

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЗАРЯДА В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МИШЕНИ, ЭКСПОНИРУЕМОЙ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

Грачёв Е.А., Негуляев Н.Н., Черёмухин Е.А.

(Москва)

На основе метода Монте-Карло производится расчет заряда, образующегося в процессе облучения мишени электронным пучком. Показано, что использование модели генерации вторичных электронов позволяет оценить распределение не только отрицательного, но и положительного поверхностного заряда, образующегося в результате вторичной эмиссии. Произведено моделирование динамики к равновесному состоянию образовавшегося заряда. Для решения системы уравнений, описывающей релаксацию заряда в трехмерном случае, разработан специальный вычислительный алгоритм. Приведены примеры.

Simulation of charge dynamics in a dielectric target during irradiation by an electron beam

Eugene A. Cheremukhin, Eugene A. Grachev, Nikolay N. Negulyaev

(Moscow)

On the basis of Monte Carlo simulation model of an electron scattering in a solid distribution of a charge produced during exposure is presented in the paper. There is shown that using a model of generation of secondary electrons adequately estimates positive charge as well as negative one. The modeling of dynamics of produced charge to behavior state is presented. Special computational algorithm was developed to solve a system of equations that describes charge relaxation in three-dimensional case. The examples are given.

Введение

Одним из основных аспектов взаимодействия излучения с органическими диэлектриками является способность последних хорошо накапливать заряд, инжектируемый в них электронным облучением. В связи с этим актуальным является теоретическое исследование вопроса о том, как накапливается заряд в процессе облучения, как долго внесенный заряд сохраняется в таких материалах и какие условия влияют на скорость разрядки образца. Эффект зарядки диэлектрика особенно сильно проявляется при длительном облучении диэлектрика, что может приводить к случайным, хаотическим отклонениям пучка в процессе облучения, а в ряде случаев пучок может и вовсе не попасть на мишень [1]. Особенно важен учет зарядовых и разрядовых процессов в электронной литографии, когда мишень представляет собой многослойную пластину из различных материалов. Например, в процессе изготовления фотошаблона, облучаемый образец состоит из подложки (как правило, пластина из кремния или стекла) с нанесенным на него тонким слоем металла. Поверх металла обычно напылен слой вещества, называемого резистом, являющимся, как правило, хорошим диэлектриком. При литографии на таких структурах на поверхности резиста обычно наблюдается наличие тонкого слоя положительного заряда [2-4] (рис. 1).

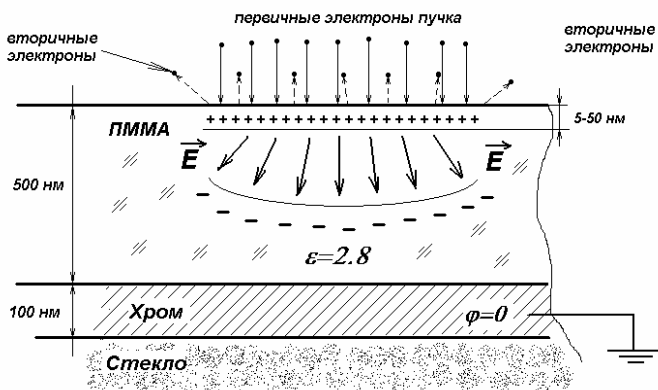


Рис.1 Поперечный срез фотошаблона (ПММА-хром-стекло).

Изучение процессов динамики заряда в процессе облучения и после его прекращения поможет повысить точность передаваемого при экспонировании рисунка и, следовательно, увеличить коэффициент выхода годных изделий при производстве интегральных микросхем.

1. Моделирование взаимодействия электронного пучка с веществом

Для расчета плотности распределения вносимого в процессе облучения заряда использован ставший уже классическим для подобного рода расчетов, метод Монте-Карло [5,6]. В этом методе обычно для описания процессов упругого рассеяния на относительно легких элементах при энергии пучка более 5 кэВ используется модифицированная формула Резерфорда с экранировкой [6]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z(Z+1)e^4}{4E^2} (1 - \cos\theta + 2\beta)^{-2}, \quad \beta = 3.43 \cdot 10^{-3} \frac{Z^{2/3}}{E}$$

здесь E – энергия электрона (кэВ), β - параметр экранировки.

Ионизация вещества в первом приближении так называемых «быстрых вторичных электронов» (с энергией больше 2 кэВ) описывается в виде сечения (Evans) [5]:

$$\frac{dE}{d\varepsilon} = \frac{\pi e^4}{E^2} Z \left(\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} \right)$$

В результате такого взаимодействия рождается вторичный электрон с энергией $\Delta E = \varepsilon E$, где ε - доля передаваемой вторичному электрону энергии. В точке соударения остается положительно ионизированный атом.

Торможение электронов в веществе в общем случае выражается при помощи модифицированной формулы Бете, которая для многокомпонентного материала имеет вид (Joy, Lou) [6]:

$$\frac{dE}{ds} = -\frac{2\pi e^4 \rho N_a}{E} \sum_{i=1}^{N_{el}} C_i \frac{Z_i}{A_i} \ln \left(\frac{1.166(E + 0.85J_i)}{J_i} \right),$$

где N_{el} – число элементов в молекуле, J_i - средний потенциал ионизации вещества, Z_i - атомный номер i -го элемента, ρ - плотность вещества (г/см^3), A_i – атомная масса i -го элемента (г/моль).

В используемой модели неучтенные потери энергии описываются в виде разницы потерь энергии, вычисленной по формуле Бете и средней энергии, переданной вторичному электрону за один акт ионизации [6]:

$$\left(\frac{dE}{ds}\right)_{total} = \left(\frac{dE}{ds}\right)_{Bethe} - \left(\frac{dE}{ds}\right)_{Evans},$$

где $\left(\frac{dE}{ds}\right)_{Evans} = \sum_{i=1}^{N_{el}} N_i Z_i \int_{\epsilon_c}^{1/2} E \epsilon \left(\frac{dE}{d\epsilon}\right)_{Evans} d\epsilon$, N_i – концентрация

атомов i -го сорта, ϵ_c – пороговый уровень передаваемой энергии (в модели используется значение 0.001).

2. Зарядка фотошаблона в процессе облучения

Для моделирования в качестве образца был взят фотошаблон, состоящий из 2-х слоев – ПММА ($C_5H_8O_2$) толщиной 500нм, и хром - 100нм, нанесенные на достаточно толстую стеклянную подложку (для упрощения расчетов использована формула – SiO_2) (рис. 1). Хотя в целом образец заряжается отрицательно, в процессе экспонирования, часть вторичных электронов уходит с образца, оставляя на поверхности мишени тонкий слой положительного заряда. Это показано на рис. 2 при моделировании облучения бесконечно тонким пучком с энергией 20 кэВ полупространства из однородного диэлектрика - ПММА.

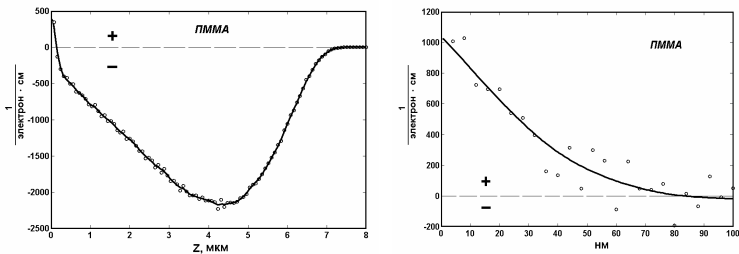


Рис. 2. Распределение плотности заряда по глубине в полупространстве ПММА при энергии пучка (слева). Кривая распределения плотности заряда по глубине в верхнем, тонком 100 нм слое ПММА (справа).

Аналогичная ситуация наблюдается и при расчетах для фотошаблона (рис.3).

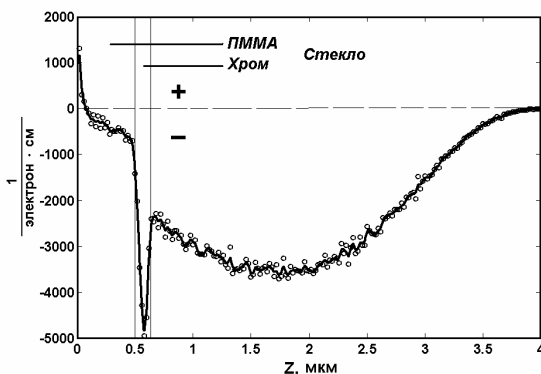


Рис. 3. Интегральная плотность распределения заряда по глубине.

3. Расчет электрического поля схемой на установление

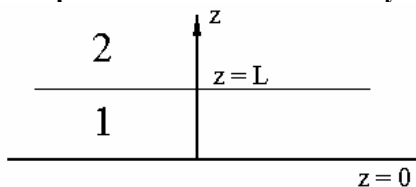


Рис. 4. Расчет электрического поля в слое диэлектрика

Одной из важной характеристик зарядки диэлектрика является потенциал внутри резиста и вблизи поверхности, образуемый внесенным зарядом. Качественные модели, такие как, например, модель «двойного слоя» [2-4] не всегда могут дать адекватную оценку зарядовых явлений происходящих в процессе облучения. Поэтому наиболее точную оценку поля может дать только численный расчет.

Уравнение Пуассона, которое необходимо решить для определения потенциала электрического поля, выглядит так:

$$\Delta\varphi_1 = -ec(\vec{r})/\varepsilon\varepsilon_0 \quad \Delta\varphi_2 = 0$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial\varphi_{1,2}}{\partial x} \Big|_{x=\pm\infty} = 0 \\ \varphi_1 \Big|_{z=0} = 0 \end{array} \right\} \quad \left. \begin{array}{l} \frac{\partial\varphi_{1,2}}{\partial y} \Big|_{y=\pm\infty} = 0 \\ \varepsilon \frac{\partial\varphi}{\partial z} \Big|_{z=L-0} = \frac{\partial\varphi}{\partial z} \Big|_{z=L+0} \end{array} \right\}$$

$$\frac{\partial\varphi_2}{\partial z} \Big|_{z=+\infty} = 0$$

где φ_1 – потенциал в области 1 (рис. 4); φ_2 – потенциал в облас-

ти 2; L – толщина слоя резиста; ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость резиста; ϵ_0 – абсолютная диэлектрическая проницаемость вакуума; $c(\vec{r})$ – пространственная концентрация заряда. Для нахождения решения приведенных уравнений очень удобно использовать схему на установление счета [7].

На рис. 5 изображены графики потенциала для полупространства из ПММА и фотошаблона (описанного в п.2). Для моделирования были взяты некоторые характерные значения тока пучка (0.5 нА) и времена импульсов облучения (5, 10, 15 и 20 мкс) – для полупространства. Расчет для фотошаблона произведен для характерных доз облучения резистных пленок ПММА, покрывающих диапазон – 25-100 мкКл/см².

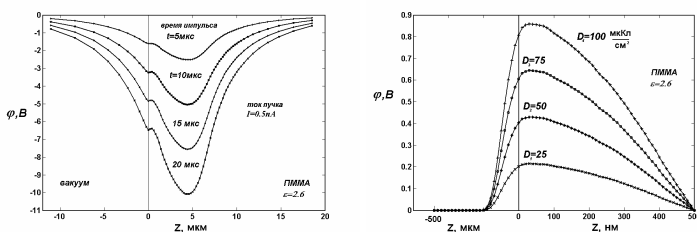


Рис. 5. Расчет потенциала для полупространства из ПММА (слева) и для фотошаблона (справа).

Необходимо, однако, помнить, что такой подход также является достаточно приблизительным и дает только качественную оценку явления, так как он не учитывает влияния уже внесенного заряда на подлетающие электроны и на электроны внутри мишени, что в некоторых случаях может давать существенные отличия [8].

4. Моделирование динамики заряда в диэлектрической мишени

В настоящее время в основе всех моделей радиационной проводимости органических диэлектриков лежит феноменологическая модель полной концентрации (МПК) [9]. Согласно МПК динамика избыточных носителей к равновесному состоянию описывается с помощью следующих пяти релаксационных механизмов: 1) дрейф носителей под действием создаваемого ими электрического поля; 2) диффузия, 3) объемная генерация электронов и дырок, 4) рекомбинация носителей, 5) захват элек-

тронов и дырок на ловушки. Учет всех этих механизмов приводит к довольно сложной системе интегро-дифференциальных уравнений, построение аналитического решения которой в общем случае невозможно.

В связи с возросшими вычислительными мощностями стало возможным создание алгоритма, строящего численное решение системы уравнений МПК, взятой в ее максимально полном виде при любых значениях феноменологических коэффициентов. Ниже излагается система уравнений, описывающая динамику носителей заряда в диэлектрических средах, краткое описание методики построения решения ее уравнений, а также иллюстрация работы модели путем сравнения получаемых на ее основе результатов с известными экспериментальными данными.

Для определенности рассмотрим диэлектрик как пластину, с одной стороны которой находится заземленный слой металла, а с другой – вакуум (рис. 1). Такие структуры очень часто встречаются в технологии электронно-лучевой литографии, где пучок электронов с энергией порядка десятков кэВ проникает в тонкий слой радиационно-чувствительного резиста (органического диэлектрика), нанесенного на металлическую пленку. Будем считать, что энергетический спектр центров захвата для электронов состоит из M_n , а для дырок из M_p различных энергетических уровней. Тогда спектр $S(E)$, например, электронных ловушек имеет вид

$$S(E) = \sum_{m=1}^{M_n} N_m \delta(E - E_m)$$

где N_m – пространственная концентрация ловушек с энергией E_m .

Систему уравнений, описывающая динамику носителей заряда в рассматриваемом диэлектрике, выглядит так [9]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n_f + \sum_{i=1}^{M_n} n_i \right) = G - \alpha n_f \left(p_f + \sum_{j=1}^{M_p} p_j \right) - \alpha' \left(n_f + \sum_{i=1}^{M_n} n_i \right) p_f + \frac{\mu_n k T}{e} \Delta n_f - \mu_n \nabla(n_f \nabla \varphi) \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(p_f + \sum_{j=1}^{M_p} p_j \right) = G - \alpha n_f \left(p_f + \sum_{j=1}^{M_p} p_j \right) - \alpha' \left(n_f + \sum_{i=1}^{M_n} n_i \right) p_f + \frac{\mu_p k T}{e} \Delta p_f + \mu_p \nabla(p_f \nabla \varphi) \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = k_3 n_f (N_i - n_i) - \frac{n_i}{\tau_i} - \alpha' p_f n_i, \quad i = 1, \dots, M_n \quad (3)$$

$$\frac{\partial p_j}{\partial t} = k_3' p_f (P_j - p_j) - \frac{p_j}{\nu_j} - \alpha n_f p_j, \quad j = 1, \dots, M_p \quad (4)$$

$$\Delta \varphi = -\frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(p_f + \sum_{j=1}^{M_p} p_j - n_f - \sum_{i=1}^{M_n} n_i \right) \quad (5),$$

здесь n_f , p_f – концентрации свободных электронов и дырок с истинными подвижностями μ_n и μ_p ; G – скорость генерации свободных электронов и дырок; n_i , p_j – концентрации электронов и дырок на ловушках; N_i , P_j – концентрации i -го и j -го уровней захвата для электронов и дырок с временами термического освобождения из них τ_i и ν_j соответственно; α , α' – константы скоростей бимолекулярной рекомбинации носителей; k_3 , k_3' – скорости захвата электронов и дырок на ловушки; φ – электростатический потенциал; ε – относительная диэлектрическая проницаемость диэлектрика; ε_0 – абсолютная проницаемость вакуума; T – температура диэлектрика; e – заряд электрона; k – постоянная Больцмана; L – толщина слоя диэлектрика.

Граничные условия для системы (1)-(5) имеют следующий вид:

$$\left. \begin{array}{l} n_f \Big|_{z=0}^{x,y=\pm\infty} = n_{f0} \\ p_f \Big|_{z=0}^{x,y=\pm\infty} = p_{f0} \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} \left(\frac{\partial n_f}{\partial z} - \frac{e}{kT} n_f \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=L-0} = 0 \\ \left(\frac{\partial p_f}{\partial z} + \frac{e}{kT} p_f \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=L-0} = 0 \end{array} \right\} \quad (6)$$

$$\left. \begin{array}{l} \varphi \Big|_{z=0} = 0 \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x=\pm\infty} = \frac{\partial \varphi}{\partial y} \Big|_{y=\pm\infty} = \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=\pm\infty} = 0 \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=L-0} = \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=L+0} \\ \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=L-0} = \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=L+0} \end{array} \right\} \quad (7),$$

здесь n_{f0} , p_{f0} – равновесные концентрации свободных электронов и дырок.

Начальные условия:

$$\left. \begin{array}{ll} n_i|_{t=0} = n_{i0} + g_n(\bar{F}) & n_i|_{t=0} = n_{i0}, \quad i = 1, \dots, M_n \\ p_j|_{t=0} = p_{j0} + g_p(\bar{F}) & p_j|_{t=0} = p_{j0}, \quad j = 1, \dots, M_p \end{array} \right\} \quad (8),$$

где n_{i0} , p_{j0} - концентрация электронов на ловушках i -го уровня и дырок на ловушках j -го уровня в равновесном состоянии; $g_n(\bar{F})$, $g_p(\bar{F})$ - избыточные концентрации носителей в начальный момент времени.

Метод решения. Опишем кратко метод решения, который использован для решения системы (1)-(5) с граничными (6)-(7) и начальными (8) условиями. Покрываем область, в которой строится решение, сеткой, равномерной по каждой из пространственных осей. Так как величина временного шага Δt_m , обеспечивающая устойчивость явной схемы, на много порядков меньше характерного времени развития процесса, необходимо обязательно использовать неявную разностную схему. Для численного интегрирования (1)-(5) применяется локально-одномерный метод [7]. В начале каждого временного шага, прежде всего, с помощью хорошего известного метода отражений строится решение уравнения Пуассона (5). Далее из условия устойчивости выбранной разностной схемы определяется величина Δt_m , и временной промежуток $[t_m, t_m + \Delta t_m]$ разбивается на три равные части. Линеаризация уравнений (1)-(4) и переход их к разностным аналогам при этом происходят по стандартной схеме [7]. В первой трети промежутка $[t_m, t_m + \Delta t_m]$ в линеаризованных разностных аналогах соотношений (1)-(4) совершается проход вдоль оси X, во второй трети – вдоль Y, в третьей – вдоль Z. На этом выполнение одного временного шага заканчивается.

На рис. 6, 7 приведен пример моделирования динамики носителей заряда в слое диэлектрика после прекращения облучения. На рисунках показано изменение концентрации носителей вдоль прямой, лежащей на оси пучка. Для моделирования взят образец, описанный в п.2, т.е. стеклянная подложка, на которую последовательно нанесены слои хрома толщиной 100нм и ПММА толщиной 500нм. Облучение производилось бесконечно тонким пучком с энергией 20 кэВ.

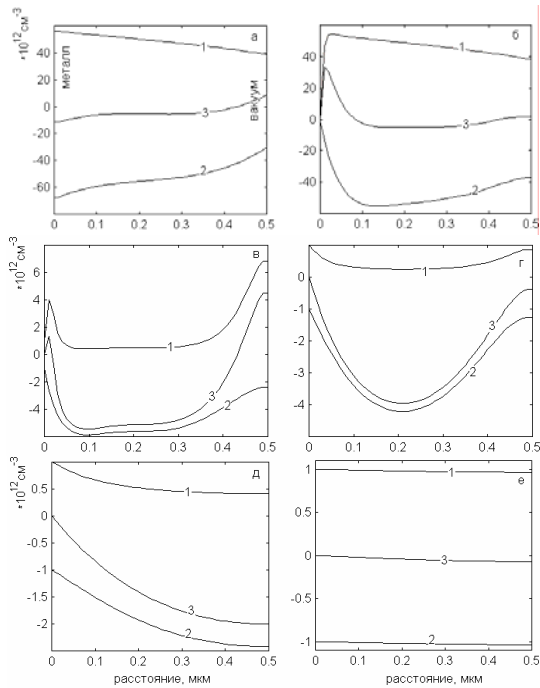


Рис. 6. Динамика носителей вдоль оси пучка в слое резиста. 1 – концентрация положительного заряда; 2 – отрицательного; 3 – суммарного. Значения расчетных параметров: $\mu_n = 10^{-8} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{сек})$; $\mu_p = 10^{-10} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{сек})$; $\tau = 10^{-4} \text{ сек}$; $L = 0.5 \text{ мкм}$; $N_i = 10^{21} \text{ м}^{-3}$; $\alpha = 10^{-16} \text{ м}^3/\text{сек}$; $\alpha' = 0$. Так как $\mu_n/\mu_p \ll 1$, то положительный заряд уходит в металл гораздо медленнее отрицательного. Значение константы рекомбинации α невелико, носители не успевают рекомбинировать, и суммарный заряд получается положительным.

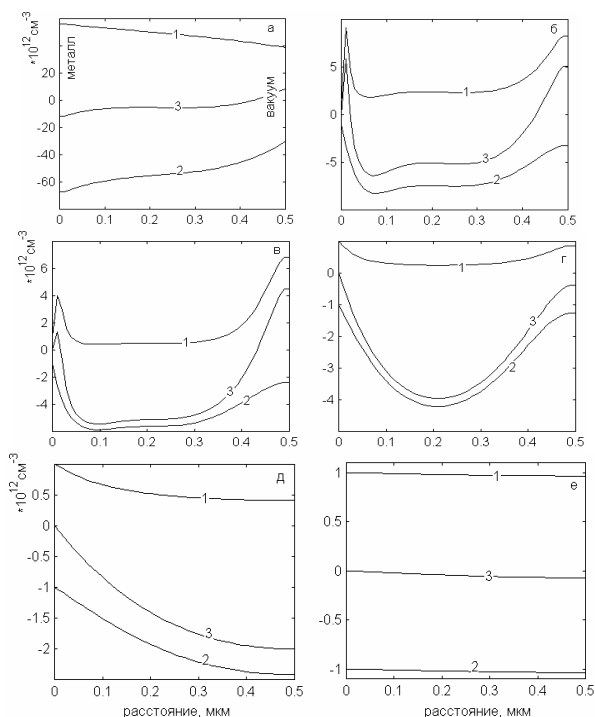


Рис. 7. Динамика носителей вдоль оси пучка в слое резиста. 1 – концентрация положительного заряда; 2 – отрицательного; 3 – суммарного. Значения расчетных параметров: $\mu_n = 10^{-8} \text{ м}^2/(\text{В}\cdot\text{сек})$; $\mu_p = 10^{-10} \text{ м}^2/(\text{В}\cdot\text{сек})$; $\tau = 10^{-4} \text{ сек}$; $L = 0.5 \text{ мкм}$; $N_t = 10^{21} \text{ м}^{-3}$; $\alpha = 10^{-13} \text{ м}^3/\text{сек}$; $\alpha' = 0$. Прежде, чем основная часть электронов уходит в металл, происходит рекомбинация носителей друг с другом (значение константы рекомбинации α велико), и, так как электронов в начальный момент времени было больше, то дырок в образце в результате почти не остается.

Закключение. На базе метода Монте-Карло произведен расчет заряда, образующегося в объеме образца в процессе его облучения электронным пучком. В рамках построенной модели оценены размеры слоя положительного заряда, возникающего на границе образец-вакуум. Разработана методика расчета потенциалов электрических полей, образующихся в процессе облучения внутри и вне мишени. На основе феноменологической модели полной концентрации разработана модель релаксации

носителей электрического заряда к равновесному состоянию. Получены качественные результаты, находящиеся в хорошем согласии с экспериментальными данными, приведенными в работах других авторов.

Литература.

1. H.Itoh, K.Nakamura "Charging effects on trilevel resist and metal layer in electron-beam lithography" // J.Vac.Sci.Technol.B 9(6), 1991.
2. J.Cazaux "Some considerations on the electric field induced in insulators" // J.Appl.Phys., 59(5), 1986.
3. D.Melchinger, S.Hofmann "Dynamic double layer model: description of time dependent charging phenomena in insulators under electron beam irradiation" // J.Appl.Phys, 78(10), 1995.
4. H.Chen, H.Gong, C.R.Ong "Determination of charge distribution volume in electron irradiated insulators by scanning electron microscope" // J.Appl.Phys.78(6),1995.
5. К.А. Валиев «Физика субмикронной литографии» // М.:Наука, 1990.
6. D.C.Joy "Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis" // Oxford University Press, 1995.
7. А.А. Самарский, А.В. Гулин. Численные методы, М., Наука, 1989.
8. M.Kotera and H.Suga "A simulation of keV electron scattering in a charged-up specimen" // J.Appl.Phys. 63(2), 1988
9. С.Г. Боев, В.Я. Ушаков. Радиационное накопление заряда в твердых диэлектриках. М., Энергоатомиздат, 1991.