

© А.А. ШМИДБЕРСКАЯ, С.Ю. УДОВИЧЕНКО

Polovinca777@rambler.ru, udotgu@mail.ru

УДК 621.384

**ИССЛЕДОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ
ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ОСТРОСФОКУСИРОВАННОГО ПУЧКА
ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ НА ПЛОСКИЕ ДВУХСЛОЙНЫЕ МИШЕНИ**

АННОТАЦИЯ. С помощью численного моделирования исследовано распределение нестационарных температурных полей на поверхности и в теле мишени при импульсном воздействии остросфокусированного ионного пучка тяжелых ионов. Повышение температуры в зоне облучения на подложке является незначительным и не опасным с точки зрения перестройки структуры, сублимации и плавления. Сравнение распределения температурного поля в мишени с нанесенной пленкой и без нее показывает, что максимальная температура однослойной подложки не намного выше по сравнению с двухслойной.

SUMMARY. The distribution of nonstationary temperature fields on the surface and in the body of the target under impact of highly-focused heavy ions beam is investigated with the usage of numerical modeling. Temperature increase in the radiation area at substrate layer is insignificant and safe towards restructuring, sublimation and melting. The comparison of temperature field distribution in target with film coating and without one shows that maximum temperature of the single-layer substrate is only slightly higher in comparison with the two-layered one.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Уравнение теплопроводности, нестационарные температурные поля, пучок тяжелых ионов, двухслойные мишени.

KEY WORDS. Heat equation, unsteady temperature fields, heavy ions beam, two-layered target.

В настоящее время важнейшим направлением научно-технического прогресса является миниатюризация элементной базы вычислительной техники и создание принципиально новых материалов на основе нанообъектов. Одной из проблем, стоящей перед наноэлектроникой и наноробототехникой, является поиск высокопроизводительной технологии для создания структур в нанометровом масштабе. Анализ существующих технологий показывает, что наиболее перспективными являются способы ионно-пучковых технологий, которые благодаря легкости управления пучком заряженных частиц, простоте модуляции энергии пучка в широком диапазоне, воспроизводимости и контролируемости условий режимов параметров обработки, а также высокой производительности соответствуют всем требованиям, предъявляемым к эффективным способам создания наноструктур. Значительный интерес при формировании наноструктур наноразмерными пучками тяжелых ионов представляют режимы обработки в области нелинейного распыления, характеризующейся высокими коэффициен-

тами распыления, высокой линейной скоростью движения пучка по поверхности, а, следовательно, и малым временем экспозиции.

Зависимость структуры тонких пленок от температуры при формировании наноразмерных объектов на подложке пучком тяжелых ионов создает необходимость изучения динамики температурных полей в зоне действия ионного пучка и исследования физики происходящих процессов, что обеспечит оптимизацию режимов работы ионно-лучевых установок и контроля в реально масштабе времени рабочих параметров.

В основе физических явлений, вызываемых в твердом теле воздействием ионного пучка, лежат процессы рассеяния энергии, выделенной пучком в приповерхностном слое вещества. Толщина этого слоя мала и приблизительно равна пробегу заряженных частиц в твердом теле. При воздействии на подложку ионов средних энергий (50-80 кэВ) основным каналом диссипации энергии является теплопроводность.

Рассмотрим мишень в виде круглой пластины радиусом R , толщиной h с нанесенной на одну из поверхностей пленкой толщиной d , плотностью материала пленки ρ_f и подложки ρ , удельной теплоемкостью c_f и c , коэффициентом теплопроводности материала λ_f и λ , начальной температурой T_0 . Пусть обе стороны пластины и боковая поверхность охлаждаются средой с температурой T_c , теплообмен характеризуется коэффициентами теплообмена α_f и α . Если пренебречь потоком лучистой энергии, то в случае отсутствия охлаждения в вакууме T_c принимается равным начальной температуре, соответственно коэффициенты α_f и α будут равны нулю. Здесь индекс f при коэффициентах относится к материалу пленочного покрытия. В первом приближении примем, что теплофизические параметры не зависят от температуры и от координат.

В некоторый момент времени $t = 0$ на поверхность, покрытую пленкой, начинает действовать тепловой поток от подвижного точечного источника энергии — ионного пучка, который осуществляет перемещение с заданной скоростью по некоторой траектории.

Возьмем за точку отсчета центр той поверхности подложки, на которую нанесена пленка. Тогда в цилиндрической системе координат трехмерное нестационарное температурное поле $T(r, \varphi, z, t)$ в подложке описывает следующее дифференциальное уравнение теплопроводности с начальными и граничными условиями:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (1)$$

$$r \in (0, R), \varphi \in (0, 2\pi), z \in (0, h), t > 0;$$

$$T|_{t=0} = T_0, r \in (0, R), \varphi \in (0, 2\pi), z \in (0, h); \quad (2)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_f \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\lambda_f \frac{\partial T}{\partial \varphi} \right) \right] d + \alpha_f (T - T_c) + \psi(r, \varphi), \quad (3)$$

$$r \in (0, R), \varphi \in (0, 2\pi), t > 0;$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=h} = \alpha (T_C - T), \quad r \in (0, R), \varphi \in (0, 2\pi), t > 0; \quad (4)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{z=R} = \alpha (T_C - T), \quad z \in (0, h), \varphi \in (0, 2\pi), t > 0; \quad (5)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0, \quad z \in (0, h), \varphi \in (0, 2\pi), t > 0; \quad (6)$$

$$T|_{\varphi_0} = T|_{\varphi_0+2\pi}, \quad r \in (0, R), z \in (0, h), t > 0; \quad (7)$$

$$\frac{1}{r} \lambda \frac{\partial T}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=\varphi_0} = \frac{1}{r} \lambda \frac{\partial T}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=\varphi_0+2\pi}, \quad r \in (0, R), z \in (0, h), t > 0. \quad (8)$$

Условие (3) является уравнением теплопроводности для пленки, выведенное из рассмотрения баланса тепла в элементе ее площади [1] с учетом граничного условия III рода на поверхности и идеальных условий сопряжения между пленкой. При выводе предполагалось, что пленка настолько тонка, что по всей ее толщине температура в любой точке одинакова, и в качестве первого приближения можно пренебречь ее теплоемкостью.

Функция источника $\psi(r, \varphi, t)$ в условии (3) учитывает поглощение энергии ионного пучка материалом пленки и определяется как

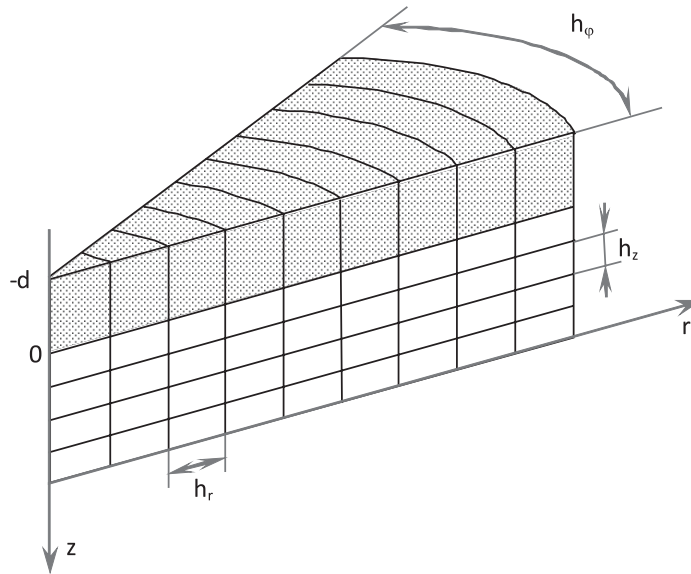
$$\Psi(r = r_1(t), \varphi = \varphi_1(t), t) = q_p,$$

где $r = r_1(t)$, $\varphi = \varphi_1(t)$ — закон перемещения источника по поверхности пленки; $q_p = IE / \pi r_p^2$; I — ток пучка, E — энергия пучка, r_p — радиус пучка.

Отметим, что в уравнении (1) отсутствует слагаемое $W(r, \varphi, t)$, так как проактивный пробег тяжелых ионов с энергией до 50 кэВ сопоставим с толщиной пленки (10-1000 нм), поэтому можно считать, что вся энергия ионного пучка выделяется в толще пленки.

Для численного решения уравнения (1) воспользуемся разностным интегроинтерполяционным методом [2]. Введем на временном интервале сетку с шагом τ . В пространственной области $[0, R] \times [0, 2\pi] \times [0, h]$ введем равномерную сетку $\omega = \{ih_r, jh_\varphi, kh_z\}$ с шагами $h_r = R/N_r$, $h_\varphi = 2\pi/N_\varphi$ и $h_z = h/N_z$, где $N_r + 1$, N_φ , $N_z + 1$ — число точек разбиения по осям r , φ и z соответственно (рис. 1). Также зададим равномерную сетку $\omega^f = \{ih_r, jh_\varphi\}$ с шагами h_r , h_φ в области $[0, R] \times [0, 2\pi] \times [-d, 0]$ (рис. 1). По угловой координате сетки ω , ω^f имеют следующий вид:

$$\varphi = 0, \varphi_1 = h_\varphi, \dots, \varphi_i = i \cdot h_\varphi, \dots, \varphi_{N_\varphi-1} = 2\pi - h_\varphi.$$

Рис. 1. Пространственные сетки ω и ω^f

Центры граней рассматриваемой сетки $\omega = \{ih_r, jh_\phi, kh_z\}$ разбивают пластину на множество элементарных объемов. Проинтегрировав обе части дифференциального уравнения теплопроводности (1) по этим элементарным объемам, учитывая граничные условия (3)–(8), мы получим систему разностных соотношений, которую можно записать в матричном виде.

$$A \cdot \vec{T} = \vec{B}. \quad (9)$$

Система (9) состоит из N уравнений с N неизвестными. Число N определяется формулой

$$N = N_r \cdot N_\phi \cdot (N_z + 1) + N_z + 1.$$

Матрица A системы (9) является сильно разреженной, что позволяет использовать специально разработанные для таких типов систем методы решения. Наиболее эффективными и устойчивыми из них являются проекционные методы, особенно методы, связанные с проектированием на подпространства Крылова. В нашем случае был использован метод бисопряженных градиентов [3], основанный на биортогонализации Ланцоша и экономно использующий оперативную память ПК. Недостатком данного метода является плохая сходимость к решению при увеличении числа неизвестных. Сходимость можно улучшить, введя алгоритм предобуславливания матрицы A . Особенность матрицы A позволило применить экономный упакованный формат хранения по CSR-схеме (Compressed Sparse Row). Также для экономии памяти была проведена симметризация портрета, хранящего данные о номерах столбцов и строк матрицы.

Численные результаты показали достаточно хорошую сходимость используемой схемы. Для верификации результатов было проведено сравнение решения, полученного с помощью данного метода для неподвижного источника в центре подложки в стационарном режиме, и решения, используемого в ин-

женерных расчетах для оценки температурных полей в мишени при воздействии ионного пучка [4]

$$T = \frac{q_p r_p}{\lambda} \cdot \quad (10)$$

Шаг по радиусу пластины h_r равнялся 1 мкм, что в данной программе равносильно воздействию ионного пучка радиусом $r_p=1$ мкм. Результаты численного моделирования распределения температуры вдоль радиуса кремниевой пластины с нанесенной на ее поверхность алмазной пленкой толщиной 100 нм представлены на рис. 2 (кривая а). Распределение температурного поля при $d = 0$ нм, то есть при отсутствии пленки на поверхности подложки показано на рис. 2 (кривая б). Выбор значений R и h определялся глубиной проникновения температурного поля Δ для данного значения времени воздействия. Глубина проникновения температурного поля оценивалась исходя из одномерного уравнения теплопроводности $\Delta \approx \sqrt{at}$. Значения теплофизических параметров были взяты из [5].

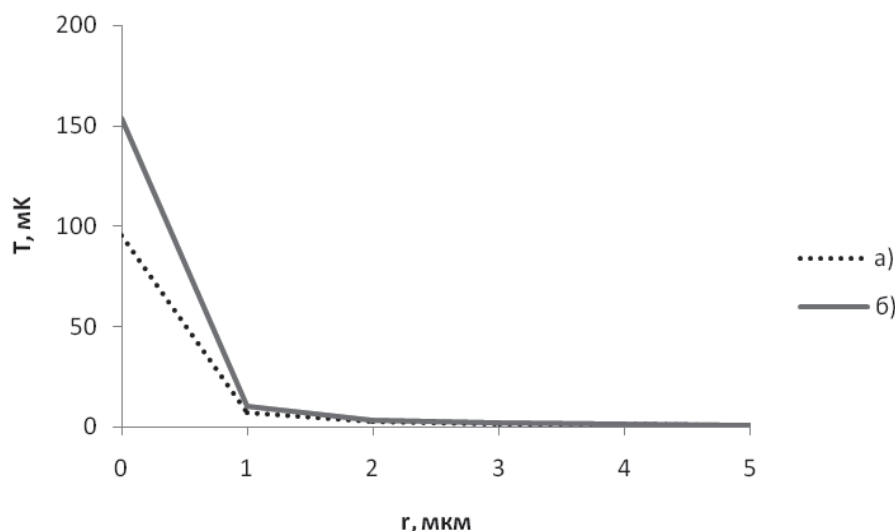


Рис. 2. Распределение избыточной температуры T по радиусу на поверхности пластины ($z=0$) при $N_z=50$, $N_r=100$, $N_l=18$, $N_i=100$: а) расчет температуры для кремниевой пластины с нанесенной на нее алмазной пленкой; б) расчет температуры для кремниевой пластины

Расчет температуры по формуле (10) для кремниевой пластины при данных значениях теплового потока и радиуса пучка дает результат равный 150 мК, который сравним со значением, получаемым численно на оси пучка. Значения температуры, получаемые при учете пленочного покрытия, показывают, что пленка сильно влияет на тепловые поля в образце. Это может быть связано с высокой теплопроводностью алмазной пленки, выбранной нами в качестве исследуемой, и растеканием теплового потока по ее поверхности.

Были также получены предварительные результаты распределения температурного поля по поверхности и вглубь пластины при спиральном движении пучка, которые показывают, что в отсутствие охлаждения при длительном ионном воздействии температура будет приблизительно одинакова по всей толщине подложки. В данном случае, следуя определению теплового потока, можно оценить среднюю избыточную температуру в мишени как

$$\Delta T = \frac{IE}{\pi r C_p R^2 h} t. \quad (11)$$

Согласно формуле (11) при диаметре кремниевой пластины 30 мм и толщине 3 мм, и параметрах пучка, используемых в предыдущих вычислениях, среднее повышение температуры при 10 часах непрерывной работы составляет не более 0,1 К.

Таким образом, проводимые расчеты показали, что динамика температурных полей на поверхности и в теле мишени определяется множеством параметров, наиболее значимыми из которых являются энергия и ток ионного пучка, отношение массы падающего иона к массе распыляемого атома и теплопроводность материала мишени. Повышение температуры в зоне облучения на подложке при импульсном воздействии остросфокусированного ионного пучка по результатам проведенных исследований является незначительным и не опасным с точки зрения перестройки структуры, сублимации и плавления. Сравнение распределения температурного поля в мишени с нанесенной пленкой и без нее показывает, что максимальная температура однослойной подложки не намного выше по сравнению с двухслойной. Предварительные результаты исследования температурных полей при движении пучка по поверхности мишени показывают, что влияние остаточной температуры при последующем проходе пучка в соседней области поверхности может быть существенно при интенсивных режимах обработки в условиях недостаточно эффективного охлаждения пластины.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Карслоу К., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 488 с.
2. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 553 с.
3. Баландин М.Ю., Шурина Э.П. Методы решения СЛАУ большой размерности. Новосибирск: Изд-во НГГУ, 2000. 70 с.
4. Физические величины: Справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
5. Шмидберская А.А., Шмидберский П.А., Кислицын А.А. Использование пучков тяжелых ионов для обработки поверхности твердых тел // Теплофизика, гидродинамика, теплотехника: Сб. статей. Тюмень: ТюмГУ, 2008. Вып. 4. С. 116-122.