

12;13

## Моделирование распыления материалов фокусированным ионным пучком

© Н.И. Боргардт, Р.Л. Волков, А.В. Румянцев, Ю.А. Чаплыгин

Национальный исследовательский университет „МИЭТ“, Москва,  
Зеленоград  
E-mail: lemi@miee.ru

Поступило в Редакцию 13 января 2015 г.

Описание эволюции поверхности образца под воздействием фокусированного ионного пучка выполнено методом функций уровня в рамках модели, которая учитывает эффекты пересадки атомов, первично распыленных падающими ионами. Для достижения количественного соответствия результатов моделирования экспериментальным данным на основе специально выполненных экспериментов уточнены как форма ионного пучка, так и модель распыления им вторично осажденного материала. На примере углублений прямоугольной формы показано, что разработанный подход позволяет с хорошей точностью моделировать рельеф поверхности, формирующийся под воздействием фокусированного ионного пучка.

Метод фокусированного ионного пучка (ФИП), основанный на сканировании по образцу остросфокусированного зонда, как правило, ионов галлия с энергией до 30 keV, позволяет локально и прецизионно удалять материал с его поверхности. Он находит все более широкое применение для создания и модификации микро- и наноструктур [1,2], для формирования и анализа как отдельных поперечных сечений, например, интегральных микросхем, так и серии сечений для трехмерной визуализации неоднородных материалов (ФИП-томография) [3,4], приготовления образцов для просвечивающей электронной микроскопии [5,6].

Быстрое развитие метода фокусированного ионного пучка и его распространение для использования во многих приложениях инициирует исследования, направленные на детальное описание процессов взаимодействия падающих ионов с материалом образца и разработку подходов для количественного моделирования формируемых с применением ФИП микро- и наноструктур. В частности, в расчетах с приме-

нием самых простых моделей предполагалось, что глубина углублений, получаемых при воздействии ионным пучком, линейно зависит от дозы ионов [7]. Более реалистичное двумерное моделирование структур с круговой симметрией с учетом угловой зависимости коэффициента распыления и эффектов вторичного осаждения распыленных атомов было представлено в [8]. Трехмерное моделирование распыления материала с использованием метода неструктурированных сеток обеспечило качественное соответствие экспериментальным данным, хотя применение этого метода связано с целым рядом технических трудностей [9]. Возможности современного и высокоэффективного метода функций уровня (level set method) [10] для описания эволюции поверхности образца под воздействием ионного пучка были впервые продемонстрированы в [11].

Данная работа посвящена дальнейшему развитию подходов для трехмерного моделирования распыления фокусированным ионным пучком материала образца на основе использования метода функций уровня. После определения реальной формы пучка и уточнения модели распыления вторично осажденных атомов этот метод был применен для моделирования получаемых с помощью ФИП-углублений, форма которых сравнивалась с полученными экспериментальными данными.

Для описания рельефа поверхности, формирующегося под воздействием фокусированного ионного пучка, введем функцию  $S(x, y, t)$ . Ее значения в каждой точке  $(x, y)$  являются координатой  $z$  текущего удаления поверхности образца от плоскости  $xOy$ , соответствующей ее положению в момент времени  $t = 0$ . В рамках метода функций уровня для неявного задания  $S(x, y, t)$  вводится функция  $\Phi(x, y, z, t)$ . Вычисляя ее нулевой уровень  $\Phi(x, y, z, t) = 0$ , можно получить искомую поверхность  $z = S(x, y, t)$  в каждый момент времени. Согласно [11] функция  $\Phi(x, y, z, t)$  находится как решение дифференциального уравнения

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + V_N(\mathbf{r}, t) |\nabla \Phi(\mathbf{r}, t)| = 0, \quad (1)$$

где  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ , а  $V_N(\mathbf{r}, t)$  — скорость, с которой элементарные участки поверхности образца смещаются под воздействием ионного пучка в нормальном к ним направлении. Она зависит от потоков распыляемых ионным пучком атомов ( $F_{sp}$ ) и переосаждаемых на поверхность образца первично распыленных атомов ( $F_r$ ). После численного интегрирования уравнения (1) функция  $S(x, y, t)$  может быть вычислена на основе  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  методом шагающих кубов [12].

Следуя [9], плотность потока распыляемых атомов  $F_{sp}(\mathbf{r}, t)$  можно представить в виде

$$F_{sp}(\mathbf{r}, t) = F_{ion}(\mathbf{r})Y(\theta) \cos \theta, \quad (2)$$

где  $F_{ion}(\mathbf{r}, t)$  — плотность потока ионов галлия,  $Y(\theta)$  — коэффициент распыления материала.

Несмотря на то что при воздействии ионного пучка на образец основная часть распыленных атомов удаляется из рабочей камеры вакуумной системой, некоторая их доля переосаждается на его поверхность. При равномерном угловом распределении распыленных атомов плотность их потока  $F_r(\mathbf{r}, t)$  определяется выражением [9,13]

$$F_r(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\pi} \int \frac{F_{sp}(\mathbf{r}_1, t) \cos \alpha \cos \beta}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)^2} dS_1, \quad (3)$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_1$  — вектор, направленный из элемента поверхности  $dS_1$  в точку  $\mathbf{r}$  и образующий угол  $\beta$  с нормалью к нему;  $\alpha$  — угол падения распыленных ионов на элемент поверхности образца, расположенный в точке  $\mathbf{r}$ . Интегрирование в (2) проводится по всей области взаимодействия падающего пучка с образцом.

Скорость смещения  $V_N(\mathbf{r}, t)$  элементарного участка поверхности  $dS$  при воздействии ионным пучком может быть записана в виде

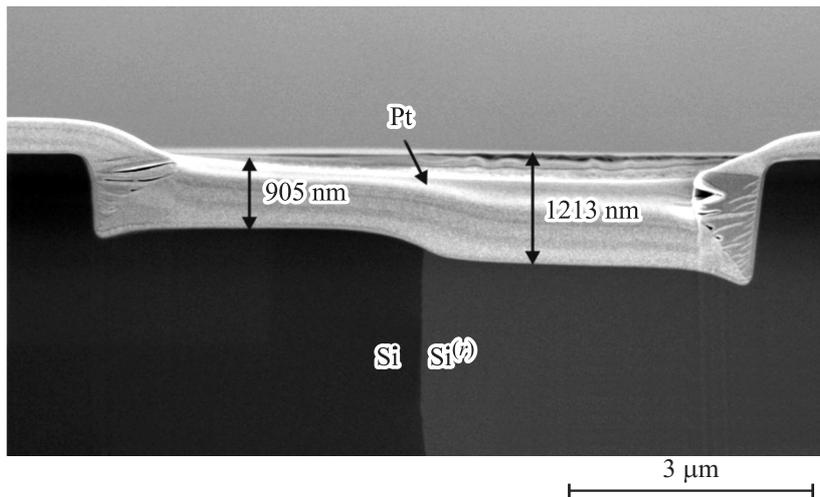
$$V_n(\mathbf{r}, t) = \frac{F_{sp}(\mathbf{r}, t) - \gamma F_r(\mathbf{r}, t)}{n}, \quad (4)$$

где  $n$  — плотность атомов образца, а  $\gamma$  — коэффициент „прилипания“, определяющий долю осевших на поверхность  $dS$  атомов от общего числа достигших ее распыленных атомов, значение которого, следуя [9], было принято равным единице.

Точность моделирования рельефа поверхности, формируемого при воздействии ФИП, зависит от реалистичности представления его формы и адекватности описания процессов, протекающих при распылении и вторичном осаждении атомов образца. По сравнению с известными расчетами [7,9,11] в данной работе падающий пучок представлялся в виде суперпозиции двух функций Гаусса со среднеквадратичными отклонениями  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ :

$$F_{ion}(\mathbf{r}) = \frac{I}{e} \frac{1}{2\pi(\sigma_1^2 + w\sigma_2^2)} \left( e^{-\frac{x^2+y^2}{\sigma_1^2}} + we^{-\frac{x^2+y^2}{\sigma_2^2}} \right), \quad (5)$$

где  $I$  — сила тока ионного пучка,  $e$  — элементарный заряд.



**Рис. 1.** Изображение в растровом электронном микроскопе поперечного сечения углубления, полученного после распыления фокусированным ионным пучком материала в области, содержащей границу между кремниевой подложкой Si и специально сформированным слоем вторично осажденного кремния  $Si^{(r)}$ .

Используя [14], параметры  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  и  $w$  были определены на основе непосредственно анализа формы углублений, формируемых ионным пучком на поверхности образца при его кратковременных воздействиях такой длительности, при которых можно пренебречь эффектами переосаждения. Однако, в отличие от [14], для анализа профиля распыления использовалась не сканирующая зондовая микроскопия, а просвечивающая электронная микроскопия. Форма углублений визуализировалась с помощью стандартно приготовленных с применением фокусированного ионного пучка образцов поперечного сечения [5,15]. На основе цифровой обработки полученной серии изображений углублений различной глубины параметр  $\sigma_1$  определялся по их центральным, а  $\sigma_2$  — по периферийным областям.

Существенным фактором, влияющим на точность моделирования в рамках описанной модели, являются различия в скорости распыления ионным пучком собственного материала подложки и вторично оса-

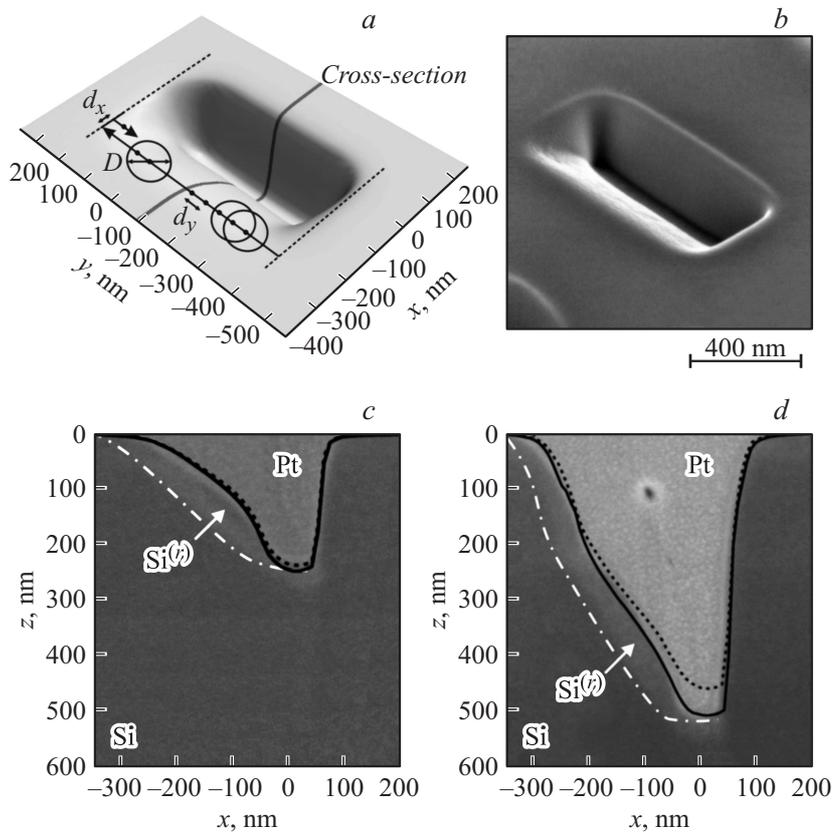
жденного слоя. Это обусловлено тем, что структура и отчасти состав образующих их материалов отличаются друг от друга. Для случая кремниевой подложки эти различия составляют 30%, что было установлено на основе выполненного эксперимента, который иллюстрируется на рис. 1. Сначала на поверхности подложки с помощью ФИП специально формировался слой вторично осажденного материала. Затем граница раздела между этим слоем и подложкой ориентировалась вдоль ионного пучка и проводилось распыление полученной структуры. Как видно из рис. 1, скорость распыления слоя, образованного вторично осажденными атомами  $V_r$ , и кремниевой подложки  $V_0$  при одинаковом воздействии на них ионного пучка отличается примерно в  $\mu = V_r/V_0 = 1.3$  раза.

В реальном процессе взаимодействия ионного пучка с образцом распыление и вторичное осаждение атомов происходят параллельно друг другу, что затрудняет непосредственно принимать во внимание различие в скоростях  $V_r$  и  $V_0$  при численном интегрировании уравнения (1). Поэтому было использовано приближение, в рамках которого в начале каждого временного шага вычислялась толщина переосажденного на этом шаге слоя, который затем распылялся на этом же шаге падающим пучком. Эффективная скорость распыления атомов переосажденного слоя и подложки  $V_N(\mathbf{r}, t)$  вычислялась на каждом временном шаге по формуле

$$V_N = V_0 \left( 1 + \frac{H_r}{H} \frac{\mu}{1 + \mu} \right), \quad (6)$$

где  $H_r$  — локальная толщина переосажденного слоя,  $H_0$  — толщина слоя подложки, который был бы удален, если бы не было переосажденного слоя. Если толщина переосажденного слоя такова, что материал подложки на данном временном шаге не распыляется, то выражение (6) упрощается и  $V_N = V_0(1 + \mu)$ .

Описанный метод моделирования был реализован в виде комплекса программ, написанных на языке СИ++, и использован для определения формы углублений при различных воздействиях ионного пучка на поверхность кремниевой подложки. Значения коэффициента распыления  $Y(\theta)$  брались из [16]. Результаты численных расчетов сравнивались с экспериментальными данными, полученными на электронно-ионном микроскопе Helios Nanolab 650. После формирования углублений ионным пучком для получения контрастных изображений поперечных



**Рис. 2.** Расчетное (a) и экспериментально полученное (b) изображения углубления в кремниевой подложке после сканирования фокусированным ионным пучком по поверхности образца и изображения поперечных сечений углублений с наложенными на них расчетными профилями (сплошные кривые) при сканировании ионного пучка с числом проходов  $N = 1$  (c),  $N = 3$  (d). a — иллюстрируются схема и параметры сканирования ионного пучка по серпантину, c, d — белая штрихпунктирная линия отделяет слой вторично осажденного материала  $\text{Si}^{(r)}$  от материала подложки, пунктирной линией показаны результаты моделирования при обычно используемом приближении  $V_r = V_0$ .

сечений на поверхность подложки осаждался слой платины с помощью встроенной в микроскоп газовой инжекционной системы.

На рис. 2 показаны расчетное и экспериментальное изображения углубления прямоугольной формы. При его формировании осуществлялось сканирование ионным пучком с энергией 30 keV по поверхности образца в режиме „серпантин“, как схематично показано на рис. 2, *a*. Пучок перемещался по шагам из нижнего левого угла вдоль оси  $y$  до верхнего угла, сдвигался на величину шага вдоль оси  $x$ , вновь перемещался вдоль  $y$  и т.д. Аппаратно задаваемый диаметр и ток пучка составляли  $D = 38$  nm,  $I = 230$  pA соответственно, которым соответствует экспериментально определенный поток ионов (5) с параметрами  $\sigma_1 = 27$  nm,  $\sigma_2 = 50$  nm,  $w = 0.11$ . Время остановки пучка после каждого перемещения  $t_d = 0.35$  ms, шаг по осям составлял  $d_x = d_y = 0.6D$ , общий размер области сканирования  $240 \times 800$  nm, ток пучка 230 pA, число проходов ионного пучка по серпантину  $N = 1$  для рис. 2, *a-c* и  $N = 3$  для рис. 2, *d*.

Из рис. 2, *a, b* видно, что формы полученного экспериментально и расчетного изображений качественно похожи другу на друга. Сопоставление профилей углублений на их поперечных сечениях, представленных на рис. 2, *c, d*, свидетельствует о том, что выполненное моделирование позволяет с хорошей точностью вычислять форму углублений, получаемых с помощью ионного пучка. Из сравнения профилей, показанных на рис. 2, *c, d* сплошной и пунктирной линиями, следует, что при  $N = 3$  точность моделирования существенным образом повышается, если при моделировании учитываются различия в скорости распыления ионным пучком вторично осажденного слоя и материала подложки.

В заключение отметим, что применение метода функций уровня позволяет эффективно моделировать распыление материала образца фокусированным ионным пучком в трехмерном случае при использовании модели, учитывающей эффекты переосаждения первично распыленных атомов. Достигнутое количественное соответствие результатов вычислений экспериментальным данным, продемонстрированное на примере прямоугольных углублений, обусловлено, во-первых, реалистичным представлением формы фокусированного ионного пучка в виде двух гауссовых функций, во-вторых, адекватным описанием процесса распыления вторично осажденного материала падающими ионами галлия.

**Список литературы**

- [1] *Bassim N., Scott K., Giannuzzi L.A.* // MRS Bulletin. 2014. V. 39. P. 317–325.
- [2] *Rommel M. et al.* // Microelectron. Eng. 2010. V. 87. P. 1566–1568.
- [3] *Cantoni M., Holzer L.* // MRS Bulletin. 2014. V. 39. P. 354–360.
- [4] *Волков Р.Л., Боргардт Н.И., Кукин В.Н.* и др. // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 18. С. 53–60.
- [5] *Giannuzzi L. A., Stevie F.A.A.* // Micron. 1999. V. 30. P. 197–204.
- [6] *Волков Р.Л., Боргардт Н.И., Кукин В.Н.* и др. // Поверхность. 2011. Т. 9. С. 94–99.
- [7] *Stoyanov S., Bailey C., Tang Y.K.* et al. // JPCS. 2010. V. 253. P. 012008.
- [8] *Kim H.-B., Hobler G., Lugstein A.* et al. // J. Micromech. Microeng. 2007. V. 17. P. 1178–1183.
- [9] *Kim H.-B., Hobler G., Steiger A.* et al. // Nanotechnology. 2007. V. 18. P. 245303.
- [10] *Osher S., Fedkiw R. P.* // J. Comput. Phys. 2001. V. 169. P. 463–502.
- [11] *Ertl O., Filipovic L., Selberherr S.* // Int. Conf. Sim. Semicond. Pressure. 2010. P. 49–52.
- [12] *Lorensen W. E., Cline H.E.* // ACM Siggraph Computer Graphics. 1987. V. 21. P. 163–169.
- [13] *Lindsey S., Hobler G.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2012. V. 282. P. 12–16.
- [14] *Lugstein A., Basnar B., Hobler G.* et al. // J. Appl. Phys. 2002. V. 92. P. 4037–4042.
- [15] *Tan S., Livengood R., Greenzweig Yu.* et al. // J. Vac. Sci. Technol. B. 2012. V. 30. P. 274–278.
- [16] *Frey L., Lehrer C., Ryssel H.* // Appl. Phys. A. 2003. V. 76. P. 1017–1023.