вернуться к поверхности в <50nm. Это отражено в результатах бинарных столкновений но только в локальной модели. В 30nm 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.

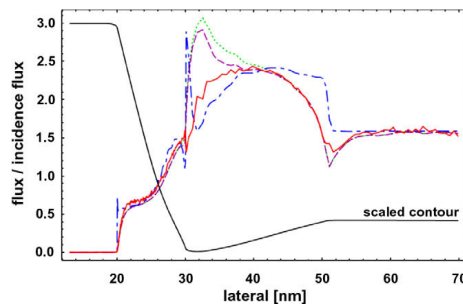


Рис. 4: This is a demo figure

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 (>30nm). 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 25nm границей 10K 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.

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 апрок-

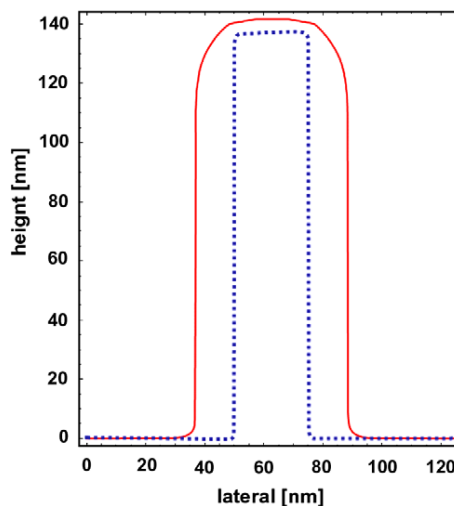


Рис. 5: This is a demo figure

симуляция для отражённых ионов. В обоих случаях реализация таблиц в топографическом симуляторе должна быть достаточно хорошей.

2. Как было показано на рис. 1 распыление отражённых ионов может быть важным эффектом. Распыление распылённых частиц похоже несущественно из-за незначительной 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 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 была частично поддержана Европейской комиссией путём финансирования проекта CHARPAN и Австрийским агентством продвижения, Австрийской нано инновационной программой, проектом NILaustria.