

Моделирование возникновения рельефа. Двумерная постановка задачи

Губарев А.А.

кафедра ПМИ, ДонГУ

Abstract

Gubarev A. A. Simulation of relief origin. Two-dimensional formulation of a problem. In the paper the attempt of the simulation of the macroscopic relief surface formation, what is caused by bombardment by heavy ions of middle energy, is undertaken. Computations are realised on the simplest model, which supposes the microcrater forming at every collision of ion with surface. They show that relief magnitude less than experimentally observed one.

1. Введение.

Экспериментально обнаружено, что при облучении пучком ионов происходит превращение изначально плоской границы раздела твердое тело — вакуум (а для многослойных мишеней — и приповерхностных границ раздела слоев) в имеющую неровности. Одним из первоначальных объяснений этого явления было наличие загрязнений, которые приводили к различным скоростям эрозии.

В процессах

- ионно-плазменного травления и напыления (характеризующихся низкими энергиями взаимодействия плазма — поверхность мишени);
- развития рельефа макроскопического масштаба при бомбардировке ионами средних энергий, когда размеры неровностей много больше геометрических характеристик каскада столкновений

можно ввести "локальную скорость" движения поверхности. Поверхность при этом понимается как огибающая реальной атомарно-ступенчатой поверхности. Так как атомы распыляются преимущественно из нескольких первых слоев поверхности и при падении нескольких атомов на выбранный участок поверхность изменяется незначительно (по сравнению с имеющимися неровностями), то в качестве локальной скорости принимают усредненную по различным реализациям столкновения и направленную по нормали к сглаженной по нескольким падениям ионов поверхности. В этом случае процесс может быть теоретически описан в форме задачи Коши для уравнения Гамильтона-Якоби. Классическое решение может не существовать даже при гладкой начальной функции. В [1] строится численная схема (в двумерном случае) для получения обобщенного решения с дополнительным условием — условием вязкости, позволяющим выделить единственное решение задачи. Такой подход позволяет изучить эволюцию, но не возникновение рельефа.

При сканирующем (для подавления образования макроскопического кратера) послойном анализе возникающий рельеф является отрицательным фактором, снижающим разрешающую способность по глубине. Поэтому проблема возникновения рельефа (в контексте влияния на послойный анализ мишеней с зависящими от глубины¹ свойствами) подробно изучалась на примере моделей в которых мишень представлялась в виде совокупности слоев, а основной вычисляемой величиной являлась доля заполнения каждого слоя [2, 3]. Зависимость распыления от формы рельефа явно не учитывалась. Для послойного анализа важно знание не самого рельефа, а доли распыляемых с заданной глубины атомов. Собственно, на этот вопрос эти модели и давали ответ. Результат этих исследований — не-

¹ концентрацией, плотностью и другими.

ограниченное увеличение числа частично заполненных слоев как следствие стохастического характера взаимодействия пучка и мишени.

При малых дозах облучения тяжелыми ионами экспериментальные исследования появления неровностей на границе между слоями [4] и границе тела и вакуума [5] показывают:

- начальная неровность формируется как множество “кратеров” от одиночно упавших ионов;
- с увеличением дозы образуются неровности, много большие среднего размера каскада столкновений.

Эти результаты не укладываются в рамки перечисленных выше моделей. Целью данной работы была проверка предположения о том, что само образование кратера от одиночно упавшего иона, имеющего среднюю из возможных форму, может привести к макроскопической неровности поверхности (то есть неровности со средними геометрическими размерами, много большими размеров кратера от одиночно упавшего иона). Такие трудности задачи как:

- конечность изменений при каждом взаимодействии (затрудняет формулировку задачи в дифференциальной форме по “дозе”);
- нелокальность взаимодействия — ион падает в точке с одной характеристикой поверхности¹, а им вызванное изменение поверхности происходит в точках с отличной характеристикой поверхности (затрудняет формулировку в дифференциальной форме по “пространственным” координатам)

вынуждают прибегнуть к имитационному моделированию (моделированию при помощи статистических испытаний) с целью предварительной проверки тех или иных модельных предположений перед построением качественной теории.

2. Описание модели и алгоритма ее реализации.

Мишень предполагается однородной, однокомпонентной, двумерной², полу-бесконечной. Первоначальная граница предполагается плоской. Выберем ось OZ так, чтобы ее орт совпадал с ортом внешней нормали изначальной границы (т.е. по мере эволюции z -координаты точек будут убывать). А ось OX так, чтобы ее орт при повороте против часовой стрелки совмещался с ортом оси OZ . Очередное взаимодействие иона с поверхностью моделировалось смещением по нормали точек поверхности на величину ненормированного распределения Гаусса

$$V = C \exp\left(-\frac{(x-x_c)^2}{2\sigma_x}\right),$$

где x_c - (некоторая случайная) точка падения иона, x - координата смещаемой точки.

Рассматривалась начальная стадия возникновения рельефа, поэтому предполагалось, что граница однозначно проектируется на ось OX . Во время каскада столкновений происходит интенсивное смещение поверхностных атомов, что, возможно, приводит к микроскопическому перемешиванию, “сглаживающему” микронеровности и не дающему образоваться разрывам производных (по крайней мере первой и второй). Поэтому решение задачи искалось в классе функций, имеющих непрерывные производные до второй включительно. В [6, 7] описаны сплайн-разностные схемы для аппроксимации искомой функции при решении уравнений параболического типа. Такие схемы позволяют получить решение на всей области задания и не требуют дополнительной интерполяции. В нашей задаче привлечение аппроксимации при помощи сплайна вызвано необходимостью для вычисления смещений нахождения тангенса угла наклона нормали, который выражается через $\partial z/\partial x$.

¹ для однокомпонентной мишени характеристикой будет форма, для многокомпонентной дополнительно концентрационный состав

² двумерность, возможно, может реализовываться при наличии выделенного направления, например, при наклонном падении пучка.

Поэтому поверхность описывалась при помощи полиномиального кубического сплайна. Вместо бесконечной границы рассматривалась периодически повторяющаяся ее часть (длина которой принималась в расчетах равной 1). Это приводит к периодической задаче для сплайна [8], трехточечная схема уравнений которой решалась при помощи алгоритма циклической прогонки [9]. Таким образом, общая схема имитации состоит из задания начальной плоской формы границы и повторения в цикле испытания:

- аппроксимации поверхности сплайном;
- генерации случайной точки падения иона;
- вычисления смещений, которые он произвел

пока не будет выполнено достаточное количество испытаний.

3. Результаты и их обсуждение.

На программе, реализующей описанную выше схему, были выполнены расчеты при различных значениях σ_x (0.05, 0.01, 0.005) и $C = 0.01\sigma_x$. (На рис. 1 и рис. 2 приведены графики Z как функции координаты X и числа испытаний при $\sigma_x = 0.005$.) Во всех случаях наблюдалась качественно похожая картина.

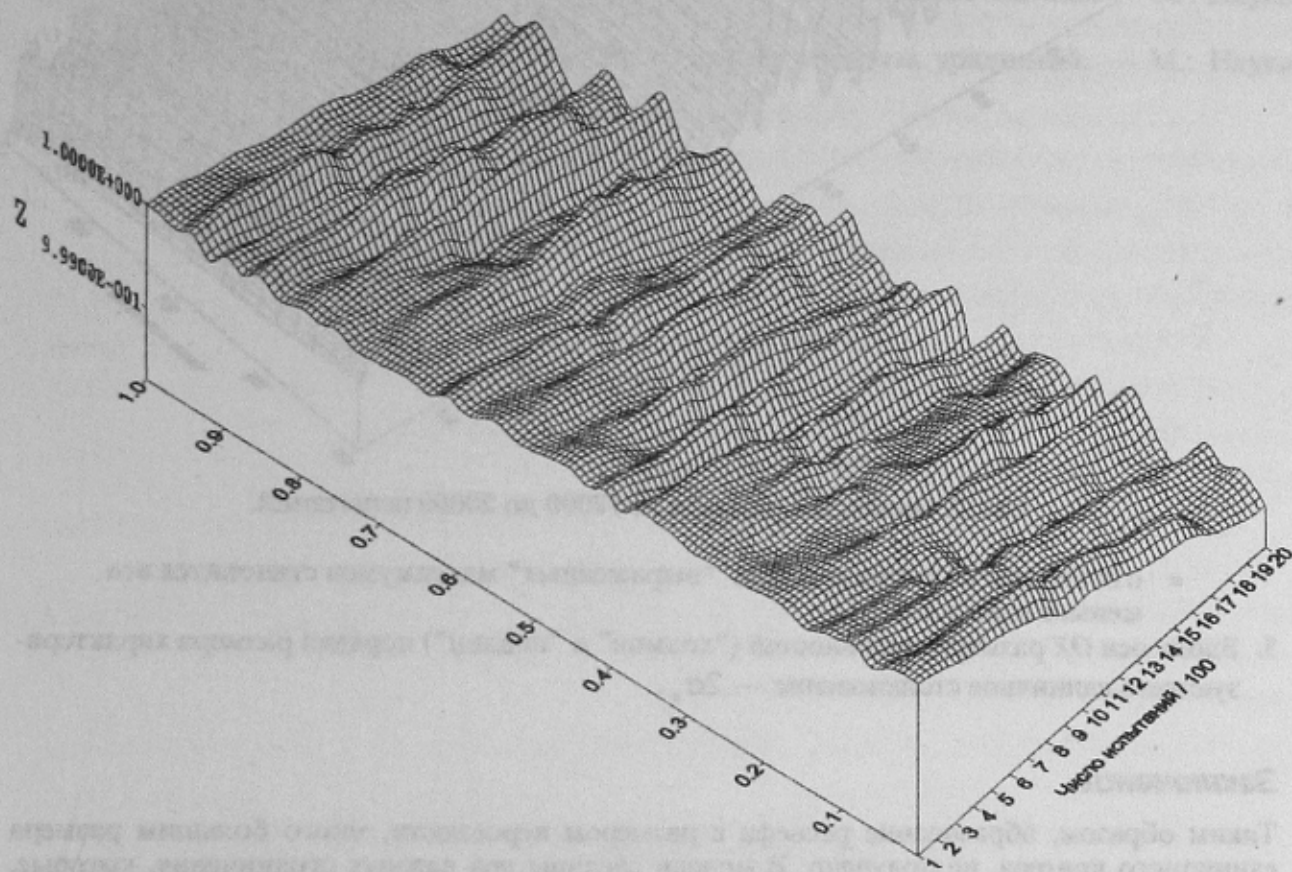


Рис. 1. Эволюция рельефа от 100 до 2000 испытаний.

1. Среднее количество “выраженных” максимумов зависит от величины σ_x : чем она меньше, тем их больше.
2. С увеличением числа испытаний
 - форма границы (рельеф) замедляет скорость изменения от испытания к испытанию (при большом числе испытаний “холм”, на котором достигается максимум (минимум) рельефа в один момент времени, остается таковым на протяжении тысяч испытаний).
 - усредненная по достаточному количеству испытаний величина разности между точками с максимальным и минимальным значением Z растет, стремясь к зави-

сящей от величины σ_x горизонтальной асимптоте, причем она возрастает с уменьшением σ_x .

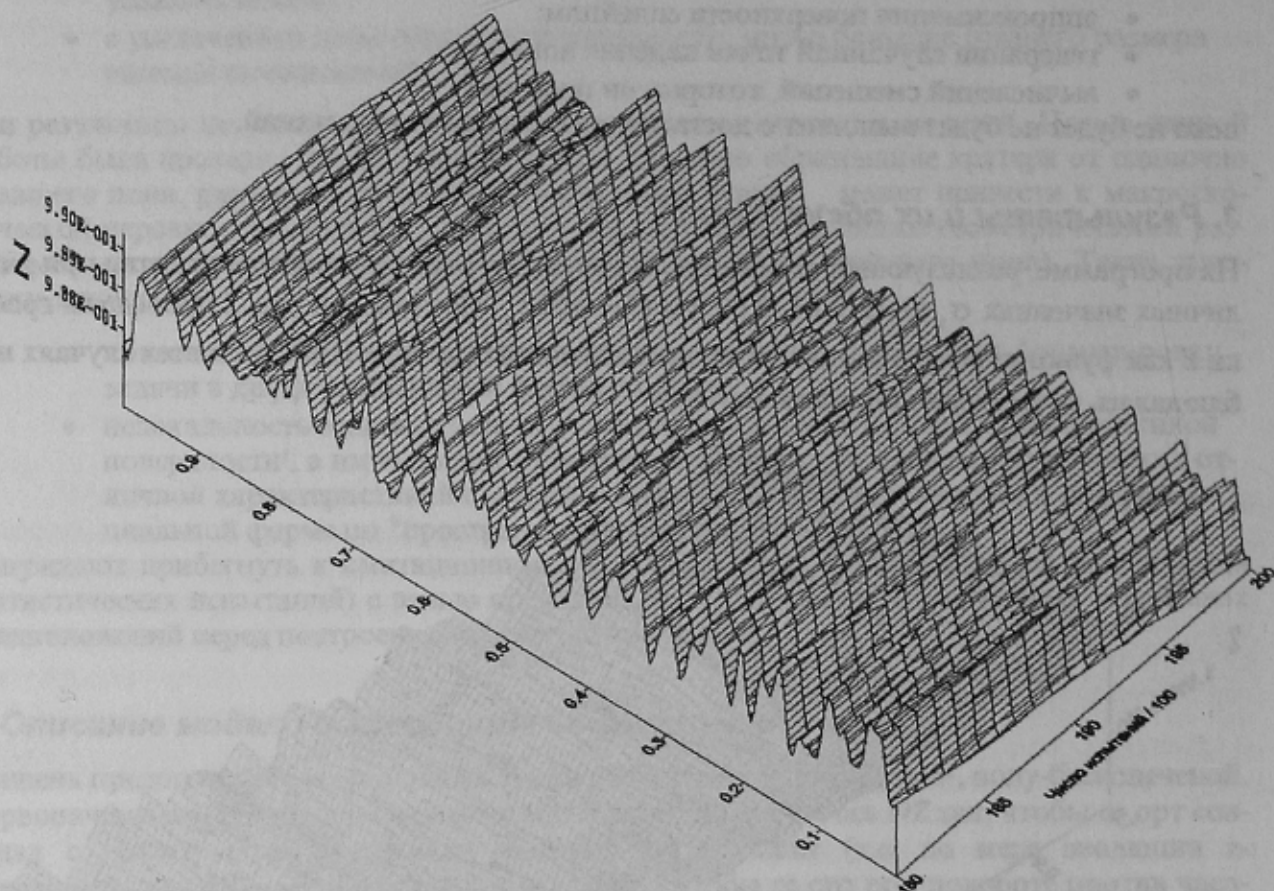


Рис. 2. Эволюция рельефа от 18000 до 20000 испытаний.

- отклонение от среднего числа “выраженных” максимумов становится все меньше и меньше.
3. Вдоль оси OX размеры неровностей (“холмов” и “впадин”) порядка размера характеризующего единичное столкновение — $2\sigma_x$.

Заключение

Таким образом, образование рельефа с размером неровности, много большим размера единичного кратера, не получено. В модели сделаны два важных ограничения, которые, возможно, приводят к такому результату. Во-первых, единичный кратер не имеет форму кратера, полученного в результате усреднения по всевозможным реализациям (простейший способ преодоления этого ограничения состоит в генерации формы распределения смещения в виде распределения со случайной величиной максимума и случайной асимметрией¹). Во-вторых, не учтена зависимость скорости распыления от формы поверхности. Может быть, учет одного из этих факторов или их обоих приведет к наблюдаемой динамике образования рельефа.

¹ наиболее подходящей кривой имеющей асимметрию является распределения Пирсон IV

Литература

1. Глебов А.Л., Комаров В.А., Кононов А.Н. Моделирование некоторых процессов травления и осаждения. / Пакеты прикладных программ. Математическое моделирование. М.: Наука, 1989. 128 с. (Алгоритмы и алгоритмические языки).
2. Вослюс Й., Прапявичюс Л. Процессы на поверхности твердых тел, активируемые ионными пучками. — Вильнюс: Мокслас, 1987. 212 с.
3. Carter G., Nobes M.J., Katardjiev I.V. The Effect of Atomic-scale Etch Pit Formation on Depth Resolution in Sputter Profiling. // Surf. Interface Anal v.15 (N17) p. 447-450 (1990).
4. Wilson I.H., Zheng N.J., Knipping U., Tsong I.S.T. Effects of isolated atomic collision cascades on SiO₂/Si interfaces studied by scanning tunneling microscopy. // Phys. Rev. B. 38(12) p. 8444-8450 (1988).
5. Wilson I.H., Zheng N.J., Knipping U., Tsong I.S.T. Scanning tunneling microscopy of an ion-bombarded PbS(001) surface. // Appl. Phys. Lett. 53(21), p. 2039-2041, (1988).
6. Ильин И.А., Лукьянов А.Т. Сплайн-разностные схемы и их приложения. — Алма-Ата:1977. 67 с.
7. Охлопков Н.М. О некоторых разностных методах решения задач для дифференциальных уравнений. — Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1986. 209 с.
8. Стечкин С.Б., Субботин Ю.Н. Сплайны в вычислительной математике. — М.: Наука, 1976, 248 с.
9. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. — М.: Наука, 1978, 367.