

УДК 537.533.35.7 : 519.245

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ЗАРЯДКИ ТОНКИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Е. А. Черемухин, Н. Н. Негуляев, С. С. Борисов, С. И. Зайцев^{*)}, Грачев Е.А.

(кафедра компьютерных методов физики)

E-mail: eugene@cmp.phys.msu.su, bot@cmp.phys.msu.su

На основе метода Монте-Карло в приближении однократного рассеяния рассмотрены различные модели взаимодействия электронов (с энергиями 1–100 кэВ) с веществом. В рамках этих моделей описан эффект зарядки в облучаемом образце, состоящем из тонкого слоя диэлектрика, нанесенного на металл. Произведен расчет распределения потенциала электрического поля и поляризации в объеме мишени. Показано, что зарядка верхнего слоя образца может приводить к значительной потере точности в электронной литографии.

Введение

Актуальность изучения процессов взаимодействия электронного пучка с веществом определяется влиянием заряда, накопленного в верхнем слое облучаемого образца, на подлетающие электроны. Это явление известно как в электронной микроскопии, так и в электронно-лучевой литографии сверхбольших интегральных микросхем, где пучок электронов используется как технологический инструмент для получения скрытого рисунка в тонком слое радиационно-чувствительного резиста (полимера). Вследствие зарядки образца искажается рисунок микросхемы или фотошаблона [1]. В работе [2] показано, что максимальное тангенциальное отклонение x_e электронов пучка с ускоряющим напряжением U_0 при подлете к мишени, потенциал на поверхности которой равен V (рис. 1), оценивается формулой

$$x_e = 0.1VL/U_0, \quad (1)$$

где L — рабочее расстояние микроскопа. Такое смещение испытывает пучок в случае, если одна половина поверхности образца заряжена до потенциала V , в то время как потенциал другой равен нулю (рис. 2). Полагая $V = 10$ В, $U_0 = 10$ кВ, $L = 10$ мм, находим, что значение отклонения x_e может достигать 1 мкм, что в ряде случаев является недопустимым как в электронной микроскопии, так и в электронной литографии.

В работах [2, 3] экспериментально наблюдалась положительная зарядка поверхности облучаемой мишени. Этот факт нельзя объяснить только лишь проникновением электронов зонда в образец; для его описания следует учитывать процессы ионизации атомов вещества и транспорта вторичных электронов.

Целью статьи является построение такой модели взаимодействия электронного пучка с образцом, которая позволяла бы вычислять количественные характеристики, связанные с процессом зарядки: пространственное распределение потенциала и

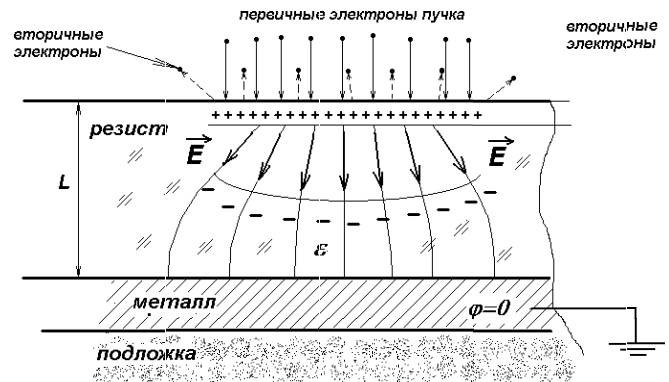


Рис. 1. Трехслойная структура (резист, металл, подложка), используемая для приготовления оптических шаблонов в электронной литографии



Рис. 2. Иллюстрация к соотношению (1). Половина поверхности заряжена до потенциала V , у второй половины потенциал — нулевой. В результате воздействия заряженной области траектория электрона искажается. Если $V < 0$, то электрон отталкивается (как на рисунке); если $V > 0$, то он притягивается

поляризацию резиста. Так как полный расчет всех явлений, происходящих во время облучения вещества, представляет собой очень сложную задачу, необходимо отметить, что настоящая работа носит оценочный характер.

Модель взаимодействия электронов с веществом

Для расчета взаимодействия электронов с твердым телом применялся ставший уже классическим

^{*)} Институт проблем технологий микроэлектроники РАН, Черноголовка.

для подобного рода расчетов метод Монте-Карло [4–9]. Наиболее точной, известной и хорошо изученной в настоящее время является модель однократного рассеяния. В работе исследованы две различные модели взаимодействия.

1. Модель непрерывного торможения Бете–Блоха

В этой модели для описания сечения рассеяния электрона в процессе упругих взаимодействий (для элементов с порядковым номером $Z < 30$ и энергиях частицы больше 5 кэВ) используется формула Резерфорда с учетом экранировки ядра внешними электронами. Дифференциальные потери энергии выражаются модифицированным законом Бете [4, 5]. Учет ионизации в первом приближении производится с помощью механизма генерации так называемых быстрых вторичных электронов [7, 10]. В этом случае средние потери энергии первичной частицы на рождение вторичной вычитаются из общих потерь [7].

2. Подробное моделирование каналов неупругого рассеяния

Как известно, типы взаимодействия электронов с твердым телом делятся на упругие и неупругие, при этом для более точного моделирования эффекта зарядки следует максимально подробно рассмотреть неупругие. Ими являются: ионизация внутренних атомных оболочек, взаимодействие с электронами проводимости или электронами внешних оболочек и возбуждение плазмонов (для металлов).

Для моделирования ионизации внутренних атомных оболочек в работе использована полуэмпирическая формула Гризинского [11]. Возбуждение объемных плазмонов и одночастичное взаимодействие первичных электронов с валентными описываются в работах [4, 12]. В некоторых случаях потери энергии

на другие, менее существенные каналы рассеяния (электрон-фононные взаимодействия, генерация поверхностных плазмонов и т. д.), могут быть оценены как разница между непрерывными и средними потерями на один акт соударения [8]. Этот подход не является общепринятым. Например, авторы работы [6] такими «остатками непрерывных потерь» пренебрегают и рассматривают только дискретные потери энергии на каждом акте соударения.

Результаты моделирования накопленного заряда и расчета потенциала в объеме диэлектрика

Для оценки распределения заряда при помощи различных моделей были выбраны трехслойные структуры (резист, металл, стекло), активно применяемые в электронной литографии. Расчет производился при помощи описанных выше моделей (табл. 1). Физические характеристики веществ и элементов, использовавшиеся при вычислениях, указаны в табл. 2 (E_f — энергия Ферми, E_g — ширина запрещенной зоны, E_p — энергия плазмонов, a — толщина мономолекулярного слоя, ϵ — диэлектрическая проницаемость, n_v — число валентных электронов). Параметры тестового образца были выбраны следующие: резист — ПММА (полиметилметакрилат) (толщина 400 нм), металл — хром (100 нм), подложка — оксид кремния (рис. 1). Доза облучения составила 50 мкКл/см², ускоряющее напряжение — 20 кВ, пучок прямоугольный — 1 × 1 мкм. Интегральные распределения поглощенного заряда по глубине резиста, посчитанные моделями 1 и 2 (табл. 1), представлены на рис. 3.

Одной из важнейших величин, характеризующих зарядку образца в процессе облучения, является потенциал электрического поля в объеме резиста и вблизи его поверхности. Полуэмпирические модели, такие как модели заряженного «двойного слоя»,

Таблица 1

Обозначения моделей, используемых в работе. Моделирование траекторий электронов ведется до порогового значения энергии электрона $E_c = 0.1$ кэВ

Номер модели	Наборы сечений
Модель 1 (полная модель)	Упругое рассеяние + ионизация внутренних оболочек (Гризинский) + ионизация внешних валентных + генерация плазмонов (только для металлов) + остатки потерь по Бете для неметаллов
Модель 2 (генерация «быстрых вторичных электронов»)	Упругое рассеяние (Резерфорд) + генерация «быстрых вторичных электронов» + непрерывные потери энергии

Таблица 2

Параметры веществ, использовавшихся при моделировании [13]

Вещество	Формула	Мол. масса, г/моль	Плотн., г/см ³	E_f , эВ	E_g , эВ	E_p , эВ	a , Å	ϵ	n_v
Хром	Cr	52	7.19	7.8	–	26.2	2.3	–	6
Стекло	SiO ₂	60	2.32	–	9	–	2.7	3.9	8
ПММА	C ₅ H ₈ O ₂	100	1.19	–	5	–	–	2.8	40

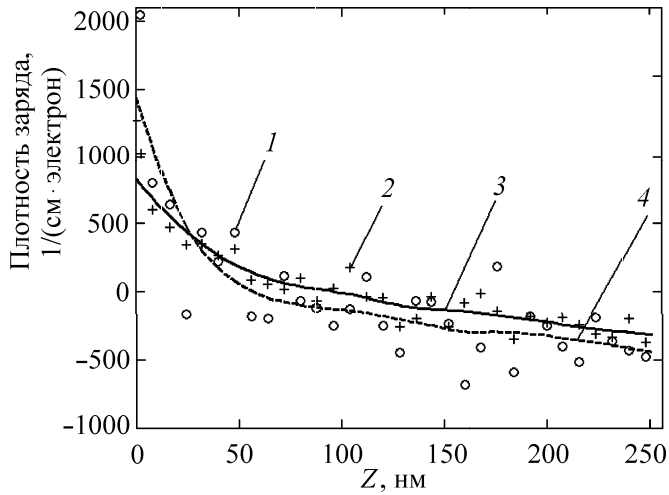


Рис. 3. Интегральное распределение плотности заряда по глубине: 1 — значения плотности заряда, посчитанные по модели 2 (табл. 1), 2 — значения плотности заряда, посчитанные по модели 1, 3 — аппроксимация сплайном значений 2, 4 — аппроксимация сплайном значений 1. Посчитано $3 \cdot 10^6$ траекторий

заряженных цилиндров или полусфер [14–16] позволяют только качественно оценить значения этой физической величины. Более точный результат получается непосредственным численным расчетом. Считаем, что весь заряд, проникающий в образец, захватывается глубокими ловушками диэлектрика и остается там, т.е. вкладом токов электронно-возбужденной проводимости пренебрегается. Уравнения Пуассона, которые решаются для определения потенциала электрического поля, выглядят так:

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

где φ_1 — потенциал в объеме резиста, φ_2 — потенциал в вакууме (рис. 1), L — толщина слоя резиста, ε — относительная диэлектрическая проницаемость резиста, ε_0 — абсолютная диэлектрическая проницаемость вакуума, $c(\mathbf{r})$ — объемная плотность инжектированного заряда.

Граничные условия, накладываемые на функции φ_1 и φ_2 , имеют вид:

$$\partial\varphi_{1,2}/\partial x|_{x=\pm\infty} = 0, \quad \partial\varphi_{1,2}/\partial y|_{y=\pm\infty} = 0, \quad \varphi_1|_{z=0} = 0,$$

$$\partial\varphi_2/\partial z|_{z=+\infty} = 0, \quad \varepsilon \partial\varphi_1/\partial z|_{z=L-0} = \partial\varphi_2/\partial z|_{z=L+0}.$$

Для численного решения приведенных уравнений использована схема счета на установление [17].

Результаты расчетов распределения потенциала по глубине вдоль оси пучка и на поверхности диэлектрика представлены на рис. 4 и 5. Видно, что потенциал на поверхности положителен. Согласно формуле (1), для установки с рабочим расстоянием L , равным 10 мм, отклонение может достигать 0.5 мкм, что указывает на важность учета влияния инжектированного заряда на подлетающие электроны. Уменьшение дозы облучения приводит к пропорциональному уменьшению потенциала поверхности и, соответственно, к уменьшению величины отклонения пучка. Полагая, что приемлемое отклонение

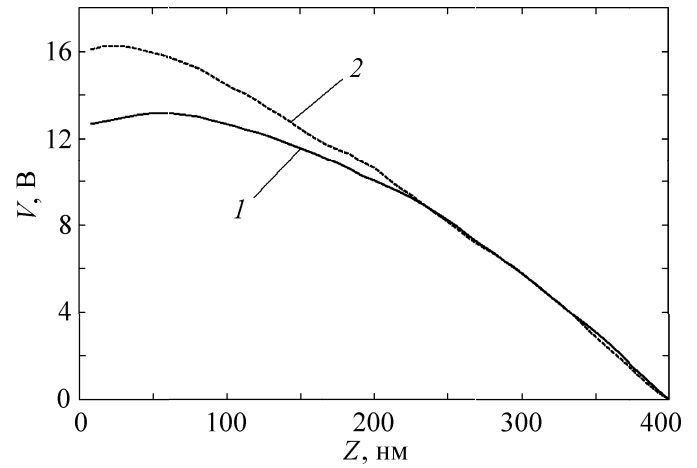


Рис. 4. Распределение потенциала по глубине в ПММА в точке $(0, 0)$ (вдоль оси влета пучка): 1 — расчет по модели 1, 2 — расчет по модели 2

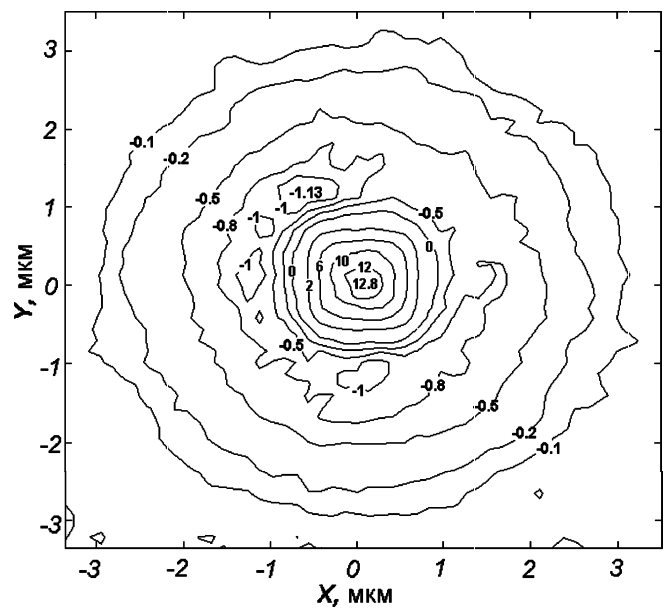


Рис. 5. Распределение потенциала на поверхности резиста. Расчет произведен по модели 1. Значения потенциала приведены в вольтах

не превышает 50 нм, получаем, что доза облучения должна быть меньше 5 мкКл/см^2 , что совпадает с чувствительностью современных резистов. Таким образом, эффект зарядки остается существенным обстоятельством, способным вызвать значительную потерю точности в электронной литографии.

Расчет поляризации диэлектрика

Зная потенциал в объеме резиста, можно рассчитать его реакцию на образующееся электрическое поле — поляризацию среды. Вектор поляризации \mathbf{P} в каждой точке связан с вектором электрического поля \mathbf{E} и потенциалом φ соотношениями:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad \mathbf{P} = -(\varepsilon - 1)\mathbf{E}/(4\pi).$$

График распределения по глубине компоненты вектора поляризации $P_x(z)$ в точке $(-480, 0)$ нм представлен на рис. 6. Хорошо видно, что для

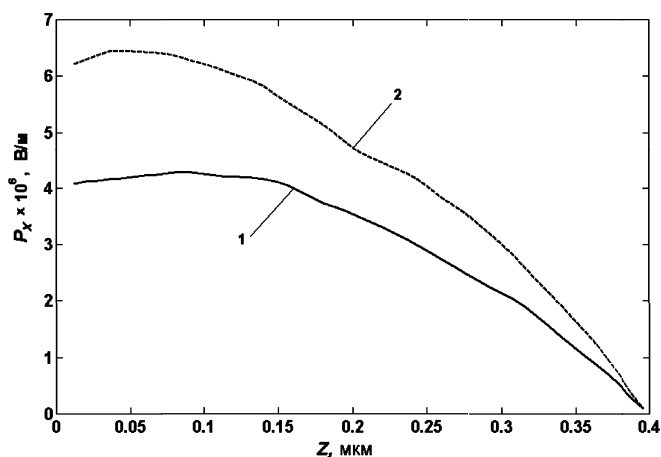


Рис. 6. Распределение компоненты вектора поляризации $P_x(z)$ по глубине в точке $(-480, 0)$ нм (там, где модуль вектора поляризации принимает максимальное значение).
1 — расчет по модели 1, 2 — расчет по модели 2

ПММА величина поляризации может достигать значений, отличающихся от пробойных всего на порядки [13].

Для негативных резистов образуемое в результате облучения электрическое поле может оказывать влияние на транспорт частиц, участвующих в процессах сшивки межмолекулярных связей полимера. Большую часть таких активных частиц, как правило, образуют ионы водорода, выбиваемые из молекул полимера налетающими электронами [18]. Можно оценить смещение, испытываемое протонами H^+ в резисте в результате действия электрического поля при термическом отжиге образца (рис. 1) после экспонирования [18]. Справедливо оценочное соотношение:

$$x_H = \mu_H E t = \frac{e D_H E t}{k T},$$

где x_H — расстояние, проходимое ионами H^+ за время отжига t , E — напряженность электрического поля, T — температура отжига, D_H и μ_H — соответственно коэффициент диффузии и подвижность протонов в резисте, k — постоянная Больцмана. Полагая $D_H = 50$ нм²/с, $t \approx 100$ с, $T \approx 400$ К [19], $E \approx 10$ МВ/м, находим, что x_H может достигать 1 мкм.

Таким образом, электрические поля, возникающие в тонких полимерных пленках при электронном облучении, являются фактором, способным вызвать значительное смещение протонов при термическом отжиге и вследствие этого существенную потерю точности при изготовлении фотошаблона.

Заключение

В представленной работе предложен новый подход к моделированию взаимодействия электронных пучков с твердым телом. Модель непрерывных потерь энергии не может адекватно описать эффект по-

ложительной зарядки поверхности образца, поэтому важен учет процессов ионизации вещества. В работе обсуждены модели, учитывающие эти явления, и произведено их сравнение. Рассчитано распределение потенциала в объеме резиста, на его поверхности и в вакууме. Показано, что зарядка может оказывать существенное влияние на траекторию подлетающих электронов и, тем самым, существенно ухудшать качество литографии.

Расчет поляризации в объеме диэлектрика демонстрирует, что в случае большой дозы облучения (характерной для позитивных резистов), величины электрических полей достигают предпробойных значений. Кроме того поляризация оказывает влияние на транспорт частиц, определяющих скорость полимеризации молекул, что актуально для негативных резистов. Показано, что поле может вызвать значительное смещение протонов в объеме полимера, что также резко ухудшает качество литографии.

Литература

1. Itoh H., Nakamura K. // J. Vac. Sci. Technol. B. 1991. **9**, N 6. P. 3039.
2. Ingino J., Owen G., Berglund C. et al. // J. Vac. Sci. Technol. B. 1994. **12**, N 3. P. 1367.
3. Rai M., Pease R., Tanasa C. et al. // J. Vac. Sci. Technol. B. 1999. **17**, N 6. P. 2893.
4. Валиев К.А., Раков А.В. Физические основы субмикронной литографии в микроэлектронике. М., 1984.
5. Joy D.C. Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis. Oxford University Press, 1995.
6. Shimizu R., Kataoka Y., Ikuta T. et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1976. **9**, N 1. P. 101.
7. Murata K., Kyser D., Ting C. // J. Appl. Phys. 1981. **52**, N 7. P. 4396.
8. Adesida I., Shimizu R., Everhart T. // Appl. Phys. Lett. 1978. **33**, N 10. P. 849.
9. Berger M., Sletzer S. // Annals of the New York Academy of Sciences. 1969. **161**. P. 8.
10. Evans R. The Atomic Nucleus. N. Y., 1955.
11. Gryzinski M. // Phys. Rev. 1965. **138(2A)**. P. A305.
12. Pines D. // Review of Modern Physics. 1956. **28**, N 3. P. 185.
13. Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьевой, Е.З. Мейлихова. М., 1991.
14. Melchinger A., Hofmann S. // J. Appl. Phys. 1995. **78**, N 10. P. 6224.
15. Chen H., Gong H., Ong C. // J. Appl. Phys. 1995. **78**, N 6. P. 3714.
16. Cazaux J. // J. Appl. Phys. 1986. **59**, N 5. P. 1418.
17. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М., 1989.
18. Боков Ю.С. Фото-, электроно- и рентгенорезисты. М., 1982.
19. Cheng M., Yuan L., Croffie E., Neureuther A. // J. Vac. Sci. Technol. B. 2002. **20**, N 2. P. 734.

Поступила в редакцию
28.05.03