



ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ

**ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ**

**ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ ΣΤΗ
ΜΙΚΡΟΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Προσομοίωση διεργασίας ιονοβολής επιφανειών με δέσμη
ιόντων υπό ταυτόχρονη απόθεση: Διερεύνηση των
μηχανισμών δημιουργίας οργανωμένων μορφολογιών**

Τρύφων Ι. Τερζόπουλος

**Επιβλέπων: Γεώργιος Κόκκορης, Συνεργαζόμενος Ερευνητής,
Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας,
ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος**

ΑΘΗΝΑ

ΜΗΝΑΣ 2018

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Προσομοίωση διεργασίας ιονοβολής με δέσμη ιόντων υπό ταυτόχρονη απόθεση:
Διερεύνηση των μηχανισμών οργάνωσης της επιφάνειας

Τρύφων Ι. Τερζόπουλος

A.M.: MM241

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ: **Γεώργιος Κόκκορης**, Συνεργαζόμενος Ερευνητής, Ινστιτούτο
Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ **Αγγελική Αραπογιάννη**, Καθηγήτρια, Τμήμα Πληροφορικής
& Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο
Αθηνών

Αγγελική Τσερέπη, Διευθύντρια Ερευνών, Ινστιτούτο
Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

Βασίλειος Κωνσταντούδης, Ερευνητής, Ινστιτούτο
Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

Μάιος 2018

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ύπαρξη οργάνωσης (περιοδικότητας) στη μορφολογία μιας επιφάνειας είναι χρήσιμη σε μια πληθώρα εφαρμογών όπως η μαγνητική αποθήκευση και η κατάλυση χημικών αντιδράσεων. Μία από τις τεχνολογίες για τη δημιουργία οργανωμένων μορφολογιών στις επιφάνειες είναι η ιονοβολή με δέσμη ιόντων (Ion Beam Sputtering). Τα τελευταία χρόνια, πειράματα ιονοβολής έχουν συνδυαστεί με ταυτόχρονη απόθεση συστατικών (παρεμποδιστών εγχάραξης) και έχουν οδηγήσει στη δημιουργία ανισοτροπικής οργάνωσης.

Η παρούσα διπλωματική εργασία πραγματεύεται τη μαθηματική προτυποποίηση (μοντελοποίηση) και προσομοίωση διεργασίας ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης παρεμποδιστών κατά την ιονοβολή ελεύθερων και αρχικά επίπεδων επιφανειών με δέσμη ιόντων. Στόχος είναι η ερμηνεία μέσω της προσομοίωσης της ανισοτροπικής οργάνωσης που παρατηρείται σε πειράματα ιονοβολής με δέσμη ιόντων Αργού (Ar) υψηλής ενέργειας (1 keV) σε επιφάνειες Πυριτίου (Si) υπό ταυτόχρονη απόθεση ατόμων Σιδήρου (Fe, παρεμποδιστών). Η ταυτόχρονη απόθεση εξασφαλίζεται με προσθήκη στόχων Fe γύρω από το δείγμα Si που εγχαράσσεται σε κατάλληλη διάταξη.

Για την επίτευξη του στόχου, τροποποιήθηκε και επεκτάθηκε κατάλληλα διαθέσιμος κώδικας Monte Carlo για την εξέλιξη μορφολογίας επιφανειών σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Ο κώδικας χρησιμοποιεί διακριτή απεικόνιση της επιφάνειας και του υποστρώματος με κυβικά κελιά. Υπολογίστηκαν με χρήση του κώδικα COMSOL οι κατανομές ιόντων και παρεμποδιστών στην επιφάνεια. Ο κώδικας SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) χρησιμοποιήθηκε για την εξαγωγή των συντελεστών προσκόλλησης των συστατικών και της απόδοσης εγχάραξης του Si και του Fe (άτομα Si ή Fe που απομακρύνονται ανά προσπίπτον ιόν) συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων. Οι συναρτήσεις για τους συντελεστές προσκόλλησης και τις αποδόσεις εγχάραξης ενσωματώθηκαν στον κώδικα και η δειγματοληψία από αυτές τις συναρτήσεις υλοποιήθηκε με τη μέθοδο αποδοχής-απόρριψης. Οι επιφανειακές μορφολογίες που προέκυψαν από την προσομοίωση χαρακτηρίστηκαν μαθηματικά με την root mean square (RMS) τραχύτητα, το μήκος συσχέτισης, το κλάσμα κάλυψης από παρεμποδιστές και το δισδιάστατο διάγραμμα πυκνότητας φάσματος ισχύος (Power Spectral Density, PSD). Η οργάνωση ποσοτικοποιήθηκε με βάση το PSD με την περίοδο των δομών που σχηματίζονται στην επιφάνεια και την παράμετρο οργάνωσης.

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης έδειξαν ότι: α) Οι στατιστικές παράμετροι χαρακτηρισμού της μορφολογίας δεν επηρεάζονται από τις διαστάσεις της επιφάνειας αλλά επηρεάζονται από την δομική μονάδα του «ψηφιδωτού» της επιφάνειας. β) Η εφαρμογή των συναρτήσεων για τις αποδόσεις εγχάραξης και τις πιθανότητες προσκόλλησης των συστατικών όπως προκύπτουν από τον κώδικα SRIM δεν οδήγησε σε δημιουργία οργάνωσης στη μορφολογία της επιφάνειας. γ) Περαιτέρω διερεύνηση των τιμών των παραμέτρων και των μηχανισμών αλληλεπίδρασης των συστατικών (Ar⁺, Fe, Si) με την επιφάνεια έδειξε ότι η οργάνωση ευνοείται όταν η πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων είναι 1 δηλαδή όταν δεν συμβαίνει ανάκλαση των ιόντων στην επιφάνεια, όταν αυξάνεται το κλάσμα των παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή και όταν η επιλεκτικότητα εγχάραξης των παρεμποδιστών (άτομα Fe) ως προς το υπόστρωμα Si πλησιάζει το 1.

ΘΕΜΑΤΙΚΗ ΠΕΡΙΟΧΗ: νανοτεχνολογία

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: τραχύτητα, ιονοβολή, εγχάραξη με πλάσμα, προσομοίωση, Monte Carlo, οργανωμένη μορφολογία

ABSTRACT

Organized (periodic) nanopatterns on surfaces has been found very useful in various applications such as magnetic storage and chemical reaction catalysis. Ion beam sputtering (IBS) of surfaces has been used for the formation of organized nanopatterns on the surfaces. Within the last decade, IBS has been used with co-deposition of metals, also called etch-inhibitors, to produce anisotropic organized nanopatterns.

This thesis is engaged with the mathematical modeling and simulation of simultaneous IBS and deposition processes on initially flat surfaces. The aim is to understand the formation of anisotropic organized nanopatterns produced by Argon (Ar) ion beam sputtering (with ion energy equal to 1 keV) on Silicon (Si) surfaces under the simultaneous deposition of Iron (Fe) atoms. Simultaneous deposition is achieved by placing of Fe targets around the Si substrate. The targets are placed on specific locations in order to control the organization of the nanopatterns being formed on the Si surface.

A pre-existing C++ Monte Carlo (MC) code for surface evolution was modified and further developed, in order to achieve the aim. A cellular representation of the substrate is utilized in code. The direction distributions of ions and Fe atoms arriving on the bombarded surface were calculated by the commercial code COMSOL. SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) code was used to calculate the sticking probabilities of ions and Fe atoms and the etching yields of Si and Fe (atoms removed pre incident ion) as a function of angle of ion incidence. The latter functions were integrated in the C++ MC code and the sampling was implemented with the acceptance - rejection method. The morphology of the simulated surfaces was characterized using the Root Mean Square (RMS) roughness, the correlation length, the surface coverage fraction by Fe atoms and the 2D Power Spectrum Density (PSD). The quantification of the organization of the nanopatterns was done by extracting the period and the parameter of organization from the 2D PSD.

The results of the simulations showed that: a) The statistical parameters characterizing the morphology were independent of the surface dimensions and were dependent on the dimensions of the unit cell of the surface. b) The use of the functions for the sticking probabilities and the etching yields coming from SRIM code did not produce organized nanopatterns on the surface. c) Further investigation on the values of the parameters and on the mechanisms of particle-surface interaction showed that organization was favored when the sticking probability of ions was equal to 1 (meaning that there is no ion reflection), when the fraction of Fe atoms on the flux arriving on the surface was increased, and when the etching selectivity of Fe atoms over the Si atoms approached 1.

SUBJECT AREA: nanotechnology

KEYWORDS: roughness, ion beam sputtering, plasma etching, simulation, Monte Carlo, organized nanopatterns

Στην Άννα

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ	15
1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	16
1.1 Η τραχύτητα ως αποτέλεσμα των διεργασιών κατασκευής	16
1.2 Η σημασία της τραχύτητας ελεύθερης σκίασης επιφάνειας.....	17
1.3 Περιοδικές μορφολογίες	19
1.4 Χαρακτηρισμός και μετρολογία τραχύτητας	21
1.5 Μηχανισμοί δημιουργίας τραχύτητας	22
1.5.1 Απόδοση εγχάραξης εξαρτώμενη από την καμπυλότητα της επιφάνειας.....	22
1.5.2 Πρώτης τάξης επανεκπομπή προσπίπτοντος σωματιδίου	23
1.5.3 Ανάπτυξη τάσεων στην επιφάνεια	24
1.5.4 Εγχάραξη με ταυτόχρονη απόθεση παρεμποδιστών εγχάραξης.....	25
1.6 Υπολογιστικά μοντέλα για την εξέλιξη της μορφολογίας επιφανειών	26
1.7 Σκοπός της εργασίας	28
2 ΠΛΑΙΣΙΟ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΞΕΛΙΞΗ ΤΡΑΧΥΤΗΤΑΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΕΓΧΑΡΑΞΗ	31
2.1 Εισαγωγή	31
2.2 Άρθρωμα και λογικό διάγραμμα πλαισίου προσομοίωσης	32
2.3 Άρθρωμα 1: Υπολογισμός παραμέτρων και τιμών της αέριας φάσης.....	33
2.3.1 Υπολογισμός του κλάσματος των παρεμποδιστών.....	34
2.3.2 Υπολογισμός κατανομών κατευθύνσεων και ενεργειών των σωματιδίων που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης	35
2.4 Άρθρωμα 2: Απόδοση Εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης.....	42
2.4.1 Απόδοση Εγχάραξης.....	42
2.4.2 Πιθανότητα προσκόλλησης	42
2.5 Άρθρωμα 3: Μοντέλο Monte Carlo για την εξέλιξη της μορφολογίας της εγχαρασσόμενης επιφάνειας.....	43
2.5.1 Γεννήτρια τυχαίων αριθμών – μέθοδος Monte Carlo	44
2.5.2 Η μέθοδος αποδοχής – απόρριψης (accept – reject method) [53]	44
2.5.3 Ανάπτυξη γεννήτριας τυχαίων αριθμών	45
2.6 Άρθρωμα 4: Μετρολογία τραχύτητας της επιφανειακής μορφολογίας.....	46
3 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ: ΑΠΟΔΟΣΗ ΕΓΧΑΡΑΞΗΣ, ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΠΡΟΣΚΟΛΛΗΣΗΣ, ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ ΤΑΧΥΤΗΤΩΝ	49
3.1 Εισαγωγή	49
3.2 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης	49
3.2.1 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε υπόστρωμα Fe	49
3.2.2 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε υπόστρωμα Si	51
3.2.3 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε υπόστρωμα Si με 10% προσμίξεις Fe	53
3.2.4 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε υπόστρωμα Si με μονοστρωματικό υμένιο Fe.....	55
3.2.5 Αποδόσεις εγχάραξης και πιθανότητες προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε διαφορετικά υποστρώματα: Συγκεντρωτικά αποτελέσματα	57

3.2.6	Πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων Fe σε υπόστρωμα Si και Fe.....	59
3.3	Κατανομή κατευθύνσεων εκπεμπόμενων παρεμποδιστών από τις επιφάνειες των στόχων	61
3.4	Κατανομή κατευθύνσεων παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης	63
3.4.1	Αριθμητικός υπολογισμός.....	63
3.4.2	Αναλυτικός υπολογισμός.....	67
3.4.3	Υπολογισμός του κλάσματος των παρεμποδιστών της προσπίπτουσας ροής σωματιδίων στην επιφάνεια εγχάραξης.....	72
3.5	Μέθοδος Διαστασιολόγησης.....	74
4	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ	77
4.1	Εισαγωγή	77
4.2	Διερεύνηση της επίδρασης παραμέτρων και μηχανισμών στη μορφολογία της επιφάνειας.....	78
4.2.1	Επίδραση της πυκνότητας των στοιχείων Fe και Si στη μορφολογία της εγχαρασσόμενης επιφάνειας	84
4.2.2	Επίδραση της διάστασης της επιφάνειας στη μορφολογία	90
4.2.3	Επίδραση της δομικής μονάδας στη μορφολογία της επιφάνειας.....	94
4.2.4	Επίδραση της απόδοσης εγχάραξης των παρεμποδιστών στη μορφολογία της επιφάνειας	100
4.2.5	Επίδραση της πιθανότητας προσκόλλησης των παρεμποδιστών στη μορφολογία της επιφάνειας	104
4.2.6	Επίδραση του μηχανισμού επαναπόθεσης προϊόντων της εγχάραξης.....	107
4.2.7	Επίδραση του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων.....	111
4.2.8	Συνδυαστική επίδραση των μηχανισμών επαναπόθεσης των προϊόντων εγχάραξης και του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων	113
4.2.9	Επίδραση του κλάσματος των παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή	116
4.3	Περαιτέρω διερεύνηση των μηχανισμών που ευνοούν την οργάνωση.....	118
4.3.1	Εξάλειψη της επιλεκτικότητας εγχάραξης των παρεμποδιστών σε σχέση με το υπόστρωμα και αύξηση του κλάσματος των παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή	120
4.3.2	Εξάλειψη της επιλεκτικότητας των ιόντων και της ανάκλασης των παρεμποδιστών	125
5	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	130
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι.....	133
	ΑΝΑΦΟΡΕΣ	135

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1: α) Εικόνα από SEM γραμμών πολυμερούς μετά την λιθογραφική εμφάνισή τους.....	16
Σχήμα 2: Ενίσχυση της υδροφοβικότητας ή υδροφιλικότητας επιφάνειας ανάλογα με την αρχική κατάσταση αυτής ενισχύοντας την επιφανειακή τραχύτητά της [7].....	17
Σχήμα 3: α) Εικόνα από SEM επιφάνειας Si με κολόνες ύψους περίπου 800 nm και πλάτος στη βάση τους περίπου 200 nm.....	18
Σχήμα 4: Σχηματική απεικόνιση μετρητή τριβής με σκοπό την διερεύνηση της επίδρασης αυτής σε μικρομηχανικές διατάξεις.....	19
Σχήμα 5: α) Εικόνα από AFM επιφάνειας PMMA μετά από εγχάραξη για 46 sec με πλάσμα O ₂ [14].....	20
Σχήμα 6: α) Υψηλής ανάλυσης φάσμα απώλειας ενέργειας δέσμης ηλεκτρονικού μικροσκοπίου για τρεις επιφάνειες αργύρου.....	21
Σχήμα 7: Σχηματική αναπαράσταση της τοπικής μεταβολής που παρουσιάζει η απόδοση εγχάραξης λόγω της καμπυλότητας της επιφάνειας.....	23
Σχήμα 8: Εικόνες από AFM υαλοκεραμικής επιφάνειας (Zerodur) πριν και μετά την φυσική εγχάραξη με δέσμη ιόντων [30].....	23
Σχήμα 9: Πρώτης τάξης επανεκπομπή.....	24
Σχήμα 10: Ζώνες πολυμερούς υλικού κατά την ταυτόχρονη έκθεσή του σε υπεριώδη ακτινοβολία και δέσμη ιόντων (όπως και στο πλάσμα).....	25
Σχήμα 11: Σε ένα σύστημα όπου υπάρχουν παρεμποδιστές, ο λόγος της ροής των ιόντων προς αυτή των παρεμποδιστών στην επιφάνεια καθορίζει την απόδοση εγχάραξης της επιφάνειας.....	25
Σχήμα 12: Προσέγγιση πειραματικής διάταξης ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης μελέτης ερευνητικής ομάδας Zhang et al [15].....	29
Σχήμα 13: Τοποθέτηση και προσανατολισμός μεταλλικών (Fe) στόχων γύρω από την επιφάνεια Si ώστε να επιτευχθεί ταυτόχρονη εγχάραξη και απόθεση.....	31
Σχήμα 14: Διάγραμμα ροής του πλαισίου προσομοίωσης.....	33
Σχήμα 15: Το πρώτο άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης.....	33
Σχήμα 16: Στροφή Euler στον άξονα Z.....	37
Σχήμα 17: Στροφή Euler στον άξονα Y.....	37
Σχήμα 18: Στροφή Euler στον άξονα X.....	37
Σχήμα 19: Η πειραματική διάταξη των Zhang et al. [15].....	38
Σχήμα 20: Ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο τρισδιάστατης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας της ταχύτητας.....	39
Σχήμα 21: Σχετικός προσανατολισμός δύο στοιχειωδών επιφανειών στις θέσεις x και x' με μοναδιαία κάθετα διανύσματα n και n' και επιφάνειες dA και dA'.....	40
Σχήμα 22: Το δεύτερο άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης.....	42

Σχήμα 23: Το υπόστρωμα εγχάραξης προσεγγίζεται με ένα τρισδιάστατο πλέγμα κυψελίδων (κύβων ή κελιών).....	43
Σχήμα 24: Μέθοδος αποδοχής – απόρριψης για την παραγωγή τυχαίων αριθμών.....	45
Σχήμα 25: Μήκος συσχέτισης ξ	47
Σχήμα 26 (α) Κάτοψη επιφάνειας από προσομοίωση (κεφάλαιο 4).....	48
Σχήμα 27: Απόδοση εγχάραξης Fe από ιόντα Ar+.....	50
Σχήμα 28: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar+ σε επιφάνεια Fe.....	51
Σχήμα 29: Απόδοση εγχάραξης Si από ιόντα Ar+.....	52
Σχήμα 30: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar+ σε υπόστρωμα Si.....	53
Σχήμα 31: Αποδόσεις εγχάραξης Si και Fe για υπόστρωμα Si με 10% προσμίξεις Fe..	54
Σχήμα 32: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar+ σε υπόστρωμα Si με 10% προσμίξεις Fe.....	55
Σχήμα 33: Αποδόσεις εγχάραξης Si και Fe για υπόστρωμα Si με μονοστρωματικό υμένιο Fe.....	56
Σχήμα 34: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar+ (ενέργειας 1000 eV) σε υπόστρωμα Si με επικάλυψη μονοστρωματικού υμενίου Fe.....	57
Σχήμα 35: Απόδοση εγχάραξης Si και Fe από ιόντα Ar+.....	57
Σχήμα 36: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar+ σε Si και Fe.....	58
Σχήμα 37: Απόδοση εγχάραξης Si και Fe από ιόντα Ar+.....	58
Σχήμα 38: Πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων Fe σε Si και Fe.....	60
Σχήμα 39: Κυλινδρικές συντεταγμένες διανύσματος ταχύτητας εξερχόμενου σωματιδίου από την επιφάνεια του στόχου.....	61
Σχήμα 40: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της αζιμουθιακής γωνίας ϕ (Σχήμα 39) εκπεμπόμενου ατόμου Fe από στόχους Fe.....	62
Σχήμα 41: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της πολικής γωνίας θ (Σχήμα 39) εκπεμπόμενου ατόμου Fe από στόχους Fe.....	63
Σχήμα 42: Γεωμετρία πειραματικής διάταξης των Zhang et al. [15] όπως κατασκευάστηκε με το COMSOL.....	64
Σχήμα 43: Ιστόγραμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των ταχυτήτων των σωματιδίων Fe που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης του COMSOL για τις συνιστώσες v_x, v_y	65
Σχήμα 44: Ιστόγραμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των ταχυτήτων των σωματιδίων Fe που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης του COMSOL για την συνιστώσα των v_z	66
Σχήμα 45: Ιστογράμματα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των συνιστωσών ταχυτήτων v_x, v_y, v_z των σωματιδίων Fe	67
Σχήμα 46: Κανονικοποιημένη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των κατευθύνσεων των σωματιδίων που καταγράφει το COMSOL.....	67
Σχήμα 47: Αναπαραγωγή της γεωμετρίας της πειραματικής διάταξης των Zhang et al.	68
Σχήμα 48: Διατομή πειραματικής διάταξης σε επίπεδο (xz).....	68

Σχήμα 49: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\varphi, \theta)$ ταχυτήτων ατόμων παρεμπόδισης (Fe).....	70
Σχήμα 50: Περιοχή της πολικής γωνίας θ των ατόμων παρεμπόδισης.....	70
Σχήμα 51: Κανονικοποιημένη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ταχυτήτων εισόδου στην επιφάνεια εγχάραξης.....	71
Σχήμα 52: Κανονικοποιημένη πυκνότητα πιθανότητας ταχυτήτων εισόδου στην επιφάνεια εγχάραξης.....	71
Σχήμα 53: Υπόστρωμα διάταξης ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης.....	77
Σχήμα 54 [15]: (a) – (c) Εικόνες AFM επιφανειών Si διάστασης $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ μετά από έκθεση σε δέσμη ιόντων Ar^+	78
Σχήμα 55: Κατόψεις επιφανειών Si.....	81
Σχήμα 56: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+	82
Σχήμα 57: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης (ξ) για το βασικό σενάριο προσομοίωσης (Πίνακας 9, σενάριο 9 του Πίνακα 11).....	83
Σχήμα 58: Συγκριτική απεικόνιση του όγκου που καταλαμβάνει ένα άτομο Fe (κόκκινες σφαίρες) και ένα άτομο Si (πράσινες σφαίρες).....	85
Σχήμα 59: Κατόψεις επιφάνειας Si για συνολική δόση $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/ cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους.....	86
Σχήμα 60: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ . Τα αποτελέσματα αντιστοιχούν στα σενάρια 09, 06 και 04 του Πίνακα 11. Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.....	87
Σχήμα 61: (α) Τιμές RMS τραχύτητας και μήκους συσχέτισης (ξ). Τα αποτελέσματα αντιστοιχούν στα σενάρια 09, 06 και 04 του Πίνακα 11.....	89
Σχήμα 62: Διαγράμματα πυκνότητας φάσματος ισχύος (PSD). Στην πρώτη στήλη φαίνονται τα αποτελέσματα για την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ και στη δεύτερη για την περίπτωση $\text{Fe} < \text{Si}$	90
Σχήμα 63: Κατόψεις επιφανειών Si διαφορετικής διάστασης.....	91
Σχήμα 64: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+	91
Σχήμα 65: (α) Τιμές RMS τραχύτητας και μήκους συσχέτισης (ξ).....	93
Σχήμα 66: Διαγράμματα PSD (PSD) επιφανειών Si τα αποτελέσματα αφορούν την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ (Πίνακας 12).....	94
Σχήμα 67: Κατόψεις επιφανειών Si διαφορετικής δομικής μονάδας.....	96
Σχήμα 68: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ (σενάρια 1 έως και 10 του Πίνακα 11), για την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ (Πίνακας 12).....	96
Σχήμα 69: (α) Τιμές RMS τραχύτητας και μήκους συσχέτισης (ξ) (σενάρια 1 έως και 10 του Πίνακα 11), για την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$	98
Σχήμα 70: : Διαγράμματα πυκνότητας φάσματος ισχύος (PSD) για επιφάνειες Si διαφορετικής δομικής μονάδας για την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ (Πίνακας 12)...	100
Σχήμα 71: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ για το ενδεχόμενο η απόδοση εγχάραξης του Fe να είναι το $\frac{1}{2}$ της αρχικής τιμής.....	101

- Σχήμα 72: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα φασματικής πυκνότητας ισχύος για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺ για το ενδεχόμενο η απόδοση εγχάραξης του Fe να είναι το ½ της αρχικής τιμής.....102
- Σχήμα 73: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ για απόδοση εγχάραξης Fe στο ½ (σενάριο 11 του Πίνακα 11) και ¼ (σενάριο 12 του Πίνακα 11) της αρχικής τιμής.....102
- Σχήμα 74: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ για απόδοση εγχάραξης Fe στο ½ (σενάριο 11 του Πίνακα 11) και ¼ (σενάριο 12 του Πίνακα 11) της αρχικής τιμής.....103
- Σχήμα 75: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺ για το ενδεχόμενο η πιθανότητα προσκόλλησης του Fe να είναι 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11).....104
- Σχήμα 76: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο η πιθανότητα προσκόλλησης του Fe να είναι 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11)..105
- Σχήμα 77: Μέσο ύψος επιφάνειας Si για πιθανότητα προσκόλλησης παρεμποδιστών ίση με 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11) και 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11)...106
- Σχήμα 78: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ για πιθανότητα προσκόλλησης Fe ίση με 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11) και 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11)...107
- Σχήμα 79 : Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺ για το ενδεχόμενο διακοπής του μηχανισμού επανατοποθέτησης του Si (σενάριο 15 του Πίνακα 11).....108
- Σχήμα 80: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺ για το ενδεχόμενο η πιθανότητα επανατοποθέτησης του Si να είναι 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11).....109
- Σχήμα 81: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ για πιθανότητα προσκόλλησης των ατόμων Si να είναι ίση με 0 (σενάριο 15 του Πίνακα 11) και 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11).....109
- Σχήμα 82: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ για πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων υποστρώματος 0 (σενάριο 15 του Πίνακα 11) και 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11).....110
- Σχήμα 83: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων (σενάριο 17 του Πίνακα 11).....111
- Σχήμα 84: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων (σενάριο 17 του Πίνακα 11).....112
- Σχήμα 85: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων.....113
- Σχήμα 86: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης διακοπής του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του Si.....114
- Σχήμα 87: Μέσο ύψος επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του Si (σενάριο 18 του Πίνακα 11).....114

- Σχήμα 88: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του υποστρώματος.....115
- Σχήμα 89 : Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50%.....116
- Σχήμα 90: Μέσο ύψος επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50%.....117
- Σχήμα 91: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50%.....118
- Σχήμα 92: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα φασματικής πυκνότητας ισχύος για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων (σενάριο 20 του Πίνακα 11).....121
- Σχήμα 93 : Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την εγχάραξη των ιόντων με ενίσχυση του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 25%.....122
- Σχήμα 94 Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων με ενίσχυση του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50%.....123
- Σχήμα 95: Μέσο ύψος επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων.....123
- Σχήμα 96: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων.....124
- Σχήμα 97: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλαση ιόντων και παρεμποδιστών και επιλεκτικότητας των ιόντων ως προς την εγχάραξη.....126
- Σχήμα 98 : Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων, των παρεμποδιστών και με επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1.....127
- Σχήμα 99: κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων, των παρεμποδιστών και με επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1.....127
- Σχήμα 100: Μέσο ύψος επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης ιόντων και Fe και επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1.....128
- Σχήμα 101: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης ιόντων και παρεμποδιστών και επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1..... 129
- Σχήμα 102: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD. Το σενάριο περιλαμβάνει την απενεργοποίηση του μηχανισμού ανάκλασης των Ar^+ και Fe με επιλεκτικότητα των Ar^+ (Fe και Si) ίση με 1.....132

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 1: Εργασίες που μελετούν την εξέλιξη μορφολογίας επιφανειών και χρησιμοποιούν τη μέθοδο των κελιών.....	27
Πίνακας 2: Απόδοση εγχάραξης Fe και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων σε υπόστρωμα Fe (S+,Fe).....	50
Πίνακας 3: Απόδοση εγχάραξης Si και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων.....	51
Πίνακας 4: Απόδοση εγχάραξης Fe (EYFe) και Si (EYSi) και πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar ⁺ (S+,Si-10%Fe) σε υπόστρωμα Si.....	53
Πίνακας 5: Απόδοση εγχάραξης Fe (EYFe) και Si (EYSi) και πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar ⁺ (S+,Si-Femonolayer) σε υπόστρωμα Si που καλύπτεται από μονοστρωματικό υμένιο Fe (πάχους 2,52 Å).....	55
Πίνακας 6: Πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων Fe σε υπόστρωμα Si και Fe για γωνίες 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80 και 87,5 μοιρών.....	60
Πίνακας 7: Κλάσματα παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή όπως προκύπτουν από την εξίσωση (3-31) και τις πειραματικές μετρήσεις δόσης ιόντων (Φ ⁺) και επιφανειακής πυκνότητας παρεμποδιστών (Cd) των Zhang et al. [15]	73
Πίνακας 8: Μηχανισμοί και παράμετροι των οποίων η συμβολή εξετάστηκε στην αναζήτηση των συνθηκών που οδηγούν στις περιοδικές μορφολογίες των αποτελεσμάτων των Zhang et al. [15].....	79
Πίνακας 9: Τιμές παραμέτρων βασικού σεναρίου προσομοίωσης.....	79
Πίνακας 10: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) για το βασικό σενάριο προσομοίωσης.....	82
Πίνακας 11: Μηχανισμοί και τιμές παραμέτρων όλων των σεναρίων προσομοίωσης...	83
Πίνακας 12: Βιβλιογραφικές τιμές των ακτινών των στοιχείων Fe και Si	85
Πίνακας 13: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για τις περιπτώσεις Fe > Si και Fe < Si (Πίνακας 12).....	88
Πίνακας 14: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) για τρεις διαστάσεις επιφάνειας.....	92
Πίνακας 15 Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για διάφορες επιφάνειες και δομικές μονάδες για την περίπτωση Fe > Si (Πίνακας 12).....	97
Πίνακας 16: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για απόδοση εγχάραξης Fe στο ½ (σενάριο 11 του Πίνακα 11) και ¼ (σενάριο 12 του Πίνακα 11) της αρχικής τιμής.....	103
Πίνακας 17: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για πιθανότητα προσκόλλησης Fe 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11) και 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11).....	106
Πίνακας 18: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων του υποστρώματος 0 (σενάριο 15 του Πίνακα 11) και 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11).....	110

Πίνακας 19: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων (σενάριο 17 του Πίνακα 11).....	112
Πίνακας 20: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του υποστρώματος (σενάριο 18 του Πίνακα 11).....	115
Πίνακας 21: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50% (σενάριο 19 του Πίνακα 11).....	117
Πίνακας 22: Τιμές παραμέτρων βελτιωμένου βασικού σεναρίου προσομοίωσης.....	119
Πίνακας 23: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων.....	124
Πίνακας 24: κατεύθυνση οργάνωσης και μήκος κύματος περιόδου επιφάνειας Si για τα σενάρια 21 και 22 του Πίνακα 11.....	125
Πίνακας 25: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης ιόντων και παρεμποδιστών και επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1.....	128
Πίνακας 26: Κατεύθυνση οργάνωσης, περίοδος και παράμετρος οργάνωσης ω σε επιφάνεια Si για τα σενάρια 24 και 25 του Πίνακα 11.....	129

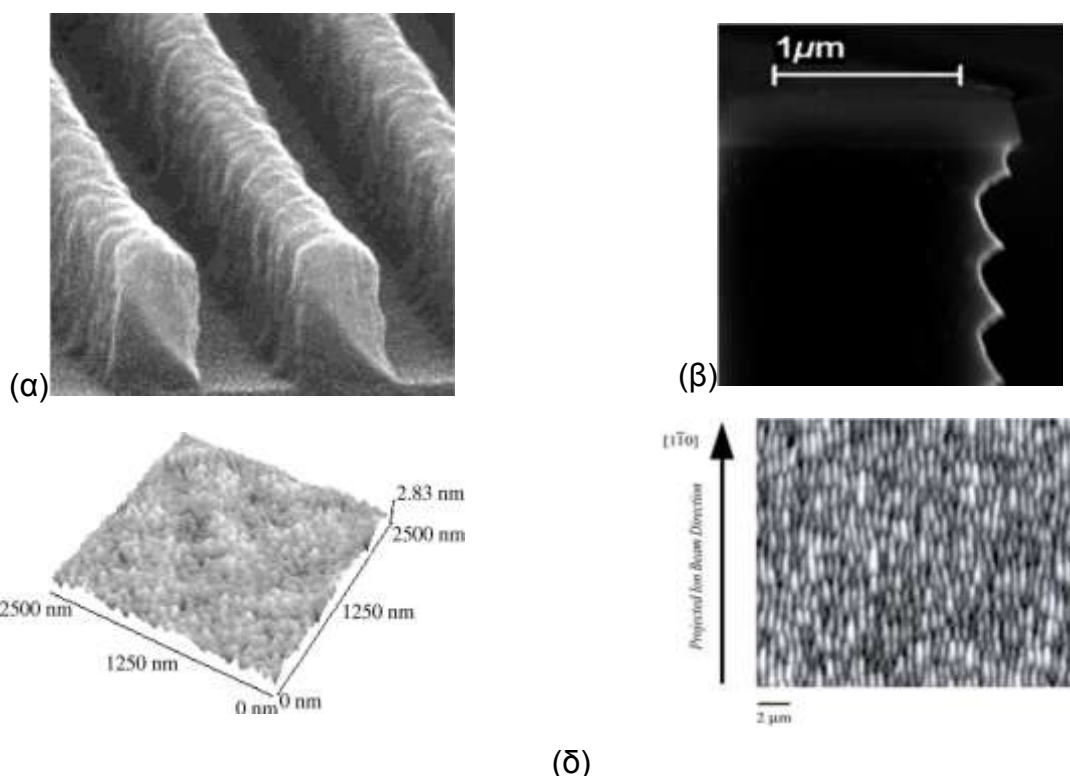
ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η εργασία πραγματοποιήθηκε στο Ινστιτούτο Νανοτεχνολογίας και Νανοεπιστήμης του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος αξιοποιώντας την συστοιχία υπολογιστών Nessie του ινστιτούτου. Από την πρώτη ημέρα ανάθεσης του θέματος έως την συγγραφή και της τελευταίας λέξης της παρούσας εργασίας ο επιβλέπων ερευνητής κ. Γεώργιος Κόκκορης υπήρξε πολύτιμος καθοδηγητής. Η εργασία δεν θα μπορούσε να ολοκληρωθεί εάν δεν υπήρχε η υποστήριξη της οικογένειάς μου την οποία και ευχαριστώ βαθιά.

1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1 Η τραχύτητα ως αποτέλεσμα των διεργασιών κατασκευής

Ο κλάδος των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και γενικότερα της ηλεκτρονικής τεχνολογίας ακολουθώντας το νόμο του Moore ελαττώνει συνεχώς τις διαστάσεις των παραγόμενων δομών του. Οι δομές αυτές, βάσει της τεχνολογίας κατασκευής της οποίας έχουν προέλθει χαρακτηρίζονται από τραχύτητα. Η τραχύτητα αυτή δεν ακολουθεί ως μέγεθος τον κανόνα της μείωσης των διαστάσεων όπως οι σχεδιαζόμενες δομές αλλά εξαρτάται από παράγοντες όπως η μεθοδολογία και τεχνολογία κατασκευής και τα υλικά κατασκευής.



Σχήμα 1: α) Εικόνα από SEM γραμμών πολυμερούς μετά την λιθογραφική εμφάνισή τους. Πλευρική τραχύτητα αναπτύσσεται στις γραμμές [1]. β) Εικόνα από SEM πλάγιου τοιχώματος αυλακιού με χαρακτηριστική πλευρική τραχύτητα προερχόμενη από την πολυβηματική διεργασία Bosch [2]. γ) Εικόνα από AFM επιφάνειας PDMS. Η επιφάνεια τοποθετήθηκε σε αντιδραστήρα πλάσματος επαγωγικής σύζευξης όπου εγχάραχθηκε με πλάσμα O_2 σε θερμοκρασία $150\text{ }^\circ\text{C}$ [3]. δ) Επιφάνεια μονοκρυσταλικού Si (111) μετά από διαδικασία ιονβολής με ιοντική δέσμη. Η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων ήταν 60° και η θερμοκρασία επιφάνειας $60 - 70\text{ }^\circ\text{C}$ [4].

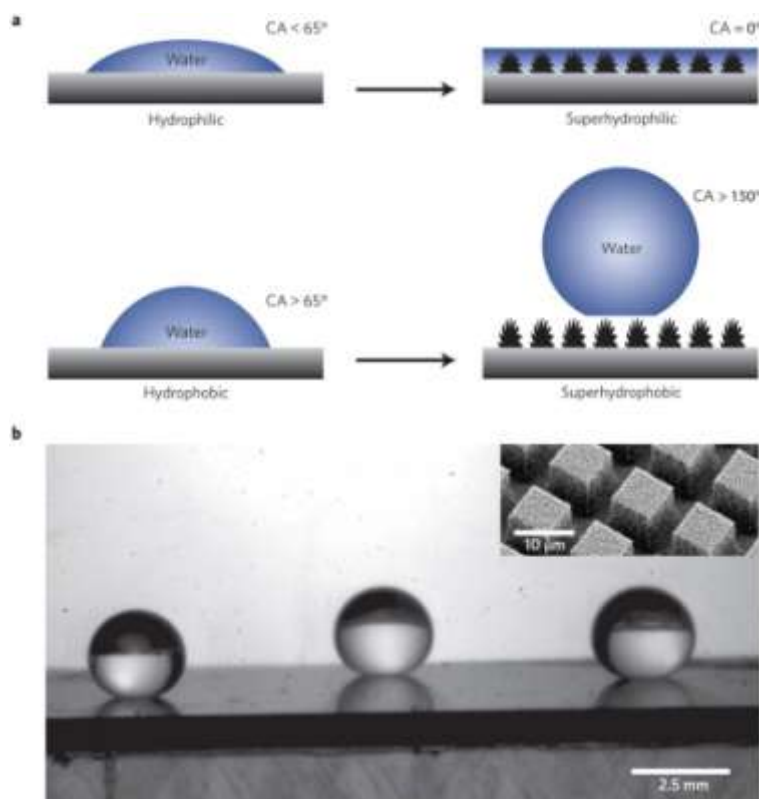
Όλες οι διεργασίες της μικρο- και νανοτεχνολογίας (εναπόθεση, εγχάραξη με πλάσμα, λιθογραφία, ιονβολή με δέσμη ιόντων) είναι διεργασίες που αναπτύσσουν τραχύτητα. Στο Σχήμα 1 (α) φαίνεται εικόνα από μικροσκόπιο σάρωσης ηλεκτρονίων (Scanning electron microscope, SEM) γραμμών πολυμερικής μάσκας εγχάραξης μετά τη διεργασία της λιθογραφίας οι οποίες διαθέτουν πλευρική τραχύτητα [1]. Στο Σχήμα 1(β) παρουσιάζονται τα πλευρικά τοιχώματα αυλακιού μετά από πολυβηματική διεργασία εγχάραξης με τη συνταγή Bosch [2], τα οποία διαθέτουν επανάληψη ενός μοτίβου στην τραχύτητα τους. Οι επαναλαμβανόμενες αυλακώσεις στο πλάγιο τοίχωμα οφείλονται στην εναλλαγή μεταξύ της εγχάραξης του υποστρώματος με πλάσμα και της απόθεσης σε αυτό στρώματος παθητικοποίησης (θωράκισης). Έχουν διενεργηθεί διάφορες μελέτες εξάλειψης της τραχύτητας αυτής με αρκετά καλά αποτελέσματα [5]. Στο Σχήμα

1 (γ) παρουσιάζεται εικόνα από μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (atomic force microscope, AFM) επιφάνειας πολυμερούς πολυ(διμέθυλο σιλοξάνης) (Polydimethylsiloxane, PDMS) μετά από διεργασία εγχάραξης με πλάσμα Οξυγόνου (O_2) [3] και στο Σχήμα 1(δ) φαίνεται επιφάνεια πυριτίου (Si) μετά από ιοντοβολή με ιοντική δέσμη [4].

Η τραχύτητα ως αποτέλεσμα των διεργασιών κατασκευής στη μικρο- και νανοτεχνολογία μπορεί να διαχωριστεί σε τραχύτητα ελεύθερων (σκίασης) επιφανειών [βλέπε Σχήμα 1(γ) και (δ)] και σε πλευρική τραχύτητα [βλέπε Σχήματα 1(α) και (β)]. Οι συνθήκες λειτουργίας όπως η πίεση, η θερμοκρασία, ο χρόνος έκθεσης για την κατασκευή μιας δομής καθώς και η τεχνική κατασκευής είναι αυτές που θα καθορίσουν το μέγεθος και τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά της τραχύτητας που θα αναπτυχθεί. **Η παρούσα εργασία εστιάζει στην μελέτη και τους μηχανισμούς δημιουργίας τραχύτητας ελεύθερων επιφανειών.**

1.2 Η σημασία της τραχύτητας ελεύθερης σκίασης επιφάνειας

Η δυνατότητα διαμόρφωσης της μορφολογίας μιας ελεύθερης επιφάνειας σε νανοκλίμακα επιτρέπει στον κατασκευαστή να προσδώσει σε αυτήν μακροσκοπικά χαρακτηριστικά. Η ανακλαστικότητα της επιφάνειας [6], η διαβροχή [7] και η επίδρασή της στη συμπεριφορά βιολογικού υλικού [8] είναι ορισμένα από τα χαρακτηριστικά που μπορούν να επηρεαστούν σε μια επιφάνεια, μεταβάλλοντας την τραχύτητά της.



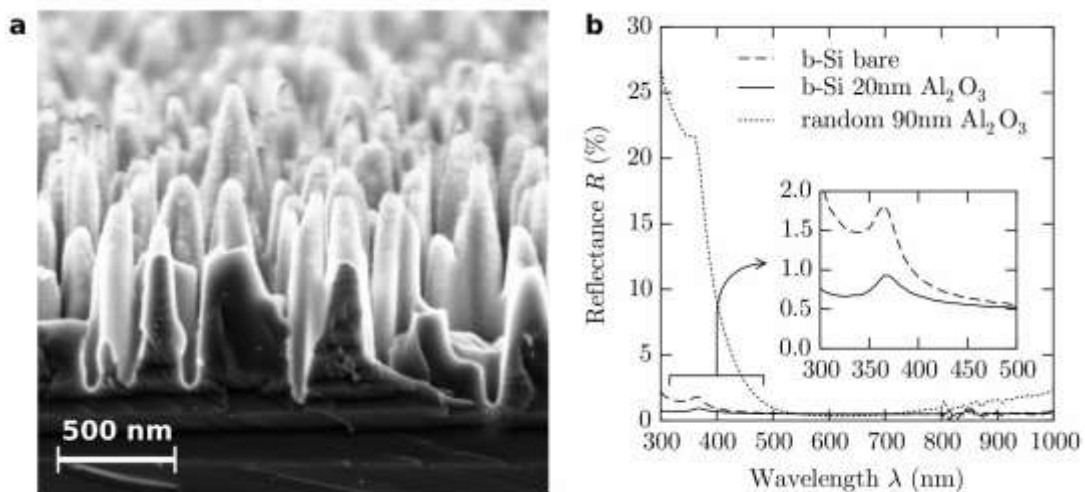
Σχήμα 2: Ενίσχυση της υδροφοβικότητας ή υδροφιλικότητας επιφάνειας ανάλογα με την αρχική κατάσταση αυτής ενισχύοντας την επιφανειακή τραχύτητά της [7].

Ο κλάδος της μικρομηχανικής, επίσης επηρεάζεται σημαντικά από την τραχύτητα των δομών της. Κατά την υλοποίηση μικρομηχανικών συστημάτων η ελαχιστοποίηση της

τραχύτητας επιφέρει σημαντική βελτίωση στην μηχανική σταθερότητα, την απόδοση και αξιοπιστία των συστημάτων αυτών [9]. Εξίσου σημαντική είναι η συμβολή της τραχύτητας σε ρευστομηχανικά συστήματα όπου η ανάμιξη διαφόρων ρευστών αποτελεί ζητούμενο [10].

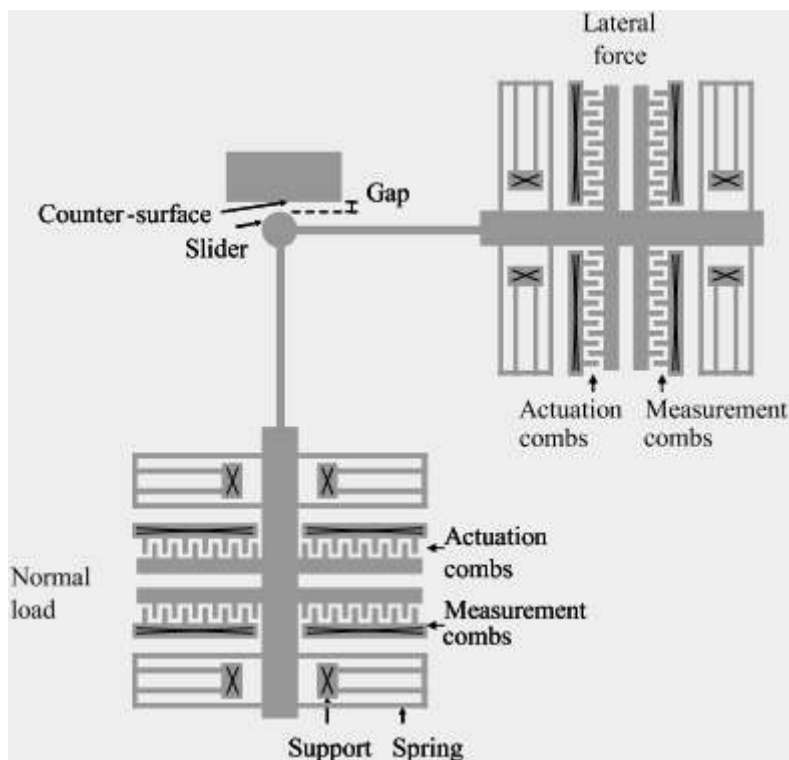
Για παράδειγμα, στο Σχήμα 2 φαίνεται ότι η τραχύτητα ενισχύει την υδροφοβικότητα ή την υδροφιλικότητα μιας αρχικά υδρόφοβης ή υδρόφιλης επιφάνειας.

Ένα δεύτερο χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι αυτό της ελαχιστοποίησης της ανακλαστικότητας επιφανειών φωτοβολταϊκών κελιών στο ορατό φάσμα του φωτός. Για την ελαχιστοποίηση της ανακλαστικότητας, τραχύτητα σε μορφή νανο-κολόνων (pillars) σχηματίζεται στην επιφάνεια Si χωρίς να χρειάζεται επιπλέον βήμα αντανάκλαστικής επίστρωσης (Σχήμα 3).



Σχήμα 3: α) Εικόνα από SEM επιφάνειας Si με κολόνες ύψους περίπου 800 nm και πλάτος στη βάση τους περίπου 200 nm. Οξειδίο αλουμίνιου (Al₂O₃) πάχους 20 nm εμφανίζεται ως φωτεινές περιοχές πάνω στις κολόνες. β) Διάγραμμα μέτρησης της ανακλαστικότητας στο φάσμα του ορατού φωτός [11].

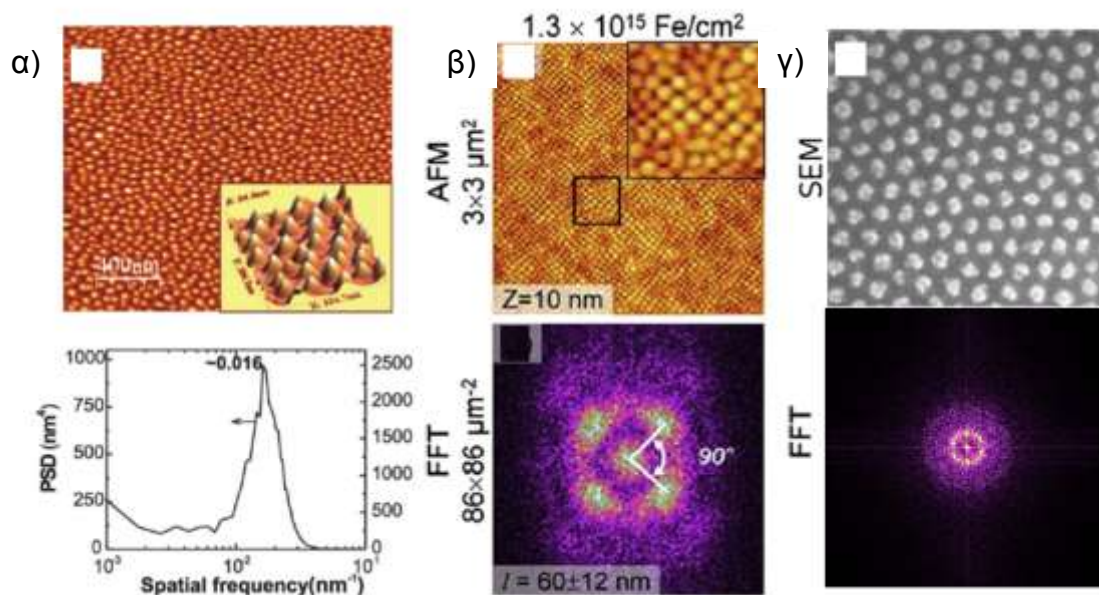
Στο Σχήμα 4 παρουσιάζεται ένα ακόμη παράδειγμα σε μικρομηχανικό σύστημα που περιέχει ολισθαίνουσες επιφάνειες. Τα φαινόμενα της τριβής και δόνησης στις επιφάνειες αυτές πηγάζουν από την υπάρχουσα τραχύτητα.



Σχήμα 4: Σχηματική απεικόνιση μετρητή τριβής με σκοπό την διερεύνηση της επίδρασης αυτής σε μικρομηχανικές διατάξεις. Το φαινόμενο της αύξησης της θερμοκρασίας και των δονήσεων που αναπτύσσονται σε ολισθαίνουσες επιφάνειες αποδίδονται στην τραχύτητα των επιφανειών αυτών [9].

1.3 Περιοδικές μορφολογίες

Κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες παρατηρείται πειραματικά η εμφάνιση οργάνωσης (περιοδικότητας) στη μορφολογία των επιφανειών μετά την εγχάραξη τους με πλάσμα [12] ή μετά από ιονβολή με δέσμη ιόντων (ion beam sputtering, IBS) [13]. Στο Σχήμα 5 προβάλλονται ελεύθερες επιφάνειες στις οποίες σχηματίζονται τελείες (dots) οι οποίες οργανώνονται σε διάφορα μοτίβα. Συγκεκριμένα στο Σχήμα 5(α) φαίνεται εικόνα από AFM επιφάνειας πολυ(μεθακρυλικού μεθυλεστέρα) [Poly(methyl methacrylate), PMMA]. Η επιφάνεια εγχάραχθηκε με πλάσμα O_2 . Στο ίδιο σχήμα απεικονίζεται και το διάγραμμα πυκνότητας φάσματος ισχύος (power spectral density, PSD) της επιφάνειας. Το διάγραμμα αυτό μαρτυρά την ύπαρξη περιοδικότητας της επιφάνειας με χαρακτηριστικό μήκος κύματος ~ 62 nm [14]. Στο Σχήμα 5(β) φαίνεται εικόνα από AFM επιφάνειας Si έπειτα από εγχάραξη με δέσμη ιόντων Αργού (Ar^+). Γύρω από την επιφάνεια Si υπάρχουν τέσσερις στόχοι Σιδήρου (Fe) συμμετρικά τοποθετημένοι ως προς αυτήν [15]. Fe από τους στόχους έχει μεταφερθεί πάνω στην επιφάνεια Si επηρεάζοντας την τραχύτητα που αναπτύσσεται σε αυτή κατά την ιονβολή. Στην πράξη συμβαίνει ταυτόχρονα εγχάραξη (του Si) και απόθεση (Fe στο Si). Στο ίδιο σχήμα φαίνεται το διάγραμμα του μετασχηματισμού Fourier της επιφάνειας Si. Οι κορυφές του διαγράμματος μαρτυρούν σε αυτή την περίπτωση την ύπαρξη ανιστροπικής οργάνωσης (περιοδικότητας) προσανατολισμένης σε ορισμένες κατευθύνσεις με περίοδο ~ 60 nm [15]. Στο Σχήμα 5(γ) φαίνεται εικόνα από SEM επιφάνειας αντιμονιούχου Γαλλίου (GaSb) μετά από διεργασία ιονβολής με δέσμη ιόντων. Οι σχηματιζόμενες τελείες (dots) οργανώνονται σε εξαγωνική διάταξη γεγονός που μαρτυρά και ο μετασχηματισμός Fourier της επιφάνειας που δίνεται κάτω από την εικόνα SEM [16].

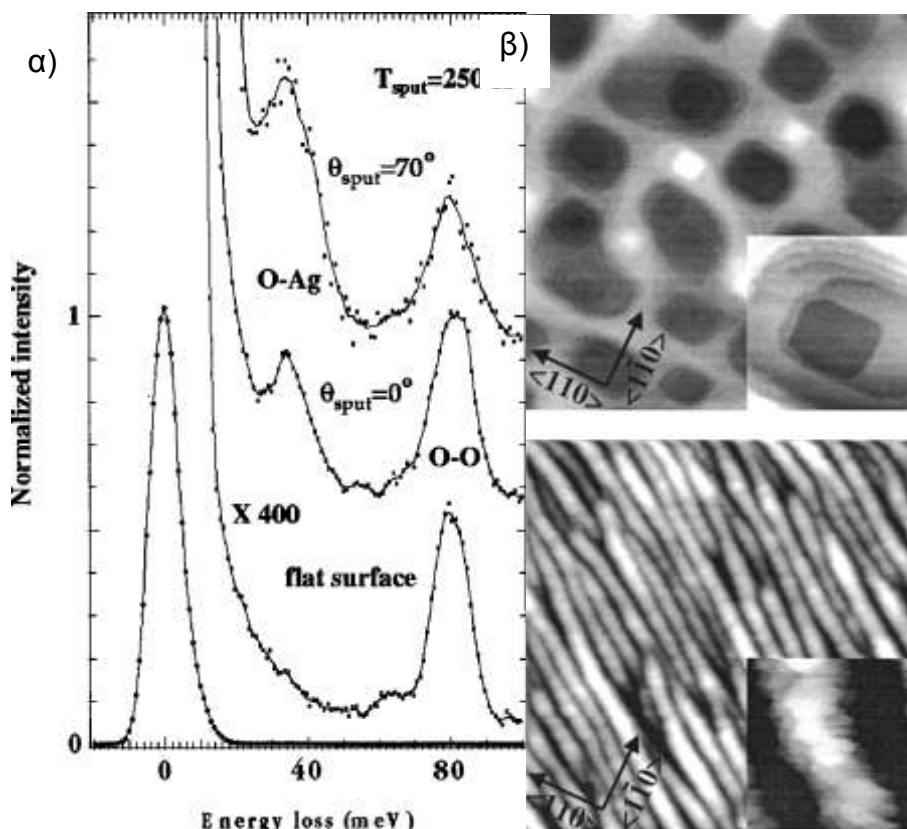


Σχήμα 5: α) Εικόνα από AFM επιφάνειας PMMA μετά από εγχάραξη για 46 sec με πλάσμα O_2 [14]. β) Εικόνα από AFM επιφάνειας Si μετά από διεργασία ιονβολής με δέσμη ιόντων Ar^+ και ταυτόχρονης απόθεσης Fe προερχόμενου από γειτονικούς στόχους [15]. γ) Εικόνα από SEM επιφάνειας GaSb μετά από ιονβολή με δέσμη ιόντων Ar^+ σε ενέργεια 420 eV για 400 sec [16].

Η περιοδικότητα αποδεικνύεται ότι είναι χρήσιμη σε εφαρμογές όπως για παράδειγμα η μαγνητική αποθήκευση [17, 18]. Σημειώνεται ότι, η βιομηχανία σκληρών δίσκων έχει προχωρήσει στην ανάπτυξη επιφανειών μαγνητικών νησίδων διάστασης μερικών νανομέτρων οι οποίες χωρίς περιοδικότητα θα ήταν μη λειτουργικές. Η αυστηρά οργανωμένη δόμηση των μοναδιαίων στοιχείων μαγνητικής αποθήκευσης (bit) η οποία διαβάζεται και γράφεται από την αντίστοιχη βελόνα του σκληρού δίσκου επιτρέπει την χαρτογράφησή τους και τελικά την προσπέλασή τους. Άναρχη δόμηση των μονάδων αυτών θα οδηγούσε σε αναμενόμενη αδυναμία χαρτογράφησης και προσπέλασης καθώς και σπατάλη διαθέσιμου χώρου δόμησης [19].

Σημαντική συνεισφορά στην κατάλυση χημικών αντιδράσεων έχει αποδειχθεί πως επιφέρει η μορφολογία των ελεύθερων επιφανειών και η περιοδικότητά τους [20, 21]. Στο Σχήμα 6(α) φαίνονται τα υψηλής ανάλυσης φάσματα απώλειας ενέργειας ηλεκτρονικού μικροσκοπίου (High resolution electron energy loss spectroscopy, HREELS) σε τρεις επιφάνειες Αργύρου (Ag). Η πρώτη βασική επιφάνεια είναι η επίπεδη ενώ οι άλλες δύο παρουσιάζουν μορφολογία αυλακώσεων και οπών αντίστοιχα. Οι μορφολογίες αυτές επιτεύχθηκαν με ιονβολή με δέσμη ιόντων σε διαφορετικές γωνίες πρόσπτωσης. Στην περίπτωση των οπών η γωνία πρόσπτωσης είναι σχεδόν μηδενική (κάθετη δέσμη ιόντων στην επιφάνεια) ενώ στην περίπτωση των αυλακώσεων η γωνία πρόσπτωσης της ιοντικής δέσμης είναι κοντά στις 70° . Οι δύο επιφάνειες αργύρου που διαθέτουν μορφολογία δίνονται στο Σχήμα 6(β).

Η φασματική ανάλυση απώλειας ενέργειας που προβάλλεται στο Σχήμα 6(α) καταδεικνύει πως η επιφάνεια με τις αυλακώσεις ($\theta=70^\circ$) ενισχύει την πιθανότητα διάσπασης των μορίων O_2 κατά περίπου 9% [20].



Σχήμα 6: α) Υψηλής ανάλυσης φάσμα απώλειας ενέργειας δέσμης ηλεκτρονικού μικροσκοπίου για τρεις επιφάνειες αργύρου. β) Επιφάνειες αργύρου με περιοδική μορφολογία μετά από εγχάραξη με ιοντική δέσμη Ne^+ . Επάνω, γωνία πρόσπτωσης 0° , κάτω, γωνία πρόσπτωσης 70° [20].

1.4 Χαρακτηρισμός και μετρολογία τραχύτητας

Ο χαρακτηρισμός της τραχύτητας μιας επιφάνειας αποτελεί πολύπλοκο πρόβλημα. Η ανάγκη βελτίωσης της λειτουργικότητας των επιφανειών οδηγεί στην ανάγκη βελτίωσης του χαρακτηρισμού τους. Τα τελευταία χρόνια συντελείται έρευνα μεγάλης κλίμακας στον τομέα της ανάπτυξης μεθοδολογιών χαρακτηρισμού των επιφανειών ώστε να είναι δυνατή η βέλτιστη ερμηνεία της λειτουργικότητας που παρουσιάζουν.

Ενώ αρχικά, μία επιφάνεια χαρακτηριζόταν μετρώντας σε μία γραμμή την τυπική απόκλιση ύψους (Root Mean Square, RMS) αυτής, στη συνέχεια κρίθηκαν αναγκαίες μετρήσεις στο σύνολο της επιφάνειας και χαρακτηρισμός αυτών. Εργασίες προτυποποίησης των μεθοδολογιών χαρακτηρισμού στο σύνολο της επιφάνειας ξεκίνησαν πριν το 1993 [22] και μέχρι το 2003 ένας βασικός οδηγός προτυποποίησης είχε ολοκληρωθεί [23]. Ο διεθνής οργανισμός προτυποποίησης (ISO) υπό τον κλάδο «Γεωμετρικά Χαρακτηριστικά Προϊόντος - υφή επιφάνειας» (GPS - surface texture) έχει εκδώσει 36 προτυποποιήσεις μέχρι σήμερα από τις οποίες 13 αναφέρονται σε όργανα μέτρησης επιφανειών. Ειδικότερα με την οδηγία (ISO 25178-2:2012) [24] δίνονται ορισμοί όρων και παραμέτρων για τον χαρακτηρισμό μιας επιφάνειας. Ο χαρακτηρισμός μιας επιφάνειας ως ισοτροπική ή μη, με ή χωρίς περιοδικότητα είναι κρίσιμος καθώς αυτά τα χαρακτηριστικά μπορούν να είναι χρήσιμα σε εφαρμογές όπως διαπιστώνεται και από τις § 1.2 και 1.3.

Η τραχύτητα ποσοτικοποιείται με την βοήθεια στατιστικών παραμέτρων πρώτης τάξης όπως το μέσο ύψος, η τυπική απόκλιση ύψους (RMS), η κύρτωση (kurtosis), και η ασυμμετρία (skewness) και δεύτερης τάξης όπως το μήκος συσχέτισης ξ , το διάγραμμα

πυκνότητας φάσματος ισχύος (power spectral density, PSD), η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης (auto correlation function, ACF) και η συνάρτηση συσχέτισης ύψους-ύψους (height-height correlation function, HHCF).

Οι στατιστικές παράμετροι πρώτης τάξης εξετάζουν τη μεταβολή των υψών μιας επιφάνειας χωρίς να λαμβάνουν υπόψη την συσχέτιση που μπορεί να υπάρχει μεταξύ υψών γειτονικών θέσεων. Το γεγονός αυτό επιτρέπει στα μεγέθη αυτά να είναι ακριβή για όλων των ειδών τις επιφάνειες, ισοτροπικές και μη, ανεξάρτητα του μεγέθους του δείγματος ή της κατεύθυνσης της μέτρησης.

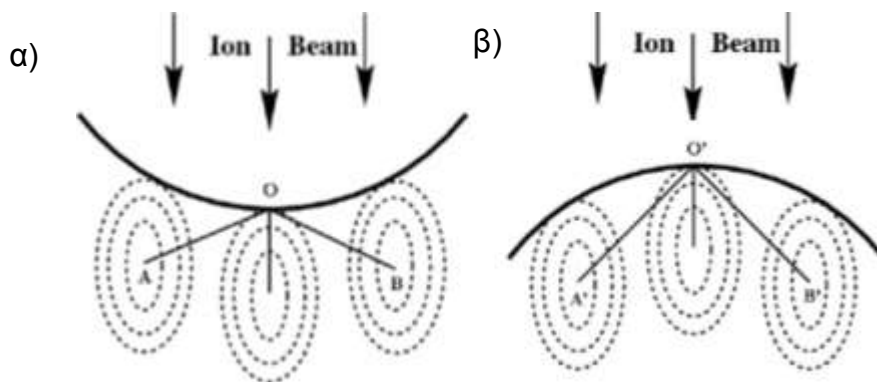
Οι στατιστικές παράμετροι δεύτερης τάξης παρέχουν επιπλέον πληροφορίες για τον χαρακτηρισμό μιας επιφάνειας καθώς λαμβάνουν υπόψη το συσχετισμό των υψών γειτονικών θέσεων με την απόσταση αυτών. Οι παράμετροι αυτές εξετάζουν επίσης την πιθανότητα ύπαρξης οργάνωσης (περιοδικότητας) στην επιφάνεια. Λόγω της φύσης των παραμέτρων δεύτερης τάξης, η δειγματοληψία μέτρησης επηρεάζει έντονα τις τελικές τιμές. Επιπλέον, στις περιπτώσεις μη ισοτροπικών επιφανειών η κατεύθυνση των δειγματοληπτικών μετρήσεων ενδέχεται να αλλοιώσει το αποτέλεσμα. Για την απεξάρτηση των παραμέτρων από την κατεύθυνση μέτρησης χρησιμοποιούνται συνήθως δυσδιάστατες απεικονίσεις αυτής, όπως η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης και το διάγραμμα PSD [25].

1.5 Μηχανισμοί δημιουργίας τραχύτητας

Από τις αρχές της δεκαετίας του 1970 και πιο πριν έχουν αναπτυχθεί διάφορες θεωρίες – μηχανισμοί οι οποίοι επιχειρούν να αιτιολογήσουν το φαινόμενο της δημιουργίας τραχύτητας στην τεχνολογία κατασκευής μικρο- και νανοδιατάξεων. Ακολούθως παρουσιάζονται με συνοπτικό τρόπο οι επικρατέστεροι μηχανισμοί που έχουν προταθεί για διάφορες τεχνολογίες εγχάραξης όπως η φυσική εγχάραξη (ιονβολή) με δέσμη ιόντων και η τεχνολογία πλάσματος. Οι παρακάτω μηχανισμοί συνήθως συνυπάρχουν στις τεχνολογίες αυτές αλλά επιδρούν στις επιφάνειες σε διαφορετικό κατά περίπτωση βαθμό. Πρώτος μηχανισμός που παρουσιάζεται είναι η εξάρτηση της απόδοσης εγχάραξης από την καμπυλότητα της εγχαρασόμενης επιφάνειας. Δεύτερος μηχανισμός είναι η πρώτη τάξης επανεκπομπή προσπίπτοντος σωματιδίου. Τρίτη κατά σειρά παρουσιάζεται η ανάπτυξη μηχανικών τάσεων στην επιφάνεια. Τέταρτος μηχανισμός είναι η ταυτόχρονη εγχάραξη επιφάνειας και εναπόθεση παρεμποδιστών εγχάραξης σε αυτήν.

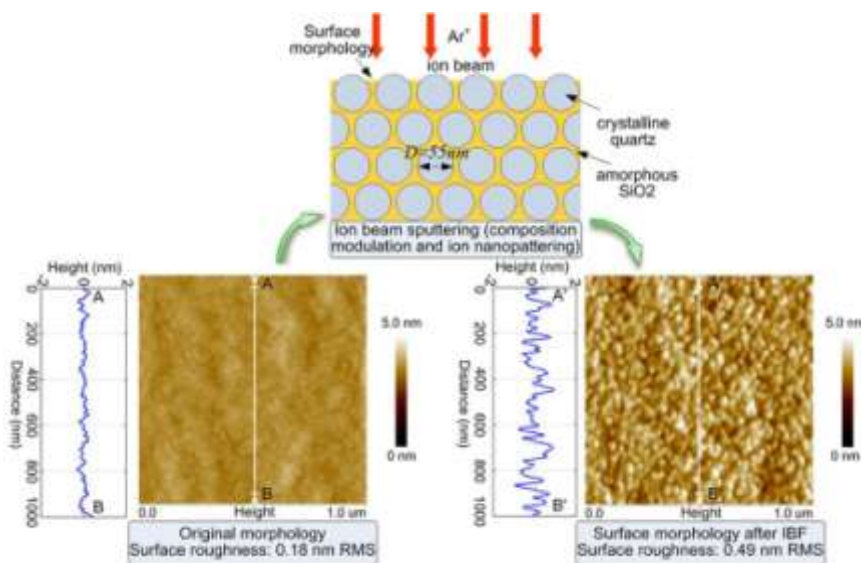
1.5.1 Απόδοση εγχάραξης εξαρτώμενη από την καμπυλότητα της επιφάνειας

Η θεωρία του Sigmund [26, 27] σημειώνει ότι όταν ένα ιόν διεισδύει σε μια επιφάνεια διανέμει την κινητική του ενέργεια εντός του υποστρώματος ακολουθώντας μια Γκαουσιανή κατανομή. Η μεταφορά της ενέργειας γίνεται με διαδοχικές συγκρούσεις (Collision Cascade, CC) καθώς και με ηλεκτρονικές διεγέρσεις. Το βάθος απορρόφησης της ενέργειας των ιόντων εξαρτάται και είναι ανάλογο του βάθους διείσδυσης του ιόντος. Οι Bradley και Harper [28] συσχετίζουν την απόδοση εγχάραξης μιας επιφάνειας με την απορροφούμενη ενέργεια. Η θεώρηση αυτή καταδεικνύει ότι η απόδοση εγχάραξης παρουσιάζει τοπικές μεταβολές που οφείλονται στην καμπυλότητα της επιφάνειας. Οι τοπικές αυτές μεταβολές οδηγούν στην ανάπτυξη τραχύτητας. Πιο συγκεκριμένα, μια κοίλη επιφάνεια [Σχήμα 7(α)] εγχαρασσεται με μεγαλύτερο ρυθμό απ' ό,τι μια κυρτή [Σχήμα 7(β)] λόγω της μικρότερης απόστασης της επιφάνειας με τα κέντρα ενεργειακής απόθεσης (ευθύγραμμα τμήματα OA και OB σε σχέση με OA' και OB') [29].



Σχήμα 7: Σχηματική αναπαράσταση της τοπικής μεταβολής που παρουσιάζει η απόδοση εγχάραξης λόγω της καμπυλότητας της επιφάνειας. Μια κοίλη επιφάνεια α) εγχάρασσεται με μεγαλύτερο ρυθμό απ' ό,τι μια κυρτή β) λόγω της μικρότερης απόστασης (ευθύγραμμα τμήματα OA και OB) που διανύει η ενέργεια σύγκρουσης από το σημείο A στο σημείο O σε σχέση με το σημείο A' στο O' [29].

Ο παραπάνω μηχανισμός είναι ο κύριος μηχανισμός ανάπτυξης τραχύτητας σε περιπτώσεις βομβαρδισμού επιφάνειας με ιοντική δέσμη. Στο Σχήμα 8 δίνεται ένα παράδειγμα επιφάνειας πριν και μετά την διεργασία βομβαρδισμού με ιόντα [30].

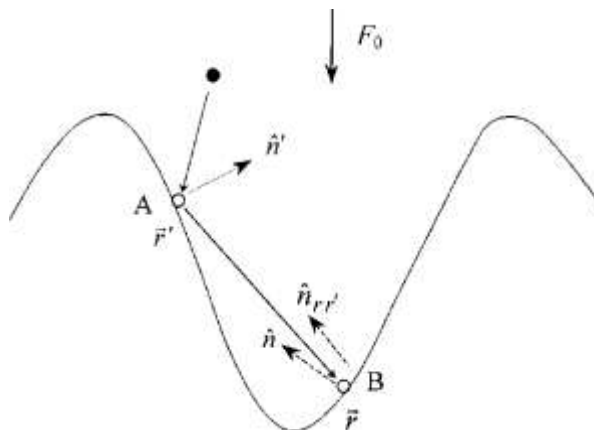


Σχήμα 8: Εικόνες από AFM υαλοκεραμικής επιφάνειας (Zerodur) πριν και μετά την φυσική εγχάραξη με δέσμη ιόντων [30].

1.5.2 Πρώτης τάξης επανεκπομπή προσπίπτοντος σωματιδίου

Στα συστήματα εγχάραξης με πλάσμα έχουν προταθεί διάφοροι μηχανισμοί δημιουργίας τραχύτητας, ένας από αυτούς είναι η πρώτης τάξης επανεκπομπή σωματιδίου. Τα ενεργά συστατικά που συμμετέχουν στην εγχάραξη με πλάσμα είναι κυρίως ρίζες, ουδέτερα συστατικά και ιόντα. Τα τελευταία συμμετέχουν στη διαδικασία εγχάραξης είτε με **ιονβολή** (physical sputtering) είτε υποβοηθώντας τις χημικές αντιδράσεις στην επιφάνεια (**υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη**, ion enhanced etching). Τα παραπάνω σωματίδια κατά την πρόσπτωσή τους στην επιφάνεια έχουν μια πιθανότητα προσκόλλησης εξαρτώμενη από διάφορους παράγοντες. Οι Drotar et al. [31] πρότειναν πιθανότητα προσκόλλησης 0 στην πρώτη πρόσκρουση και 1 στην

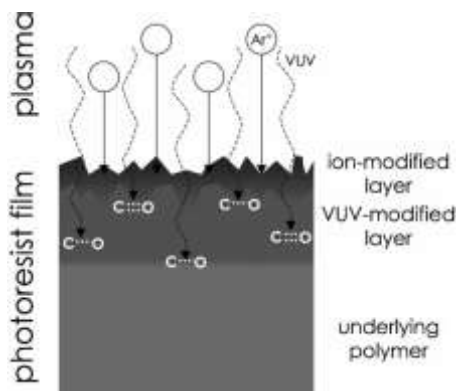
αμέσως επόμενη για τα ουδέτερα συστατικά του πλάσματος. Αν και αυτή η θεώρηση δεν έχει κάποιο στέρεο φυσικό υπόβαθρο (γιατί να αλλάζει η πιθανότητα προσκόλλησης των ουδέτερων από σύγκρουση σε σύγκρουση και γιατί να αλλάζει με αυτό τον τρόπο), το αποτέλεσμα είναι, σε επιφάνειες που υπάρχουν κοιλάδες και κορυφές να παρατηρείται ότι στις κοιλάδες φτάνουν τελικά περισσότερα ουδέτερα σωματίδια απ' ό,τι στις κορυφές. Η συνέπεια είναι οι κοιλάδες να εγχάρασσονται με μεγαλύτερο ρυθμό απ' ό,τι οι κορυφές. Η διαφορά αυτή στους ρυθμούς εγχάραξης κοιλάδων και κορυφών ενισχύει τελικά την τραχύτητα της επιφάνειας.



Σχήμα 9: Πρώτης τάξης επανεκπομπή (πιθανότητα προσκόλλησης ίση με 0 στην πρώτη και 1 στη δεύτερη πρόσκρουση) σωματιδίου εγχάραξης από τη θέση A στη θέση B. Λόγω της πρώτης τάξης επανεκπομπής, η συνολική ροή των ουδέτερων σωματιδίων είναι μεγαλύτερη στις κοιλάδες μιας επιφάνειας απ' ό,τι στις κορυφές [31].

1.5.3 Ανάπτυξη τάσεων στην επιφάνεια

Κατά τη διεργασία εγχάραξης (ή ιονβολής με δέσμη ιόντων) με ταυτόχρονη έκθεση σε υπεριώδη ακτινοβολία (VUV), παρατηρείται επίσης ανάπτυξη τραχύτητας. Στην περίπτωση αυτή, ο μηχανισμός που αποτελεί κύριο παράγοντα ανάπτυξης τραχύτητας είναι η ανάπτυξη τάσεων στην επιφάνεια του υποστρώματος. Συγκεκριμένα, η παραπάνω διεργασία διαχωρίζει το υπόστρωμα σε δύο ζώνες διαφορετικής ελαστικότητας: Η ζώνη που βρίσκεται πιο κοντά στην επιφάνεια είναι λιγότερο ελαστική της ζώνης που βρίσκεται κάτω από αυτήν. Η υπεριώδης ακτινοβολία δρώντας σε μεγαλύτερο πάχος απ' ό,τι τα ιόντα διασπά τους δεσμούς του υποστρώματος ενώ η δράση των ιόντων περιορίζεται σε μικρότερο πάχος και οδηγεί σε ένα «σκληρότερο» ή περισσότερο άκαμπτο στρώμα. Η ανάπτυξη θερμοκρασίας (αναπόφευκτη λόγω του πλάσματος) και η συνεπακόλουθη ψύξη με το τέλος της διεργασίας εγχάραξης οδηγεί στην ανάπτυξη μηχανικών τάσεων [32]. Οι μηχανικές αυτές τάσεις του λιγότερο άκαμπτου επιφανειακού στρώματος εκτονώνονται παραμορφώνοντας την επιφάνεια και δημιουργώντας τραχύτητα. Στο Σχήμα 10 φαίνεται πολυμερές χωρισμένο στις ζώνες επίδρασης της ακτινοβολίας και της δέσμης ιόντων που έχει δεχτεί.

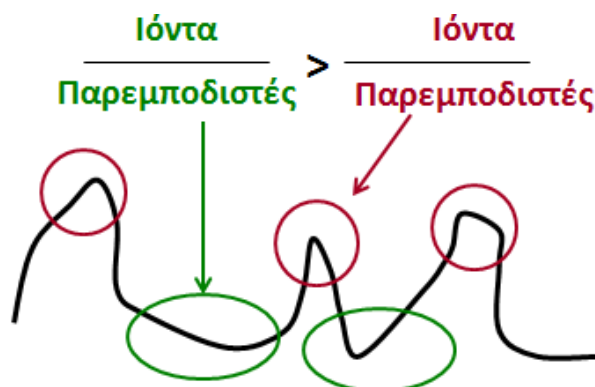


Σχήμα 10: Ζώνες πολυμερούς υλικού κατά την ταυτόχρονη έκθεσή του σε υπεριώδη ακτινοβολία και δέσμη ιόντων (όπως και στο πλάσμα). Η υπεριώδης ακτινοβολία δρώντας σε διαφορετικά βάθη από τα ιόντα διαφοροποιεί τις μηχανικές ιδιότητες του σώματος οδηγώντας το σώμα σε ανάπτυξη τάσεων στην επιφάνεια του [32].

1.5.4 Εγχάραξη με ταυτόχρονη απόθεση παρεμποδιστών εγχάραξης

Κατά την εγχάραξη με πλάσμα ή σε σύστημα ιοντικής δέσμης μια επιφάνεια βομβαρδίζεται από ιόντα και ουδέτερα συστατικά όπως έχει σημειωθεί στην § 1.5.2. Τα ουδέτερα συστατικά μπορούν όμως να λειτουργούν και ως τοπικές μάσκες εγχάραξης στη μικρο- ή νανοκλίμακα. Σε αυτή την περίπτωση ονομάζονται **παρεμποδιστές εγχάραξης (etch-inhibitors)**. Τον ρόλο αυτό των παρεμποδιστών εγχάραξης παίζουν συνήθως άτομα μετάλλου από τα τοιχώματα του αντιδραστήρα πλάσματος [33] ή από στόχους μετάλλου που έχουν τοποθετηθεί εντός των συστημάτων ιονβολής με δέσμη ιόντων [15].

Όταν οι παρεμποδιστές εγχάραξης φτάνουν με ισοτροπική κατανομή κατευθύνσεων στην επιφάνεια, η εξήγηση για την αύξηση της τραχύτητας περιγράφεται στο Σχήμα 11 [34]. Λόγω της ισοτροπικής κατανομής τους και του φαινομένου της σκίασης, περισσότεροι παρεμποδιστές εγχάραξης φτάνουν στις κορυφές απ' ότι στις κοιλάδες, ενώ τα ιόντα παραμένουν περίπου ίδια στις κοιλάδες και στις κορυφές λόγω της κάθετα κατευθυνόμενης κατανομής τους. Έτσι, οι κοιλάδες εγχαράσσονται ταχύτερα από τις κορυφές αυξάνοντας την τραχύτητα της επιφάνειας.



Σχήμα 11: Σε ένα σύστημα όπου υπάρχουν παρεμποδιστές, ο λόγος της ροής των ιόντων προς αυτή των παρεμποδιστών στην επιφάνεια καθορίζει την απόδοση εγχάραξης της επιφάνειας. Όσο μικρότερος είναι αυτός ο λόγος τόσο πιο δύσκολα γίνεται η εγχάραξη στο σημείο αυτό. Αν οι παρεμποδιστές έχουν ισοτροπική κατανομή, τότε λόγω σκίασης ο λόγος αυτός είναι μεγαλύτερος στις κορυφές από ότι στις κοιλάδες της επιφάνειας με συνέπεια οι κοιλάδες να εγχαράσσονται ταχύτερα από τις κορυφές [34].

Με αυτό το μηχανισμό έχει υπολογιστεί πώς ένα ποσοστό παρεμποδιστών κοντά στο 5% της προσπίπτουσας ροής είναι ικανό να δώσει επιφάνειες με περιοδικότητα ενώ εγχάραξη με πολύ χαμηλά ποσοστά παρεμποδιστών (1-3%) δεν αναπτύσσει περιοδική αλλά τυχαία τραχύτητα [35].

Οι Zhang et al. [36] θεωρούν ότι η πρόσπτωση των παρεμποδιστών οδηγεί στην ανάπτυξη τραχύτητας λόγω αλλαγής της απόδοσης εγχάραξης σε τοπικό επίπεδο της επιφάνειας. Ισχυρίζονται ότι η αλλαγή στην απόδοση εγχάραξης οφείλεται σε διαχωρισμό φάσεων που συμβαίνει στην εγχαρασόμενη επιφάνεια και υποβοηθείται από το βομβαρδισμό με ιόντα υψηλής ενέργειας. Και σε αυτή τη μελέτη, τραχύτητα αναπτύσσεται στην επιφάνεια όταν οι παρεμποδιστές ξεπεράσουν μια επιφανειακή συγκέντρωση. Μάλιστα, θεωρούν ότι τραχύτητα αναπτύσσεται μόνο όταν οι παρεμποδιστές σχηματίζουν σταθερές ενώσεις με το υπόστρωμα. Για παράδειγμα, παρατήρησαν δημιουργία τραχύτητας όταν οι παρεμποδιστές ήταν Fe, Mo, ή Pt και όχι στην περίπτωση όπου οι παρεμποδιστές ήταν Au ή Cu [37, 38] τονίζοντας τη σημασία της δημιουργίας χημικών ενώσεων στην επιφάνεια στη δημιουργία τραχύτητας. Το συμπέρασμα τους αμφισβητήθηκε από πειράματα των Moon et al. [39] οι οποίοι χρησιμοποιώντας μέταλλα τα οποία δεν σχηματίζουν χημική ένωση με την επιφάνεια έδειξαν ότι επίσης αναπτύσσεται τραχύτητα.

1.6 Υπολογιστικά μοντέλα για την εξέλιξη της μορφολογίας επιφανειών

Κατά το παρελθόν έχουν χρησιμοποιηθεί διάφορα υπολογιστικά μοντέλα για την εξέλιξη της τραχύτητας επιφανειών. Οι αλγόριθμοι εξέλιξης της μορφολογίας ή τοπογραφίας επιφανειών που έχουν κατά καιρούς χρησιμοποιηθεί βασίζονται στη μέθοδο χορδής (string algorithms) [40], στη μέθοδο των χαρακτηριστικών (method of characteristics, shock tracking algorithms) [41], στη μέθοδο των ισοϋψών (level set algorithms) [42, 43] και την μέθοδο των κελιών (cell based algorithms) [44]. Έχουν επίσης αναπτυχθεί υβριδικά μοντέλα προσομοίωσης [45] τα οποία συνδυάζουν τα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των παραπάνω μεθόδων.

Η **μέθοδος της χορδής** [45] εξετάζει την εξέλιξη μιας τομής (προφίλ) μιας επιφάνειας ως διακριτοποιημένα σημεία συνδεδεμένα μεταξύ τους με ευθύγραμμα τμήματα. Τα σημεία αυτά κινούνται κάθετα ως προς τα ευθύγραμμα τμήματα σύμφωνα με τον τοπικό ρυθμό εγχάραξης της επιφάνειας. Βάσει γεωμετρικών κανόνων συνοχής στη συνέχεια και με δεδομένη την κατεύθυνση και το ρυθμό εγχάραξης των σημείων εξελίσσεται η προαναφερθείσα τομή. Προβλήματα αστάθειας [46] εμφανίζονται σε περιπτώσεις όπου η χορδή παρουσιάζει ασυνέχεια στην κλίση της. Σε αυτά τα σημεία είναι πιθανό να δημιουργηθούν βρόχοι για την απομάκρυνση των οποίων χρειάζονται πρόσθετες εμπειρικές τεχνικές.

Η **μέθοδος των χαρακτηριστικών** [46] βασίζεται στο γεγονός ότι μια εξελισσόμενη επιφάνεια μπορεί να περιγραφεί από μια διαφορική εξίσωση μερικών παραγώγων. Εάν ο ρυθμός εγχάραξης ή εναπόθεσης ενός σημείου μιας επιφάνειας δεν εξαρτάται από την κλίση (πρώτη παράγωγος της θέσης) του σημείου ή ανώτερη παράγωγο αυτού τότε η διαφορική εξίσωση είναι πρώτης τάξης και άρα επιλύσιμη με τη μέθοδο των χαρακτηριστικών. Σε αυτή την περίπτωση προβλήματα ασυνέχειας επίσης εμφανίζονται όταν δύο χαρακτηριστικές τέμνονται. Τα προβλήματα αυτά επιλύονται με τη προσθήκη γεωμετρικών κανόνων στον αλγόριθμο.

Η **μέθοδος των ισοϋψών** [47] βασίζεται στην έννοια της πεπλεγμένης συνάρτησης. Η εξέλιξη της επιφάνειας σε αυτή την περίπτωση παρακολουθείται έμμεσα από την εξέλιξη της συνάρτησης ισοϋψών στην ισοϋψή μηδέν. Η επίλυση της πεπλεγμένης

συνάρτησης γίνεται με χρήση υπερβολικών νόμων διατήρησης. Προβλήματα ασυνέχειας και συγχώνευσης σε αυτή την περίπτωση αντιμετωπίζονται χωρίς εμπειρικούς κανόνες αλλά από την ίδια την πεπλεγμένη συνάρτηση. Ωστόσο η μέθοδος αυτή μειονεκτεί λόγω αυξημένων απαιτήσεων σε μνήμη και υπολογιστικό χρόνο. Εξέλιξη της μεθόδου αυτής αποτελεί η μέθοδος ισουψών στενής ζώνης η οποία περιορίζει τα προβλήματα αυτά.

Οι **μέθοδοι κελιών** [44] βασίζονται στην απεικόνιση των δομών με κελιά (ψηφίδες), κάθε ένα από τα οποία μπορεί να περιέχει περισσότερα από ένα υλικά. Τα όρια των κελιών χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό της τοπογραφίας της δομής. Οι μέθοδοι αυτές μπορούν να χειριστούν εύκολα συγχωνεύσεις συνόρων. Ωστόσο, ο υπολογισμός της κλίσης του συνόρου είναι περισσότερο πολύπλοκος από τις υπόλοιπες μεθόδους. Επίσης, οι μέθοδοι αυτές έχουν υψηλότερο υπολογιστικό κόστος σε χρόνο και μνήμη. Η εξέλιξη τελικά της επιφάνειας επιτυγχάνεται με την προσθήκη ή αφαίρεση κελιών.

Από τις παραπάνω μεθόδους εξέλιξης μορφολογίας ή τοπογραφίας, οι μέθοδοι των κελιών είναι οι ευρύτερα χρησιμοποιούμενες σε περιπτώσεις εξέλιξης τραχύτητας επιφανειών. Στον Πίνακα 1 που ακολουθεί παρουσιάζονται σχετικές εργασίες και σημειώνονται τα βασικά χαρακτηριστικά τους.

Στην παρούσα εργασία, το υπολογιστικό μοντέλο για την εξέλιξη της μορφολογίας μιας επιφάνειας βασίζεται στη μέθοδο των κελιών. Η μέθοδος Monte Carlo [48] χρησιμοποιείται για τη δειγματοληψία αρχικών κατευθύνσεων, κατευθύνσεων επανεκπομπής των προσπιπτόντων στην επιφάνεια σωματιδίων καθώς και τις «αποφάσεις» για εγχάραξη και απόθεση.

Πίνακας 1: Εργασίες που μελετούν την εξέλιξη μορφολογίας επιφανειών και χρησιμοποιούν τη μέθοδο των κελιών.

Εργασία	Σύστημα εγχάραξης-απόθεσης	Τύπος Προσομοιωτή (μέθοδος)	Διάσταση προσομοιωτή	Συγκριση με Πειραματικά Δεδομένα	Υπολογιζόμενα Μεγέθη	Διαστάσεις επιφάνειας
Kawai 2007 [49]	Εγχάραξη δομής Si με σε πλάσμα Cl ₂ (Υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη) & Ιονβολή Si με Ar+	Monte Carlo – κελιών	3D	NAI	RMS, 2D-PSD	250×250 nm ²
Tsuda et al. 2011 [50]	Εγχάραξη Si σε πλάσμα Cl ₂ (υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη)	Monte Carlo – κελιών	2D	NAI	RMS ¹ , R _p ² , R _v ³ , ER ⁴ ,	50×50 nm ²

¹ Τυπική απόκλιση μέσου ύψους επιφάνειας.

² Μέγιστο ύψος κορυφής επιφάνειας από το μέσο ύψος

³ Μέγιστο βάθος κοιλάδας επιφάνειας από το μέσο ύψος.

⁴ Ρυθμός εγχάραξης.

Εργασία	Σύστημα εγχάραξης - απόθεσης	Τύπος Προσομοιωτή (μέθοδος)	Διάσταση προσομοιωτή	Συγκριση με Πειραματικά Δεδομένα	Υπολογιζόμενα Μεγέθη	Διαστάσεις επιφάνειας
Drotar et al. 2000 [31]	Εγχάραξη και απόθεση με πλάσμα δραστικών ιόντων (RIE) σε χαμηλή πίεση	Monte Carlo – κελιών	3D	OXI	$H(r,t)^5$, RMS_z^6 , α^7	1024×1024 κελιά
Kokkoris et al. 2012 [35]	IBS, RIE, ICP σε χαμηλή πίεση	Monte Carlo – κελιών	(2+1)D	OXI	RMS, PSD, ξ	512×512 κελιά

1.7 Σκοπός της εργασίας

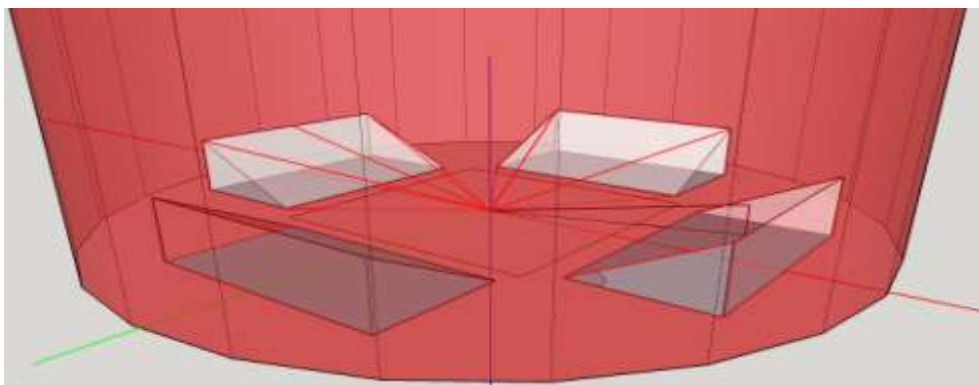
Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η μαθηματική προτυποποίηση (μοντελοποίηση) και προσομοίωση διεργασίας ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης (βλ. § 1.5.4) κατά την κατεργασία αρχικά επίπεδων επιφανειών με δέσμη ιόντων (Ion Beam Sputtering, IBS). Συνθήκες ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης εμφανίζονται σε αντιδραστήρες πλάσματος όσο και σε συστήματα ιονβολής με ιοντική δέσμη. Η εργασία των Zhang, Bodes και Hofsass με τίτλο «*Designing self-organized nanopatterns on Si by ion irradiation and metal co-deposition*» [15] περιλαμβάνει παραδείγματα ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης σε σύστημα ιοντικής δέσμης και αποτέλεσε τη βάση για τη μελέτη της παρούσας εργασίας.

Ειδικότερα, στην μελέτη των Zhang et al. [15] χρησιμοποιείται επιφάνεια μονοκρυσταλλικού Si (100) η οποία εγχάρασσεται με δέσμη ιόντων Ar^+ . Εντός της περιοχής πρόσπτωσης της δέσμης ιόντων βρίσκονται πέραν της επιφάνειας Si στόχοι Fe με διαφορετική χωροθέτηση κάθε φορά. Η χωροθέτηση που εξετάστηκε στην παρούσα εργασία είναι αυτή που παρουσιάζεται στο Σχήμα 12. Τέσσερις στόχοι Fe τοποθετούνται αντιδιαμετρικά μεταξύ τους. Η κλίση τους είναι 30^0 μοίρες ως προς την επιφάνεια του Si. Στην § 2.1 γίνεται αναλυτική παρουσίαση της πειραματικής διάταξης των Zhang et al [15]. Κατά την ιονβολή άτομα Fe μεταφέρονται από τους στόχους στην επιφάνεια Si και προσκολλάται σε αυτήν παρεμποδίζοντας την εγχάραξη της. Η παραπάνω διεργασία παράγει ανισοτροπική οργάνωση (περιοδικότητα) προσανατολισμένη σε ορισμένες κατευθύνσεις όπως φαίνεται στο Σχήμα 5(β).

⁵ Συνάρτηση συσχέτισης ύψους – ύψους.

⁶ Μήκος συσχέτισης

⁷ Εκθέτης τραχύτητας (roughness exponent)



Σχήμα 12: Προσέγγιση πειραματικής διάταξης ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης μελέτης ερευνητικής ομάδας Zhang et al [15]. Διακρίνονται, Ιοντική Δέσμη, τέσσερις στόχοι μετάλλου και η επιφάνεια εγχάραξης.

Ο σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η ερμηνεία των μετρήσεων των Zhang et al. Για το σκοπό αυτό:

α) Τροποποιήθηκε και επεκτάθηκε κατάλληλα διαθέσιμος κώδικας εξέλιξης μορφολογίας επιφανειών κατά την εγχάραξη με ταυτόχρονη απόθεση [35]. Μία από τις επεκτάσεις του κώδικα είναι η ανάπτυξη τάξης (class) για την αρχική κατανομή κατευθύνσεων και ενεργειών των σωματιδίων που συμμετέχουν στην εγχάραξη.

β) Υπολογίστηκε αριθμητικά με τη χρήση του COMSOL [51] και αναλυτικά η κατανομή των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια Si.

γ) Υπολογίστηκαν οι αποδόσεις εγχάραξης και οι πιθανότητες προσκόλλησης του Si, και του Fe (παρεμποδιστές) με τη χρήση του κώδικα SRIM [52].

δ) Εφαρμόστηκε η μεθοδολογία αποδοχής – απόρριψης (accept-reject) [53] για την ανάπτυξη «γεννήτριας» παρεμποδιστών που ακολουθούν την κατανομή των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια Si [βλέπε (β)].

ε) Όλες οι παραπάνω μεταβλητές εισήχθησαν ως παράμετροι στον κώδικα εξέλιξης μορφολογίας.

στ) Έγινε προβολή των παραγόμενων επιφανειών και των PSD με τη χρήση του ελεύθερων κωδίκων Gwyddion [54] και Paraview [55] και στατιστική επεξεργασία με τη βοήθεια κώδικα μετρολογίας μορφολογίας επιφανειών.

Τα επόμενα κεφάλαια της παρούσας εργασίας δομούνται ως εξής:

Στο κεφάλαιο 2 γίνεται μια αναλυτική περιγραφή του πλαισίου προσομοίωσης. Παρουσιάζεται η πειραματική διάταξη των Zhang et al [15] που εξετάστηκε, οι μεθοδολογίες και οι κανόνες ανάπτυξης των επιφανειών που λήφθηκαν υπόψη. Επίσης, γίνεται περιγραφή των εργαλείων που κατασκευάστηκαν ή που προϋπήρχαν και χρησιμοποιήθηκαν για την ανάπτυξη και τον χαρακτηρισμό της τραχύτητας των παραγόμενων επιφανειών.

Στο κεφάλαιο 3 υπολογίζονται και παρουσιάζονται η απόδοση εγχάραξης, η πιθανότητα προσκόλλησης, η κατανομή εκπομπής παρεμποδιστών από τους στόχους και η κατανομή κατευθύνσεων των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης.

Στο κεφάλαιο 4 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων και διερευνάται η επίδραση μηχανισμών και παραμέτρων στην οργάνωση.

Στο κεφάλαιο 5 συνοψίζονται τα συμπεράσματα της εργασίας και προτείνονται κατευθύνσεις ανάπτυξης του κώδικα εξέλιξης μορφολογίας. Στόχος των κατευθύνσεων

Προσομοίωση διεργασίας ιονβολής επιφανειών με δέσμη ιόντων υπό ταυτόχρονη απόθεση: Διερεύνηση των μηχανισμών δημιουργίας οργανωμένων μορφολογιών

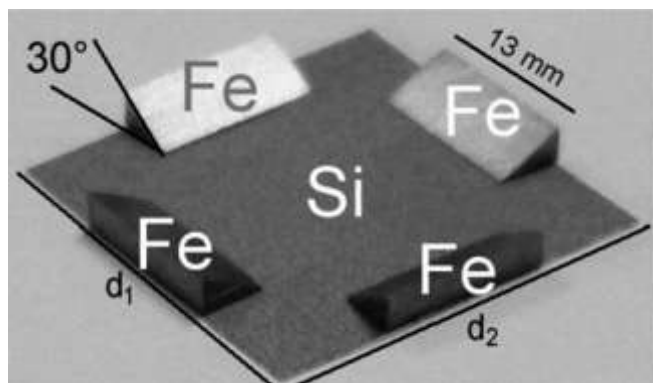
ανάπτυξης είναι η βελτίωση των αποτελεσμάτων προσομοίωσης ώστε αυτά να προσεγγίσουν περισσότερο στις πειραματικές μετρήσεις.

2 ΠΛΑΙΣΙΟ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΞΕΛΙΞΗ ΤΡΑΧΥΤΗΤΑΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΕΓΧΑΡΑΞΗ

2.1 Εισαγωγή

Ο στόχος του πλαισίου προσομοίωσης για την εξέλιξη τραχύτητας επιφανειών κατά την εγχάραξη είναι η διερεύνηση των μηχανισμών που οδηγούν στη δημιουργία τραχύτητας σε επιφάνειες υπό το βομβαρδισμό δέσμης ιόντων. Πιο συγκεκριμένα, η μελέτη που διεξάγεται με το πλαίσιο βασίζεται στα πειράματα των Zhang et al. [15]. Στη μελέτη των Zhang et al. επιφάνεια Si εγχάρασσεται με δέσμη ιόντων Ar^+ . Γύρω από την επιφάνεια Si υπάρχουν στόχοι Fe. Η τραχύτητα-μορφολογία που αναπτύσσεται στην επιφάνεια είναι αποτέλεσμα ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης. Άτομα Fe που απομακρύνονται από τους στόχους μέσω ιονβολής μεταφέρονται στην επιφάνεια Si και δρουν ως παρεμποδιστές εγχάραξης. Τα πειράματα των Zhang et al. οδήγησαν σε οργανωμένες επιφάνειες με συμμετρίες προς κατευθύνσεις οι οποίες εξαρτώνται από τη θέση και τον προσανατολισμό των στόχων ως προς την επιφάνεια [15].

Τα δείγματα Si που χρησιμοποιούνται στα πειράματα των Zhang et al. είναι μονοκρυσταλικά (100). Το δείγμα του Si της διάταξης που εξετάζεται έχει διαστάσεις $15 \times 15 \text{ mm}^2$ και μέγιστη τιμή αρχικής τραχύτητας (Root Mean Square, RMS) ίση με 0,1 nm. Το δείγμα Si, αφού περάσει από λουτρό ακετόνης και μεθανόλης βομβαρδίζεται με δέσμη ιόντων Ar^+ με ενέργεια 1000 eV. Καθ' όλη την διάρκεια της ιονβολής η επιφάνεια εγχάραξης διατηρείται σε συνθήκες υψηλού κενού ($\sim 2 \cdot 10^{-6} \text{ Pa}$) και σε θερμοκρασία δωματίου. Η ταυτόχρονη απόθεση παρεμποδιστών επιτυγχάνεται με την προσθήκη μεταλλικών στόχων γύρω από την επιφάνεια Si. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 13 οι στόχοι τοποθετούνται αντιδιαμετρικά σε αποστάσεις d_1 και d_2 μεταξύ τους. Ως στόχοι χρησιμοποιούνται φύλλα Fe ARMCO (Fe-99,9%, C-0.01%, Mn-0.06%, P-0.005%, S-0.003%, ίχνη Si). Τα φύλλα Fe πλάτους 13 mm τοποθετούνται πάνω στην επιφάνεια Si και όλη η διάταξη στο κέντρο της βάσης του θαλάμου ιοντικής δέσμης.



Σχήμα 13: Τοποθέτηση και προσανατολισμός μεταλλικών (Fe) στόχων γύρω από την επιφάνεια Si ώστε να επιτευχθεί ταυτόχρονη εγχάραξη και απόθεση. Φύλλα Fe πλάτους 13 mm τοποθετούνται αντιδιαμετρικά σε αποστάσεις d_1 , d_2 με κεκλιμένη γωνία 30° ως προς την κάθετο της εγχαρασόμενης επιφάνειας [15]. Η κεντρική περιοχή της επιφάνειας εγχάραξης αποτελεί την περιοχή μελέτης των αποτελεσμάτων της διεργασίας ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης.

Οι στόχοι καθώς και η επιφάνεια Si βομβαρδίζονται από την ίδια δέσμη ιόντων Ar^+ ενέργειας 1000eV. Πηγή της δέσμης είναι μία πηγή πλάσματος Gen-II με ρεύμα ιόντων $150 \mu A/cm^2$. Όλες οι διατάξεις της μελέτης δέχτηκαν δόση $2,5e+18$ ιόντων ανά cm^2 και έφτασαν σε κατάσταση σταθερής τιμής επιφανειακής συγκέντρωσης Fe. Η δέσμη ιόντων προσανατολίστηκε κάθετα ως προς την επιφάνεια Si. Η ταυτόχρονη έκθεση της

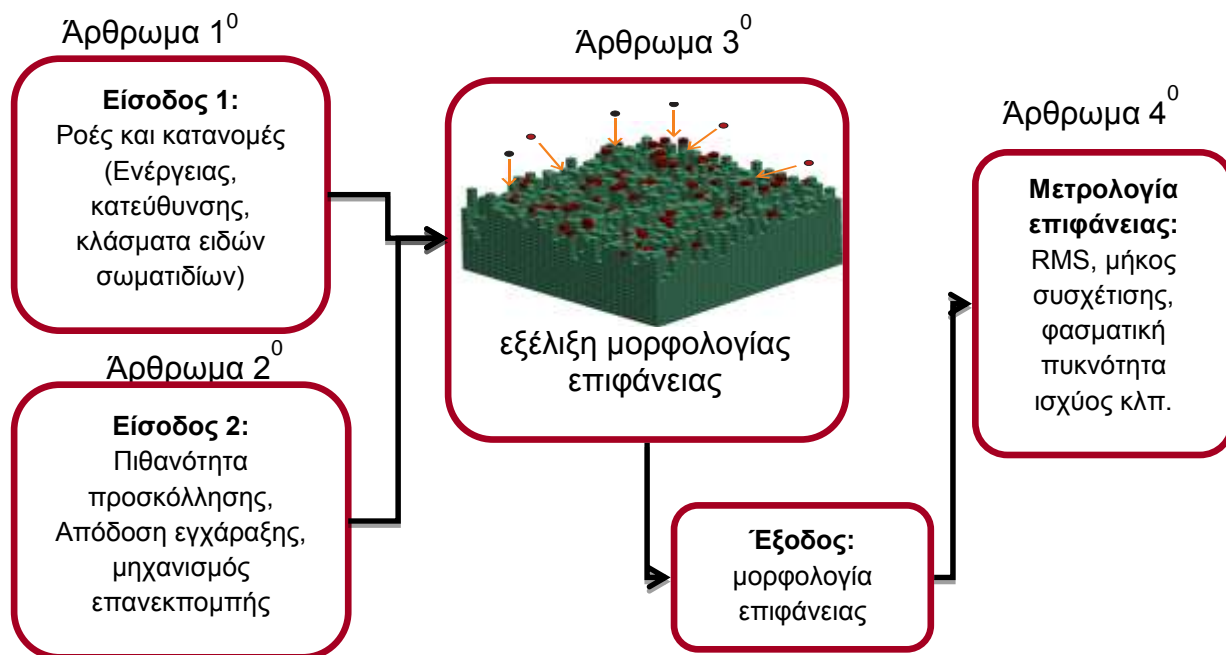
επιφάνειας Si και των στόχων στην ίδια δέσμη ιόντων εξασφαλίζει σταθερή αναλογία μεταξύ της ροής των προσπιπτόντων ατόμων Fe και της ροής των προσπιπτόντων ιόντων Ar^+ στην επιφάνεια Si. Η συγκέντρωση ατόμων Fe στο κέντρο της επιφάνειας Si μπορεί να ελεγχθεί με την μεταβολή των αποστάσεων d_1 και d_2 . Λόγω του πεπερασμένου μεγέθους των στόχων επιτυγχάνεται συμμετρική απόθεση παρεμποδιστών μόνο στο κέντρο της επιφάνειας Si και ως εκ τούτου οι υπολογισμοί εστίασαν σε αυτή την περιοχή.

Στη συνέχεια του παρόντος κεφαλαίου παρουσιάζεται το πλαίσιο προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε για την διερεύνηση των μηχανισμών που οδηγούν στη δημιουργία των μορφολογιών που μέτρησαν οι Zhang et al. Το κεφάλαιο παρουσιάζει το λογικό διάγραμμα του πλαισίου προσομοίωσης και τα επιμέρους τμήματα – αρθρώματα αυτού. Επίσης, γίνεται αναφορά στις μεθόδους που χρησιμοποιούνται για την υλοποίηση των αρθρωμάτων. Όπου αναπτύχθηκαν εναλλακτικές προσεγγίσεις σημειώνονται και προβάλλονται αντίστοιχα.

2.2 Αρθρώματα και λογικό διάγραμμα πλαισίου προσομοίωσης

Για τη διερεύνηση των μηχανισμών δημιουργίας της μορφολογίας στο πείραμα των Zhang et al. (βλέπε § 2.1) αναπτύχθηκε πλαίσιο προσομοίωσης με τέσσερα αρθρώματα (modules). Το **πρώτο άρθρωμα** εξετάζει την αέρια φάση της διεργασίας δηλαδή υπολογίζει τις κατανομές κατευθύνσεων και ενέργειας των ιόντων και των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια Si. Γίνεται χρήση εμπορικού κώδικα (COMSOL [51] και Matlab [56]) και αναπτύσσονται αναλυτικές σχέσεις που δίνουν τις κατανομές κατευθύνσεων των προσπίπτοντων παρεμποδιστών (άτομα Fe). Στο **δεύτερο άρθρωμα** υπολογίζονται οι σχέσεις αλληλεπίδρασης των σωματιδίων με την επιφάνεια εγχάραξης, όπως οι πιθανότητες προσκόλλησης και η απόδοση εγχάραξης. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιείται ο ανοιχτού λογισμικού κώδικας SRIM [52]. Το **τρίτο άρθρωμα** υπολογίζει την εξέλιξη της μορφολογίας της εγχαρασσόμενης επιφάνειας (μοντέλο Monte Carlo). Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιείται διαθέσιμος κώδικας (σε γλώσσα προγραμματισμού C++) ο οποίος τροποποιείται και επεκτείνεται κατάλληλα. Το **τέταρτο άρθρωμα** υλοποιεί τη στατιστική επεξεργασία της εγχαρασσόμενης επιφάνειας ώστε να προκύψουν παράμετροι χαρακτηρισμού της (π.χ. RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης, ξ , βλέπε § 1.4 και 2.6). Οι υπολογισμοί των στατιστικών παραμέτρων γίνονται με τον διαθέσιμο κώδικα σε C++. Σημειώνεται ότι, στη μελέτη των Zhang et al. [15] χρησιμοποιείται ο κώδικας Gwyddion [54] για τον χαρακτηρισμό της επιφάνειας ως προς την οργάνωση της.

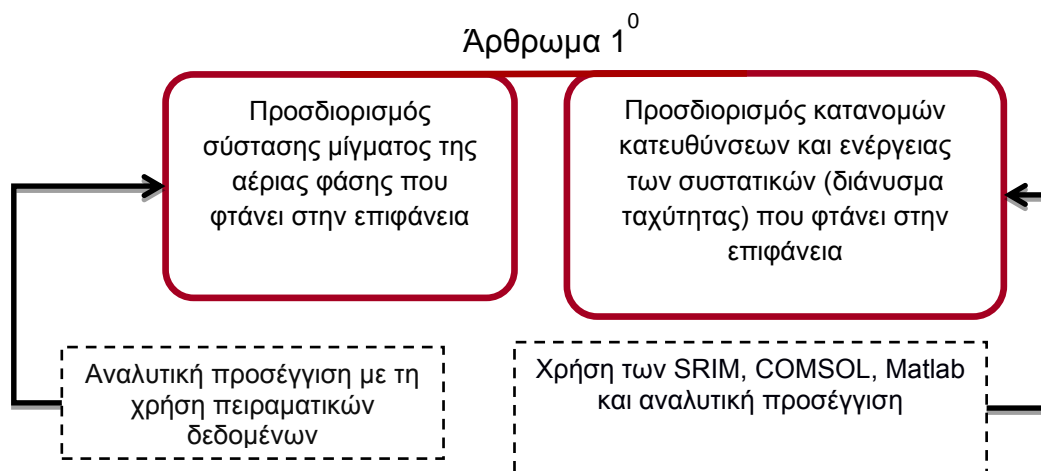
Το **πρώτο βήμα** στη διαδικασία της προσομοίωσης είναι οι υπολογισμοί των ροών και των κατανομών κατευθύνσεων και ενέργειας των προσπίπτοντων στην επιφάνεια σωματιδίων (πρώτο άρθρωμα). Το **δεύτερο βήμα** περιλαμβάνει τους υπολογισμούς των συντελεστών προσκόλλησης και των αποδόσεων εγχάραξης (δεύτερο άρθρωμα). Στο **επόμενο βήμα** γίνεται προσομοίωση εξέλιξης της μορφολογίας της επιφάνειας με το τρίτο άρθρωμα. Το **τελευταίο βήμα** είναι η μετρολογία και ο χαρακτηρισμός της μορφολογίας της επιφάνειας. Το Σχήμα 14 αποτελεί το διάγραμμα ροής του πλαισίου προσομοίωσης. **Η παρούσα εργασία εμβαθύνει στο πρώτο και δεύτερο άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης και τροποποιεί και επεκτείνει κατάλληλα το τρίτο άρθρωμα.**



Σχήμα 14: Διάγραμμα ροής του πλαισίου προσομοίωσης. Τα άρθρωμα 1 και 2 περιλαμβάνουν τον υπολογισμό των τιμών και παραμέτρους εισόδου στο πλαίσιο, στο άρθρωμα 3 γίνεται η εξέλιξη της μορφολογίας της επιφάνειας και το άρθρωμα 4 περιλαμβάνει τη μετρολογία και το χαρακτηρισμό της μορφολογίας της επιφάνειας.

2.3 Άρθρωμα 1: Υπολογισμός παραμέτρων και τιμών της αέριας φάσης

Το πρώτο άρθρωμα του πλαισίου παρομοίωσης μπορεί να διαχωριστεί σε δύο υποενότητες. Η πρώτη υποενότητα αφορά στον προσδιορισμό του μείγματος των συστατικών της αέριας φάσης που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης. Η δεύτερη υποενότητα αφορά στον προσδιορισμό των κατανομών κατευθύνσεων και ενεργειών κάθε συστατικού της αέριας φάσης (ιόντα και παρεμποδιστές) που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης. Στο Σχήμα 15 φαίνεται ο παραπάνω διαχωρισμός καθώς και οι μεθοδολογίες που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των παραμέτρων κάθε υποενότητας.



Σχήμα 15: Το πρώτο άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης υπολογίζει τις μεταβλητές εισόδου του πλαισίου προσομοίωσης που αφορούν την αέρια φάση.

2.3.1 Υπολογισμός του κλάσματος των παρεμποδιστών

Στις πειραματικές μετρήσεις των Zhang et al. [15] δεν περιλαμβάνονται οι ροές των παρεμποδιστών στην επιφάνεια. Οι ροές αυτές μπορούν να εκτιμηθούν με δύο προσεγγίσεις: Η πρώτη βασίζεται στη μέτρηση της επιφανειακής πυκνότητας παρεμποδιστών που έκαναν οι Zhang et al. με τη βοήθεια της μεθόδου φασματοσκοπίας οπισθοσκέδασης Rutherford (Rutherford Backscattering Spectrometry, RBS). Η δεύτερη βασίζεται στο συνδυασμό α) της ροής των ιόντων (οι Zhang et al. μέτρησαν τη δόση των ιόντων που σχετίζεται με τη ροή), β) της απόδοσης εγχάραξης του στόχου των παρεμποδιστών από τα ιόντα, η οποία υπολογίζεται με τον κώδικα SRIM (βλέπε § 2.4.1) και β) της κατανομής των παρεμποδιστών στην εγχαρασόμενη επιφάνεια, η οποία υπολογίζεται με τον κώδικα COMSOL (βλέπε § 2.3.2.2) ή αναλυτικά με γεωμετρικό μοντέλο (βλέπε § 2.3.2.3).

Το κλάσμα της ροής των παρεμποδιστών, x_d , που φτάνουν σε μία επιφάνεια υπολογίζεται από την παρακάτω εξίσωση

$$x_d = \frac{j_d}{j_+ + j_d} \quad (2-1)$$

όπου j_+ και j_d είναι οι ροές των ιόντων και των παρεμποδιστών. Η εξίσωση (2-1) μπορεί να γραφεί και ως

$$x_d = \frac{\frac{j_d}{t_{\text{total}}}}{\frac{j_+}{t_{\text{total}}} + \frac{j_d}{t_{\text{total}}}} = \frac{\Phi_d}{\Phi_+ + \Phi_d} \quad (2-2)$$

όπου Φ_+ και Φ_d η αντίστοιχη δόση (dose, fluence, fluency) ιόντων και παρεμποδιστών. Σημειώνεται ότι, $\Phi_i = j_i t_{\text{total}}$, όπου t_{total} είναι ο συνολικός χρόνος της έκθεσης της επιφάνειας στις ροές. Η δόση των παρεμποδιστών, συνδέεται με την επιφανειακή πυκνότητα αυτών με την εξίσωση

$$\Phi_d = C_d \quad (2-3)$$

Με την προϋπόθεση ότι η πιθανότητα προσκόλλησης στο υπόστρωμα να είναι 1 και ότι αυτοί δημιουργούν ένα μόνο στρώμα παρεμποδιστών στην επιφάνεια.

Στη δεύτερη προσέγγιση, το κλάσμα των παρεμποδιστών υπολογίζεται από την εξίσωση (2-1), όμως η δόση των παρεμποδιστών υπολογίζεται με την βοήθεια της εξίσωσης (2-4) που ακολουθεί.

$$\Phi_d = \Phi_+ EY_d \left(\frac{\Phi_d}{\Phi_{d,\text{reem-target}}} \right)_{\text{sim}} \quad (2-4)$$

όπου EY_d είναι η απόδοση εγχάραξης των παρεμποδιστών από την επιφάνεια του στόχου η οποία υπολογίζεται με τον κώδικα SRIM (βλέπε § 2.4.1). Το κλάσμα της εξίσωσης (2-4) είναι ο λόγος της δόσης των παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης προς την εκπεμπόμενη από το στόχο δόση. Απλούστερα, είναι το κλάσμα της ροής των παρεμποδιστών που εκπέμπονται από το στόχο (λόγω της ιονβολής) το οποίο φτάνει στην επιφάνεια εγχάραξης (Σχήμα 13). Αυτό το κλάσμα μπορεί να προκύψει από τον υπολογισμό των τροχιών των παρεμποδιστών που εκπέμπονται από το στόχο. Σε αυτή την περίπτωση θα πρέπει να είναι γνωστή η πιθανότητα εκπομπής τους, η οποία υπολογίζεται επίσης από τον κώδικα SRIM (βλέπε § 2.3.2.1). Τέλος, οι τροχιές υπολογίζονται με τον κώδικα COMSOL (βλέπε § 2.3.2.2) και το κλάσμα καθορίζεται από αυτές τις τροχιές που φτάνουν στην επιφάνεια μελέτης. Το κλάσμα της εξίσωσης (2-4) είναι ίσο τελικά με

$$\left(\frac{\Phi_d}{\Phi_{d, \text{reem-target}}} \right)_{\text{sim}} = \left(\frac{N_d / A}{N_{d, \text{reem-target}} / A_{\text{target}}} \right)_{\text{sim}} = \frac{A_{\text{target}}}{A} \left(\frac{N_d}{N_{d, \text{reem-target}}} \right)_{\text{sim}} \quad (2-5)$$

όπου $N_d/N_{d, \text{reem-target}}$ είναι το κλάσμα των σωματιδίων παρεμποδιστών που εκπέμπονται από το στόχο και φτάνουν στην επιφάνεια μελέτης. A_{target} είναι το εμβαδό των επιφανειών των στόχων (Σχήμα 13) και A το εμβαδό της επιφάνειας εγχάραξης.

2.3.2 Υπολογισμός κατανομών κατευθύνσεων και ενεργειών των σωματιδίων που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης

Όσον αφορά τα ιόντα που βομβαρδίζουν την επιφάνεια εγχάραξης σημειώνεται ότι αυτά είναι μονοενεργητικά, με ενέργεια 1000 eV, μονοκατευθυντικά και φτάνουν κάθετα στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Για να υπολογιστούν οι κατανομές κατευθύνσεων και ενεργειών των παρεμποδιστών που φτάνουν στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια θα πρέπει αρχικά να υπολογιστούν οι κατανομές κατευθύνσεων και ενεργειών των εκπεμπομένων από τους στόχους παρεμποδιστών. Αυτό επιτυγχάνεται με τη χρήση του κώδικα SRIM [52]. Στη συνέχεια, με βάση αυτές τις κατανομές, υπολογίζονται οι κατανομές κατευθύνσεων και ενεργειών των παρεμποδιστών, είτε α) με αριθμητικό τρόπο και με χρήση του COMSOL [51] και του Matlab [56], είτε β) με αναλυτικό τρόπο (θεωρώντας ότι το μήκος ελεύθερης διαδρομής των παρεμποδιστών είναι μεγαλύτερο από την απόσταση που διανύουν οι παρεμποδιστές από το στόχο μέχρι την εγχαρασσόμενη επιφάνεια). Σημειώνεται ότι οι κατανομές κατευθύνσεων και ενεργειών των παρεμποδιστών μπορούν να προκύψουν από την κατανομή των συνιστωσών του διανύσματος της ταχύτητας των παρεμποδιστών και αντίστροφα.

2.3.2.1 Υπολογισμός κατανομών ταχυτήτων των εκπεμπομένων από τους στόχους παρεμποδιστών

Σημαντική για τις παραγόμενες μορφολογίες της εγχαρασσόμενης επιφάνειας που βομβαρδίζεται από ιόντα και παρεμποδιστές είναι κυρίως η κατανομή κατευθύνσεων αλλά και ενεργειών των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια. Ο υπολογισμός των κατανομών γίνεται με τα ακόλουθα βήματα. Πρώτο βήμα είναι η εύρεση των αντίστοιχων κατανομών των παρεμποδιστών από τους στόχους. Για το σκοπό αυτό γίνεται χρήση κώδικα SRIM [52].

Ο κώδικας SRIM βασίζεται σε ένα μοντέλο Monte Carlo διαδοχικών συγκρούσεων του προσπίπτοντος ιόντος με τα άτομα του υποστρώματος το οποίο υπολογίζει τις αλληλεπιδράσεις των ιόντων με άμορφες επιφάνειες υποστρωμάτων (στόχων). Η μεθοδολογία υπολογισμού που επιλέχτηκε στην παρούσα εργασία είναι η *Monolayer Collision Steps*. Η μεθοδολογία αυτή υποχρεώνει κάθε ιόν να συγκρουστεί με κάθε στρώμα ατόμων του στόχου. Κάθε σύγκρουση στο παραπάνω μοντέλο θεωρείται σύγκρουση Coulomb και η τροχιά των ιόντων καθώς και η καταστροφή που συμβαίνει στο στόχο καταγράφονται για περαιτέρω χρήση. Επίσης ο μηχανισμός καταγραφεί την ενέργεια και κατεύθυνση των ατόμων του στόχου που εξαγονται τελικά από αυτόν.

Σημειώνεται ότι, για να συμβεί εκπομπή (εξαγωγή) ατόμου του στόχου δηλαδή παρεμποδιστή από την επιφάνεια, θα πρέπει η κάθετη στην επιφάνεια συνιστώσα της ορμής του ατόμου να δίνει τιμή ενέργειας μεγαλύτερη της ενέργειας επιφανειακού δεσμού όταν το άτομο βρίσκεται στην επιφάνεια. Η επιφανειακή ενέργεια δεσμού (surface binding energy) αποτελεί σημαντικό κριτήριο για το εάν ένα άτομο θα βρεθεί εκτός ή όχι του σώματος και η τιμή της πρέπει να λαμβάνεται σοβαρά υπόψη. Δεδομένου του παραπάνω κριτηρίου για την εκπομπή ατόμων από ένα στόχο γίνεται αντιληπτό ότι συνήθως εξαγονται τα άτομα που βρίσκονται στα πρώτα επιφανειακά στρώματα. Έτσι δεν είναι απαραίτητο ο στόχος να διαθέτει σημαντικό βάθος.

Με τον κώδικα SRIM, όπως σημειώνεται ανωτέρω, καταγράφεται η ενέργεια και η κατεύθυνση των εκπεμπόμενων ατόμων του στόχου σε αρχεία της μορφής txt. Συγκεκριμένα, η ενέργεια δίνεται σε μονάδες eV και η κατεύθυνση δίνεται με τη μορφή συνημίτονων των γωνιών αυτής στους τρεις άξονες του χώρου ως προς την κάθετο της επιφάνειας. Προκειμένου να κατασκευαστεί η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της ταχύτητας χρησιμοποιείται η μάζα των εκπεμπομένων ατόμων και η γνωστή σχέση της κινητικής ενέργειας ατόμου (ουσιαστικά, προσεγγίζεται το άτομο-παρεμποδιστής ως ελεύθερη σφαίρα χωρίς φορτίο ή εξωτερικό πεδίο που να την επηρεάζουν).

2.3.2.2 Αριθμητικός υπολογισμός της κατανομής κατευθύνσεων των παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης

Για τον προσδιορισμό της κατανομής κατευθύνσεων (και ενεργειών) των παρεμποδιστών στην επιφάνεια που εγχάρασσεται χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο charged particle tracing του COMSOL. Το μοντέλο αυτό υπολογίζει την θέση και την ταχύτητα φορτισμένων ή μη σωματιδίων επιλύοντας τις εξισώσεις κίνησης του Νεύτωνα για κάθε σωματίδιο. Η εξίσωση κίνησης που επιλύει το COMSOL δίνεται στην εξίσωση (2-6)

$$\frac{d(m_p \mathbf{v})}{dt} = \mathbf{F}_t \quad (2-6)$$

Το πρόβλημα που καλείται να προσομοιώσει το COMSOL στην παρούσα εργασία είναι οι τροχιές των παρεμποδιστών από τις επιφάνειες των στόχων (Fe) προς την επιφάνεια εγχάραξης (Si) (βλέπε Σχήμα 13). Για τις ανάγκες αυτού του προβλήματος θεωρείται πως δεν υπάρχει εξωτερικό πεδίο ή φορτίο που να επηρεάζει τους παρεμποδιστές.

Στην γεωμετρία του COMSOL καθορίζεται ένας όγκος ο οποίος αντιστοιχεί στον θάλαμο της διεργασίας. Εντός αυτού, τοποθετούνται οι στόχοι και η επιφάνεια εγχάραξης. Οι στόχοι αποτελούν τα σύνορα του χώρου από τα οποία γίνεται η είσοδος στο υπολογιστικό χωρίο των παρεμποδιστών και η επιφάνεια εγχάραξης αποτελεί το σύνορο του χώρου στο οποίο γίνεται η καταγραφή των χαρακτηριστικών των

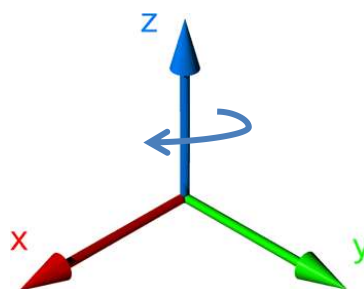
παρεμποδιστών που φτάνουν σε αυτή. Στα υπόλοιπα σύνορα του θαλάμου δεν γίνεται καμία καταγραφή και όταν σωματίδιο παρεμποδιστή φτάσει σε αυτά εξέρχεται του υπολογιστικού χωρίου.

Οι κατανομές που κατασκευάζονται από το SRIM είναι αδύνατο να εισαχθούν απευθείας ως μεταβλητές εισόδου στο COMSOL. Συγκεκριμένα, ο κώδικας SRIM υπολογίζει τις κατευθύνσεις των παρεμποδιστών που εκπέμπονται από τις επιφάνειες των στόχων με επιφάνεια αναφοράς την επιφάνεια του στόχου. Αυτές οι κατευθύνσεις θα πρέπει να στραφούν και να συνδυαστούν με την επιφάνεια εγχάραξης μέσω της σχετικής γεωμετρίας μεταξύ των δύο επιφανειών. Για να προκύψει αυτή η σύνδεση χρησιμοποιούνται οι γνωστές εξισώσεις στροφής του Euler [57]. Ειδικότερα, για να ταυτιστεί χωρικά η επιφάνεια εκπομπής των ατόμων-παρεμποδιστών του SRIM με τις επιφάνειες των στόχων του COMSOL χρησιμοποιούνται κατάλληλα οι παρακάτω πίνακες μετασχηματισμού.

- Ο πίνακας μετασχηματισμού

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

συνεπάγεται στροφή στον άξονα Z με την φορά του βέλους που φαίνεται στο Σχήμα 16.

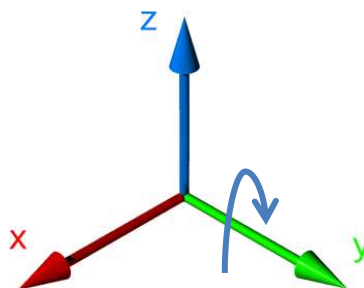


Σχήμα 16: Στροφή Euler στον άξονα Z

- Ο πίνακας μετασχηματισμού

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

συνεπάγεται στροφή στον άξονα Y με τη φορά του βέλους που φαίνεται στο Σχήμα 17.

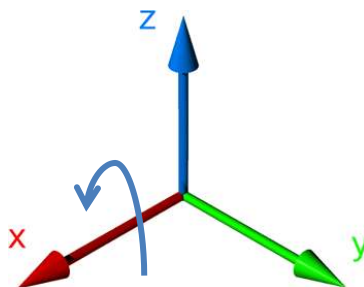


Σχήμα 17: Στροφή Euler στον άξονα Y

- Ο πίνακας μετασχηματισμού

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

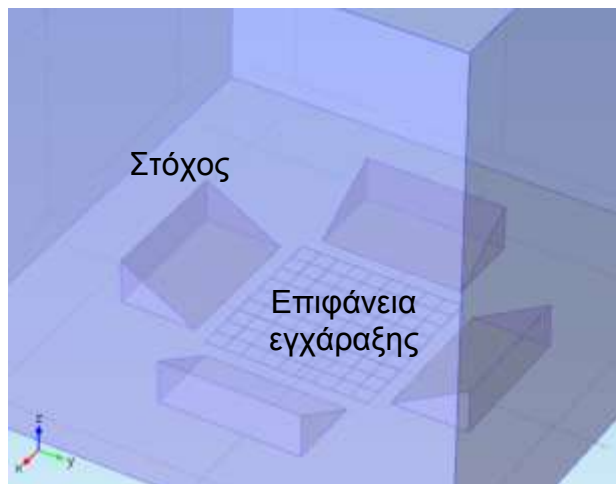
συνεπάγεται στροφή στον άξονα X με τη φορά του βέλους που φαίνεται στο Σχήμα 18.



Σχήμα 18: Στροφή Euler στον άξονα X

Στο Σχήμα 19 δίνεται η γεωμετρία που κατασκευάστηκε με το COMSOL και αφορά την πειραματική διάταξη των Zhang et al. [15] που μελετήθηκε. Σε αυτό διακρίνονται, η

περιοχή υπολογισμού των τροχιών (θάλαμος διεργασίας), οι τέσσερις τοποθετημένοι αντιδιαμετρικά στόχοι σε αποστάσεις d_1 , d_2 και η επιφάνεια εγχάραξης. Η επιφάνεια εγχάραξης έχει διαχωριστεί σε ένα πλέγμα 13×13 κελιά με σκοπό την επιλογή των κεντρικών περιοχών για την διεξαγωγή προσομοιώσεων.



Σχήμα 19: Η πειραματική διάταξη των Zhang et al. [15] στην οποία συμβαίνει ταυτόχρονη εγχάραξη και απόθεση όπως κατασκευάστηκε με τη χρήση του COMSOL. Διακρίνονται η επιφάνεια εγχάραξης, οι τέσσερις μεταλλικοί στόχοι και ο θάλαμος υπολογισμού των τροχιών.

Μοναδική αιτία για την αλλαγή κατεύθυνσης των παρεμποδιστών (μη φορτισμένα άτομα) στην πορεία τους προς την επιφάνεια εγχάραξης είναι η πιθανή σύγκρουση με τα υπόλοιπα σωματίδια του αερίου που βρίσκονται εντός του θαλάμου της διεργασίας. Τα σωματίδια αυτά μπορεί να είναι ιόντα και πιθανά λοιπά ουδέτερα συστατικά. Πιθανή ύπαρξη ηλεκτρονίων εντός του θαλάμου τα οποία θα μπορούσαν να φορτίσουν αρνητικά τους παρεμποδιστές και να αλλάξουν τις τροχιές τους δεν λαμβάνεται υπόψη. Σχετικά με τα λοιπά ουδέτερα συστατικά και τα ιόντα αναμένεται να υπάρξει αλληλεπίδραση εφόσον συμβεί σύγκρουση. Το ενδεχόμενο σύγκρουσης εξαρτάται σημαντικά από τις συνθήκες πίεσης του θαλάμου της διεργασίας και κατά συνέπεια από το μήκος ελεύθερης διαδρομής των παρεμποδιστών.

Οι συγκρούσεις στο θάλαμο της διεργασίας θεωρούνται ελαστικές και η πιθανότητα πρόσκρουσης των ατόμων παρεμπόδισης με τα υπόλοιπα πιθανά στοιχεία μέσα στο θάλαμο δίνεται από την εξίσωση

$$P = 1 - e^{-v\Delta t} \quad (2-7)$$

όπου

$$v = N_d \sigma |v - v_g| \quad (2-8)$$

N_d είναι η πυκνότητα του αερίου και σ η ενεργός διατομή σύγκρουσης μεταξύ των σωματιδίων. v και v_g είναι αντίστοιχα οι ταχύτητες των παρεμποδιστών και των λοιπών σωματιδίων που βρίσκονται μέσα στο θάλαμο (ιόντα).

Τα διανύσματα ταχύτητας των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης καταγράφονται και με βάση αυτά τα διανύσματα υπολογίζεται η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας.

Το COMSOL δεν έχει την δυνατότητα να κατασκευάζει τρισδιάστατες συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας γι αυτό και γίνεται χρήση κατάλληλου κώδικα [58] που υλοποιείται στο Matlab. Ο κώδικας αυτός έχει τη δυνατότητα να παράγει ιστογράμματα N -διαστάσεων. Στην περίπτωση της παρούσας εργασίας αυτό που χρειάζεται είναι μια συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ταχύτητας των ατόμων-παρεμποδιστών που φτάνουν από τις επιφάνειες των στόχων στην επιφάνεια εγχάραξης (βλέπε Σχήμα 19).

Για την υλοποίηση της παραπάνω κατανομής κατασκευάζεται στο Matlab ένα ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο (Σχήμα 20) στο χώρο των ταχυτήτων το οποίο διαιρείται σε στοιχειώδεις κυψελίδες (κύβους). Κάθε στοιχειώδης κυψελίδα λαμβάνει ένα σταθερό εύρος για τους άξονες (v_x , v_y , v_z). Στη συνέχεια, κάθε μία ταχύτητα προερχόμενη από το COMSOL καταμετράται στη στοιχειώδη κυψελίδα ταχύτητας που αντιστοιχεί. Με αυτό τον τρόπο κατασκευάζεται μια συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(v_x, v_y, v_z)$ της οποίας η λεπτομέρεια εξαρτάται από την ακμή της στοιχειώδους κυψελίδας (του κύβου).



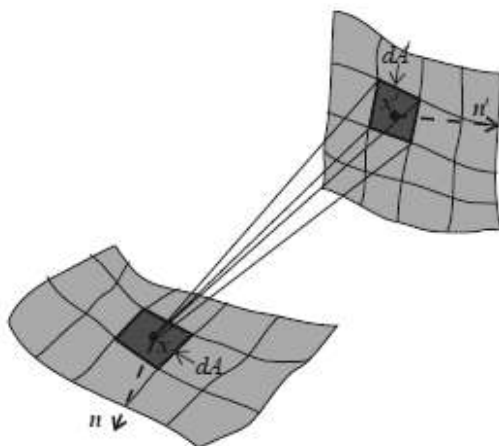
Σχήμα 20: Ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο που αποτελείται από κυψελίδες (κύβους) ταχύτητας ορισμένου εύρους για την κατασκευή τρισδιάστατης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας της ταχύτητας. Κάθε ταχύτητα σωματιδίου του COMSOL καταμετράται στις στοιχειώδεις κυψελίδες του κύβου κατασκευάζοντας ιστογράμματα τριών διαστάσεων στο χώρο των ταχυτήτων.

Σημειώνεται ότι χρειάζεται ιδιαίτερη προσοχή στην επιλογή του μεγέθους της στοιχειώδους κυψελίδας. Μια πολύ μικρή στοιχειώδης κυψελίδα μπορεί να εκμηδενίσει της πιθανότητες σε όλες τις τιμές ταχύτητας ενώ μια πολύ μεγάλη κυψελίδα ενδέχεται να αποκρύψει διαφορετικές πιθανότητες μεταξύ ταχυτήτων που τελικά βρίσκονται στην ίδια στοιχειώδη κυψελίδα.

Η κατασκευή της παραπάνω κατανομής ακολουθείται από την εξαγωγή της σε ένα αρχείο. Στη συνέχεια, το αρχείο αυτό διαβάζεται από τον τρίτο άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης ώστε κάθε φορά που γεννάται ένας παρεμποδιστής αυτός να έχει ταχύτητα η οποία να ακολουθεί την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του αρχείου.

2.3.2.3 Αναλυτικός υπολογισμός της κατανομής κατευθύνσεων των παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης

Ο υπολογισμός της κατανομής κατευθύνσεων των παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης μπορεί να γίνει αναλυτικά όταν το μήκος ελεύθερης διαδρομής τους είναι μεγαλύτερο από τη διαδρομή που διανύουν από το στόχο μέχρι την επιφάνεια εγχάραξης. Αυτός ο αναλυτικός υπολογισμός βασίζεται μόνο στη γεωμετρία: Στο σχετικό προσανατολισμό και την απόσταση των στόχων και της επιφάνειας εγχάραξης. Θεωρείται ότι οι τροχιές των παρεμποδιστών είναι ευθείες.



Σχήμα 21: Σχετικός προσανατολισμός δύο στοιχειωδών επιφανειών στις θέσεις \mathbf{x} και \mathbf{x}' με μοναδιαία κάθετα διανύσματα \mathbf{n} και \mathbf{n}' και επιφάνειες dA και dA' .

Η ροή των σωματιδίων από μία θέση \mathbf{x}' μιας επιφάνειας A' στη θέση \mathbf{x} μιας επιφάνειας A υπολογίζεται από την παρακάτω εξίσωση [59].

$$j(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \text{vis}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \frac{(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{n}})(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \cdot \hat{\mathbf{n}}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} j(\mathbf{x}') \quad (2-9)$$

όπου $\text{vis}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ είναι η συνάρτηση ορατότητας (ίση με το 1 αν υπάρχει ευθεία γραμμή ορατότητας των δύο επιφανειών A και A' και ίση με μηδέν αν όχι), $P(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ είναι η πιθανότητα που έχει ένα σωματίδιο που εκπέμπεται από τη θέση \mathbf{x}' της επιφάνειας A' να φτάσει στο σημείο \mathbf{x} της επιφάνειας A . $j(\mathbf{x}')$ είναι η ροή των εκπεμπόμενων σωματιδίων από τη θέση \mathbf{x}' και $j(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ η ροή των σωματιδίων που φτάνουν στη θέση \mathbf{x} από τη θέση \mathbf{x}' .

Το διπλό ολοκλήρωμα της εξίσωσης (2-9) στην επιφάνεια A' δίνει την συνολική ροή των σωματιδίων από την επιφάνεια A' στη θέση \mathbf{x} της επιφάνειας A .

Αν \mathbf{x} είναι μία θέση στην επιφάνεια εγχάραξης και \mathbf{x}' μία θέση στους στόχους, τότε: α) Η $P(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ προκύπτει από τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των ταχυτήτων των εκπεμπόμενων ατόμων παρεμποδιστών από τους στόχους (βλέπε § 2.3.2.1). β) Η $j(\mathbf{x}')$ είναι η ροή των εκπεμπόμενων ατόμων παρεμποδιστών από θέση \mathbf{x}' στους στόχους που είναι ίδια για όλες τις θέσεις στους στόχους διότι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στους στόχους είναι ίδια για όλες τις θέσεις πάνω σε αυτούς.

Αν $\mathbf{x} = (x, y, z)$ και $\mathbf{x}' = (x', y', z')$, τότε το μοναδιαίο διάνυσμα, $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}}$ επί της διεύθυνσης $\mathbf{x}'\mathbf{x}$ με κατεύθυνση από το \mathbf{x}' στο \mathbf{x} δίνεται από την παρακάτω εξίσωση

$$\hat{e}_{x'x} = \frac{x-x'}{|x-x'|} = \frac{(x-x')\hat{e}_x + (y-y')\hat{e}_y + (z-z')\hat{e}_z}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} \quad (2-10)$$

Επίσης, το $\hat{e}_{xx'}$ αποτελεί το μοναδιαίο διάνυσμα επί της διεύθυνσης $\mathbf{x}\mathbf{x}'$ με κατεύθυνση από το \mathbf{x} στο \mathbf{x}' και δίνεται από την παρακάτω εξίσωση

$$\hat{e}_{xx'} = -\hat{e}_{x'x} \quad (2-11)$$

\mathbf{n} και \mathbf{n}' είναι τα μοναδιαία κάθετα διανύσματα στις θέσεις \mathbf{x} (επιφάνειας εγχάραξης) και \mathbf{x}' (επιφάνεια στόχου) με κατεύθυνση προς το εσωτερικό των επιφανειών. Για την επιφάνεια εγχάραξης της πειραματικής διάταξης των Zhang et al [15] το μοναδιαίο διάνυσμα \mathbf{n} δίνεται από την εξίσωση 2-12.

$$\hat{\mathbf{n}} = 0\hat{e}_x + 0\hat{e}_y - 1\hat{e}_z \quad (2-12)$$

Αντίστοιχα για τις επιφάνειες των στόχων το μοναδιαίο διάνυσμα \mathbf{n}' δίνεται από τις παρακάτω εξισώσεις.

Για τον **Ανατολικό στόχο**:

$$\mathbf{n}' = \sin(30^\circ)\hat{e}_x + 0\hat{e}_y - \cos(30^\circ)\hat{e}_z \quad (2-13)$$

Για τον **Βόρειο στόχο**:

$$\mathbf{n}' = 0\hat{e}_x + \sin(30^\circ)\hat{e}_y - \cos(30^\circ)\hat{e}_z \quad (2-14)$$

Για τον **Δυτικό στόχο**:

$$\mathbf{n}' = +\sin(-30^\circ)\hat{e}_x + 0\hat{e}_y - \cos(-30^\circ)\hat{e}_z \quad (2-15)$$

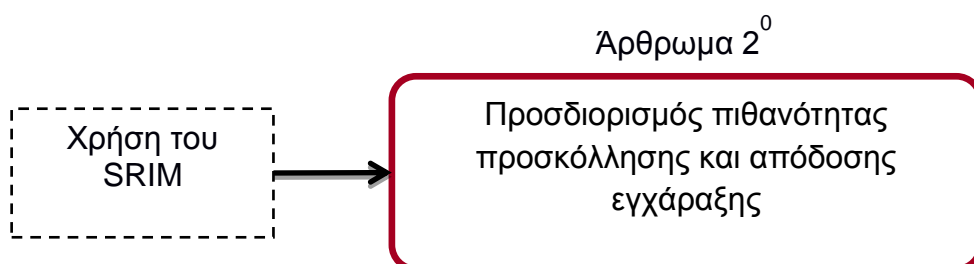
Και για τον **Νότιο στόχο**:

$$\mathbf{n}' = 0\hat{e}_x + \sin(-30^\circ)\hat{e}_y - \cos(-30^\circ)\hat{e}_z \quad (2-16)$$

Από την εξίσωση (2-9), φέρνοντας το $j(\mathbf{x}')$ στο πρώτο μέλος, μπορεί να υπολογιστεί η σχετική συνεισφορά στη ροή που φτάνει στη θέση \mathbf{x} (επιφάνεια εγχάραξης) από κάθε θέση \mathbf{x}' στους στόχους. Με αυτό τον τρόπο μπορεί να υπολογιστεί η κατανομής κατευθύνσεων των παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης.

2.4 Άρθρωμα 2: Απόδοση Εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης

Στις παραμέτρους εισόδου πέρα από τις συνθήκες της αέριας φάσης περιλαμβάνονται και οι συνθήκες αλληλεπίδρασης αερίου με την επιφάνεια εγχάραξης. Το δεύτερο άρθρωμα (Σχήμα 22) του πλαισίου προσομοίωσης διαχειρίζεται αυτό το σύνολο παραμέτρων. Στη παρούσα παράγραφο εξετάζονται η απόδοση εγχάραξης και η πιθανότητα προσκόλλησης. Οι παράμετροι αυτοί αντιστοιχούν σε ένα μικρό τμήμα της αλληλεπίδρασης μεταξύ σωματιδίων αέριας φάσης και επιφάνειας. Η μεταφορά ενέργειας και η καταστροφή του δυναμικού πλέγματος της επιφάνειας από την διείσδυση των ιόντων δεν αποτελεί πεδίο διερεύνησης της παρούσας εργασίας. Βασικό εργαλείο διερεύνησης της απόδοσης εγχάραξης και της πιθανότητας προσκόλλησης αποτελεί ο κώδικας SRIM [52].



Σχήμα 22: Το δεύτερο άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης υπολογίζει τις παραμέτρους εισόδου του τρίτου αρθρώματος που αφορούν στην αλληλεπίδραση μεταξύ της αέριας φάσης και της επιφάνειας εγχάραξης..

2.4.1 Απόδοση Εγχάραξης

Η απόδοση εγχάραξης εκφράζει το πλήθος των ατόμων ή μορίων που απομακρύνονται από ένα υπόστρωμα ανά προσπίπτον ιόν. Όπως σημειώνεται και στην παράγραφο 2.3.2.1 για να συμβεί απομάκρυνση σωματιδίου (ατόμου ή μορίου) από την επιφάνεια υποστρώματος θα πρέπει να ισχύουν τα εξής: Η ορμή του σωματιδίου θα πρέπει να έχει κατεύθυνση προς το εξωτερικό της επιφάνειας του υποστρώματος και το μέγεθος της ορμής θα πρέπει να δίνει τιμή ενέργειας μεγαλύτερη της ενέργειας επιφανειακού δεσμού. Επιπλέον, το σωματίδιο θα πρέπει να βρίσκεται στη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ υποστρώματος και αέριας φάσης.

Το μοντέλο Monte Carlo του SRIM που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της απόδοσης εγχάραξης είναι το monolayer collision steps/Surface sputtering. Το ίδιο μοντέλο χρησιμοποιείται και στον προσδιορισμό της κατανομής κατευθύνσεων των ατόμων-παρεμποδιστών (βλέπε § 2.3.2.1).

Σημειώνεται ότι, για διαφορετικές γωνίες πρόσπτωσης των ιόντων η απόδοση εγχάραξης λαμβάνει διαφορετικές τιμές. Αυτή η γωνιακή εξάρτηση μελετήθηκε και τα αποτελέσματα της παρουσιάζονται στο κεφάλαιο 3..

2.4.2 Πιθανότητα προσκόλλησης

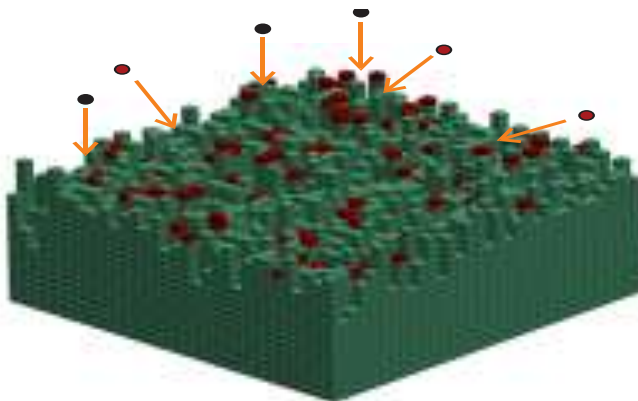
Η πιθανότητα προσκόλλησης αποτελεί την τελευταία μεταβλητή εισόδου του τρίτου αρθρώματος που εξετάζεται με τη χρήση του SRIM. Ειδικότερα, το SRIM είναι κατασκευασμένο έτσι ώστε να ερευνά και καταγράφει την τροχιά ενός ιόντος όταν αυτό πέσει σε ένα άμορφο υπόστρωμα. Χρησιμοποιώντας ένα μηχανισμό διαδοχικών συγκρούσεων καταγράφει τροχιές, ενέργειες και άλλα δεδομένα.

Όσον αφορά την πιθανότητα προσκόλλησης το SRIM δεν δίνει ένα ξεκάθαρο μέγεθος καθώς υποθέτει ότι όλα τα ιόντα προσκρούουν στην επιφάνεια και διανύουν τροχιές εντός ή και εκτός υποστρώματος. Τα σωματίδια που η τροχιά τους κατευθύνεται τελικά εκτός υποστρώματος ονομάζονται οπισθοσκεδαζόμενα. Τα οπισθοσκεδαζόμενα ιόντα είναι αυτά που θεωρούνται από την παρούσα μελέτη ως εκείνα που δεν προσκολλήθηκαν. Επομένως η πιθανότητα προσκόλλησης μπορεί να εκτιμηθεί λαμβάνοντας υπόψη το σύνολο των ιόντων και αυτών που οπισθοσκεδάστηκαν. Η προσέγγιση αυτή αγνοεί ή τουλάχιστον θεωρεί αμελητέο το ενδεχόμενο ένα προσπίπτων ιόν που οπισθοσκεδάστηκε να προκάλεσε και εγχάραξη στο σώμα.

Σημειώνεται ότι και στην περίπτωση της πιθανότητας προσκόλλησης υπάρχει εξάρτηση με την γωνία πρόσπτωσης του ιόντος. Η διερεύνηση της εξάρτησης αυτής παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 3

2.5 Άρθρωμα 3: Μοντέλο Monte Carlo για την εξέλιξη της μορφολογίας της εγχαρασσόμενης επιφάνειας

Στο τρίτο άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης γίνεται εξέλιξη της μορφολογίας της εγχαρασσόμενης επιφάνειας με μοντέλο Monte Carlo [35] το οποίο έχει αναπτυχθεί σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Το υπόστρωμα εγχάραξης προσεγγίζεται με ένα τρισδιάστατο πλέγμα κυψελίδων (κύβων ή κελιών) (Σχήμα 23). Τρία είδη σωματιδίων συμμετέχουν στην προσομοίωση: Τα ιόντα, οι παρεμποδιστές και τα σωματίδια της εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Τα δύο πρώτα αφορούν την αέρια φάση και ο κώδικας υπολογίζει τις τροχιές τους μέχρι να συγκρουστούν με τα σωματίδια του υποστρώματος. Στη συνέχεια, τα σωματίδια μπορεί να προσκολληθούν ή να επανεκπεμφθούν από την επιφάνεια, να προκαλέσουν εγχάραξη ή απόθεση. Η μέθοδος Monte Carlo χρησιμοποιείται για την λήψη αποφάσεων, όπως η απόφαση προσκόλλησης ή επανεκπομπής, η απόφαση εγχάραξης ή απόθεσης.



Σχήμα 23: Το υπόστρωμα εγχάραξης προσεγγίζεται με ένα τρισδιάστατο πλέγμα κυψελίδων (κύβων ή κελιών). Η μέθοδος Monte Carlo χρησιμοποιείται για την λήψη αποφάσεων όπως η απόφαση εγχάραξης ή όχι, η απόφαση θέσης γέννησης σωματιδίου κλπ.

Παρακάτω παρουσιάζονται συνοπτικά τα βήματα που ακολουθούνται στο μοντέλο Monte Carlo [35].

- α)** Γέννηση σωματιδίου: Η απόφαση για το είδος του σωματιδίου που θα γεννηθεί (ιόν ή παρεμποδιστής) εξαρτάται από τη σύσταση του μείγματος αέριας φάσης.
- β)** Αρχική θέση σωματιδίου: Όλες οι θέσεις γέννησης είναι ισοπίθανες.

- γ) Αρχική κατεύθυνση και ενέργεια σωματιδίου: Προέρχεται με δειγματοληψία από τις αντίστοιχες κατανομές του σωματιδίου.
- δ) Βηματική προώθηση σωματιδίου σε ευθεία τροχιά έως την πρόσκρουση στην επιφάνεια. Το μήκος ελεύθερης διαδρομής είναι μεγαλύτερο από το μήκος της τροχιάς μέχρι την πρόσκρουση.
- ε) Προσδιορισμός της θέσης και του κελιού πρόσκρουσης
- στ) Προσδιορισμός του είδους σωματιδίου στο κελί πρόσκρουσης
- ζ) Βάσει της πιθανότητας προσκόλλησης αποφασίζεται η προσκόλληση ή η επανεκπομπή του σωματιδίου
 - ζ1) Σε περίπτωση επανεκπομπής υπολογίζεται η τοπική κλίση της επιφάνειας και η κατεύθυνση (και ενέργεια) του επανεκπεμπόμενου σωματιδίου. Επαναλαμβάνονται τα βήματα δ έως η.
 - ζ2) Στην περίπτωση προσκόλλησης ιόντος αποφασίζεται η εγχάραξη ή όχι. Στην περίπτωση εγχάραξης αφαιρείται το κελί και η διαδικασία ξεκινά πάλι από την αρχή για νέο σωματίδιο αέριας φάσης (βήμα α)
 - ζ3) Στην περίπτωση προσκόλλησης παρεμποδιστή ένα κελί παρεμποδιστή γεννιέται στην πλευρά του κελιού πρόσκρουσης όπου βρίσκεται το σημείο πρόσκρουσης. Στη συνέχεια το νέο κελί «κυλάει» έως ότου συναντήσει άλλο κελί κάτω από αυτό. Οι κανόνες εξέλιξης της μορφολογίας δεν επιτρέπουν τη δημιουργία «σπηλαιώσεων» στη μορφολογία (Solid on Solid approximation) [60]

Η διαδικασία ξεκινά πάλι από την αρχή για νέο σωματίδιο αέριας φάσης (βήμα α).

2.5.1 Γεννήτρια τυχαίων αριθμών – μέθοδος Monte Carlo

Για να λειτουργήσει η μέθοδος Monte Carlo [48] χρειάζεται μια πηγή παροχής τυχαίων αριθμών. Οι πηγές αυτές ονομάζονται γεννήτριες τυχαίων αριθμών. Στις γλώσσες προγραμματισμού, όπως η C++, υπάρχουν ενσωματωμένοι αλγόριθμοι παραγωγής τυχαίων αριθμών. Οι αλγόριθμοι αυτοί παράγουν ψευδοτυχαίες σειρές αριθμών οι οποίες δύναται να ακολουθούν γνωστές κατανομές πυκνότητας πιθανότητας, όπως η κανονική κατανομή και η κατανομή Maxwell-Boltzmann. Συνήθως οι αλγόριθμοι χρειάζονται ένα αρχικό αριθμό που ονομάζεται κλειδί ή σπόρος (seed) για να λειτουργήσουν. Ως κλειδί πολλές φορές χρησιμοποιείται το ρολόι του χρόνου του υπολογιστή. Θέτοντας το ίδιο κλειδί στον αλγόριθμο η σειρά των ψευδοτυχαίων αριθμών επαναλαμβάνεται δίνοντας τη δυνατότητα στον προγραμματιστή να εκτελέσει εργασίες αποσφαλμάτωσης ή και επαλήθευσης αποτελεσμάτων.

Μία από τις μεθόδους που χρησιμοποιούνται στους αλγόριθμους τυχαίων αριθμών για να ακολουθούν γνωστές κατανομές και όχι μόνο είναι η μέθοδος αποδοχής – απόρριψης [53]. Η μέθοδος αυτή είναι αρκετά χρονοβόρα αλλά δίνει τη δυνατότητα στη γεννήτρια τυχαίων αριθμών να ακολουθεί ακόμα και τυχαίες συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας. Στη συνέχεια δίνεται μια σύντομη περιγραφή της μεθόδου αποδοχής απόρριψης.

2.5.2 Η μέθοδος αποδοχής – απόρριψης (accept – reject method) [53]

Έστω ένα εύρος τιμών της μεταβλητής $x [a, b] \in \mathcal{R}$ το οποίο «εμφανίζεται» σε ένα πλήθος επαναλήψεων με μια τυχαία συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f(x)$. Ορίζεται

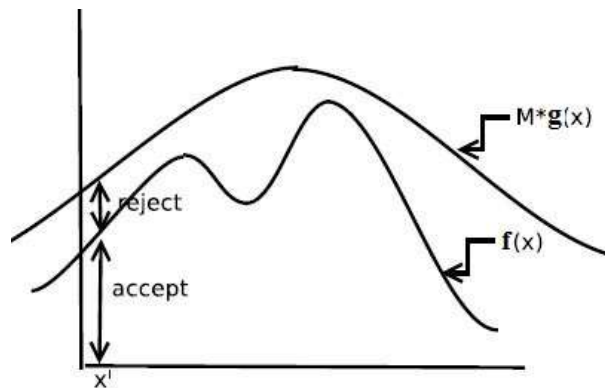
μια γνωστή συνάρτηση $g(x)$ για την οποία ισχύει ότι για κάθε x η $Mg(x) > f(x)$. Στη συνέχεια υπολογίζεται η τιμή

$$M = \max\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right) \quad (2-17)$$

Ακολούθως παράγεται ένας τυχαίος αριθμός X εντός του εύρους $[a, b]$ και ένας Y εντός του διαστήματος $[0, 1]$. Στη συνέχεια εξετάζεται εάν ισχύει η παρακάτω εξίσωση

$$Y \leq \frac{f(x)}{M \cdot g(x)} \quad (2-18)$$

Εάν ισχύει η εξίσωση αυτή τότε γίνεται αποδοχή της τυχαίας τιμής X . Εάν δεν ισχύει, τότε απορρίπτεται και επαναλαμβάνεται η διαδικασία παραγωγής του τυχαίου αριθμού X .



Σχήμα 24: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου αποδοχής – απόρριψης για την παραγωγή τυχαίων αριθμών οι οποίοι ακολουθούν μια τυχαία συνάρτηση πιθανότητας. Στο σχήμα φαίνονται η περιοχή επιτρεπόμενων τιμών και η περιοχή απορριπτέων τιμών.

Σημειώνεται ότι όσο πιο κοντά στην $f(x)$ βρίσκεται η $Mg(x)$, τόσο μικρότερο είναι το πλήθος των απορριπτέων τιμών με αποτέλεσμα να βελτιώνεται η ταχύτητα λήψης της σειράς τυχαίων αριθμών.

2.5.3 Ανάπτυξη γεννήτριας τυχαίων αριθμών

Για την ανάπτυξη γεννήτριας τυχαίων αριθμών η οποία ακολουθεί τυχαία συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας χρησιμοποιήθηκε κώδικας σε γλώσσα προγραμματισμού C++ ο οποίος συντάχθηκε ειδικά για αυτόν τον σκοπό. Ο κώδικας ακολουθεί τη φιλοσοφία της μεθόδου αποδοχής – απόρριψης που περιγράφεται στην παράγραφο 2.5.2

Η πλατφόρμα υλοποίησης που χρησιμοποιήθηκε είναι το ολοκληρωμένο πακέτο ανάπτυξης κώδικα Eclipse Luna [61] το οποίο διατίθεται ως ελεύθερο λογισμικό. Η κατασκευή του τελικού εκτελέσιμου αρχείου έγινε σε περιβάλλον linux ώστε να υπάρχει συμβατότητα με την συστοιχία των υπολογιστών Nessie του Ινστιτούτου Νανοτεχνολογίας και Νανοεπιστήμης του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.

Η γεννήτρια τυχαίων αριθμών που κατασκευάστηκε λαμβάνει την τυχαία συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας από κατάλληλα διαμορφωμένο εξωτερικό αρχείο. Στη συνέχεια διατηρεί στην μνήμη της εφαρμογής την κατανομή και με την μέθοδο αποδοχής – απόρριψης παράγει νέους τυχαίους αριθμούς ακολουθώντας την κατανομή αυτή. Ο κώδικας πέρασε από διάφορα στάδια ανάπτυξης, στο παράρτημα I παρουσιάζεται το στάδιο εξέλιξης του οποίου η αρχιτεκτονική ενσωματώθηκε στον κώδικα C++ του μοντέλου εξέλιξης μορφολογίας.

2.6 Άρθρωμα 4: Μετρολογία τραχύτητας της επιφανειακής μορφολογίας

Για την μετρολογία της εγχαρασσομένης επιφάνειας χρησιμοποιείται ο διαθέσιμος κώδικας μετρολογίας σε C++. Στην παρούσα εργασία, τα μεγέθη που εξετάζονται με μεγαλύτερη προσοχή είναι και πρώτης και δεύτερης τάξης μέτρα, σε αυτά περιλαμβάνονται τα παρακάτω:

Μέσο πάχος εγχάραξης (Mean Height): Το μέσο πάχος εγχάραξης εκφράζει την μέση τιμή της μετατόπισης του ύψους της επιφάνειας κατά την διεργασία της εγχάραξης από την αρχική της θέση. Το μέσο πάχος εγχάραξης σχετίζεται άμεσα με το ρυθμό με τον οποίο εγχαρασσεται μια επιφάνεια και δίνεται από την εξίσωση

$$\bar{z} = \frac{1}{M \cdot N} \sum_{i,j=0}^{i=M,j=N} z_{i,j} \quad (2-19)$$

Όπου M,N το πλήθος των σημείων στους άξονες x και y αντίστοιχα και $z_{i,j}$ το ύψος της θέσης (i,j).

Τραχύτητα (Route Mean Square, RMS): Είναι η τυπική απόκλιση του ύψους της επιφάνειας από το μέσο ύψος αυτής. Εκφράζει το εύρος των διαφορετικών υψών μιας επιφάνειας. Η τραχύτητα Route Mean Square, RMS δίνεται από την εξίσωση

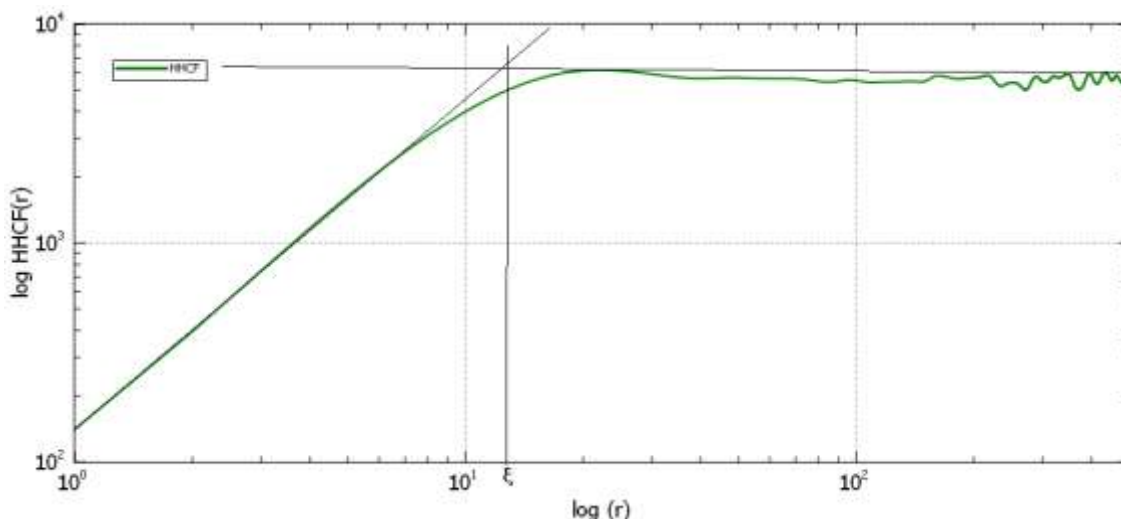
$$RMS = R_q = w = \sqrt{\frac{1}{M \cdot N} \sum_{i,j=0}^{i=M,j=N} (z_{i,j} - \bar{z})^2} \quad (2-20)$$

Μήκος συσχέτισης (ξ) (correlation length): Αποτελεί μέτρο της συχνότητας των διακυμάνσεων των υψών μιας επιφάνειας. Εκφράζει την μέγιστη απόσταση μεταξύ δύο σημείων των οποίων τα ύψη θεωρείται ότι σχετίζονται μεταξύ τους. Για αποστάσεις μεγαλύτερες του ξ ο μοναδικός παράγοντας συσχέτισης είναι η ύπαρξη περιοδικότητας στην επιφάνεια.

Ο ευκολότερος τρόπος υπολογισμού του μήκους συσχέτισης προκύπτει από την μονοδιάστατη απεικόνιση της συνάρτησης συσχέτισης ύψους – ύψους. Η συνάρτηση συσχέτισης ύψους – ύψους εκφράζει κατά πόσο σχετίζονται τα ύψη μιας επιφάνειας μεταξύ δύο θέσεων. Η συνάρτηση συσχέτισης ύψους – ύψους σε λογαριθμικής κλίμακας απεικονίσεις εμφανίζει δύο κλάδους. Ο πρώτος κλάδος χαρακτηρίζεται από

ένα ευθύγραμμο τμήμα θετικής κλίσης στις μικρές τιμές των αποστάσεων ($z_{i+m}-z$) ενώ ο δεύτερος κλάδος χαρακτηρίζεται από ένα ευθύγραμμο τμήμα σταθερής σχετικά τιμής στις μεγάλες αποστάσεις ($z_{i+m}-z$). Η τιμή του μήκους συσχέτισης (ξ) λαμβάνεται ακριβώς στο συνδετικό σημείο (γόνατο) μεταξύ των δύο αυτών τμημάτων. Στο Σχήμα 25 δίνεται μια τυπική απεικόνιση της συνάρτησης ύψους – ύψους και ο γραφικός προσδιορισμός της τιμής του μήκους συσχέτισης.

Το μήκος συσχέτισης για μία επιφάνεια με λόφους ή τελείες είναι περίπου ίσο με τη μέση ακτίνα αυτών. Αντιστοιχεί συνεπώς στο μήκος της πλαγιάς ενός λόφου.



Σχήμα 25: Προσδιορισμός του μήκους συσχέτισης ξ χρησιμοποιώντας την μονοδιάστατη προβολή της συνάρτησης ύψους – ύψους σε λογαριθμικές κλίμακες ως προς τους άξονες x και y . Το σημείο σύνδεσης του τμήματος με κλίση και του οριζόντιου κλάδου της συνάρτησης ύψους – ύψους προσδιορίζει την τιμή του μήκους συσχέτισης.

Κλάσμα κάλυψης παρεμποδιστών: Το κλάσμα κάλυψης παρεμποδιστών εκφράζει το κλάσμα της επιφάνειας που καλύπτεται από άτομα παρεμποδιστών.

Διάγραμμα πυκνότητας φάσματος ισχύος (Power Spectral Density, PSD): Το διάγραμμα PSD όπως και η συνάρτηση ύψους – ύψους αποτελεί δεύτερης τάξης παράμετρος. Το διάγραμμα PSD μπορεί να γραφεί ως ο μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης και δίνεται από την παρακάτω εξίσωση

$$W(K_x, K_y) = \frac{1}{4\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} G(\tau_x, \tau_y) e^{-i(K_x \tau_x + K_y \tau_y)} d\tau_x d\tau_y \quad (2-21)$$

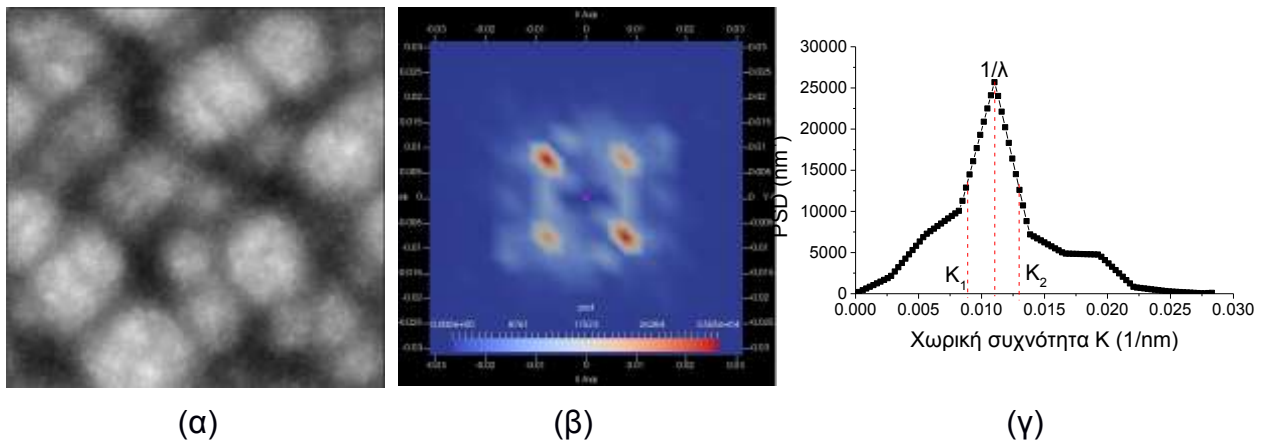
όπου τ η απόσταση μεταξύ δύο σημείων (x_1-x_2) και K το φάσμα των χωρικών συχνοτήτων (κυματαριθμός).

Το PSD χρησιμοποιείται για την αναγνώριση ύπαρξης οργάνωσης στην επιφάνεια. Η ύπαρξη κορυφής στο PSD εκφράζει την ύπαρξη οργάνωσης (περιοδικότητα). Στο Σχήμα 26(α) φαίνεται η κάτοψη επιφάνειας που έχει προκύψει από προσομοίωση (κεφαλαίου 4) και στο Σχήμα 26(β) φαίνεται το 2D PSD αυτής της επιφάνειας το οποίο εμφανίζει 4 κορυφές. Οι κορυφές εμφανίζονται σε συγκεκριμένες κατευθύνσεις το οποίο σηματοδοτεί την ύπαρξη προσανατολισμού στην οργάνωση (ανιστροπική οργάνωση σε 4 κατευθύνσεις). Αν η οργάνωση ήταν ισοτροπική, οι

κορυφές θα εκφυλλίζονταν σε δακτύλιο ακτίνας r γύρω από το θέση $(0,0)$ και ένα διάγραμμα 1D PSD θα ήταν αρκετό για να προσδιορίσει την ύπαρξη οργάνωσης.

Μήκος κύματος (περίοδος): Το μήκος κύματος της επιφάνειας υπολογίζεται από την αντίστροφη τιμή της χωρικής συχνότητας της θέσης της κορυφής που παρατηρείται στο 2D PSD. Στο Σχήμα 26(γ) φαίνεται 1D PSD το οποίο προκύπτει από τις τιμές του 2D PSD κατά μήκος της κατεύθυνσης των 45° ως προς τον άξονα x' [βλέπε Σχήμα 26(β)]. Το μήκος κύματος κατά αυτή την κατεύθυνση είναι $1/0,011031 = 90,7$ nm. Σημειώνεται ότι, το μήκος κύματος εκφράζει την μέση απόσταση μεταξύ των σχηματιζόμενων δομών (τελειών) στην επιφάνεια.

Παράμετρος οργάνωσης (ω): Για την ποσοτικοποίηση της οργάνωσης χρησιμοποιείται [35, 62, 63] ο λόγος του μήκους συσχέτισης συστήματος (system correlation length, ζ) προς την περίοδο, $\omega = \zeta/\lambda$. Το ζ ορίζεται ως το αντίστροφο του εύρους της κορυφής στο PSD στο μέσο ύψος αυτής (full width at half maximum) [$\zeta = 1/(k_2 - k_1)$ στο Σχήμα 2-14(γ)] **Όσο μεγαλύτερη είναι η παράμετρος ω τόσο πιο αυστηρή είναι η οργάνωση.** Για το Σχήμα 26(γ) όπου αποτυπώνεται το διάγραμμα PSD στην κατεύθυνση των 45° ως προς τον x' άξονα το ζ είναι 235,5 nm και το ω είναι 2,596.



Σχήμα 26 (α) Κάτοψη επιφάνειας από προσομοίωση (κεφάλαιο 4). (β) 2D PSD της επιφάνειας. Οι 4 κορυφές δηλώνουν την ύπαρξη ανισοτροπικής (προσανατολισμένης) οργάνωσης. (γ) 1D PSD κατά μήκος της κατεύθυνσης $x=y$ (45° ως προς τον άξονα x'). Η θέση του μεγίστου δίνει την περίοδο (λ) και ο λόγος του μήκους συσχέτισης συστήματος (ζ) προς την περίοδο δίνει ποσοτικοποιεί την οργάνωση της επιφάνειας.

3 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ: ΑΠΟΔΟΣΗ ΕΓΧΑΡΑΞΗΣ, ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΠΡΟΣΚΟΛΛΗΣΗΣ, ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ ΤΑΧΥΤΗΤΩΝ

3.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται οι υπολογισμοί και τα δεδομένα εισόδου που κατασκευάστηκαν για την αναζήτηση των επιφανειών που περιγράφονται στην μελέτη των Zhang et al. [15]. Ειδικότερα, με στόχο τα δεδομένα εισόδου του δεύτερου αρθρώματος του μοντέλου προσομοίωσης «μηχανισμός εξέλιξης μορφολογίας», έγιναν υπολογισμοί για την γωνιακή εξάρτηση της απόδοσης εγχάραξης και της πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ σε υποστρώματα Fe, Si και συνδυασμών των δύο. Επίσης, έγιναν υπολογισμοί της γωνιακής εξάρτησης της πιθανότητας προσκόλλησης των ατόμων Fe σε επιφάνειες Si και Fe (βλέπε § 3.4).

Επίσης, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών προσδιορισμού της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας της ροής των ατόμων Fe στην επιφάνεια εγχάραξης. Τέλος, παρουσιάζεται η μεθοδολογία για τη διαστασιολόγηση της επιφάνειας και των στατιστικών παραμέτρων χαρακτηρισμού της. Οι υπολογισμοί βασίζονται σε υπερκελιά (supercells) υποστρώματος, που περιέχουν πλήθος ατόμων Si, σε υπερσωματίδια ιόντων Ar^+ και Fe, που περιέχουν πλήθος ιόντων Ar^+ και Fe. Με τη διαστασιολόγηση είναι δυνατή η άμεση σύγκριση με τα πειραματικά αποτελέσματα.

3.2 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης

Για τους υπολογισμό της απόδοσης εγχάραξης και της πιθανότητας προσκόλλησης χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας SRIM (βλέπε § 2.4)

3.2.1 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε υπόστρωμα Fe

Χρησιμοποιώντας το λογισμικό πακέτο SRIM εκτελέστηκαν οι παρακάτω εργασίες. Για υπόστρωμα Fe πάχους 1 μm γίνεται βομβαρδισμός με ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV και καταγράφονται η απόδοση εγχάραξης (Etching Yield, EY_{Fe}) και η πιθανότητα προσκόλλησης (Sticking Probability, S) των Ar^+ , $S_{+,Fe}$. Με δεδομένο ότι το SRIM υπολογίζει το πλήθος των οπισθοσκεδαζόμενων ιόντων, η πιθανότητα προσκόλλησής τους υπολογίζεται από την εξίσωση (3-1).

$$S_{+,Fe} = 1 - \frac{\text{πλήθος οπισθοσκεδαζόμενων ιόντων}}{\text{πλήθος προσπίπτοντων ιόντων}} \quad (3-1)$$

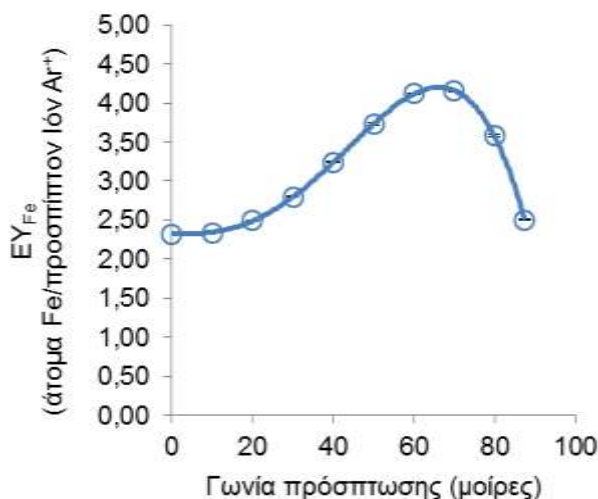
Συγκεκριμένα, η επιφάνεια Fe βομβαρδίζεται με 99999 ιόντα στις γωνίες 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80 και 87,5 μοίρες. Οι γωνίες μετρούνται ως προς την κάθετο στην επιφάνεια πρόσπτωσης. Για κάθε γωνία έγιναν 10 επαναλήψεις ώστε να εξαχθεί μέση τιμή των EY_{Fe} και $S_{+,Fe}$ και η τυπική απόκλιση από τις μέσες τιμές. Ακολουθεί ο πίνακας των αποτελεσμάτων.

Πίνακας 2: Απόδοση εγχάραξης Fe από ιόντα Ar⁺ (EY_{Fe}) και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων σε υπόστρωμα Fe ($S_{+,Fe}$) συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων. Η γωνία ορίζεται ως προς την κάθετη στην επιφάνεια πρόσπτωσης. Οι υπολογισμοί έγιναν με τον κώδικα SRIM και αποτελούν τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων από 99999 ιόντα η κάθε μία. Στον πίνακα δίνεται και η τυπική απόκλιση από τις μέσες τιμές.

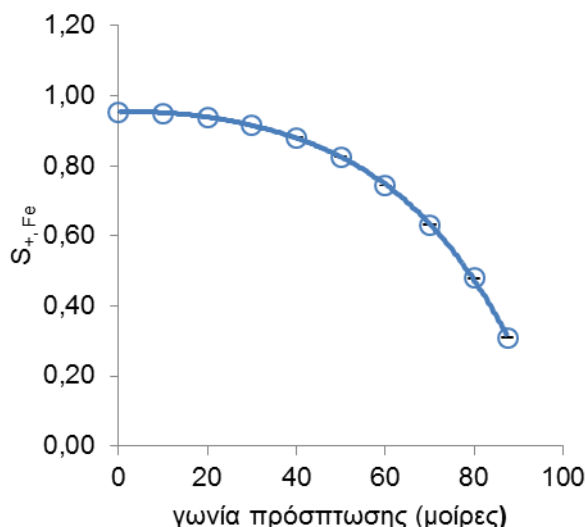
Γωνία (μοίρες)	EY_{Fe}	τυπική απόκλιση	$S_{+,Fe}$	Τυπική απόκλιση
0	2,32	0,01	0,9534	0,0005
10	2,34	0,01	0,9501	0,0007
20	2,49	0,01	0,9390	0,0007
30	2,80	0,01	0,9166	0,0011
40	3,24	0,01	0,8811	0,0008
50	3,73	0,01	0,8256	0,0015
60	4,12	0,01	0,7446	0,0013
70	4,15	0,01	0,6321	0,0016
80	3,58	0,01	0,4788	0,0009
87,5	2,50	0,01	0,3099	0,0011

Σημειώνεται ότι, το μοντέλο προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε στο SRIM ήταν το monolayer collision steps/Surface Sputtering που αναφέρεται στην παράγραφο 2.3.2.1 και 2.4.1 .

Ο παραπάνω πίνακας μεταφέρθηκε σε δύο σχήματα (Σχήματα 27 και 28) και από τις τιμές του προέκυψαν εξισώσεις πολυωνυμικής προσέγγισης. Παρακάτω δίνονται τα δύο σχήματα της απόδοσης εγχάραξης EY_{Fe} και της πιθανότητας προσκόλλησης $S_{+,Fe}$ και στη συνέχεια οι δύο εξισώσεις πολυωνυμικής προσέγγισης.



Σχήμα 27: Απόδοση εγχάραξης Fe από ιόντα Ar⁺ (ενέργειας 1000 eV) συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων. Η γωνία ορίζεται ως προς την κάθετη στην επιφάνεια πρόσπτωσης. Η απόδοση εγχάραξης υπολογίστηκε με τον κώδικα SRIM και αποτελεί τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 99999 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνεται η πολυωνυμική προσέγγιση που δίνεται στην εξίσωση (3-2).



Σχήμα 28: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ (ενέργειας 1000 eV) σε υπόστρωμα Fe σε σχέση με την γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια του Fe. Η πιθανότητα υπολογίστηκε με τον κώδικα SRIM και αποτελεί τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων από 99999 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνεται η πολυωνυμική προσέγγιση που δίνεται στην εξίσωση (3-3).

Αν x είναι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια Fe, τότε οι εξισώσεις πολυωνυμικής προσέγγισης για την απόδοση εγχάραξης και την πιθανότητα προσκόλλησης είναι

$$EY_{Fe} = -3 \cdot 10^{-7} x^4 + 2 \cdot 10^{-5} x^3 + 7 \cdot 10^{-5} x^2 - 0,0002x + 2,3184 \quad (3-2)$$

$$S_{+,Fe} = -1 \cdot 10^{-8} x^4 + 9 \cdot 10^{-7} x^3 - 8 \cdot 10^{-5} x^2 + 0,0006x + 0,9525 \quad (3-3)$$

3.2.2 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε υπόστρωμα Si

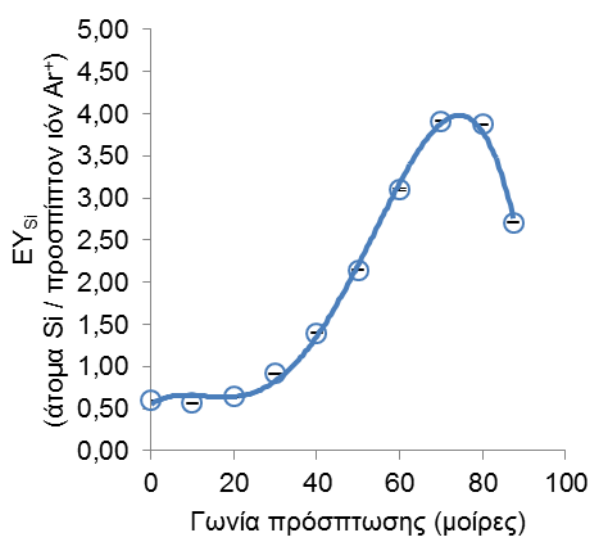
Οι προσομοιώσεις της παραγράφου 3.2.1 επαναλήφθηκαν για υπόστρωμα Si. Το υπολογιστικό κόστος σε χρόνο των προσομοιώσεων ελαττώθηκε μειώνοντας τον αριθμό των προσπιπτόντων ιόντων από 99999 σε 50000. Η αλλαγή αυτή δεν απέφερε αλλοίωση στην ποιότητα των αποτελεσμάτων καθώς οι τυπικές αποκλίσεις παραμένουν σε χαμηλά επίπεδα. Ακολουθεί ο πίνακας της απόδοσης εγχάραξης, EY_{Si} , και της πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ , $S_{+,Si}$, ενέργειας 1000 eV, συναρτήσεως της γωνίας πρόσπτωσης σε επιφάνεια Si.

Πίνακας 3: Απόδοση εγχάραξης Si από ιόντα Ar^+ (EY_{Si}) και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ ($S_{+,Si}$) συναρτήσεως της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων. Η απόδοση εγχάραξης και η πιθανότητα προσκόλλησης υπολογίστηκαν με τον κώδικα SRIM και αποτελούν τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα η κάθε μία. Στον πίνακα δίνεται και η τυπική απόκλιση από τη μέση τιμή.

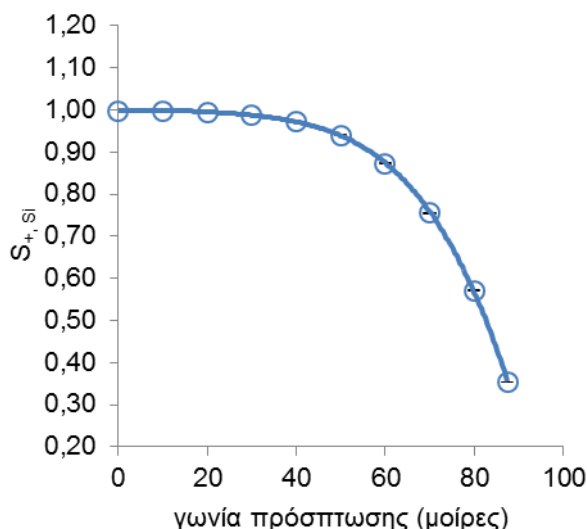
Γωνία (μοίρες)	EY_{Si}	τυπική απόκλιση	$S_{+,Si}$	τυπική απόκλιση
0	0,592	0,007	0,9984	0,0001

Γωνία (μοίρες)	EY_{Si}	τυπική απόκλιση	$S_{+,Si}$	τυπική απόκλιση
10	0,563	0,004	0,9978	0,0002
20	0,643	0,007	0,9952	0,0003
30	0,912	0,004	0,9884	0,0004
40	1,396	0,008	0,9727	0,0007
50	2,144	0,011	0,9392	0,0012
60	3,101	0,011	0,8733	0,0014
70	3,913	0,008	0,7557	0,0021
80	3,872	0,010	0,5715	0,0020
87,5	2,708	0,010	0,3534	0,0015

Ακολουθούν οι γραφικές απεικονίσεις του Πίνακα 3.



Σχήμα 29: Απόδοση εγχάραξης Si από ιόντα Ar^+ (ενέργειας 1000 eV) συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων. Η απόδοση εγχάραξης υπολογίστηκε με τον κώδικα SRIM και αποτελεί τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνεται η πολυωνυμική προσέγγιση που δίνεται στην εξίσωση (3-4).



Σχήμα 30: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar+ (ενέργειας 1000 eV) σε υπόστρωμα Si σε σχέση με τη γωνία πρόσπτωσης των ιόντων. Η πιθανότητα υπολογίστηκε με τον κώδικα SRIM και αποτελεί τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνεται η πολυωνυμική προσέγγιση που δίνεται στην εξίσωση (3-5).

Αν x είναι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια Si (σε μοίρες), τότε οι εξισώσεις πολυωνυμικής προσέγγισης για την απόδοση εγχάραξης και την πιθανότητα προσκόλλησης είναι

$$EY_{Si} = -7 \cdot 10^{-7} x^4 + 1 \cdot 10^{-4} x^3 - 0,003x^2 + 0,0315x + 0,5521 \quad (3-4)$$

$$S_{+,Si} = -2 \cdot 10^{-8} x^4 + 1 \cdot 10^{-6} x^3 - 5 \cdot 10^{-5} x^2 + 0,0005x + 0,9978 \quad (3-5)$$

3.2.3 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar⁺ σε υπόστρωμα Si με 10% προσμίξεις Fe

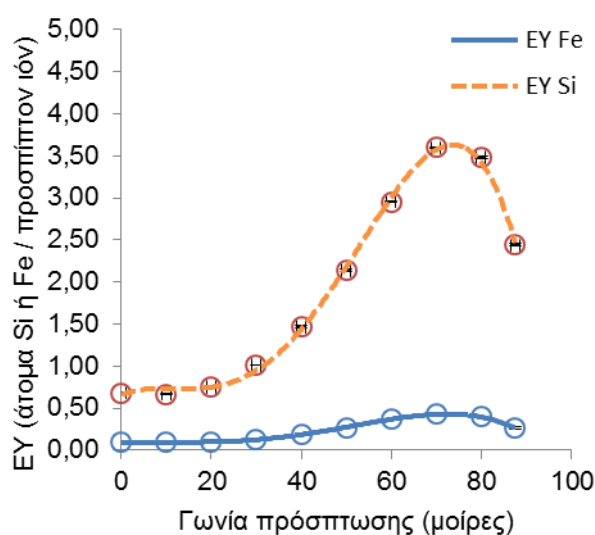
Στους υπολογισμούς που ακολουθούν το υπόστρωμα που βομβαρδίζεται από τα ιόντα Ar⁺ παύει να αποτελείται από ένα στοιχείο αλλά αποτελεί μίγμα συγκεκριμένης στοιχειομετρίας. Στην περίπτωση της παρούσας παραγράφου η στοιχειομετρία είναι 9 άτομα Si για 1 άτομο Fe. Η αναλογία αυτή εκφράζει ότι το υπόστρωμα Si που βομβαρδίζεται από τα ιόντα Ar⁺ περιέχει Fe σε ποσοστό 10%. Ακολουθεί ο πίνακας της απόδοσης εγχάραξης για κάθε στοιχείο ξεχωριστά όπως τα δίνει το SRIM ανά προσπίπτον ιόν και η πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων Ar⁺.

Πίνακας 4: Απόδοση εγχάραξης Fe (EY_{Fe}) και Si (EY_{Si}) και πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar⁺ ($S_{+,Si-10\%Fe}$) σε υπόστρωμα Si πάχους 1 μm που περιέχει 10% Fe συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων. Οι υπολογισμοί έγιναν με τον κώδικα SRIM και αποτελούν τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα Ar⁺ (ενέργειας 1000 eV) η κάθε μία. Στον πίνακα δίνεται και η τυπική απόκλιση από τη μέση τιμή.

Γωνία (μοίρες)	EY_{Fe}	τυπική απόκλιση	EY_{Si}	τυπική απόκλιση	$S_{+,Si-10\%Fe}$	τυπική απόκλιση

Γωνία (μοίρες)	EY_{Fe}	τυπική απόκλιση	EY_{Si}	τυπική απόκλιση	$S_{+,Si-10\%Fe}$	τυπική απόκλιση
0	0,092	0,002	0,682	0,005	0,9946	0,0003
10	0,089	0,002	0,664	0,005	0,9932	0,0003
20	0,098	0,001	0,752	0,009	0,9897	0,0004
30	0,131	0,002	1,012	0,006	0,9803	0,0004
40	0,185	0,002	1,468	0,010	0,9611	0,0008
50	0,270	0,003	2,137	0,014	0,9239	0,0012
60	0,363	0,002	2,951	0,010	0,8547	0,0012
70	0,430	0,003	3,598	0,010	0,7395	0,0024
80	0,396	0,004	3,481	0,011	0,5597	0,0022
87,5	0,263	0,002	2,438	0,015	0,3477	0,0028

Από τον Πίνακα 4 προκύπτουν τα γραφήματα και οι πολυωνυμικές προσεγγίσεις που ακολουθούν.



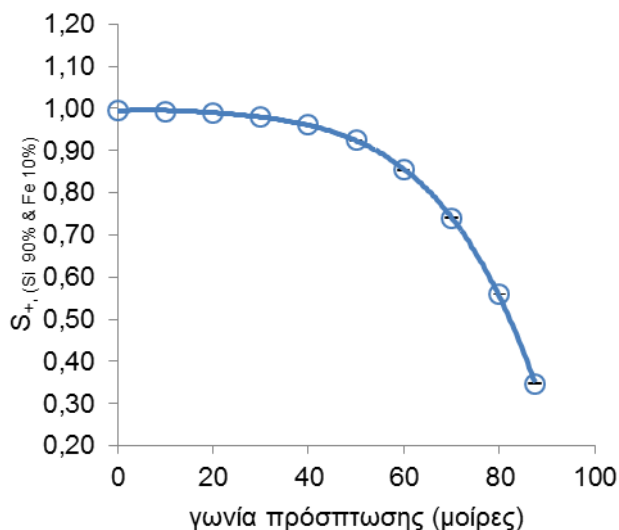
Σχήμα 31: Αποδόσεις εγχάραξης Si και Fe για υπόστρωμα Si με 10% προσμίξεις Fe συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων Ar^+ (ενέργειας 1000 eV). Οι αποδόσεις εγχάραξης υπολογίστηκαν με τον κώδικα SRIM και αποτελούν τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνονται και οι πολυωνυμικές προσεγγίσεις που δίνονται στις σχέσεις (3-6) και (3-7)

Αν x είναι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια Si (σε μοίρες), τότε οι εξισώσεις πολυωνυμικής προσέγγισης για τις αποδόσεις εγχάραξης είναι

$$EY_{Si} = -6 \cdot 10^{-7} x^4 + 8 \cdot 10^{-5} x^3 - 0,0023 x^2 + 0,6519 \quad (3-6)$$

$$EY_{Fe} = -7 \cdot 10^{-8} x^4 + 9 \cdot 10^{-6} x^3 - 0,0002 x^2 + 0,0021 x + 0,0892 \quad (3-7)$$

Η πιθανότητα προσκόλλησης της ιόντων Ar^+ στο υπόστρωμα Si με 10% προσμίξεις Fe φαίνεται στο Σχήμα 32.



Σχήμα 32: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ (ενέργειας 1000 eV) σε υπόστρωμα Si 10% προσμίξεις Fe σε σχέση με τη γωνία πρόσπτωσης των ιόντων. Η πιθανότητα υπολογίστηκε με τον κώδικα SRIM και αποτελεί τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνεται η πολυωνυμική προσέγγιση που δίνεται στην εξίσωση (3-8).

Αν x είναι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια Si (σε μοίρες), τότε η εξίσωση πολυωνυμικής προσέγγισης της πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ δίνεται από την εξίσωση

$$S_{+, Si-10\%Fe} = -2 \cdot 10^{-8} x^4 + 1 \cdot 10^{-6} x^3 - 6 \cdot 10^{-5} x^2 + 0,0006x + 0,9937 \quad (3-8)$$

3.2.4 Απόδοση εγχάραξης και πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε υπόστρωμα Si με μονοστρωματικό υμένιο Fe

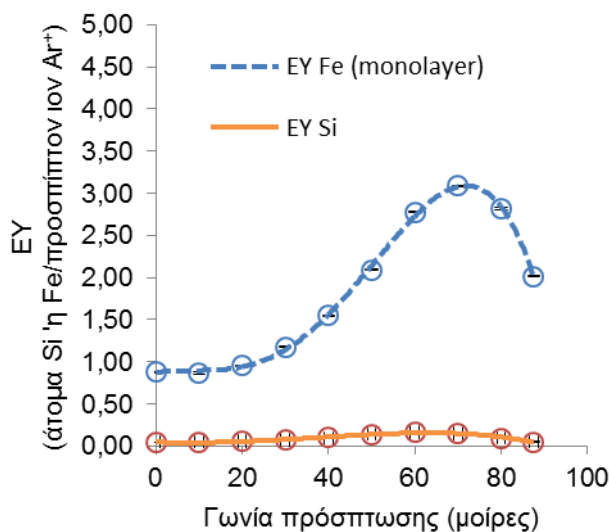
Στην παρούσα διερεύνηση θεωρούμε ένα μονοστρωματικό υμένιο Fe στην επιφάνεια του Si. Το πάχος του στρώματος Fe είναι 2,52 Å και το πάχος του στρώματος Si είναι 100 Å. Οι προηγούμενες προσομοιώσεις (§ 3.2.1 έως και 3.2.3) έδειξαν ότι το μέγιστο βάθος διείσδυσης των ιόντων Ar^+ ενέργειας 1000 eV στο Si δεν ξεπερνά τα 500 Å. Ο συνδυασμός με επιπλέον μονοστρωματικό υμένιο Fe πάνω από το Si φαίνεται πως ελαττώνει το τελικό βάθος διείσδυσης στα 100 Å. Η αλλαγή επομένως του πάχους του υποστρώματος Si (από 1 μm σε 100 Å) για τον προσδιορισμό μεγεθών που εξαρτώνται από τα λίγα πρώτα ανώτερα στρώματα μιας επιφάνειας δεν αναμένεται να επηρεάσει σημαντικά τα αποτελέσματα. Η παραπάνω αλλαγή βελτιώνει επίσης το χρόνο ολοκλήρωσης της κάθε προσομοίωσης. Ακολουθεί ο πίνακας των αποτελεσμάτων της απόδοσης εγχάραξης και της πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ .

Πίνακας 5: Απόδοση εγχάραξης Fe (EY_{Fe}) και Si (EY_{Si}) και πιθανότητας προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ ($S_{+, Si-Fe\text{monolayer}}$) σε υπόστρωμα Si πάχους 100 Å που καλύπτεται από μονοστρωματικό υμένιο Fe (πάχους 2,52 Å) συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων. Οι υπολογισμοί

έγιναν με τον κώδικα SRIM και αποτελούν τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα Ar⁺ (ενέργειας 1000 eV) η κάθε μία. Στον πίνακα δίνεται και η τυπική απόκλιση από τη μέση τιμή.

Γωνία (°)	EY_{Fe}	τυπική απόκλιση	EY_{Si}	τυπική απόκλιση	$S_{+,Si-Fe\text{monolayer}}$	τυπική απόκλιση
0	0,877	0,006	0,0407	0,0007	0,9834	0,0007
10	0,865	0,007	0,0443	0,0004	0,9825	0,0005
20	0,952	0,007	0,0546	0,0012	0,9768	0,0002
30	1,177	0,006	0,0697	0,0006	0,9663	0,0007
40	1,547	0,006	0,0966	0,0018	0,9464	0,0011
50	2,087	0,006	0,1388	0,0003	0,9080	0,0003
60	2,773	0,006	0,1651	0,0010	0,8212	0,0021
70	3,083	0,006	0,1456	0,0018	0,6998	0,0031
80	2,817	0,015	0,0915	0,0016	0,5258	0,0010
87,5	2,013	0,012	0,0488	0,0010	0,3383	0,0008

Από τον Πίνακα 5 προκύπτουν τα γραφήματα και οι πολυωνυμικές καμπύλες προσέγγισης των αποδόσεων εγχάραξης και της πιθανότητας προσκόλλησης.

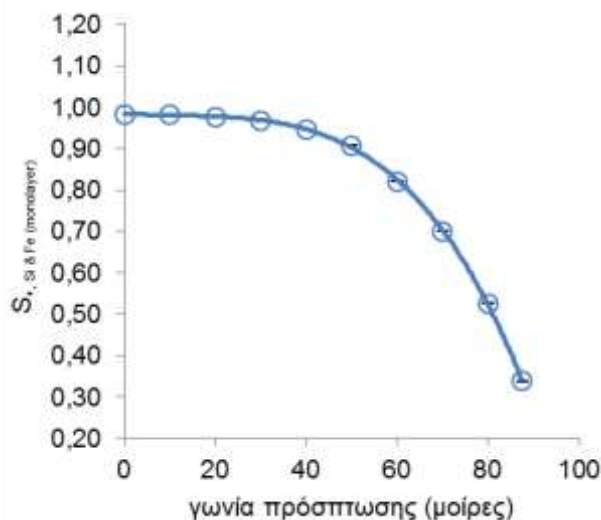


Σχήμα 33: Αποδόσεις εγχάραξης Si και Fe για υπόστρωμα Si με μονοστρωματικό υμένιο Fe συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων Ar⁺ (ενέργειας 1000 eV). Οι αποδόσεις εγχάραξης υπολογίστηκαν με τον κώδικα SRIM και αποτελούν τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνονται και οι πολυωνυμικές προσεγγίσεις που δίνονται στις εξισώσεις (3-9) και (3-10).

Αν x είναι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια Si (σε μοίρες), τότε οι εξισώσεις πολυωνυμικής προσέγγισης για τις αποδόσεις εγχάραξης είναι

$$EY_{Si} = -7 \cdot 10^{-4} x^4 - 4 \cdot 10^{-7} x^3 + 0,0001x^2 - 0,0015x + 0,0438 \quad (3-9)$$

$$EY_{Fe} = -4 \cdot 10^{-7} x^4 + 5 \cdot 10^{-5} x^3 - 0,001x^2 + 0,0094x + 0,8673 \quad (3-10)$$

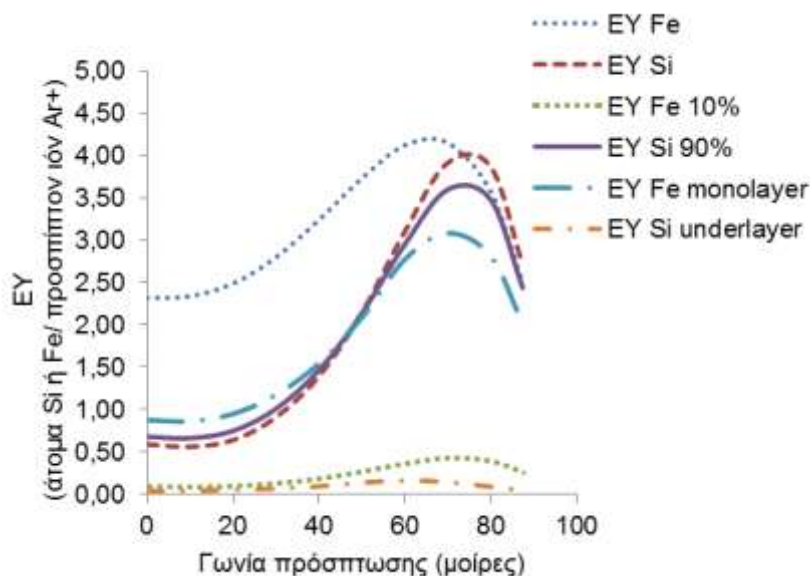


Σχήμα 34: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ (ενέργειας 1000 eV) σε υπόστρωμα Si με επικάλυψη μονοστρωματικού υμενίου Fe σε σχέση με τη γωνία πρόσπτωσης των ιόντων. Η πιθανότητα υπολογίστηκε με τον κώδικα SRIM και αποτελεί τη μέση τιμή 10 προσομοιώσεων με 50000 ιόντα η κάθε μία. Στο σχήμα φαίνονται και οι τυπικές αποκλίσεις από τις μέσες τιμές. Επίσης φαίνεται η πολυωνυμική προσέγγιση που δίνεται στην εξίσωση (3-11).

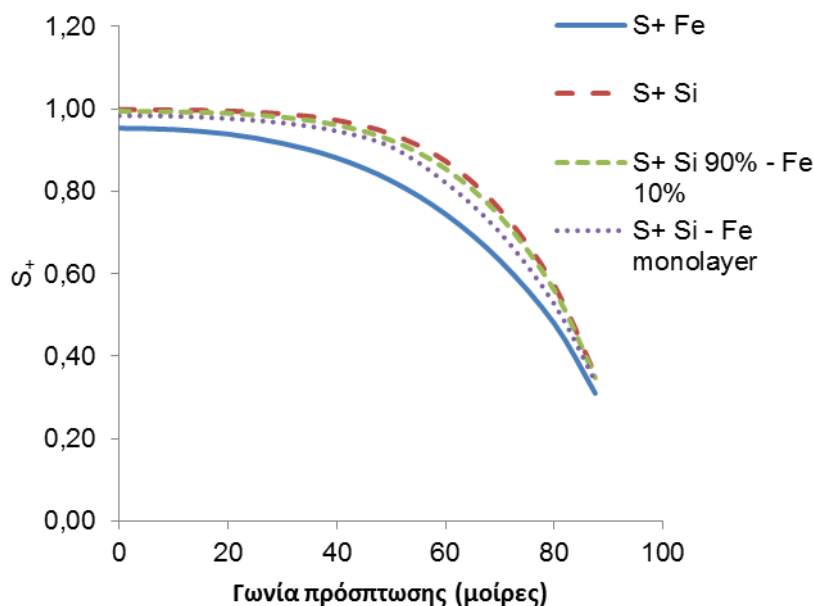
$$S_{+, Si-Fe(monolayer)} = -6 \cdot 10^{-9} x^4 + 7 \cdot 10^{-7} x^3 + 3 \cdot 10^{-5} x^2 - 0,0005x + 0,9841 \quad (3-11)$$

3.2.5 Αποδόσεις εγχάραξης και πιθανότητες προσκόλλησης ιόντων Ar^+ σε διαφορετικά υποστρώματα: Συγκεντρωτικά αποτελέσματα

Στα παρακάτω δύο σχήματα εμφανίζονται όλες οι αποδόσεις εγχάραξης (Σχήμα 35) και οι πιθανότητες προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ (Σχήμα 36) που υπολογίστηκαν στις παραγράφους 3.2.1 έως και 3.2.4.

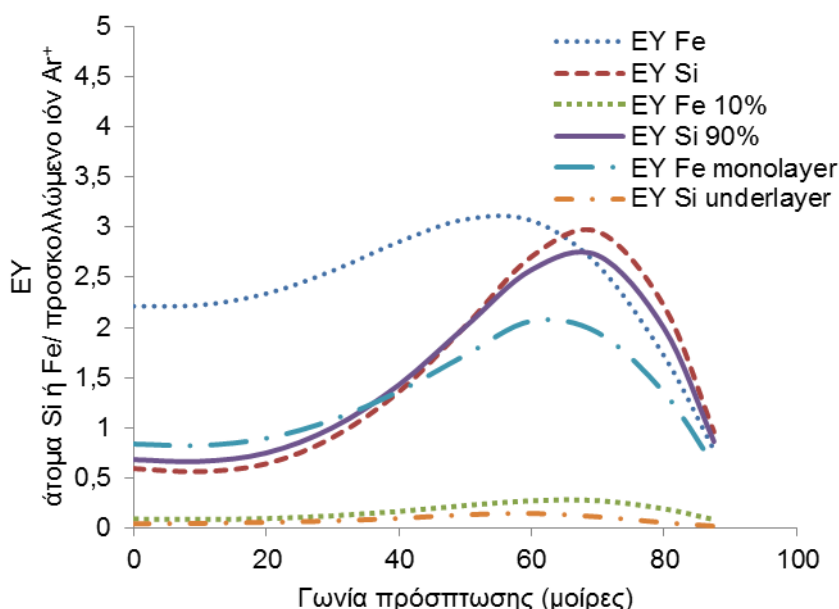


Σχήμα 35: Απόδοση εγχάραξης Si και Fe από ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων όπως υπολογίστηκαν στις παραγράφους 3.2.1 έως και 3.2.4.



Σχήμα 36: Πιθανότητα προσκόλλησης ιόντων Ar^+ ενέργειας 1000 eV σε Si και Fe συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων όπως υπολογίστηκαν στις παραγράφους 3.2.1 έως και 3.2.4.

Στο Σχήμα 37 δίνονται οι αποδόσεις εγχάραξης των παραγράφων 3.2.1 έως και 3.2.4 ανά προσκολλώμενο ιόν. Δεδομένου ότι ο μηχανισμός εξέλιξης τραχύτητας εξετάζει σε πρώτη φάση εάν ένα ιόν προσκολλάται στην επιφάνεια και στην συνέχεια εάν την εγχάρασσει (βλέπε § 2.5) κρίνεται απαραίτητη η χρήση της απόδοσης εγχάραξης ανά προσκολλώμενο ιόν και όχι ανά προσπίπτον ιόν.



Σχήμα 37: Απόδοση εγχάραξης Si και Fe από ιόντα Ar^+ ενέργειας 1 keV συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων ανά προσκολλώμενο ιόν όπως προσδιορίζονται από το SRIM.

Συμπερασματικά, σημειώνεται ότι χρησιμοποιώντας ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV φαίνεται πως οι επιφάνειες Fe εγχάρασσονται ευκολότερα από ότι οι επιφάνειες Si. Το

συμπέρασμα αυτό προκύπτει συγκρίνοντας τις καμπύλες EY_{Fe} και EY_{Si} . Η καμπύλη EY_{Si} σχεδόν σε όλες τις γωνίες πρόσπτωσης πέραν των πάρα πολύ μεγάλων γωνιών βρίσκεται σε χαμηλότερες τιμές από την αντίστοιχη καμπύλη EY_{Fe} . Ειδικότερα, σε μικρές γωνίες έως 20 μοίρες περίπου, υπάρχει ένας σταθερός λόγος μεταξύ των αποδόσεων εγχάραξης του Fe και του Si. Ο λόγος αυτός έχει τιμή περίπου ίση με 5 άτομα Fe προς 1 άτομο Si.

Επίσης, το μονοατομικό στρώμα Fe φαίνεται πως «θωρακίζει» σε μεγάλο βαθμό το υπόστρωμα του Si. Το συμπέρασμα αυτό προκύπτει παρατηρώντας τις καμπύλες $EY_{Fe(monolayer)}$ και $EY_{Si(underlayer)}$. Ενώ στην περίπτωση των επιφανειών Fe και Si ο λόγος των αποδόσεων εγχάραξης στις μικρές γωνίες είναι κοντά στο 5 προς 1, στην περίπτωση μονοατομικού στρώματος Fe πάνω σε υπόστρωμα Si ο αντίστοιχος λόγος είναι περίπου 20 προς 1. Η «θωράκιση» φαίνεται και από το βάθος διείσδυσης των ιόντων στην επιφάνεια το οποίο από τα 500 περίπου Å γίνεται 100 Å (βλέπε § 3.2.4)

Αξιοσημείωτη είναι επίσης η εξάρτηση της απόδοσης εγχάραξης από το πλήθος των ατόμων που υπάρχουν προς εγχάραξη. Η εξάρτηση αυτή φαίνεται μεταξύ των καμπυλών EY_{Fe} όπου υπάρχει απεριόριστος αριθμός εγχαρασσόμενων ατόμων και $EY_{Fe(monolayer)}$ όπου υπάρχει μονοατομικό στρώμα ατόμων προς εγχάραξη.

Σχετικά με την πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ στις επιφάνειες που εξετάστηκαν προκύπτει ότι ο Fe προκαλεί εντονότερη επανεκμπομπή των ιόντων Ar^+ σε σχέση με το Si. Αυξάνοντας τη γωνία πρόσπτωσης και ειδικότερα για γωνίες άνω των 60 μοιρών η πιθανότητα προσκόλλησης μειώνεται με αυξανόμενο υψηλό ρυθμό. Για γωνίες μικρότερες των 60 μοιρών η πιθανότητα προσκόλλησης μεταβάλλεται με πιο αργό ρυθμό ενώ για γωνίες 0 έως 20 μοίρες η πιθανότητα προσκόλλησης μπορεί να θεωρηθεί σταθερή κοντά στο 100%. Η γωνιακή εξάρτηση της πιθανότητας προσκόλλησης αντικατοπτρίζεται στην απόδοση εγχάραξης (Σχήμα 37) μειώνοντας την επίδραση της γωνίας στην τιμή της. Συγκρίνοντας τα Σχήματα 35 και 37 διαπιστώνεται πως το Σχήμα 37 παρουσιάζει πιο ήπια μεταβολή τιμής καθώς η γωνία πρόσπτωσης μετακινείται από τις 0 έως τις 90 μοίρες.

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η γωνιακή εξάρτησης γίνεται αισθητή στην απόδοση εγχάραξης και στην πιθανότητα προσκόλλησης για γωνίες μεγαλύτερες των 20 μοιρών. Για μικρές γωνίες πρόσπτωσης έως 20 μοίρες η πιθανότητα προσκόλλησης και η απόδοση εγχάραξης μπορούν να θεωρηθούν σταθερές, ανεξάρτητες της γωνίας πρόσπτωσης των ιόντων.

3.2.6 Πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων Fe σε υπόστρωμα Si και Fe.

Δεδομένου ότι η επιφάνεια εγχάραξης Si βομβαρδίζεται πέρα από ιόντα Ar^+ και από άτομα Fe προερχόμενα από τους στόχους, διερευνήθηκε η πιθανότητα προσκόλλησης των ατόμων Fe σε επιφάνειες Fe και Si. Η διερεύνηση αυτή κρίνεται απαραίτητη καθώς οι γωνίες πρόσπτωσης των ατόμων Fe στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια είναι ιδιαίτερα υψηλές (βλέπε § 3.4).

Η ενέργεια των ατόμων Fe θεωρείται ίση με τη μέση τιμή της ενέργειας των εκπεμπομένων ατόμων Fe λόγω εγχάραξης από ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV και είναι ίση με 16 eV. Δεδομένου της χαμηλής σχετικά ενέργειας θεωρείται ότι τα άτομα αυτά δεν εγχαρασσούν την επιφάνεια αλλά προσκολλώνται σε αυτήν συνεπώς δεν εξετάζεται η απόδοση εγχάραξης τους. Σημειώνεται επίσης ότι, το SRIM εξετάζει ιόντα πρόσπτωσης Fe και όχι άτομα. Η διαφορά αυτή, επίσης θεωρείται αμελητέα.

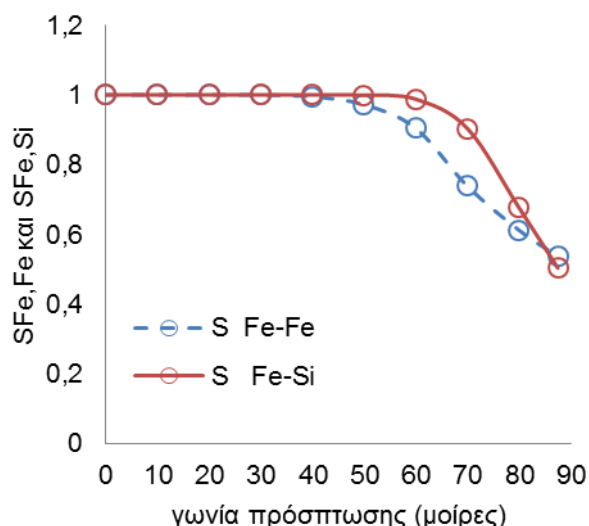
Για τον προσδιορισμό της γωνιακής εξάρτησης της πιθανότητας προσκόλλησης των ατόμων Fe στις επιφάνειες Fe και Si χρησιμοποιείται ο κώδικας SRIM με

προσομοιώσεις πρόσπτωσης 10.000 ατόμων Fe σε γωνίες 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80 και 87,5 μοιρών. Το μοντέλο προσομοίωσης είναι το “monolayer collision step / surface sputtering” και η πιθανότητα προσκόλλησης υπολογίζεται από την εξίσωση (3-1) . Ακολουθεί ο πίνακας τιμών της πιθανότητας προσκόλλησης.

Πίνακας 6: Πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων Fe ενέργειας 16 eV σε υπόστρωμα Si και Fe για γωνίες 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80 και 87,5 μοιρών.

Γωνία (°)	$S_{Fe,Si}$	$S_{Fe,Fe}$
0	1,0000	1,0000
10	1,0000	1,0000
20	1,0000	1,0000
30	1,0000	1,0000
40	1,0000	0,9953
50	0,9998	0,9723
60	0,9883	0,9046
70	0,9040	0,7382
80	0,6764	0,6117
87,5	0,5029	0,5363

Από τον Πίνακα 6 προκύπτει το γράφημα και οι πολυωνυμικές καμπύλες προσέγγισης της πιθανότητας προσκόλλησης των ατόμων Fe σε επιφάνειες Si και Fe που δίνονται στη συνέχεια.



Σχήμα 38: Πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων Fe ενέργειας 16eV σε Si και Fe συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης.

Για τις πολυωνυμικές καμπύλες προσέγγισης σημειώνεται ότι η πιθανότητα προσκόλλησης θεωρείται σταθερή ίση με 1 έως την γωνία των 40 μοιρών και γωνιακά

εξαρτώμενη για μεγαλύτερες γωνίες. Αν x είναι η γωνία πρόσπτωσης των ατόμων στις επιφάνειες (σε μοίρες), τότε οι εξισώσεις πολυωνυμικής προσέγγισης για τις πιθανότητες προσκόλλησης είναι

$$S_{Fe,Si} = 2 \cdot 10^{-8}x^5 - 7 \cdot 10^{-6}x^4 + 0,0008x^3 - 0,0439x^2 + 1,2357x - 12,697 \quad (3-12)$$

$$S_{Fe,Fe} = -3 \cdot 10^{-8}x^5 + 1 \cdot 10^{-5}x^4 - 0,0013x^3 + 0,0795x^2 + 2,3979x + 29,231 \quad (3-13)$$

3.3 Κατανομή κατευθύνσεων εκπεμπόμενων παρεμποδιστών από τις επιφάνειες των στόχων

Στην παράγραφο 2.3.2 περιγράφεται η διαδικασία ανεύρεσης της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας της ροής των παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης. Πηγή αυτής της ροής είναι η διεργασία φυσικής εγχάραξης με δέσμη ιόντων (Ion Beam Sputtering) στόχων καθαρού Fe με ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV σε γωνία 30 μοιρών ως προς την κάθετο της επιφάνειας των στόχων Fe.

Για τον υπολογισμό της κατανομής των εκπεμπόμενων παρεμποδιστών από την επιφάνεια των στόχων χρησιμοποιήθηκε το SRIM. Στόχοι Fe βομβαρδίστηκαν με ιόντα Ar^+ και συλλέχθηκαν 4440000 εκπεμπόμενα άτομα Fe. Για κάθε ένα από αυτά τα άτομα καταγράφηκαν τα συνημίτονα των κατευθύνσεών τους στους 3 άξονες και η ενέργεια τους σε μονάδες eV. Σχετικά με την κατεύθυνση των εκπεμπόμενων ατόμων Fe σημειώνεται ότι αυτή προσδιορίστηκε ως προς την επιφάνεια του στόχου. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των κατευθύνσεων των εκπεμπόμενων ατόμων Fe (παρεμποδιστών) μέσω της πολικής γωνίας θ και της αζιμουθιακής γωνίας φ (σχήμα 39).

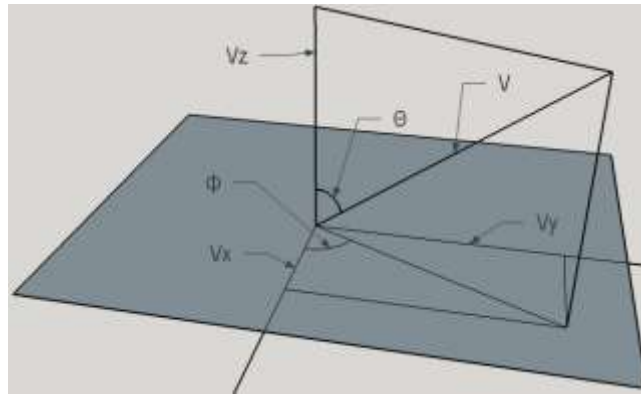
Ο υπολογισμός της πολικής γωνίας θ (σχήμα 39) που σχηματίζει η κάθετη της επιφάνειας του στόχου και το διάνυσμα της ταχύτητας του εκπεμπόμενου ατόμου Fe (v_x, v_y, v_z) δίνεται από την εξίσωση (3-14), σημειώνεται ότι η επιφάνεια του στόχου αναπτύσσεται στο επίπεδο xy .

$$\theta = \text{atan}\left(\frac{\sqrt{v_x^2 + v_y^2}}{v_z}\right) \quad (3-14)$$

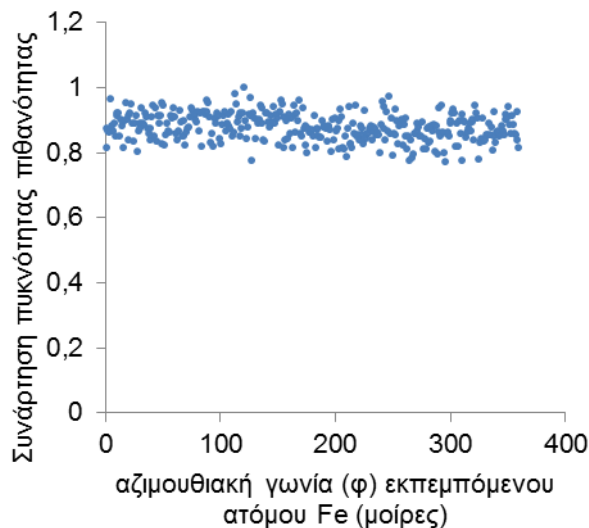
Η αζιμουθιακή γωνία φ (σχήμα 39) που σχηματίζει το επίπεδο της επιφάνειας του στόχου με το διάνυσμα του εκπεμπόμενου ατόμου Fe δίνεται αντίστοιχα από την εξίσωση (3-15).

$$\varphi = \text{asin}\left(\frac{v_y}{\sqrt{v_x^2 + v_y^2}}\right) \quad (3-15)$$

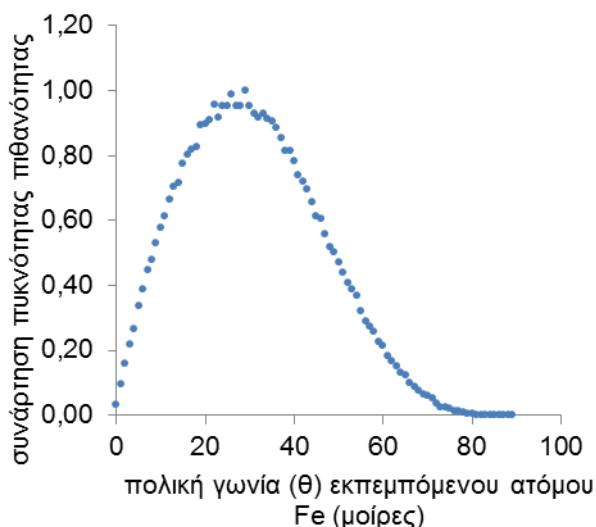
Οι συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας των γωνιών φ και θ φαίνονται στα Σχήματα 40 και 41.



Σχήμα 39: Κυλινδρικές συντεταγμένες διανύσματος ταχύτητας εξερχόμενου σωματιδίου από την επιφάνεια του στόχου. Ως γωνία θ ορίζεται η πολική γωνία που σχηματίζει η κάθετη της επιφάνειας του στόχου και το διάνυσμα της ταχύτητας. Αντίστοιχα, ως γωνία ϕ ορίζεται η αζιμουθιακή γωνία που σχηματίζει η προβολή του διανύσματος της ταχύτητας του εξερχόμενου ατόμου στην επιφάνεια του στόχου με τον άξονα x' της επιφάνειας. Ο άξονας x' προσανατολίζεται τυχαία επί της επιφάνειας.



Σχήμα 40: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της αζιμουθιακής γωνίας ϕ (Σχήμα 39) εκπεμπόμενου ατόμου Fe από στόχους Fe μέσω ιονβολής των στόχου με ιόντα Ar^+ (ενέργειας 1000 eV) υπό γωνία 30° . Το γράφημα παράγεται από κανονικοποιημένη κατανομή 200000 γωνιών που προκύπτουν αντίστοιχα από τις πρώτες 200000 κατευθύνσεις ατόμων Fe. Η κατανομή αναπτύχθηκε σε κλάσεις της 1 μοίρας και οι 200000 γωνίες προέρχονται από προσομοίωση ιονβολής με την χρήση του SRIM.



Σχήμα 41: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της πολικής γωνίας θ (Σχήμα 39) εκπεμπόμενου ατόμου Fe από στόχους Fe μέσω ιονβολής των στόχου με ιόντα Ar^+ (ενέργειας 1000 eV) υπό γωνία 30° . Το γράφημα παράγεται από κανονικοποιημένη κατανομή 200000 γωνιών που προκύπτουν αντίστοιχα από τις πρώτες 200000 κατευθύνσεις ατόμων Fe. Η κατανομή αναπτύχθηκε σε κλάσεις της 1 μοίρας και οι 200000 γωνίες προέρχονται από προσομοίωση ιονβολής με την χρήση του SRIM.

Από το Σχήμα 40 φαίνεται ότι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της γωνίας φ είναι ομοιόμορφη και ισοπίθανη για κάθε γωνία. Αυτό είναι αναμενόμενο διότι η αζιμουθιακή γωνία πρόσπτωσης των ιόντων είναι μηδενική και έτσι δεν υπάρχει κάποια «προτίμηση» εκπομπής σε συγκεκριμένη αζιμουθιακή κατεύθυνση. Από το Σχήμα 41 φαίνεται ότι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της γωνίας θ εμφανίζει μέγιστο στις 30 μοίρες περίπου. Προσεγγίζοντας πολυωνυμικά τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της γωνίας θ προκύπτει η ακόλουθη εξίσωση

$$P(\theta) = 0.3595\theta^6 - 4.4516\theta^5 + 13.636\theta^4 - 14.362\theta^3 + 1.957\theta^2 + 3.1732\theta - 0.0076 \quad (3-16)$$

όπου θ είναι η πολική γωνία (Σχήμα 39). Σημειώνεται ότι η γωνία θ αποδίδεται σε ακτίνια στην εξίσωση (3-16) .

3.4 Κατανομή κατευθύνσεων παρεμποδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης

3.4.1 Αριθμητικός υπολογισμός

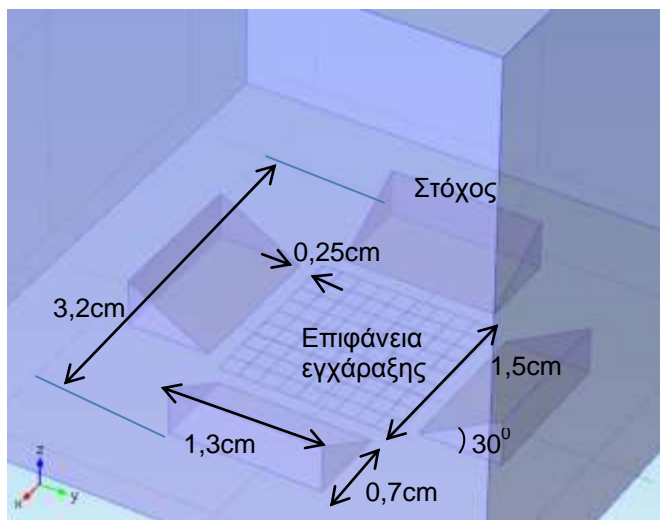
Η πρώτη προσέγγιση υπολογισμού της κατανομής κατευθύνσεων των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης (επιφάνεια Si) περιλαμβάνει τη χρήση των COMSOL και Matlab. Αρχικά κατασκευάζεται στο COMSOL η γεωμετρία της πειραματικής διάταξης των Zhang et al. [15] (Σχήμα 42). Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της διάταξης όπως τα περιγράφουν οι Zhang et al. σημειώνονται παρακάτω:

- Μήκος στόχου = 1,3 cm
- Εμβαδό επιφάνειας εγχάραξης = $1,5 \times 1,5 \text{ cm}^2$
- Μήκος ολικής διάταξης = 3,2 cm

- Κλίση των στόχων = 30°

Επιπλέον, από το Σχήμα 13 της πειραματικής διάταξης των Zhang et al. [15] προκύπτουν τα παρακάτω

- πλάτος πηγής = 0,7cm
- Απόσταση εγγύτερης πλευράς στόχου από επιφάνεια εγχάραξης = 0,08 έως 0,25 cm. Στο (Σχήμα 42) σημειώνεται η απόσταση 0,25 cm μεταξύ δυτικού στόχου και επιφάνειας.



Σχήμα 42: Γεωμετρία πειραματικής διάταξης των Zhang et al. [15] όπως κατασκευάστηκε με το COMSOL. Διακρίνονται η συνολική περιοχή προσομοίωσης, οι τέσσερις στόχοι τοποθετημένοι στις τέσσερις πλευρές ενός τετραγώνου και η επιφάνεια εγχάραξης. Σημειώνεται ότι η επιφάνεια εγχάραξης έχει τμηθεί σε πλέγμα 13×13 τετραγώνων.

Σημειώνεται ότι η επιφάνεια εγχάραξης χωρίζεται σε ένα πλέγμα 13×13 τετραγώνων για μεγαλύτερη ευελιξία στη χρήση των αποτελεσμάτων. Η κατάτμηση της επιφάνειας εγχάραξης σε 13×13 τετράγωνα δίνει την δυνατότητα στη συνέχεια να επιλεγθούν ορισμένα τετράγωνα για την κατασκευή της κατανομής κατευθύνσεων. Ειδικότερα, για την κατασκευή της κατανομής κατευθύνσεων μπορεί να χρησιμοποιηθεί όλη η επιφάνεια, εναλλακτικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί η κεντρική περιοχή από 3×3 ή 5×5 τετράγωνα. Επίσης, μπορεί να αναζητηθεί η κατανομή κατευθύνσεων σε μια περιοχή εκτός της κεντρικής. Αν και τα πειράματα των Zhang et al. διαθέτουν αποτελέσματα σε περιοχές εκτός του κέντρου της επιφάνειας εγχάραξης στην παρούσα μελέτη γίνεται διερεύνηση μόνο στην κεντρική περιοχή της επιφάνειας εγχάραξης.

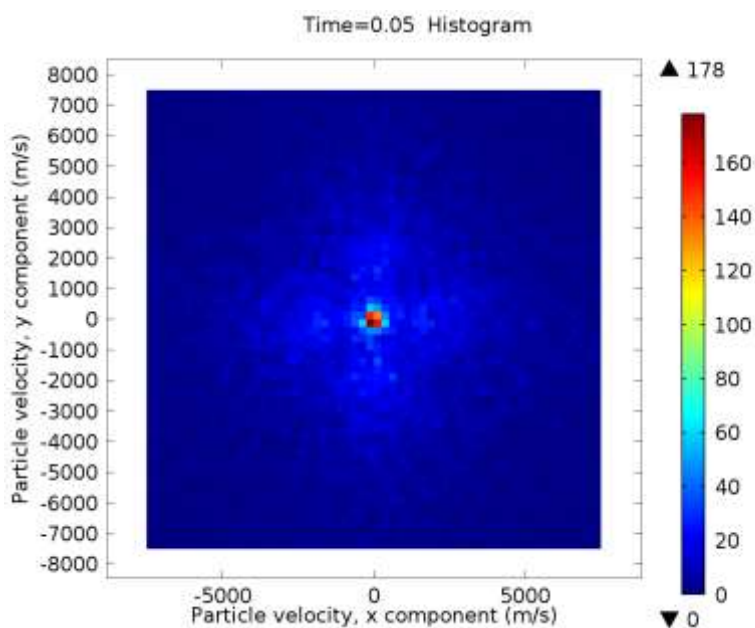
Μεταβλητές εισόδου του προβλήματος είναι οι συνιστώσες της ταχύτητας (v_x , v_y , v_z) των εκπεμπομένων από τους στόχους ατόμων Fe όπως αυτά υπολογίστηκαν με το SRIM (βλέπε § 2.3.2.1) και στράφηκαν κατάλληλα για την ορθή ενσωμάτωση τους στην διάταξη του Σχήματος 42 που φτιάχτηκε στο COMSOL. Αυτές οι συνιστώσες της ταχύτητας για κάθε άτομο Fe αποτελούν την αρχική συνθήκη για την τροχιά του. Η τροχιά κάθε ατόμου Fe υπολογίζεται με το μοντέλο “charged particle tracing” του COMSOL (βλέπε § 2.3.2.2).

Οι συνθήκες υπολογισμού της τροχιάς των εισερχόμενων σωματιδίων έχουν ως εξής:

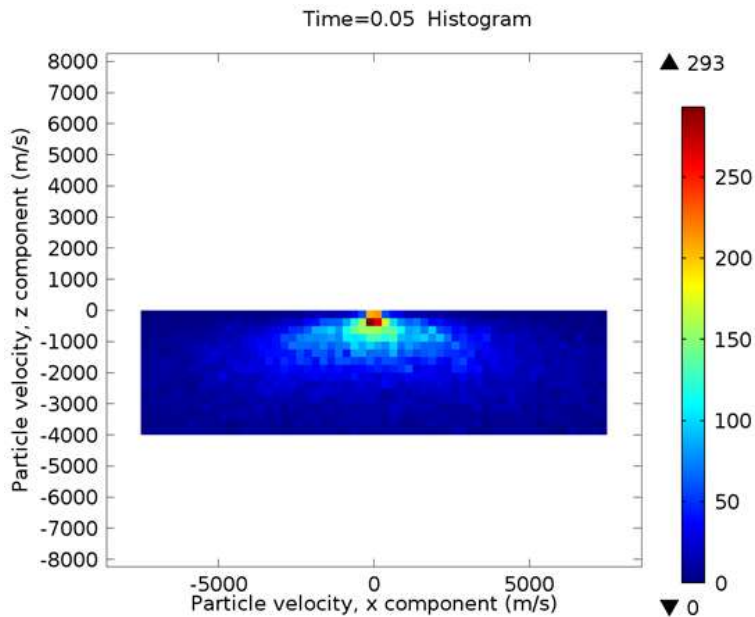
- Πλήθος εκπεμπόμενων σωματιδίων (ατόμων Fe) = **4440000 (1110000** από κάθε στόχο)
- Μάζα εκπεμπόμενων σωματιδίων = $9,2135 \times 10^{-26}$ kg (μάζα ατόμου Fe)
- Ενεργός διατομή σύγκρουσης ατόμων Fe με άτομα (μόρια) του αερίου (Ar) στη διάταξη $1,21922 \times 10^{-19}$ m²
- Πυκνότητα αερίου Ar = $3,21256 \times 10^{20}$ m⁻³
- Θερμοκρασία αερίου Ar = 27° C (300K)
- Μοριακή μάζα Ar = 0,039 kg/mol

Από τα 4440000 σωματίδια Fe που εκπέμπονται από τους στόχους αυτά που φτάνουν τελικά στην επιφάνεια εγχάραξης είναι μόνο 30634. Από τα 30634 άτομα Fe καταγράφονται οι συνιστώσες της ταχύτητας. Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας αυτών των συνιστωσών κατασκευάζεται με τη χρήση του Matlab.

Τα 30634 σωματίδια κατανέμονται σε δύο ιστογράμματα ταχύτητας v_x , v_y και v_x , v_z με την βοήθεια του COMSOL. Στο Σχήμα 43 δίνεται το ιστόγραμμα των ταχυτήτων v_x , v_y για όλες τις ταχύτητες v_z όπως το αποδίδει το COMSOL ενώ στο Σχήμα 44 δίνεται αντίστοιχα το ιστόγραμμα των ταχυτήτων v_x , v_z για όλες τις ταχύτητες v_y



Σχήμα 43: Ιστόγραμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των ταχυτήτων των σωματιδίων Fe που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης του COMSOL. Το ιστόγραμμα διαχωρίζεται σε μία ενιαία κλάση v_z εύρους ταχυτήτων από -4000 m/s έως 0 m/s και 60×60 κλάσεις v_x , v_y εύρους από -7500 m/s έως 7500 m/s με μέγεθος πλευράς τετραγώνου της κλάσης τα 250 m/s.

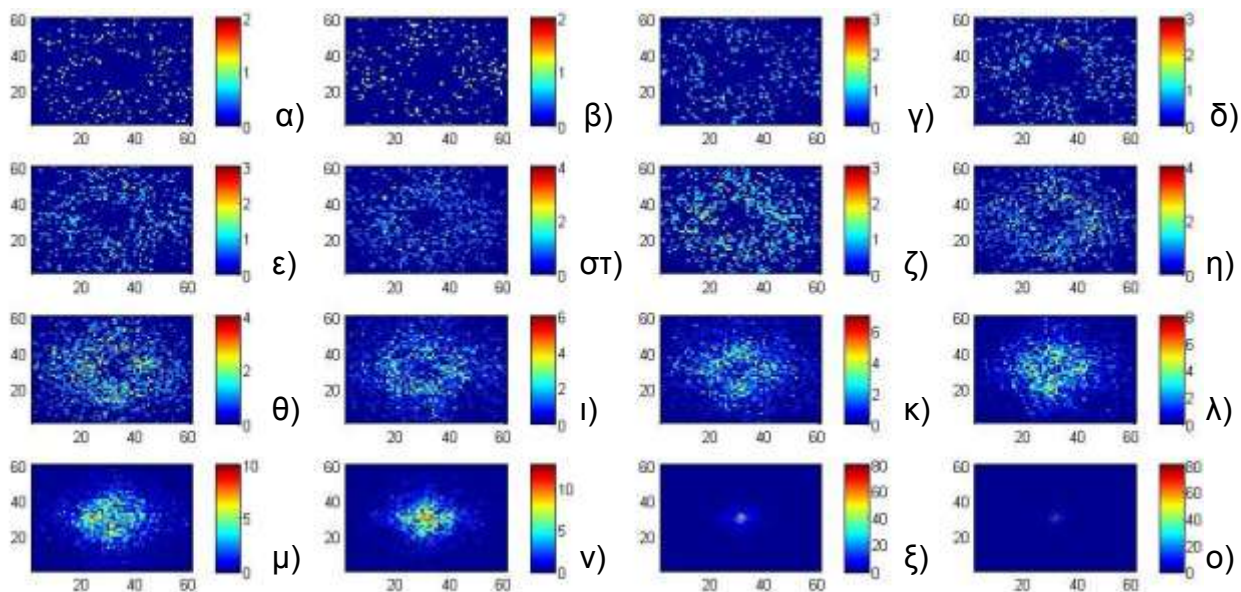


Σχήμα 44: Ιστογράμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των ταχυτήτων των σωματιδίων Fe που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης του COMSOL. Το ιστογράμμα διαχωρίζεται σε μία ενιαία κλάση v_y εύρους ταχυτήτων από -7500 m/s έως 7500 m/s και 60×16 κλάσεις v_x, v_z εύρους από -7500 m/s έως 7500 m/s για την συνιστώσα των v_x και -4000 m/s έως 0 m/s για την συνιστώσα των v_z με μέγεθος πλευράς τετραγώνου της κλάσης τα 250 m/s.

Τα δύο παραπάνω ιστογράμματα λειτουργούν ως οδηγοί για τον καθορισμό των παραμέτρων του τριών διαστάσεων ιστογράμματος που κατασκευάζεται με την βοήθεια του Matlab. Ειδικότερα, ορίζεται στο Matlab ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο κλάσεων ταχυτήτων με άκρα στις v_x και v_y από -7500 έως 7500 m/s και στη v_z από -4000 έως 0 m/s. Το παραλληλεπίπεδο αυτό συντίθεται από στοιχειώδης κύβους (κλάσεις) ακμής 250 m/s. Το πλήθος των κύβων (κλάσεων) στο ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο είναι $n_x n_y n_z$ όπου

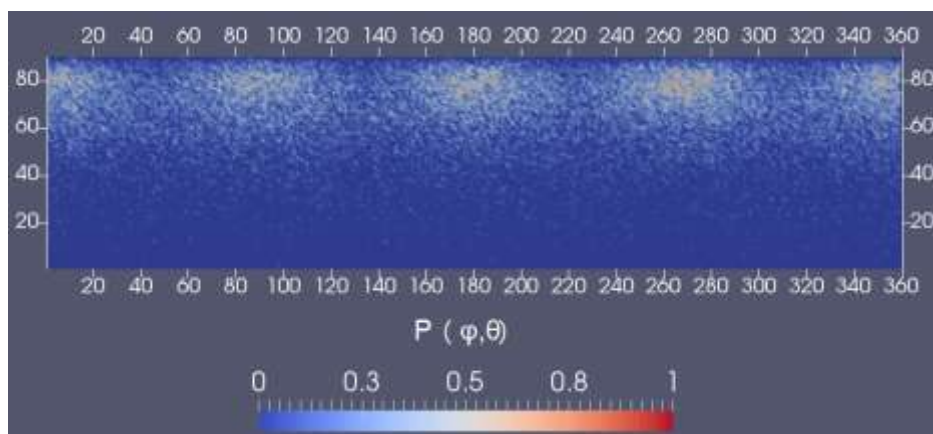
$$n_x = \frac{7500+7500}{250} = 60, \quad n_y = \frac{7500+7500}{250} = 60 \text{ και } n_z = \frac{0+4000}{250} = 16 \quad (3-17)$$

Στο Σχήμα 45 δίνεται για κάθε v_z κλάση η απεικόνιση του ιστογράμματος των v_x, v_y κλάσεων που αποθηκεύεται στον 3D πίνακα ιστογράμματος.



Σχήμα 45: Ιστογράμματα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των συνιστωσών ταχύτητων v_x, v_y, v_z των σωματιδίων Fe που έφτασαν στην επιφάνεια εγχάραξης του COMSOL. Τα ιστογράμματα της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας κατασκευάστηκαν με την χρήση του κώδικα MatLab [58] και δομούνται από $60 \times 60 \times 16$ κλάσεις v_x, v_y, v_z με ακμή κύβου κλάσης τα 250 m/s και εύρος ταχύτητων τα -7500 m/s έως 7500 m/s για τις συνιστώσες v_x, v_y και -4000 m/s έως 0 m/s για τη συνιστώσα v_z

Σε πολικές συντεταγμένες φ, θ όπως σημειώνονται στο Σχήμα 39 οι ταχύτητες που καταγράφονται από το COMSOL συνθέτουν την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\varphi, \theta)$ που δίνεται στο Σχήμα 46.

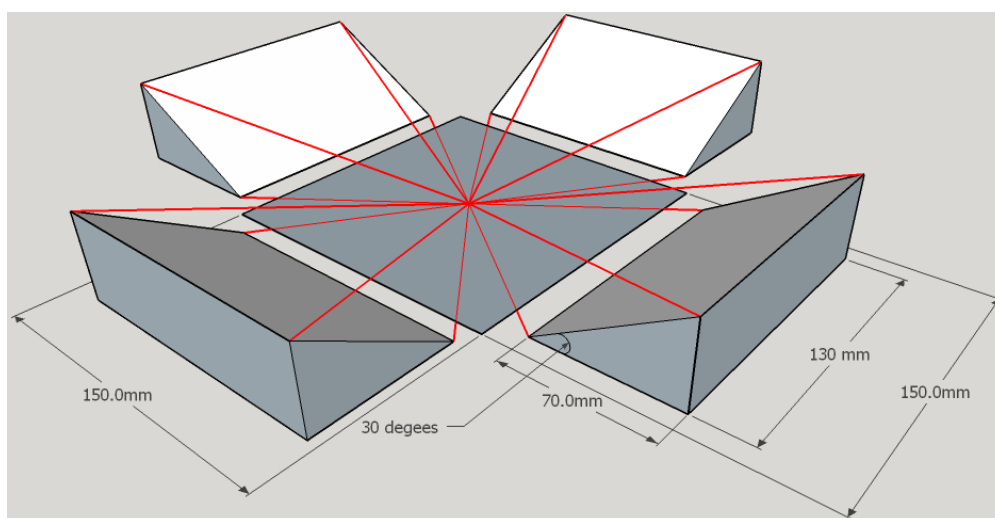


Σχήμα 46: Κανονικοποιημένη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των κατευθύνσεων των σωματιδίων που καταγράφει το COMSOL ότι φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης. Το αποτέλεσμα πηγάζει από 30634 άτομα Fe.

3.4.2 Αναλυτικός υπολογισμός

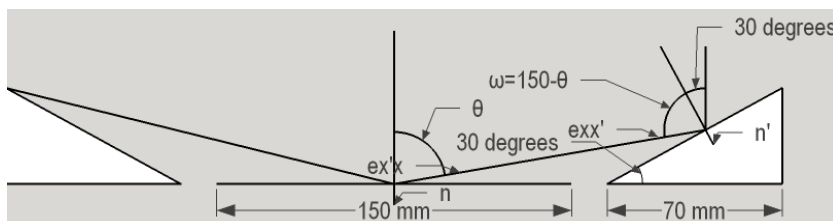
Η αναζήτηση της κατανομής των κατευθύνσεων των ατόμων Fe (παρεμποδιστών) στην επιφάνεια εγχάραξης δύναται να προσδιοριστεί με αναλυτικές μεθόδους αν θεωρήσουμε ότι η διαδρομή από τον στόχο έως την επιφάνεια εγχάραξης είναι πολύ μικρότερη της ελεύθερης διαδρομής των σωματιδίων του στόχου μέσα στο θάλαμο εγχάραξης. Στην περίπτωση που εξετάζει η παρούσα μελέτη (θερμοκρασία θαλάμου

27⁰ C και πίεση $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ Pa βλέπε § 2.1) το μήκος ελεύθερης διαδρομής υπολογίζεται σε αρκετά δεκάδες μέτρα (~ 90 m). Συνεπώς, εκτιμάται ότι τα εκπεμπόμενα άτομα Fe ξεκινούν από τους στόχους και φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης εκτελώντας ευθύγραμμη ομαλή κίνηση. Οι παράγοντες που καθορίζουν την κατανομή κατευθύνσεων των παρεμπόδιστών στην επιφάνεια εγχάραξης είναι η γεωμετρική χωροθέτηση των στόχων, η κλίση τους και η επιφάνειά τους. Στο Σχήμα 47 απεικονίζεται η συνολική διάταξη. Με κόκκινες γραμμές συμβολίζονται τα όρια της δέσμης των σωματιδίων του δυτικού και βόρειου στόχου που φτάνουν στο κέντρο της επιφάνειας εγχάραξης.



Σχήμα 47: Αναπαραγωγή της γεωμετρίας της πειραματικής διάταξης των Zhang et al. ώστε να χρησιμοποιηθεί στον αναλυτικό υπολογισμό της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας $P(\varphi, \theta)$ των κατευθύνσεων των ατόμων παρεμπόδισης.

Η διατομή της παραπάνω διάταξης (Σχήμα 47) σε επίπεδο (xz) που κόβει στη μέση δύο αντικριστούς στόχους δίνεται στο Σχήμα 48. Στο σχήμα αυτό φαίνεται η σχέση μεταξύ της γωνίας εξόδου των ατόμων Fe από την επιφάνεια των στόχων και της γωνίας εισόδου αυτών στην επιφάνεια εγχάραξης (συσχέτιση μεταξύ των γωνιών $\omega - \theta$)



Σχήμα 48: Διατομή πειραματικής διάταξης σε επίπεδο (xz) που κόβει στη μέση δύο αντικριστούς στόχους. Στο σχήμα φαίνονται δύο απέναντι στόχοι καθώς και οι σχηματιζόμενες γωνίες και τα διανύσματα κατεύθυνσης από το στόχο προς το κέντρο της επιφάνειας εγχάραξης.

Για τον υπολογισμό της ροής των σωματιδίων από τις επιφάνειες των στόχων προς το κέντρο της επιφάνειας εγχάραξης γίνεται χρήση των εξισώσεων (2-9) έως (2-16) του κεφαλαίου 2. Η εξίσωση της ροής των σωματιδίων 2-9 επαναλαμβάνεται στην εξίσωση (3-18) (βλέπε § 2.3.2.3).

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \text{vis}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \frac{(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{n}})(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \cdot \hat{\mathbf{n}}')}{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2} \mathbf{j}(\mathbf{x}') \quad (3-18)$$

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\mathbf{x}\mathbf{x}')$ που σημειώνεται στην εξίσωση (2-9) και (3-18) υπολογίζεται στο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων και ειδικότερα στις γωνίες φ, θ που σημειώνονται στο Σχήμα 47 και Σχήμα 48 αντίστοιχα. Οι κατευθύνσεις επομένως των ταχυτήτων v_x, v_y, v_z των εκπεμπόμενων ατόμων παρεμπόδισης από τους στόχους εκφράζονται στο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων (r, φ, θ)

Η γωνία θ συνδέεται με τους άξονες x, y, z από την παρακάτω εξίσωση

$$\theta = \text{acos}(-\hat{\mathbf{e}}_z \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}}) \quad (3-19)$$

Ενώ η γωνία φ προσεγγίζεται από την εξίσωση

$$\varphi = \text{acos}\left(\hat{\mathbf{e}}_x \cdot \frac{\overline{x' + x'}(-\hat{\mathbf{e}}_z)}{|\overline{x' + x'}(-\hat{\mathbf{e}}_z)|}\right) \quad (3-20)$$

και εκφρασμένη στους άξονες x, y, z προσδιορίζεται για κάθε στόχο χωριστά ως εξής.

- Για τον **Ανατολικό στόχο** :

$$\varphi = \text{asin}\left(\frac{y' - y}{\sqrt{(x' - x)^2 + (y' - y)^2}}\right) \quad (3-21)$$

- Για τον **Βόρειο στόχο**:

$$\varphi = \text{acos}\left(\frac{x' - x}{\sqrt{(x' - x)^2 + (y' - y)^2}}\right) \quad (3-22)$$

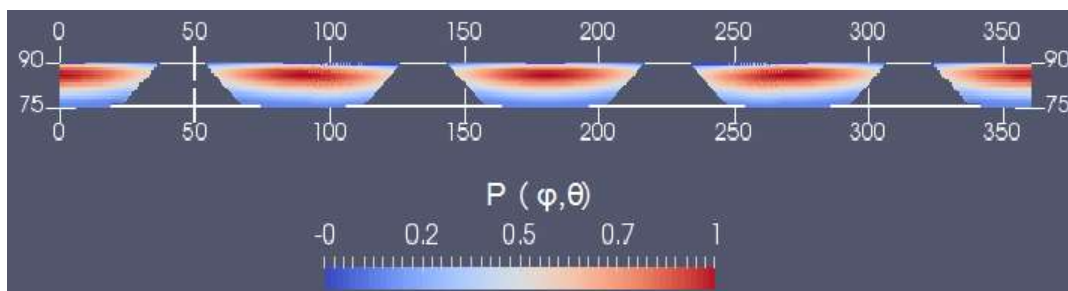
- Για τον **Δυτικό στόχο**:

$$\varphi = 180^\circ + \text{asin}\left(\frac{y' - y}{\sqrt{(x' - x)^2 + (y' - y)^2}}\right) \quad (3-23)$$

- Και για τον **Νότιο στόχο**:

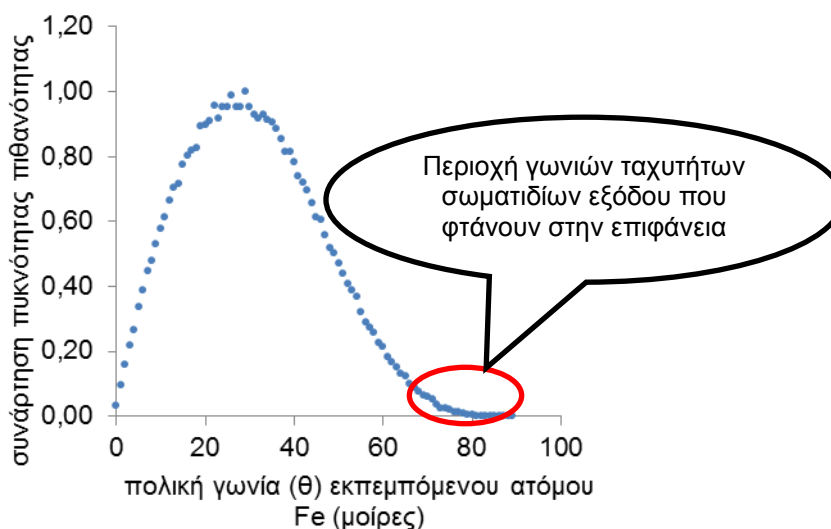
$$\varphi = 180^\circ + \text{acos}\left(\frac{x' - x}{\sqrt{(x' - x)^2 + (y' - y)^2}}\right) \quad (3-24)$$

Στο Σχήμα 49 παρουσιάζεται η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\varphi, \theta)$ όπως υπολογίζεται για το κέντρο της επιφάνειας εγχάραξης της πειραματικής διάταξης των Zhang et al.



Σχήμα 49: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\varphi, \theta)$ ταχυτήτων ατόμων παρεμπόδισης (Fe) που φτάνουν στο κέντρο της επιφάνειας εγχάραξης από τους τέσσερις στόχους της πειραματικής διάταξης των Zhang et al. Ο υπολογισμός έγινε χρησιμοποιώντας την αναλυτική μέθοδο στην οποία θεωρείται ότι οι παρεμπόδιστες ταξιδεύουν σε ευθείες τροχιές από τους στόχους προς το κέντρο της επιφάνειας εγχάραξης.

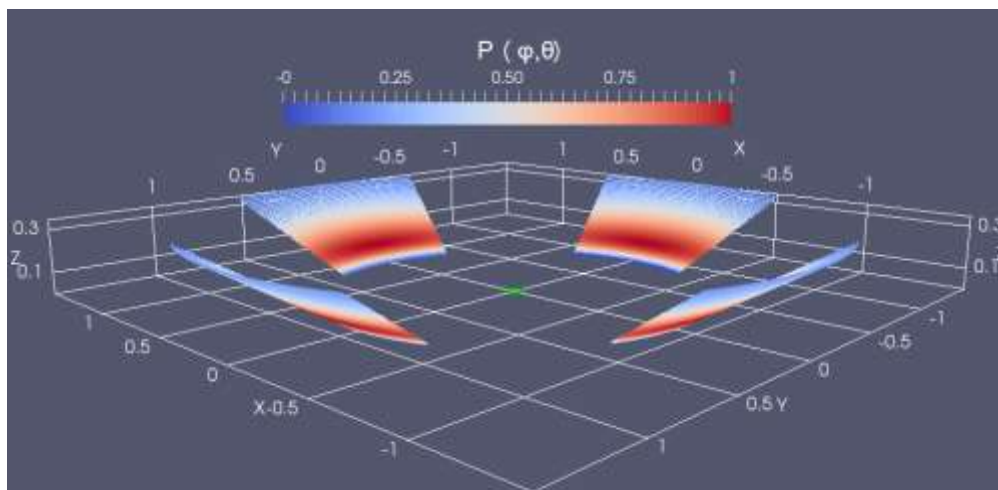
Το Σχήμα 49 καταδεικνύει ότι υπάρχουν 4 ζώνες της γωνίας φ στις οποίες η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\varphi, \theta)$ μηδενίζεται ανεξάρτητα της πολικής γωνίας θ . Σημειώνεται ότι οι πιθανότερες κατευθύνσεις όπως προκύπτει είναι αυτές που προέρχονται από θέσεις κοντά στα κέντρα των στόχων. Το γεγονός αυτό οφείλεται στο εύρος της γωνίας θ (Σχήμα 41) που βλέπει η επιφάνεια εγχάραξης τους στόχους σε συνδυασμό με την απόσταση κάθε σημείου των στόχων από το κέντρο της επιφάνειας εγχάραξης. Συγκεκριμένα το εύρος της γωνίας θ κυμαίνεται από τις 90 μοίρες έως τις ~75 μοίρες. Το εύρος της γωνίας αυτής εκφρασμένο στον προσανατολισμό των επιφανειών του στόχου αντιστοιχεί στις γωνίες 60 έως ~85 μοίρες. Στο Σχήμα 50 σημειώνεται η περιοχή της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των κατευθύνσεων των ατόμων (Fe) που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης. Είναι εμφανές ότι το εύρος των 60 έως 85 μοίρες βρίσκεται αρκετά μετά το μέγιστο των 30 μοιρών.



Σχήμα 50: Περιοχή της πολικής γωνίας θ των ατόμων παρεμπόδισης που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης από τους στόχους βάσει της αναλυτικής μεθόδου προσδιορισμού της κατανομής των κατευθύνσεών τους. Σημειώνεται ότι η περιοχή αυτή βρίσκεται μακριά από το

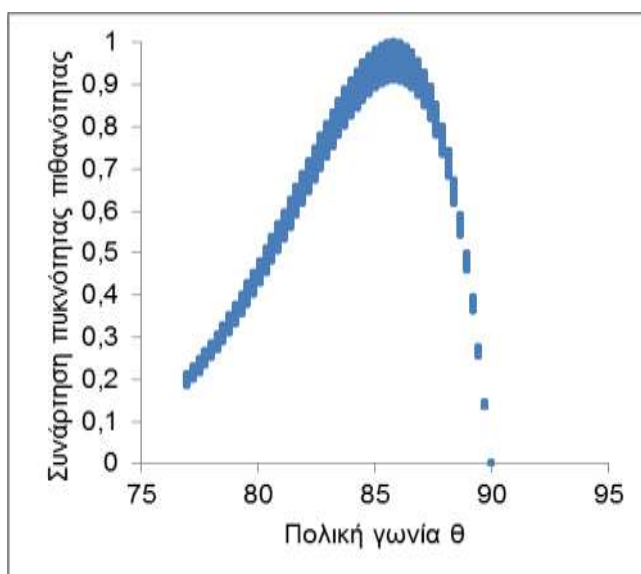
μέγιστο των 30 μοιρών κατά συνέπεια πιθανότερες τιμές είναι αυτές των 60 μοιρών που αντιστοιχούν στις 90 μοίρες της επιφάνειας εγχάραξης.

Στο Σχήμα 51 παρουσιάζεται η συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των κατευθύνσεων των ατόμων παρεμπόδισης που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων. Σε αυτή την απεικόνιση γίνεται αντιληπτό πως οι τέσσερις στόχοι έχουν πιθανότερες θέσεις εκπομπής τα σημεία που βρίσκονται πιο χαμηλά και πιο κοντά στην επιφάνεια εγχάραξης.



Σχήμα 51: Κανονικοποιημένη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ταχυτήτων εισόδου στην επιφάνεια εγχάραξης ατόμων παρεμπόδισης από τις επιφάνειες των τεσσάρων στόχων. Η χρωματική διαβάθμιση εκφράζει την πιθανότητα κάθε κατεύθυνσης.

Στο Σχήμα 52 δίνεται η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ως προς την γωνία θ . Βάσει της πολυωνμικής προσέγγισης αυτής, λειτουργεί η μεθοδολογία αποδοχής απόρριψης που σημειώνεται στην § 2.5.2



Σχήμα 52: Κανονικοποιημένη πυκνότητα πιθανότητας ταχυτήτων εισόδου στην επιφάνεια εγχάραξης ατόμων παρεμπόδισης από τις επιφάνειες των στόχων ως προς την γωνία θ για

ανεξάρτητη γωνία φ . Η γωνία φ κυμαίνεται μεταξύ 0 και 360 μοίρες και η $P(\varphi, \theta)$ είναι ανεξάρτητη του φ εκτός από εκείνες τις τιμές της φ στις οποίες δεν υπάρχει στόχος (βλ. γεωμετρία διάταξης Σχήμα 47).

Οι κενές ζώνες που εμφανίζονται στο γράφημα του Σχήματος 49 αντιστοιχούν στις περιοχές όπου δεν υπάρχει επιφάνεια στόχου. Σε αυτές τις περιοχές η κατανομή πυκνότητας πιθανότητας παίρνει την τιμή 0. Οι περιοχές αυτές ορίζονται ως ακολούθως:

- Περιοχή μηδενικής τιμής πυκνότητας πιθανότητας **μεταξύ ανατολικού και βόρειου στόχου.**

$$1,015\theta - 0,968 < \varphi < -1,015\theta + 2,539 \quad (3-25)$$

- Περιοχή μηδενικής τιμής πυκνότητας πιθανότητας **μεταξύ βόρειου και δυτικού στόχου**

$$1,015\theta + 0,602 < \varphi < -1,015\theta + 4,11 \quad (3-26)$$

- Περιοχή μηδενικής τιμής πυκνότητας πιθανότητας **μεταξύ δυτικού και νότιου στόχου**

$$1,015\theta + 2,173 < \varphi < -1,015\theta + 5,68 \quad (3-27)$$

- Περιοχή μηδενικής τιμής πυκνότητας πιθανότητας **μεταξύ νότιου και ανατολικού στόχου**

$$1,015\theta + 3,744 < \varphi < -1,015\theta + 7,252 \quad (3-28)$$

Η αναλυτική πολυωνυμική προσέγγιση που περιγράφει την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των ταχυτήτων των ατόμων παρεμπόδισης που φτάνουν στην επιφάνεια εγχάραξης για τις υπόλοιπες τιμές της γωνίας φ δίνεται από την παρακάτω εξίσωση (3-29) και προκύπτει από το Σχήμα 52. για γωνία θ με μονάδα μέτρησης σε ακτίνια

$$P(\theta) = 1,53\theta^6 - 5,05\theta^5 - 32,831\theta^4 + 203,233\theta^3 - 407,127\theta^2 + 355,717\theta - 115,653 \quad (3-29)$$

Σημειώνεται ότι οι εξισώσεις (3-25) έως και (3-29) αναφέρονται σε γωνίες με μονάδα μέτρησης τα ακτίνια.

3.4.3 Υπολογισμός του κλάσματος των παρεμποδιστών της προσπίπτουσας ροής σωματιδίων στην επιφάνεια εγχάραξης

Οι Zhang et al. [15] δεν έχουν μετρήσει τις ροές των παρεμποδιστών στην επιφάνεια. Οι ροές εκτιμήθηκαν με δύο προσεγγίσεις: Η πρώτη βασίστηκε στη μέτρηση της επιφανειακής πυκνότητας παρεμποδιστών των Zhang et al. Η δεύτερη βασίστηκε στο συνδυασμό της ροής των ιόντων (οι Zhang et al. μέτρησαν τη δόση των ιόντων που σχετίζεται με τη ροή), της απόδοσης εγχάραξης του στόχου των παρεμποδιστών από τα ιόντα, η οποία υπολογίστηκε με τον κώδικα SRIM (βλέπε § 3.2.1), και της κατανομής των παρεμποδιστών στην εγχαρασσομένη επιφάνεια, η οποία υπολογίστηκε με τον κώδικα COMSOL (βλέπε § 3.4.1) ή αναλυτικά με γεωμετρικό μοντέλο (βλέπε § 3.4.2).

Το κλάσμα των παρεμποδιστών, x_d , υπολογίζεται από την παρακάτω εξίσωση

$$x_d = \frac{j_d}{j_+ + j_d} \quad (3-30)$$

όπου j_+ και j_d είναι οι ροές των ιόντων και των παρεμποδιστών. Η εξίσωση (3-30) μπορεί να γραφεί και ως

$$x_d = \frac{\frac{j_d}{t_{total}}}{\frac{j_+}{t_{total}} + \frac{j_d}{t_{total}}} = \frac{\Phi_d}{\Phi_+ + \Phi_d} \quad (3-31)$$

όπου Φ_+ και Φ_d είναι η δόση (fluency) ιόντων και παρεμποδιστών ή $\Phi_+ = j_+ t_{total}$ και $\Phi_d = j_d t_{total}$, όπου t_{total} είναι ο συνολικός χρόνος της έκθεσης της επιφάνειας στις ροές. Στα πειράματα, η δόση των ιόντων είναι $\Phi_+ = 2.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ και η επιφανειακή πυκνότητα των παρεμποδιστών μετρήθηκε μετά το τέλος του πειράματος (μετά από χρόνο t_{total}) $C_d = 1.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ έως $2.7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. Αν υποθέσουμε ότι η πιθανότητα προσκόλλησης των παρεμποδιστών στο υπόστρωμα είναι 1, και ότι αυτοί δημιουργούν ένα μόνο στρώμα στην επιφάνεια τότε $\Phi_d = C_d$. Θεωρώντας τρεις τιμές για το C_d στο εύρος των πειραματικών μετρήσεων, προκύπτουν οι τιμές για το x_d περιγράφονται στον Πίνακα 7.

Πίνακας 7: Κλάσματα παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή όπως προκύπτουν από την εξίσωση (3-31) και τις πειραματικές μετρήσεις δόσης ιόντων (Φ_+) και επιφανειακής πυκνότητας παρεμποδιστών (C_d) των Zhang et al. [15] .

Φ_+ (ions/cm ²)	C_d (cm ⁻²)	x_d
2,5E+18	1.3E+15	0.00052
2,5E+18	1.8E+15	0.00072
2,5E+18	2.7E+15	0.00108

Στη δεύτερη προσέγγιση, το κλάσμα των παρεμποδιστών υπολογίζεται από την εξίσωση (3-30), όμως η δόση των παρεμποδιστών υπολογίζεται με την βοήθεια της εξίσωσης 3-32.

$$\Phi_d = \Phi_+ EY_d \left(\frac{\Phi_d}{\Phi_{d, \text{reem-target}}} \right)_{\text{sim}} \quad (3-32)$$

όπου EY_d είναι η απόδοση εγχάραξης των παρεμποδιστών από το στόχο (Σχήμα 13), η οποία υπολογίζεται με τον κώδικα SRIM (βλέπε § 3.2). Το κλάσμα της εξίσωσης (3-32) είναι ο λόγος της δόσης των παρεμποδιστών στην επιφάνεια μελέτης προς την εκπεμπόμενη από το στόχο δόση. Απλούστερα, είναι το κλάσμα της ροής των παρεμποδιστών που εκπέμπονται από το στόχο (λόγω της ιονβολής) το οποίο φτάνει στην επιφάνεια μελέτης (Σχήμα 13). Αυτό το κλάσμα μπορεί να προκύψει από τον υπολογισμό των τροχιών των παρεμποδιστών που εκπέμπονται από το στόχο. Σε αυτή την περίπτωση θα πρέπει να είναι γνωστή η πιθανότητα επανεκπομπής τους, η οποία υπολογίζεται από τον κώδικα SRIM (βλέπε § 3.3). Οι τροχιές υπολογίζονται με τον κώδικα COMSOL (βλέπε § 3.4.1) και το κλάσμα καθορίζεται από αυτές τις τροχιές που φτάνουν στην επιφάνεια μελέτης. Το κλάσμα της εξίσωσης (3-32) είναι ίσο με

$$\left(\frac{\Phi_d}{\Phi_{d, \text{reem-target}}} \right)_{\text{sim}} = \left(\frac{N_d / A}{N_{d, \text{reem-target}} / A_{\text{target}}} \right)_{\text{sim}} = \frac{A_{\text{target}}}{A} \left(\frac{N_d}{N_{d, \text{reem-target}}} \right)_{\text{sim}} \quad (3-33)$$

όπου $N_d/N_{d, \text{reem-target}}$ είναι το κλάσμα των σωματιδίων παρεμποδιστών που εκπέμπονται από το στόχο και φτάνουν στην επιφάνεια μελέτης. Υπολογίζεται από τον κώδικα COMSOL ίσο με $30634/4440000 = 0.0069$.

A_{target} ($4,2 \text{ cm}^2$) είναι το εμβαδό των επιφανειών των στόχων (Σχήμα 42) και A ($2,25 \text{ cm}^2$) είναι το εμβαδό της επιφάνειας μελέτης.

Το EY_d που υπολογίζεται από τον κώδικα SRIM για ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV που φτάνουν σε στόχο Fe (παρεμποδιστές) υπό γωνία 30° είναι ίσο με 2.8 atoms/ion (βλέπε § 3.2.1). Αντικαθιστώντας τις τιμές όλων των μεταβλητών στην εξίσωση (3-33) προκύπτει ότι $\Phi_d = 0.036061\Phi_+$ και άρα από την εξίσωση (3-30) το κλάσμα των παρεμποδιστών είναι $x_d = 0.034806$. Σημειώνεται ότι, η τιμή αυτή είναι μεγαλύτερη κατά μία τάξη μεγέθους από την μεγαλύτερη τιμή του Πίνακα 7.

3.5 Μέθοδος Διαστασιολόγησης

Το άρθρωμα του πλαισίου προσομοίωσης που υπολογίζει την εξέλιξη της μορφολογίας (βλέπε § 2.5) χρησιμοποιεί ένα ανεξάρτητο από το φυσικό περιβάλλον σύστημα περιγραφής του χώρου εξέλιξης. Το σύστημα αυτό περιγράφεται από δύο χωρικές οντότητες, τα υπερσωματίδια και τα υπερκελιά. Ένα υπερσωματίδιο (superparticle) αποτελείται από πλήθος σωματιδίων (ατόμων ή μορίων) το οποίο καθορίζει και το μέγεθός του. Τα υπερσωματίδια ταξιδεύουν στην αέρια φάση, προσκρούουν στην εγχαρασόμενη επιφάνεια και αλληλεπιδρούν με αυτή.

Ένα υπερκελί (supercell) περιέχει πλήθος σωματιδίων (άτομα, μόρια) το οποίο καθορίζει το μέγεθός του. Η διαφορά του από το υπερσωματίδιο είναι ότι αναφέρεται σε άτομα ή μόρια του στερεού σώματος, της εγχαρασόμενης επιφάνειας. Το σύνολο των υπερκελιών ουσιαστικά συνθέτει το εγχαρασόμενο υπόστρωμα που αλληλεπιδρά με τα προσπίπτοντα σε αυτό υπερσωματίδια.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι εξισώσεις οι οποίες συνδέουν τα υπερκελιά και υπερσωματίδια με την απόδοση εγχάραξης, και το χρόνο εγχάραξης (ή τη δόση) και τις διαστάσεις της επιφάνειας.

Θεωρείται ότι τα υπερσωματίδια όπως και τα υπερκελιά περιέχουν έναν αριθμό σωματιδίων ίδιου τύπου ο οποίος καθορίζει και τη διάστασή τους. Συγκεκριμένα, τα υπερκελιά των παρεμποδιστών (άτομα Fe) θεωρείται ότι έχουν όγκο κύβου ο οποίος δίνεται από την εξίσωση (3-34)

$$\alpha^3 = q_{Fe}(2r_{Fe})^3 \quad (3-34)$$

Όπου q_{Fe} είναι ο αριθμός των ατόμων Fe εντός του υπερκελιού και r_{Fe} η φυσική ακτίνα των ατόμων Fe. Τα άτομα Fe προσεγγίζονται ως σκληρές σφαίρες «συσκευασμένες» εντός του κύβου του υπερκελιού. Η ακτίνα r_{Fe} μπορεί να είναι η θεωρητική τιμή της ακτίνας van der Waals του ατόμου. **Το μέγεθος α αποτελεί την ακμή του κύβου του υπερκελιού και αντιστοιχεί στην μονάδα με την οποία θα πρέπει να πολλαπλασιαστεί το πλέγμα της τοπολογίας της επιφάνειας για να προκύψει η φυσική διάσταση αυτής.**

Δύο υπερκελιά διαφορετικού είδους (π.χ. Si και Fe) με το ίδιο α δεν περιέχουν των ίδιο αριθμό σωματιδίων (ατόμων ή μορίων) καθώς κάθε είδος σωματιδίου διαθέτει διαφορετική ακτίνα. Έτσι, ο αριθμός ατόμων του Si που περιέχονται σε ένα υπερκελί Si μπορεί να προσδιοριστεί από τον λόγο των ακτινών σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση (3-35).

$$\left(\frac{r_{Fe}}{r_{Si}}\right)^3 = \frac{q_{Si}}{q_{Fe}} \quad (3-35)$$

Όπου q_{Si} είναι ο αριθμός των ατόμων Si σε ένα υπερκελί Si και r_{Si} η ακτίνα τους.

Η απόδοση εγχάραξης των ατόμων Fe δίνεται από την εξίσωση (3-36)

$$EY_{Fe} = \widehat{Y}_{Fe} \frac{q_{Fe}}{q_+} \quad (3-36)$$

όπου q_+ ο αριθμός των ιόντων στο υπερσωματίδιο των ιόντων και \widehat{Y}_{Fe} η απόδοση εγχάραξης του υπερκελιού Fe από ένα υπερσωματίδιο ιόντων, δηλαδή ο λόγος των υπερκελιών Fe που αφαιρέθηκαν με την πρόσπτωση ενός υπερσωματιδίου ιόντων.

Το κλάσμα των ατόμων Fe στην ροή σωματιδίων που φτάνει στην επιφάνεια δίνεται από την ακόλουθη εξίσωση

$$x_{Fe} = \frac{\Gamma_{Fe}}{\Gamma_{Fe} + \Gamma_+} = \frac{q_{Fe}}{q_d + \frac{1-x_{Fe}}{x_{Fe}} q_+} \quad (3-37)$$

όπου Γ_{Fe} και Γ_+ η ροή υπερσωματιδίων Fe και ιόντων που φτάνει στην επιφάνεια και \widehat{x}_{Fe} το κλάσμα των υπερσωματιδίων Fe στη συνολική ροή υπερσωματιδίων που φτάνουν στην επιφάνεια.

Ένας περιορισμός του αρθρώματος του πλαισίου προσομοίωσης που υπολογίζει την εξέλιξη της μορφολογίας είναι ότι ένα υπερσωματίδιο δεν μπορεί να αφαιρέσει περισσότερα από ένα υπερκελιά, επομένως η παρακάτω εξίσωση είναι αληθής

$$\max(\widehat{Y}_{Si}, \widehat{Y}_{Fe}) = 1 \quad (3-38)$$

όπου \widehat{Y}_{Si} είναι η απόδοση εγχάραξης του υπερκελίου Si από ένα υπερσωματίδιο ιόντων.

Λαμβάνοντας υπόψη τον περιορισμό της (3-38) και τις εξισώσεις (3-34) έως (3-37) εξάγεται ότι η απόδοσης εγχάραξης μεταξύ δύο διαφορετικού τύπου υπερσωματιδίων εξαρτάται από το λόγο των ακτίνων των σωματιδίων. Ειδικότερα

$$\widehat{Y}_{Fe} = \left(\frac{r_{Fe}}{r_{Si}}\right)^3 \frac{Y_{Fe}}{Y_{Si}} \quad (3-39)$$

Επίσης,

$$\widehat{x}_{Fe} = \frac{1}{Y_s \left(\frac{r_{Si}}{r_{Fe}}\right)^3 \frac{1-x_{Fe}}{x_{Fe}} + 1} \quad (3-40)$$

Επομένως, αν είναι γνωστά ο λόγος των ακτινών, οι αποδόσεις εγχάραξης και το κλάσμα των ατόμων Fe στην προσπίπτουσα ροή, μπορούν να προσδιοριστούν οι διαστάσεις των υπερσωματιδίων και υπερκελιών.

Ο χρόνος εγχάραξης προσδιορίζεται τελικά από τον συνολικό αριθμό των υπερσωματιδίων που φτάνουν στην επιφάνεια σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση.

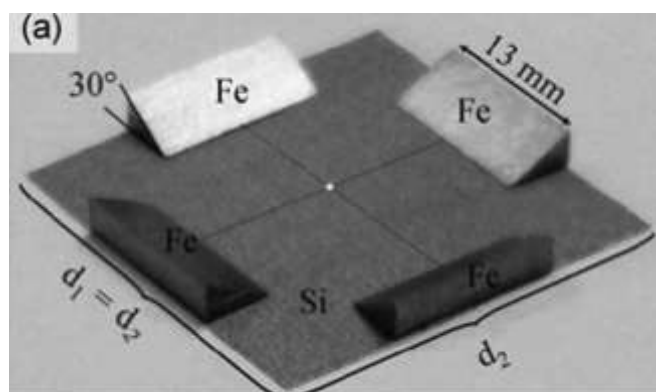
$$t = \frac{(1-\widehat{x}_{Fe})q_+}{N^2 a^2 \Gamma_+} \widehat{Q} \quad (3-41)$$

Όπου N^2 το εμβαδό της επιφάνειας που εγχάρασσεται, Γ_+ η ροή υπερσωματιδίων Ar^+ και \widehat{Q} το πλήθος των υπερσωματιδίων που φτάνουν στην επιφάνεια. Σημειώνεται ότι η δόση των ιόντων που λαμβάνει η επιφάνεια είναι το γινόμενο $\Gamma_+ t$.

4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ

4.1 Εισαγωγή

Το υπόστρωμα της διάταξης ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης της μελέτης των Zhang et al. [15] φαίνεται στο Σχήμα 53. Το προς εγχάραξη δείγμα Si βρίσκεται στο κέντρο του υποστρώματος, μεταξύ 4 στόχων Fe και βομβαρδίζεται από ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV. Οι αποστάσεις των στόχων από το δείγμα, $d_1/2$ και $d_2/2$ (16 μέχρι 17 mm), καθορίζουν την ανάπτυξη τελειών (dots) ή κυμάτων (ripples) στην επιφάνεια του εγχαρασόμενου δείγματος. **Επιχειρείται να προβλεφθούν και να εξηγηθούν οι μηχανισμοί που οδηγούν στις μορφολογίες που αναπτύσσονται στις επιφάνειες Si στα πειράματα των Zhang et al. [15].** Ο στόχος υλοποιείται μέσω προσομοιώσεων με υπολογιστικό πλαίσιο στο οποίο γίνεται σύζευξη του μοντέλου εξέλιξης μορφολογίας που περιγράφεται στο Κεφάλαιο 2 και του μοντέλου επιφανειακών διεργασιών που περιγράφεται στο Κεφάλαιο 3. Οι προσομοιώσεις εκτελέστηκαν στη συστοιχία ηλεκτρονικών υπολογιστών Nessie του Ινστιτούτου Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.

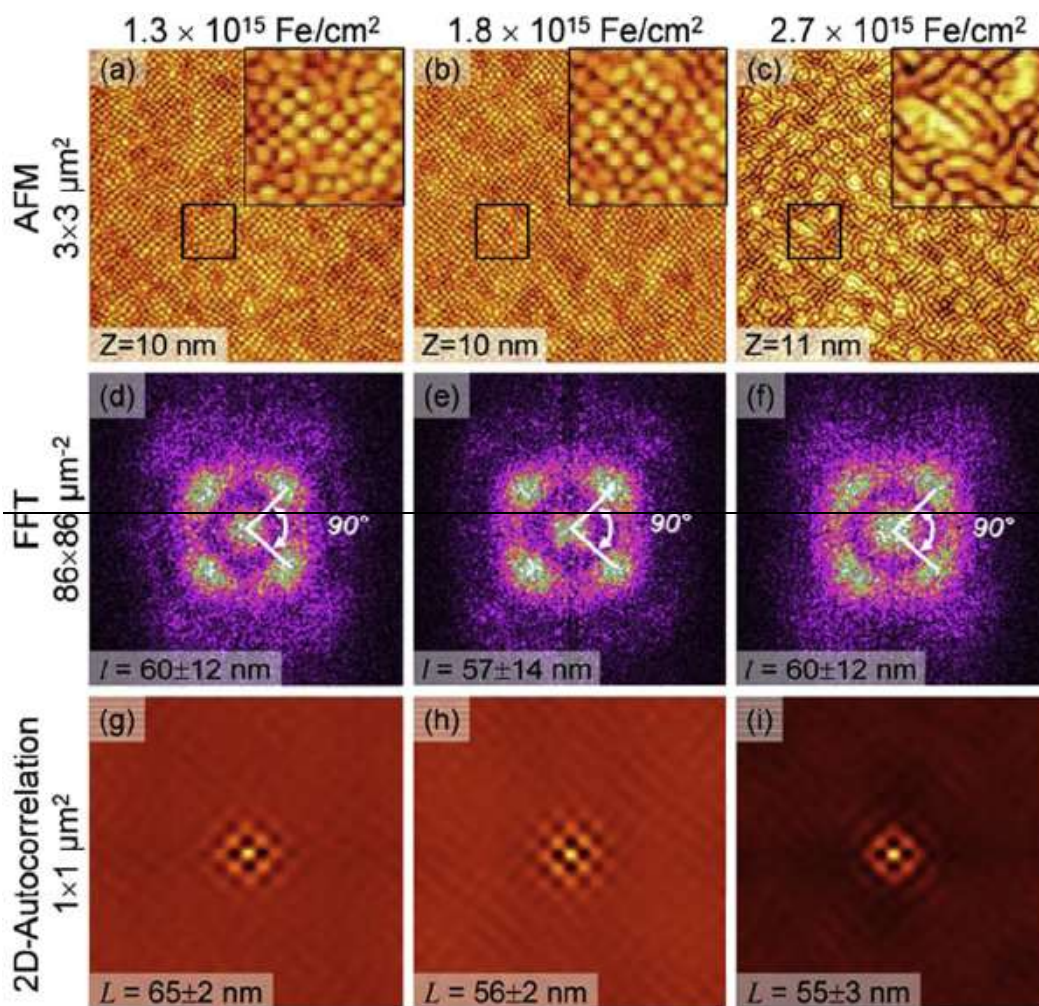


Σχήμα 53: Υπόστρωμα διάταξης ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης. Φύλλα Fe πλάτους 13 mm τοποθετούνται αντιδιαμετρικά σε αποστάσεις d_1 και d_2 σε κεκλιμένη γωνία 30° ως προς την κάθετο της επιφάνειας του δείγματος [15]. Το δείγμα βρίσκεται στο κέντρο του υποστρώματος στο οποίο συμβαίνει συμμετρική απόθεση ατόμων Fe (παρεμπλοδιστών).

Η μορφολογία των επιφανειών στη μελέτη των Zhang et al. [15] χαρακτηρίζεται μέσω μετρήσεων με μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (Atomic Force Microscope, AFM) σε λειτουργία επαφής και λογισμικό επεξεργασίας δεδομένων μικροσκοπίου Nanosurf Easyscan [64]). Οι ακίδες Si της NanoAndMore που χρησιμοποιήθηκαν στο AFM έχουν μέση ακτίνα ακροδέκτη 7 nm. Στη συνέχεια, η στατιστική ανάλυση της μορφολογίας (συνάρτηση αυτοσυσχέτισης και μετασχηματισμός Φουριέ) γίνεται με το λογισμικό ανοιχτού κώδικα Gwyddion [54].

Στα Σχήματα 4-2 (a) – (c) φαίνονται εικόνες AFM τριών επιφανειών Si μετά από συνολική δόση ιόντων Ar^+ ίση με $2,5e+18$ ions/cm². Αναφέρεται [15] ότι βρίσκονται σε μόνιμη κατάσταση όσον αφορά τη συγκέντρωση Fe στην επιφάνεια. Οι διαστάσεις των επιφανειών που παρουσιάζονται είναι $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ και στις ένθετες εικόνες προβάλλεται μεγέθυνση διάστασης $500 \times 500 \text{ nm}^2$. Το χρωματικό εύρος των εικόνων των επιφανειών είναι 10 nm. Πάνω από κάθε επιφάνεια σημειώνεται η συγκέντρωση Fe που μετρήθηκε με τη μέθοδο φασματοσκοπίας οπισθοσκέδασης Rutherford (Rutherford Backscattering Spectrometry, RBS). Η RBS εφαρμόστηκε στο ιοντικό αντιδραστήρα 500 keV του Gottingen [65] με ιόντα ηλίου (He^{2+}) ενέργειας 900 keV και δέσμης διαμέτρου 1 mm.

Στα Σχήματα 54 (d) – (f) δίνονται οι μετασχηματισμοί Fourier των επιφανειών των Σχημάτων 54 (a) – (c) και σημειώνεται η μέση απόσταση μεταξύ των τελειών που παρατηρούνται στις επιφάνειες. Η απόσταση αυτή προσδιορίζεται από τις κορυφές του μετασχηματισμού Fourier και είναι ~ 60 nm. Η απεικόνιση του μετασχηματισμού Fourier αποκαλύπτει την περιοδικότητα των παραπάνω επιφανειών. Στα Σχήματα 54 (g) – (i) φαίνονται οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης (autocorrelation function, ACF) των επιφανειών των Σχημάτων 4-2 (a) – (c) μέσω των οποίων το μέσο πλάτος των τελειών υπολογίζεται ~ 55 nm.



Σχήμα 54 [15]: (a) – (c) Εικόνες AFM επιφανειών Si διάστασης $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ μετά από έκθεση σε δέσμη ιόντων Ar^+ (1000 eV) συνολικής δόσης $2,5 \times 10^{18}$ ιόντων/cm². Στα πλαίσια εμφανίζονται μεγεθυμένες περιοχές 500×500 nm² των επιφανειών που είναι σημειωμένες με τα τετράγωνα. (d) – (f) Μετασχηματισμός Fourier των εικόνων στα Σχήματα 54 (a) – (c). Σημειώνονται οι μετρούμενες αποστάσεις μεταξύ των τελειών, l . (g) – (i) Δισδιάστατη απεικόνιση της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης των εικόνων στα Σχήματα τα 54 (a) – (c). Σημειώνεται το μέσο πλάτος των τελειών, L .

4.2 Διερεύνηση της επίδρασης παραμέτρων και μηχανισμών στη μορφολογία της επιφάνειας

Στο παρόν κεφάλαιο διερευνάται η επίδραση μηχανισμών και παραμέτρων στη μορφολογία που αναπτύσσεται στις εγχαρασσομένες επιφάνειες της μελέτης των Zhang et al. [15]. Στόχος είναι η αναζήτηση των μηχανισμών και των τιμών των παραμέτρων που οδηγούν στις περιοδικές μορφολογίες που παρατηρούνται στο Σχήμα 54. Για την

εκπλήρωση του στόχου, χρησιμοποιείται υπολογιστικό πλαίσιο στο οποίο γίνεται σύζευξη του μοντέλου εξέλιξης μορφολογίας που περιγράφεται στο Κεφάλαιο 2 και του μοντέλου επιφανειακών διεργασιών που περιγράφεται στο Κεφάλαιο 3. Στον Πίνακα 8 σημειώνονται οι μηχανισμοί και οι παράμετροι που εξετάζονται. Η επίδρασή τους ποσοτικοποιείται μέσω του μέσου ύψος, της RMS τραχύτητας, του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από Fe, του μήκους συσχέτισης ξ , και του διαγράμματος πυκνότητας φάσματος ισχύος (Power Spectral Density, PSD).

Πίνακας 8: Μηχανισμοί και παράμετροι των οποίων η συμβολή εξετάστηκε στην αναζήτηση των συνθηκών που οδηγούν στις περιοδικές μορφολογίες των αποτελεσμάτων των Zhang et al. [15]

4.2.1	Επίδραση της πυκνότητας των στοιχείων Fe και Si στη μορφολογία της εγχαρασσόμενης επιφάνειας
4.2.2	Επίδραση της διάστασης της επιφάνειας στη μορφολογία
4.2.3	Επίδραση της δομικής μονάδας στη μορφολογία της επιφάνειας
4.2.4	Επίδραση της απόδοσης εγχάραξης των παρεμποδιστών στη μορφολογία της επιφάνειας
4.2.5	Επίδραση της πιθανότητας προσκόλλησης των παρεμποδιστών στη μορφολογία της επιφάνειας
4.2.6	Επίδραση του μηχανισμού επαναπόθεσης προϊόντων της εγχάραξης
4.2.7	Επίδραση του μηχανισμού της ανάκλασης των ιόντων
4.2.8	Συνδυαστική επίδραση των μηχανισμών επαναπόθεσης των προϊόντων εγχάραξης και του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων
4.2.9	Επίδραση του κλάσματος των παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή

Σε όλα τα σενάρια προσομοίωσης, συμμετέχουν τρία είδη σωματιδίων: Τα ιόντα (Ar^+), οι παρεμποδιστές εγχάραξης (άτομα Fe) που αποτίθενται στην επιφάνεια, και τα σωματίδια της επιφάνειας (άτομα Si) που εγχαράσσεται. **Το βασικό σενάριο προσομοίωσης προκύπτει συγκεντρώνοντας κάθε διαθέσιμη πληροφορία για τις συνθήκες και την αλληλεπίδραση των σωματιδίων.** Οι τιμές των παραμέτρων και οι μηχανισμοί του βασικού σεναρίου φαίνονται στον Πίνακα 9. Σημειώνεται ότι οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων χαρακτηρισμού της επιφάνειας του βασικού σεναρίου προσομοίωσης προέρχονται από τρεις προσομοιώσεις (τρεις επαναλήψεις).

Πίνακας 9: Τιμές παραμέτρων βασικού σεναρίου προσομοίωσης για την αναζήτηση των μηχανισμών που οδηγούν σε επιφάνειες όμοιες με αυτές των πειραμάτων των Zhang et al. [15]

Κλάσμα σωματιδίων στην προσπίπτουσα ροή	
Ιόντα (Ar^+)	0.934134
Παρεμποδιστές (Fe)	0.065866
Υπόστρωμα (Si)	0
Αέρια φάση (θέση, κατεύθυνση, ενέργεια)	
<u>Ιόντα:</u>	
Κατανομή σημείων γέννησης	Ισοτροπική ^(α)
Κατανομή Κατευθύνσεων	Κανονική κατανομή με τυπική απόκλιση 1°
Κατανομή ενέργειας	1000 eV ^(β) (μονοενεργητική)

<u>Παρεμποδιστές:</u>	
Κατανομή σημείων γέννησης	Ισοτροπική
Κατανομή Κατευθύνσεων	Καθορίζεται από τη σχετική θέση της εγχαρασσόμενης επιφάνειας και των στόχων ^(v)
Κατανομή Ενέργειας	16 eV ^(δ) (μονοενεργητική)
Συντελεστές προσκόλλησης	
Ιόν σε παρεμποδιστή (Ar ⁺ σε Fe)	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (εξίσωση 3-3)
Ιόν σε υπόστρωμα (Ar ⁺ σε Si)	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (εξίσωση 3-5)
Παρεμποδιστής σε παρεμποδιστή (Fe σε Fe)	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (3-12)
Παρεμποδιστής σε υπόστρωμα (Fe σε Si)	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (εξίσωση 3-13)
Υπόστρωμα σε υπόστρωμα (Si σε Si, περίπτωση επαναπόθεσης)	1
Αποδόσεις εγχάραξης (ιονβολής)	
Ιόν σε παρεμποδιστή (Ar ⁺ σε Fe)	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (σχέση 3-2)
Ιόν σε υπόστρωμα (Ar ⁺ σε Si)	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (σχέση 3-4)
Παρεμποδιστής σε παρεμποδιστή (Fe σε Fe)	-1 (απόθεση)
Παρεμποδιστής σε υπόστρωμα (Fe σε Si)	-1 (απόθεση)
Υπόστρωμα σε υπόστρωμα (Si σε Si)	-1 (επαναπόθεση προϊόντων εγχάραξης)
Μηχανισμός επαναπόθεσης	
Ιόντων (Ar ⁺)	Ενεργός
Παρεμποδιστών (Fe)	Ενεργός
Υποστρώματος (Si)	Ενεργός

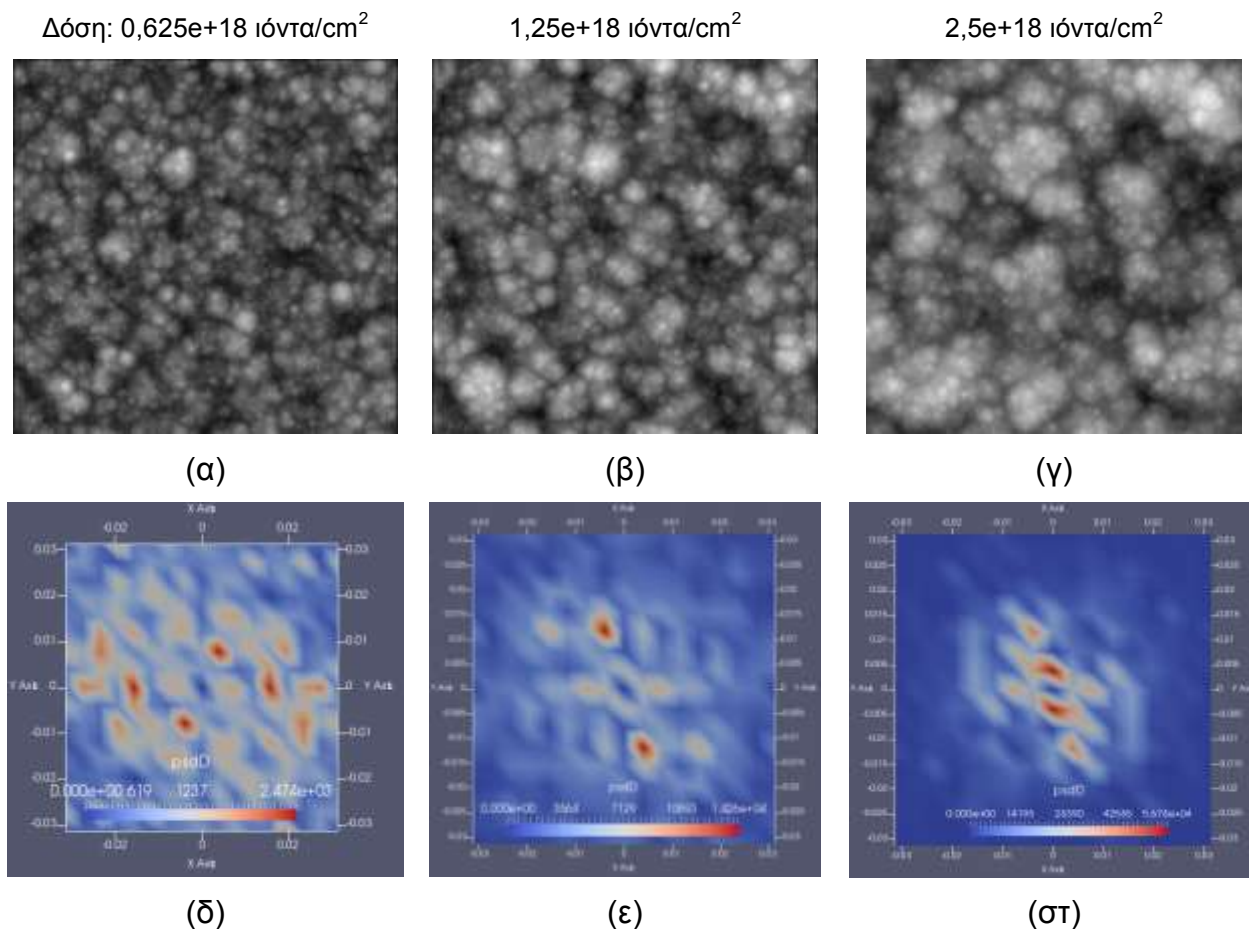
^(α) Όλα τα δυνατά σημεία γέννησης πάνω από την επιφάνεια θεωρούνται ισοπίθανα

^(β) Τιμή από την εργασία των Zhang et al [15].

^(v) Αναλυτικός υπολογισμός βάσει της γεωμετρικής ανάλυσης της διάταξης (βλέπε § 3.4.2)

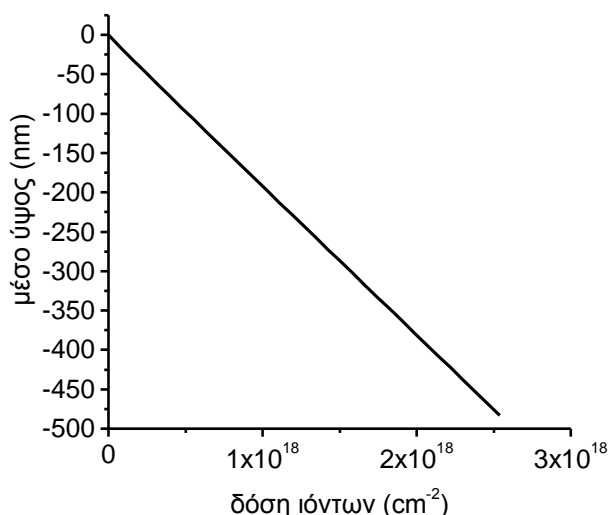
^(δ) Μέση τιμή ενέργειας των ατόμων Fe (βλέπε § 3.4.2)

Η χρονική εξέλιξη της εγχαρασσόμενης επιφάνειας Si όπως προκύπτει από το βασικό σενάριο προσομοίωσης δίνεται στο Σχήμα 55. Ειδικότερα στα Σχήματα 55 (α), (β) και (γ) φαίνεται η επιφάνεια Si για δόση 0,625e+18, 1,25e+18 και 2,5e+18 ιόντα /cm². Παρατηρούμε το σχηματισμό λόφων στην επιφάνεια. Το πάχος των λόφων αυξάνει και το πλήθος τους μικραίνει με τη δόση. Στα Σχήματα 55 (δ), (ε) και (στ) φαίνονται τα διαγράμματα PSD σε δύο διαστάσεις που αντιστοιχούν στις τρεις δόσεις ιόντων. **Δεν υπάρχει ένδειξη για εμφάνιση περιοδικότητας στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια.**



Σχήμα 55: Κατόψεις επιφανειών Si για δόση Ar⁺ ίση με (α) $0,625e+18$ ιόντα/cm², (β) $1,25e+18$ ιόντα/cm² και (γ) $2,5e+18$ ιόντα/cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 όπως προκύπτουν για το βασικό σενάριο προσομοίωσης (Πίνακας 9, σενάριο 9 του Πίνακα 11). (δ-ε) Η πυκνότητα φάσματος ισχύος (μέση τιμή 3 προσομοιώσεων) για τις ανωτέρω δόσεις.

Το τελικό πάχος της επιφάνειας που εγχάρασσεται είναι **$483\text{nm} \pm 16\text{ nm}$** (για δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm²). Επίσης, το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από παρεμποδιστές (άτομα Fe) σε όλη σχεδόν τη διάρκεια της έκθεσης στην ιοντική δέσμη παραμένει σταθερό ίσο με **0,038** (Πίνακας 10). Στο Σχήμα 56 φαίνεται το μέσο ύψος της επιφάνειας σε σχέση με τη δόση ιόντων που δέχεται η επιφάνεια για το βασικό σενάριο (βλέπε Πίνακα 9). **Η γραμμική μεταβολή του μέσου ύψους δείχνει ότι ο ρυθμός εγχάραξης της επιφάνειας είναι σταθερός σε όλη την διάρκεια της έκθεσης.**



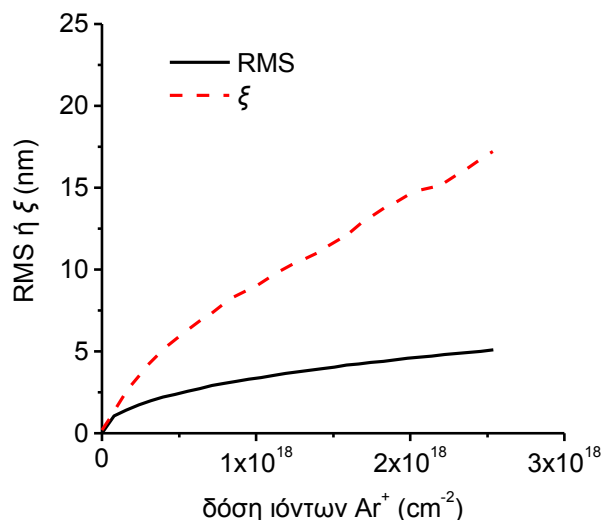
Σχήμα 56: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 όπως προκύπτει για το βασικό σενάριο προσομοίωσης (Πίνακας 9, σενάριο 9 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 10, δίνονται το κλάσμα κάλυψης και οι τιμές της RMS τραχύτητας και του μήκους συσχέτισης (ξ) όπως διαμορφώνονται για συνολική έκθεση της επιφάνειας σε δόση $2,5e+18$ ιόντων Ar^+ / cm^2 .

Πίνακας 10: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si από άτομα Fe για δόση ιόντων Ar^+ ίση με $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53, όπως προκύπτουν για το βασικό σενάριο προσομοίωσης (Πίνακας 9, σενάριο 9 του Πίνακα 11). Οι τιμές είναι οι μέσες τιμές 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
09	5,10	17,25	0,038

Στο Σχήμα 57 φαίνεται η RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης, ξ , συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ . Τόσο η RMS τραχύτητα όσο και το μήκος συσχέτισης μεγαλώνουν με τη δόση και οι αυξήσεις αυτές αποτυπώνουν την αύξηση του ύψους και του πάχους των λόφων στην επιφάνεια.



Σχήμα 57: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης (ξ) της επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53, όπως προκύπτει για το βασικό σενάριο προσομοίωσης (Πίνακας 9, σενάριο 9 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 11 περιλαμβάνονται όλα τα σενάρια προσομοίωσης που υλοποιήθηκαν στην παρούσα εργασία και εξετάζουν την επίδραση των μηχανισμών και παραμέτρων στη μορφολογία της εγχαρασόμενης επιφάνειας.

Πίνακας 11: Μηχανισμοί και τιμές παραμέτρων όλων των σεναρίων προσομοίωσης. Κάθε σενάριο εξετάζει την επίδραση ενός μηχανισμού ή μιας παραμέτρου στην εξέλιξη της μορφολογίας μιας επιφάνειας Si (υπόστρωμα) η οποία εκτίθεται σε δέσμη ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe (παρεμποδιστές) από τέσσερις στόχους τοποθετημένους σύμφωνα με την διάταξη που αποτυπώνεται στο Σχήμα 53.

Σενάριο	Διαστάσεις		Ιόντα (Ar^+ , 1 keV)						Παρεμποδιστές (Fe)				Υπόστρωμα (Si)
	Ακμή δομική κυβικής μονάδας (nm)	Διάσταση επιφάνειας (nm ²)	Κλάσμα στην προσπίπτουσα ροή	Κατανομή κατευθύνσεων	Πιθανότητα προσκόλλησης στο υπόστρωμα	Πιθανότητα προσκόλλησης σε παρεμποδιστή	Απόδοση Εγχάραξης του υποστρώματος	Απόδοση εγχάραξης παρεμποδιστή	Κλάσμα στην προσπίπτουσα ροή	Κατανομή κατευθύνσεων	Πιθανότητα προσκόλλησης στο υπόστρωμα	Πιθανότητα προσκόλλησης σε παρεμποδιστή	
01	4	2048 ²	0,9341	K ^(a)	ΓΕ ^(b)	ΓΕ2 ^(v)	ΓΕ3 ^(o)	ΓΕ4 ^(στ)	0,0659	AY ^(θ)	ΓΕ8 ^(κ)	ΓΕ9 ^(λ)	1
02	4	1024 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
03	2	2048 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
04	2	1024 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
05	1	1024 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
06	1	512 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
07	1	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1

Σενάριο	Διαστάσεις		Ιόντα (Ar ⁺ , 1 keV)						Παρεμποδιστές (Fe)				Υπόστρωμα (Si)
			Κλάσμα στην προσπίπτουσα ροή	Κατανομή κατευθύνσεων	Πιθανότητα προσκόλλησης στο υπόστρωμα	Πιθανότητα προσκόλλησης σε παρεμποδιστή	Απόδοση Εγχάραξης του υποστρώματος	Απόδοση εγχάραξης παρεμποδιστή	Κλάσμα στην προσπίπτουσα ροή	Κατανομή κατευθύνσεων	Πιθανότητα προσκόλλησης στο υπόστρωμα	Πιθανότητα προσκόλλησης σε παρεμποδιστή	
a/a	Ακμή δομική κυβικής μονάδας (nm)	Διάσταση επιφάνειας (nm ²)											
08	0,5	512 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
09	0,5	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
10	0,5	128 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
11	0,5	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ6 ^(ζ)	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
12	0,5	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ7 ^(η)	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
13	0,5	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	0,5	ΓΕ9	1
14	0,5	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	1	ΓΕ9	1
15	0,5	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	0
16	0,5	256 ²	0,9341	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	0,1
17	0,5	256 ²	0,9341	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
18	0,5	256 ²	0,9341	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	0
19	0,5	256 ²	0,9012	K	ΓΕ	ΓΕ2	ΓΕ3	ΓΕ4	0,0988	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
20	0,5	256 ²	0,9341	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ3	0,0659	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
21	0,5	256 ²	0,9177	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ3	0,0823	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
22	0,5	256 ²	0,9012	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ3	0,0988	AY	ΓΕ8	ΓΕ9	1
23	0,5	256 ²	0,9341	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ3	0,0659	AY	1	1	1
24	0,5	256 ²	0,9177	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ3	0,0823	AY	1	1	1
25	0,5	256 ²	0,9012	K	1	1	ΓΕ3	ΓΕ3	0,0988	AY	1	1	1

^(α) K = Κανονική κατανομή

^(β) ΓΕ = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από τη συνάρτηση (3-5).

^(γ) ΓΕ2 = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από τη συνάρτηση (3-3).

^(δ) ΓΕ3 = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από τη συνάρτηση (3-4)

^(στ) ΓΕ4 = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από συνάρτηση (3-2)

^(ζ) ΓΕ6 = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από συνάρτηση (3-2) πολλαπλασιασμένη με 1/2

^(η) ΓΕ7 = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από συνάρτηση (3-2) πολλαπλασιασμένη με ¼

^(θ) AY = Αναλυτικός υπολογισμός της κατανομής παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια από 4 στόχους (βλέπε § 3.4.2).

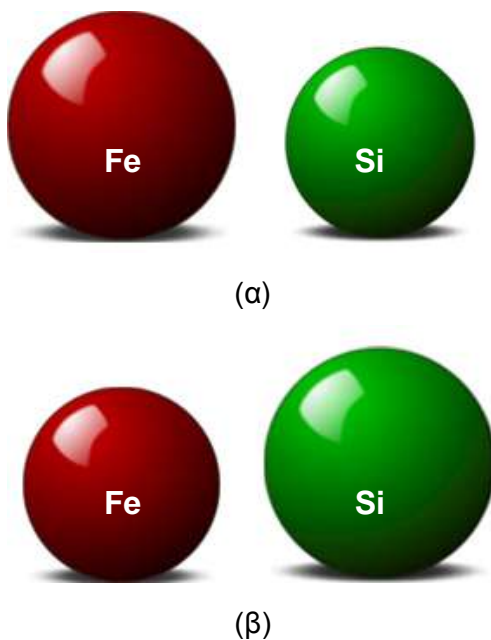
^(κ) ΓΕ8 = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από συνάρτηση (3-12)

^(λ) ΓΕ9 = Γωνιακά εξαρτώμενη τιμή ελεγχόμενη από συνάρτηση (3-13)

4.2.1 Επίδραση της πυκνότητας των στοιχείων Fe και Si στη μορφολογία της εγχαρασσόμενης επιφάνειας

Για τον προσδιορισμό της πυκνότητας των παρεμποδιστών (άτομα Fe) και της πυκνότητας του υποστρώματος (άτομα Si), χρησιμοποιήθηκαν δύο ζευγάρια τιμών της

ακτίνας των ατόμων του κάθε στοιχείου. Το πρώτο ζευγάρι τιμών ακτινών προκύπτει από τις αναθεωρημένες το 2008 κρυσταλλογραφικές μετρήσεις του μήκους του ομοιοπολικού δεσμού των στοιχείων [66]. Βάσει των μετρήσεων αυτών, η ακτίνα του ατόμου του Fe ορίζεται **132 pm** ενώ η ακτίνα του Si **111 pm**. Λαμβάνοντας υπόψη την ατομική πυκνότητα του κάθε στοιχείου ανά κυβικό εκατοστό ($8,482 \times 10^{22}$ άτομα / cm^3 για το Fe και $4,977 \times 10^{22}$ άτομα / cm^3 για το Si [67]) η τιμή της ακτίνας του ατόμου του Fe προκύπτει **114 pm** και η τιμή της ακτίνας του ατόμου του Si **136 pm**. Στο Σχήμα 58 δίνεται μια συγκριτική απεικόνιση του όγκου που καταλαμβάνει κάθε στοιχείο στις δύο αυτές περιπτώσεις.



Σχήμα 58: Συγκριτική απεικόνιση του όγκου που καταλαμβάνει ένα άτομο Fe (κόκκινες σφαίρες) και ένα άτομο Si (πράσινες σφαίρες) λαμβάνοντας υπόψη (α) τις αναθεωρημένες κατά το 2008 κρυσταλλογραφικές μετρήσεις του ομοιοπολικού δεσμού των στοιχείων [66] και (β) την ατομική πυκνότητα αυτών [67].

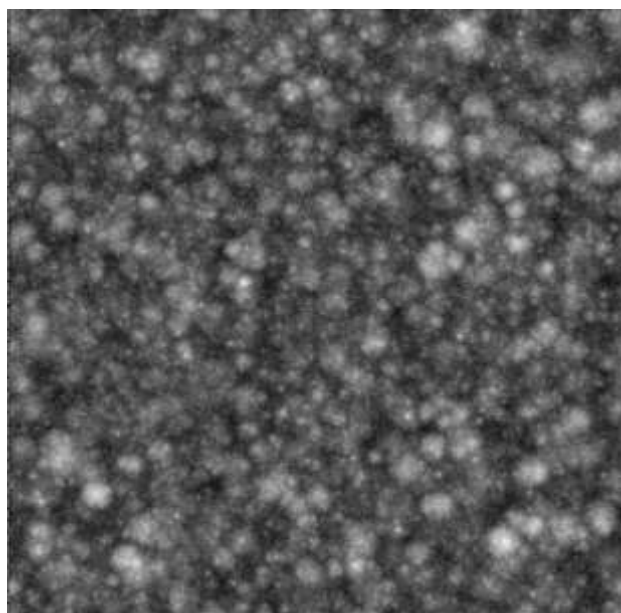
Ο Πίνακας 12 περιλαμβάνει τις τιμές των ακτινών του κάθε ζεύγους των στοιχείων που χρησιμοποιήθηκαν για να εξεταστεί η επίδραση που επιφέρει στην μορφολογία της επιφάνειας η μεταβολή της πυκνότητας των στοιχείων. Σημειώνεται ότι, κατά τον προσδιορισμό της απόδοσης εγχάραξης από ιόντα Ar^+ ενέργειας 1000 eV (βλέπε § 3.2), ο κώδικας SRIM λαμβάνει υπόψη το δεύτερο ζευγάρι τιμών ακτινών του Πίνακα 12 ($\text{Fe} < \text{Si}$).

Πίνακας 12: Βιβλιογραφικές τιμές των ακτινών των στοιχείων Fe και Si βάσει των αναθεωρημένων το 2008 μετρήσεων του μήκους του ομοιοπολικού δεσμού του εκάστοτε στοιχείου ($\text{Fe} > \text{Si}$) [66] και βάσει της ατομικής πυκνότητας αυτών ($\text{Fe} < \text{Si}$) [67].

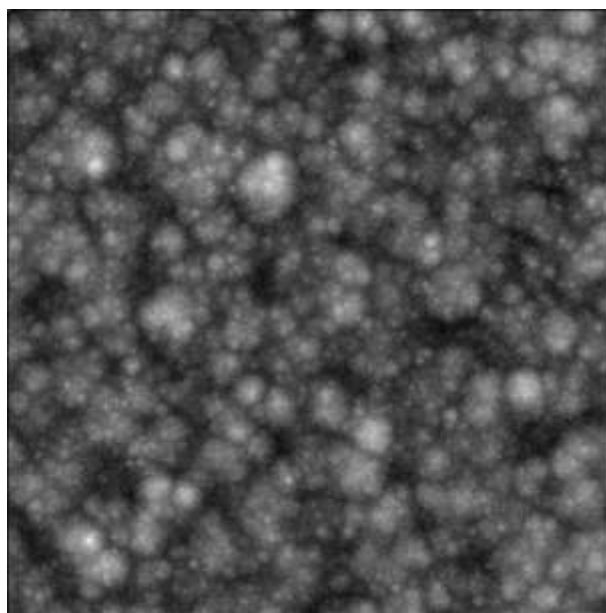
	Ακτίνα Σιδήρου (Fe)	Ακτίνα Πυριτίου (Si)
Fe > Si	132 pm	111 pm
Fe < Si	114 pm	136 pm

Τα δύο ζευγάρια τιμών ακτινών εφαρμόστηκαν σε 3 επιφάνειες με διαφορετικές διαστάσεις και δομικές μονάδες: Η πρώτη επιφάνεια έχει εμβαδό $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ και δομική

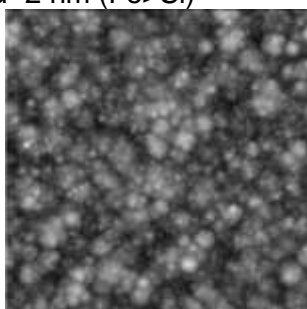
μονάδα κύβο με ακμή $a=2$ nm, η δεύτερη έχει εμβαδό 512×512 nm² και δομική μονάδα κύβο με ακμή $a=1$ nm, και η τρίτη επιφάνεια έχει εμβαδό 256×256 nm² και δομική μονάδα κύβο με ακμή $a=0,5$ nm. Στο Σχήμα 59 φαίνονται κατόψεις των επιφανειών μετά από έκθεση σε δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm². Η έκθεση αυτή αντιστοιχεί στην συνολική έκθεση που σημειώνεται στα πειράματα των Zhang et al. (βλέπε § 4.1).



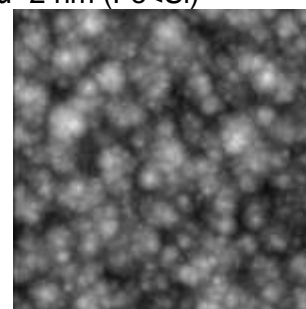
(α) 1×1 μm², $a=2$ nm (Fe>Si)



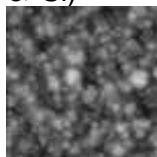
(β) 1×1 μm², $a=2$ nm (Fe<Si)



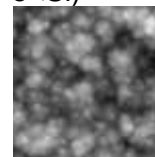
(γ) 512×512 nm², $a=1$ nm (Fe>Si)



(δ) 512×512 nm², $a=1$ nm (Fe<Si)



(ε) 256×256 nm², $a=0,5$ nm (Fe>Si)



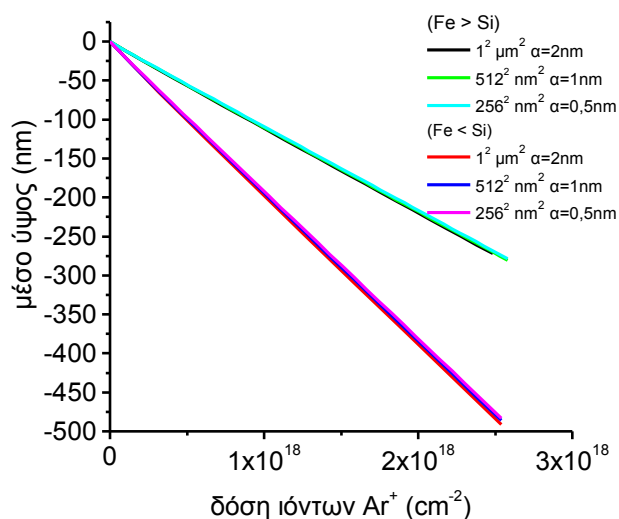
(στ) 256×256 nm², $a=0,5$ nm (Fe<Si)

Σχήμα 59: Κατόψεις επιφάνειας Si για συνολική δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53, όπως προκύπτει για τα δύο ζευγάρια τιμών ακτινών των Si και Fe του Πίνακα 12. Κάτοψη επιφάνειας με διάσταση 1^2 μm² και δομική μονάδα ακμής $a=2$ nm (σενάριο 04 του Πίνακα 11) όταν (α) Fe > Si και (β) Fe < Si. Κάτοψη επιφάνειας με διάσταση 512^2 nm² και δομική μονάδα ακμής $a=1$ nm (06 του Πίνακα 11) όταν (γ) Fe > Si και (δ) Fe < Si (δ). Κάτοψη επιφάνειας με διάσταση 256^2 nm² και δομική μονάδα ακμής $a=0,5$ nm (09 του Πίνακα 11) όταν (ε) Fe > Si και (στ) Fe < Si.

Σε όλες τις περιπτώσεις που φαίνονται στο Σχήμα 59 σχηματίζονται λόφοι στην επιφάνεια. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ότι όταν η διάσταση του παρεμποδιστή (άτομα Fe) είναι μικρότερη από αυτή του Si (Fe < Si), οι τελείες που

σχηματίζονται είναι πλατύτερες [βλέπε π.χ. Σχήματα 59(α) και (β)]. Από τη στατιστική επεξεργασία των επιφανειών που θα σχολιαστεί στη συνέχεια, οι τελείες είναι επίσης υψηλότερες για την περίπτωση $Fe < Si$. Ο λόγος για τη μεγαλύτερη διάσταση των τελειών στην περίπτωση $Fe < Si$ είναι ότι **η μικρότερη διάσταση των παρεμποδιστών επιτρέπει την ταχύτερη εξέλιξη της εκτράχυνσης της επιφάνειας**.

Για τις 3 επιφάνειες ($1 \times 1 \mu\text{m}^2 - \alpha=2 \text{ nm}$, $512 \times 512 \text{ nm}^2 - \alpha=1 \text{ nm}$ και $256 \times 256 \text{ nm}^2 - \alpha=0,5 \text{ nm}$) το πάχος του υποστρώματος που έχει εγχαραχθεί στην περίπτωση $Fe < Si$ είναι $483 \pm 37 \text{ nm}$ ενώ στην περίπτωση $Fe > Si$ είναι $277 \pm 20 \text{ nm}$. Στο Σχήμα 60 φαίνεται η μεταβολή του μέσου ύψους της επιφάνειας Si συναρτήσει της προσπίπτουσας δόσης ιόντων.



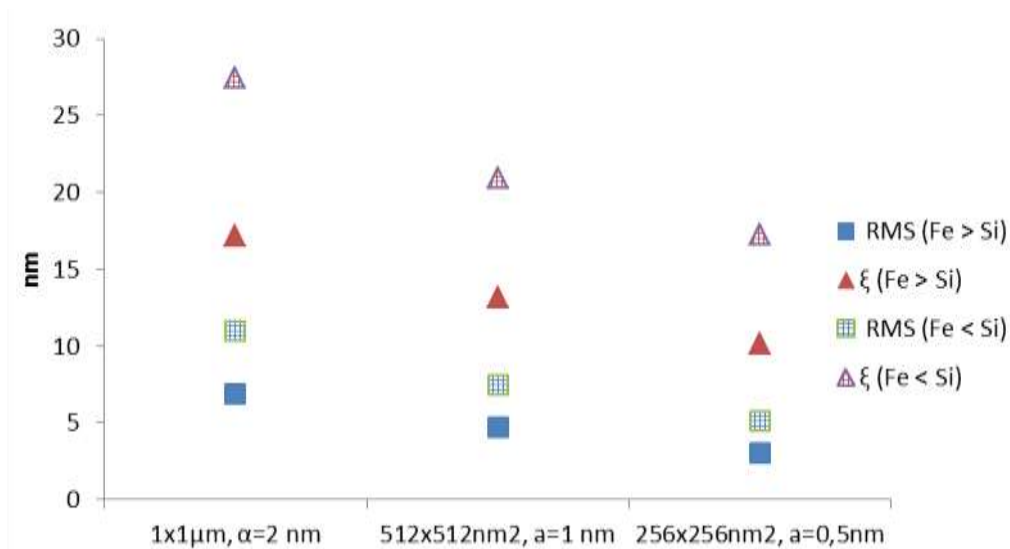
Σχήμα 60: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για τρεις διαστάσεις επιφάνειας ($256 \times 256 \text{ nm}^2$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$) και τρεις δομικές μονάδες αντίστοιχα (ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$, 1 nm και 2 nm) για τις περιπτώσεις $Fe > Si$ και $Fe < Si$ (Πίνακας 12). Τα αποτελέσματα αντιστοιχούν στα σενάρια 09, 06 και 04 του Πίνακα 11. Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 13 φαίνεται ότι τα δύο ζευγάρια τιμών για τις ακτίνες των Fe και Si οδηγούν σε διαφορετικό κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από παρεμποδιστές και σε διαφορετικές τιμές RMS τραχύτητας και μήκους συσχέτισης (ξ). Στην περίπτωση $Fe < Si$ το κλάσμα κάλυψης είναι μικρότερο, ενώ η RMS τραχύτητα και το ξ είναι μεγαλύτερα.

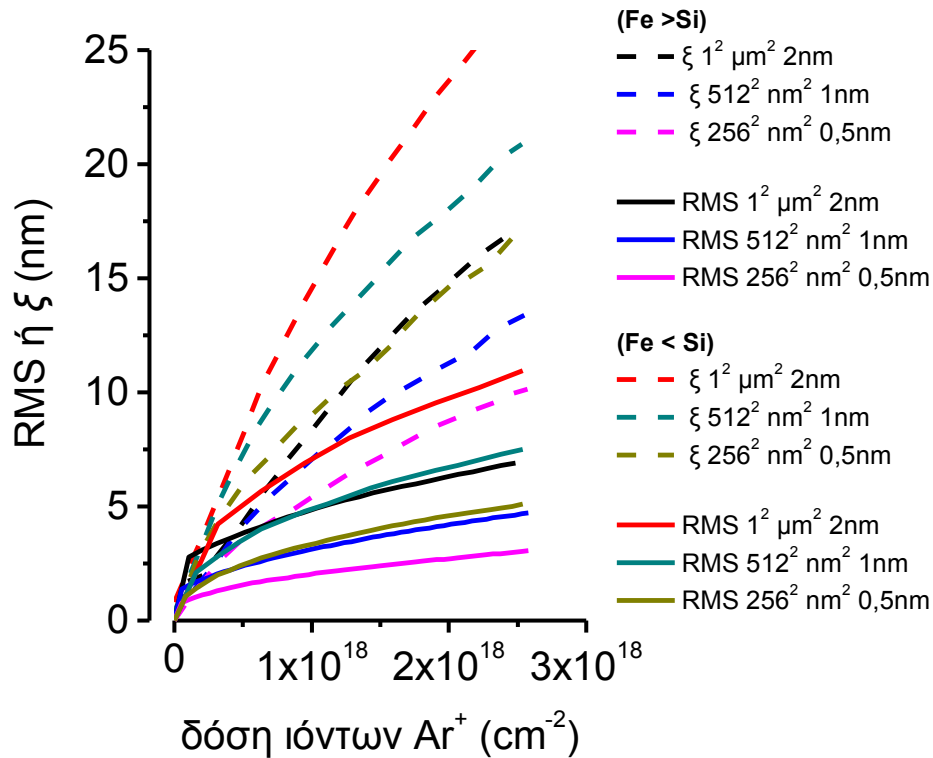
Πίνακας 13: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για τρεις διαστάσεις επιφάνειας ($256 \times 256 \text{ nm}^2$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$) και τρεις δομικές μονάδες αντίστοιχα (ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$, 1 nm και 2 nm) για τις περιπτώσεις $Fe > Si$ και $Fe < Si$ (Πίνακας 12). Τα αποτελέσματα αντιστοιχούν στα σενάρια 09, 06 και 04 του Πίνακα 11. Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	Διάσταση – Δομική μονάδα	Fe > Si			Fe < Si		
		RMS (nm)	ξ (nm)	Κλάσμα κάλυψης	RMS (nm)	ξ (nm)	Κλάσμα κάλυψης
04	$1 \times 1 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=2 \text{ nm}$	6,90	17,15	0,052	10,94	27,44	0,038
06	$512 \times 512 \text{ nm}^2$ - $\alpha=1 \text{ nm}$	4,68	13,17	0,052	7,49	20,93	0,038
09	$256 \times 256 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$	3,05	10,13	0,052	5,10	17,25	0,038

Στο Σχήμα 61α φαίνονται οι τελικές τιμές της RMS τραχύτητας και του μήκους συσχέτισης ξ επιφάνειας Si για έκθεση σε ιοντική δέσμη Ar^+ συνολικής δόσης $2,5e+18$ ιόντων / cm^2 . Στο Σχήμα 61β δίνονται οι στατιστικές παράμετροι της RMS τραχύτητας και του μήκους συσχέτισης συναρτήσει της δόσης της ιοντικής δέσμης.



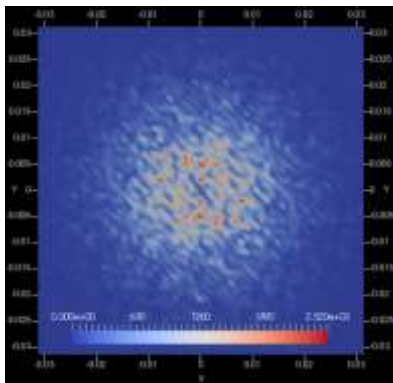
(α)



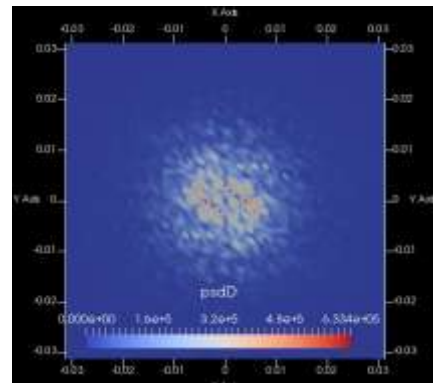
(β)

Σχήμα 61: (α) Τιμές RMS τραχύτητας και μήκους συσχέτισης (ξ) για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για τρεις διαστάσεις επιφάνειας ($256 \times 256 \text{ nm}^2$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$) και τρεις δομικές μονάδες αντίστοιχα (ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$, 1 nm και 2 nm) για τις περιπτώσεις $Fe > Si$ και $Fe < Si$ (Πίνακας 12). Τα αποτελέσματα αντιστοιχούν στα σενάρια 09, 06 και 04 του Πίνακα 11. Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων. (β) Το ίδιο με το Σχήμα 61(α) συναρτήσεως της δόσης των ιόντων.

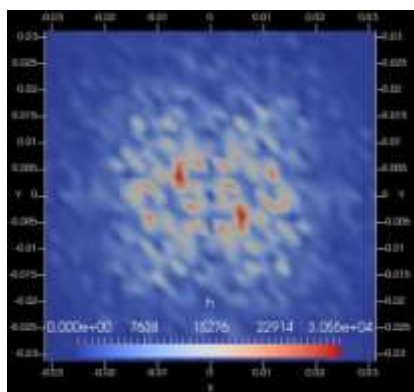
Στο Σχήμα 62: φαίνεται η πυκνότητα φάσματος ισχύος (power Spectral Density, PSD) για τις 3 επιφάνειες ($1 \times 1 \mu\text{m}^2 - \alpha = 2 \text{ nm}$, $512 \times 512 \text{ nm}^2 - \alpha = 1 \text{ nm}$ και $256 \times 256 \text{ nm}^2 - \alpha = 0,5 \text{ nm}$) και για τις περιπτώσεις $Fe > Si$ και $Fe < Si$. **Δεν υπάρχει ένδειξη για εμφάνιση περιοδικότητας στο Σχήμα 62:** .



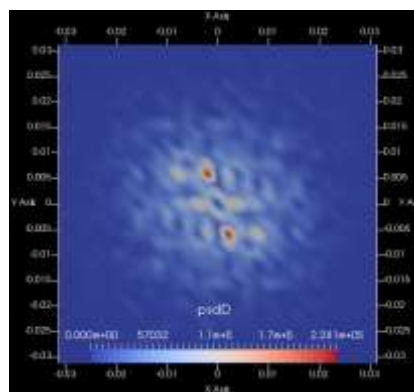
(α) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$, $\alpha=2 \text{ nm}$, $Fe > Si$



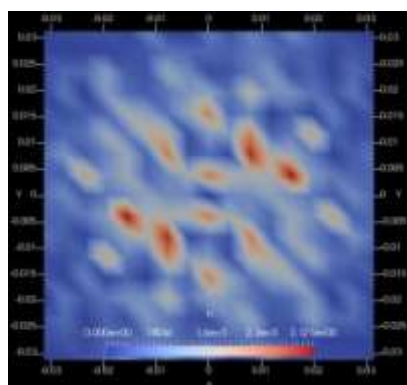
(β) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$, $\alpha=2 \text{ nm}$, $Fe < Si$



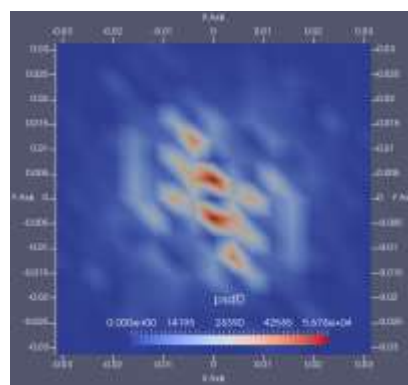
(γ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $\alpha=1 \text{ nm}$, $\text{Fe} > \text{Si}$



(δ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $\alpha=1 \text{ nm}$, $\text{Fe} < \text{Si}$



(ε) $256 \times 256 \text{ nm}^2$, $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $\text{Fe} > \text{Si}$



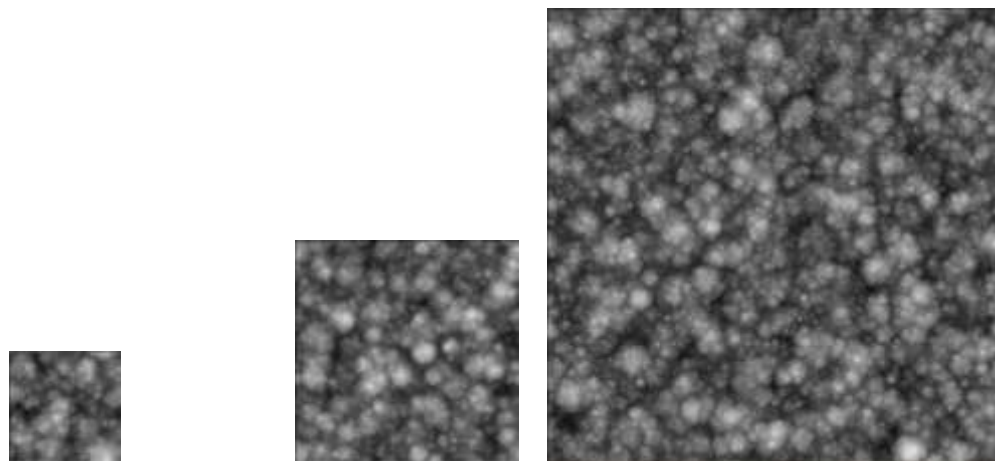
(στ) $256 \times 256 \text{ nm}^2$, $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $\text{Fe} < \text{Si}$

Σχήμα 62: Διαγράμματα πυκνότητας φάσματος ισχύος (PSD) επιφανειών Si διαστάσεων $(\alpha, \beta) 1 \times 1 \mu\text{m}^2$ δομικής μονάδας $\alpha = 2 \text{ nm}$ (σενάριο 04 του Πίνακα 11), $(\gamma, \delta) 512 \times 512 \text{ nm}^2$ δομικής μονάδας ακμής $\alpha=1 \text{ nm}$ (06 του Πίνακα 11) και $(\epsilon, \sigma\tau) 256 \times 256 \text{ nm}^2$ δομικής μονάδας ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$ (09 του Πίνακα 11) για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53. Στην πρώτη στήλη φαίνονται τα αποτελέσματα για την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ και στη δεύτερη για την περίπτωση $\text{Fe} < \text{Si}$. Τα διαγράμματα προκύπτουν ως μέσοι όροι 3 προσομοιώσεων.

Συμπερασματικά, η πυκνότητα των στοιχείων Fe και Si ή το μέγεθος των ατόμων Fe και Si επηρεάζουν την τραχύτητα που αναπτύσσεται στην εγχαρασόμενη επιφάνεια Si. Η εξέλιξη εκτράχυνσης της επιφάνειας είναι ταχύτερη λόγω του υψηλότερου ρυθμού εγχάραξης στην περίπτωση $\text{Fe} < \text{Si}$ και η RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης των τελειών που σχηματίζονται στην επιφάνεια είναι μεγαλύτερα. Ωστόσο, σε καμιά από τις περιπτώσεις δεν παρατηρείται περιοδικότητα στην επιφάνεια.

4.2.2 Επίδραση της διάστασης της επιφάνειας στη μορφολογία

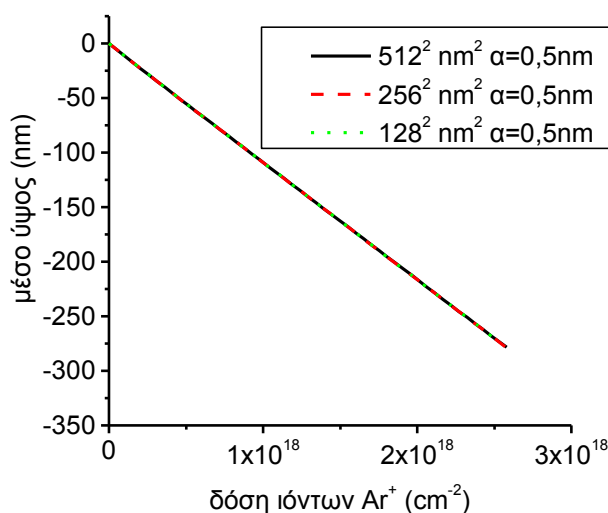
Στο πλαίσιο αναζήτησης των βέλτιστων παραμέτρων του μοντέλου εξέλιξης μορφολογίας για την ανάπτυξη επιφανειών όμοιων με αυτών των πειραμάτων των Zhang et al. διερευνήθηκε κατά πόσο οι διαστάσεις της εγχαρασόμενης επιφάνειας μεταβάλουν τις τιμές της τραχύτητας, του μήκους συσχέτισης και του διαγράμματος PSD. Ειδικότερα, για δομική μονάδα διάστασης $\alpha=0,5 \text{ nm}$ εκτελέστηκαν προσομοιώσεις ταυτόχρονης εγχάραξης και απόθεσης σε επιφάνειες $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$ και $128 \times 128 \text{ nm}^2$. Στο Σχήμα 63 δίνονται τρεις κατόψεις των επιφανειών μετά από έκθεση σε δέσμη ιόντων συνολικής δόσης $2,5e+18$ ιόντων/ cm^2 . Στις επιφάνειες παρατηρείται σχηματισμός τελειών οι οποίες δεν διαφέρουν από επιφάνεια σε επιφάνεια.



(α) $128 \times 128 \text{ nm}^2$, $\alpha=0,5 \text{ nm}$ (β) $256 \times 256 \text{ nm}^2$, $\alpha=0,5 \text{ nm}$ (γ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $\alpha=0,5 \text{ nm}$

Σχήμα 63: Κατόψεις επιφανειών Si διαφορετικής διάστασης για συνολική δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53. Η δομική μονάδα σε όλες τις περιπτώσεις είναι κύβος ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$ και οι διαστάσεις των επιφανειών είναι (α) $128 \times 128 \text{ nm}^2$ (σενάριο 10 του Πίνακα 11), (β) $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (09 του Πίνακα 11) και (γ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (08 του Πίνακα 11).

Το πάχος του υποστρώματος που έχει εγχαραχθεί για τις τρεις επιφάνειες για τη συνολική δόση διαμορφώνεται στα $278 \pm 23 \text{ nm}$ και όπως φαίνεται από το Σχήμα 64 δεν εξαρτάται από τις διαστάσεις της επιφάνειας. Το γεγονός αυτό εκφράζει ότι ο ρυθμός εγχάραξης των επιφανειών είναι ανεξάρτητος από τις διαστάσεις της επιφάνειας. Στο Σχήμα 64 αποδίδεται η μεταβολή του μέσου ύψους της επιφάνειας συναρτήσει της προσπίπτουσας δόσης ιόντων.



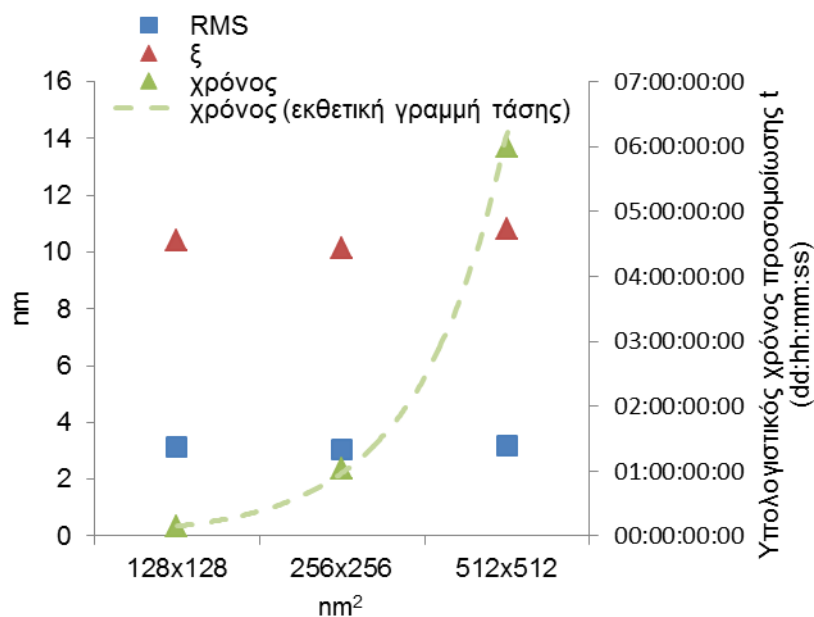
Σχήμα 64: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για τρεις διαστάσεις επιφάνειας [$128 \times 128 \text{ nm}^2$ (σενάριο 10 του Πίνακα 11), $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (09 του Πίνακα 11) και $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (08 του Πίνακα 11)] με δομική μονάδα ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$ και για την περίπτωση Fe > Si (Πίνακας 12). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 14 δίνονται οι τιμές της RMS τραχύτητας, του μήκους συσχέτισης ξ , το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας Si από Fe για δόση ιόντων Ar^+ $2.5e+18$ ιόντα/cm² για τις τρεις διατάσεις επιφάνειας (128×128 nm², 256×256 nm² και 512×512 nm²). Στον ίδιο πίνακα φαίνεται και ο υπολογιστικός χρόνος που χρειάστηκε για κάθε προσομοίωση. Τα χαρακτηριστικά του υπολογιστή στον οποίο έγιναν οι προσομοιώσεις είναι intel i7, 3.2 GHz, 6 cores, 32 GB RAM.

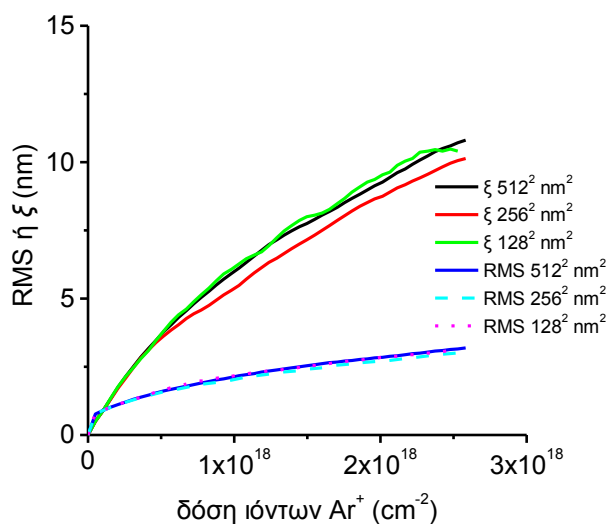
Πίνακας 14: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για τρεις διαστάσεις επιφάνειας [128×128 nm² (σενάριο 10 του Πίνακα 11), 256×256 nm² (09 του Πίνακα 11) και 512×512 nm² (08 του Πίνακα 11)] με δομική μονάδα ακμής $\alpha=0,5$ nm και για την περίπτωση Fe > Si (Πίνακας 12). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	Διάσταση – Δομική μονάδα	RMS (nm)	ξ (nm)	Κλάσμα κάλυψης	Υπολογιστικός χρόνος ολοκλήρωσης προσομοίωσης (ηη:ωω:λλ:δδ)
08	512×512 nm ² - $\alpha=0,5$ nm	3,19	10,81	0,051	06:00:00:00
09	256×256 nm ² - $\alpha=0,5$ nm	3,05	10,13	0,052	01:00:56:42
10	128×128 nm ² - $\alpha=0,5$ nm	3,14	10,40	0,051	00:03:30:20

Οι τιμές της RMS τραχύτητας, του μήκους συσχέτισης, ξ , και του χρόνου ολοκλήρωσης της προσομοίωσης για δόση ιόντων Ar^+ $2.5e+18$ ιόντα/cm² παρουσιάζονται γραφικά και στο Σχήμα 65(α) για τις τρεις διαστάσεις επιφάνειας (128×128 nm², 256×256 nm² και 512×512 nm²). Στο Σχήμα 65(β) δίνεται η RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης συναρτήσει της δόσης των ιόντων.



(α)



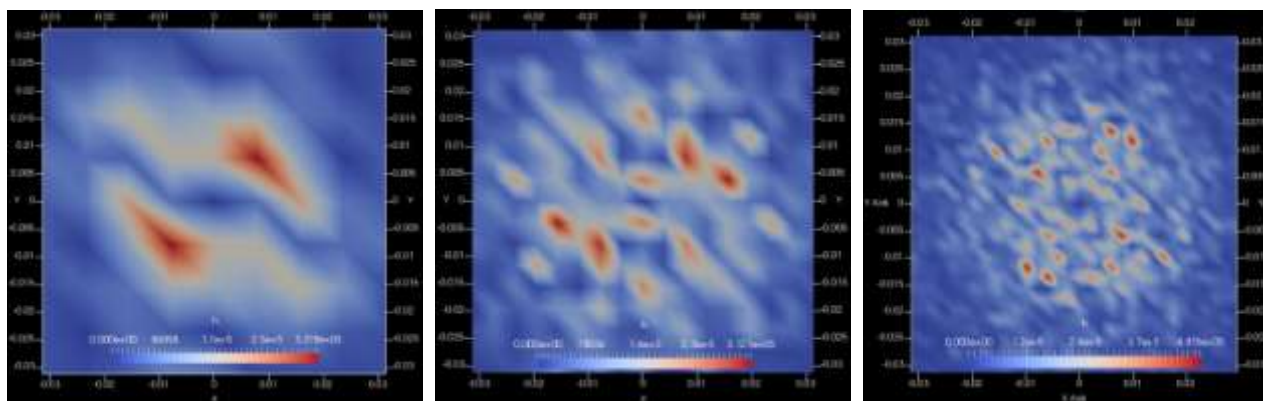
(β)

Σχήμα 65: (α) Τιμές RMS τραχύτητας και μήκους συσχέτισης (ξ) για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για τρεις διαστάσεις επιφάνειας [$128 \times 128 \text{ nm}^2$ (σενάριο 10 του Πίνακα 11), $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (09 του Πίνακα 11) και $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (08 του Πίνακα 11)] με δομική μονάδα ακμής $a=0,5 \text{ nm}$ και για την περίπτωση $Fe > Si$ (Πίνακας 12). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων. Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται και ο μέσος υπολογιστικός χρόνος που χρειάστηκε σε κάθε προσομοίωση σε υπολογιστή με χαρακτηριστικά Intel i7, 3.2 GHz, 6 cores, 32 GB RAM. (β) Το ίδιο με το Σχήμα 65(α) για την RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης συναρτήσεως της δόσης των ιόντων.

Παρατηρώντας τις τιμές του Πίνακα 14 καθώς και το Σχήμα 65 γίνεται αντιληπτό ότι το μέγεθος της επιφάνειας δεν επηρεάζει τις τιμές της RMS τραχύτητας και του μήκους συσχέτισης (ξ). Αξιοσημείωτο είναι ότι ακόμα και σε διαστάσεις $128 \times 128 \text{ nm}^2$ το μήκος συσχέτισης (ξ) προκύπτει όμοιο με τις διαστάσεις των $256 \times 256 \text{ nm}^2$ και $512 \times 512 \text{ nm}^2$.

Ιδιαίτερη προσοχή θα πρέπει να δοθεί στο πως διαμορφώνεται το διάγραμμα PSD των παραπάνω επιφανειών. Με βάση αυτό το διάγραμμα θα γίνει η εκτίμηση για την ύπαρξη ή μη οργάνωσης στην επιφάνεια. Ακολουθούν (βλέπε Σχήμα 66) τα διαγράμματα PSD

για τις επιφάνειες τριών διαστάσεων ($128 \times 128 \text{ nm}^2$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$ και $512 \times 512 \text{ nm}^2$). Σημειώνεται ότι τα διαγράμματα αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων για κάθε επιφάνεια.



(α) $128 \times 128 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $\text{Fe} > \text{Si}$, (β) $256 \times 256 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $\text{Fe} > \text{Si}$, (γ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $\text{Fe} > \text{Si}$

Σχήμα 66: Διαγράμματα PSD (PSD) επιφανειών Si διαστάσεων (α) $128 \times 128 \text{ nm}^2$ (σενάριο 10 του Πίνακα 11), (β) $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (09 του Πίνακα 11) και (γ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (08 του Πίνακα 11) για δόση $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/ cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53. Η δομική μονάδα είναι κύβος ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$ και τα αποτελέσματα αφορούν την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ (Πίνακας 12). Τα διαγράμματα προκύπτουν ως μέσοι όροι 3 προσομοιώσεων.

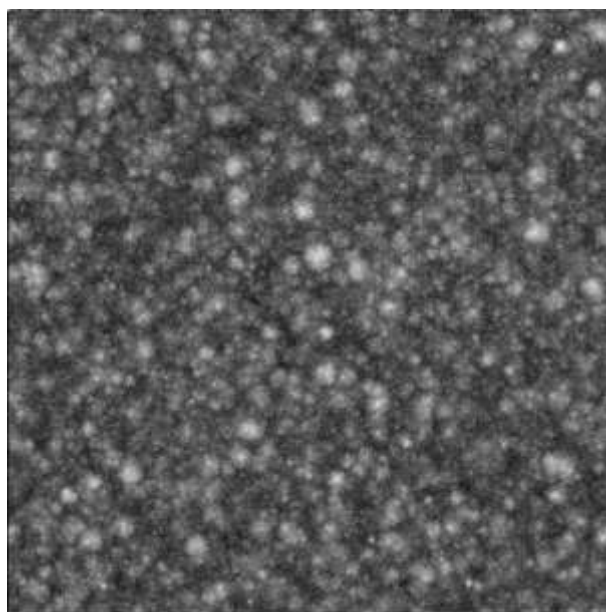
Αυξάνοντας την διάσταση της επιφάνειας ουσιαστικά αυξάνεται το δείγμα τιμών από το οποίο αναμένεται να αναζητηθεί οργάνωση. Το διάγραμμα PSD βελτιώνεται καθώς αυτό υπολογίζεται για τετραπλάσια και δεκαεξαπλάσια επιφάνεια της αρχικής. Η βελτίωση αυτή φαίνεται από την απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών χωρικών συχνοτήτων υπολογισμού. Η απόσταση αυτή μειώνεται από 0,016 σε 0,008 και 0,004 nm^{-1} για επιφάνειες $128 \times 128 \text{ nm}^2$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$ και $512 \times 512 \text{ nm}^2$ αντίστοιχα και δομικής μονάδας 0,5 nm. Κατά συνέπεια, η βελτίωση έγκειται στην ευκρίνεια του διαγράμματος, χαρακτηριστικό συγκριτικό παράδειγμα αποτελούν το διάγραμμα για την επιφάνεια των $128 \times 128 \text{ nm}^2$ σε σύγκριση με το διάγραμμα της επιφάνειας των $512 \times 512 \text{ nm}^2$ του Σχήματος 66.

Εξετάζοντας τις τιμές του υπολογιστικού χρόνου ολοκλήρωσης κάθε προσομοίωσης γίνεται αντιληπτό ότι η αύξηση της επιφάνειας από $128 \times 128 \text{ nm}^2$ σε $256 \times 256 \text{ nm}^2$ και $512 \times 512 \text{ nm}^2$ επιφέρει σημαντική αύξηση στον υπολογιστικό χρόνο (βλέπε Σχήμα 65). Επίσης, οι στατιστικές παράμετροι χαρακτηρισμού της επιφάνειας (RMS τραχύτητα, μήκος συσχέτισης ξ) δεν μεταβάλλονται συνεπώς αποτελεί σπατάλη πόρων η εξέταση της εξέλιξης της μορφολογίας μιας επιφάνειας σε μεγάλες διαστάσεις. Φραγμό στην ελαχιστοποίηση της επιφάνειας επιφέρει το διάγραμμα PSD του οποίου η ευκρίνεια μειώνεται κατά την ελαχιστοποίηση αυτή.

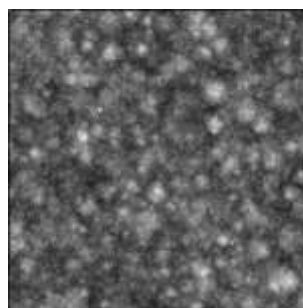
4.2.3 Επίδραση της δομικής μονάδας στη μορφολογία της επιφάνειας

Για τη διερεύνηση της επίδρασης της δομικής μονάδας του υποστρώματος στην μορφολογία της επιφάνειας εκτελείται πλήθος προσομοιώσεων με ακμή δομικής μονάδας (κύβου) 4 nm, 2 nm, 1 nm και 0,5 nm σε επιφάνειες διαφορετικών διαστάσεων. Η συνολική δόση των ιόντων Ar^+ είναι $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/ cm^2 . Οι κατόψεις των επιφανειών των παραπάνω προσομοιώσεων φαίνονται στο Σχήμα 67. Σημειώνεται ότι η διαφορά

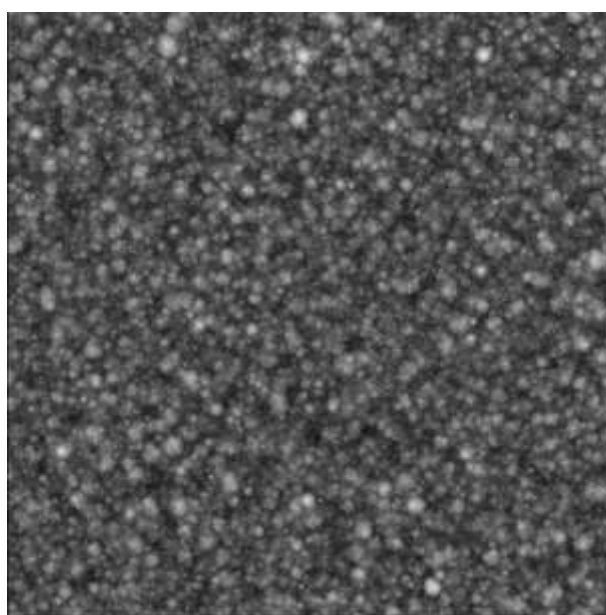
στο μέγεθος των κατόψεων αντικατοπτρίζει τη σχετική μείωση στο εμβαδό τους. Σε όλες τις επιφάνειες, ακόμα και στην μικρότερη αυτών υπάρχουν σχηματισμένοι λόφοι



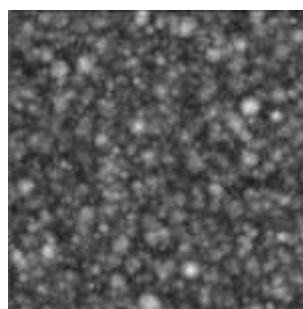
(α) $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=4 \text{ nm}$



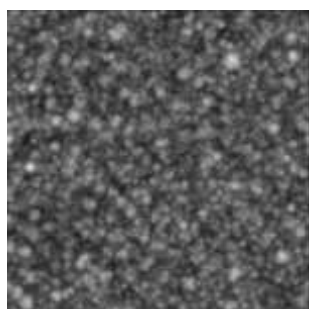
(β) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=4 \text{ nm}$



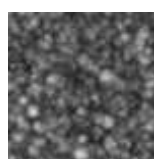
(γ) $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=2 \text{ nm}$



(δ) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=2 \text{ nm}$



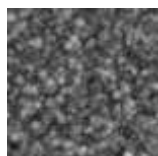
(ε) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=1 \text{ nm}$



(στ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$ - $\alpha=1 \text{ nm}$



(ζ) $256 \times 256 \text{ nm}^2$ - $\alpha=1 \text{ nm}$



(η) $512 \times 512 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$



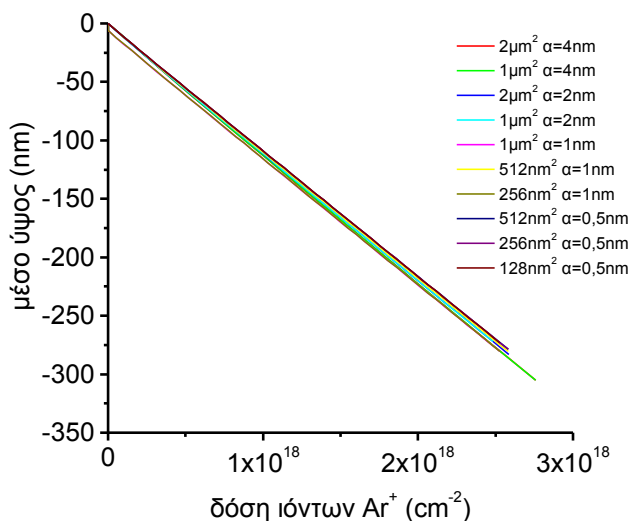
(θ) $256 \times 256 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$



(ι) $128 \times 128 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$

Σχήμα 67: Κατόψεις επιφανειών Si διαφορετικής δομικής μονάδας, α (ακμή κύβου), και διαφορετικής διάστασης για συνολική δόση $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53. (α) $\alpha=4 \text{ nm}$, διάσταση επιφάνειας $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 01 του Πίνακα 11), (β) $\alpha=4 \text{ nm}$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 02 του Πίνακα 11), (γ) $\alpha=2 \text{ nm}$, $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 03 του Πίνακα 11), (δ) $\alpha=2 \text{ nm}$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 04 του Πίνακα 11), (ε) $\alpha=1 \text{ nm}$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 05 του Πίνακα 11), (στ) $\alpha=1 \text{ nm}$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (σενάριο 06 του Πίνακα 11), (ζ) $\alpha=1 \text{ nm}$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (σενάριο 07 του Πίνακα 11), (η) $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (σενάριο 08 του Πίνακα 11), (θ) $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (σενάριο 09 του Πίνακα 11) και (ι) $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $128 \times 128 \text{ nm}^2$ (σενάριο 10 του Πίνακα 11).

Στο Σχήμα 68 φαίνεται το μέσο ύψος της εγχαρασσομένης επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων για τους συνδυασμούς δομικών μονάδων και διαστάσεων επιφανειών του σχήματος 67. Το πάχος των επιφανειών που έχει εγχαραχθεί δεν επηρεάζεται σημαντικά από τη δομική μονάδα. Το όρια τιμών καθορίζονται από τις προσομοιώσεις με δομική μονάδα $\alpha=4 \text{ nm}$ (και 2 nm) όπου το μέσο πάχος διαμορφώνεται στα $283 \pm 52 \text{ nm}$ και $\alpha=0,5 \text{ nm}$ (και 1 nm) όπου το μέσο πάχος παίρνει τιμές $273 \pm 12 \text{ nm}$ αντίστοιχα.



Σχήμα 68: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για επιφάνειες Si $2 \times 2 \mu\text{m}^2$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$, $128 \times 128 \text{ nm}^2$ και δομικές μονάδες (ακμής $\alpha=4 \text{ nm}$, $\alpha=2 \text{ nm}$, $\alpha=1 \text{ nm}$, $\alpha=0,5 \text{ nm}$) (σενάρια 1 έως και 10 του Πίνακα 11), για την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ (Πίνακας 12). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 15 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων χαρακτηρισμού της επιφάνειας, RMS τραχύτητα, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσμα κάλυψης επιφάνειας Si από Fe. Επίσης, δίνεται ο υπολογιστικός χρόνος ολοκλήρωσης των προσομοιώσεων. Τα χαρακτηριστικά του υπολογιστή στον οποίο έγιναν οι προσομοιώσεις είναι Intel i7,

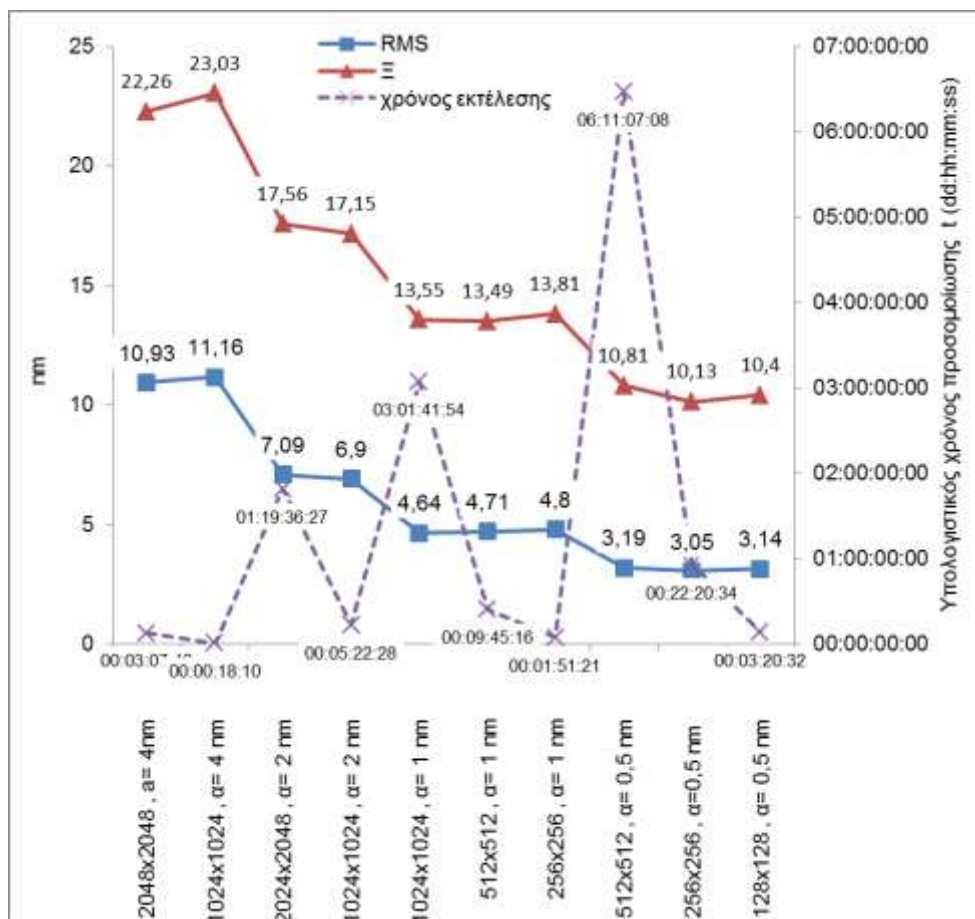
3.2 GHz, 6 cores, 32 GB RAM. Σημειώνεται ότι όλες οι προσομοιώσεις αφορούν την περίπτωση $Fe > Si$ του Πίνακα 12.

Πίνακας 15 Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για επιφάνειες $2 \times 2 \mu m^2$, $1 \times 1 \mu m^2$, $512 \times 512 nm^2$, $256 \times 256 nm^2$, $128 \times 128 nm^2$ και δομικές μονάδες 4 nm, 2nm, 1nm 0,5nm (σενάρια 1 έως και 10 του Πίνακα 11), για την περίπτωση $Fe > Si$ (Πίνακας 12). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων. Στον πίνακα περιλαμβάνεται ο μέσος υπολογιστικός χρόνος που χρειάστηκε σε κάθε προσομοίωση σε υπολογιστή με χαρακτηριστικά Intel i7, 3.2 GHz, 6 cores, 32 GB RAM.

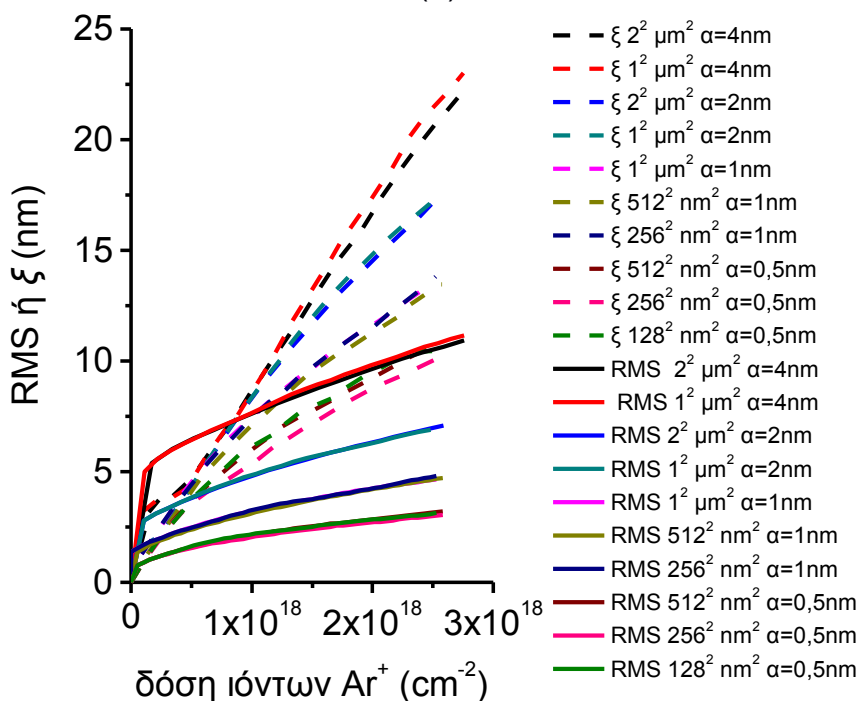
Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	Διάσταση – Δομική μονάδα	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης	Υπολογιστικός χρόνος ολοκλήρωσης προσομοίωσης (ηη:ωω:λλ:δδ)
01	$2 \times 2 \mu m^2 - \alpha=4 \text{ nm}$	10,93	22,26	0,053	00:03:07:42
02	$1 \times 1 \mu m^2 - \alpha=4 \text{ nm}$	11,16	23,03	0,052	00:00:18:10
03	$2 \times 2 \mu m^2 - \alpha=2 \text{ nm}$	7,09	17,56	0,052	01:19:36:27
04	$1 \times 1 \mu m^2 - \alpha=2 \text{ nm}$	6,9	17,15	0,052	00:05:22:28
05	$1 \times 1 \mu m^2 - \alpha=1 \text{ nm}$	4,64	13,55	0,052	03:01:41:54
06	$512 \times 512 nm^2 - \alpha=1 \text{ nm}$	4,71	13,49	0,051	00:09:45:16
07	$256 \times 256 nm^2 - \alpha=1 \text{ nm}$	4,8	13,81	0,052	00:01:51:21
08	$512 \times 512 nm^2 - \alpha=0,5 \text{ nm}$	3,19	10,81	0,051	06:11:07:08
09	$256 \times 256 nm^2 - \alpha=0,5 \text{ nm}$	3,05	10,13	0,052	00:22:20:34
10	$128 \times 128 nm^2 - \alpha=0,5 \text{ nm}$	3,14	10,4	0,052	00:03:20:32

Στο Σχήμα 69(α) παρουσιάζονται γραφικά οι τιμές του Πίνακα 15. Στο Σχήμα 69(β) δίνεται η RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης των ιόντων.

Στο Σχήμα 69 είναι εμφανές πως αν και η διάσταση της επιφάνειας δεν επιφέρει αλλαγή στις στατιστικές παραμέτρους της RMS τραχύτητας και του μήκους συσχέτισης, ο υπολογιστικός χρόνος επηρεάζεται σημαντικά. Για παράδειγμα, ο υπολογιστικός χρόνος είναι 6 ημέρες 11 ώρες και 7 λεπτά για την προσομοίωση σε επιφάνεια $512 \times 512 nm^2$ με δομική μονάδα ακμής $\alpha=0,5 \text{ nm}$. Επίσης, το Σχήμα 69 προδίδει ότι κατά την αλλαγή δομικής μονάδας οι στατιστικές παράμετροι (RMS, ξ) μεταβάλλονται αισθητά. Συνεπώς, δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μεγάλες δομικές μονάδες που θα μας επιτρέπουν υπολογισμούς σε υπολογιστικούς χρόνους $< 24 \text{ h}$ σε επιφάνειες με μεγάλες διαστάσεις (π.χ. $2 \times 2 \mu m^2$). Θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε την ελάχιστη δυνατή διάσταση για τη δομική μονάδα. Επιλέγουμε ως δομική μονάδα για τις προσομοιώσεις από εδώ και στο εξής κύβο ακμής 0,5 nm ο οποίος περιέχει 6,2 άτομα Si. Δεν χρησιμοποιούμε ως δομική μονάδα το 1 άτομο Si διότι θα αναγκάζομασταν να χρησιμοποιήσουμε ακόμη μικρότερες επιφάνειες για τους υπολογισμούς που όχι μόνο θα οδηγούσαν σε μεγάλη αύξηση του υπολογιστικού κόστους αλλά και σε μείωση της ποιότητας των διαγραμμάτων PSD (βλέπε § 4.2.2).



(α)

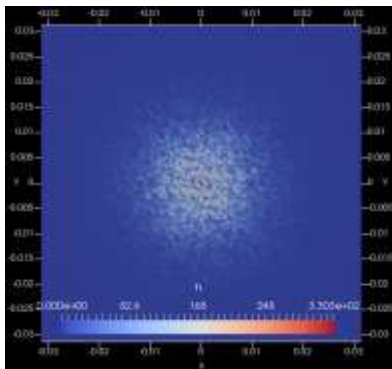


(β)

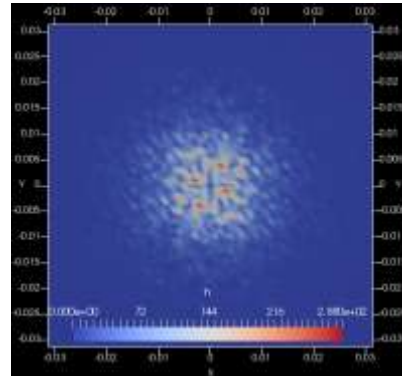
Σχήμα 69: (α) Τιμές RMS τραχύτητας και μήκους συσχέτισης (ξ) για δόση $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για επιφάνειες $2 \times 2 \mu\text{m}^2$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$, $512 \times 512 \text{nm}^2$, $256 \times 256 \text{nm}^2$, $128 \times 128 \text{nm}^2$ και δομικές μονάδες 4 nm, 2 nm, 1 nm 0,5 nm (σενάρια 1 έως και 10 του Πίνακα 11), για την περίπτωση Fe>Si (Πίνακας 12). Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται και ο μέσος υπολογιστικός χρόνος που χρειάστηκε σε κάθε

προσομοίωση σε υπολογιστή με χαρακτηριστικά Intel i7, 3.2 GHz, 6 cores, 32 GB RAM. (β) Το ίδιο με το Σχήμα 69(α) για την RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης συναρτήσει της δόσης των ιόντων.

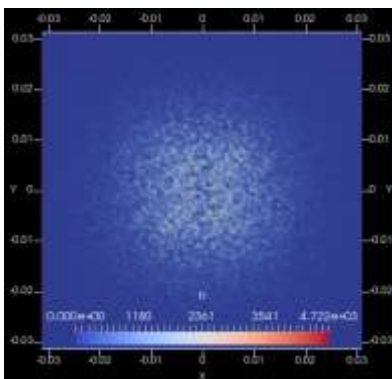
Ακολουθούν στο Σχήμα 70 τα διαγράμματα PSD για τις προσομοιώσεις με διαφορετικές δομικές μονάδες και διαστάσεις επιφανειών όταν η δόση είναι $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm². Σημειώνεται ότι τα διαγράμματα αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων για κάθε επιφάνεια και δομική μονάδα.



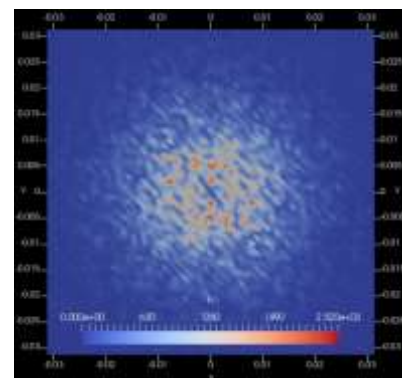
(α) $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=4 \text{ nm}$



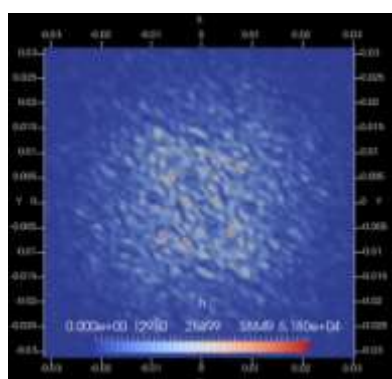
(β) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=4 \text{ nm}$



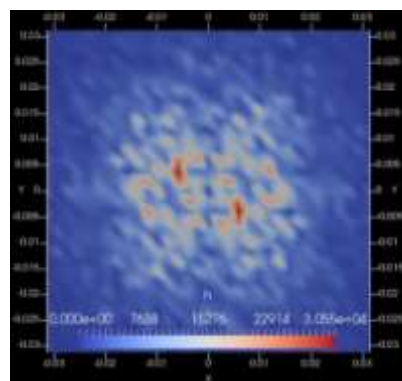
(γ) $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=2 \text{ nm}$



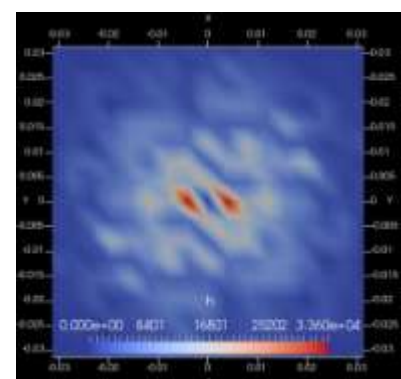
(δ) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=2 \text{ nm}$



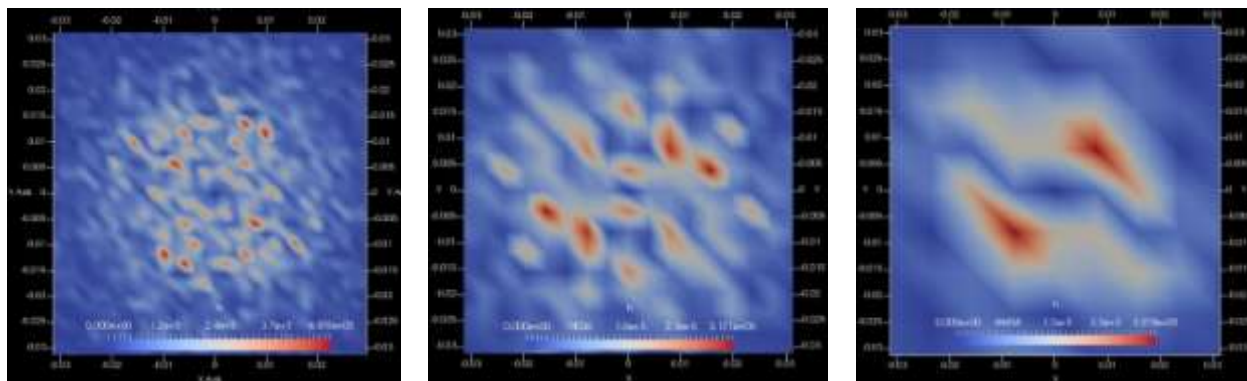
(ε) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ - $\alpha=1 \text{ nm}$



(στ) $512 \times 512 \text{ nm}^2$ - $\alpha=1 \text{ nm}$



(ζ) $256 \times 256 \text{ nm}^2$ - $\alpha=1 \text{ nm}$



(η) $512 \times 512 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$ (θ) $256 \times 256 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$ (ι) $128 \times 128 \text{ nm}^2$ - $\alpha=0,5 \text{ nm}$

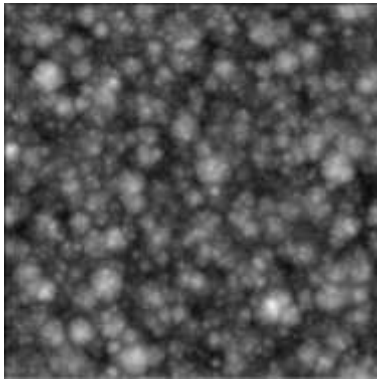
Σχήμα 70: Διαγράμματα πυκνότητας φάσματος ισχύος (PSD) για επιφάνειες Si διαφορετικής δομικής μονάδας, α (ακμή κύβου), και διαφορετικής διάστασης για συνολική δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53. (α) $\alpha=4 \text{ nm}$, διάσταση επιφάνειας $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 01 του Πίνακα 11), (β) $\alpha=4 \text{ nm}$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 02 του Πίνακα 11), (γ) $\alpha=2 \text{ nm}$, $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 03 του Πίνακα 11), (δ) $\alpha=2 \text{ nm}$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 04 του Πίνακα 11), (ε) $\alpha=1 \text{ nm}$, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ (σενάριο 05 του Πίνακα 11), (στ) $\alpha=1 \text{ nm}$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (σενάριο 06 του Πίνακα 11), (ζ) $\alpha=1 \text{ nm}$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (σενάριο 07 του Πίνακα 11), (η) $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $512 \times 512 \text{ nm}^2$ (σενάριο 08 του Πίνακα 11), (θ) $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $256 \times 256 \text{ nm}^2$ (σενάριο 09 του Πίνακα 11) και (ι) $\alpha=0,5 \text{ nm}$, $128 \times 128 \text{ nm}^2$ (σενάριο 10 του Πίνακα 11), για την περίπτωση $\text{Fe} > \text{Si}$ (Πίνακας 12). Τα διαγράμματα αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

4.2.4 Επίδραση της απόδοσης εγχάραξης των παρεμποδιστών στη μορφολογία της επιφάνειας

Κατά την διαδικασία υπολογισμού της απόδοσης εγχάραξης των παρεμποδιστών (άτομα Fe) και της επιφάνειας του υποστρώματος (άτομα Si), ο κώδικας SRIM εξετάζει καθαρά κρυσταλλικά σώματα (βλέπε § 3.2). Ο υπολογισμός δεν λαμβάνει υπόψη χημικές ενώσεις που ενδεχομένως αναπτύσσονται στην επιφάνεια (π.χ. FeSi_2) και πιθανόν μεταβάλλουν την απόδοση εγχάραξης της επιφάνειας. Σε μια προσπάθεια να ληφθεί υπόψη αυτή η αβεβαιότητα εξετάζονται δύο περιπτώσεις όπου η απόδοση εγχάραξης των Fe παίρνει τιμές κατά το ένα δεύτερο ($\frac{1}{2}$) και κατά το ένα τέταρτο ($\frac{1}{4}$) της αρχικής (βλέπε Εξίσωση (3-2) για την αρχική). Η αλλαγή της απόδοσης εγχάραξης των Fe θα μεταβάλλει την επιλεκτικότητα της εγχάραξης. Πιο συγκεκριμένα, η μείωση της απόδοσης εγχάραξης των Fe θα αυξήσει την επιλεκτικότητα εγχάραξης του Si ως προς τους παρεμποδιστές.

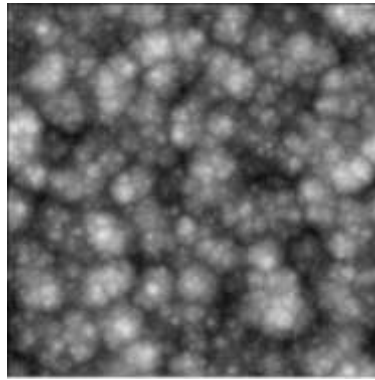
Στα Σχήματα 71(α)-(γ) φαίνεται η μορφολογία επιφάνειας Si για διαφορετικές δόσεις ιόντων όταν η απόδοση εγχάραξης των Fe είναι $\frac{1}{2}$ της αρχικής. Στα Σχήματα 71(δ)-(στ) φαίνονται τα διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις και αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/cm²



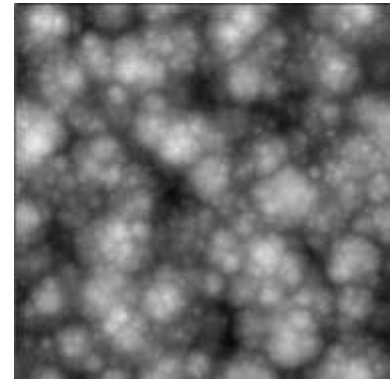
(α)

$1,25e+18$ ιόντα/cm²

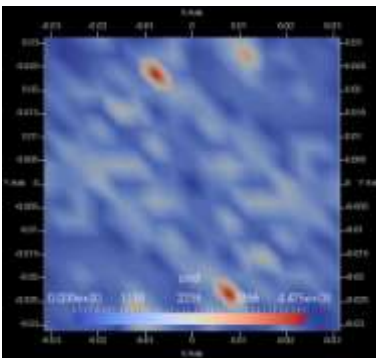


(β)

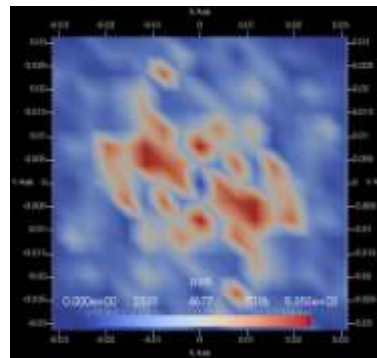
$2,5e+18$ ιόντα/cm²



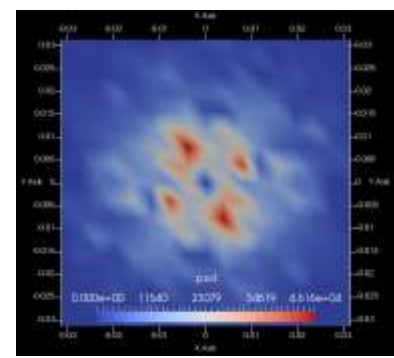
(γ)



(δ)



(ε)

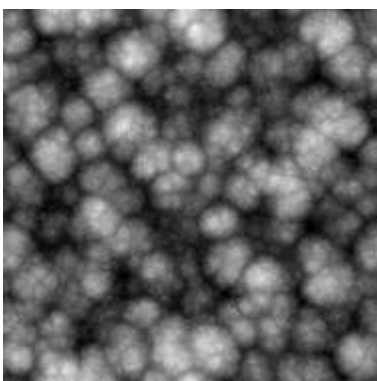


(στ)

Σχήμα 71: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺, (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο η απόδοση εγχάραξης του Fe να είναι το $\frac{1}{2}$ της αρχικής τιμής (σενάριο 11 του Πίνακα 11).

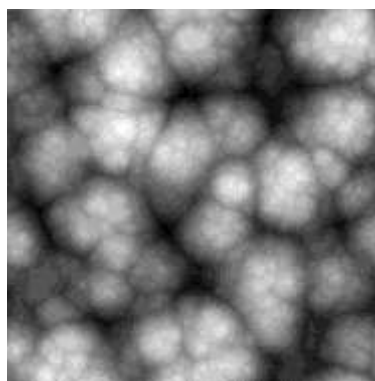
Στα Σχήματα 72(α)-(γ) φαίνεται η μορφολογία επιφάνειας Si για διαφορετικές δόσεις ιόντων όταν η απόδοση εγχάραξης των Fe είναι $\frac{1}{4}$ της αρχικής. Στα Σχήματα 72(δ)-(στ) φαίνονται τα διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις και αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων. Στη περίπτωση αυτή οι λόφοι ενισχύονται σε τέτοιο βαθμό ώστε να παρατηρούνται συσσωματώσεις αυτών.

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/cm²



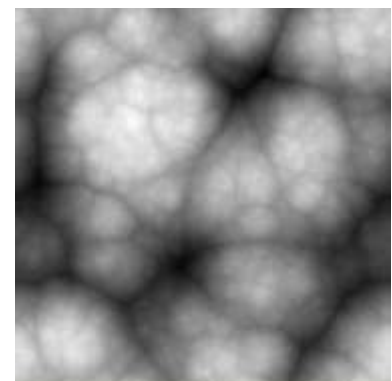
(α)

$1,25e+18$ ιόντα/cm²

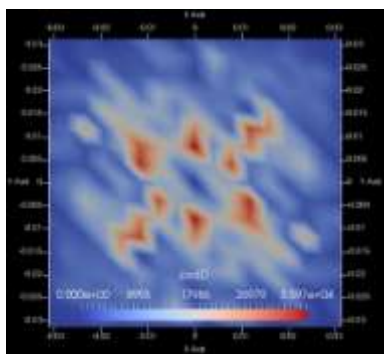


(β)

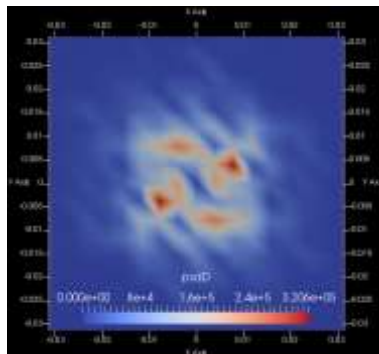
$2,5e+18$ ιόντα/cm²



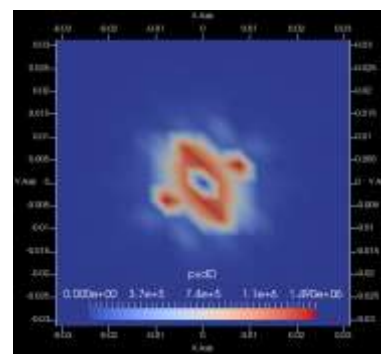
(γ)



(δ)



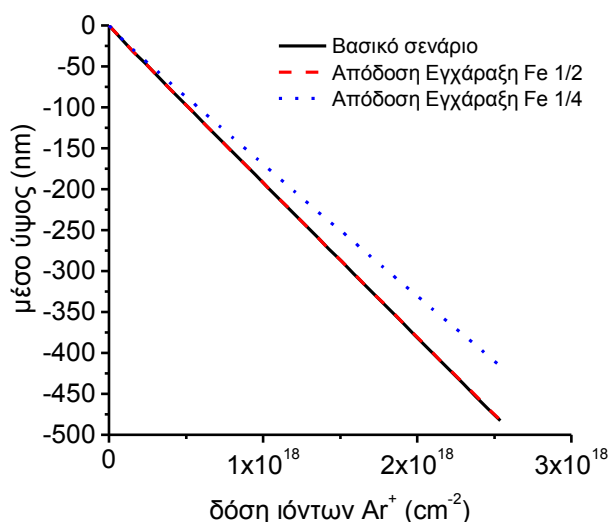
(ε)



(στ)

Σχήμα 72: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα φασματικής πυκνότητας ισχύος για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ , (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2 , (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/ cm^2 και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 , υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο η απόδοση εγχάραξης του Fe να είναι το $\frac{1}{2}$ της αρχικής τιμής (σενάριο 12 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος του υποστρώματος Si που εγχάρασσεται για τα δύο παραπάνω ενδεχόμενα διαμορφώνεται στα 482 ± 36 nm για την περίπτωση θεώρησης της απόδοσης εγχάραξης των Fe στο $\frac{1}{2}$ της αρχικής τιμής και 416 ± 99 nm για την περίπτωση θεώρησης της απόδοσης εγχάραξης των Fe στο $\frac{1}{4}$ της αρχικής τιμής. Για το βασικό σενάριο σημειώνεται ότι το μέσο πάχος έχει τιμή 483 ± 23 nm. Το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας παραμένει σταθερό και ίσο με $0,038$ για την περίπτωση θεώρησης της απόδοσης εγχάραξης των Fe στο $\frac{1}{2}$ της αρχικής τιμής ενώ αυξάνεται στο $0,075$ για την περίπτωση θεώρησης της απόδοσης εγχάραξης των Fe στο $\frac{1}{4}$ της αρχικής τιμής. Αξιοσημείωτο είναι ότι το κλάσμα κάλυψης της πρώτης περίπτωσης είναι ίδιο με το κλάσμα κάλυψης του βασικού σεναρίου (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της επιφάνειας Si των δύο περιπτώσεων σε σύγκριση με το βασικό σενάριο προσομοίωσης.



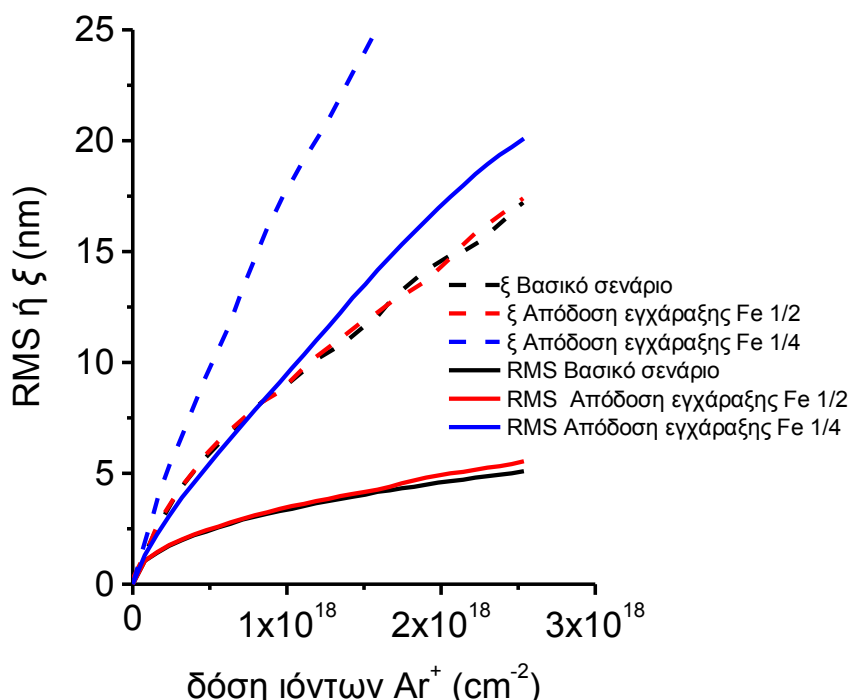
Σχήμα 73: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για απόδοση εγχάραξης Fe στο $\frac{1}{2}$ (σενάριο 11 του Πίνακα 11) και $\frac{1}{4}$ (σενάριο 12 του Πίνακα 11) της αρχικής τιμής σε σύγκριση με την αρχική τιμή (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Οι τιμές που λαμβάνουν η RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης ξ δίνονται στον Πίνακα 16.

Πίνακας 16: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για απόδοση εγχάραξης Fe στο $\frac{1}{2}$ (σενάριο 11 του Πίνακα 11) και $\frac{1}{4}$ (σενάριο 12 του Πίνακα 11) της αρχικής τιμής. Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
11	5,5	17,4	0,38
12	20,1	34,8	0,75

Στο Σχήμα 74 δίνονται η RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης των ιόντων για τις περιπτώσεις απόδοσης εγχάραξης του Fe στο $\frac{1}{2}$ και στο $\frac{1}{4}$ της αρχικής τιμής σε σύγκριση με το βασικό σενάριο.



Σχήμα 74: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για απόδοση εγχάραξης Fe στο $\frac{1}{2}$ (σενάριο 11 του Πίνακα 11) και $\frac{1}{4}$ (σενάριο 12 του Πίνακα 11) της αρχικής τιμής σε σύγκριση με την αρχική τιμή (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Η αλλαγή της τιμής της απόδοσης εγχάραξης του Fe από την αρχική τιμή στο $\frac{1}{2}$ αυτής δεν επιφέρει ουσιαστικές αλλαγές στον ρυθμό εξέλιξης της επιφάνειας ή στην ίδια την επιφάνεια. Μόνο όταν η απόδοση εγχάραξης μειωθεί στο $\frac{1}{4}$ της αρχικής τιμής γίνεται εμφανής η επίδραση. Στην περίπτωση που η απόδοση εγχάραξης λάβει τιμή στο $\frac{1}{4}$ της

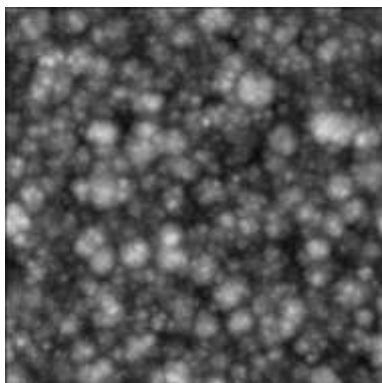
αρχικής, το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από Fe αυξάνεται και ακολούθως ο ρυθμός εγχάραξης μειώνεται. Στη συνέχεια, οι στατιστικές παράμετροι παίρνουν μεγαλύτερες τιμές με το μήκος συσχέτισης να παραμένει μεγαλύτερο της RMS τραχύτητας. Συγκρίνοντας το βασικό σενάριο με τα δύο σενάρια αλλαγής της απόδοσης εγχάραξης των παρεμποδιστών γίνεται αντιληπτό ότι στην περίπτωση που η απόδοση εγχάραξης των παρεμποδιστών λάβει τιμή στο $\frac{1}{4}$ της αρχικής τότε σχηματίζονται πιο ξεκάθαρες και μεγάλες δομές (λόφοι). Όσον αφορά την οργάνωση αυτών σε ένα μοτίβο όμοιο αυτού των πειραμάτων των Zhang et al. (βλέπε § 4.1), σημειώνεται ότι τα διαγράμματα PSD εμφανίζουν καθαρότερες κορυφές από το βασικό σενάριο χωρίς όμως αυτές να είναι όμοιες με αυτές των πειραμάτων.

4.2.5 Επίδραση της πιθανότητας προσκόλλησης των παρεμποδιστών στη μορφολογία της επιφάνειας

Στην παράγραφο 3.2.6 επιχειρείται ο προσδιορισμός της πιθανότητας προσκόλλησης των παρεμποδιστών (άτομα Fe) στην επιφάνεια Si. Η διερεύνηση αυτή εκτελείται με την χρήση του κώδικα SRIM και προσδίδει γωνιακή εξάρτηση στη μεταβλητή αυτή. Στη συνέχεια εξετάζεται η πιθανότητα προσκόλλησης των Fe να είναι ανεξάρτητη της γωνίας πρόσπτωσης και ίση με 0,5 και 1.

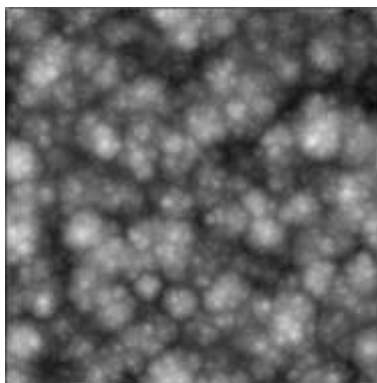
Στο Σχήμα 75 δίνεται η κάτοψη της επιφάνειας Si σε τρεις διαφορετικές δόσεις όταν η πιθανότητα προσκόλλησης των Fe είναι ίση με 0,5 ανεξάρτητα της γωνίας πρόσπτωσης. Όλες οι υπόλοιπες παράμετροι και μηχανισμοί αφορούν το βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Στο ίδιο σχήμα, δίνονται τα διαγράμματα PSD (μέσος όρος 3 προσομοιώσεων) που αντιστοιχούν στις παραπάνω δόσεις.

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/cm²



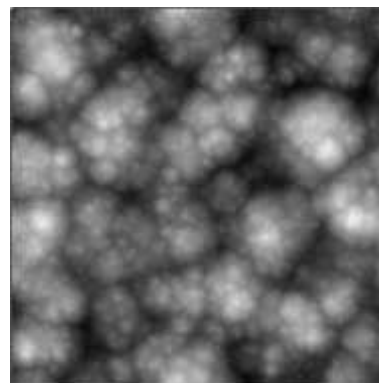
(α)

$1,25e+18$ ιόντα/cm²

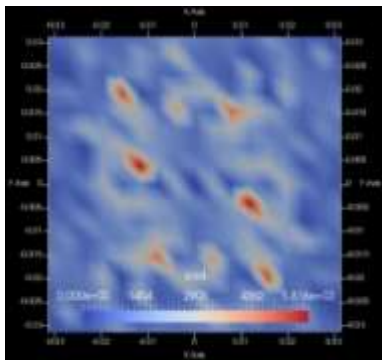


(β)

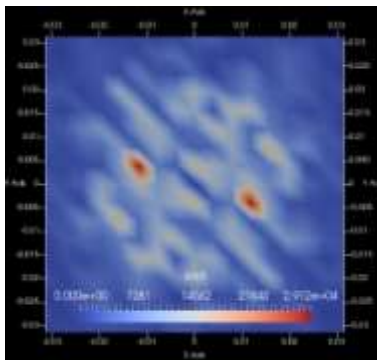
$2,5e+18$ ιόντα/cm²



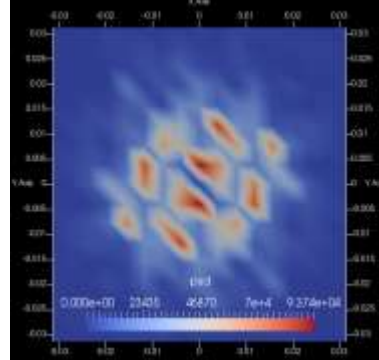
(γ)



(δ)



(ε)

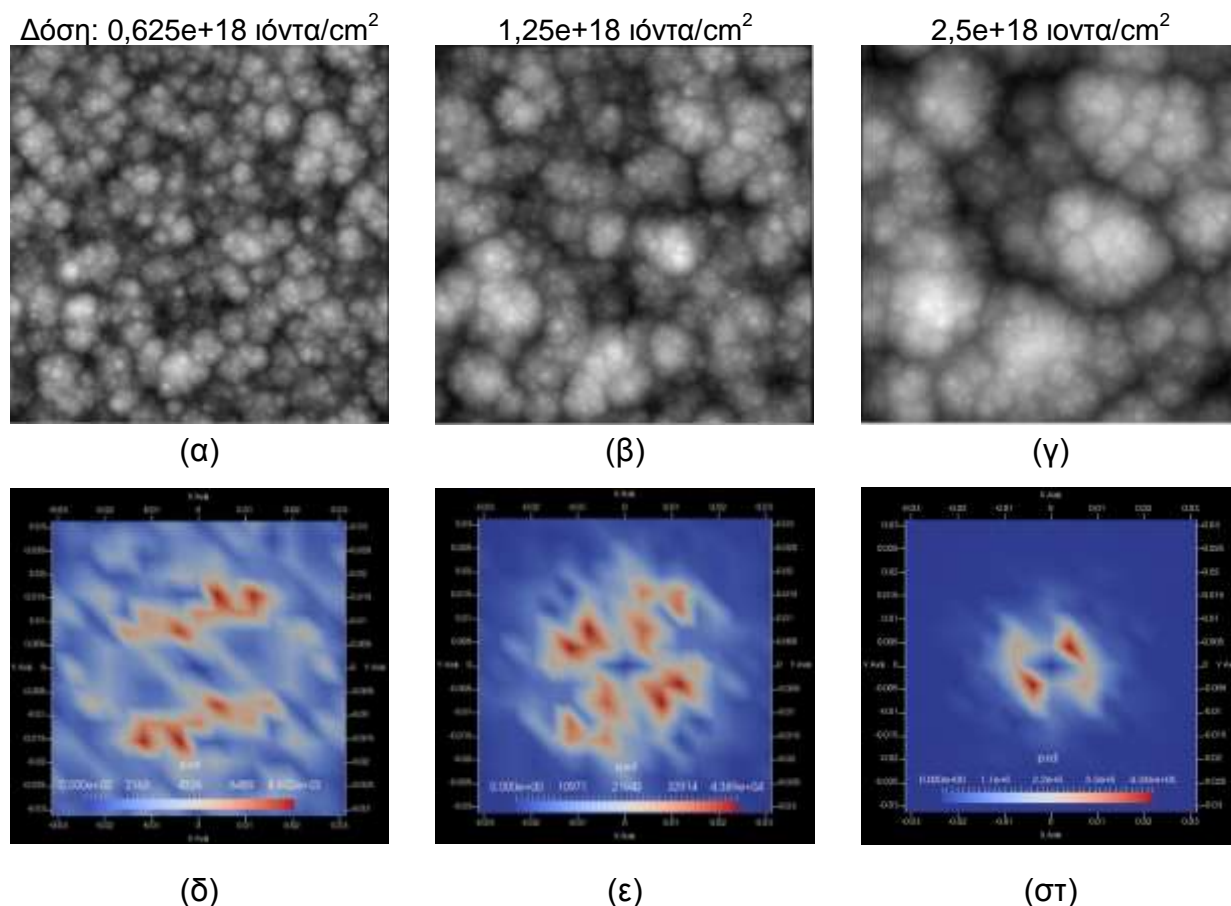


(στ)

Σχήμα 75: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺, (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη

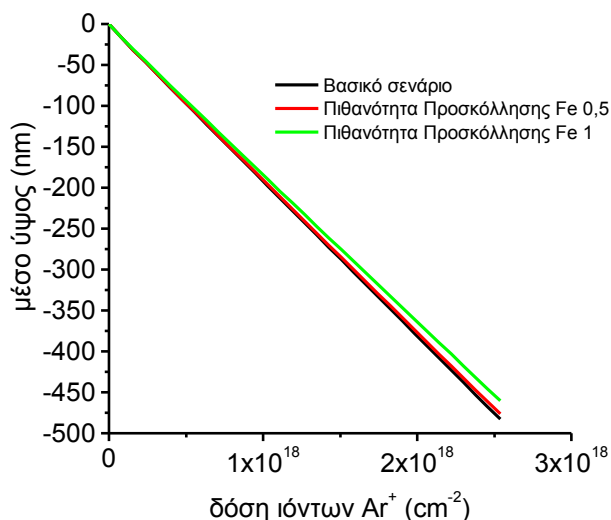
απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο η πιθανότητα προσκόλλησης του Fe να είναι 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11).

Στο Σχήμα 76 δίνεται η επιφάνειες Si για διαφορετικές δόσεις όταν η πιθανότητα προσκόλλησης των Fe είναι ίση με 1 ανεξάρτητα της γωνίας πρόσπτωσης. Όλες οι υπόλοιπες παράμετροι και μηχανισμοί αφορούν το βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Στο ίδιο σχήμα δίνονται επίσης τα διαγράμματα PSD (μέσος όρος 3 προσομοιώσεων) που αντιστοιχούν στις παραπάνω δόσεις.



Σχήμα 76: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺, (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο η πιθανότητα προσκόλλησης του Fe να είναι 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος του υποστρώματος Si που εγχάρασσεται είναι 476 ± 47 nm όταν η πιθανότητα προσκόλλησης του Fe είναι ίση με 0,5 και 460 ± 59 nm όταν η πιθανότητα αυτή είναι 1. Το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας είναι σταθερό συναρτήσει της δόσης και ίσο με **0,031** όταν η πιθανότητα προσκόλλησης του Fe είναι ίση με 0,5 ενώ αυξάνεται στο **0,054** όταν η πιθανότητα προσκόλλησης πάρει την τιμή 1. Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της επιφάνειας Si συναρτήσεως της δόσης για τις δύο περιπτώσεις σε σύγκριση με το βασικό σενάριο.

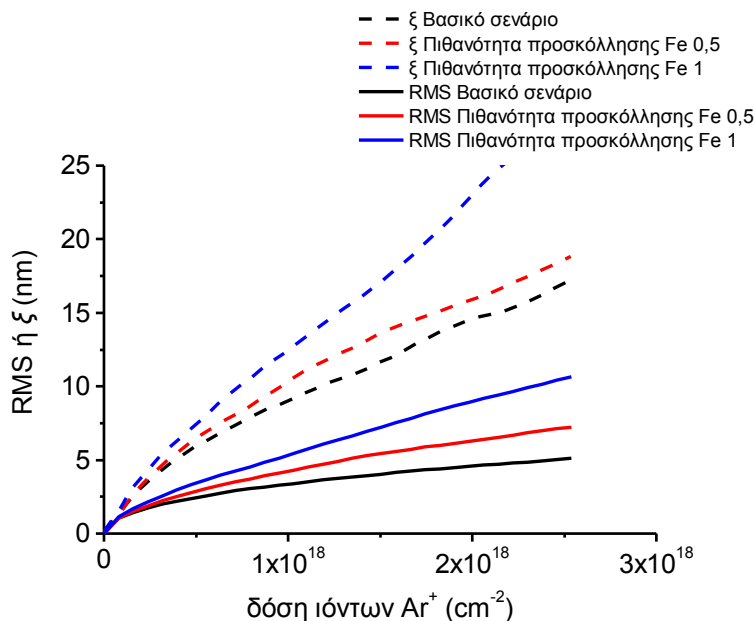


Σχήμα 77: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για πιθανότητα προσκόλλησης παρεμποδιστών ίση με 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11) και 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με την αρχική τιμή (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στο Πίνακα 17 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων της επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 όταν η πιθανότητα προσκόλλησης του Fe είναι 0,5 και 1. Η εξέλιξη των στατιστικών παραμέτρων του Πίνακα 17 συναρτήσει της δόσης δίνεται στο Σχήμα 78.

Πίνακας 17 Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για πιθανότητα προσκόλλησης Fe 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11) και 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
13	7,24	18,84	0,031
14	10,64	28,07	0,054



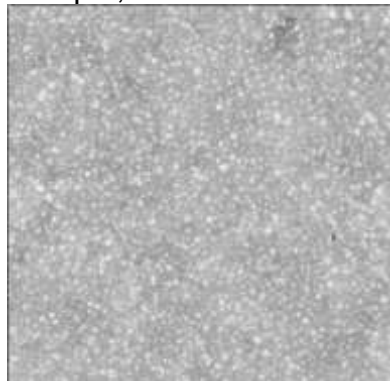
Σχήμα 78: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για πιθανότητα προσκόλλησης Fe ίση με 0,5 (σενάριο 13 του Πίνακα 11) και 1 (σενάριο 14 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το βασικό σενάριο (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Βάσει του Σχήματος 78 και του Πίνακα 17 διαπιστώνεται ότι τόσο η τιμή της RMS τραχύτητας όσο και η τιμή του μήκους συσχέτισης ξ αυξάνονται καθώς αυξάνεται η πιθανότητα προσκόλλησης των Fe και κατά συνέπεια το κλάσμα κάλυψης αυτού στην επιφάνεια. Η αύξηση της RMS τραχύτητας και του μήκους συσχέτισης ξ αντικατοπτρίζει την αύξηση των διαστάσεων των δομών που σχηματίζονται στην επιφάνεια.

4.2.6 Επίδραση του μηχανισμού επαναπόθεσης προϊόντων της εγχάραξης

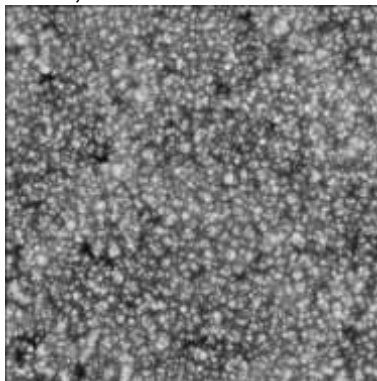
Στην παρούσα παράγραφο εξετάζεται η επίδραση που επιφέρει στη μορφολογία της επιφάνειας η επαναπόθεση των προϊόντων της εγχάραξης. Πιο συγκεκριμένα, εξετάζεται η επίδραση της πιθανότητας προσκόλλησης των ατόμων Si, που προκύπτουν από την εγχάραξη, είναι δηλαδή προϊόντα εγχάραξης, στο υπόστρωμα. Στο βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11), η πιθανότητα αυτή λαμβάνει την τιμή 1 και το ενδεχόμενο επαναπόθεσης εξαρτάται μόνο από το εάν η τροχιά του εγχαρασόμενου ατόμου προσπίπτει στην επιφάνεια εγχάραξης. Στην παρούσα παράγραφο η τιμή της πιθανότητας προσκόλλησης των ατόμων Si στο υπόστρωμα λαμβάνει τις τιμές 0 και 0,1. Στο Σχήμα 79 φαίνεται η επιφάνεια Si όταν η πιθανότητα προσκόλλησης των ατόμων Si στο υπόστρωμα είναι 0 δηλαδή όταν δεν συμβαίνει επαναπόθεση.

Δόση: $0,625 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²



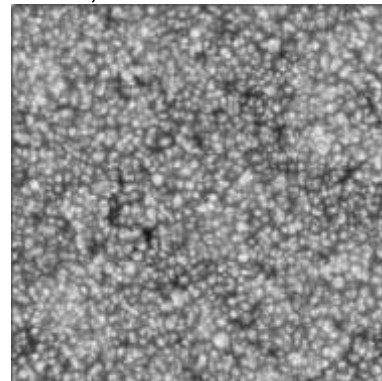
(α)

Δόση: $1,25 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²

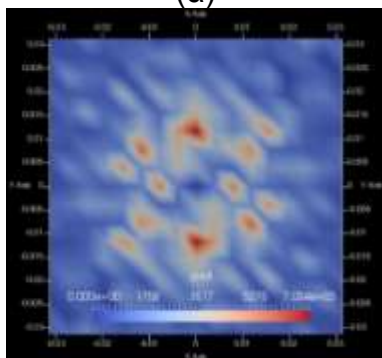


(β)

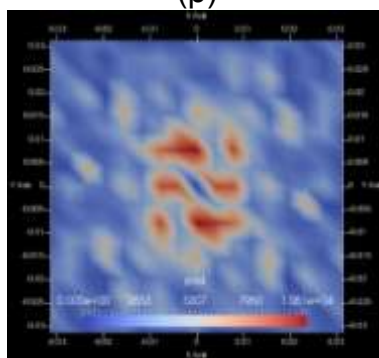
Δόση: $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²



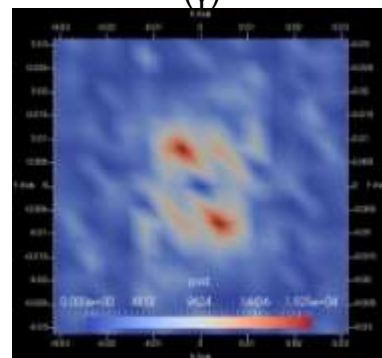
(γ)



(δ)



(ε)

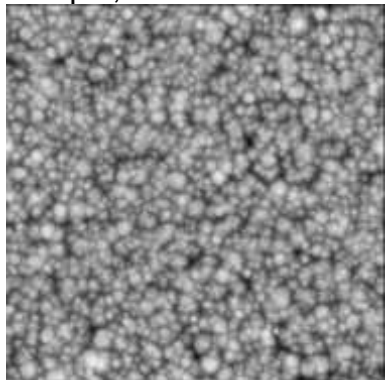


(στ)

Σχήμα 79 : Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺, (α, δ) $0,625 \times 10^{18}$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25 \times 10^{18}$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο διακοπής του μηχανισμού επανατοποθέτησης του Si (σενάριο 15 του Πίνακα 11).

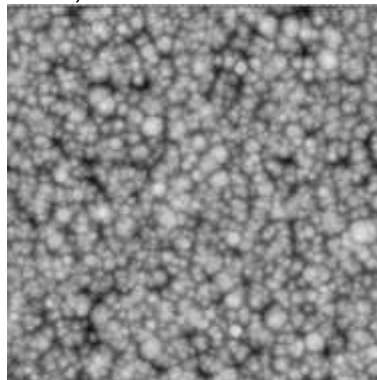
Στο Σχήμα 80 φαίνεται η επιφάνεια Si για διάφορες δόσεις όταν η πιθανότητα προσκόλλησης των ατόμων Si στο υπόστρωμα είναι 0,1 δηλαδή όταν η επαναπόθεση είναι περιορισμένη.

Δόση: $0,625 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²



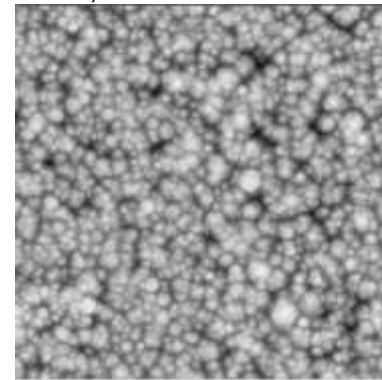
(α)

Δόση: $1,25 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²

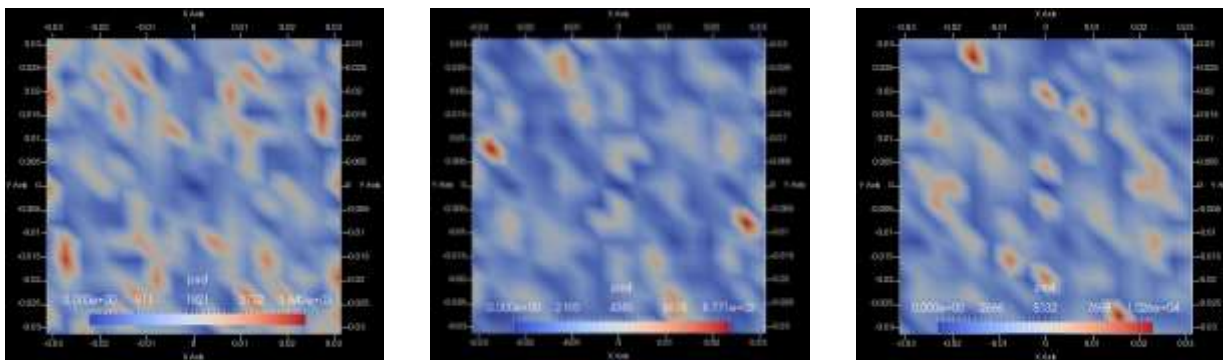


(β)

Δόση: $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²



(γ)



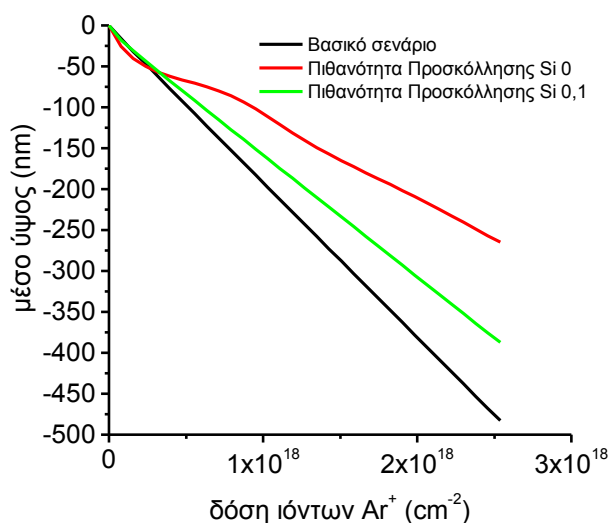
(δ)

(ε)

(στ)

Σχήμα 80: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ , (α , δ) $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2 , (β , ϵ) $1,25e+18$ ιόντα/ cm^2 και (γ , $\sigma\tau$) $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 , υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο η πιθανότητα επανατοποθέτησης του Si να είναι 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος της επιφάνειας που εγχάρασσεται διαμορφώνεται στα 265 ± 39 nm για την περίπτωση η πιθανότητα επαναπόθεσης των ατόμων Si να είναι ίση με 0 ενώ στα 387 ± 30 nm για την περίπτωση η πιθανότητα επαναπόθεσης να είναι ίση με 0,1. Το κλάσμα κάλυψης παραμένει σταθερό για τις δύο περιπτώσεις ίσο με **0,845** στην περίπτωση η πιθανότητα επαναπόθεσης να είναι 0 και **0,131** στην περίπτωση η πιθανότητα επαναπόθεσης να είναι 0,1. Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της επιφάνειας Si συναρτήσεως της δόσης των ιόντων.

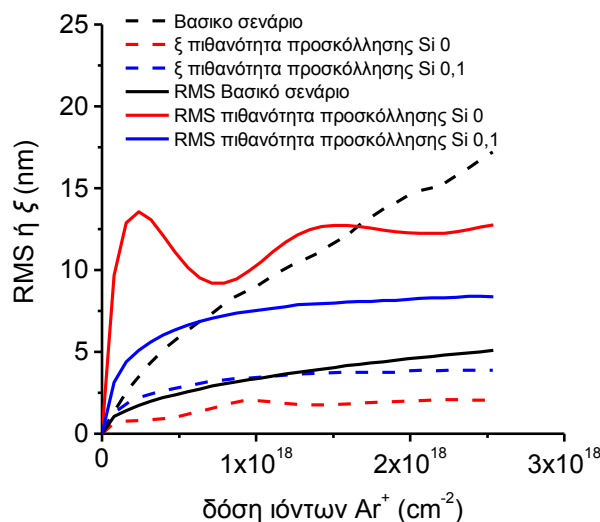


Σχήμα 81: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσεως της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για πιθανότητα προσκόλλησης των ατόμων Si να είναι ίση με 0 (σενάριο 15 του Πίνακα 11) και 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το αρχικό σενάριο (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 4-11 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων της επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 όταν η πιθανότητα επαναπόθεσης των ατόμων Si είναι 0 και 0,1. Η εξέλιξη των στατιστικών παραμέτρων του Πίνακα 18 συναρτήσεως της δόσης δίνεται στο Σχήμα 82.

Πίνακας 18: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων του υποστρώματος 0 (σενάριο 15 του Πίνακα 11) και 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
15	12,76	2,05	0,845
16	8,35	3,87	0,131



Σχήμα 82: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για πιθανότητα προσκόλλησης ατόμων υποστρώματος 0 (σενάριο 15 του Πίνακα 11) και 0,1 (σενάριο 16 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το αρχικό σενάριο (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Ιδιαίτερη εντύπωση προκαλεί το γεγονός ότι το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από άτομα Fe μεταβάλλεται σημαντικά στην περίπτωση που η πιθανότητα επαναπόθεσης των ατόμων Si μηδενιστεί. Η μεταβολή αυτή επηρεάζει και το μέσο ύψος της επιφάνειας καθώς αυξάνοντας το κλάσμα κάλυψης το μέσο ύψος μειώνεται κατ' απόλυτη τιμή.

Επίσης εντυπωσιακή μεταβολή υπάρχει και στην τιμή του μήκους συσχέτισης ξ το οποίο παρατηρείται να είναι μικρότερο της τιμής της RMS τραχύτητας. Οι δομές (λόφοι) που κατασκευάζονται υπό αυτές τις συνθήκες χαρακτηρίζονται συνεπώς από ένα πολύ περιορισμένο πλάτος.

Η RMS τραχύτητα παρουσιάζει έντονο ενδιαφέρον καθώς στην περίπτωση μηδενισμού της πιθανότητας επαναπόθεσης των ατόμων Si η εξέλιξη της παρουσιάζει ταλάντωση. Διερευνώντας την συμπεριφορά αυτή διαπιστώνεται ότι και το κλάσμα κάλυψης ακολουθεί όμοια εξέλιξη, συνεπώς αναμένεται να υπάρχει κάποια σύνδεση μεταξύ των δύο τιμών.

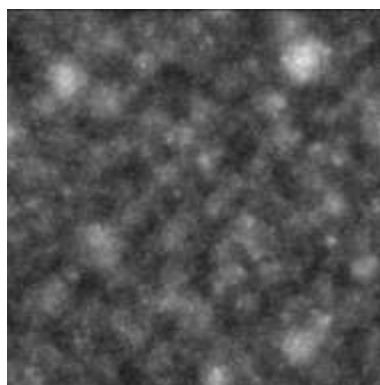
Όσον αφορά την οργάνωση των δομών σε μοτίβο όμοιο με αυτό της πειραματικής διάταξης των Zhang et al σημειώνεται το εξής. **Όταν η πιθανότητα επαναπόθεσης των ατόμων Si παίρνει την τιμή 0,1 ή 0 η οργάνωση καταστρέφεται και δεν σχηματίζεται κάποιο μοτίβο.**

4.2.7 Επίδραση του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων

Στο βασικό σενάριο, η πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων Ar^+ στο υπόστρωμα (άτομα Si) και στους παρεμποδιστές (άτομα Fe) εξαρτάται από την γωνία υπό την οποία γίνεται η πρόσκρουση του ιόντος στο άτομο της επιφάνειας. Η εξάρτηση αυτή προσδιορίζεται με την χρήση του κώδικα SRIM και παρουσιάζεται στην παράγραφο 3.2. Στην παρούσα παράγραφο εξετάζεται το ενδεχόμενο η πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων στην επιφάνεια Si και στα άτομα Fe να είναι σταθερή ίση με 1 ανεξάρτητα της γωνίας υπό την οποία γίνεται η πρόσκρουση. Με αυτή την προσέγγιση εκμηδενίζεται ο μηχανισμός ανάκλασης των ιόντων. Οι υπόλοιπες παράμετροι και μηχανισμοί παίρνουν τιμές σύμφωνα με το βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Στο Σχήμα 83 δίνεται η κάτοψη της επιφάνειας Si σε τρεις διαφορετικές δόσεις όταν απενεργοποιείται ο μηχανισμός ανάκλασης των ιόντων καθώς και τα PSD των επιφανειών αυτών (μέσος όρος 3 προσομοιώσεων).

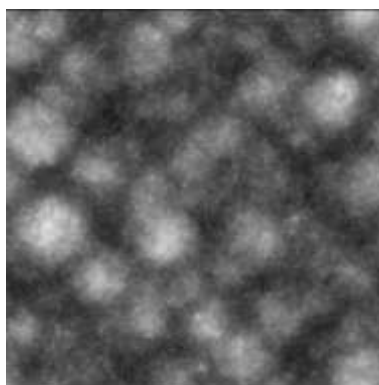
Τα αποτελέσματα που φαίνονται στα PSD [Σχήματα 83(δ) και 83(ε)] είναι ενθαρρυντικά καθώς υπάρχουν κορυφές οι οποίες πλησιάζουν τις μετρήσεις των Zhang et al.[Σχήμα 54(e)]. Ειδικότερα, στο Σχήμα 83(δ) και σε γωνία 56° ως προς τον άξονα x' , η περίοδος (μήκος κύματος) είναι 71 nm και η παράμετρος οργάνωσης είναι $\omega=2,294$. Στη γωνία των 135° η περίοδος γίνεται 61 nm το ω γίνεται 1,758. Επίσης, το Σχήμα 83(ε) στις 56° δίνει περίοδο 71 nm και λόγο $\omega=1.950$. Η περίοδος στις μετρήσεις των Zhang et al. είναι ~ 60 nm και οι κορυφές στο PSD διαφέρουν 90° . Στο παρόν σενάριο η διαφορά των κορυφών είναι $\sim 80^\circ$.

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/cm²



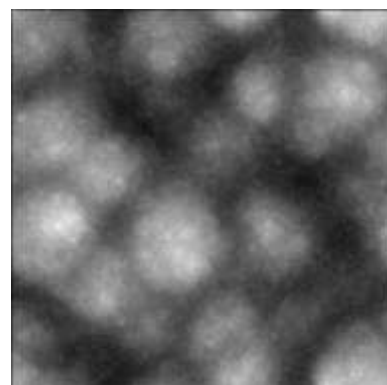
(α)

$1,25e+18$ ιόντα/cm²

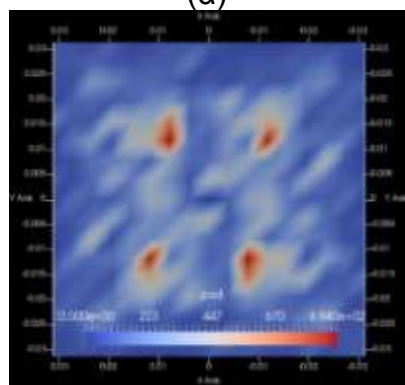


(β)

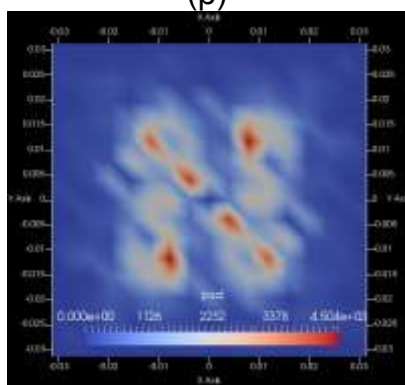
$2,5e+18$ ιόντα/cm²



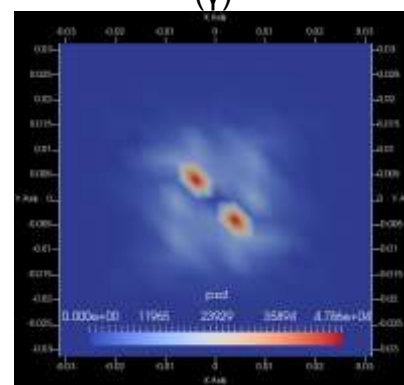
(γ)



(δ)



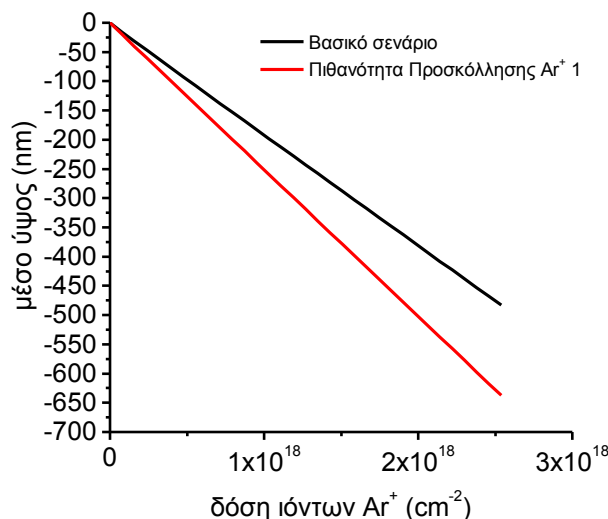
(ε)



(στ)

Σχήμα 83: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ , (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων (σενάριο 17 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος του υποστρώματος Si που εγχαράσσεται είναι $637 \pm 9,75$ nm και το κλάσμα κάλυψης παραμένει σταθερό συναρτήσει της δόσης, ίσο με **0,047**. Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης σε σύγκριση με το μέσο ύψος του βασικού σεναρίου.

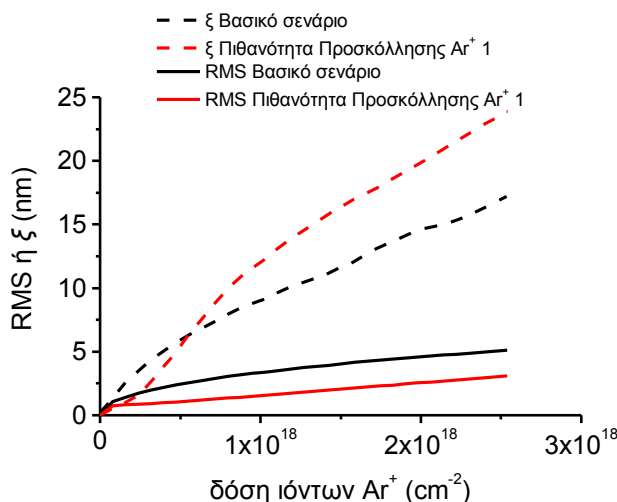


Σχήμα 84: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων (σενάριο 17 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το βασικό σενάριο (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 19 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων της επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm² όταν είναι απενεργοποιημένος ο μηχανισμός ανάκλασης των ιόντων. Η εξέλιξη των στατιστικών παραμέτρων του Πίνακα 19 συναρτήσει της δόσης δίνεται στο Σχήμα 85.

Πίνακας 19 : Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων (σενάριο 17 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
17	3,08	23,93	0,047



Σχήμα 85: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων (σενάριο 17 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το βασικό σενάριο (βλέπε 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Βάσει του Σχήματος 85 και του Πίνακα 19 διακρίνεται ότι η απενεργοποίηση του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων οδηγεί σε χαμηλότερη τιμή RMS τραχύτητας και υψηλότερη τιμή μήκους συσχέτισης ξ συγκριτικά με τα αποτελέσματα του βασικού σεναρίου (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Το αποτέλεσμα αυτό είναι πιο κοντά από τα υπόλοιπα σενάρια στις μετρήσεις των Zhang et al.: Η μέγιστη υψομετρική διαφορά στις μετρήσεις των Zhang et al. είναι 10 nm και οι δομές (τελείες) έχουν μέσο πάχος ~ 60 nm. Στο παρόν σενάριο η μέγιστη υψομετρική διαφορά είναι $9,75 \times 2 = 19$ nm (βλέπε μέσο ύψος της επιφάνειας) και το πλάτος των δομών είναι κατά μέσο όρο $2\xi = 2 \times 23,93 = 47,86$ nm.

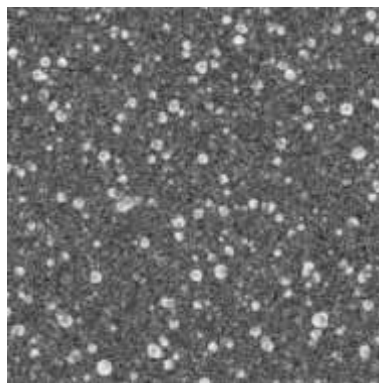
4.2.8 Συνδυαστική επίδραση των μηχανισμών επαναπόθεσης των προϊόντων εγχάραξης και του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων

Στις παραγράφους 4.2.6 και 4.2.7 εξετάζονται μεμονωμένα, η απενεργοποίηση του μηχανισμού επαναπόθεσης ατόμων υποστρώματος (Si) και η απενεργοποίηση του μηχανισμού ανάκλασης ιόντων (Ar^+). Στην παρούσα παράγραφο εξετάζεται το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης και των δύο μηχανισμών. Όλες οι υπόλοιπες παράμετροι και μηχανισμοί παίρνουν τιμές από το βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Στο Σχήμα 86 δίνεται η κάτοψη της επιφάνειας Si σε τρεις διαφορετικές δόσεις όταν είναι ταυτόχρονα απενεργοποιημένοι ο δύο παραπάνω μηχανισμοί.

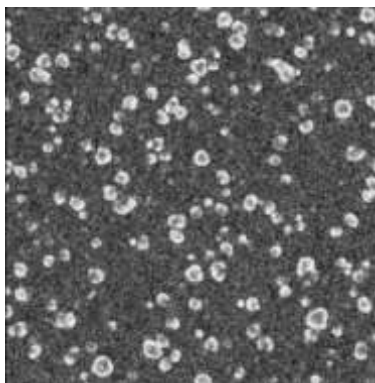
Δόση: $0,625 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²

$1,25 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²

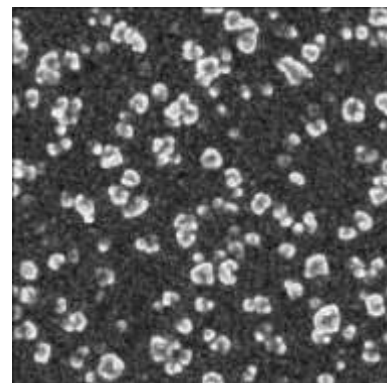
$2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²



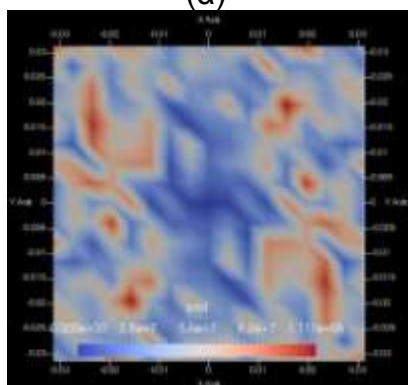
(α)



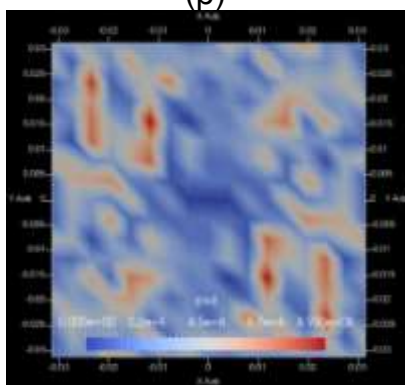
(β)



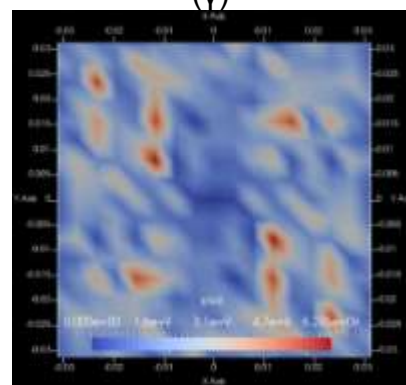
(γ)



(δ)



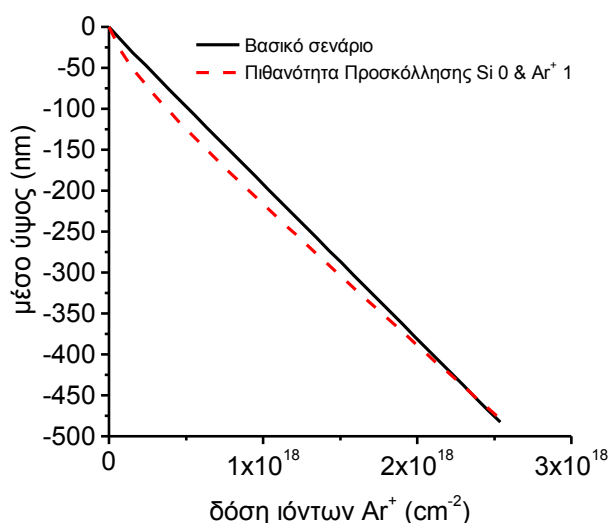
(ε)



(στ)

Σχήμα 86: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺, (α, δ) $0,625 \times 10^{18}$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25 \times 10^{18}$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης διακοπής του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του Si (σενάριο 18 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος του υποστρώματος Si που εγχάρασσεται είναι 478 ± 248 nm και το κλάσμα κάλυψης παραμένει σταθερό συναρτήσει της δόσης ίσο με **0,096**. Ουσιαστικά οι δομές που αναπτύσσονται είναι κολόνες σε ακανόνιστη διάταξη και ακανόνιστου σχήματος. Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης σε σύγκριση με το βασικό σενάριο.



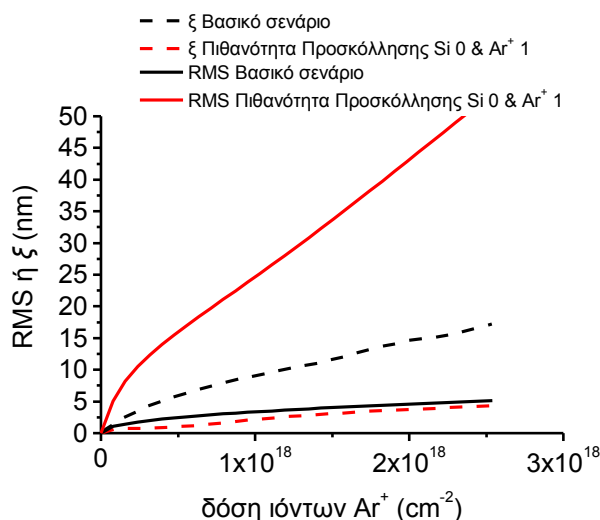
Σχήμα 87: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο

ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του Si (σενάριο 18 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το βασικό σενάριο (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 20 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων της επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm² όταν είναι απενεργοποιημένοι ο μηχανισμός επανατοποθέτησης των ατόμων Si και ο μηχανισμός ανάκλασης των ιόντων Ar⁺. Η εξέλιξη των στατιστικών παραμέτρων του Πίνακα 20 συναρτήσει της δόσης δίνεται στο Σχήμα 88.

Πίνακας 20: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του υποστρώματος (σενάριο 18 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
18	53,62	4,33	0,096



Σχήμα 88: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων και του μηχανισμού επανατοποθέτησης του υποστρώματος (σενάριο 18 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το βασικό σενάριο (βλέπε σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Αξίζει να σημειωθεί ότι η **συνδυαστική απενεργοποίηση του μηχανισμού επανατοποθέτησης των ατόμων της επιφάνειας και του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων οδηγεί σε επιφάνεια με πολύ ψηλές δομές αλλά καμία οργάνωση. Επίσης, οι σχηματιζόμενες δομές φαίνεται να σχηματίζονται σε σχετικά απομακρυσμένες μεταξύ τους θέσεις.** Το Σχήμα 88 καταδεικνύει επίσης ότι η RMS τραχύτητας εξελίσσεται έτσι ώστε να παίρνει τιμές μεγαλύτερες από τις τιμές που παίρνει το μήκος συσχέτισης ξ .

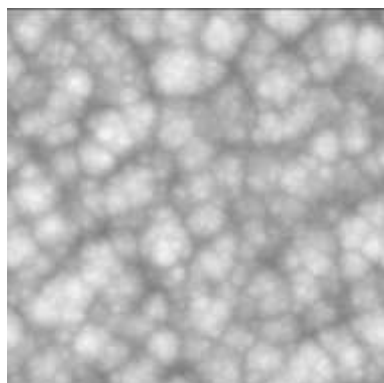
4.2.9 Επίδραση του κλάσματος των παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή

Στις παραγράφους 4.2.4 έως και 4.2.8 εξετάστηκαν μεταβολές σε μηχανισμούς που αφορούν την αλληλεπίδραση αέριας φάσης - επιφάνειας. Στην παρούσα παράγραφο εξετάζεται η επίδραση που επιφέρει η μεταβολή του μείγματος της αέριας φάσης. Ειδικότερα, εξετάζεται η επίδραση που ασκεί η αύξηση του κλάσματος κατά 50% των παρεμποδιστών (άτομα Fe) της αέριας φάσης στη μορφολογία της επιφάνειας. Οι υπόλοιπες παράμετροι του σεναρίου παίρνουν τιμές από το βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11).

Η μελέτη των Zhang et al. σημειώνει ότι με την απομάκρυνση ή την προσέγγιση των στόχων Fe στην επιφάνεια αλλάζει η συγκέντρωση των ατόμων Fe στην επιφάνεια Si. Τα αποτελέσματα της μεταβολής της συγκέντρωσης του Fe στην επιφάνεια φαίνονται στο Σχήμα 54. Διακρίνεται ότι, στην υψηλή συγκέντρωση ατόμων Fe ($2,7e+15$ Fe/cm²) οι δομές που τελικά σχηματίζονται εμφανίζουν κυματοειδή μορφή και παύουν να έχουν την μορφή τελειών. Επίσης, το ύψος των δομών σε όλες τις συγκεντρώσεις μεταβάλλεται ελάχιστα.

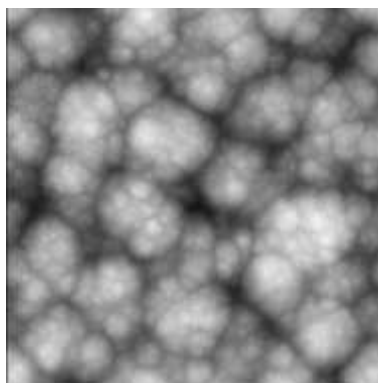
Η μετακίνηση των στόχων, εκφράζεται στο μοντέλο εξέλιξης επιφάνειας με την μεταβολή της σύνθεσης του μείγματος της αέριας φάσης. Στο Σχήμα 89 δίνεται η κάτοψη της επιφάνειας Si σε τρεις διαφορετικές δόσεις όταν στο κλάσμα αέριας φάσης των συμμετεχόντων στοιχείων ενισχυθεί το πλήθος των ατόμων Fe κατά 50%.

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/cm²



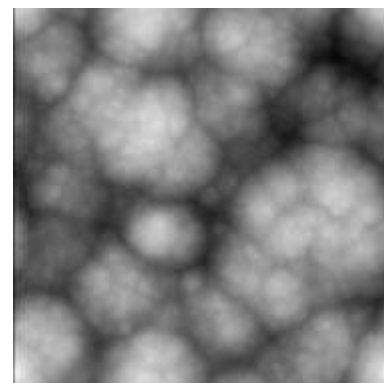
(α)

$1,25e+18$ ιόντα/cm²

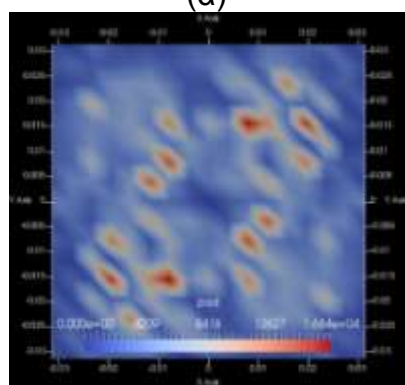


(β)

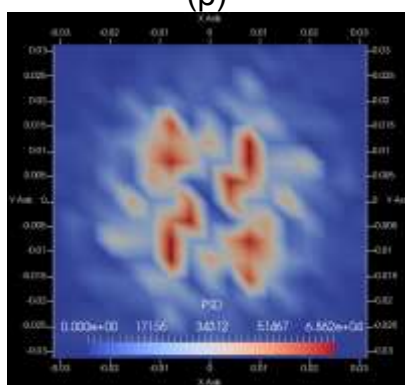
$2,5e+18$ ιόντα/cm²



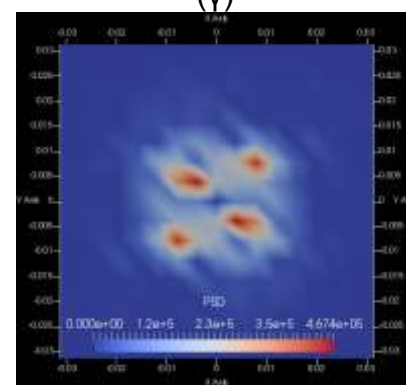
(γ)



(δ)



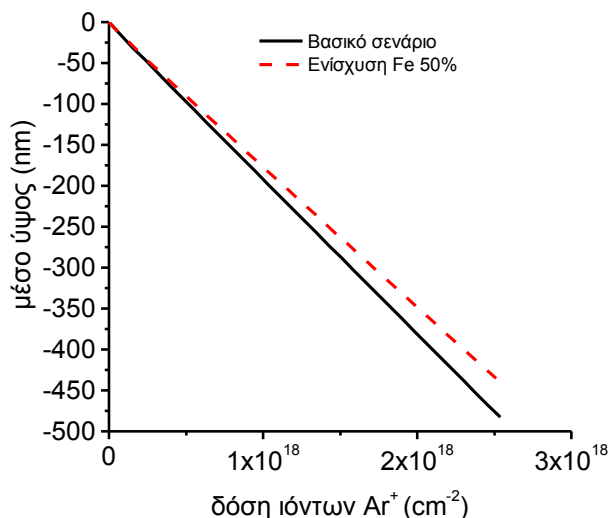
(ε)



(στ)

Σχήμα 89 : Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺, (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50% της αρχικής τιμής (σενάριο 19 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος του υποστρώματος που εγχарάσσεται είναι $443 \pm 35,2$ nm και το κλάσμα κάλυψης από παρεμποδιστές στην επιφάνεια παίρνει την τιμή **0,080**. Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης.

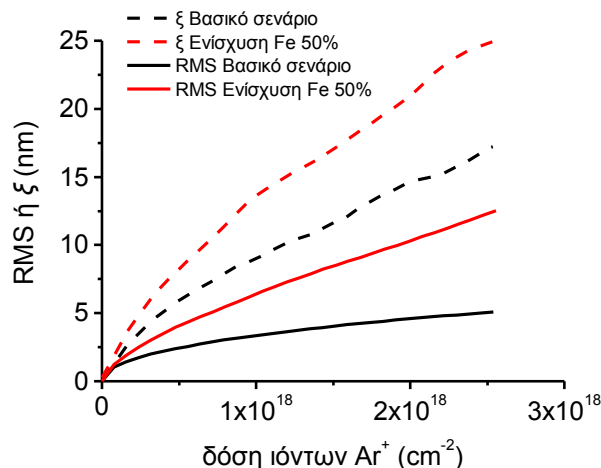


Σχήμα 90: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50% (σενάριο 19 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Στον Πίνακα 21 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων της επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm² όταν στο μείγμα αέριας φάσης τα άτομα Fe ενισχύονται κατά 50%. Η εξέλιξη των στατιστικών παραμέτρων του Πίνακα 21 συναρτήσει της δόσης δίνεται στο Σχήμα 91.

Πίνακας 21: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50% (σενάριο 19 του Πίνακα 11).

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
19	12,53	25,03	0,080



Σχήμα 91: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50% (σενάριο 19 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με το βασικό σενάριο (σενάριο 09 του Πίνακα 11). Οι τιμές αποτελούν το μέσο όρο 3 προσομοιώσεων.

Από τα αποτελέσματα της διερεύνησης του κλάσματος αέριας φάσης παρατηρούνται τα εξής. **Η αύξηση του κλάσματος των παρεμποδιστών στην αέρια φάση αυξάνει το μέγεθος των δομών (τελειών) που σχηματίζονται.** Επίσης, όπως είναι αναμενόμενο η αύξηση του κλάσματος των Fe στην αέρια φάση ελαττώνει το ρυθμό εγχάραξης της επιφάνειας. Στο παρών σενάριο γίνεται αντιληπτό από το Σχήμα 91 ότι το μήκος συσχέτισης ξ και η RMS τραχύτητα παρουσιάζουν όμοια μεταβολή σε σχέση με το βασικό σενάριο.

Όσον αφορά την οργάνωση, στο Σχήμα 89(στ) η περίοδος είναι 90,7 nm στην κατεύθυνση των 45° ως προς τον άξονα x' με παράμετρο οργάνωσης $\omega=2.167$. Στην κατεύθυνση των 135° η περίοδος γίνεται 176,8 nm και ο λόγος ω παίρνει την τιμή 0,741.

4.3 Περαιτέρω διερεύνηση των μηχανισμών που ευνοούν την οργάνωση

Στην παράγραφο 4.2 παρουσιάστηκαν οι επιδράσεις που επιφέρουν κάποιες από τις παραμέτρους στην μορφολογία της εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Από αυτή την παραμετρική μελέτη, τα αποτελέσματα της παραγράφου 4.2.7 είναι αυτά που πλησιάζουν περισσότερο τις μετρήσεις των Zhang et al. για την οργάνωση στις επιφάνειες Si. Στην παράγραφο 4.2.7 εξετάζεται η επίδραση του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων. Αν τα ιόντα δεν ανακλώνται στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια δηλαδή η πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων είναι 1, τότε οι επιφάνειες που προκύπτουν από την προσομοίωση προσεγγίζουν τα πειραματικά αποτελέσματα των Zhang et al. σε επίπεδο οργάνωσης (βλέπε Σχήμα 83). Με βάση αυτό το θετικό αποτέλεσμα, επιχειρείται η περεταίρω διερεύνηση των μηχανισμών που ευνοούν την οργάνωση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια διατηρώντας σταθερή την πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων στην επιφάνεια ίση με 1.

Η σταθεροποίηση της παραμέτρου του συντελεστή προσκόλλησης στην τιμή 1 μπορεί να ερμηνευθεί ως εξής. Στην παράγραφο 3.2.1 σημειώνεται ότι ως συντελεστής προσκόλλησης υπολογίζεται ο λόγος των οπισθοσκεδαζόμενων ατόμων προς τα προσπίπτοντα άτομα. Στην περίπτωση των ιόντων της παρούσας εργασίας λαμβάνεται

αρχικά η παραδοχή πως τα οπισθοσκεδαζόμενα ιόντα δεν επιδρούν στην επιφάνεια και συνεπώς δεν διαμορφώνουν την απόδοση εγχάραξης μαζί με τα απομένοντα ιόντα σε αυτήν. Εάν λάβουμε υπόψη το γεγονός ότι τα ιόντα φτάνουν στην επιφάνεια με ενέργεια 1000 eV και η ενέργεια επιφανειακού δεσμού του Si και του Fe είναι μερικά eV τότε είναι αρκετά ασφαλές να ειπωθεί πως υπάρχουν ιόντα τα οποία φτάνουν στην επιφάνεια, εγχάρασσουν και διατηρούν αρκετή ενέργεια ώστε να μπορέσουν να διαφύγουν στη συνέχεια από αυτήν και τελικά να καταμετρηθούν ως οπισθοσκεδαζόντα. Ωστόσο, έχουν προκαλέσει εγχάραξη όπως τα ιόντα που προσκολλώνται στην εγχαρασόμενη επιφάνεια.

Το σενάριο προσομοίωσης διαμορφώνεται τελικά όπως στον Πίνακα 22 που ακολουθεί. Επιπλέον αλλαγές στο σενάριο αυτό διενεργούνται στις επόμενες παραγράφους με σκοπό την όσο το δυνατόν καλύτερη προσέγγιση των επιφανειών που παρήγαγαν οι Zhang et al.

Πίνακας 22 Τιμές παραμέτρων βελτιωμένου βασικού σεναρίου προσομοίωσης (σενάριο 17 του Πίνακα 11) για την αναζήτηση των μηχανισμών που αναπτύσσουν επιφάνειες όμοιες με αυτές των πειραμάτων των Zhang et al [15].

Κλάσμα σωματιδίων στην προσπίπτουσα ροή	
Ιόντα	0.934134
Παρεμποδιστές	0.065866
Υπόστρωμα	0
Αέρια φάση (θέση, κατεύθυνση, ενέργεια)	
<u>Ιόντα:</u>	
Κατανομή σημείων γέννησης	Ισοτροπική
Κατανομή Κατευθύνσεων	Κανονική κατανομή ($1^0 \sigma$)
Κατανομή ενέργειας	Σταθερή = 1keV
<u>Παρεμποδιστές:</u>	
Κατανομή σημείων γέννησης	Ισοτροπική
Κατανομή Κατευθύνσεων	Αναλυτικός προσδιορισμός ελεγχόμενος μέσω αρχείου
Κατανομή ενέργειας	Σταθερή = 16eV
Μηχανισμός Ανάκλασης (Συντελεστής προσκόλλησης)	
Ιόν σε παρεμποδιστή	Σταθερός = 1
Ιόν σε υπόστρωμα	Σταθερός = 1
Παρεμποδιστή σε παρεμποδιστή	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (σχέση 3-12)
Παρεμποδιστής σε	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (σχέση

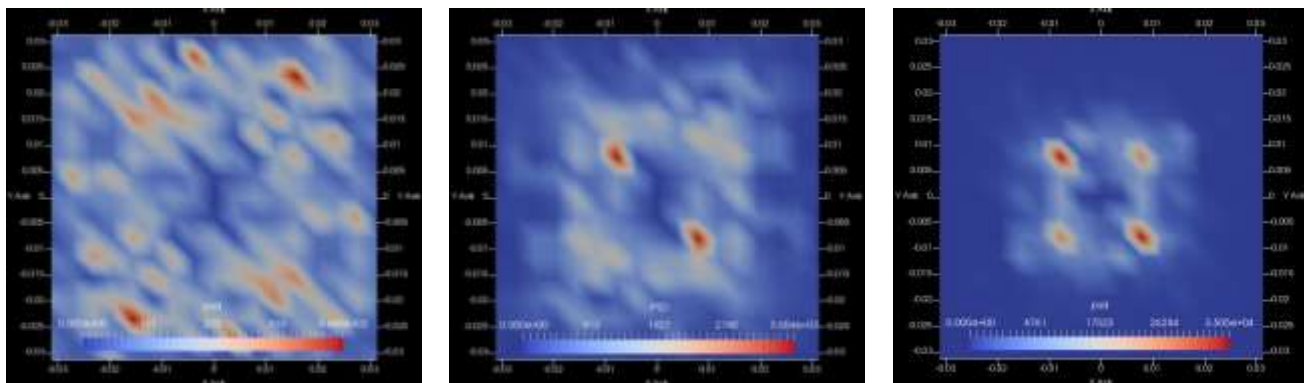
Υπόστρωμα	3-13)
Υπόστρωμα σε υπόστρωμα	Σταθερός = 1
Επιφανειακή αλληλεπίδραση (Απόδοση εγχάραξης)	
Ιόν σε παρεμποδιστή	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (σχέση 3-2)
Ιόν σε υπόστρωμα	Γωνιακά εξαρτώμενος, υπολογισμός μέσω SRIM (σχέση 3-4)
Παρεμποδιστή σε παρεμποδιστή	Σταθερός = -1
Παρεμποδιστής σε υπόστρωμα	Σταθερός = -1
Υπόστρωμα σε υπόστρωμα	-1
Μηχανισμός επανατοποθέτησης	
Ιόντων	Ενεργός
Παρεμποδιστών	Ενεργός
Υποστρώματος	Ενεργός

Η εγχαρασόμενη επιφάνεια συναρτήσεως της δόσης των ιόντων καθώς και οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων χαρακτηρισμού της επιφάνειας για το βελτιωμένο βασικό σενάριο παρουσιάζονται στην παράγραφο 4.2.7.

4.3.1 Εξάλειψη της επιλεκτικότητας εγχάραξης των παρεμποδιστών σε σχέση με το υπόστρωμα και αύξηση του κλάσματος των παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή

Στο πλαίσιο διερεύνησης του βέλτιστου – με κριτήριο την παραγόμενη οργάνωση στην επιφάνεια Si - σεναρίου προσομοίωσης εξετάζεται το ενδεχόμενο η ιοντική δέσμη να παρουσιάζει μηδενική επιλεκτικότητα εγχάραξης ατόμων Si και ατόμων Fe. Η απόδοση εγχάραξης των ατόμων Fe επιλέγεται να είναι ίδια με την απόδοση εγχάραξης του Si λόγω της σύστασης της εγχαρασόμενης επιφάνειας η οποία κατά ένα ποσοστό μεγαλύτερο του 90% αποτελείται από Si.

Επίσης, η επιλογή επιλεκτικότητας ίση με 1 εκφράζει κατά μία έννοια ότι η επιφάνεια ομογενοποιείται ως προς τη σύσταση της. Οι Zhang et al. σημειώνουν [15] ότι στα αρχικά στάδια της εγχάραξης με ιοντική δέσμη δημιουργείται ένα στρώμα άμορφου υλικού αποτελούμενο από Si και Fe. Στη συνέχεια, λόγω της ιοντικά υποβοηθούμενης αλλαγής φάσης του υλικού σχηματίζονται τοπικές, σε νανοκλίμακα, συγκεντρώσεις Fe οι οποίες μεταβάλουν τοπικά την απόδοση εγχάραξης οδηγώντας τελικά στην ανάπτυξη τελειών. Σημειώνεται ότι, στο άμορφο υλικό εμπεριέχονται άτομα Fe όχι μόνο στην επιφάνεια αλλά και σε κάποιο βάθος στο εσωτερικό του υλικού σύμφωνα με τους Zhang et al.



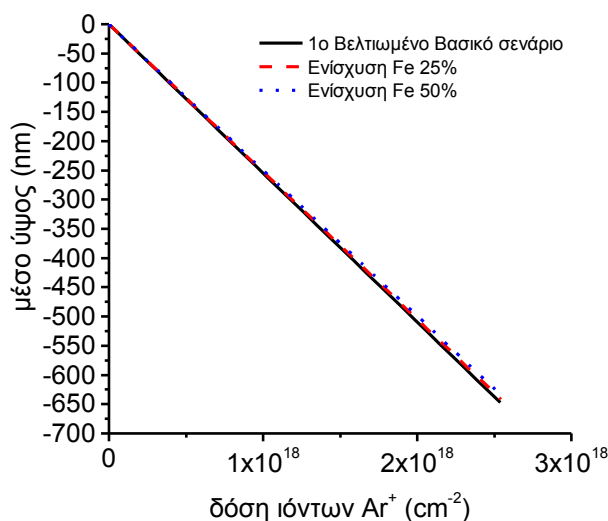
(δ)

(ε)

(στ)

Σχήμα 94 Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ , (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2 , (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/ cm^2 και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 , υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων με ενίσχυση του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50% της αρχικής τιμής (σενάριο 22 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος του υποστρώματος που εγχαράχθηκε για δόση $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 διαμορφώνεται στα 642 ± 6 nm και 637 ± 9 nm αντίστοιχα. Όπως γίνεται αντιληπτό, η ενίσχυση των κλάσματος των παρεμποδιστών οδηγεί στο σχηματισμό δομών (τελείες) οι οποίες φαίνεται πως διαθέτουν οργάνωση. Σημειώνεται ότι, το κλάσμα κάλυψης την επιφάνειας από παρεμποδιστές λαμβάνει τις τιμές **0,048** και **0,058** αντίστοιχα. Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της εγχαρασσομένης επιφάνειας συναρτήσει της δόσης.



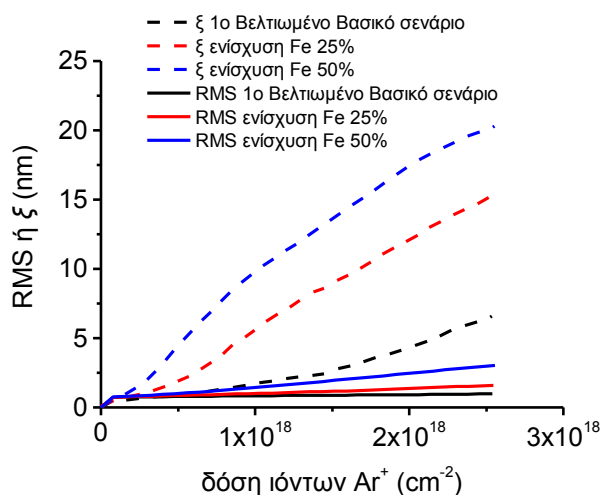
Σχήμα 95: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων (σενάριο 20 του Πίνακα 11) σε σύγκριση με ενίσχυση του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 25% (σενάριο 21 του Πίνακα 11) και 50% (σενάριο 22 του Πίνακα 11).

Στον Πίνακα 23 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων της επιφάνειας για δόση $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 .

Πίνακας 23: Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων (σενάριο 20 του Πίνακα 11) και ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 25% (σενάριο 21 του Πίνακα 11) και κατά 50% (σενάριο 22 του Πίνακα 11).

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	RMS (nm)	ξ (nm)	κλάσμα κάλυψης
20	0,97	6,59	0,038
21	1,59	15,34	0,048
22	3,02	20,30	0,058

Η εξέλιξη των στατιστικών παραμέτρων της RMS τραχύτητας και του μήκους συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης δίνονται στο Σχήμα 96.



Σχήμα 96: RMS τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης και επιλεκτικότητας ως προς την απόδοση εγχάραξης των ιόντων (σενάριο 20 του Πίνακα 11) και ενίσχυσης του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 25% (σενάριο 21 του Πίνακα 11) και κατά 50% (σενάριο 22 του Πίνακα 11).

Από τα διαγράμματα PSD των Σχημάτων 4-41(ε,στ) και 4-42(ε,στ) γίνεται αντιληπτό πως οι επιφάνειες αναπτύσσουν οργάνωση καθώς για συγκεκριμένες κατευθύνσεις του διαγράμματος PSD εμφανίζονται κορυφές. Στον Πίνακα 24 δίνεται η περίοδος (το μήκος κύματος) της οργάνωσης που παρατηρείται στις επιφάνειες έκθεσης σε $1,25e+18$ και $2,5e+18$ ιόντα / cm^2 για τα σενάρια 21 και 22 του Πίνακα 11 και η τιμή του λόγου ω . Επίσης, σημειώνεται η κατεύθυνση στην οποία παρατηρείται η ανάπτυξη της οργάνωσης. Σημειώνεται ότι όσο πιο μεγάλη είναι η τιμή του ω τόσο αυστηρότερη οργάνωση παρουσιάζει η επιφάνεια.

Πίνακας 24 κατεύθυνση οργάνωσης και μήκος κύματος περιόδου επιφάνειας Si για τα σενάρια 21 και 22 του Πίνακα 11

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	Προσανατολισμός (μοίρες)	Περίοδος (μήκος κύματος) για δόση $1,25e+18$ ιόντα/cm ² (nm)	ω	Προσανατολισμός (μοίρες)	Περίοδος (μήκος κύματος) για δόση $2,5e+18$ ιόντα/cm ² (nm)	ω
21	45 ⁰	59,9	3,933	45 ⁰	59,9	4,538
21	114 ⁰	65,9	1,486	135 ⁰	90,6	1,300
22	-	-	-	45 ⁰	90,7	2,600
22	135 ⁰	90,7	1,500	135 ⁰	90,7	1,625

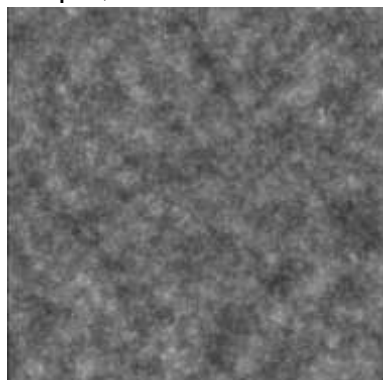
Ο ισχυρισμός της ύπαρξης μιας ομογενοποιημένης άμορφης επιφάνειας FeSi_x που δίνεται στην αρχή της παραγράφου φαίνεται να οδηγεί σε οργάνωση. Σημειώνεται ότι στο διαγράμματα PSD (Σχήμα 94(στ)) απουσιάζει η κορυφή γύρω από τη θέση (0,0) των Zhang et al. (Σχήμα 54(d-f)). Η απουσία αυτή ενδέχεται να οφείλεται στη μικρή διάσταση της επιφάνειας προσομοίωσης. Λόγω της μικρής διάστασης της επιφάνειας προσομοίωσης το διάγραμμα PSD παρουσιάζει μικρή ευκρίνεια (βλέπε § 4.2.2).

4.3.2 Εξάλειψη της επιλεκτικότητας των ιόντων και της ανάκλασης των παρεμποδιστών

Στο πλαίσιο διερεύνησης επιπλέον βελτίωσης της οργάνωσης της επιφάνειας εξετάζεται το ενδεχόμενο η πιθανότητα προσκόλλησης των Fe να είναι ίση με 1. Η αλλαγή αυτή βασίζεται στην υπόθεση πως η έλλειψη ανακατανομής των Fe λόγω επανεκπομπής τους θα επιφέρει βελτίωση στην οργάνωση της μορφολογίας στην επιφάνεια καθώς τα άτομα Fe θα μένουν στις θέσεις όπου έγινε η πρώτη πρόσκρουση στην επιφάνεια.

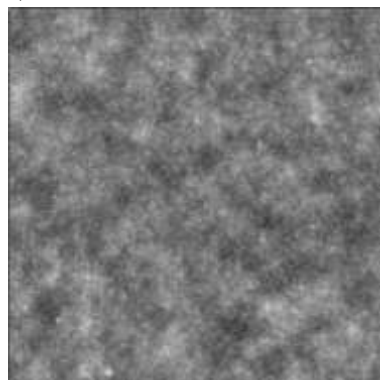
Στο Σχήμα 97 φαίνεται η επιφάνεια Si για διαφορετικές δόσεις ιόντων με απενεργοποιημένο το μηχανισμό ανάκλασης των ιόντων και το μηχανισμό επανεκπομπής των Fe ενώ η επιλεκτικότητα εγχάραξης των Fe σε σχέση με το υπόστρωμα είναι 1.

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/cm²



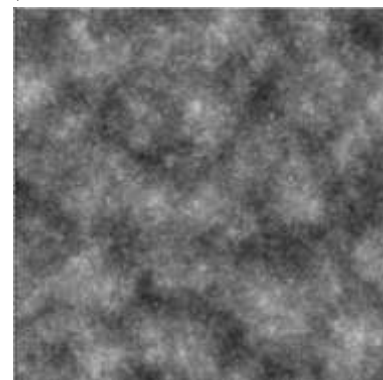
(α)

$1,25e+18$ ιόντα/cm²

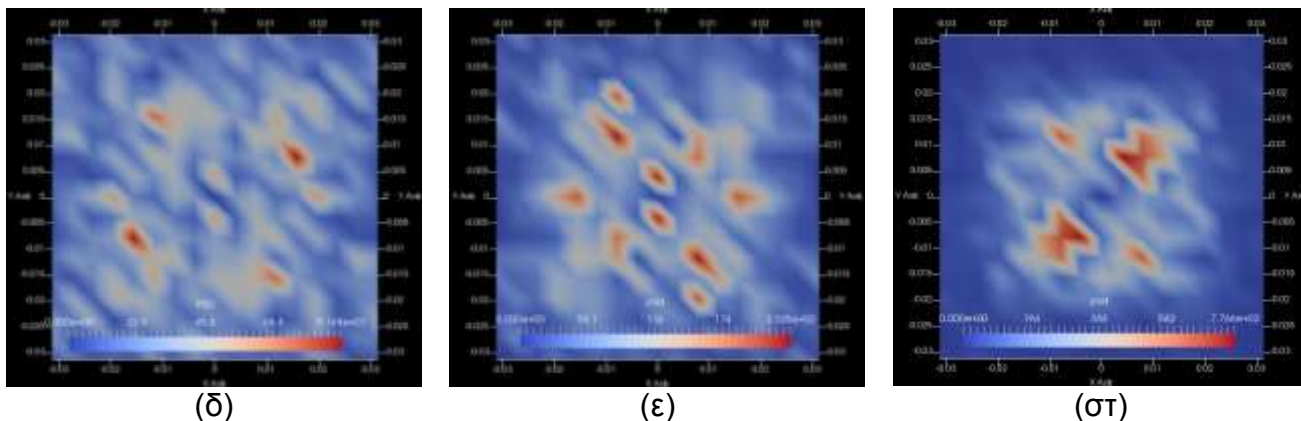


(β)

$2,5e+18$ ιόντα/cm²



(γ)



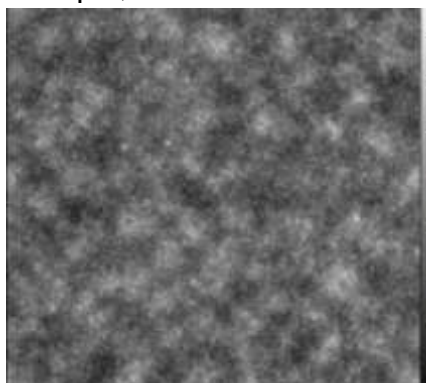
Σχήμα 97: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ , (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2 , (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/ cm^2 και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 , υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλαση ιόντων και παρεμποδιστών και επιλεκτικότητας των ιόντων ως προς την εγχάραξη (σενάριο 23 του Πίνακα 11).

Το μέσο πάχος του υποστρώματος που εγχάρασσεται για δόση $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 διαμορφώνεται στα 646 ± 3 nm. Εντυπωσιακό γεγονός είναι ότι αν και δεν φαίνεται να υπάρχουν σχηματισμένες δομές στην επιφάνεια τα διαγράμματα PSD φαίνεται να παρουσιάζουν οργάνωση. Το διάγραμμα PSD του Σχήματος 97 (στ) δείχνει πως υπάρχει κάποιο κύμα (περιοδικότητα) στην επιφάνεια. Η έλλειψη από την άλλη σχηματισμένων δομών οφείλεται ξεκάθαρα στην μικρή τιμή του κλάσματος κάλυψης Fe το οποίο είναι **0,039**.

Στα Σχήματα 98 και 99 φαίνεται η επιφάνεια Si για διαφορετικές δόσεις ιόντων με απενεργοποιημένο το μηχανισμό ανάκλασης των ιόντων, απενεργοποιημένο τον μηχανισμό επανεκπομπής των Fe, την επιλεκτικότητα εγχάραξης μεταξύ Fe και Si ίση με 1 και με αυξημένο κατά 25% (Σχήμα 98) και 50% (Σχήμα 99) το κλάσμα αέριας φάσης των Fe.

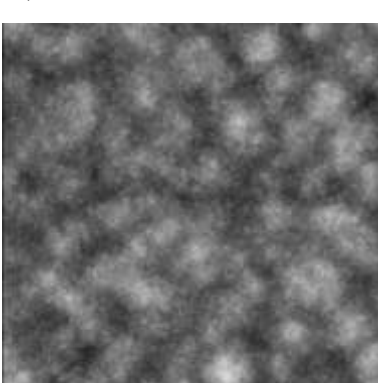
Η ενίσχυση των Fe μέσω του κλάσματος αέριας φάσης οδηγεί ξανά στο σχηματισμό δομών (τελείες) οι οποίες διαθέτουν οργάνωση.

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2



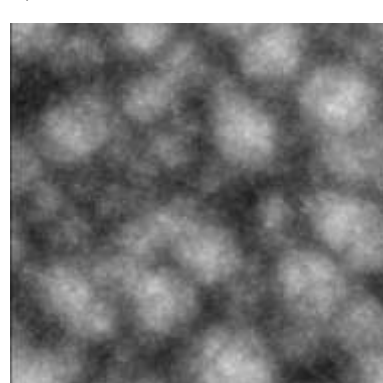
(α)

$1,25e+18$ ιόντα/ cm^2

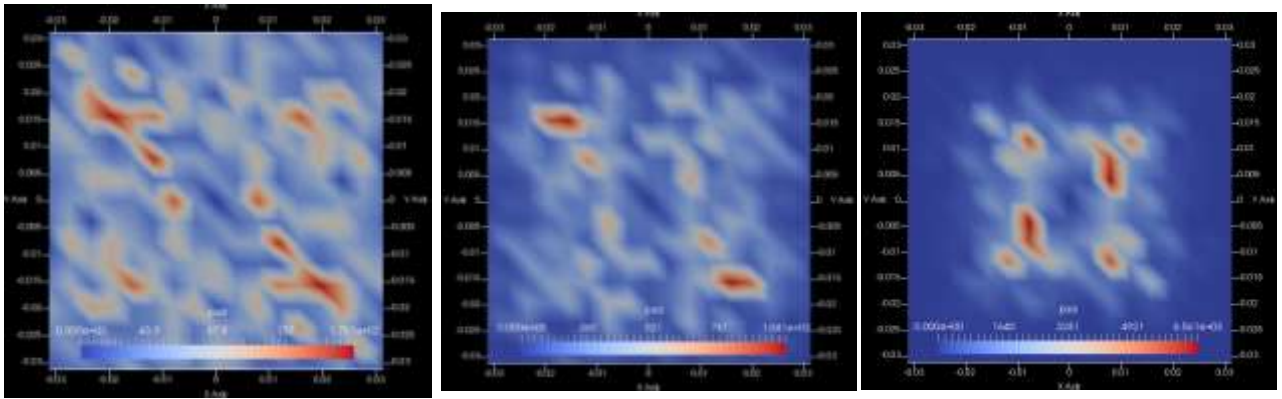


(β)

$2,5e+18$ ιόντα/ cm^2



(γ)



(δ)

(ε)

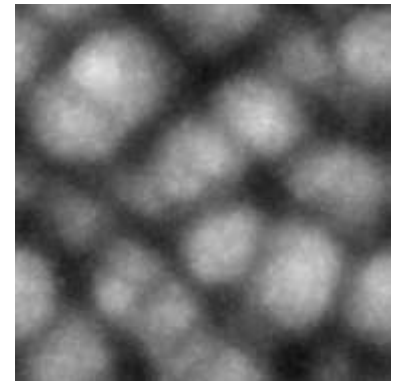
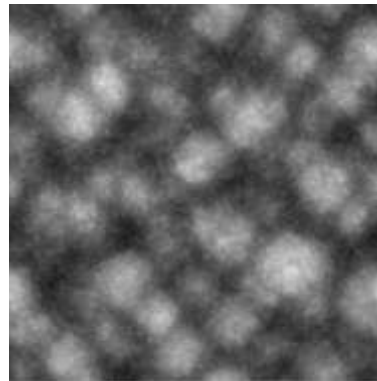
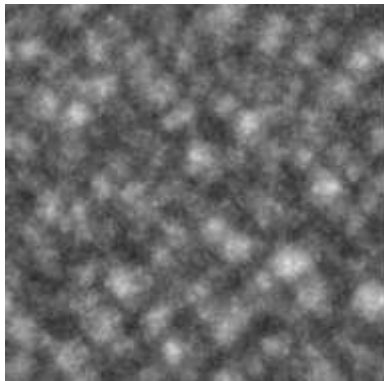
(στ)

Σχήμα 98 : Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ , (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2 , (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/ cm^2 και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 , υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων, των παρεμποδιστών και με επιλεκτικότητα εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1 με ενίσχυση του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 25% της αρχικής τιμής (σενάριο 24 του Πίνακα 11).

Δόση: $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2

$1,25e+18$ ιόντα/ cm^2

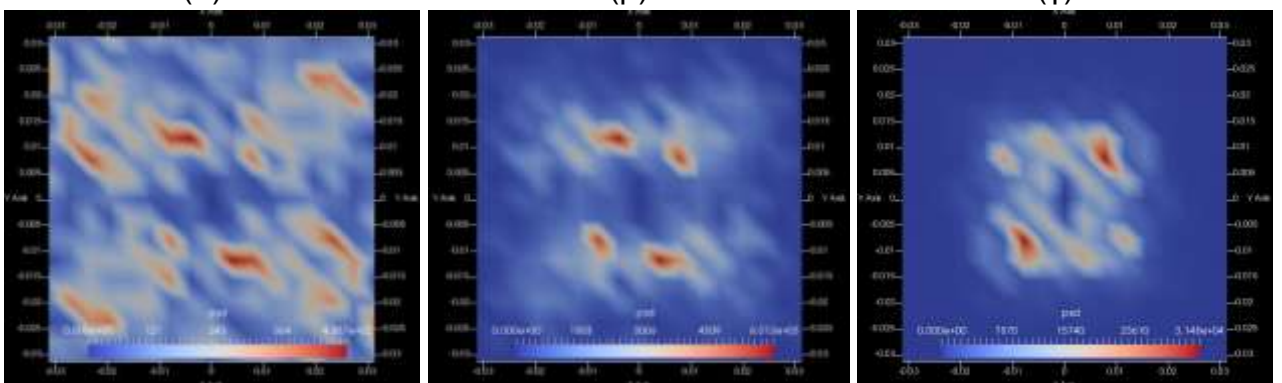
$2,5e+18$ ιόντα/ cm^2



(α)

(β)

(γ)



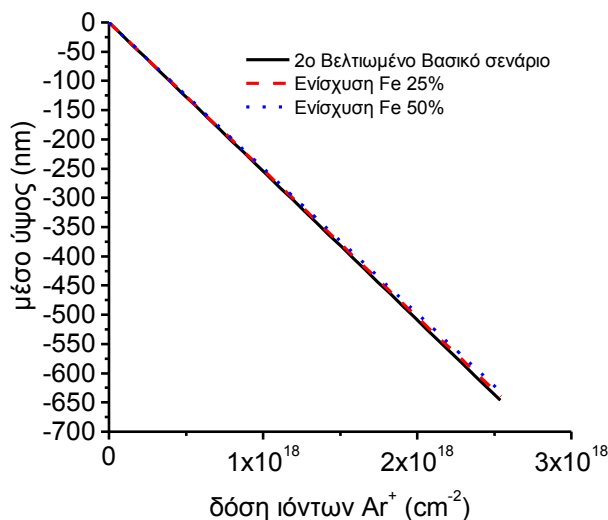
(δ)

(ε)

(στ)

Σχήμα 99: κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar^+ , (α, δ) $0,625e+18$ ιόντα/ cm^2 , (β, ε) $1,25e+18$ ιόντα/ cm^2 και (γ, στ) $2,5e+18$ ιόντα/ cm^2 , υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης των ιόντων, των παρεμποδιστών και με επιλεκτικότητα εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1 με ενίσχυση του κλάσματος αέριας φάσης των Fe κατά 50% της αρχικής τιμής (σενάριο 25 του Πίνακα 11).

Στο Σχήμα 100 Ακολουθεί η γραφική απεικόνιση του μέσου ύψους της εγχαρασσόμενης επιφάνειας συναρτήσει της δόσης.

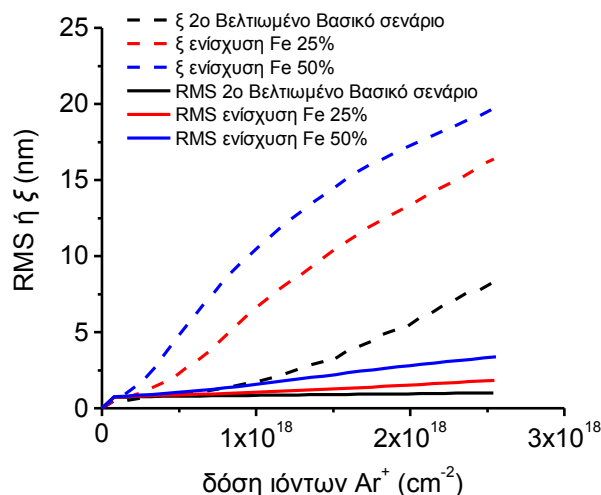


Σχήμα 100: Μέσο ύψος επιφάνειας Si συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar⁺ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης ιόντων και Fe και επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1. Σύγκριση μεταξύ βασικού κλάσματος αέριας φάσης Fe και ενίσχυσης αυτού κατά 25% και 50% (σενάρια 23,24 και 25 του Πίνακα 11)

Στον Πίνακα 25 δίνονται οι τιμές των στατιστικών παραμέτρων της επιφάνειας για δόση 2,5e+18 ιόντα/cm² και στο Σχήμα 101 η εξέλιξη τους συναρτήσει της δόσης.

Πίνακας 25 : Τιμές RMS τραχύτητας, μήκους συσχέτισης (ξ) και κλάσματος κάλυψης επιφάνειας Si για δόση 2,5e+18 ιόντα / cm² υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης ιόντων και παρεμποδιστών και επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1. Σύγκριση μεταξύ βασικού κλάσματος αέριας φάσης Fe και ενίσχυσης αυτού κατά 25% και 50% .Σενάρια 23, 24 και 25 του Πίνακα 11

Δείκτης σεναρίου	RMS	ξ	Κλάσμα κάλυψης
23	1,01	8,27	0,039
24	1,80	16,42	0,049
25	3,36	19,79	0,059



Σχήμα 101: RMS Τραχύτητα και μήκος συσχέτισης ξ συναρτήσει της δόσης ιόντων Ar^+ υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από τέσσερις στόχους τοποθετημένους όπως φαίνεται στο Σχήμα 53 για το ενδεχόμενο ταυτόχρονης απενεργοποίησης του μηχανισμού ανάκλασης ιόντων και παρεμποδιστών και επιλεκτικότητας εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1. Σύγκριση μεταξύ βασικού κλάσματος αέριας φάσης Fe και ενίσχυσης αυτού κατά 25% και 50%. Σενάρια 23, 24 και 25 του Πίνακα 11

Το σενάριο απενεργοποίησης της ανάκλασης των ιόντων και Fe σε συνδυασμό με την επιλεκτικότητα εγχάραξης (Fe και Si) ίση με 1 οδηγεί στο αποτέλεσμα ανάπτυξης οργάνωσης χωρίς την ευδιάκριτη ανάπτυξη δομών (βλέπε Σχήμα 97(στ)). Ενισχύοντας το κλάσμα των ατόμων Fe στην αέρια φάση οι κορυφές γίνονται ευδιάκριτες και διατηρούν ως ένα βαθμό την οργάνωση. Αξιοσημείωτο είναι ότι, η περεταίρω ενίσχυση των Fe δεν οδηγεί σε θεαματική βελτίωση της οργάνωσης. Στον Πίνακα 26 δίνονται για τα σενάρια 24 και 25 του Πίνακα 11 τα αποτελέσματα περιοδικής ανάλυσης που έγιναν σε ορισμένες κατευθύνσεις και δόσεις. Σημειώνονται η περίοδος (μήκος κύματος) της οργάνωσης που αναπτύσσεται στην επιφάνεια καθώς και η παράμετρος οργάνωσης ω .

Πίνακας 26 Κατεύθυνση οργάνωσης, περίοδος και παράμετρος οργάνωσης ω σε επιφάνεια Si για τα σενάρια 24 και 25 του Πίνακα 11.

Δείκτης σεναρίου (Πίνακας 11)	Προσανατολισμός (μοίρες)	Μήκος κύματος για δόση $1,25\text{e}+18$ ιόντα/ cm^2 (nm)	ω	Προσανατολισμός (μοίρες)	Μήκος κύματος για δόση $2,5\text{e}+18$ ιόντα/ cm^2 (nm)	ω
23				45^0	104,0	0,829
24	-	-	-	123^0	71,5	2,154
25	45^0	90,6	2,786	45^0	90,6	2,786
25	106^0	81,3	2,500	-	-	-

5 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα εργασία αναζητήθηκε ερμηνεία μέσω προσομοίωσης για την οργάνωση που παρατηρείται σε επιφάνειες Si κατά τη διάρκεια πειραμάτων ιονβολής με δέσμη ιόντων στα οποία συμβαίνει ταυτόχρονη απόθεση ατόμων Fe. Τα άτομα Fe δρουν ως παρεμποδιστές της εγχάραξης και προέρχονται από κατάλληλα τοποθετημένους στόχους γύρω από την εγχαρασόμενη επιφάνεια. **Τα εργαλεία που αναπτύχθηκαν και χρησιμοποιήθηκαν συνοψίζονται παρακάτω:**

α) Τροποποιήθηκε και επεκτάθηκε κατάλληλα διαθέσιμος κώδικας εξέλιξης μορφολογίας επιφανειών κατά την εγχάραξη με ταυτόχρονη απόθεση [35]. Μία από τις επεκτάσεις του κώδικα είναι η ανάπτυξη τάξης (class) για την αρχική κατανομή κατευθύνσεων και ενεργειών των σωματιδίων που συμμετέχουν στην εγχάραξη.

β) Υπολογίστηκε αριθμητικά με τη χρήση του COMSOL [50] και αναλυτικά η κατανομή των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια Si.

γ) Υπολογίστηκαν οι αποδόσεις εγχάραξης και οι πιθανότητες προσκόλλησης του Si, και του Fe (παρεμποδιστές) με τη χρήση του κώδικα SRIM [51].

δ) Εφαρμόστηκε η μεθοδολογία αποδοχής – απόρριψης (accept-reject) [52] για την ανάπτυξη «γεννήτριας» παρεμποδιστών που ακολουθούν την κατανομή των παρεμποδιστών που φτάνουν στην επιφάνεια Si [βλέπε (β)].

ε) Όλες οι παραπάνω μεταβλητές εισήχθησαν ως παράμετροι στον κώδικα εξέλιξης μορφολογίας.

στ) Έγινε προβολή των παραγόμενων επιφανειών και των PSD με τη χρήση του ελεύθερων κωδίκων Gwyddion [53] και Paraview [54] και στατιστική επεξεργασία με τη βοήθεια κώδικα μετρολογίας μορφολογίας επιφανειών.

Ο κώδικας εξέλιξης της μορφολογίας χρησιμοποιήθηκε για τη διερεύνηση της επίδρασης των μηχανισμών και των παραμέτρων στην εμφάνιση οργάνωσης. **Τα βασικά συμπεράσματα αυτής της διερεύνησης συνοψίζονται στη συνέχεια:**

α) Για το μαθηματικό χαρακτηρισμό των επιφανειών που προκύπτουν από την προσομοίωση χρησιμοποιήθηκε η RMS τραχύτητα, το μήκος συσχέτισης, το εγχαρασόμενο πάχος του υποστρώματος, το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από παρεμποδιστές, το PSD (2δ) και η παράμετρος οργάνωσης (παράμετρος που ποσοτικοποιεί την οργάνωση)

β) Η διάσταση (εμβαδό) της επιφάνειας δεν επηρεάζει καμία από τις παραμέτρους χαρακτηρισμού της εκτός από το PSD το οποίο σε μεγάλες διαστάσεις είναι ευκρινέστερο από ότι σε μικρότερες.

γ) Η δομική μονάδα του «ψηφιδωτού» επιφάνειας επηρεάζει την RMS τραχύτητα και το μήκος συσχέτισης. Έτσι αποφασίστηκε να γίνουν υπολογισμοί για δομική μονάδα που περιέχει 6,2 Άτομα Si.

δ) Το μέγεθος των παρεμποδιστών μεταβάλλει το ρυθμό εγχάραξης και εκτράχυνσης της επιφάνειας. Η αύξηση του μεγέθους των παρεμποδιστών οδηγεί σε μικρότερο ρυθμό εγχάραξης και σε μικρότερη RMS τραχύτητα.

ε) Όταν χρησιμοποιήθηκαν οι συναρτήσεις για τις αποδόσεις εγχάραξης και τους συντελεστές προσκόλλησης όπως προέκυψαν από το SRIM δεν παρατηρήθηκε οργάνωση στην επιφάνεια.

στ) Περαιτέρω διερεύνηση των τιμών των παραμέτρων και των μηχανισμών έδειξε ότι η οργάνωση ευνοείται

- όταν η πιθανότητα προσκόλλησης των ιόντων είναι 1 (όταν δεν συμβαίνει ανάκλαση των ιόντων στην επιφάνεια)
- όταν αυξάνεται το κλάσμα των παρεμποδιστών στην προσπίπτουσα ροή (αρκεί να μην αυξηθεί υπερβολικά το κλάσμα κάλυψης από παρεμποδιστές)
- όταν η επιλεκτικότητα εγχάραξης των παρεμποδιστών (άτομα Fe) ως προς το υπόστρωμα Si είναι 1

Παρά τα βελτιωμένα αποτελέσματα όσον αφορά την οργάνωση στην επιφάνεια που προέκυψαν από την τροποποίηση των παραπάνω μηχανισμών και παραμέτρων και παρόλο που δεν είναι δυνατό να ποσοτικοποιήσουμε την οργάνωση των πειραμάτων των Zhang et al., φαίνεται ότι η οργάνωση στα πειράματα είναι αυστηρότερη από αυτή που παρατηρείται στις προσομοιώσεις. Είναι πιθανόν κάποιος συγκεκριμένος συνδυασμός τιμών παραμέτρων και μηχανισμών του μοντέλου που χρησιμοποιείται να οδηγεί σε αυστηρότερη οργάνωση. Η μέγιστη τιμή για την παράμετρο οργάνωσης των επιφανειών από την προσομοίωση ήταν 4,5. Η διαφορά μεταξύ πειραματικής οργάνωσης και προσομοίωσης μπορεί να οφείλεται επίσης σε κάποιο μηχανισμό που δεν λαμβάνεται υπόψη στο μοντέλο. Ένα πολύ χρήσιμο δεδομένο που θα βοηθούσε στην περαιτέρω διερεύνηση είναι ο ρυθμός εγχάραξης (ιονβολής) τόσο των ατόμων Si όσο των στόχων Fe.

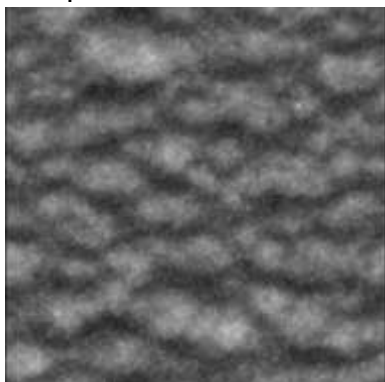
Οι πιθανές μελλοντικές εργασίες αφορούν

α) Την ενσωμάτωση στο πλαίσιο προσομοίωσης νέων μηχανισμών με στόχο τη βελτίωση της υπολογιζόμενης οργάνωσης. Για παράδειγμα, θα μπορούσε να διερευνηθεί η επίδραση της επιφανειακής διάχυσης των παρεμποδιστών στην οργάνωση.

β) Τη χρήση του πλαισίου προσομοίωσης για το σχεδιασμό διεργασιών που παράγουν επιθυμητές μορφολογίες πάνω σε εγχαρασσομένες επιφάνειες. Για παράδειγμα, αν αλλάξει ο προσανατολισμός των στόχων ως προς την εγχαρασσομένη επιφάνεια μπορούμε να παράγουμε μορφολογίες όπως αυτές του Σχήματος 102. Οι μορφολογίες του Σχήματος 102 προκύπτουν από τοποθέτηση 2 στόχων αντικριστά (στο Βορρά και στο Νότο της εγχαρασσομένης επιφάνειας).

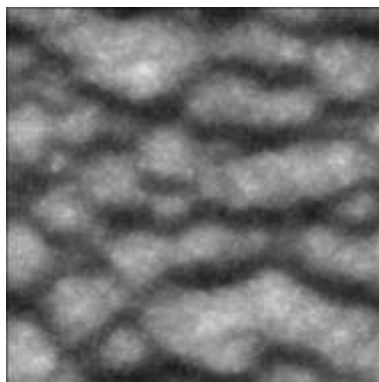
γ) Η χρήση του πλαισίου μπορεί να επεκταθεί και σε διεργασίες εγχάραξης με πλάσμα εκτός από αυτές ιονβολής με δέσμη ιόντων. Για παράδειγμα, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για το σχεδιασμό ενός πειράματος αντίστοιχου αυτού των Zhang et al. σε αντιδραστήρα πλάσματος.

Δόση: $0,625 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²



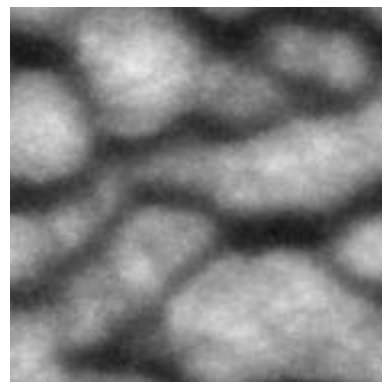
(α)

Δόση: $1,25 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²

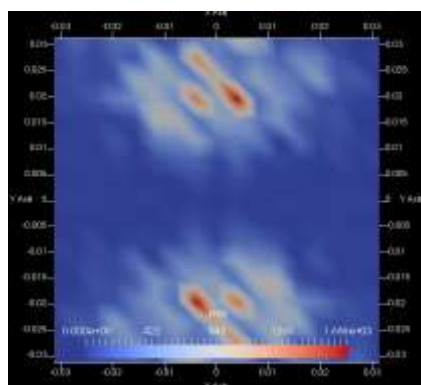


(β)

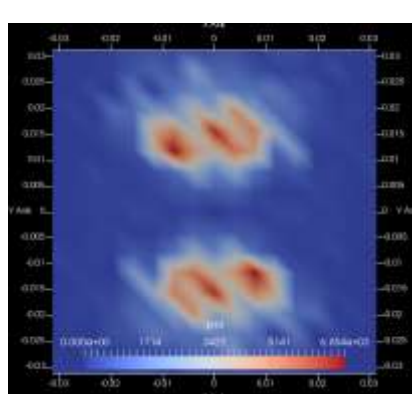
Δόση: $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm²



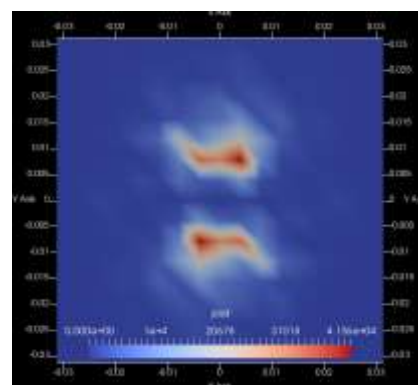
(γ)



(δ)



(ε)



(στ)

Σχήμα 102: Κατόψεις επιφάνειας Si και διαγράμματα PSD για διαφορετικές δόσεις ιόντων Ar⁺, (α, δ) $0,625 \times 10^{18}$ ιόντα/cm², (β, ε) $1,25 \times 10^{18}$ ιόντα/cm² και (γ, στ) $2,5 \times 10^{18}$ ιόντα/cm², υπό ταυτόχρονη απόθεση Fe από δύο στόχους τοποθετημένους αντιδιαμετρικά απέναντι ο ένας από τον άλλο και σε ίσες αποστάσεις από το κέντρο της επιφάνειας. Το σενάριο περιλαμβάνει την απενεργοποίηση του μηχανισμού ανάκλασης των Ar⁺ και Fe με επιλεκτικότητα των Ar⁺ (Fe και Si) ίση με 1.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι

```
// randome_range.cpp : Defines the entry point for the console application.

#include <iostream>
#include <ctime>
#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include <fstream>

using namespace std;

//global variables
double random_Distribution[100000]; // The output random numbers
int i, fCounter, Success; // define the int variables

double FtoX(double LE, double HE, double RE) //function for the F(x). This function
uses the var random_Energy from the function acceptReject
{
    double x[100], fy[100];
    double step = (HE - LE) / 100; // stepping f(x) into 100 intervals

    x[0] = LE;
    fy[0] = 0;
    for (int l= 1; l < 100; l++) // for every interval end calculate f(xi)
from the standard f(x)
    {
        // note that this
for loop should change to a function that reads a file.
        x[l] = x[l - 1] + step;
        double x2 = x[l] * x[l];
        double x3 = x2 * x[l];
        double x4 = x3 * x[l];
        double y = -0.25*x4 + 2.33333*x3 - 7 * x2 + 8 * x[l];
        fy[l]= y / 5.3333333;
    }
    int l = 0;
    while (x[l] < RE)
    {
        l++;
    }
    //calculate f(RE) using the linear interpolation method for the right interval
    double slope=(fy[l-1]-fy[l])/(x[l-1]-x[l]);
    double constantB=fy[l-1]-slope*x[l-1];
    double sinartisi=slope*RE+constantB;
    return sinartisi; //return the average f(x) for the interval that x is in
}

double acceptReject(double LowEdge, double HighEdge) // function for the accept - reject
method. calls the FtoX() function.
{
    double random_Energy; // define the random
horizontal variable array, dooble size of probability array
    double random_Frequency, range; //define the random normed
vertical variable array, dooble size of probability array

    range = (HighEdge - LowEdge);
    //calculate the range of the allowed random numbers cannot be bigger than 1000
    random_Energy = LowEdge + (range*rand() / (RAND_MAX + 1.0)); //Generate
random energy value within the Energy range
    random_Frequency = (rand() / (RAND_MAX + 1.0));
    //generate the Unif (0,1)
```

```
//if (random_Frequency < FtoX(random_Energy))
if (random_Frequency < FtoX(LowEdge, HighEdge, random_Energy))
{
return random_Energy;
}
return -2;
}

void exportToFile() // function to export the results to a .txt file
{
//export the numbers in a .txt file
ofstream myfile;
myfile.open("random_energies.txt");
myfile << "The total numbers are " << fCounter << endl << endl;
for (i = 0; i < 100000; i++)
{
if (random_Distribution[i]>0)
myfile << random_Distribution[i] << endl;
}
myfile << endl;
myfile.close();
}

int main()
{
srand((unsigned)time(0)); //set a different
starting point it's time the program runs
cout << "Give the amount of numbers you want < 100000 = ";
cin >> fCounter;

double lowest = 0;
double highest = 5.25;

for (i = 0; i<100000; i++) random_Distribution[i] = -1;
Success = 0;
int n = 0;
while (Success < fCounter)
{
random_Distribution[n] = acceptReject(lowest, highest);
if (random_Distribution[n] > -1)
{
Success++;
n++;
}
}
exportToFile();
return 0;
}
```

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Constantoudis, V., Kokkoris, G., Gogolides, E., Pargon, E. and Martin, M. *Effects of resist sidewall morphology on line-edge roughness reduction and transfer during etching: is the resist sidewall after development isotropic or anisotropic?* SPIE, City, 2010.
- [2] Gao, F., Ylinen, S., Kainlauri, M. and Kapulainen, M. *Smooth silicon sidewall etching for waveguide structures using a modified Bosch process.* SPIE, City, 2014.
- [3] Tserepi, A., Gogolides, E., Constantoudis, V., Cordoyiannis, G., Raptis, I. and Valamontes, E. S. Surface roughness induced by plasma etching of Si-containing polymers. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 17, 8 (2003/01/01 2003), 1083-1091.
- [4] Brown, A.-D. *Studies of ion sputtered silicon(111) surfaces.* Baltimore, Maryland, 2005.
- [5] In-Hyouk, S., Yves-Alain, P. and Michel, M. Smoothing dry-etched microstructure sidewalls using focused ion beam milling for optical applications. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 17, 8 (2007), 1593.
- [6] Perl Ee Fau - McMahon, W. E., McMahon We Fau - Bowers, J. E., Bowers Je Fau - Friedman, D. J. and Friedman, D. J. Design of antireflective nanostructures and optical coatings for next-generation multijunction photovoltaic devices, 1094-4087 (Electronic).
- [7] Tian, Y. and Jiang, L. Intrinsically robust hydrophobicity. *Nature Materials*, 12(03/20/online 2013), 291.
- [8] El-Gammal, M. Y., El-Gammal, N. Y., Fadhil, O. N. and Maria, O. M. Biological reactions to different dental implant surface treatments. *Int J Contemp Dent Med Rev*(2015).
- [9] van Spengen, W. M., Turq, V. and Frenken, J. W. M. The description of friction of silicon MEMS with surface roughness: virtues and limitations of a stochastic Prandtl–Tomlinson model and the simulation of vibration-induced friction reduction. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 12(2010), 163-171.
- [10] Mukhopadhyay, S., Roy, S. S., D'Sa, R. A., Mathur, A., Holmes, R. J. and McLaughlin, J. A. Nanoscale surface modifications to control capillary flow characteristics in PMMA microfluidic devices. *Nanoscale Research Letters*, 6, 1 (2011/06/03 2011), 411.
- [11] Savin, H., Repo, P., von Gastrow, G., Ortega, P., Calle, E., Garín, M. and Alcubilla, R. Black silicon solar cells with interdigitated back-contacts achieve 22.1% efficiency. *Nature Nanotechnology*, 10(05/18/online 2015), 624.
- [12] Evangelos, G., Vassilios, C., George, K., Dimitrios, K., Katerina, T., George, B., Marilena, V. and Angeliki, T. Controlling roughness: from etching to nanotexturing and plasma-directed organization on organic and inorganic materials. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 44, 17 (2011), 174021.
- [13] Muñoz-García, J., Vázquez, L., Castro, M., Gago, R., Redondo-Cubero, A., Moreno-Barrado, A. and Cuerno, R. Self-organized nanopatterning of silicon surfaces by ion beam sputtering. *Materials Science & Engineering R*, 86, Complete (2014), 1-44.
- [14] Vourdas, N., Kontziampasis, D., Kokkoris, G., Constantoudis, V., Goodyear, A., Tserepi, A., Cooke, M. and Gogolides, E. Plasma directed assembly and organization: bottom-up nanopatterning using top-down technology. *Nanotechnology*, 21, 8 (2010), 085302.
- [15] Zhang, K., Bobes, O. and Hofsäss, H. Designing self-organized nanopatterns on Si by ion irradiation and metal co-deposition. *Nanotechnology*, 25, 8 (2014), 085301.
- [16] Facsko, S., Dekorsy, T., Koerdts, C., Trappe, C., Kurz, H., Vogt, A. and Hartnagel, H. L. Formation of Ordered Nanoscale Semiconductor Dots by Ion Sputtering. *Science*, 285, 5433 (1999), 1551.
- [17] Wassermann, E. F., Thielen, M., Kirsch, S., Pollmann, A., Weinforth, H. and Carl, A. Fabrication of large scale periodic magnetic nanostructures. *Journal of Applied Physics*, 83, 3 (1998), 1753-1757.
- [18] Shen, J. and Kirschner, J. Tailoring magnetism in artificially structured materials: the new frontier. *Surface Science*, 500, 1 (2002/03/10/ 2002), 300-322.
- [19] Joel, K. W. Y., Yunjie, C., Tianli, H., Huigao, D., Naganivetha, T., Hui Kim, H., Siang Huei, L. and Vivian, N. Fabrication and characterization of bit-patterned media beyond 1.5 Tbit/in². *Nanotechnology*, 22, 38 (2011), 385301.
- [20] Weiss, W. and Ranke, W. Surface chemistry and catalysis on well-defined epitaxial iron-oxide layers. *Progress in Surface Science*, 70, 1 (2002/03/01/ 2002), 1-151.
- [21] Costantini, G., Buatier de Mongeot, F., Rusponi, S., Boragno, C., Valbusa, U., Vattuone, L., Burghaus, U., Savio, L. and Rocca, M. Tuning surface reactivity by in situ surface nanostructuring. *The Journal of Chemical Physics*, 112, 15 (2000/04/15 2000), 6840-6843.
- [22] k j stout, P. j. S., W P Dong, E Mainsah, N Luo T Mathia, H Zahouani *The Devekopment of methods for the characterisation of roughness in three dimentions.* Commission of the European Communities, UK, 1993.
- [23] Liam Blunt, X. J. *Advanced Techniques for Assessment Surface Topography, Development of a Basis for 3D Surface Texture Standards "SURFSTAND"*. Kogan Page Science, City, 2003.
- [24] ISO *Geometrical product specifications (GPS) — Surface texture: Areal* City, 2012.

- [25] Leach, R. *Characterisation of Areal Surface Texture*. Springer, City, 2013.
- [26] Sigmund, P. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets. *Physical Review*, 184, 2 (08/10/ 1969), 383-416.
- [27] Sigmund, P. A mechanism of surface micro-roughening by ion bombardment. *Journal of Materials Science*, 8, 11 (1973/11/01 1973), 1545-1553.
- [28] Bradley, R. M. and Harper, J. M. E. Theory of ripple topography induced by ion bombardment. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 6, 4 (1988/07/01 1988), 2390-2395.
- [29] Makeev, M. A., Cuerno, R. and Barabási, A.-L. Morphology of ion-sputtered surfaces. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 197, 3 (2002/12/01/ 2002), 185-227.
- [30] Liao, W., Xie, X. and Dai, Y. Ion beam processing for ultra-smooth glass-ceramic optics. *SPIE Newsroom*(18 December 2014 2014).
- [31] Drotar, J. T., Zhao, Y. P., Lu, T. M. and Wang, G. C. Mechanisms for plasma and reactive ion etch-front roughening. *Physical Review B*, 61, 4 (01/15/ 2000), 3012-3021.
- [32] Nest, D., Chung, T.-Y., Graves, D. B., Engelmann, S., Bruce, R. L., Weilnboeck, F., Oehrlein, G. S., Wang, D., Andes, C. and Hudson, E. A. Understanding the Roughening and Degradation of 193 nm Photoresist during Plasma Processing: Synergistic Roles of Vacuum Ultraviolet Radiation and Ion Bombardment. *Plasma Processes and Polymers*, 6, 10 2009), 649-657.
- [33] Martin, M. and Cunge, G. *Surface roughness generated by plasma etching processes of silicon*, 2015.
- [34] Kokkoris, G., Constantoudis, V., Angelikopoulos, P., Boulousis, G. and Gogolides, E. Dual nanoscale roughness on plasma-etched Si surfaces: Role of etch inhibitors. *Physical Review B*, 76, 19 (11/13/ 2007), 193405.
- [35] George Kokkoris and Evangelos Gogolides The potential of ion-driven etching with simultaneous deposition of impurities for inducing periodic dots on surfaces. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 45, 16 2012), 165204.
- [36] Hofsäss, H. and Zhang, K. Surfactant sputtering. *Applied Physics A*, 92, 3 (2008/08/01 2008), 517-524.
- [37] Hofsäss, H., Zhang, K., Pape, A., Bobes, O. and Brötzmann, M. The role of phase separation for self-organized surface pattern formation by ion beam erosion and metal atom co-deposition. *Applied Physics A*, 111, 2 (2013/05/01 2013), 653-664.
- [38] Zhang, K., Brötzmann, M. and Hofsäss, H. Sharp transition from ripple patterns to a flat surface for ion beam erosion of Si with simultaneous co-deposition of iron. *AIP Advances*, 2, 3 (2012/09/01 2012), 032123.
- [39] Moon, B., Yoo, S., Kim, J. S., Kang, S. J., Muñoz-García, J. and Cuerno, R. Ion-beam nanopatterning of silicon surfaces under codeposition of non-silicide-forming impurities. *Physical Review B*, 93, 11 (03/22/ 2016), 115430.
- [40] Jewett, R. *A String Model Etching Algorithm*. EECS Department, University of California, Berkeley, 1979.
- [41] Hamaguchi, S., Dalvie, M., Farouki, R. T. and Sethuraman, S. A shock-tracking algorithm for surface evolution under reactive-ion etching. *Journal of Applied Physics*, 74, 8 (1993/10/15 1993), 5172-5184.
- [42] Adalsteinsson, D. and Sethian, J. A. A Level Set Approach to a Unified Model for Etching, Deposition, and Lithography I: Algorithms and Two-Dimensional Simulations. *Journal of Computational Physics*, 120, 1 (1995/08/01/ 1995), 128-144.
- [43] Ξύδης, Π. *Προσομοίωση εγχάραξης επιφανειών με τραχύτητα με τη μέθοδο ισοϋψών στενής ζώνης*. Πανεπιστήμιο Αθηνών, Αθήνα, 2006.
- [44] Scheckler, E. W. *Algorithms for Three-Dimensional Simulation of Etching and Deposition Processes in Integrated Circuit Fabrication*. EECS Department, University of California, Berkeley, 1991.
- [45] Mukhamadeev, R. A., Danilina, T. I. and Troyan, P. E. Simulation of the Bosch process for micro- and nanostructures. *Russian Microelectronics*, 44, 7 (2015/12/01 2015), 460-462.
- [46] Andrew, A. M. LEVEL SET METHODS AND FAST MARCHING METHODS: EVOLVING INTERFACES IN COMPUTATIONAL GEOMETRY, FLUID MECHANICS, COMPUTER VISION, AND MATERIALS SCIENCE, by J.A. Sethian, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2nd edn. 1999 (first published 1996 as Level Set Methods) xviii + 420 pp., ISBN (paperback) 0-521-64557-3, (hardback) 0-521-64204-3 (Pbk, £18.95). *Robotica*, 18, 1 2000), 89-92.
- [47] Jin, W. and Sawin, H. H. Feature profile evolution in high-density plasma etching of silicon with Cl₂. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 21, 4 (2003/07/01 2003), 911-921.
- [48] Patrignani, C., Agashe, K., Aielli, G., Amsler, C., Antonelli, M., Asner, D. M., Baer, H., Banerjee, S., Barnett, R. M., Basaglia, T., Bauer, C. W., Beatty, J. J., Belousov, V. I., Beringer, J., Bethke, S.,

- Bichsel, H., Biebel, O., Blucher, E., Brooijmans, G., Buchmueller, O., Burkert, V., Bychkov, M. A., Cahn, R. N., Carena, M., Ceccucci, A., Cerri, A., Chakraborty, D., Chen, M.-C., Chivukula, R. S., Copic, K., Cowan, G., Dahl, O., D'Ambrosio, G., Damour, T., de Florian, D., de Gouvea, A., DeGrand, T., de Jong, P., Dissertori, G., Dobrescu, B. A., D'Onofrio, M., Doser, M., Drees, M., Dreiner, H. K., Dwyer, D. A., Eerola, P., Eidelman, S., Ellis, J., Erler, J., Ezhela, V. V., Fetscher, W., Fields, B. D., Foster, B., Freitas, A., Gallagher, H., Garren, L., Gerber, H.-J., Gerbier, G., Gershon, T., Gherghetta, T., Godizov, A. A., Goodman, M., Grab, C., Grietsan, A. V., Grojean, C., Groom, D. E., Grünewald, M., Gurtu, A., Gutsche, T., Haber, H. E., Hagiwara, K., Hanhart, C., Hashimoto, S., Hayato, Y., Hayes, K. G., Hebecker, A., Heltsley, B., Hernández-Rey, J. J., Hikasa, K., Hisano, J., Höcker, A., Holder, J., Holtkamp, A., Huston, J., Hyodo, T., Irwin, K., Jackson, J. D., Johnson, K. F., Kado, M., Karliner, M., Katz, U. F., Klein, S. R., Klempt, E., Kowalewski, R. V., Krauss, F., Kreps, M., Krusche, B., Kuyanov, Y. V., Kwon, Y., Lahav, O., Laiho, J., Langacker, P., Liddle, A., Ligeti, Z., Lin, C.-J., Lippmann, C., Liss, T. M., Littenberg, L., Lugovsky, K. S., Lugovsky, S. B., Lusiani, A., Makida, Y., Maltoni, F., Mannel, T., Manohar, A. V., Marciano, W. J., Martin, A. D., Masoni, A., Matthews, J., Meißner, U.-G., Milstead, D., Mitchell, R. E., Molaro, P., Mönig, K., Moortgat, F., Mortonson, M. J., Murayama, H., Nakamura, K., Narain, M., Nason, P., Navas, S., Neubert, M., Nevski, P., Nir, Y., Olive, K. A., Pagan Griso, S., Parsons, J., Peacock, J. A., Pennington, M., Petcov, S. T., Petrov, V. A., Piepke, A., Pomarol, A., Quadt, A., Raby, S., Rademacker, J., Raffelt, G., Ratcliff, B. N., Richardson, P., Ringwald, A., Roesler, S., Rolli, S., Romaniouk, A., Rosenberg, L. J., Rosner, J. L., Rybka, G., Rytin, R. A., Sachrajda, C. T., Sakai, Y., Salam, G. P., Sarkar, S., Sauli, F., Schneider, O., Scholberg, K., Schwartz, A. J., Scott, D., Sharma, V., Sharpe, S. R., Shutt, T., Silari, M., Sjöstrand, T., Skands, P., Skwarnicki, T., Smith, J. G., Smoot, G. F., Spanier, S., Spieler, H., Spiering, C., Stahl, A., Stone, S. L., Sumino, Y., Sumiyoshi, T., Syphers, M. J., Takahashi, F., Tanabashi, M., Terashi, K., Terning, J., Thorne, R. S., Tiator, L., Titov, M., Tkachenko, N. P., Törnqvist, N. A., Tovey, D., Valencia, G., van de Water, R., Varelas, N., Venanzoni, G., Vincter, M. G., Vogel, P., Vogt, A., Wakely, S. P., Walkowiak, W., Walter, C. W., Wands, D., Ward, D. R., Wascko, M. O., Weiglein, G., Weinberg, D. H., Weinberg, E. J., White, M., Wiencke, L. R., Willocq, S., Wohl, C. G., Wolfenstein, L., Womersley, J., Woody, C. L., Workman, R. L., Yao, W.-M., Zeller, G. P., Zenin, O. V., Zhu, R.-Y., Zimmermann, F. and Zyla, P. A. Review of Particle Physics. *Chin.Phys.*, C40, 10 (2016-10-03 2016), 100001.
- [49] Kawai, H. *3-Dimensional Modeling and Simulation of Surface and Sidewall Roughening During Plasma Etching*. Massachusetts Institute of Technology, 2008.
- [50] Hirota, T., Hiroki, M., Yoshinori, T., Koji, E. and Kouichi, O. Three-Dimensional Atomic-Scale Cellular Model and Feature Profile Evolution during Si Etching in Chlorine-Based Plasmas: Analysis of Profile Anomalies and Surface Roughness. *Japanese Journal of Applied Physics*, 50, 8S1 (2011), 08JE06.
- [51] COMSOL *Multiphysics*. City.
- [52] Ziegler, J. F. *The Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM)*. City.
- [53] Sigman, K. *Acceptance-Rejection Method*. City, 2007.
- [54] Petr Klapetek, D. N. *Gwyddion – Free SPM (AFM, SNOM/NSOM, STM, MFM, ...) data analysis software*. City.
- [55] Ahrens, J., Geveci, Berk, Law, Charles, *ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization*. Elsevier, 2005.
- [56] The MathWorks, I. *MATLAB and Statistics Toolbox, Natick, s.*, City, 2013.
- [57] Weisstein, E. W. *Euler Angles*. From MathWorld--A Wolfram Web Resource, City.
- [58] Yamaguchi, K. *N-D histogram, Extension to the histc function to count the number of data points on N-D grid*. www.mathworks.com, City.
- [59] Γιώργος, Κ. *Ολοκληρωμένη προσομοίωση εξέλιξης τοπογραφίας κατά την εγχάραξη μικρο και νάνο δομών με πλάσμα*. ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ, 2005.
- [60] A.- L. Barabási, H. E. S. *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University press 1995, 1995.
- [61] Eclipse Foundation, I. *Eclipse Luna*. City.
- [62] Zhao, Y., Wang, G. C. and Lu, T. M. *Experimental methods in the physical sciences. Vol. 37. Characterization of amorphous and crystalline rough surface: Principles and applications*. Academic Press, 2001.
- [63] Ziberi, B., Frost, F. and Rauschenbach, B. Self-organized dot patterns on Si surfaces during noble gas ion beam erosion. *Surface Science*, 600, 18 (2006), 3757-3761.
- [64] *NanoSurf EasyScan*. City.
- [65] Uhrmacher, M. and Hofsäss, H. Ion accelerator facilities at the University of Göttingen. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 240, 1 (2005/10/01/ 2005), 48-54.

Προσομοίωση διεργασίας ιονβολής επιφανειών με δέσμη ιόντων υπό ταυτόχρονη απόθεση: Διερεύνηση των μηχανισμών δημιουργίας οργανωμένων μορφολογιών

[66] Cordero, B., Gomez, V., Platero-Prats, A. E., Reves, M., Echeverria, J., Cremades, E., Barragan, F. and Alvarez, S. Covalent radii revisited. *Dalton Transactions*, 21 2008), 2832-2838.

[67] *WebElements* City, 2018.