

С. С. КУЦ, студент НТУ «ХПИ»,
А. С КУЦЕНКО, д-р тех. наук, профессор НТУ «ХПИ»,
И. И. МАРЧЕНКО, ассистент НТУ «ХПИ»

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ТОНКИХ ПЛЁНОК КИНЕТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

У роботі розроблена модель осадження тонких плівок, яка заснована на методі кінетичного Монте-Карло. Запропонований алгоритм враховує процеси дифузії по адатомним вузлам кристалічної решітки, та також ефект затінення осаджених атомів нерівностями рельєфу поверхні. Проведені розрахунки показують гарне згоду з наявними експериментальними результатами.

В работе разработана модель осаждения тонких плёнок, основанная на методе кинетического Монте-Карло. Предложенный алгоритм учитывает процессы диффузии по адатомным узлам кристаллической решетки, а также эффект затенения осаждаемых атомов неровностями рельефа поверхности. Проведенные расчеты показывают хорошее согласие с имеющимися экспериментальными результатами.

We developed a model of deposition of thin films based on the method of kinetic Monte Carlo. The proposed algorithm takes into account the processes of diffusion adatomnym lattice sites, as well as the effect of shadowing of the deposited atoms by the roughness of the surface relief. The simulations are in a good agreement with available experimental results.

Введение. Метод физического вакуумного осаждения (Physical Vapor Deposition, PVD) в настоящее время широко применяется в различных областях промышленности. PVD используется для получения многослойных материалов с хорошими характеристиками, которые применяются в производстве высокочувствительных магнитных слоев головок жестких дисков и магнитной памяти случайного доступа [1]. Данный метод получения пленок используется в производстве полупроводниковых устройств для получения многослойных устройств с субмикронными свойствами.

Производство тонких пленок при помощи физического вакуумного осаждения является процессом, который сильно зависит от условий роста пленок. Необходимость оптимизации процессов получения плёнок с заданными свойствами вызывает пристальное внимание к методам их компьютерного моделирования.

В настоящее время для моделирования роста пленок обычно широко используются методы молекулярной динамики баллистического осаждения [2-3]. Метод молекулярной динамики на текущий момент наиболее точен, однако он требует больших вычислительных мощностей и, как следствие, позволяет моделировать только небольшое количество осаждаемых атомов за малые интервалы времени. Метод баллистического

осаждение рассматривает только процессы осаждения атомов, не учитывая процессы диффузии, что не позволяет получить адекватные результаты для PVD. В кинетическом методе Монте-Карло рассматриваются как процессы осаждения, так и процессы диффузии, однако из-за особенностей построения алгоритма решения не требуется больших вычислительных ресурсов. Данная особенность позволяет рассматривать большое количество осадений за сравнительно небольшое время.

Поэтому целью данной работы была разработка компьютерной модели процессов атомарного осаждения тонких пленок кинетическим методом Монте-Карло (КМК).

Физическая модель гомоэпитоксимального осаждения. В данной работе рассматривались процессы осаждения тонких пленок на подложку из такого же материала, образующие кристаллическую структуру.

Рассматривается гомоэпитоксимальный рост тонких пленок. Так как из экспериментов [4] известно, что кристаллическая структура не изменяется с ростом пленки, поэтому в модели предполагается, что атомы могут занимать только идеальные кристаллографические позиции.

Кристаллическая решетка описывается позицией атома в элементарной ячейке и векторами трансляций.

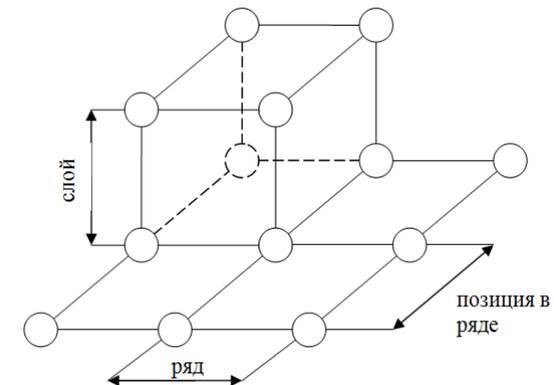


Рис 1. Схема построения кристаллической решетки

В общем случае ячейка представляет собой параллелепипед с векторами $\mathbf{a}(a_x, a_y, a_z)$, $\mathbf{b}(b_x, b_y, b_z)$, $\mathbf{c}(c_x, c_y, c_z)$. Для оптимальной работы алгоритма кристаллическая решетка строилась заполнением по слоям и рядам (см. рис 1). Это позволяет однозначным образом определить соседние атомы по положению в плоскости, ряду и места в нем (т.е. отпадает необходимость перебора всех узлов для нахождения необходимого).

Каждый атом характеризуется энергией в узле e_s , которая вычисляется как сумма парных взаимодействий с первыми и вторыми соседями.

Процесс формирования поверхности может быть описан в рамках процессов осаждения атомов на поверхность и их поверхностной миграции.

Атомы осаждаются под некоторым углом θ , рассчитываемым от нормали к поверхности осаждения. Осаждение происходит с постоянной скоростью F , и распределяются равномерно в плоскости, параллельной подложке.

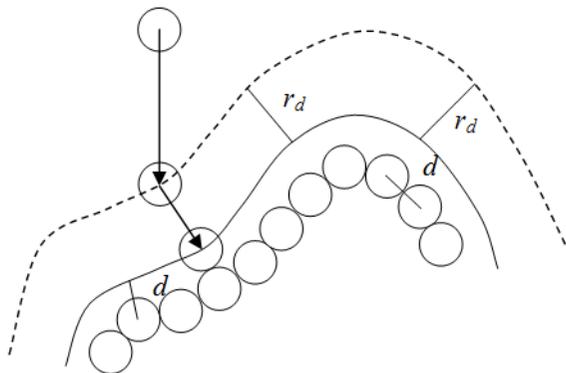


Рис 2. Схема процесса осаждения атомов. d – расстояние между атомами, r_d – расстояние, характеризующее взаимодействие между атомами

На рис. 2 приведена схема процесса осаждения. Считается, что атом движется по прямой до контакта с ближайшим поверхностным атомом. Критерием контакта является расстояние $(d + r_d)$ между ними, где d – удвоенный атомный радиус, а величина r_d характеризует межатомное взаимодействие [5]. То, что r_d в модели отлично от нуля может приводить к морфологической нестабильности поверхности осаждаемых пленок. Обычно данный параметр в баллистическом осаждении не учитывается, что может приводить к неправильному описанию эволюции пленок. Если расстояние $r < r_d$, то атом занимает один из ближайших незанятых узлов. Конкретная позиция выбирается случайным образом с учетом энергии связи e_s .

В кинетическом методе Монте-Карло поверхностная диффузия является термически зависимым процессом, с вероятностью скачка из положения i в положение j описываемой Ареневской зависимостью [6]:

$$R^{ij} = R_0 \exp\left(\frac{E_A^{ij}}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где R_0 характеризует частоту атомных перескоков и составляет величину порядка 10^{12} с^{-1} , T – температура пленки и k_B – постоянная Больцмана, E_A^{ij} активационная энергия диффузионного скачка из положения i в положение j .

Активационная энергия E_A^{ij} была параметризована в терминах количества межатомных связей до и после диффузионного скачка следующим образом

$$E_A^{ij} = E_D + n_N E_N + n_{NN} + E_{NN}, \quad (2)$$

где E_D – диффузионный барьер скачка адатома, E_N и E_{NN} энергия связи первых и вторых соседей, n_N и n_{NN} – количество соседей до и после скачка.

Алгоритм моделирования процессов формирования тонких пленок. На основании вышеизложенного материала был разработан алгоритм моделирования процессов атомарного осаждения тонких пленок.

На рис. 3 приведены основные этапы моделирования процессов осаждения тонких пленок:

1. Задается структура кристаллической решетки, определяются геометрические координаты узлов, определяется начальное время осаждение t равно нулю.
2. В блоке 2 проводится проверка на синхронизацию процессов осаждения атомов и миграцию по времени t .
3. В третьем блоке случайным образом задаются начальные координаты атома в плоскости (x, y) находящейся на уровне нескольких слоев над последним заполненным слоем.
4. Последовательно изменяются координаты атома (x, y, z) с шагом ΔX .
5. Проверяется, есть ли в ближайшем окружении другие атомы.
6. В блоке 6 случайным образом выбирается незанятая позиция в кристалле, которую занимает осаждаемый атом.
7. В массиве с состоянием узлов решетки позиция с данными координатами меняет свое значение на «занято»
8. Проверка времени t на критерий остановки процесса t_{cmon}
9. В 9 блоке выбирается атом, который может мигрировать
10. Выбираются позиции, в которые атом может совершить скачек.
11. В блоке 11 выбирается случайным образом одна из позиций, полученных в блоке 10.
12. В массиве с состоянием узлов решетки выбранная позиция меняет свое значение на «занято», а предыдущая позиция принимает значение «свободно».

13. В блоке 13 добавляется к значению времени моделирования t значение времени миграции t_i .

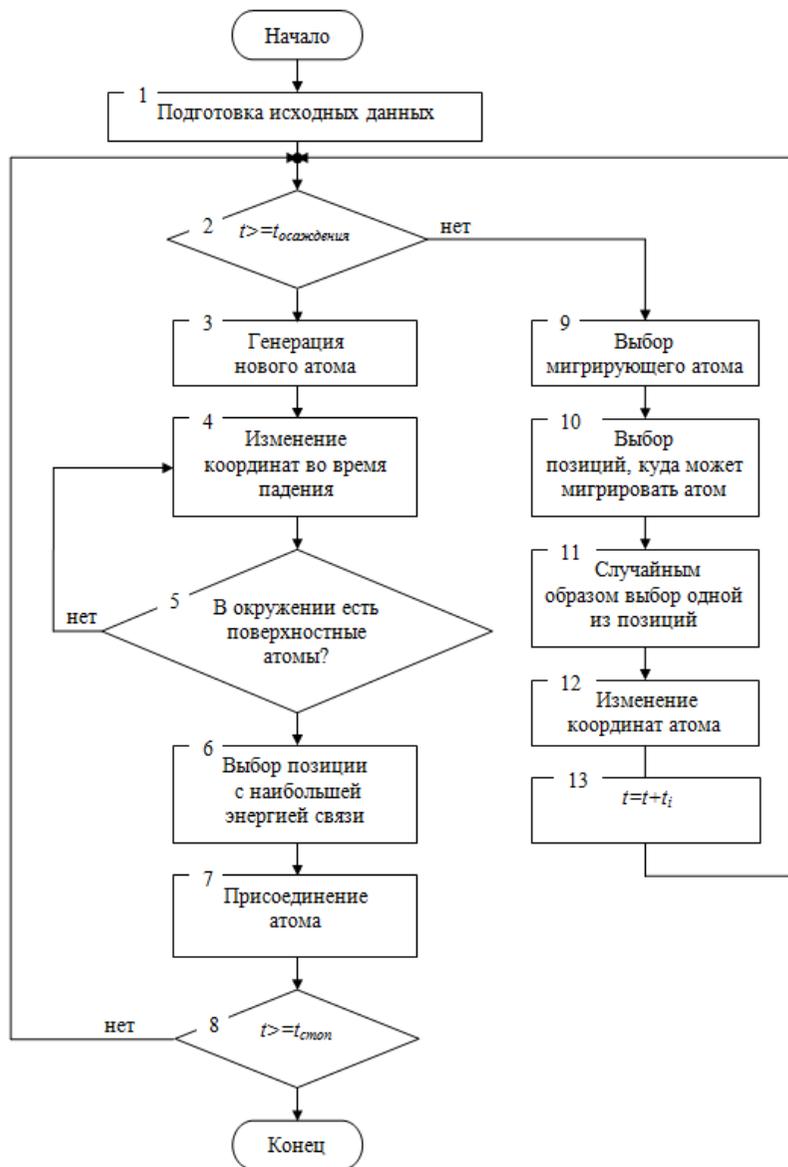


Рис 3. Блок-схема алгоритма моделирования процессов формирования тонких пленок

Верификация алгоритма. На основании описанного выше алгоритма было разработано программное средство, позволяющее моделировать рост поверхности тонких пленок. При помощи разработанного программного комплекса была проведена серия имитационных расчетов.

На рисунке 4 приведены результаты имитационного моделирования микрокристаллита, имеющего объемцентрированную кристаллическую решетку (ОЦК) после осаждения 1 млн. атомов. Как видно из рисунка, поверхность тонкой пленки имеет сложную морфологию, что обусловлено условиями процесса осаждения и микроструктуры пленки.

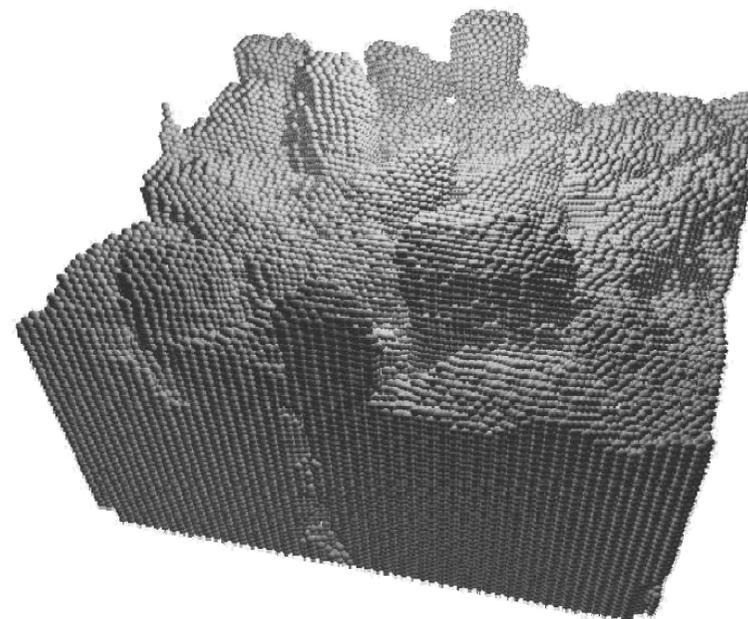


Рис 4. Результаты моделирования ОЦК-материала после осаждения 1 млн. атомов

Так же в рамках данной работы было проведено моделирование роста тонкой пленки с гранецентрированной кристаллической решеткой. На рисунке 5(а) приведены результаты компьютерного моделирования. На рисунке 5(б) приведены результаты эксперимента [4]. Как видно из рисунка, эти результаты находятся в качественном согласии с полученными результатами моделирования.

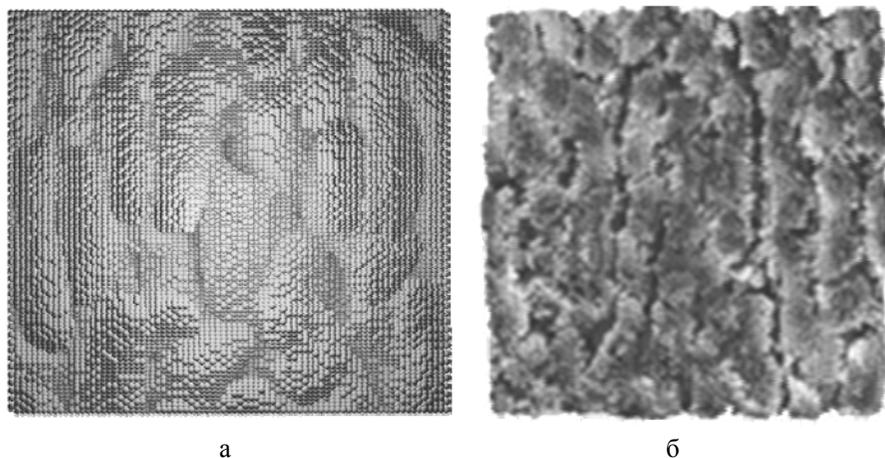


Рис 5. Сравнение результатов компьютерного моделирования (а) с экспериментальными данными (б)

Выводы. В настоящей работе разработана компьютерная модель формирования тонких пленок методом физического атомного осаждения. На основании созданной модели был создан алгоритм моделирования процессов атомарного осаждения и разработан программный комплекс.

При помощи созданного программного средства было проведено серия расчетов. Данные, полученные методами компьютерного моделирования, находятся в качественном согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Данная разработка в дальнейшем может использоваться для изучения зависимости между условиями процесса осаждения и микроструктурой пленки.

Список литературы: 1. *Mattox D.M.*, Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing// William Andrew Publishing/Noyes -1998. –P.- 907. 2. *Smith R. W., Srolovitz D. J.* Void formation during film growth: A molecular dynamics simulation study// J. Appl. Phys.- 1996.-Vol. 79.- P. 1448-1457. 3. *Srolovitz D. J., Mazor A., Bukiet B. G.* Analytical and numerical modeling of columnar evolution in thin films //J. of Vac. Science & Technology.-1988.- Vol. A6.- P. 2371-2380. 4. *Kohler U., Jensen C., Reshort K., et. al.* Homo- and heteroepitaxy of metal on metal growth// Structure dynamics in heterogeneous systems.-Singapore: World Scientific, 2001.- P. 140-147. 5. *Биддер К., Сунерли Д., Ансен Ж.-П. и др* Методы Монте-Карло в статистической физике/ Пер. с англ.- М.: Мир, 1982.- 400 с. 6. *Бокштейн Б.С., Бокштейн С.С., Жуховицкий А. А.* Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах /М.: Металлургия, 1974.- 280 с.

Поступила в редколлегию 18.12.09