



Наталья Лазаревна Нарская окончила МВТУ им. Н.Э. Баумана в 1974 г. Канд. техн. наук, доцент кафедры “Теоретическая механика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 20 научных работ в области расчетов на прочность, механики пневматических шин.

N.L. Narskaya graduated from the Bauman Higher Technical School in 1974. Ph. D. (Eng.), assoc. professor of the “Theoretical Mechanics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 20 publications in the field of strength calculations, pneumatic tire mechanics.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ

УДК 621.382

В. Н. Неволин, А. Г. Гнедовец,
В. Ю. Фоминский, В. Е. Кошманов,
В. Шарфф (W. Scharff)
(Московский инженерно-физический институт
(Государственный университет))

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННО-ИМПЛАНТАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ

Методом “частиц в ячейках” (PIC) проведено моделирование разлета импульсной лазерной плазмы в интенсивном внешнем электрическом поле, используемом для ускорения ионов при имплантационной обработке материалов. Исследованы динамика ионной и электронной компоненты, а также особенности распределения потенциала при подключении к обрабатываемой детали отрицательных высоковольтных импульсов различной формы. Проведено сравнение расчетных и экспериментально измеренных токовых и дозовых характеристик формируемого ионного пучка. Показана возможность применения разработанной модели для оптимизации требований к технологическим параметрам и оборудованию.

Методика ионно-имплантационной обработки материалов в импульсной лазерной плазме отличается высокой универсальностью и простотой технической реализации [1]. Для получения плазмы используют импульсное лазерное излучение, способное испарять и ионизовать самые различные материалы. В момент разлета плазмы от мишени к обрабатываемой подложке прикладывается высоковольтный импульс

отрицательной полярности, который вызывает ускорение ионов и внедрение их в подложку. Используя достаточно интенсивные лазерные импульсы, можно реализовать конгруэнтное испарение и высокую степень ионизации материала облучаемой мишени. Выбор мишени (или набора из нескольких различных мишеней) однозначно определяет состав ионного пучка. При включении внешнего электрического поля энергия внедряемых ионов может быть повышена до нескольких десятков килоэлектрон-вольт, что позволяет реализовать как “чистую” ионно-имплантационную обработку [2], так и ионно-ассистированное осаждение покрытий [3] и ионное перемешивание на границе покрытие – подложка [4].

В качестве основных технологических параметров, которые устанавливаются при реализации ионно-имплантационной обработки материал, следует выделить интенсивность лазерного воздействия на мишень, время включения высоковольтного импульса и его параметры, геометрические особенности взаимного расположения мишени и подложки. При изменении этих параметров могут существенно меняться плотность и энергетические характеристики лазерной плазмы, конфигурация и напряженность электрического поля между мишенью и подложкой, энергетические и дозовые характеристики ионного пучка. В настоящее время поиск оптимальных технологических режимов проводится эмпирически.

Цель настоящей работы — создание математической модели ионной имплантации из лазерной плазмы, которая позволила бы перейти к компьютерному моделированию технологических процессов и существенно упростить проблему их оптимизации. Особенно важно выяснить физическую картину процессов, определяющих формирование ионного пучка из плазменного облака при различных режимах включения внешнего электрического поля.

Для описания разлета в вакуум лазерной плазмы во внешнем электрическом поле применялся метод “частиц в ячейках” (particles in cells — PIC) [5]. Метод PIC зарекомендовал себя как эффективное средство решения задач физики плазмы и успешно использовался для моделирования широкого круга плазменных технологических процессов, в частности — для описания ионной имплантации из газоразрядной плазмы [6]. Узконаправленный характер распространения плазменного факела по окончании лазерного импульса (экспериментальные значения угла разлета $\sim 30^\circ$) и особенно после включения высоковольтного напряжения позволяет с некоторым приближением пренебречь радикальным расширением плазмы и рассматривать задачу в одномерной постановке.

Алгоритм расчетов методом РС сводится к следующему. Моделируется поведение частиц (“суперчастиц”), каждая из которых представляет собой большое число реальных частиц плазмы — электронов или ионов. На каждом временном шаге заряды частиц с известными координатами и скоростями присваиваются ближайшим узлам пространственной сетки. На основании распределения плотности заряда из уравнения Пуассона получают пространственное распределение потенциала. По определенному электрическому полю рассчитывают действующие на частицы силы. Новые координаты и скорости частиц находят из уравнений движения. Этот процесс повторяется необходимое число раз.

Таким образом, задача сводится к совместному решению уравнений движения электронов и ионов:

$$m_j \frac{dv}{dt} = F; \quad \frac{dx}{dt} = v \quad (1)$$

и уравнения Пуассона для потенциала самосогласованного поля

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}. \quad (2)$$

Здесь φ — потенциал; $\rho = e(N_i - N_e)$ — плотность заряда; N_j — плотность частиц плазмы — ионов (индекс $j = i$) и электронов (индекс $j = e$); $F = q_j E$ — сила ($q_i = e, q_e = -e$); $E = -d\varphi/dx$ — напряженность электрического поля; v — скорость; x — пространственная координата (расстояние от мишени); t — время; m_j — масса частиц; e — заряд электрона; ε_0 — электрическая постоянная.

Время образования лазерного факела (близкое к длительности лазерного импульса $\tau \sim 10$ нс) много меньше времени его разлета. Поэтому распространение факела от мишени до подложки рассматривается независимо от процесса его формирования. Для задания начального распределения плотности плазмы и скорости ее движения использовали результаты экспериментальных измерений [1] “время-пролетных” спектров ионов Fe, приведенные к некоторому фиксированному моменту времени $t = t_0$, и полученные в условиях, когда высоковольтный импульс не включался. Согласно данным работы [1], за время, равное 1 мкс после лазерного облучения, плазма распространялась на расстояние ~ 2 см от мишени, а ее плотность распределялась в этом промежутке колоколообразно. Максимальная плотность плазмы составляла примерно $\sim 7 \cdot 10^{10}$ см $^{-3}$.

Начальные распределения частиц плазмы по x -компонентам скоростей задавались максвелловскими функциями

$$f_{j0}(v_x, x, t = t_0) = N_j(x, t_0) \left(\frac{m_j}{2\pi kT_j} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{m_j(v_x - u)^2}{2kT_j} \right) \quad (3)$$

с параметрами N_j , T_j и u , которые соответствуют плотности, температуре и массовой скорости плазмы. Здесь следует заметить, что в рассматриваемой постановке задача является трехмерной в пространстве скоростей, но две другие компоненты скорости (v_y и v_z) остаются неизменными, и соответствующие уравнения не рассматривались.

В приближении, что к моменту времени $t = t_0 = 1$ мкс плазма в целом остается квазинейтральной, начальное распределение плотностей ионов и электронов $N_j(x, t = t_0)$ аппроксимировалось параболой на отрезке от 0 до 2 см с нулевыми значениями на его концах и максимумом $N_{jm} = 7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ при $x = 1$ см. Соответствующая массовая скорость движения плазмы составляла $u = 10^6$ см/с. Для температуры выбранные характерные для лазерных экспериментов значения $kT_j = 1$ эВ.

В модели облучаемая лазером мишень поддерживалась при нулевом потенциале, а к подложке с задержкой τ_V относительно лазерного импульса прикладывались высоковольтные импульсы различной формы. Поэтому в качестве граничных условий для уравнения Пуассона использовались известные значения потенциала на мишени ($x = 0$) и на подложке ($x = x_s$):

$$\varphi(x = 0, t) = 0; \quad \varphi(x = x_s, t) = V_s(t). \quad (4)$$

При численном решении кинетической задачи шаг по времени Δt и размер ячеек пространственной сетки Δx определяются двумя характеристиками плазмы — радиусом дебаевского экранирования $r_D = (\epsilon_0 kT_e / N_e e^2)^{1/2}$ и плазменной частотой $\omega_e = (N_e e^2 / \epsilon_0 m_e)^{1/2}$. В методе PIC для обеспечения устойчивости получаемых решений требуется выполнение ряда условий, в частности $\Delta x < r_D$ и $\Delta t < 2\pi / \omega_e$. В рассматриваемой задаче моделировалось поведение 10^5 частиц плазмы обоих видов (электронов и ионов), а шаги по времени и координате составляли $4 \cdot 10^{-12}$ с и 8 мкм (10^4 ячеек).

Для проверки модели были проведены расчеты для импульса треугольной формы, соответствующего экспериментальным условиям [1]: напряжение резко возрастало по абсолютной величине в течение 1 мкс, а затем плавно спадало примерно за 10 мкс. Также проведено моделирование разлета плазмы при использовании “идеального” прямоугольного высоковольтного импульса длительностью 10 мкс. В обоих случаях расстояние мишень – подложка принято равным 8 см, а амплитуда подключаемого к подложке с задержкой 1 мкс отрицательного высоковольтного импульса — 40 кВ.

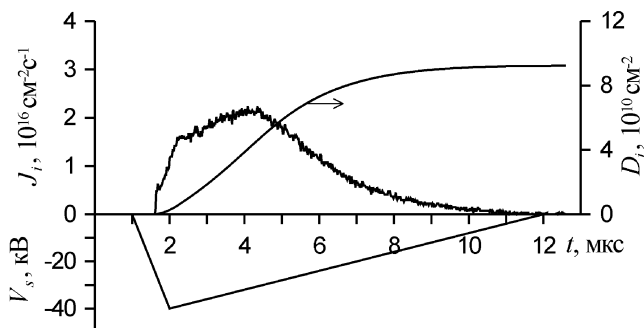


Рис. 1. Расчетное изменение во времени плотности ионного потока и дозы ионной имплантации из лазерной плазмы под действием высоковольтного импульса треугольной формы, подключаемого к подложке через 1 мкс после лазерного импульса

На рис. 1 приведены результаты расчета ионного тока из лазерной плазмы и дозы имплантации при проведении процесса с подключением высоковольтного импульса треугольной формы. Разработанная модель предсказывает нарастание ионного тока в течение первых ~ 4 мкс, а затем плавный спад на протяжении еще ~ 5 мкс. Во многом схожая зависимость ионного тока от времени была установлена в экспериментальных исследованиях [1] в тех случаях, когда высоковольтный импульс треугольной формы включался на ранней стадии разлета лазерного факела.

Моделирование динамики лазерной плазмы позволяет выявить основные механизмы, определяющие формирование ионного пучка. На рис. 2 показана расчетная динамика ионной плотности при разлете лазерной плазмы во внешнем электрическом поле, а на рис. 3 более подробно представлены результаты для пространственных распределений ионной и электронной плотностей, а также потенциала электрического поля для момента времени, соответствующего 3 мкс после лазерного воздействия. Расчеты показывают, что большую часть времени разлета в основном объеме плазмы поддерживается квазинейтральность. Внешнее поле практически полностью экранируется плазмой, а разделение зарядов и образование ионного слоя происходит на переднем фронте. Поступление ионов на подложку развивается с переднего фронта плазменного факела, где действует очень сильное электрическое поле. Ионный ток нарастает на стадии сближения фронта лазерной плазмы с подложкой. Этот процесс длится ~ 4 мкс (см. рис. 1 и 2). За это время ускоряющее напряжение падает почти до 30 кВ. Затем при дальнейшем снижении потенциала подложки начинается обратное движение фронта плазмы от подложки к мишени (при этом сама плазма в целом продолжает двигаться от мишени к подложке).

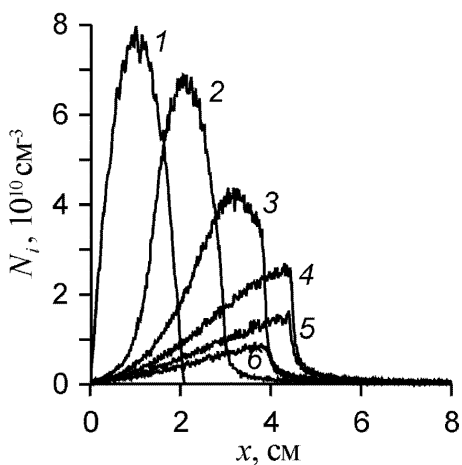


Рис. 2. Моделирование динамики ионной плотности в пространстве от мишени ($x = 0$) до подложки ($x = 8$ см) при разлете лазерной плазмы; через 1 мкс после лазерного воздействия к подложке подключался отрицательный высоковольтный потенциал с амплитудой 40 кВ (треугольный импульс)

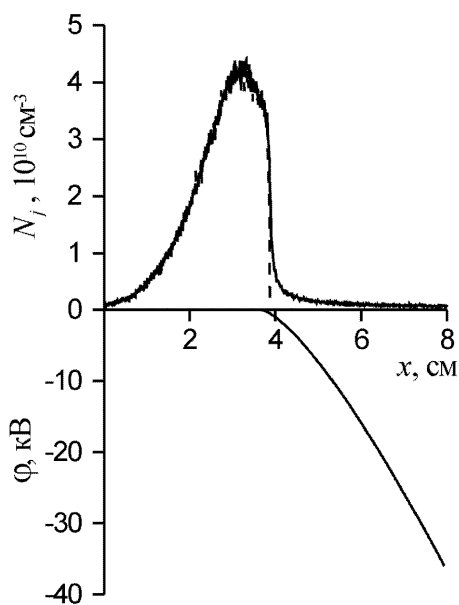


Рис. 3. Рассчитанные распределения ионов (сплошная линия) и электронов (штриховая) между мишенью и подложкой через 3 мкс после лазерного воздействия во внешнем электрическом поле (треугольный импульс), включенном через 1 мкс после лазерного облучения мишени; распределение потенциала в этом пространстве определяется нижней кривой

Энергия бомбардирующих ионов во многом определяется потенциалом подложки и повторяет его временную эволюцию (рис. 4). В результате кулоновских взаимодействий между ионами и вылетающими из плазмы подвижными электронами, сил взаимного отталкивания между самими ионами и под действием внешнего электрического поля плазма в целом ускоряется. Поэтому после окончания импульса на подложку падают ионы с энергиями ~ 1 кэВ (рис. 4), что намного превышает среднюю энергию их направленного движения (~ 30 эВ) в начале разлета плазмы. В результате формируется достаточно широкий энергетический спектр имплантированных ионов (рис. 5). Отметим, что экспериментальные измерения глубинных концентрационных профилей внедренных ионов также указывают на этот эффект [1].

Разработанная модель позволяет выявить возможные изменения в параметрах технологического процесса в случае использования высоковольтного импульса прямоугольной формы. Далее приведены результаты численного моделирования для режима, когда отрицательный высоковольтный импульс с амплитудой 40 кВ включался через 1 мкс по-

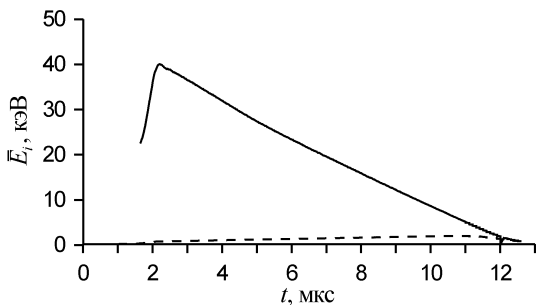


Рис. 4. Изменение энергии ионов, бомбардирующих подложку из лазерной плазмы (сплошная линия), и ионов лазерной плазмы (штриховая); расчет проведен для треугольного импульса с амплитудой 40 кВ

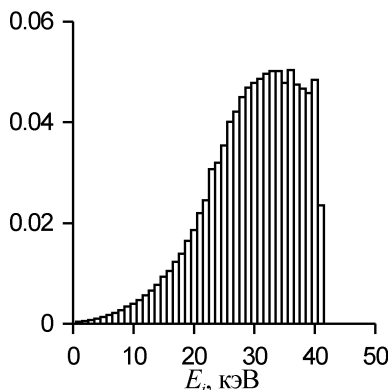


Рис. 5. Рассчитанное энергетическое распределение ионов, имплантированных в подложку под воздействием высоковольтного импульса треугольной формы

сле лазерного. На временной зависимости поступающего на подложку ионного тока можно выделить три характерных участка: кратковременный (продолжительностью $\sim 0,2$ мкс) всплеск, обусловленный мгновенным включением высоковольтного импульса, медленное нарастание (на временном интервале от 1,6 мкс до 4 мкс) и спад (на интервале от 4 мкс до 7 мкс) на заключительном этапе разлета плазменного факела (рис. 6). В данном случае ясно видно, что в начале процесса в подложку могут имплантироваться ионы с повышенной средней энергией, а в конце — с пониженной (рис. 7). Первые высокоэнергичные ионы долетают до подложки через $\sim 0,3$ мкс после включения высоковольтного импульса.

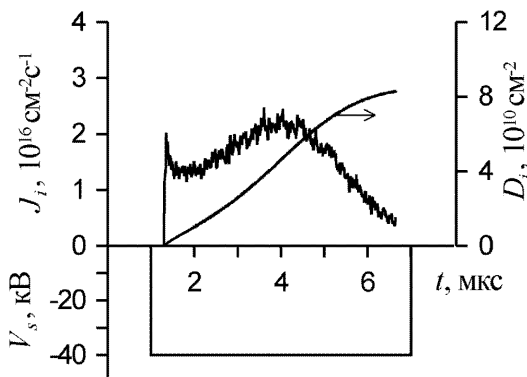


Рис. 6. Моделирование динамики ионного тока и дозы имплантации в случае применения прямоугольного высоковольтного импульса, включаемого через 1 мкс после лазерного

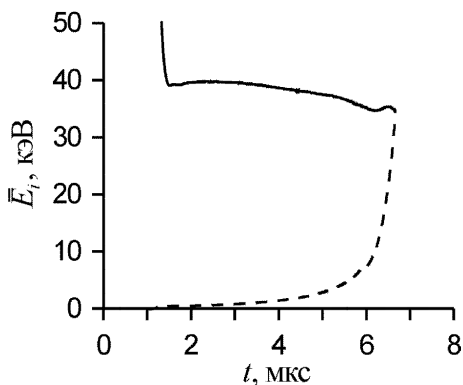


Рис. 7. Изменение средней энергии имплантируемых ионов (сплошная кривая) и ионов лазерного факела (штриховая) под воздействием высоковольтного импульса прямоугольной формы; расчет проведен для импульса с амплитудой 40 кВ

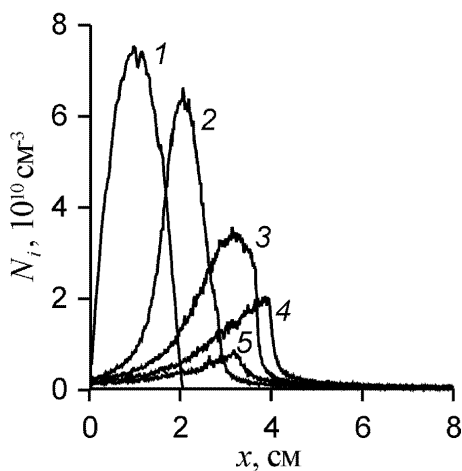


Рис. 8. Расчетная динамика ионной плотности под воздействием прямоугольного импульса, включаемого через 1 мкс после лазерного воздействия

Пространственные распределения ионной плотности лазерного факела в разные моменты времени показаны на рис. 8. Рис. 9 иллюстрирует динамику изменения пространственных распределений плотностей ионов и электронов и электростатического потенциала в течение короткого промежутка времени после подачи высоковольтного импульса. Мгновенное включение электрического поля приводит к повышению потенциала самой плазмы в силу воздействия на подвижную электронную компоненту. В результате энергия имплантируемых ионов может превысить “номинальную”, т.е. задаваемую амплитудой высоковольт-

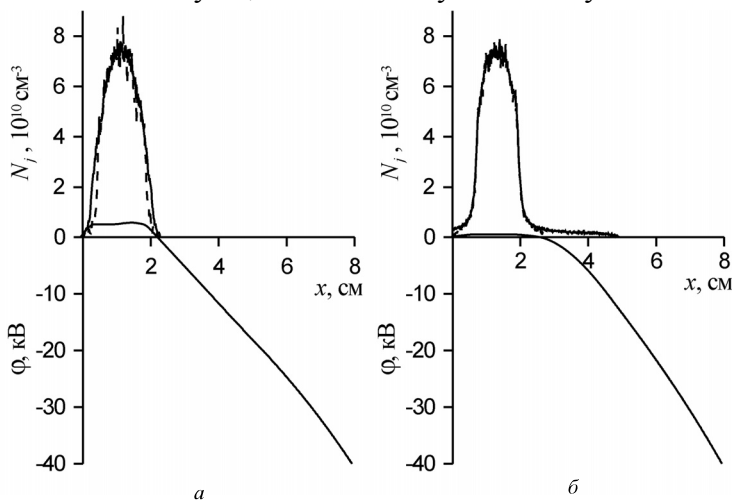


Рис. 9. Распределение ионной (сплошная линия) и электронной (штриховая) плотности, а также потенциала электрического поля (нижняя кривая) через 10 нс (а) и 200 нс (б) после включения высоковольтного прямоугольного импульса

ного импульса (рис. 9, а). Такие ионы были действительно обнаружены при анализе глубинного распределения [1]. Согласно расчетам, выход электронов из плазмы сразу после включения высоковольтного импульса составляет около 5–10 % от их первоначального количества, а число ионов практически не меняется. Оценить скачок потенциала в плазме можно уравнением Пуассона: $\delta\varphi \sim e\delta N(\delta x)^2/\varepsilon_0$. При разности плотностей ионов и электронов $\delta N \sim 10^9 \text{ см}^{-3}$ и характерных размерах плазмы $\delta x \sim 1 \text{ см}$ изменение потенциала $\delta\varphi$ составляет несколько киловольт. Вызванные включением поля возмущения быстро релаксируют, и примерно через 0,2 мкс в основном объеме плазмы восстанавливается квазинейтральность (рис. 9, б).

Как и в случае применения треугольного высоковольтного импульса, газодинамическое движение плазмы от мишени к подложке обуславливает рост ионного тока на подложку. Расчеты показывают, что сближение плазменного факела и подложки происходит примерно за 4 мкс, а затем развивается обратный процесс. Плазма как бы удаляется от подложки из-за увеличения области пространственного заряда. В последующие моменты времени картина процессов во многом напоминает картину ионно-имплантационной обработки в газоразрядной плазме [6]. Ионный ток начинает уменьшаться со временем как из-за увеличения области пространственного заряда (закон Чайльда – Ленгмюра), так и вследствие уменьшения плотности плазмы.

Удаление границы плазмы от подложки сопровождается уменьшением энергии имплантированных ионов. Сохранившиеся к концу

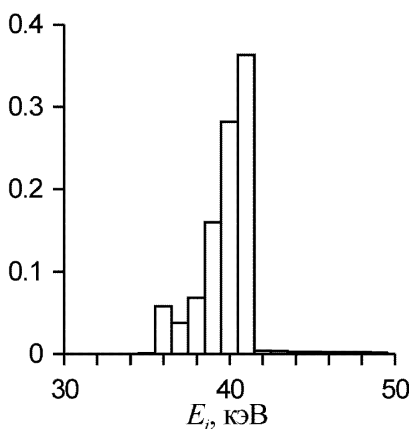


Рис. 10. Расчетная гистограмма энергетического распределения ионов, имплантируемых под воздействием прямоугольного высоковольтного импульса с амплитудой 40 кВ

процесса в промежутке мишень – подложка ионы могут “стартовать” с различных потенциальных поверхностей, поскольку электрический потенциал изменяется в этом промежутке. Это приводит к заметному размытию энергетического спектра и появлению ионов с энергией, меньшей “номинальной”. Расчеты показывают, что при наложении импульса с амплитудой 40 кВ энергия имплантированных ионов может снижаться до 35 кэВ (рис. 10). Согласно расчетам, использование прямоугольного высоковольтного импульса позволяет получать достаточно узкий энергетический спектр имплантированных ионов. Большая часть ионов

(около 80 %) имплантируется с энергией 39 – 41 кэВ. Около 17 % ионов имеют меньшую энергию: 35 – 38 кэВ. Около 3 % ионов могут внедряться с энергией до 50 кэВ. Ионно-имплантационная обработка под воздействием прямоугольного высоковольтного импульса протекает около 7 мкс.

Таким образом, разработанная математическая модель имплантации ионов из импульсного лазерного факела позволяет провести детальный анализ физических процессов, протекающих в лазерной плазме под воздействием внешних импульсных электрических полей. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными указывает на высокую достоверность расчетных данных. Модель может быть применена для прогнозирования технологических параметров при варьировании режимов лазерного облучения и условий включения высоковольтных импульсов. Так, для получения ионного пучка с достаточно узким энергетическим спектром необходимо использовать прямоугольные высоковольтные импульсы длительностью более 7 мкс. При этом доля ионов с номинальной энергией составит до 80 % от полной дозы имплантации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Международной организации INTAS (Grant 03-51-4206) и Совета по грантам Президента РФ для молодых ученых и ведущих научных школ (НШ-97.2003.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И м п у л ь с н а я имплантация ионов при лазерной абляции материалов / В.Е. Кошманов, А.Л. Смирнов, В.Ю. Фоминский и др. // Вестник МГТУ имени Н.Э. Баумана. Сер. "Машиностроение". – 2003. – № 2. – С. 37–51.
2. Qi B., Gilgenbach R. M., Jones M. C., Johnston M. D., Lau Y. Y., Wang L. M., Lian J., Doll G. L., Lazarides A. Diagnostic characterization of ablation plasma ion implantation // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 93. – № 11. – P. 8876–8883.
3. Fominski V. Yu., Nevolin V. N., Romanov R. I., Smurov I. Ion-assisted deposition of MoSx films from laser-generated plume under pulsed electric field // J. Appl. Phys. – 2001. – Vol. 89. – № 2. – P. 1449–1457.
4. Fominski V., Nevolin V., Romanov R., Smirnov A., Scharff W. Atomic mixing and chemical bond formation in MoSx/Fe thin-film system deposited from a laser plume in a high-intensity electrostatic field // Thin Solid Films. – 2002. – Vol. 422/1-2. – P. 39–47.
5. Birdsall C. K., Langdon A. B. Plasma Physics via Computer Simulation. – Bristol. – IoP Publishing. – 1991.
6. Chu P. K., Qin S., Chan C., Cheung N. W., Larson L. A. Plasma immersion ion implantation – a fledging technique for semiconductor processing // Materials Science and Engineering. – 1996. – V. R17. – P. 207–280.

Статья поступила в редакцию 17.05.04

Владимир Николаевич Неволин — д-р физ.-мат. наук, профессор Московского инженерно-физического института (государственного университета). Специализируется в области физики взаимодействия высокоэнергетических пучков с твердым телом

V.N. Nevolin - D. Sc. (Phys.-Math.), professor of the Moscow Institute for Engineering and Physics (state university). Specializes in the field of physics of interaction of high-energetic beams with solid body.

Алексей Григорьевич Гнедовец — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Института металлургии и материаловедения РАН. Специализируется в области моделирования плазменно-паровых потоков, инициируемых импульсным лазерным облучением твердых тел.

A.G. Gnedovets - Ph. D. (Phys.-Math.), senior researcher of the Institute for Metallurgy and Science of Materials of the Russian Academy of Sciences. Specializes in the field of simulation of plasma-vapor fluxes initiated by laser pulse irradiation of solid bodies.

Вячеслав Юрьевич Фоминский — д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Московского инженерно-физического института (государственного университета). Специализируется в области разработки физических основ современных пучковых технологий, применяемых для модифицирования поверхности и синтеза тонкопленочных структур.

V.Yu. Fominsky — D. Sc. (Phys.-Math.), leading researcher of the Moscow Institute for Engineering and Physics (state university). Specializes in the field of development of physical bases of contemporary beam technologies, applied for modifying the surface and synthesis of thin film structures.

Владимир Евгеньевич Кошманов — аспирант Московского инженерно-физического института (государственного университета). Специализируется в области разработки методов имплантации ионов из лазерной плазмы.

V.Ye. Koshmanov — post-graduate of the Moscow Institute for Engineering and Physics (state university). Specializes in the field of developments of methods of ion implantation from laser plasma.

В. Шарфф (Scharff Wolfram) — профессор Института материаловедения (Германия). Специализируется на разработке современных технологий модифицирования материалов и формирования покрытий.

Wolfram Scharff — professor of the Institute for Science of Materials (Germany). Specializes in the field of physics of interaction of high-energetic beams with solid body.