

12;13

Моделирование распыления многослойных подложек фокусированным ионным пучком

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

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

Поступило в Редакцию 21 февраля 2023 г.

В окончательной редакции 25 марта 2023 г.

Принято к публикации 27 марта 2023 г.

Метод функций уровня обобщен для моделирования эволюции поверхности многослойных подложек при воздействии фокусированного ионного пучка. Для корректного описания такого воздействия при проведении расчетов принимались во внимание угловые зависимости коэффициентов распыления, плотности облучаемых материалов и учитывалось, что вылет распыленных атомов может происходить из разных слоев подложки. Сравнением результатов расчетов с экспериментальными данными для тестовых углублений, изготовленных в двухслойной подложке диоксид кремния–кристаллический кремний, показано, что развитый метод моделирования позволяет с хорошей точностью предсказывать форму структур, создаваемых фокусированным ионным пучком.

Ключевые слова: фокусированный ионный пучок, распыление, метод функций уровня.

DOI: 10.21883/PJTF.2023.10.55433.19533

Метод фокусированного ионного пучка (ФИП) получил широкое распространение во многих современных научно-технических областях, включая микроэлектронику, благодаря возможности прямого прецизионного изготовления и анализа микро- и наноструктур на подложках из практически любых материалов, в том числе состоящих из нескольких слоев. Распыление (травление) многослойных структур методом ФИП необходимо для решения ряда задач. Так, слои металлов и диэлектриков могут использоваться в качестве твердых масок, обеспечивающих высокое разрешение и производительность процесса формирования наноструктур с помощью ФИП [1]. Практически значимым примером воздействия ФИП на многослойные структуры является, в частности, модификация интегральных микросхем [2] и волноводов полупроводниковых лазеров [3].

Компьютерное моделирование, обеспечивающее количественное описание эволюции поверхности образца под воздействием ионного пучка, существенным образом упрощает процесс изготовления структур с помощью ФИП, поскольку позволяет минимизировать применение ресурсозатратного метода „проб и ошибок“. В существующих подходах моделирования формы структур, в том числе с применением метода функций уровня, рассматривалось воздействие ФИП на подложку кремния [4,5] или оксида кремния [6]. Результаты для многослойных структур ограничиваются аналитической оценкой глубины распыления двухслойной мишени [7] и моделированием проникновения ионов методом Монте-Карло в сочетании с расчетом эволюции поверхности образца методом ячеек [8].

Настоящая работа посвящена дальнейшему развитию метода функций уровня для описания эволюции поверхности многослойных подложек под воздействием

ФИП. Результаты моделирования тестовых углублений двух типов, сформированных в слое диоксида кремния на поверхности кристаллического кремния, сопоставлены с электронно-микроскопическими изображениями поперечных сечений экспериментально изготовленных структур.

При распылении подложки методом ФИП величина удаления z поверхности образца в точке (x, y) от плоскости xOy в момент времени t может быть представлена в виде $z = S(x, y, t)$ (рис. 1). В рамках метода функций уровня поверхность $S(x, y, t)$ определяется как

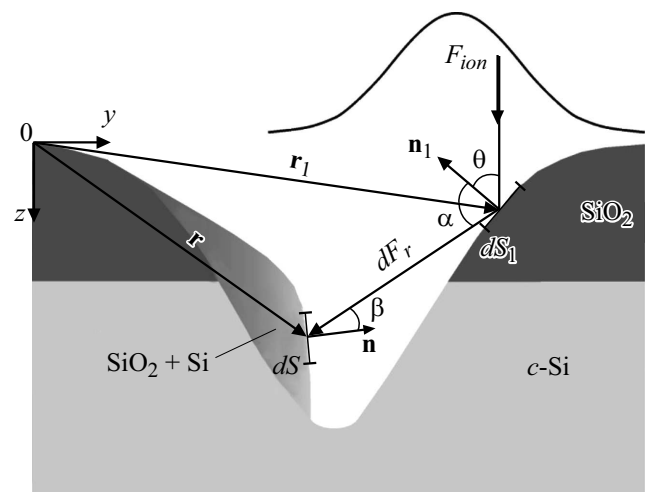


Рис. 1. Схематическое изображение процесса распыления подложки, состоящей из слоя диоксида кремния на поверхности монокристаллического кремния (c -Si). \mathbf{n} и \mathbf{n}_1 — единичные векторы, перпендикулярные участкам поверхности dS и dS_1 соответственно.

нулевой уровень функции $\Phi(x, y, z, t)$, удовлетворяющей дифференциальному уравнению [9]:

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

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, которая определяется плотностями потоков распыляемых ионным пучком атомов $F_{sp}(\mathbf{r}, t)$ и переосаждаемых на поверхность образца первично распыленных атомов $F_r(\mathbf{r}, t)$.

Обобщая известное выражение для $F_{sp}(\mathbf{r}, t)$ [4] на случай многослойных подложек и ограничиваясь для простоты рассмотрением двухслойных структур, для плотности потока атомов, распыленных с элемента поверхности dS_1 с центром в точке \mathbf{r}_1 , имеем соотношение

$$F_{sp}(\mathbf{r}_1, t) = \sum_{i=1,2} F_{sp,i}(\mathbf{r}_1, t), \quad (2)$$

в котором $F_{sp,i}(\mathbf{r}_1, t)$ — плотность потока распыляемых атомов i -го материала, равная

$$F_{sp,i}(\mathbf{r}_1, t) = F_{ion}(\mathbf{r}_1) \cos \theta C_i(\mathbf{r}_1, t) Y_i(\theta) (1 + \mu_i), \quad (3)$$

где $F_{ion}(\mathbf{r}_1)$ — плотность потока ионов галлия, $\mu_i = [Y_{r,i}(\theta)/Y_i(\theta) - 1]$ — параметр, характеризующий различие в скоростях распыления i -го материала в переосажденном и исходном состояниях, значение которого определяется коэффициентами распыления $Y_{r,i}(\theta)$ и $Y_i(\theta)$ соответственно, $C_i(\mathbf{r}_1, t)$ — доля i -го материала в распыляемом объеме dV_1 в окрестности точки \mathbf{r}_1 , а угол θ определяется в соответствии с рис. 1.

Плотность потока атомов, которые переосаждаются на элемент поверхности dS , расположенный в точке \mathbf{r} (рис. 1), может быть записана в виде

$$F_r(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1,2} F_{r,i}(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

где $F_{r,i}(\mathbf{r}, t)$ — плотность потока переосажденных атомов i -го материала, которая при их угловом распределении по закону косинуса находится обобщением выражения из работы [4]

$$F_{r,i}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\pi} \int \frac{F_{sp,i}(\mathbf{r}_1, t) \cos \alpha \cos \beta}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)^2} dS_1 \quad (5)$$

с углами α и β , определенными в соответствии с рис. 1, и интегрированием по всей области взаимодействия пучка с образцом.

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

$$V_N(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1,2} \frac{F_{sp,i}(\mathbf{r}, t) - \gamma F_{r,i}(\mathbf{r}, t)}{n_i}, \quad (6)$$

где γ — коэффициент „прилипания“, который определяет долю атомов, осевших на участок поверхности dS , от общего числа достигших ее распыленных атомов, значение которого в соответствии с [4] было принято равным единице, n_i — плотность атомов i -го материала.

Для плотности потока ионов пучка $F_{ion}(x, y)$ использовалось хорошо апробированное ее представление в виде суммы двух гауссовых функций

$$F_{ion}(x, y) = \frac{I}{e} \frac{1}{2\pi(\sigma_1^2 + w\sigma_2^2)} \left[\exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma_1^2}\right) + w \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma_2^2}\right) \right] \quad (7)$$

с параметрами $\sigma_1 = 53$ nm, $\sigma_2 = 136$ nm, $w = 0.08$, определенными с использованием описанного в [10] подхода.

Численное решение уравнения (1) для определения $\Phi(\mathbf{r}, t)$ выполнялось на основной регулярной прямоугольной расчетной сетке. Функция $S(x, y, t)$ находилась на основе $\Phi(\mathbf{r}, t)$ на каждом временном шаге методом шагающих кубов с использованием нерегулярной сетки треугольных элементов [11]. Потоки ионов и скорости $V_N(\mathbf{r}, t)$ вычислялись на поверхности $S(x, y, t)$ и для решения (1) переносились с использованием интерполяции методом ближайшего соседа на основную расчетную сетку, на которой также осуществлялась дискретизация функций $C_i(\mathbf{r}, t)$.

Функции $C_i(\mathbf{r}, t)$ при $t = 0$ определялись двухслойной структурой облучаемой ионным пучком подложки. Если в окрестности точки \mathbf{r} для элементарного участка ΔS распыляемой поверхности выполнялось условие $F_r > F_{sp}$, то полное число переосажденных атомов в соответствующей \mathbf{r} ячейке объемом ΔV изменялось на $\Delta N = (F_r - F_{sp})\Delta S\Delta t$, а число атомов i -го материала — на $\Delta N_i = (F_{r,i} - F_{sp,i})\Delta S\Delta t$. Для упрощения вычислений потоки $F_{sp,i}$ определялись по формуле (3) без учета параметров μ_i , если доля переосажденного материала в ячейке была менее 50%, и с учетом их значений при превышении доли 50%.

Описанный метод моделирования был реализован на основе ранее разработанного комплекса программ [5]. Результаты численных расчетов сравнивались с данными экспериментальных исследований тестовых структур, которые формировались в электронно-ионном микроскопе Helios Nanolab 650 на подложках монокристаллического кремния, покрытых слоем термического диоксида кремния толщиной примерно 600 nm. Структуры изготавливались при ускоряющем напряжении 30 kV, токе пучка $I = 900$ pA и одинаковых в двух перпендикулярных направлениях шагах пучка $a = b = 38.5$ nm. Первым типом структур были прямоугольные углубления с размером $1 \times 1 \mu\text{m}$, полученные при числе проходов пучка $N = 48$ и времени остановки $t_d = 0.1$ ms. Структуры второго типа представляли собой узкие канавки с высоким аспектным отношением. Они формировались путем сканирования ионного пучка вдоль прямых линий длиной около $3 \mu\text{m}$ с числом проходов $N = 200$

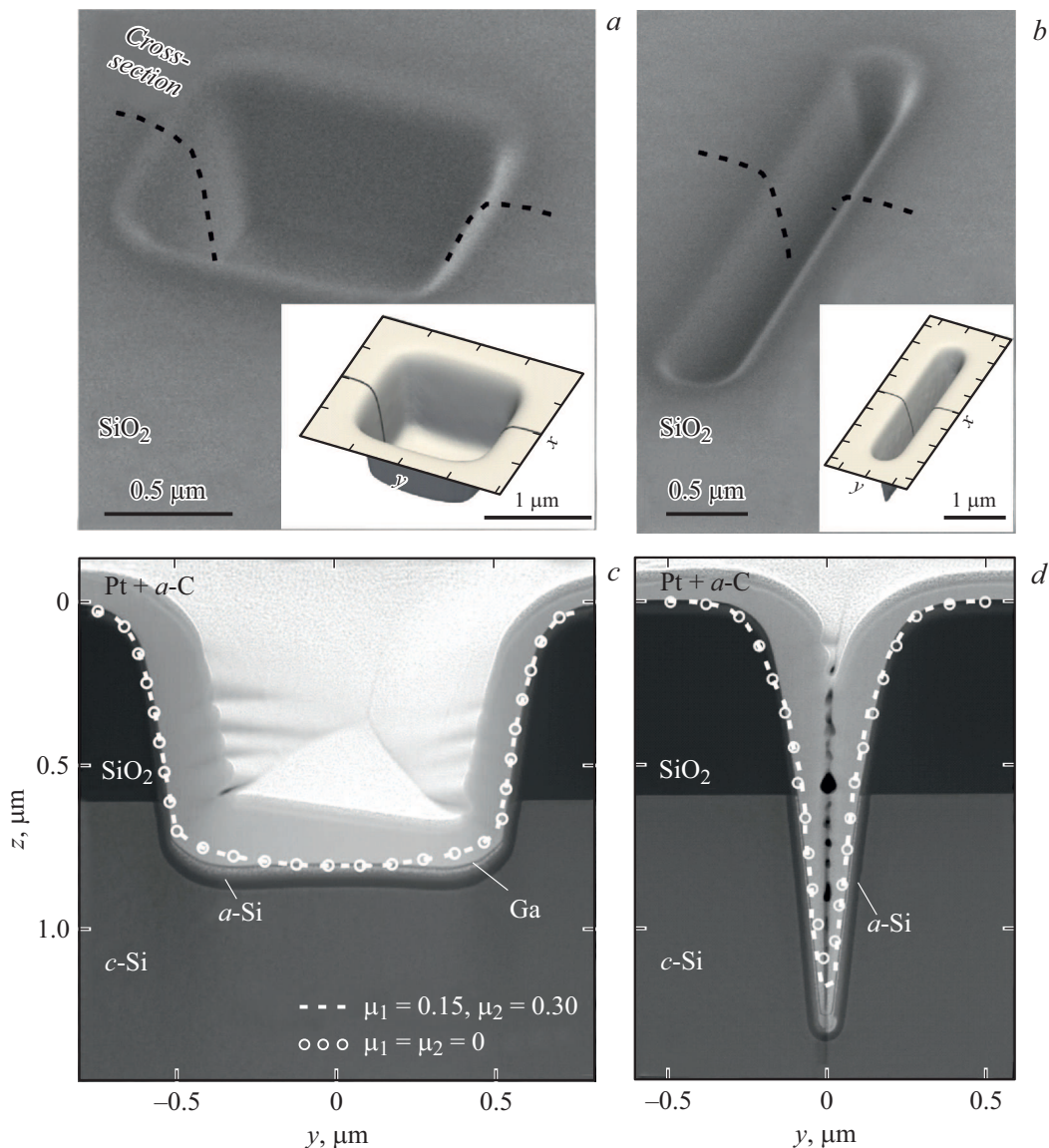


Рис. 2. Изображения изготовленных методом ФИП прямоугольных углублений (*a, c*) и узких канавок (*b, d*), полученные методами РЭМ (*a, b*) и ПРЭМ (*c, d*). На вставках (части *a, b*) приведены результаты моделирования сформированных углублений. На частях *c* и *d* на ПРЭМ-изображения углублений наложены расчетные профили, вычисленные как с учетом корректных значений параметров μ_1 и μ_2 для SiO_2 и Si соответственно (светлые штриховые линии), так и без такого учета (светлые кружки). Углубления покрыты защитными слоями платины и аморфного углерода Pt + a-C, в их приповерхностных областях визуализируются имплантированный галлий и аморфизованный кремний (a-Si).

и временем остановки $t_d = 0.2$ ms. Выбор конкретных значений N и t_d при создании структур обоих типов позволил проиллюстрировать предлагаемый метод моделирования для типичных экспериментальных приложений. Непосредственно после изготовления тестовых структур методом *in situ* lift out [12] приготавливались образцы поперечного сечения для исследования методами просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) на микроскопе Titan Themis 200. Моделирование структур проводилось в соответствии с экспериментальными условиями их получения. Для угловых зависимостей коэффициентов распыления, кор-

ректность описания которых определяет точность моделирования [13], использовались данные [6] для SiO_2 и [14] для Si, а значения параметров μ_i вычислялись исходя из отношений $Y_{r,1}/Y_1 \approx 1.15$ для SiO_2 [6] и $Y_{r,2}/Y_2 \approx 1.3$ для Si [5].

На рис. 2, *a, b* показаны изображения изготовленных углублений, полученные методом растровой электронной микроскопии (РЭМ), а на вставках приведены результаты их моделирования. Из рис. 2, *c, d* следует, что расчетные профили углублений, показанные светлыми штриховыми линиями, хорошо согласуются с ПРЭМ-изображениями их поперечных сечений. Незна-

чительные расхождения между экспериментальными и расчетными данными для прямоугольных углублений (рис. 2, *c*), по-видимому, связаны с отражением падающих ионов от их боковых стенок, которое не принималось во внимание при моделировании. V-образная форма сечения узкой канавки (рис. 2, *d*) обусловлена существенным влиянием процесса переосаждения материала при формировании структур с высоким аспектным отношением. Светлыми кружками на рис. 2, *c, d* показаны профили, полученные при моделировании углублений без учета увеличения скорости распыления переосажденного материала. Такой учет является несущественным для прямоугольного углубления (рис. 2, *c*) из-за малого количества переосажденного материала, однако для глубоких канавок (рис. 2, *d*) он позволяет улучшить согласие расчетных и экспериментальных данных.

Таким образом, представленное обобщение метода функций уровня на случай многослойных структур обеспечило эффективное моделирование распыления фокусированным ионным пучком кремниевой подложки, покрытой слоем диоксида кремния. Учет угловых зависимостей коэффициентов распыления каждого из материалов подложки, различий в их плотностях, а также реалистичное описание процесса переосаждения позволили достигнуть количественного соответствия результатов расчетов экспериментальным данным. Отметим, что развитый метод может быть непосредственно использован для моделирования распыления подложек с более чем двумя слоями при наличии данных, характеризующих взаимодействие ионного пучка с материалом этих слоев.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 21-79-00197).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.C. Madison, J.S. Villarrubia, K.T. Liao, C.R. Copeland, J. Schumacher, K. Siebein, B.R. Ilic, J.A. Liddle, S.M. Stavis, *Adv. Funct. Mater.*, **32** (38), 2111840 (2022). DOI: 10.1002/adfm.202111840
- [2] S. Herschbein, S. Tan, R. Livengood, M. Wong, in *Proc. of the ISTFA-2022* (Pasadena, California, USA, 2022), p. i1-i69. DOI: 10.31399/asm.cp.istfa2022tpi1
- [3] А.С. Паюсов, М.И. Митрофанов, Г.О. Корнышов, А.А. Серин, Г.В. Вознюк, М.М. Кулагина, В.П. Евтихийев, Н.Ю. Гордеев, М.В. Максимов, S. Breuer, *Письма в ЖТФ*, **47** (24), 51 (2021). DOI: 10.21883/PJTF.2021.24.51801.18980 [A.S. Payusov, M.I. Mitrofanov, G.O. Kornyshev, A.A. Serin, G.V. Voznyuk, M.M. Kulagina, V.P. Evtikhiev, N.Yu. Gordeev, M.V. Maximov, S. Breuer, *Tech. Phys. Lett.*, **48** (15), 87 (2022). DOI: 10.21883/TPL.2022.15.54275.18980].
- [4] H.B. Kim, G. Hobler, A. Steiger, A. Lugstein, E. Bertagnolli, *Nanotechnology*, **18** (26), 265307 (2007). DOI: 10.1088/0957-4484/18/26/265307
- [5] Н.И. Боргардт, Р.Л. Волков, А.В. Румянцев, Ю.А. Чаплыгин, *Письма в ЖТФ*, **41** (12), 97 (2015). [N.I. Borgardt, R.L. Volkov, A.V. Romyantsev, Yu.A. Chaplygin, *Tech. Phys. Lett.*, **41** (6), 610 (2015). DOI: 10.1134/S106378501506019X].
- [6] A.V. Romyantsev, N.I. Borgardt, R.L. Volkov, Yu.A. Chaplygin, *Vacuum*, **202**, 111128 (2022). DOI: 10.1016/j.vacuum.2022.111128
- [7] A.A. Tseng, I.A. Insua, J.S. Park, C.D. Chen, *J. Micromech. Microeng.*, **15** (1), 20 (2004). DOI: 10.1088/0960-1317/15/1/004
- [8] W. Boxleitner, G. Hobler, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **180** (1-4), 125 (2001). DOI: 10.1016/S0168-583X(01)00406-2
- [9] F. Gibou, R. Fedkiw, S. Osher, *J. Comput. Phys.*, **353**, 82 (2018). DOI: 10.1016/j.jcp.2017.10.006
- [10] N.I. Borgardt, A.V. Romyantsev, *J. Vac. Sci. Technol. B*, **34** (6), 061803 (2016). DOI: 10.1116/1.4967249
- [11] P. Manstetten, J. Weinbub, A. Hössinger, S. Selberherr, *Proc. Comput. Sci.*, **108**, 245 (2017). DOI: 10.1016/j.procs.2017.05.067
- [12] L.A. Giannuzzi, F.A. Stevie, *Micron*, **30** (3), 197 (1999). DOI: 10.1016/S0968-4328(99)00005-0
- [13] В.И. Бачурин, И.В. Журавлев, Д.Э. Пухов, А.С. Рудый, С.Г. Симакин, М.А. Смирнова, А.Б. Чурилов, *Поверхность*, № 8, 34 (2020). DOI: 10.31857/S102809602008004X [V.I. Bachurin, I.V. Zhuravlev, D.E. Pukhov, A.S. Rudy, S.G. Simakin, M.A. Smirnova, A.B. Churilov, *J. Surf. Investig.*, **14** (4), 784 (2020). DOI: 10.1134/S1027451020040229].
- [14] L. Frey, C. Lehrer, H. Ryssel, *Appl. Phys. A*, **76** (7), 1017 (2003). DOI: 10.1007/s00339-002-1943-1