

He(Ar)低能 FIB研磨 Si薄膜的纳米孔洞溅射产额的计算*

高云¹, 杨黎东², 杨海¹

(1. 云南师范大学 物理与电子信息学院, 云南 昆明 650092 2. 保山师范学院 计算机科学系, 云南 保山 678000)

摘要: 利用蒙特卡罗方法计算氦离子和氩离子在各种参数下(离子能量、入射角度)入射硅材料表面的溅射产额. 计算了硅材料表面的溅射产额对离子数目、离子能量、入射角度与 He离子和 Ar离子的数量依赖关系, 并对模拟结果进行分析. 当入射离子数量为 2 000个, 入射能量为 3 keV, 入射角度为 84°时, He离子产生的溅射产额最大值是 1.30 Atm s/ion, 当入射角度为 78°时, Ar离子产生的溅射产额最大值是 8.91 Atm s/ion.

关键词: 聚焦离子束; 溅射产额; 氦离子; 氩离子

中图分类号: TB 383 **文献标识码:** A **文章编号:** 0258-7971(2010)02-0168

当前, 应用聚焦离子束在半导体材料上形成纳米孔洞是非常有前景的^[1]. 聚焦离子束加工是由聚焦状态的离子探针对工件表面进行点状轰击来达到加工目的的, 轰击点的直径从几纳米到几微米. 主要应用于离子束的刻蚀、沉积、注入、曝光等方面^[2]. 离子束不仅具有高能离子的特性, 而且还具有元素特性.

离子束刻蚀在集成电路制造领域应用十分广泛^[3]. 离子束刻蚀可大致分为离子溅射刻蚀、等离子刻蚀和反应离子刻蚀. 离子溅射刻蚀通常采用惰性元素的离子, 以免入射离子和工件表面材料发生化学反应. 离子束溅射刻蚀可以分为扫描离子束刻蚀和掩模离子束刻蚀^[4]. 掩模离子束刻蚀的掩模层通常刻蚀工件上的感光胶图形层. 反应离子刻蚀是将一束反应气体的离子束引向工件表面, 反应后形成易挥发的产物, 通过反应气体离子束溅射作用达到刻蚀目的.

离子加工技术是使用载能离子轰击工件的表面^[5], 从而实现材料的剥离、沉积、注入和改性的工艺. 入射离子束通常具有较高的能量, 一般的离子在入射过程中通常会和靶材料发生化学反应, 在粒子溅射刻蚀中如果入射离子和靶材料发生了化学反应, 将不利于靶离子的溅射. 所以采用了稀

有气体, 它不容易和靶材料发生化学反应, 另外稀有气体容易获得, 并且在入射过程中需要的能量不高.

1 原理

入射离子与固体材料中的原子发生弹性碰撞^[6], 将一部分能量 E_t 传递给固体晶格上的原子, 如果能量 E_t 足够大, 超过了使晶格原子离开晶格位置的能量阈值 E_d , 则被撞原子就移离晶格位置, 成为离位原子. 初级碰撞出的离位原子往往具有远大于移位阈值 E_d 的能量, 于是它将继续与晶格原子碰撞, 再产生新的离位原子, 这种不断碰撞的现象称为“级联碰撞”. 在级联碰撞过程中, 运动方向朝着固体表面的一部分具有较高能量的离位原子将有可能穿过晶格空隙, 从材料表面逸出, 成为溅射原子. 溅射原子产额(即每个离子能弹射出固体材料的原子数)取决于入射离子的种类、能量、入射角以及固体材料的成分和结构. 在一般情况下, 产额大约在 2~30 原子数/离子. 溅射原子产额与入射离子的入射角有关^[7]. 一般来说, 当离子束由垂直入射到倾斜入射时, 溅射原子产额会增加. 造成这种变化的原因有 2种: 首先, 溅射原子时固体浅表层原子被碰撞后, 弹射出固体表面的, 倾斜入

* 收稿日期: 2009-03-05

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10864009); 云南省科技厅应用基础研究基金资助项目(2008CD109).

作者简介: 高云(1964-), 男, 云南人, 副编审, 主要从事物理学及计算机模拟科学方面研究.

通讯作者: 杨海(1964-), 男, 教授, 云南人, 主要从事凝聚态物理学方面的研究.

射的离子比垂直入射的离子在相同厚度的浅表层内射程更长,因此能碰撞出更多的原子. 其次固体材料晶格的不同方向具有不同的原子位移能量阈值也是原因之一.

离子溅射现象是非常复杂的物理化学过程^[8], 溅射过程的重要参数有溅射产额、溅射离子角度分布和溅射离子能谱分布等. 实际应用中最重要的是溅射产额(表示一个入射离子从靶材料表面平均移走的原子数). 影响溅射产额的因素有: 入射离子束能量、入射角、质量、核电荷数、逸出功、温度和晶体结构等^[6].

对于溅射现象, 有很多研究者推导出各种表达式来进行解释^[9-11]. Signund 提出的线性碰撞级联模型(linear collision cascade model)能较好地定量解释这一现象. 根据这一模型, 入射离子的能量是通过级联碰撞传递给靶材原子的, 即入射离子和靶材原子发生初级碰撞, 撞出反冲原子, 反冲原子会继续与靶材料中静态原子碰撞, 再产生反冲原子. Signund 给出了溅射产率与入射离子能量、入射角、离子元素的原子序数、靶材的原子序数和靶材相对原子质量的定量关系. 这一模型是建立在随机碰撞过程基础上的, 采用了玻尔兹曼(Boltzmann)等式和通用传输理论, 同时假设靶平面是光滑的无定形结构. 假设入射离子束能量为 E , 入射角为 θ , 根据 Signund 的理论可以推导出总的溅射产额 Y_s 为:

$$Y_s = \frac{4.2 \times 10^{14} \alpha S_n(E)}{E_s}, \quad (1)$$

式中 E_s 为靶材的表面束缚能; α 是无量纲量, 与 m_2/m_1 和离子入射角有关 (m_1, m_2 分别为入射离子和靶材的相对原子质量), 当垂直入射 ($\theta = 0^\circ$) 时,

$$\alpha = 0.15 + 0.13m_2/m_1. \quad (2)$$

$S_n(E)$ 是核阻止截面

$$S_n(E) = 8.462 S_n(\varepsilon) \frac{m_1}{(m_1 + m_2)} \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (3)$$

式中, Z_1, Z_2 为入射离子和靶材原子的原子序数; $S_n(\varepsilon)$ 为

$$S_n(\varepsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + \varepsilon)}{\varepsilon + 0.14 \varepsilon^{0.42}}, \quad (4)$$

式中 ε 是代表损失能量的无量纲量.

$$\varepsilon = \frac{32.53m_2E}{(m_1 + m_2)Z_1Z_2(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (5)$$

2 模拟结果和讨论

TRM 软件包是一个复杂的蒙特卡罗程序^[12], 它利用量子统计原理处理离子和原子之间的碰撞. TRM 软件包能模拟复杂多层化合物的靶材料. 它能提供离子的三维分布和离子能量损失的动量力学现象, 包括靶损失、电离、声子产量、溅射. 因此, 它可以用来预测许多不同离子轰击靶材料所产生的溅射产额.

溅射产额随入射离子数量的变化关系如图 1 所示. 采用固定离子入射能量 (3 keV) 和入射角度 ($\theta = 0^\circ$ 为入射离子束和固体材料表面法线之间的夹角定义为离子束入射角) 而改变入射离子数目, 来研究入射离子数量和溅射产额的关系.

溅射产额随离子能量的变化关系如图 2 所示. 当入射离子能量小于溅射阈值能量 E_y 时, 材料不发生溅射现象. 当入射离子能量超过 E_y 时, 开始发生溅射. 在入射离子数目为 2 000 个和入射角度 $\theta = 0^\circ$ 时, 随着入射离子能量的增加, 溅射产额也随着增加. 当入射离子能量约为 2.5 keV 时, 溅射产额随入射离子能量增加而增加的比率下降, 这时离子的注入效应增强. 从图 2 还可以看出溅射产额和离子种类的关系, 对于 He 离子, 能量在 1 keV 附近时溅射产额最大; 对于 Ar 离子, 溅射产额随着能量的增加而增加, 当能量大于 3.5 keV 时, 溅射产额随能量的增加出现了波动情况.

溅射产额与离子入射角度的关系如图 3 所示. 当入射离子数量为 2 000 个, 入射离子数能量为 3 keV 时, 离子入射角度增加, 入射离子的浅表层的途径变长, 从而能碰撞出更多的靶材原子. 当离子束入射角达到某一临界值时, 溅射产额达到最大值. 此后, 随着离子束入射角的增加, 溅射产额将降低, 一般最大的溅射产额发生在 $45^\circ \sim 85^\circ$ 之间. 当入射角度为 84° 时 He 离子的溅射产额最大是 1.30 A tm s/ion, 当入射角度为 78° 时, Ar 离子的溅射产额值最大是 8.91 A tm s/ion.

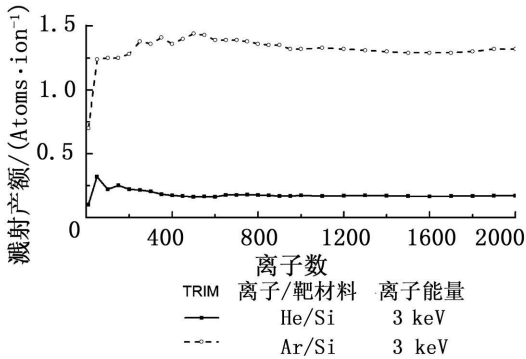


图 1 溅射产额随入射离子数量的变化关系

Fig 1 Relation sputtering yield with the number of ion

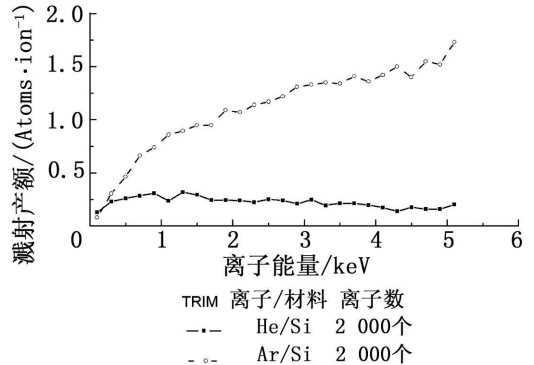


图 2 溅射产额随入射离子能量的变化关系

Fig 2 Relation sputtering yield with ion energy

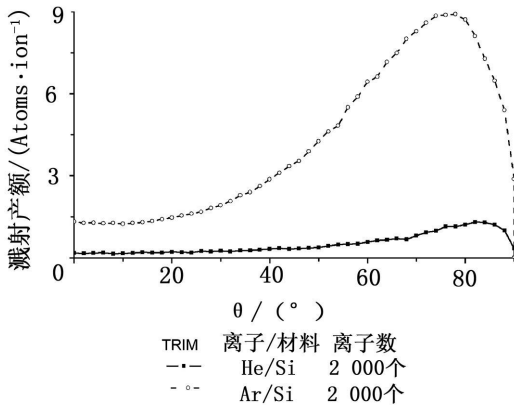


图 3 溅射产额随离子束入射角的变化关系

Fig 3 Relation sputtering yield with angle of incidences

3 结 论

用蒙特卡罗方法首次模拟计算了 He 和 Ar 的聚焦离子束入射 Si 材料表面产生的溅射产额。溅射主要是由薄膜表面的碰撞级联引起的, 当离子入射角从 0° 开始增加, 在级联碰撞中靶原子从表面逸出的几率增加, 从而增加了溅射量。溅射量达到最大后, 溅射量迅速减少, 直到离子的入射角度接近 90°。这时由于更多的离子被反弹, 并且越来越多的碰撞级联被终止在薄膜表面。He 离子的溅射产额随入射角度的增加变化幅度不大, 而 Ar 离子就有较明显的变化。离子相对质量越大溅射产额越大。用于材料溅射的 FIB 的能量一般在低能段, 过高的入射离子能量不但不能增强溅射产额, 反而会造成更多的材料表面损伤。离子数目在 0~750 范围内溅射产额变化较大, 当离子数目大于 750 时, 溅射产额基本趋于稳定, He 离子溅射 Si 材料表面的溅射产额在 0.17 Atoms/ion 左右, Ar 离子溅射 Si 材料表面的溅射产额在 1.32 Atoms/ion 左右。在

同一入射能量和入射角度下, 溅射产额随着入射离子相对质量的增大而增大。理论模拟结果对 FIB 实验中选择参数、控制孔洞大小和深度有指导作用。

参考文献:

- [1] 马向国, 刘同娟, 顾文琪. 新一代微细加工手段——聚焦离子束技术及组合系统 [J]. 电子工业专用设备, 2004(3): 53-55.
- [2] 赵玉清. 电子束离子束技术 [M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2003.
- [3] 刘立建, 谢进, 王家楫. 聚焦离子束 (FIB) 技术及其在微电子领域中的应用 [J]. 半导体技术, 2001, 2(26): 19-20.
- [4] Ivor Brodie Julius J Murray. The physics of microfabrication: Conventional and nonconventional method [J]. Electrophoresis, 2001, 22(4): 187-207.
- [5] PARAREN A, FILLOUX P G, WANG K. Patterning and characterization of 2D photonic crystals fabricated by focused ion beam etching of multilayer membranes [J]. Nanotechnology, 2003, 15(3): 341-346.
- [6] Martin-Moreo L, Garcia-Vidal F J, Lezec H J et al. Theory of extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays [J]. Phys Rev Lett, 2001, 86(6): 1114-1118.
- [7] TSENG A A. Recent developments in micromilling using focused ion beam technology [J]. J Micromech Microeng, 2004, 14(4): 15-34.
- [8] ZHOU Jack, YANG Guoliang. Nanohole fabrication using FIB, EB and AFM for biomedical applications [J]. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing, 2006, 7(4): 18-22.
- [9] WITMAACK K. Sputtering by particulate bombardment III [M] // BEHRISCH R, WITMAACK K. New York: Springer-Verlag, 1991, 161-246.

(下转第 176 页)

The numeric- simulated study on the local climate effect of reservoir in mountain area

LIU Hong-nian¹, ZHANG Ning¹, WU Jian², JIANG Weimei¹

(1. School of Atmospheric Sciences Nanjing University, Nanjing 210093, China; 2. Department of Atmospheric Sciences Yunnan University, Kunming 650091, China)

Abstract The reservoir has obviously effect on the local climate by modify the land use. In this paper, the local climate effects of reservoir in mountain area are studied by a high resolution boundary layer model. The results show that the reservoir may increase the surface temperature in winter nearby the reservoir with the amplitude range from 0.4 to 0.85 °C. The surface temperatures in spring, summer and autumn are decreased because of reservoir, the maximum value of decedent is about 2 °C. The effect range of reservoir on the nearby temperature is small, the horizon range which the temperature variation is less than 0.1 °C is about 2.5 km, and the vertical effect height is about 500 meter. The daily variation of temperature caused by reservoir in winter is different from other seasons. The increase of temperature in winter caused by reservoir in the daytime is greater than that in the night, but in other season, the reservoir make the surface temperature decrease in the daytime and increase in the night, the convert time is about 8 o'clock and 21 o'clock. The effect of reservoir on the relative humidity is in the range of 3 km, with the maximum values of the increase of relative humidity of 29.8%, 37.2%, 13.3% and 20.3% in winter, spring, summer and autumn respectively. The reservoir also make the nearby surface wind velocity increase, with amplitude below 0.5 m/s.

Key words reservoir climate effect; boundary layer model; numerical simulation

* * * * *

(上接第 170 页)

- [10] BERSACK J P, HAGGMARK L G. Nucl Instrum [J]. Methods Phys Res B, 1980, 174: 257-263
- [11] XIE Feng, WANG Xiaoping, SHI Qiwei, et al. Monte Carlo simulation of the effect of atomic diagonal transition on cluster diffusion [J]. Chin Phys, 2003, 12: 778-783
- [12] CATLANO M, TAURINO A, LOMASCOLO M, et al. Critical issues in the focused ion beam patterning of nanometric hole matrixes on GaAs based semiconductor devices [J]. Nanotechnology, 2006, 17(6): 1758-1762

Simulation of sputtering yield in nanopore sculpted by low energy noble gas ion (He and Ar) beam

GAO Yun¹, YANG Lirong², YANG Hai¹

(1. School of Physics and Electronic Information Yunnan Normal University, Kunming 650092, China; 2. Computer Department of Baoshang Normal College, Baoshang 678000, China)

Abstract The sputtering yield of the silicon thin film by He ions and Ar ions under various parameters (ion energy, angle of incidences) is calculated by Monte Carlo method. The dependences of the sputtering yield on incident ion energy, incident angle and the number of ion are predicted. The simulation results are analyzed. When the number of ion is 2000, ion energy is 3 keV, angle of incidence is 84°, the He ions will appear to the biggest sputtering yield that is 1.30 atoms/ion, when angle of incidence is 78°, the Ar ions will appear to the biggest sputtering yield that is 8.91 atoms/ion.

Key words focused ion beam; sputtering yield; He ions; Ar ions