Εθνικό & Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Πληροφορικής

Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών ‘Δημόκριτος’
Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής

Μεταπτυχιακό πρόγραμμα ΕΠΕΑΕΚ Μικροηλεκτρονικής

Προσομοίωση εγχάραξης δομών SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων

Διπλωματική εργασία

Κόκκορης Γεώργιος

Επιβλέπων:
Γογγολίδης Ευάγγελος
Κύριος Ερευνητής
Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

ΑΘΗΝΑ 2000

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου σε όλους όσους βοήθησαν καθ' οιονδήποτε τρόπο στην εκπόνηση αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Κύριο Ερευνητή του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής του Δημόκριτου κ. Ευάγγελο Γογγολίδη που μου έδωσε την ευκαιρία να πραγματοποιήσω αυτή την εργασία και ήταν ο οδηγός και ο βοηθός σε όλη την πορεία της. Θα ήθελα ακόμη να ευχαριστήσω τον Αναπληρωτή Καθηγητή του ΕΜΠ κ. Ανδρέα Μπουντουβή για την υλικοτεχνική υποστήριξη που μου εξασφάλισε, χωρίς την οποία δεν θα ήταν δυνατό να υλοποιηθεί η εργασία. Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω όλο το προσωπικό του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής και ειδικά τις Δρ. Αγγελική Τσερέπη και Ευαγγελία Τέγου καθώς και τους υποτρόφους του Ινστιτούτου οι οποίοι με βοήθησαν σε δύσκολες στιγμές.

Θα ήθελα τέλος να ευχαριστήσω την οικογένεια μου που συμπαραστάθηκε στην προσπάθειά μου και να της αφιερώσω τ ην παρούσα εργασία.

Περιεχόμενα

Περίληψη

Η διεργασία της εγχάραξης επιφανειών συναντάται πολύ συχνά κατά τη διαδικασία κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων (ΟΚ) στη Μικροηλεκτρονική. Οι επιφάνειες που εγχαράσσονται κατά τις διαδικασίες κατασκευής ΟΚ δεν είναι ελεύθερες αλλά αποτελούν τμήμα κάποιας δομής όπως ένα αυλάκι ή μία οπή. Μία από τις σημαντικές περιοχές εφαρμογής της διεργασίας τα τελευταία χρόνια είναι η εγχάραξη διηλεκτρικών υλικών όπως το SiO_2 για τη κατασκευή οπών επαφής μεταξύ διαφορετικών επιπέδων μετάλλου σε ένα ΟΚ. Η βιομηχανία αναζητεί νέα διηλεκτρικά υλικά χαμηλής διηλεκτρικής σταθεράς (ε) που θα αντικαταστήσουν το SiO_2. Αντιμετωπίζει προβλήματα όπως η υστέρηση εγχάραξης (η μείωση του ρυθμού εγχάραξης σε στενότερες δομές) που είναι δυνατό να οδηγήσει ακόμη και στη διακοπή της εγχάραξης και την εναπόθεση πολυμερικού προϊόντος επί της επιφάνειας (μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση). Ολοκληρωμένος προσομοιωτής εγχάραξης δομών διηλεκτρικών υλικών που θα μπορούσε να βοηθήσει στην κατανόηση των φαινομένων και στην επίλυση των προβλημάτων δεν υπάρχει.

Ο σκοπός της εργασίας είναι η προσομοίωση εγχάραξης δομών SiO_2, Si με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων, η πρόβλεψη της εξέλιξης της τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών και η κατανόηση βασικών φαινομένων όπως η υστέρηση εγχάραξης (Reactive Ion Etching lag ή RIE lag) και η μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση.

Για την ανάπτυξη ενός ολοκληρωμένου *μοντέλου εγχάραξης δομών* απαιτούνται:

1. *Μοντέλο εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας.* Με το μοντέλο αυτό προσδιορίζεται η ποσοτική επίδραση των διαφόρων παραμέτρων (όπως η ροή ιόντων, ουδετέρων ειδών προς την επιφάνεια για την ξηρή εγχάραξη) στο ρυθμό εγχάραξης.

2. *Μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών* των παραμέτρων που καθορίζουν το ρυθμό εγχάραξης μέσα σε δομές. Η τοπική τιμή της ροής κάποιου ουδέτερου είδους στη βάση ενός αυλακιού διαφέρει από αυτή που φτάνει σε μια ελέυθερη επιφάνεια . Η διαφορά των τοπικών τιμών των παραμέτρων από τις τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια οφείλεται στην γεωμετρία της εγχαρασσόμενης δομής και στα φαινόμενα μεταφοράς που συμβαίνουν στη μικρονική και υπό-μικρονική κλίμακα της δομής.

3. *Σύζευξη των μοντέλων* ελεύθερης επιφάνειας (1) και υπολογισμού των τοπικών τιμών των παραμέτρων που επηρεάζουν το ρυθμό εγχάραξης (2). Στόχος είναι ο υπολογισμός του ρυθμού εγχάραξης σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της εγχαρασσόμενης δομής.

4. *Ενσωμάτωση των μοντέλων* σε προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας.

Στην παρούσα εργασία αναπτύσσεται μοντέλο για την εγχάραξη δομών Si και SiO_2 σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Ειδικότερα :

Αρχικά αναπτύσσεται *μοντέλο εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας* Si, SiO_2 σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Το μοντέλο περιγράφει τις επιφανειακές διεργασίες ρόφησης-εκρόφησης των ουδετέρων ειδών (ατόμων F, ουδετέρων ριζών CF_x) που παράγονται στον κυρίως όγκο του πλάσματος καθώς και τις διεργασίες δημιουργίας και καταστροφής του πολυμερούς που σχηματίζεται στην επιφάνεια. Βασική παράμετρός του μοντέλου είναι το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας, θ. Το μοντέλο μπορεί να υπολογίσει α) τα κλάσματα κάλυψης της επιφάνειας από τα ουδέτερα είδη που προσροφούνται σε αυτή και από το πολυμερές που σχηματίζεται επί αυτής, β) την απόδοση εγχάραξης (απομακρυνόμενα άτομα Si)/(προσπίπτον ιόν), γ) το ρυθμό εγχάραξης, δ) την εκλεκτικότητα εγχάραξης (SiO_2/Si) και ε) τους συντελεστές προσκόλλησης των ουδετέρων ειδών στην επιφάνεια. Τέλος, μπορεί να προβλέψει και τη μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση.

Το μοντέλο ελεύθερης επιφάνειας που αναπτύσσεται προβλέπει απότομη μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση με την μείωση του λόγου της ροής των ατόμων F προς τη ροή των ιόντων, με τη μείωση της ενέργειας των ιόντων και με την αύξηση του λόγου της ροής των ριζών CF_x προς τη ροή των ιόντων. Επίσης, τα αποτελέσματά του φανερώνουν ότι η εκλεκτικότητα SiO_2/Si μπορεί να πάρει εξαιρετικά υψηλή τιμή με κατάλληλη επιλογή παραμέτρων (π.χ ροή και σύσταση ουδετέρων ειδών και ιόντων, ενέργεια ιόντων). Το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές αντιστοιχίζεται με το πάχος του πειραματικά παρατηρούμενου πολυμερικού στρώματος στην επιφάνεια Si, SiO_2 και τα αποτελέσματα του μοντέλου συγκρίνονται με πειραματικά.

Στη συνέχεια αναπτύσσεται *μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών μέσα σε δομές*. Το μοντέλο περιγράφει την επίδραση της γεωμετρίας της εγχαρασσόμενης δομής και των φαινομένων μεταφοράς της ροής μέσα σε αυτή στις τοπικές τιμές της ροής ιόντων, ουδετέρων ειδών. Οι δομές που εξετάζονται είναι αυλάκια και οπές με κυλινδρική συμμετρία. Εξετάζονται φαινόμενα όπως η σκίαση (shadowing) της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών και η επανεκπομπή (re-emission) ουδετέρων ειδών. Το μοντέλο λαμβάνει υπόψη την κατανομή κατευθύνσεων των σωματιδίων (ιόντων, ουδετέρων ειδών) που εισέρχονται στη δομή καθώς και το μηχανισμό επανεκπομπής των σωματιδίων. Είναι γενικό και μπορεί να εφαρμοστεί και σε άλλες διεργασίες που συμβαίνουν μέσα σε δομές (π.χ. εναπόθεση). Το αναγκαίο δεδομένο για τον υπολογισμό των τοπικών τιμών της ροής ενός σωματιδίου είναι οι τοπικές τιμές του συντελεστή προσκόλλησης (πιθανότητα προσκόλλησης του σωματιδίου στην επιφάνεια).

Το επόμενο τμήμα αφορά *αριθμητικές μεθόδους επίλυσης*: Η θεώρηση φαινομένων όπως η σκίαση και κυρίως η επανεκπομπή της ροής οδηγούν σε μαθηματικά προβλήματα για την επίλυση των οποίων επιστρατεύονται μέθοδοι αριθμητικής ανάλυσης. Για παράδειγμα η ροή από επανεκπομπή που φτάνει σε κάθε σημείο της εγχαρασσόμενης δομής υπολογίζεται λύνοντας αριθμητικά μια ολοκληρωτική εξίσωση. Δοκιμάζονται και αξιολογούνται περισσότερες από μια μεθόδους επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης: α) η μέθοδος προβολής collocation και β) η μέθοδος Nystrom.

Έπειτα γίνεται *σύζευξη του μοντέλου ελεύθερης επιφάνειας με το μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών ροής*. Το κεντρικό σημείο της σύζευξης είναι ο ταυτόχρονος υπολογισμός των τοπικών τιμών α) της ροής ουδετέρων ειδών και β) των συντελεστών προσκόλλησής αυτών των ειδών στην επιφάνεια. Με τη σύζευξη υπολογίζεται ο ρυθμός εγχάραξης τοπικά σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής που εξετάζεται. Μελετάται η επίδραση του λόγου ασυμμετρίας της δομής (βάθος/πλάτος για αυλάκι) στο ρυθμό εγχάραξης και προβλέπεται το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης (Reactive Ion Etching lag ή RIE lag): οι στενότερες δομές εγχαράσσονται με μικρότερο ρυθμό. Διερευνάται ο ρόλος της σκίασης και της επανεκπομπής της ροής στην εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το λόγο ασυμμετρίας και προσδιορίζεται η εξάρτηση του βάθους και του ρυθμού εγχάραξης από το χρόνο για αυλάκια SiO_2.

Τέλος, γίνονται οι πρώτες προσπάθειες για *την ενσωμάτωση των μοντέλων που αναπτύχθηκαν σε προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας και* καταγράφονται τα συμπεράσματα και οι προτάσεις για το μέλλον.

1

Εισαγωγή

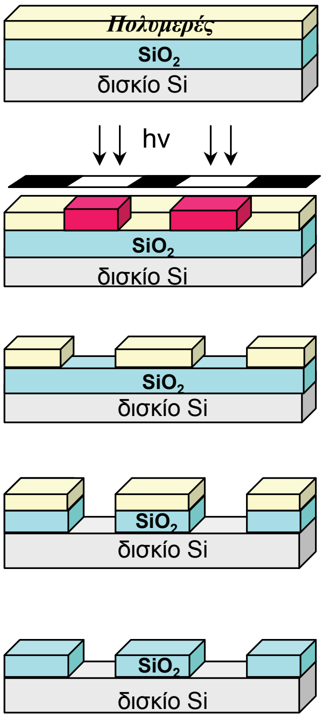
Περίληψη

Η διεργασία της εγχάραξης συναντάται πολύ συχνά κατά τη διαδικασία κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων στη Μικροηλεκτρονική. Η εγχάραξη διακρίνεται σε υγρή (wet etching) και ξηρή ή εγχάραξη με πλάσμα (plasma etching). Κρίσιμες παράμετροι κατά την εγχάραξη είναι η ανισοτροπία (anisotropy), η εκλεκτικότητα (selectivity) και η ομοιομορφία (uniformity). Η ξηρή εγχάραξη διεξάγεται εντός αντιδραστήρα πλάσματος. Οι βασικοί μηχανισμοί εγχάραξης είναι η ιονοβολή (physical sputtering), η χημική εγχάραξη (chemical etching) και η εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα (ion-enhanced etching). Η μελέτη της εγχάραξης δομών (π.χ. αυλάκια ή οπές) απαιτεί να διερευνηθεί η ποσοτική επίδραση των διαφόρων παραμέτρων (π.χ. ροή ιόντων, ουδετέρων ειδών προς την επιφάνεια) στο ρυθμό εγχάραξης και να προσδιοριστούν οι τιμές αυτών των παραμέτρων τοπικά σε κάθε σημείο της δομής. Στην παρούσα εργασία αναπτύσσεται ένα μοντέλο για την εγχάραξη δομών (π.χ. αυλακιών και κυλινδρικών οπών) Si και SiO_2 με πλάσμα CF_4.

Περιεχόμενα

1.1 Εισαγωγή

Τα ολοκληρωμένα κυκλώματα σήμερα κατασκευάζονται με επίπεδη τεχνολογία δηλαδή με εναπόθεση διαδοχικών στρωμάτων (υμένια ή φιλμ) και σχηματοποίηση τους ώστε να γίνουν οι πύλες των τρανζίστορ, οι γραμμές των αγωγών ρεύματος και άλλα απαραίτητα στοιχεία αυτών. Για τη σχηματοποίηση των λεπτών αυτών υμενίων απαιτείται η χρήση προηγμένων τεχνολογιών αποτύπωσης σχήματος (patterning technologies). Η τεχνολογία αποτύπωσης σχήματος[1] εμπεριέχει δύο σημαντικές τεχνολογικές διεργασίες: τη λιθογραφία και την εγχάραξη με υγρά χημικά ή με ηλεκτρικές εκκενώσεις πλάσματος.



1. επίστρωση πολυμερούς σε φιλμ οξειδίου

2. έκθεση σε ακτινοβολία μέσω μάσκας

3. υγρή εμφάνιση (διάλυση των φωτισμένων περιοχών)

4. εγχάραξη του οξειδίου με πλάσμα

5. αφαίρεση του πολυμερούς

<u>Σχήμα 1.1.</u> Αποτύπωση σχήματος σε λεπτό στρώμα οξειδίου με λιθογραφία και εγχάραξη.

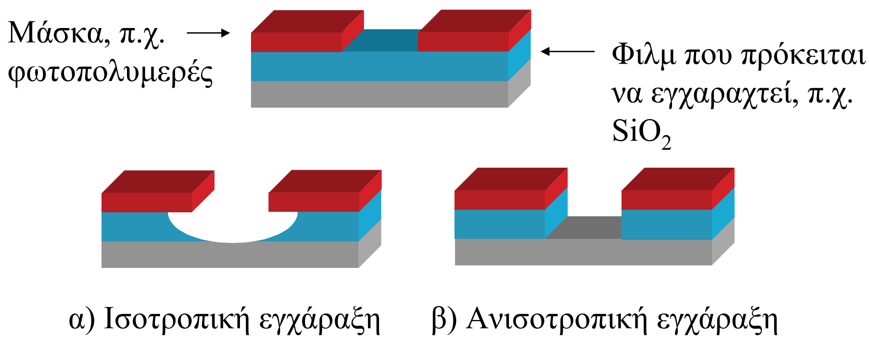
Το σχήμα 1.1 δείχνει την αποτύπωση ενός σχήματος πάνω σε ένα λεπτό στρώμα οξειδίου του πυριτίου που έχει εναποτεθεί πάνω σε ένα δισκίο πυριτίου. Ένα λεπτό στρώμα φωτοευαίσθητου πολυμερούς (photoresist) που παίζει το ρόλο φωτογραφικού υλικού εναποτίθεται πάνω στο οξείδιο με περιστροφή (spining) διαλύματός του. Το πολυμερές φωτίζεται μέσα από μια μάσκα με διαφανείς και αδιαφανείς περιοχές, η οποία φέρει το σχήμα που ζητούμε να αποτυπώσουμε στο οξείδιο. Το φως που περνά από τις διαφανείς περιοχές προκαλεί χημικές αλλαγές στο φωτοευαίσθητο πολυμερές. Ακολουθεί η εμφάνιση (development) του πολυμερούς με κατάλληλο εμφανιστή που απομακρύνει τις φωτισμένες περιοχές αφήνοντας άθικτες τις αφώτιστες (διεργασία θετικού τόνου-positive tone process), είτε το αντίθετο (αρνητικού τόνου διεργασία-negative tone process). Με το τέλος της εμφάνισης το σχήμα της μάσκας (ή το αρνητικό της) έχει αποτυπωθεί στο πολυμερές. Όλα τα παραπάνω βήματα συνιστούν τη διεργασία της λιθογραφίας (lithography). Ακολουθεί η διεργασία της εγχάραξης του οξειδίου με υγρά χημικά αντιδραστήρια ή αέρια που δημιουργούνται σε ηλεκτρικές εκκενώσεις πλάσματος. Τέλος, ακολουθεί η αφαίρεση του πολυμερούς (photoresist stripping) με υγρούς διαλύτες ή με πλάσμα πλούσιο σε οξυγόνο που «καίει» το πολυμερές (photoresist ashing).

Οι διεργασίες εγχάραξης όπως και λιθογραφίας είναι εφαρμόσιμες όχι μόνο στη Μικροηλεκτρονική, αλλά σε οποιαδήποτε επίπεδη τεχνολογία. Μικροσυστήματα και μικρομηχανικές εφαρμογές (μικρογρανάζια, μικροαντλίες) μικροαισθητήρες και ανιχνευτές χημικών ή φυσικών μεγεθών, επίπεδοι καταλύτες, μικροαντιδραστήρες, μικροδομές για την ανάπτυξη κυττάρων είναι μερικές σύγχρονες τεχνολογικές εφαρμογές των διεργασιών αποτύπωσης σχήματος.

1.2 Κατηγορίες και βασικές παράμετροι εγχάραξης

Η εγχάραξη υποστρωμάτων Si, SiO_2 μπορεί να γίνει είτε με υγρά χημικά αντιδραστήρια (π.χ. HF, H_3PO_4) οπότε αναφερόμαστε στην υγρή εγχάραξη (wet chemical etching) είτε με αέρια αντιδραστήρια που δημιουργούνται με ηλεκτρικές εκκένωσεις αερίων (π.χ. CF_4, CHF_3, SF_6, Cl_2) οπότε αναφερόμαστε στην ξηρή εγχάραξη (dry etching, plasma etching).

Η διαφορά της ξηρής από την υγρή εγχάραξη όσον αφορά στο σχήμα της δομής που εγχαράσσεται φαίνεται στο σχήμα 1.2. Στην περίπτωση της ξηρής εγχάραξης τα πλάγια τοιχώματα είναι κάθετα, η κυρίαρχη κατεύθυνση της εγχάραξης είναι κάθετη. Με τα υγρά αντιδραστήρια η εγχάραξη δεν εμφανίζει κατεύθυνση προτίμησης*. Λέμε ότι η υγρή εγχάραξη χαρακτηρίζεται από *ισοτροπία* (isotropy) ενώ η ξηρή από *ανισοτροπία* (anisotropy). Η ανισοτροπία αποτελεί κρίσιμη παράμετρο για την εγχάραξη και τις διαδικασίες κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και το βασικό πλεονέκτημα της ξηρής σε σχέση με την υγρή εγχάραξη. Με την ξηρή εγχάραξη είναι δυνατή η πιστή μεταφορά του υπερκείμενου προστατευτικού στρώματος καθώς η εγχάραξη δεν προχωρά κάτω από αυτό το προστατευτικό στρώμα όπως συμβαίνει με την υγρή.



<u>*Σχήμα 1.2.*</u> *Η ισοτροπία (α) είναι χαρακτηριστικό της υγρής εγχάραξης και η ανισοτροπία (β) της ξηρής.*

Μια ακόμη κρίσιμη παράμετρος της διεργασίας εγχάραξης είναι η *εκλεκτικότητα* (selectivity). Το μέσο εγχάραξης που χρησιμοποιείται θα πρέπει εκλεκτικά να διαβρώνει το προς εγχάραξη στρώμα σε σχέση με το υποκείμενό του. Αν η εκλεκτικότητα δεν είναι υψηλή και η διάβρωση όλου του πάχους του προς εγχάραξη στρώματος δεν ανιχνευθεί άμεσα ώστε να σταματήσει η εγχάραξη, υπάρχει ο

* υπό συγκεκριμένες συνθήκες η υγρή εγχάραξη μπορεί να είναι κρυσταλλογραφικά κατευθυνόμενη σε κρυσταλλικά υποστρώματα

κίνδυνος καταστροφής του υποκείμενου στρώματος. Με την υγρή εγχάραξη είναι δυνατό να επιτευχθεί πολύ μεγάλη εκλεκτικότητα, κάτι το οποίο δεν είναι εύκολο με την ξηρή.

Σημαντική παράμετρος στην διαδικασία εγχάραξης είναι η *ομοιομορφία* (uniformity). Η ομοιομορφία καθορίζεται από την μεταβολή του εναπομείναντος πάχους του προς εγχάραξη στρώματος στο εύρος της εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Αν οι μεταβολές είναι μικρές η ομοιομορφία είναι υψηλή. Η απαίτηση για πιστή μεταφορά του υπερκείμενου στρώματος και πλήρη απομάκρυνση του προς εγχάραξη στρώματος απαιτεί υψηλό βαθμό ομοιομορφίας στην εγχάραξη. Αν τελικά η εγχάραξη δεν είναι ομοιόμορφη, για την πιστή μεταφορά του υπερκείμενου στρώματος χρειάζεται επιπλέον εγχάραξη (overetch) για να απομακρυνθεί ολοκληρωτικά το προς εγχάραξη στρώμα. Στο χρόνο που διαρκεί η επιπλέον εγχάραξη υπάρχει κίνδυνος διάβρωσης του υποκείμενου στρώματος. Η ανάγκη για επιπλέον εγχάραξη λόγω ανομοιομορφίας αναδεικνύει τη σημασία της εκλεκτικότητας.

Η σύγκριση της υγρής με την ξηρή εγχάραξη δείχνει ότι ο απλός αυτοματισμός, η αποφυγή μεγάλου όγκου υγρών χημικών αντιδραστηρίων, η συμβατότητά της με τις υπόλοιπες τεχνολογίες κενού που χρησιμοποιούνται στην κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και κυρίως η ανισοτροπία δίνουν στην ξηρή εγχάραξη σημαντικό προβάδισμα.[2]

1.3. Ξηρή εγχάραξη-Εγχάραξη με πλάσμα

1.3.1. Το πλάσμα

Με τον όρο **«πλάσμα» (plasma)** εννοούμε ένα σχεδόν ουδέτερο (quasineutral) ηλεκτρικά αέριο που αποτελείται από φορτισμένα σωματίδια (θετικά και αρνητικά ιόντα, ηλεκτρόνια) και ουδέτερα μόρια, και εμφανίζει συλλογική συμπεριφορά.[3] Με τον όρο «σχεδόν ουδέτερο» ηλεκτρικά περιγράφεται ένα μέσο στο οποίο η πυκνότητα των θετικών φορτίων είναι σχεδόν ίση με την πυκνότητα των αρνητικών φορτίων. Με τον όρο «συλλογική συμπεριφορά» εννοούμε ότι οι κινήσεις φορτισμένων σωματιδίων του πλάσματος εξαρτώνται όχι μόνο από τις συνθήκες στη γειτονιά των σωματιδίων αλλά και από τις συνθήκες που επικρατούν σε απομακρυσμένες σε σχέση με τα σωματίδια περιοχές.[3]

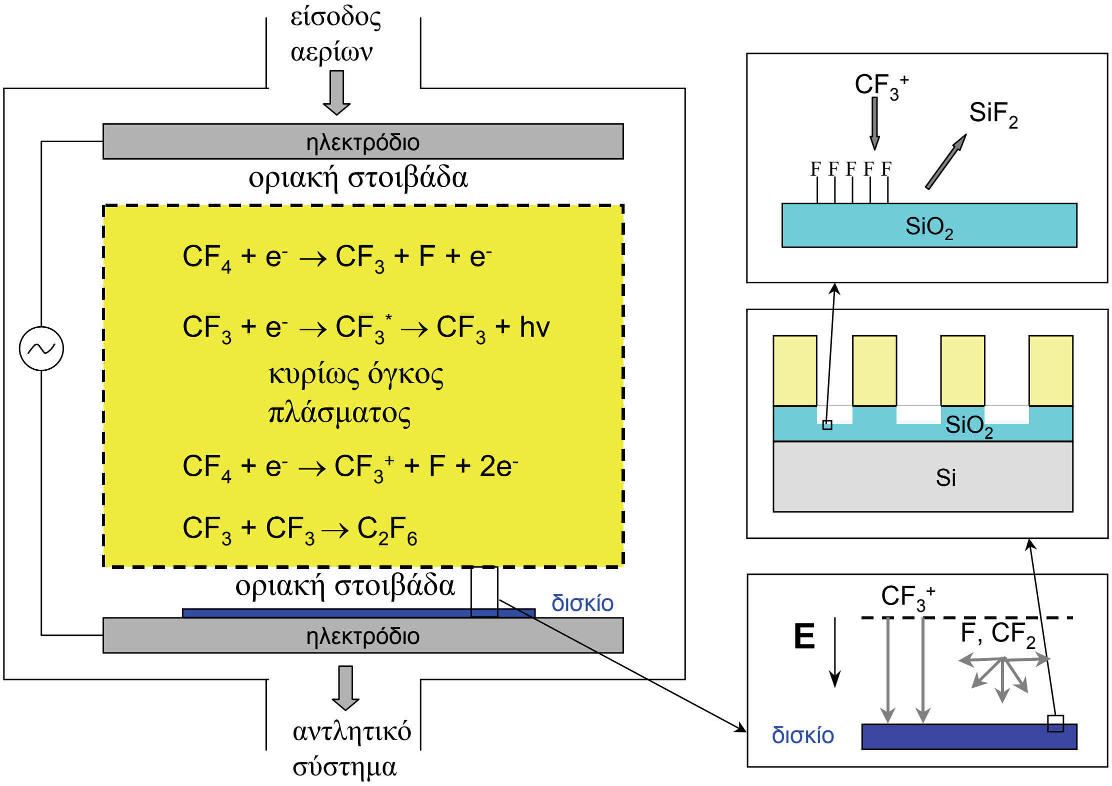
Ο όρος «πλάσμα» οφείλεται στον Langmuir, ο οποίος παρατηρώντας τις ηλεκτρικές εκκενώσεις σε αέρια όπως He, Ne, Ar, διαπίστωσε ότι αυτές λαμβάνουν οποιοδήποτε σχήμα, «πλάθονται». Έτσι το 1929 χρησιμοποίησε την ελληνική λέξη «πλάσμα» για να περιγράψει το φαινόμενο αυτό. Ο Chen[3] αναφέρει ότι πρόκειται για μια εσφαλμένη ονομασία: εξαιτίας της συλλογικής συμπεριφοράς που εμφανίζει το πλάσμα δεν προσαρμόζεται εύκολα στις εξωτερικές επιδράσεις.

Το πλάσμα είναι ιδιαίτερα διαδεδομένο στην φύση, όπως στην ιονόσφαιρα της γης και στην ηλιακή κορώνα, σε σημείο να θεωρείται από ορισμένους ως η τέταρτη κατάσταση της ύλης. Απτά, καθημερινά παραδείγματα πλάσματος αποτελούν οι λαμπτήρες φθορισμού και οι φωτεινές επιγραφές των καταστημάτων.

1.3.2. Ο αντιδραστήρας πλάσματος[2]

Μια απλουστευμένη μορφή ενός αντιδραστήρα πλάσματος φαίνεται στο σχήμα 1.3. Πρόκειται για δύο παράλληλες μεταλλικές πλάκες (ηλεκτρόδια) που απέχουν 0.1-

10 cm, ίσου (συχνότερα και άνισου) εμβαδού, στις οποίες εφαρμόζεται μια εναλλασσόμενη τάση. Το προς επεξεργασία δισκίο βρίσκεται πάνω στο ένα ηλεκτρόδιο. Το όλο σύστημα βρίσκεται μέσα σε ένα θάλαμο κενού. Το αέριο



Σχήμα 1.3. Σχηματικό διάγραμμα ενός αντιδραστήρα παραλλήλων πλακών καθώς και των τυπικών διεργασιών που συμβαίνουν με τη δημιουργία του πλάσματος.

εισέρχεται από το ένα ηλεκτρόδιο (συνήθως από οπές στην επιφάνειά του) και αντλείται από κάποια οπή του θαλάμου μέσω αντλιών κενού. Με την εφαρμογή της τάσεως ξεσπά ηλεκτρική εκκένωση στο αέριο και δημιουργείται πλάσμα. Το αέριο

Πίνακας 1.1. Χαρακτηριστικές τιμές των παραμέτρων του πλάσματος.

Πίεση	10^{-3} - 1 Torr
Κλάσμα ιονισμένων μορίων	$10^{-8} – 10^{-4}$
Πυκνότητα ηλεκτρονίων	$10^{8} – 10^{12}$ ηλεκτρόνια / cm^3
Μέση ενέργεια (θερμοκρασία)	
α) ουδέτερων μορίων	0.025 eV (300 K) – 0.043 eV (500 K)
β) ιόντων στο κυρίως πλάσμα	0.025 eV (300 K) – 0.035 eV (400 K)
γ) ηλεκτρονίων	1 eV (11600 K) – 10 eV (116000 K)
Συχνότητα εναλλασσόμενης τάσης	100 KHz μέχρι μερικά GHz
Συνήθης συχνότητα	13.56 MHz
Συνήθης μέση ενέργεια ιόντων πάνω στην επιφάνεια του δισκίου	200 eV (κάθετα στο δισκίο)

εκπέμπει φως. Στο πλάσμα που δημιουργήθηκε διακρίνονται δύο περιοχές: α) ο κυρίως όγκος (bulk) του πλάσματος που είναι σχεδόν ουδέτερος και ανταποκρίνεται στον ορισμό του πλάσματος που δόθηκε και β) τις οριακές στοιβάδες ή φράκτες ηλεκτρονίων (sheaths) που αναπτύσσονται όταν το πλάσμα έρχεται σε επαφή με κάποια επιφάνεια.

Χαρακτηριστικές τιμές των παραμέτρων του πλάσματος φαίνονται στον πίνακα 1.1. Η θερμοκρασία του αερίου είναι περίπου αυτή του περιβάλλοντος και περίπου ίση με αυτή των αυτή των ιόντων στον κυρίως όγκο του πλάσματος. Αντίθετα, τα ηλεκτρόνια είναι πολύ θερμά (~100.000 K). Η αυξημένη θερμοκρασία (ενέργεια) των ηλεκτρονίων οφείλεται στο ότι ενώ επιταχύνονται (κερδίζουν ενέργεια) από τα πεδία που αναπτύσσονται στο πλάσμα, μεταφέρουν πολύ λίγη ενέργεια στο αέριο κατά τις ελαστικές συγκρούσεις με τα ουδέτερα μόρια. Από την άλλη πλευρά, τα ιόντα μεταφέρουν σχεδόν όλη τους την ενέργεια σε μια ελαστική σύγκρουση με ουδέτερα μόρια.

Όταν η ενέργεια των ηλεκτρονίων αυξηθεί πολύ, τότε υφίστανται και μη ελαστικές (ανελαστικές) συγκρούσεις κατά τις οποίες χάνουν ενέργεια με αποτέλεσμα η ενέργειά τους να μην αυξάνεται επ' άπειρο. Μερικές από τις ανελαστικές συγκρούσεις των ηλεκτρονίων φαίνονται στο σχήμα 1.3 όταν το αέριο στον αντιδραστήρα είναι το CF_4. Έτσι, ένα ηλεκτρόνιο συγκρουόμενο ανελαστικά με ένα ουδέτερο μόριο μπορεί να το διασπάσει σε χημικά δραστικές ρίζες :

$$CF_4 + e^- \rightarrow CF_3 + F + e^-$$

Ένα ηλεκτρόνιο συγκρουόμενο ανελαστικά με ένα ουδέτερο είδος μπορεί να το διεγείρει ηλεκτρονικά οπότε αυτό αποδιεγειρόμενο εκπέμπει φως:

$$CF_3 + e^- \rightarrow CF_3^* \rightarrow CF_3 + h\nu$$

Τέλος, τα ηλεκτρόνια ιονίζουν θετικά ουδέτερα μόρια:

$$CF_4 + e^- \rightarrow CF_3^+ + F + 2e^-$$

Στην παραπάνω αντίδραση παράγεται νέο ηλεκτρόνιο και σε αυτή οφείλεται η συντήρηση του πλάσματος. Η υψηλή ενέργεια των ηλεκτρονίων επιτρέπει χημικές δράσεις σε ένα ψυχρό αέριο που μόνο σε συνθήκες φλόγας θα μπορούσαν να γίνουν.

Στον κυρίως όγκο του πλάσματος, εκτός από τις δράσεις όπου συμμετέχουν ηλεκτρόνια γίνονται και αντιδράσεις μεταξύ ουδετέρων ειδών:

$$CF_3 + CF_3 \rightarrow C_2F_6$$

Τα φαινόμενα που συμβαίνουν στον κυρίως όγκο είναι διαφορετικά από αυτά που συμβαίνουν στην οριακή στοιβάδα που σχηματίζεται όταν το πλάσμα έρθει σε επαφή με μια επιφάνεια. Τα ηλεκτρόνια κινούνται με μεγαλύτερη ταχύτητα από τα ιόντα. Έτσι, φτάνουν συντομότερα από τα ιόντα στην επιφάνεια με την οποία το πλάσμα έρχεται σε επαφή. Το αποτέλεσμα είναι η επιφάνεια να φορτιστεί αρνητικά, το δυναμικό της να γίνει χαμηλότερο από αυτό του πλάσματος και τα ηλεκτρόνια να απωθούνται από αυτή. Συνεπώς, η οριακή στοιβάδα αδειάζει από ηλεκτρόνια και το δυναμικό που αναπτύσσεται δρα σαν ένας φράκτης ηλεκτρονίων. Όταν στην επιφάνεια εφαρμόζεται και εξωτερικό δυναμικό, όπως συμβαίνει στα ηλεκτρόδια του πλάσματος, η πτώση δυναμικού από το πλάσμα στο ηλεκτρόδιο είναι σημαντική και φτάνει από δεκάδες σε εκατοντάδες Volts. Το δυναμικό αυτό δημιουργεί ένα ηλεκτρικό πεδίο που κατευθύνεται κάθετα προς το ηλεκτρόδιο και συνεπώς προς το δισκίο που εγχαράσσεται (σχήμα 1.3). Οι τροχιές των ουδετέρων ειδών που εισέρχονται στο φράκτη ηλεκτρονίων δεν επηρεάζονται από το πεδίο. Αντίθετα τα ιόντα που εισέρχονται στην οριακή στοιβάδα επιταχύνονται από το πεδίο, πέφτουν με ορμή σχεδόν κατακόρυφα πάνω στο δισκίο και υποβοηθούν τις χημικές δράσεις που συμβαίνουν εκεί (σχήμα 1.3). Επειδή η κατεύθυνση των ιόντων είναι σχεδόν κατακόρυφη ο ρυθμός εγχάραξης αυξάνεται μόνο σε αυτή την κατεύθυνση. Έτσι, εξηγείται απλά το φαινόμενο της ανισοτροπίας στην εγχάραξη με πλάσμα.

1.3.3. Μηχανισμοί εγχάραξης

Οι βασικοί μηχανισμοί εγχάραξης μιας επιφάνειας[4] είναι οι παρακάτω:

α) Ιονοβολή (physical sputtering)

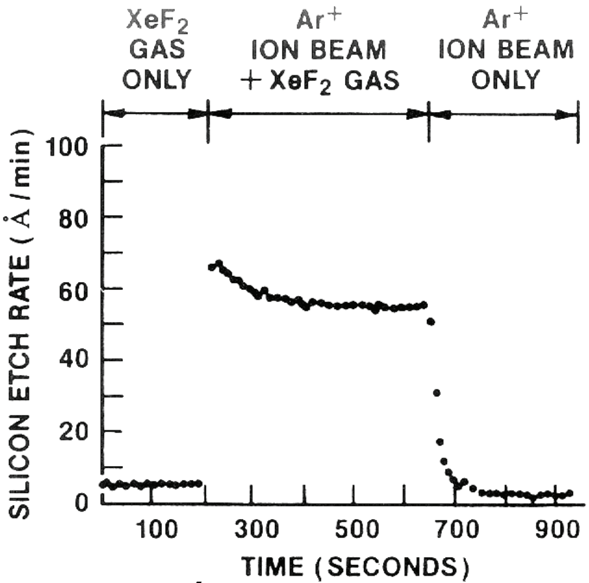
Πρόκειται για το φυσικό μηχανισμό εκτίναξης υλικού από την επιφάνεια λόγω του βομβαρδισμού του με υψηλής ενέργειας ιόντα. Η ιονοβολή είναι κατευθυνόμενη σχεδόν κάθετα στο δισκίο και προκαλεί ανισοτροπική εγχάραξη. Είναι ο μηχανισμός με την μικρότερη εκλεκτικότητα.

β) Θερμική ή Χημική εγχάραξη (thermal or chemical etching)

Πρόκειται για τη χημική αντίδραση μεταξύ των ουδετέρων ειδών που φτάνουν στην επιφάνεια και του προς εγχάραξη στρώματος κατά την οποία παράγονται πτητικά προϊόντα. Η χημική εγχάραξη προκαλεί ισοτροπική εγχάραξη. Η εκλεκτικότητα αυτού του μηχανισμού μπορεί να είναι πολύ υψηλή

γ) Εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα (ion-enhanced etching)

Πρόκειται για το αποτέλεσμα της συνεργιστικής δράσης των δύο προηγούμενων μηχανισμών εγχάραξης που οδηγεί σε σημαντικά υψηλότερους ρυθμούς εγχάραξης σχετικά με το καθαρά αθροιστικό αποτέλεσμα της ιονοβολής και της χημικής εγχάραξης. Στο σχήμα 1.4[5] φαίνεται ακριβώς η διαφορά στους ρυθμούς εγχάραξης στρώματος πυριτίου. Αρχικά χρησιμοποιείται μόνο δέσμη XeF_2, οπότε συμβαίνει μόνο χημική εγχάραξη, στη συνέχεια προστίθεται δέσμη ιόντων Ar^+ και τέλος αφαιρείται η δέσμη XeF_2. Είναι φανερή η διαφορά στο ρυθμό εγχάραξης στα διάφορα στάδια εγχάραξης.

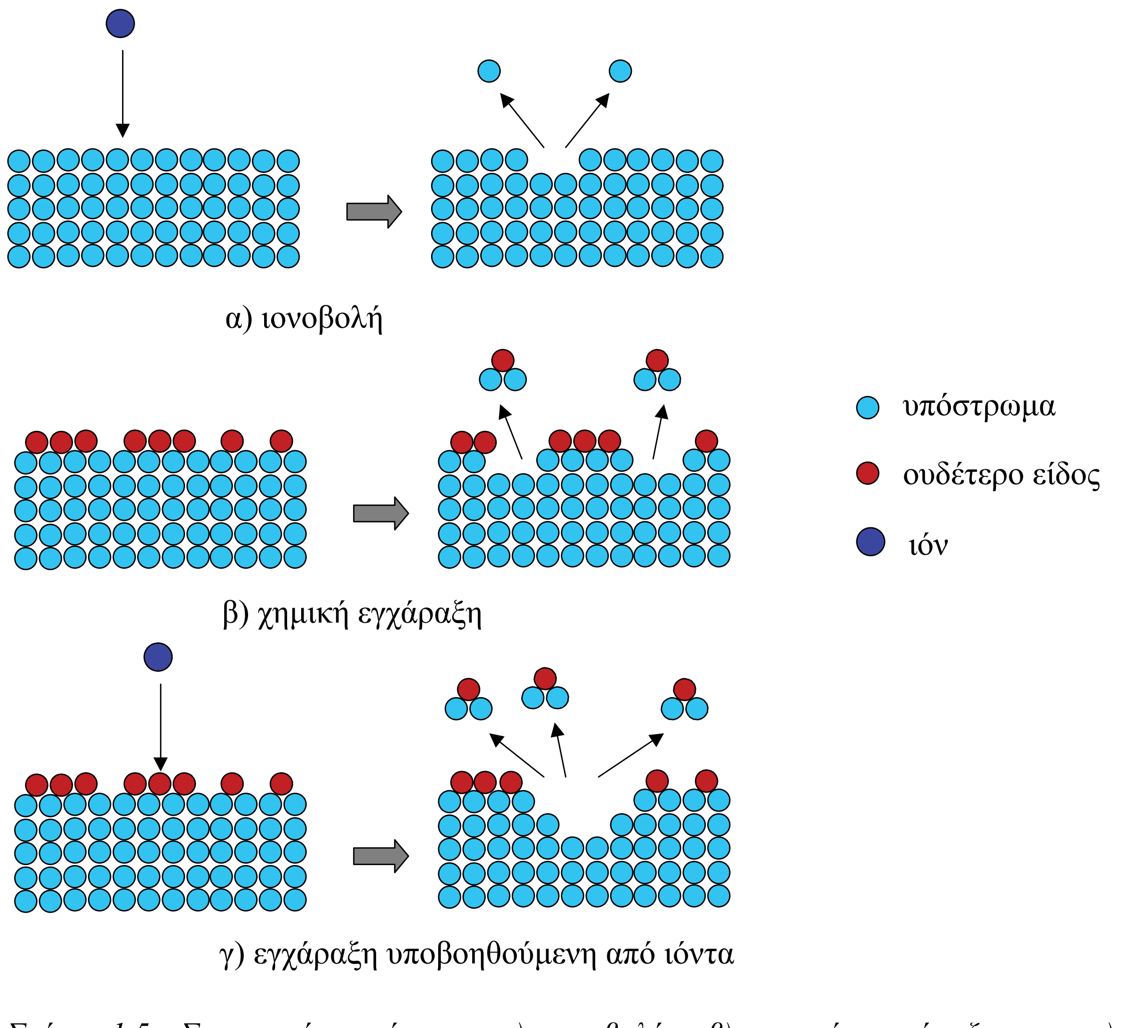


<u>Σχήμα 1.4.</u> Ο ρυθμός εγχάραξης[5] επιφάνειας Si λόγω καθαρά χημικής εγχάραξης

(t<200sec), λόγω εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα (200sec< t<650sec) και λόγω ιονοβολής (t>650sec).

Έχουν δοθεί διάφορες ερμηνείες για την εξήγηση της συνεργιστικής δράσης ιονοβολής και χημικής εγχάραξης. Σύμφωνα με μία από αυτές, τα ιόντα υψηλής ενέργειας που προσπίπτουν στην επιφάνεια προκαλούν αλλαγές (damages) σε αυτή και με αυτόν τον τρόπο την καθιστούν περισσότερο ενεργή.[4] Σύμφωνα με κάποια άλλη τα ιόντα παρέχουν την απαιτούμενη ενέργεια ώστε είτε να επιταχυνθεί ένα στάδιο της αντίδρασης, είτε να επιταχυνθεί η εκρόφηση των προϊόντων. Τέλος, υπάρχει και η περίπτωση τα ιόντα να απομακρύνουν κάποιο προστατευτικό στρώμα που σχηματίζεται επί της επιφάνειας και να καθιστούν δυνατή την έκθεση του προς εγχάραξη στρώματος στο χημικά δραστικό ουδέτερο είδος.[6]

Επειδή ο μηχανισμός ελέγχεται από τη ροή ιόντων προς την επιφάνεια, η οποία είναι σχεδόν κάθετη και δεν φτάνει στα πλάγια τοιχώματα της εγχαρασσόμενης δομής, προκαλεί ανισοτροπική εγχάραξη.



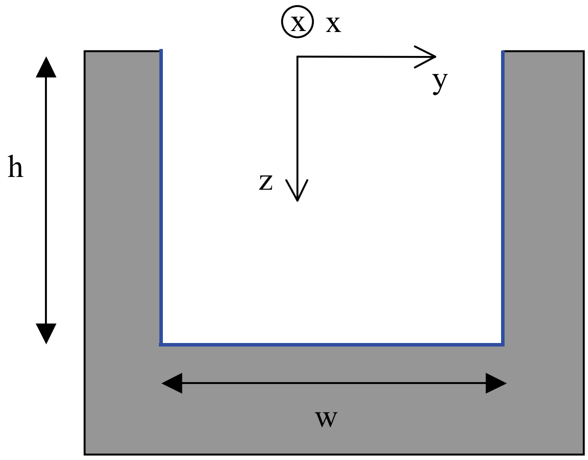
<u>Σχήμα 1.5.</u> Σχηματική παράσταση α) ιονοβολής, β) χημικής εγχάραξης και γ) εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα.

1.4. Εγχάραξη δομών με πλάσμα

Μία από τις βασικές απαιτήσεις κατά την εγχάραξη δομών (π.χ αυλακιών ή οπών) είναι η μικροσκοπική ομοιομορφία (microscopic uniformity) εγχάραξης, δηλαδή η ομοιομορφία εγχάραξης σε κάθε μία από τις δομές που περιέχει ένα δισκίο (διατήρηση σταθερού ρυθμού εγχάραξης σε κάθε μια από τις δομές που περιέχει ένα δισκίο). Προβλήματα στην ικανοποίηση της παραπάνω απαίτησης δημιουργεί η εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από τις διαστάσεις των δομών ή καλύτερα από το λόγο ασυμμετρίας των δομών (aspect ratio dependent etching) και από την τοπική πυκνότητά των δομών επί του δισκίου (pattern dependent etching ή microloading). Συχνά στη βιβλιογραφία αντί του όρου "aspect ratio dependent etching" χρησιμοποιείται ο όρος "microloading". Πρόκειται ωστόσο για δύο διαφορετικά φαινόμενα[7] που εξηγούνται παρακάτω. Στην παρούσα εργασία δεν θα ασχοληθούμε με την επίδραση της πυκνότητας δομών επί του δισκίου στην εγχάραξη.

1.4.1 Εγχάραξη εξαρτώμενη από το λόγο ασυμμετρίας μιας δομής

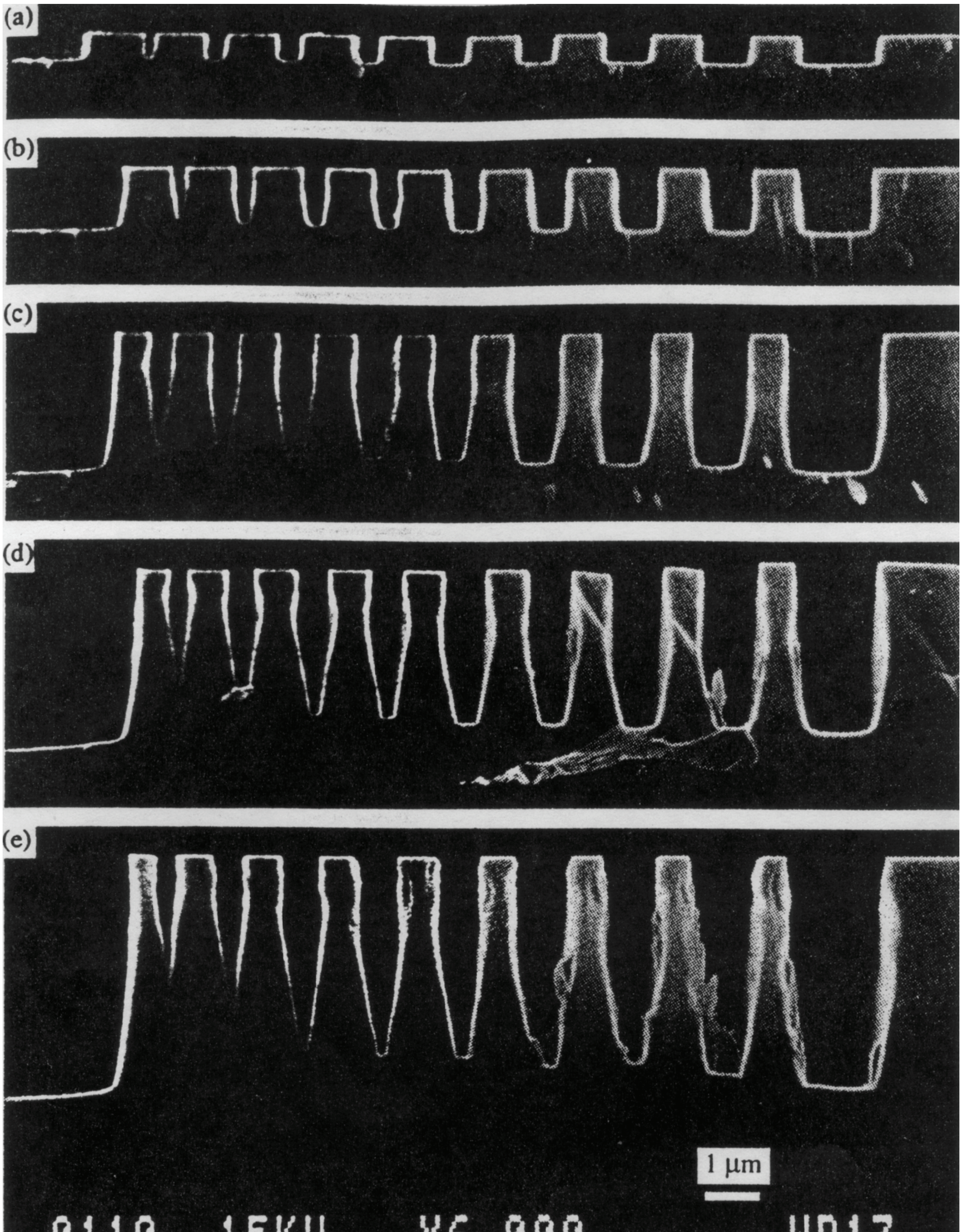
Ο λόγος ασυμμετρίας (Aspect Ratio) μιας δομής ορίζεται από το λόγο του βάθους της δομής προς το πλάτος (αυλάκι) ή τη διάμετρο (κυλινδρική οπή).



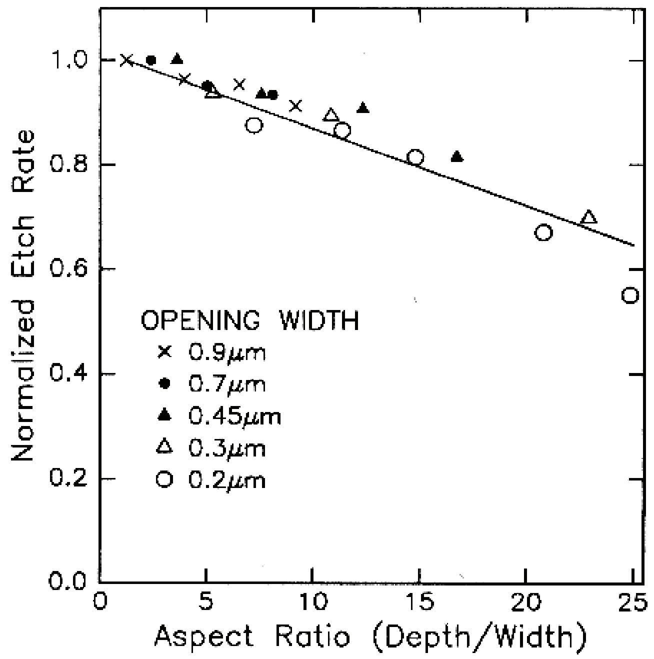
Σχήμα 1.6. Ο λόγος ασυμμετρίας (Aspect Ratio) για αυλάκι ορίζεται από το λόγο του βάθους h προς το πλάτος w του αυλακιού.

Έχει παρατηρηθεί πειραματικά τόσο για το Si,[8,9,10,11] όσο και για το SiO_2[12,13,14] ότι ο ρυθμός εγχάραξης σε στενότερες δομές (π.χ. στενότερα αυλάκια ή κυλινδρικές οπές μικρότερης διαμέτρου) είναι χαμηλότερος (σχήμα 1.7). Αυτή μάλιστα η επίδραση στο ρυθμό εγχάραξης δεν οφείλεται στις απόλυτες διαστάσεις αλλά στο λόγο ασυμμετρίας, A, της δομής (σχήμα 1.8). Αυτό το φαινόμενο επίδρασης στο ρυθμό εγχάραξης είναι γνωστό ως υστέρηση εγχάραξης (Reactive Ion Etching lag ή RIE lag[*] και μπορεί να προκαλέσει σημαντικά προβλήματα στη διαδικασία εγχάραξης.[7]

[*] η ονομασία οφείλεται σε ερευνητές της IBM

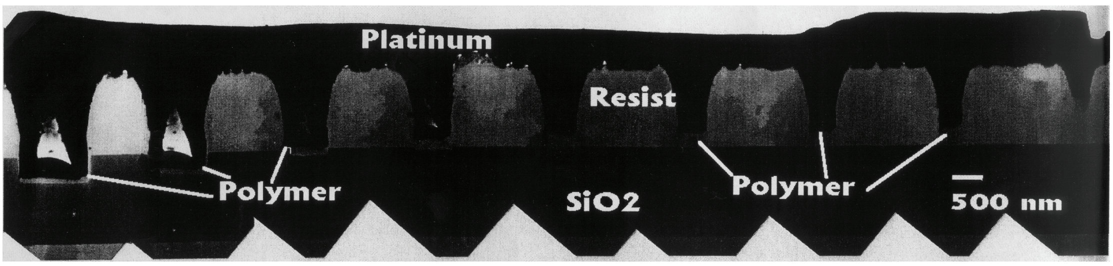


Σχήμα 1.7. Φωτογραφία[8] *από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης έπειτα από εγχάραξη αυλακιών Si με πλάσμα SF_6/O_2. Η προστατευτική μάσκα είναι από Al. Το πάχος της προστατευτικής μάσκας και ο χρόνος εγχάραξης για κάθε ομάδα αυλακιών είναι a) 67nm και 4min, b) 134nm και 8min, c) 268nm και 16min, d) 402nm και 24min και e) 536nm και 32min.*



Σχήμα 1.8. Ρυθμός εγχάραξης Si σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας για αυλάκια διαφορετικού πλάτους.[7]

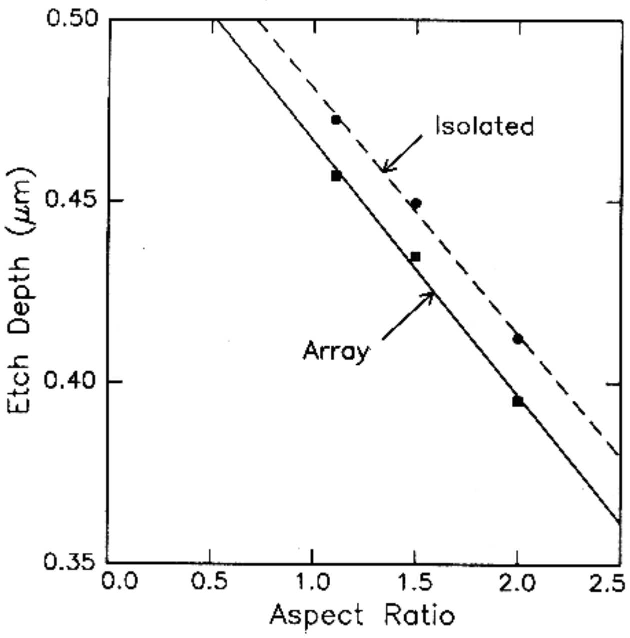
Σε ορισμένες περιπτώσεις η μείωση του ρυθμού εγχάραξης λόγω του φαινομένου υστέρηση εγχάραξης είναι τόσο έντονη ώστε να οδηγεί στη διακοπή της εγχάραξης και στην εναπόθεση ενός πολυμερικού προϊόντος στη βάση της δομής. Στο σχήμα 1.9 φαίνεται η μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση από τις ευρύτερες προς τις στενότερες κυλινδρικές οπές SiO_2. Είναι εμφανές το πρόβλημα που είναι δυνατό να δημιουργήσει η γεωμετρία της δομής: αντί για εγχάραξη έχουμε εναπόθεση.



Σχήμα 1.9. Φωτογραφία[15] από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (TEM) οπών SiO_2 που εγχαράσσονται σε πλάσμα $CHF_3/H_2/O_2$.

1.4.2 Εγχάραξη εξαρτώμενη από την πυκνότητα των δομών (microloading)

Ο όρος microloading χρησιμοποιείται για να περιγράψει την εξάρτηση της εγχάραξης δομών με ακριβώς ίδιες διαστάσεις που βρίσκονται σε θέσεις επί του εγχαρασσόμενου δισκίου με διαφορετική πυκνότητα δομών. Αυτή η επίδραση της πυκνότητας των δομών στην εγχάραξη φαίνεται στο σχήμα 1.10 όπου μελετάται η εγχάραξη οπών Si σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας και της πυκνότητας οπών της περιοχής όπου βρίσκονται.[7] Ανεξάρτητα από το λόγο ασυμμετρίας παρατηρείται ότι ο ρυθμός εγχάραξης των απομονωμένων οπών είναι μεγαλύτερος από αυτόν που αντιστοιχεί στις οπές που βρίσκονται συγκεντρωμένες.



Σχήμα 1.10. Φαινόμενο microloading κατά την εγχάραξη οπών Si.[7] *Για τον ίδιο λόγο ασυμμετρίας ο ρυθμός εγχάραξης είναι διαφορετικός για οπή που βρίσκεται απομονωμένη στο δισκίο και οπή που βρίσκεται σε περιοχή όπου υπάρχουν και άλλες. Τόσο για την απομονωμένη οπή όσο και για αυτή που βρίσκεται σε θέση υψηλής πυκνότητας είναι φανερή η υστέρηση εγχάραξης.*

Το φαινόμενο microloading οφείλεται στην έλλειψη αντιδρώντων στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια υπό συνθήκες όπου το στάδιο μεταφοράς των στην επιφάνεια είναι το ελέγχον. Αύξηση της πυκνότητας των δομών έχει σαν αποτέλεσμα αύξηση της προς εγχάραξη επιφάνειας και μείωση της συγκέντρωσης των αντιδρώντων πάνω σε αυτή. Μείωση της συγκέντρωσης των αντιδρώντων έχει σαν αποτέλεσμα και τη μείωση του ρυθμού αντίδρασης (εγχάραξης).

1.5 Σκοπός της εργασίας

Ο σκοπός της εργασίας είναι η προσομοίωση εγχάραξης δομών SiO_2, Si με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων, η πρόβλεψη της εξέλιξης της τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών και η κατανόηση βασικών φαινομένων όπως η υστέρηση εγχάραξης (Reactive Ion Etching lag ή RIE lag) και η μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση.

Οι επιμέρους στόχοι για την επίτευξη του παραπάνω στόχου είναι:

1. Η ανάπτυξη μοντέλου για τις διεργασίες που συμβαίνουν σε ελεύθερες επιφάνειες Si, SiO_2 κατά την εγχάραξη με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Αυτό το ***μοντέλο ελεύθερης επιφάνειας*** υπολογίζει ρυθμούς εγχάραξης και προβλέπει τη μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση. Τα αποτελέσματα του μοντέλου συγκρίνονται με πειραματικά.

2. Η ανάπτυξη μοντέλου που περιγράφει την επίδραση της γεωμετρίας της εγχαρασσόμενης δομής και των φαινομένων μεταφοράς της ροής στις τοπικές τιμές των παραμέτρων που καθορίζουν το ρυθμό εγχάραξης (ροή ιόντων, ουδετέρων ειδών). Πρόκειται για ένα ***μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών μέσα σε δομές***. Οι δομές που εξετάζονται είναι αυλάκια και οπές με κυλινδρική συμμετρία. Εξετάζονται φαινόμενα όπως η σκίαση (shadowing) και η επανεκπομπή (re-emission) της ροής.

3. Η ***αριθμητική επίλυση των μαθηματικών προβλημάτων*** στα οποία οδηγεί η θεώρηση φαινομένων όπως η σκίαση και κυρίως η επανεκπομπή της ροής. Για παράδειγμα η ροή από επανεκπομπή που φτάνει σε κάθε σημείο της εγχαρασσόμενης δομής υπολογίζεται λύνοντας αριθμητικά μια ολοκληρωτική εξίσωση. Δοκιμάζονται και αξιολογούνται περισσότερες από μια μεθόδους επίλυσης.

4. Η ***σύζευξη των δύο μοντέλων (1 και 2) προκειμένου να υπολογιστεί τοπικά ο ρυθμός εγχάραξης δομών Si, SiO_2***. Με τη σύζευξη μελετάται ο ρόλος φαινομένων όπως η σκίαση και η επανεκπομπή της ροής στην υστέρηση εγχάραξης. Επιχειρείται επίσης η *ενσωμάτωση των μοντέλων που αναπτύχθηκαν σε ένα προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας*.

Μετά την υλοποίηση των παραπάνω απαιτήσεων η εργασία ολοκληρώνεται με την καταγραφή των συμπερασμάτων καθώς και των προτάσεων για μελλοντικές εργασίες.

Αναφορές

[1] Γογγολίδης Ευάγγελος, *Σημειώσεις μεταπτυχιακού μαθήματος Μικροηλεκτρονικής: Διαδικασίες Κατασκευής Ολοκληρωμένων Κυκλωμάτων, Τεχνολογίες Αποτύπωσης Σχήματος. Μέρος πρώτο: Λιθογραφία, (*Αθήνα, Νοέμβριος 1998), σελ. 4-5.
[2] Γογγολίδης Ευάγγελος, Επιθεώρηση Φυσικής, Β περίοδος, Ζ(21), 43 (1992).
[3] F. F. Chen, *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion, Volume 1: Plasma Physics*, *2nd edition*, (Plenum Press, New York, 1984), p. 1-4.
[4] D. L. Flamm, *Plasma Etching. An Introduction*, (Academic Press, San Diego, 1989), p.18-21.
[5] J. W. Coburn and H. F. Winters, J. Vac. Sci. Technol. **16**, 391 (1979).
[6] M.A. Lieberman, A. J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*, (Wiley&Sons, New York, 1994), p. 5.
[7] R. A. Gottscho, C. W. Jurgensen, and D. J. Vitkavage, J. Vac. Sci. Technol. B **10**, 2133 (1992).
[8] V. F. Lukichev and V. A. Yunkin, Russian Microelectronics **27**, 194 (1998).
[9] V. F. Lukichev and V. A. Yunkin, Microelectronic Engineering **46**, 315 (1999).
[10] D. Chin, S. H. Dhang, and G. L. Long, J. Electrochem. Soc.: Solid State Science and Technology **132**, 1705 (1985).
[11] A. D. Bailey III, M. C. M. van de Sanden, J. A. Gregus, and R. A. Gottscho, J. Vac. Sci. Technol. B **13**, 92 (1995).
[12] O. Joubert, G. S. Oehrlein, and Y. Zhang, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 658 (1994).
[13] O. Joubert, G. S. Oehrlein, and M. Surendra, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 665 (1994).
[14] S. Kato, M. Sato, and Y. Arita, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 1204 (1994).
[15] Ομάδα Ινστιτούτου Fraunhofer (προσωπική επικοινωνία).

2

Μοντέλο εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας Si, SiO_2 σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων

Περίληψη

Αναπτύσσεται μοντέλο εγχάραξης ελεύθερων επιφανειών Si, SiO_2 σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Το μοντέλο περιγράφει τις επιφανειακές διεργασίες ρόφησης-εκρόφησης των ουδετέρων ειδών που παράγονται στον κυρίως όγκο του πλάσματος καθώς και τις διεργασίες δημιουργίας και καταστροφής πολυμερούς που σχηματίζεται στην επιφάνεια. Υπολογίζει ρυθμούς εγχάραξης και προβλέπει και τη μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση. Βασική παράμετρος του μοντέλου είναι το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας, θ. Το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές αντιστοιχίζεται με το πάχος του πειραματικά παρατηρούμενου πολυμερικού στρώματος στην επιφάνεια Si, SiO_2 και τα αποτελέσματα του μοντέλου συγκρίνονται με πειραματικά.

Περιεχόμενα

2.1 Εισαγωγή

Η εγχάραξη διηλεκτρικών όπως το SiO_2 σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων (π.χ. πλάσμα CF_4) είναι μια συχνά χρησιμοποιούμενη διεργασία κατά την κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Τέτοιες διεργασίες πρέπει να σταματούν πριν προκαλέσουν ζημιά στο υποκείμενο στρώμα που συχνά είναι Si. Οι ρυθμοί εγχάραξης και η εκλεκτικότητα εγχάραξης του SiO_2 ως προς το Si είναι εξαιρετικής σημασίας σε τέτοιου είδους διεργασίες, όπως είναι η εγχάραξη οπών επαφής (contact hole ή via etching) μεταξύ διαφορετικών στρωμάτων ολοκλήρωσης.

Πειραματικά δεδομένα από διάφορες ομάδες[1,2,3,4,5,6,7] αναδεικνύουν ότι σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων υψηλής πυκνότητας σε ιόντα (High Density Plasma ή HDP) η εγχάραξη SiO_2, Si εξελίσσεται διαμέσου ενός λεπτού φιλμ πολυμερούς. Η εγχάραξη και η εναπόθεση πολυμερούς διεξάγονται ταυτόχρονα. Αυτό καθιστά την προσπάθεια για προσομοίωση της διεργασίας ακόμη δυσκολότερη.

Στο παρόν κεφάλαιο περιγράφεται ένα (φαινομενολογικό) μοντέλο για την εγχάραξη SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων που λαμβάνει υπόψη τα ανταγωνιστικά φαινόμενα εγχάραξης και εναπόθεσης. Σε πρώτη φάση αναγνωρίζονται οι βασικοί μηχανισμοί εγχάραξης-εναπόθεσης. Στη συνέχεια καταστρώνονται οι εξισώσεις του μοντέλου και υπολογίζονται οι συντελεστές (αποδόσεις) χωριστά για κάθε έναν από τους μηχανισμούς που λαμβάνονται υπόψη με προσαρμογές σε διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα. Τέλος παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του μοντέλου και συγκρίνονται με πειραματικά.

2.2 Οι βασικοί μηχανισμοί

Στον κυρίως όγκο πλάσματος φθοριωμένων υδρογονανθράκων, όπως το πλάσμα CF_4, παράγονται ιόντα όπως CF_3^+, CF_2^+, CF^+, C^+ , ουδέτερες ρίζες CF_3, CF_2, CF και άτομα F. Τα ιόντα και τα ουδέτερα μόρια καταλήγουν στην προς εγχάραξη επιφάνεια προκαλώντας σε αυτή αυτόνομα ή συνεργιστικά φυσικές και χημικές δράσεις.

Η μαθηματική περιγραφή αυτών των δράσεων με βάση το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας είναι συνήθης στη βιβλιογραφία:[8,9,10,11,12,13] κάθε ουδέτερο είδος N προσροφάται στην επιφάνεια και απομακρύνεται από αυτή με φυσικούς και χημικούς μηχανισμούς με αποτέλεσμα να καλύπτει ένα κλάσμα της, θ_N. Αυτή η προσέγγιση χρησιμοποιείται και στο παρόν μοντέλο.

Ακολουθεί η μαθηματική περιγραφή των βασικών μηχανισμών που συμβαίνουν στην επιφάνεια και λαμβάνονται υπόψη στο μοντέλο.

2.2.1 Προσρόφηση ουδετέρων ειδών

Τα ουδέτερα είδη (ουδέτερες ρίζες CF_x, x=1,2,3 και άτομα F) προσροφόνται στην «καθαρή επιφάνεια» (1-θ), όπου θ είναι το κλάσμα κάλυψης (surface coverage) της επιφάνειας από όλα τα ουδέτερα είδη, με συντελεστή προσκόλλησης (sticking coefficient) στην καθαρή επιφάνεια ίσο με s. Τα προσροφούμενα είδη θεωρείται ότι περνούν πολύ γρήγορα από την κατάσταση φυσικής ρόφησης σε αυτή της χημειορόφησης εξαιτίας της υψηλής δραστικότητάς τους. Αν η ροή ουδετέρων που φτάνει στην επιφάνεια είναι j_N, τότε η ροή που προσροφάται είναι:

$$j_{ADS} = s\,(1-\theta)\,j_N \qquad (1)$$

2.2.2 Εγχάραξη Υποβοηθούμενη από Ιόντα (ΕΥΙ): Χημική και μηχανική (Ion-Enhanced Chemical Etching + Ion-Enhanced Chemical Sputtering)

Τα ιόντα που προσπίπτουν στην επιφάνεια προκαλούν ανάμιξη των ουδετέρων ειδών στην επιφάνεια και στη συνέχεια αυθόρμητη-θερμική ή υποβοηθούμενη από ιόντα εκρόφηση προϊόντων. Θεωρώντας ότι το κύριο είδος τύπου SiF_x στο στρώμα επί της επιφάνειας είναι το SiF_2, ο ρυθμός εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα είναι

$$ER_{IE} = \beta' \,(1+b)\, \theta_{SiF2}\, j_{ION} \qquad (2)$$

και ο αντίστοιχη *απόδοση εγχάραξης* δηλαδή άτομα Si που απομακρύνονται ανά προσπίπτον ιόν είναι :

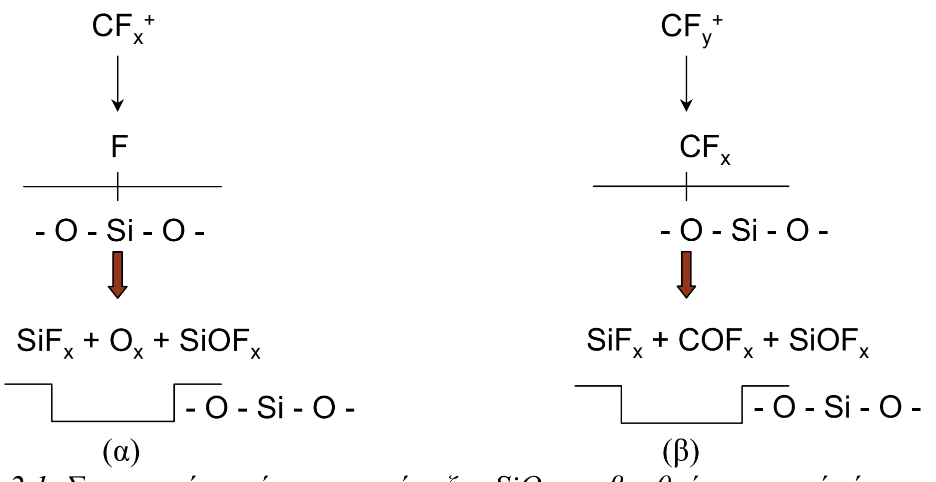
$$y_{IE} = \beta' \,(1+b)\, \theta_{SiF2} = \beta\, \theta_{SiF2} \qquad (3)$$

όπου β′ είναι ο συντελεστής χημικής εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα,
b το κλάσμα ακόρεστων προϊόντων SiF_x/SiF_2,
θ_{SiF2} το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από SiF_2 και
j_{ION} η ροή ιόντων που προσπίπτει στην επιφάνεια.

Ο συντελεστής β′ αντιστοιχεί στην παραγωγή κορεσμένων προϊόντων όπως το SiF_4. Ο μηχανισμός εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα περιλαμβάνει και τη μηχανική απομάκρυνση ακόρεστων προϊόντων τύπου SiF_x, $x<4$, που εκφράζεται από το γινόμενο (bβ′). Οι συντελεστές β′ και b έχουν τη μορφή:

$$\beta' = \beta_0' \,(\sqrt{E} - \sqrt{E_{th}}\,),\ E_{th}= 4 \text{ eV και } b=b_0\sqrt{E}, \qquad (4)$$

όπου E είναι η ενέργεια των ιόντων (eV) και
E_{th} είναι το κατώφλι ενέργειας (eV) για την υποβοηθούμενη από ιόντα χημική εγχάραξη.



<u>*Σχήμα 2.1.*</u> *Σχηματική παράσταση εγχάραξης SiO_2 υποβοηθούμενης από ιόντα σε τμήμα επιφάνειας που καλύπτεται από α) άτομα F και β) ουδέτερες ρίζες CF_x.*

2.2.3 Καθαρά χημική ή θερμική εγχάραξη (thermal etching)

Τα άτομα F εγχαράσσουν υποστρώματα Si, SiO_2 με ρυθμό ανάλογο με την ροή ατόμων F στην επιφάνεια. Η εξάρτηση του ρυθμού θερμικής εγχάραξης από το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας διαφέρει στη βιβλιογραφία. Ο Zawaideh[11,12] πολλαπλασιάζει το ρυθμό με το κλάσμα της καθαρής επιφάνειας (1 − θ), ενώ ο Gray[8] θεωρεί ότι δεν υπάρχει εξάρτηση από το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας. Στην παρούσα εργασία θεωρείται κάτι ενδιάμεσο στις δύο παραπάνω προσεγγίσεις και ο ρυθμός πολλαπλασιάζεται με το κλάσμα της επιφάνειας που δεν καλύπτεται από άνθρακα:

$$ER_{TH} = K_0\, e^{-Ea/kT}\, (1 - \theta_C)\, j_F \qquad (5)$$

όπου E_a είναι η ενέργεια ενεργοποίησης για τη δράση θερμικής εγχάραξης,
k η σταθερά Boltzmann,
T η θερμοκρασία της επιφάνειας και
θ_C το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από άνθρακα.

Αν η ροή ατόμων F (j_F) είναι σε molecules/cm^2/s και η σταθερά K_0 σε cm^3/molecule ή A s cm^2/min/molecule, τότε ο ρυθμός εγχάραξης είναι σε cm/s ή A/min αντίστοιχα. Μολονότι ο ρυθμός θερμικής εγχάραξης δεν σχετίζεται με τη ροή ιόντων ορίζουμε ως απόδοση θερμικής εγχάραξης:

$$y_{TH} = K(T)\,(1-\theta_c)\,R_F, \text{with } R_F = \frac{j_F}{j_{ION}} \text{ and } K(T) = \frac{K_0 \rho N_{Av}}{M_w} e^{-E_a/kT} \qquad (6)$$

όπου K(T) είναι ένας αδιάστατος συντελεστής,
ρ η πυκνότητα του υλικού που εγχαράσσεται,
N_{Av} ο αριθμός Avogadro και
M_w το ατομικό ή μοριακό βάρος του υλικού που εγχαράσσεται.

2.2.4 Ιονοβολή ή καθαρά μηχανική εγχάραξη από τα προσπίπτοντα ιόντα (sputtering) και (άμεση) απευθείας εναπόθεση ιόντων

Η απόδοση ιονοβολής, y_{SP}, προτάθηκε από τον Steinbruchel[14] ως συνάρτηση της ενέργειας των ιόντων:

$$y_{SP} = A\,(\sqrt{E} - \sqrt{E_{th}}) \qquad (7)$$

όπου A σταθερός συντελεστής,
E είναι η ενέργεια των ιόντων (eV) και
E_{th} είναι το κατώφλι ενέργειας (eV) για την ιονοβολή.

Οι Oehrlein[1] και Maruyama[15] αναφέρουν ότι τα ιόντα είναι δυνατό σε αντιδραστήρες πλάσματος υψηλής πυκνότητας ιόντων (High Density Plasma reactors) να εναποτεθούν απευθείας επί της επιφάνειας αντί να προκαλέσουν μηχανική εγχάραξή της. Η εξίσωση (7), όταν η ενέργεια ιόντων είναι μικρότερη από την ενέργεια E_{th}, προβλέπει αρνητικό ρυθμό εγχάραξης δηλαδή εναπόθεση. Αυτό το είδος εναπόθεσης καλείται «απευθείας εναπόθεση ιόντων» (direct ion deposition).

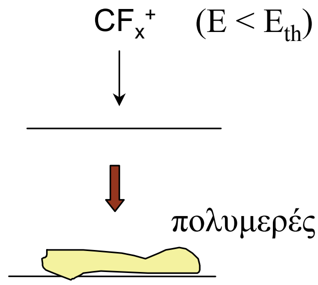
Τυπικές τιμές ενέργειας κατωφλίου E_{th} είναι μερικές δεκάδες έως μερικές εκατοντάδες eV, εξαρτώμενες από τον τύπο των ιόντων. Αφού ρυθμός εγχάραξης είναι μηδέν σε μηδενική ενέργεια ιόντων και σε ενέργεια ίση με E_{th}, θα πρέπει να υπάρχει ένα ελάχιστο της απόδοσης εγχάραξης (μέγιστο του ρυθμού εναπόθεσης) σε μια τιμή ενέργειας ενδιάμεση, γεγονός που επιβεβαιώνεται και από πειραματικά δεδομένα για κάποια ιόντα.[16,17] Υποθέτουμε την παρακάτω απλή μαθηματική συνάρτηση για προσαρμόσουμε τα πειραματικά δεδομένα:

$$y_d = -A_d \sqrt{E} \text{ ,if } 0 < E < E_{\text{maximum deposition yield}} \qquad (8)$$

$$y_d = A(\sqrt{E} - \sqrt{E_{th}}) \text{ , if } E > E_{\text{maximum deposition yield}} \qquad (9)$$

όπου A_d είναι σταθερός συντελεστής και
$E_{\text{maximum deposition yield}}$ η ενέργεια για την οποία ο ρυθμός εναπόθεσης είναι ο μέγιστος, συνήθως θεωρείται ίση με $E_{th}/2$.

Ενώ η μηχανική εγχάραξη έχει μελετηθεί επαρκώς και υπάρχουν τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα η απευθείας εναπόθεση ιόντων δεν έχει λεπτομερώς μελετηθεί. Έτσι, οι συντελεστές A, A_d των εξισώσεων (8) και (9) όπως προκύπτουν από προσαρμογές πειραματικών δεδομένων απόδοσης ιονοβολής σαν συνάρτηση της ενέργειας θα πρέπει να θεωρηθούν σαν πρώτες προσεγγίσεις.

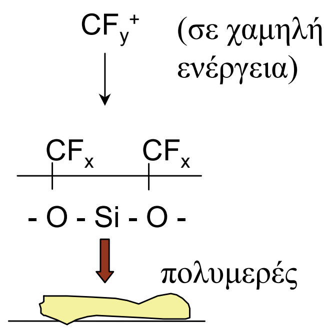


Σχήμα 2.2. Σχηματική παράσταση απευθείας εναπόθεσης ιόντων με χαμηλή ενέργεια σε επιφάνεια SiO_2.

2.2.5 Εναπόθεση υποβοηθούμενη από ιόντα (Ion-enhanced deposition or neutral stitching by ions)

Χημειορροφημένες ουδέτερες ρίζες CF_x είναι δυνατό υπό τον βομβαρδισμό ιόντων χαμηλής ενέργειας να οδηγήσουν στο σχηματισμό πολυμερούς προϊόντος στην επιφάνεια. Αυτός ο μηχανισμός καλείται εναπόθεση υποβοηθούμενη από ιόντα (ion-enhanced deposition[18] ή ion-assisted deposition[15]).

Θεωρούμε ότι εναπόθεση υποβοηθούμενη από ιόντα συμβαίνει κάτω από μια τιμή ενέργειας ιόντων και ότι η αντίστοιχη απόδοση δίδεται από εκφράσεις ανάλογες με αυτές των εξισώσεων (8) και (9). Σημειώνεται ότι και σε αυτή την περίπτωση πρόκειται για μια πρώτη εκτίμηση και νέα σχετικά πειράματα θα φωτίσουν το φαινόμενο.



Σχήμα 2.3. Σχηματική παράσταση εναπόθεσης ουδετέρων ριζών CFx σε SiO_2 υποβοηθούμενης από ιόντα χαμηλής ενέργειας.

2.3 Μοντέλα για την εγχάραξη Si, SiO_2 σε πλάσμα CF_4

Στις παραγράφους 2.3.1 και 2.3.2 που ακολουθούν περιγράφονται τα δίκτυα αντιδράσεων και καταστρώνονται οι μαθηματικές εξισώσεις των μοντέλων. ***Οι συμβολισμοί των παραμέτρων και συντελεστών που χρησιμοποιούνται εξηγούνται στην επόμενη παράγραφο 2.3.3***. Στην ίδια παράγραφο περιγράφεται συνοπτικά ο τρόπος με τον οποίο προσδιορίστηκαν οι συντελεστές των μοντέλων.

2.3.1 Το μοντέλο για την εγχάραξη Si

Οι δράσεις που περιλαμβάνονται στο μοντέλο για την εγχάραξη Si με πλάσμα CF_4 φαίνονται στον πίνακα 2.1. Βασική έννοια στην ανάπτυξη του μοντέλου είναι το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας. Θεωρείται ότι τα άτομα F, οι ουδέτερες ρίζες CF_x και το πολυμερές καλύπτουν συγκεκριμένο κλάσμα της επιφάνειας Si ή καλύτερα του αναμεμιγμένου στρώματος που δημιουργείται με την προσρόφηση των ουδετέρων ειδών και τον βομβαρδισμό των ιόντων. Το κλάσμα αυτό οποίο εξαρτάται από τα ισοζύγια στις θέσεις επιφάνειας για κάθε ένα από αυτά τα είδη, τα οποία περιγράφονται από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$\frac{d[Si^*]}{dt} = s_F\,(1-\theta_{TOT})\,j_F - 2\beta_F\,\theta_F\,j_{ION} = 0 \tag{10}$$

$$\frac{d[CF_x]}{dt} = \sum_i s_{CFi}\,j_{CFi}\,(1-\theta_{TOT}) - y_C\,\theta_{CFx}\,j_{ION} - k_{REC}\,\theta_{CFx}\,j_F = 0 \tag{11}$$

$$\frac{d[P]}{dt} = \sum_i x_i\,y_{d,i}\,j_{ION} + \beta_s\theta_{CFx}\,j_{ION} + \beta_s\theta_P\,\theta_{CFx/P}\,j_{ION} - \beta_{F/P}\theta_P\theta_{F/P}\,j_{ION} = 0 \tag{12}$$

$$\theta_{TOT} = \theta_F + \theta_{CFx} + \theta_P \tag{13}$$

Στο ισοζύγιο για τα άτομα F (εξίσωση 10) ο πρώτος όρος είναι όρος προσρόφησης (χημειορρόφησης) ατόμων F με αποτέλεσμα τη δημιουργία ειδών SiF_x (κυρίως SiF_2, $\theta_F=\theta_{SiF2}$). Ο δεύτερος όρος εκφράζει τη διεργασία εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα η οποία απομακρύνει 2 άτομα F για να παράγει SiF_4 δικαιολογώντας τον παράγοντα 2.

Στο ισοζύγιο για τις ουδέτερες ρίζες CF_x (εξίσωση 11) ο πρώτος όρος αφορά την προσρόφηση (χημειορόφηση) των ουδετέρων ριζών στην επιφάνεια. Ο δεύτερος όρος αναφέρεται στην ιονοβολή C και ο τρίτος στην αντίδραση επανασύνδεσης των προσροφημένων ουδετέρων ριζών CF_x με φυσικά ροφημένα άτομα F ή με άτομα F από την αέρια φάση.

Στο ισοζύγιο για το πολυμερές (εξίσωση 12) ο πρώτος όρος εκφράζει την απευθείας εναπόθεση ιόντων ενώ ο δεύτερος και ο τρίτος όρος αναφέρονται στην υποβοηθούμενη από ιόντα εναπόθεση των ουδετέρων ριζών CF_x. Ο τελευταίος όρος αφορά στην υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη του πολυμερούς. *Το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές θα μπορούσε να θεωρηθεί σε ένα γενικότερο πλαίσιο σαν το πάχος πολυμερούς στρώματος επί της επιφάνειας, το οποίο όταν γίνει ίσο με τη μονάδα παρεμποδίζει την εγχάραξη*. Αυτή η θεώρηση είναι συμβατή με τις πειραματικές παρατηρήσεις[3,6,7,11,19] πολυμερούς στρώματος επί των επιφανειών Si, SiO_2 κατά την εγχάραξή τους σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων.

<u>Πίνακας 2.1.</u> Σύνολο αντιδράσεων κατά την εγχάραξη Si σε πλάσμα CF_4^*.

	Αντιδράση			Διεργασία	Εξάρτηση από ροή	Εξάρτηση από κλάσμα κάλυψης επιφάνειας	Συντελεστής δράσης
Ιονοβολή ή μηχανική εγχάραξη							
1	Si* $(E > E_{th})$	→	Si(g)+Si*	Ιονοβολή	j_{ION}	$1\text{-}\theta_{TOT}$	y_{SP}
Αντιδράσεις με άτομα F							
2	2F(p) + Si*	→	$Si\text{-}F_2(s)$	Χημειορρόφηση ατόμων F	j_F	$1\text{-}\theta_{TOT}$	s_F
3	$Si\text{-}F_2(s)$ + F(p)	→	$SiF_4(g)$ + 2Si*	Υποβοηθούμενη από ιόντα χημική εγχάραξη με άτομα F	j_{ION}	θ_F	β_F'
4	$Si\text{-}F_2(s)$	→	$SiF_2(g)$ + 2Si*	Υποβοηθούμενη από ιόντα μηχανική εγχάραξη με άτομα F	j_{ION}	θ_F	$\beta_F'b$
5	$Si\text{-}F_2(s)$ + 2F(p ή g)	→	$SiF_4(g)$	Θερμική εγχάραξη από άτομα F	j_F	$1\text{-}\theta_{CFx}\text{-}\theta_P$	K(T)
Αντιδράσεις με ουδέτερες ρίζες CF_x (x=1,2,3) ή άλλες ουδέτερες ρίζες φθοράνθρακα							
6	Si* + $CF_x(g)$	→	$Si\text{-}CF_y(s)$	Χημειορόφηση ριζών CF_x	J_{CFx}	$1\text{-}\theta_{TOT}$	S_{CFx}
7	$Si\text{-}CF_y(s)$	→	$CF_y(g)$ + Si*	Ιονοβολή άνθρακα	j_{ION}	θ_{CFx}	y_C
8	$Si\text{-}CF_y$ (s) +F(p ή g)	→	Si* + $CF_{y+1}(g)$	Επανασύνδεση ριζών CF_x με άτομα F	j_F	θ_{CFx}	K_{REC}
Αντιδράσεις δημιουργίας ή κατανάλωσης πολυμερούς (P)							
9	CF_x^+ σε $E< E_{th1}$	→	Πολυμερές (P)	Απευθείας εναπόθεση ιόντων	j_{ION}	1	y_d
10	$Si\text{-}CF_x(s)$ $(E< E_{th2})$	→	Πολυμερές (P)	Υποβοηθούμενη από ιόντα εναπόθεση ριζών CF_x	j_{ION}	θ_{CFx}	β_s
11	P-F(s/P)	→	Προϊόντα εγχάραξης πολυμερούς (P)	Υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη του P με άτομα F	j_{ION}	$\theta_{F/P}$	$\beta_{F/P}$
12	P-CFx(s/P) $(E< E_{th2})$	→	Περισσότερο πολυμερές (P)	Υποβοηθούμενη από ιόντα εναπόθεση ριζών CF_x στο P	j_{ION}	$\theta_{C/P}$	β_s

[*] το p εκφράζει άτομα ή μόρια φυσικά ροφημένα, το s εκφράζει άτομα ή μόρια χημειοροφημένα, το s/P εκφράζει άτομα ή μόρια χημειοροφημένα στην επιφάνεια του πολυμερούς και το (*) δηλώνει σπασμένο δεσμό (dangling bond) ή μια θέση (site) για χημειορόφηση.

Τα ισοζύγια των ατόμων F και των ουδετέρων ριζών CF_x πάνω στο πολυμερές περιγράφονται, με ανάλογο τρόπο με αυτά στην επιφάνεια Si, από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$\frac{d[\text{F on P}]}{dt} = s_{F/P}\,(1-\theta_{TOT/P})\,j_F - \beta_{F/P}\,\theta_{F/P}\,j_{ION} = 0 \qquad (14)$$

$$\frac{d[\text{CF}_x\text{ on P}]}{dt} = \sum_i s_{CFi/P}\,j_{CFi}\,(1-\theta_{TOT/P}) - y_C\,\theta_{CFx/P}\,j_{ION} - k_{REC}\,\theta_{CFx/P}\,j_F = 0 \qquad (15)$$

$$\theta_{TOT/P} = \theta_{F/P} + \theta_{CFx/P} \qquad (16)$$

Ορίζοντας

$$R_F = j_F/j_{ION},\ R_{CFx} = j_{CFx}/j_{ION},\ j_{ION} \neq 0,$$

$$Q = y_C + k_{REC}\,R_F \qquad (17)$$

και λύνοντας τις εξισώσεις (10)-(16) ως προς $\theta_{F/P}$, $\theta_{CFx/P}$, θ_P, θ_F και θ_{CFx} προκύπτει ότι:

$$\theta_{F/P} = \frac{s_{F/P}R_F Q}{\beta_{F/P}\sum_i s_{CFi/P}R_{CFi} + \beta_{F/P}Q + s_{F/P}R_F Q)} \qquad (18)$$

$$\theta_{CFx/P} = \frac{\beta_{F/P}\sum_i s_{CFi/P}R_{CFi}}{\beta_{F/P}\sum_i s_{CFi/P}R_{CFi} + \beta_{F/P}Q + s_{F/P}R_F Q)} \qquad (19)$$

$$\theta_P = \frac{\sum_i x_i y_{d,i}\left(2\beta_F\sum_i s_{CFi}R_{CFxi} + 2\beta_F Q + s_F R_F Q\right) + 2\beta_F\beta_S\sum_i s_{CFi}R_{CFxi}}{\left(2\beta_F\sum_i s_{CFi}R_{CFxi} + 2\beta_F Q + s_F R_F Q\right)(\beta_{F/P}\theta_{F/P} - \beta_S\theta_{CFx/P}) + 2\beta_F\beta_S\sum_i s_{CFi}R_{CFxi}} \qquad (20)$$

$$\theta_F = (1-\theta_P)\frac{s_F R_F Q}{2\beta_F\sum_i s_{CFi}R_{CFxi} + 2\beta_F Q + s_F R_F Q} \qquad (21)$$

$$\theta_{CFx} = (1-\theta_P)\frac{2\beta_F\sum_i s_{CFi}R_{CFxi}}{2\beta_F\sum_i s_{CFi}R_{CFxi} + 2\beta_F Q + s_F R_F Q} \qquad (22)$$

Η εγχάραξη Si οφείλεται στην ιονοβολή (για αυτά τα ιόντα που εμφανίζουν θετική τιμή απόδοσης ιονοβολής στην αναφερόμενη ενέργεια), στην υποβοηθούμενη από ιόντα *εγχάραξη με άτομα F και στη θερμική εγχάραξη.* Η απόδοση εγχάραξης (άτομα Si ανά προσπίπτον ιόν) δίδεται από την εξίσωση (23):

Αν $\theta_P < 1$ και για $y_{SP,i} > 0$,

$$y_{SI} = \sum_i x_i y_{SP,i} (1 - \theta_{TOT}) + \beta_F \theta_F + K(T)R_F (1 - \theta_{CFx} - \theta_p) \quad (23)$$

όπου x_i είναι το κλάσμα ιόντος i στο συνολικό ρεύμα ιόντων και το άθροισμα γίνεται μόνο επί των ιόντων με θετική τιμή $y_{SP,i}$.

Αν $\theta_P > 1$, η επιφάνεια καλύπτεται απόλυτα από πολυμερές και μόνο τα ισοζύγια πάνω στο πολυμερές (εξισώσεις 14-16) χρησιμοποιούνται. Η «απόδοση εναπόθεσης» δίδεται από την εξίσωση (24) :

$$\text{Αν } \theta_P > 1, \quad y_{SI,dep} = \sum_i x_i y_{d,i} + \beta_S \theta_{CFx/P} - \beta_{F/P} \theta_{F/P} \quad (24)$$

Ο πρώτος όρος στην εξίσωση (24) αναφέρεται στην απευθείας εναπόθεση ιόντων, ο δεύτερος στην υποβοηθούμενη από ιόντα εναπόθεση ριζών CF_x στο σχηματιζόμενο επί της επιφάνειας πολυμερές και ο τρίτος στην υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη του πολυμερούς με άτομα F.

2.3.2 Το μοντέλο για την εγχάραξη SiO_2

Οι δράσεις που περιλαμβάνονται στο μοντέλο για την εγχάραξη SiO_2 φαίνονται στον πίνακα 2.2. Το δίκτυο αντιδράσεων του πίνακα 2.2 μπορεί να περιγραφεί μαθηματικά από ισοζύγια σε θέσεις πάνω στην επιφάνεια με τρόπο παρόμοιο με την περίπτωση του Si (εξισώσεις 10-16). Η μόνη διαφορά είναι ότι οι ουδέτερες ρίζες CF_x μπορούν σε επιφάνεια SiO_2 να προκαλέσουν υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη. Οι ουδέτερες ρίζες CF_x μπορούν να απομακρυνθούν από την επιφάνεια με την αντίδραση (7) του πίνακα 2.2 προκαλώντας εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα, με την αντίδραση (8) του πίνακα 2.2 ως μηχανικά (με ιονοβολή) απομακρυνόμενος C και με την αντίδραση (9) του ίδιου πίνακα μέσω επανασύνδεσης με άτομα F. Έτσι, οι εξισώσεις (18)-(22) που ισχύουν για το Si ισχύουν και για SiO_2 αν ο όρος Q γίνει

$$Q = y_C + \beta_{CFx} + k_{REC} R_F , \quad (25)$$

περιλαμβάνοντας τον πρόσθετο μηχανισμό απομάκρυνσης των ουδετέρων ριζών CF_x από την επιφάνεια μέσω της υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης του SiO_2.

Η εγχάραξη SiO_2 οφείλεται στην ιονοβολή (για αυτά τα ιόντα που εμφανίζουν θετική τιμή απόδοσης ιονοβολής στην αναφερόμενη ενέργεια), στην υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη με άτομα F και ουδέτερες ρίζες CF_x και στη θερμική εγχάραξη.
Η εξίσωση που δίνει την απόδοση εγχάραξης είναι :

Αν $\theta_P < 1$ και για $y_{SP,i} > 0$,

$$y_{SiO2} = \sum_i x_i y_{SP,i} (1 - \theta_{TOT}) + \beta_F \theta_F + \beta_{CFx} \theta_{CFx} + K(T)R_F (1 - \theta_{CFx} - \theta_p) \quad (26)$$

όπου x_i είναι το κλάσμα ιόντος i στο συνολικό ρεύμα ιόντων και το άθροισμα γίνεται μόνο επί των ιόντων με θετική τιμή $y_{SP,i}$.

<u>Πίνακας 2.2.</u> Σύνολο αντιδράσεων κατά την εγχάραξη SiO_2 σε πλάσμα CF_4.*

	Αντιδράση			Διεργασία	Εξάρτηση από ροή	Εξάρτηση από κλάσμα κάλυψης επιφάνειας	Συντελεστής δράσης
Ιονοβολή ή μηχανική εγχάραξη							
1	O_2-Si*	→	Si(g) + 2O(g) + O_2-Si*	Ιονοβολή	j_{ION}	$1-\theta_{TOT}$	y_{SP}
Αντιδράσεις με άτομα F							
2	O_2-Si*(s) + 2F(p)	→	O_2-Si-F_2(s)	Προσρόφηση	j_F	$1-\theta_{TOT}$	s_F
3	O_2-Si-F_2(s) + 2F(p)	→	Si-F_4(g) + O_2(g) + 2O_2-Si*	Υποβοηθούμενη από ιόντα χημική εγχάραξη με άτομα F	j_{ION}	θ_F	β_F'
4	O_2-Si-F_2(s)	→	Si-F_2(g) + O_2(g) + 2O_2-Si*	Υποβοηθούμενη από ιόντα μηχανική εγχάραξη με άτομα F	j_{ION}	θ_F	β_F' b
5	O_2-Si-F_2(s) + 2F(p ή g)	→	Si-F_4(g) + O_2(g)	Θερμική εγχάραξη από άτομα F	j_F	$1-\theta_{CFx}-\theta_p$	K(T)
Αντιδράσεις με ουδέτερες ρίζες CF_x (x=1,2,3) ή άλλες ουδέτερες ρίζες φθοράνθρακα							
6	Si-O_2*(s) + CF_x(g)	→	Si-O_2-CF_x(s)	Χημειορόφηση ριζών CF_x	j_{CFx}	$1-\theta_{TOT}$	s_{CFx}
7	2Si-O_2-CF_x(s)	→	SiF_x(g) + 2CO_2(g) + Si-O_2*	Υποβοηθούμενη από ιόντα Χημική εγχάραξη με ρίζες CF_x	j_{ION}	θ_{CFx}	β_c
8	Si-O_2-CF_x(s)	→	Si(s)+2COF_x(g)+Si-O_2*	Ιονοβολή άνθρακα	j_{ION}	θ_{CFx}	y_C
9	Si-O_2-CF_x(s) + F(p ή g)	→	Si-O_2 + CF_{x+1}(g)	Επανασύνδεση ριζών CF_x με άτομα F	j_F	θ_{CFx}	k_{REC}
Αντιδράσεις δημιουργίας ή κατανάλωσης πολυμερούς (P)							
10	CF_x^+ σε $E<E_{th}$	→	Πολυμερές (P)	Απευθείας εναπόθεση ιόντων	j_{ION}	1	y_d
11	Si-O_2-CF_x(s) ($E<E_{th}$)	→	Πολυμερές (P)	Υποβοηθούμενη από ιόντα εναπόθεση ριζών CF_x	j_{ION}	θ_{CFx}	β_s
12	P-F(s)	→	Προϊόντα εγχάραξης του πολυμερούς (P)	Υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη του P με άτομα F	j_{ION}	$\theta_P\theta_{F/P}$	$\beta_{F/P}$
13	P-CF_x(s)	→	Περισσότερο πολυμερές (P)	Υποβοηθούμενη από ιόντα εναπόθεση ριζών CF_x στο P	j_{ION}	$\theta_P\theta_{C/P}$	β_s

* *το p εκφράζει άτομα ή μόρια φυσικά ροφημένα, το s εκφράζει άτομα ή μόρια χημειοροφημένα, το s/P εκφράζει άτομα ή μόρια χημειοροφημένα στην επιφάνεια του πολυμερούς και το (*) δηλώνει σπασμένο δεσμό (dangling bond) ή μια θέση (site) για χημειορόφηση.*

Αν $\theta_P > 1$, η επιφάνεια καλύπτεται απόλυτα από πολυμερές και μόνο τα ισοζύγια πάνω στο πολυμερές (εξισώσεις 14-16) χρησιμοποιούνται. Η «απόδοση εναπόθεσης» δίδεται από την εξίσωση (27) :

$$\text{Αν } \theta_P > 1,\ y_{SiO2,dep} = \sum_i x_i y_{d,i} + \beta_S\, \theta_{CFx/P} - \beta_{F/P}\, \theta_{F/P} \qquad (27)$$

Ο πρώτος όρος στην εξίσωση (27) αναφέρεται στην απευθείας εναπόθεση ιόντων, ο δεύτερος στην υποβοηθούμενη από ιόντα εναπόθεση ριζών CF_x στο σχηματιζόμενο επί της επιφάνειας πολυμερές και ο τρίτος στην υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη του πολυμερούς με άτομα F.

2.3.3 Οι συντελεστές του μοντέλου

Αρχικά παρουσιάζεται ο πίνακας ερμηνείας των συμβόλων των μοντέλων που περιγράφηκαν στις προηγούμενες παραγράφους:

β : συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης : χημικής + μηχανικής (ion-enhanced etching coefficient)
β' : συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα χημικής εγχάραξης (ion-enhanced chemical etching coefficient)
β_{CFx} : συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης με ουδέτερες ρίζες CF_x, ισχύει μόνο για το SiO_2 :(ion-enhanced etching coefficient of SiO_2 on CF_x radicals surface coverage)
β_F : συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης με άτομα F (ion-enhanced etching coefficient of Si or SiO_2 on fluorine atoms surface coverage)
$\beta_{F/P}$: συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης πολυμερούς (P) με άτομα F (ion-enhanced etching coefficient of polymer on fluorine atoms surface coverage on polymer)
β_S : συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα εναπόθεσης ουδετέρων ριζών CF_x (ion-enhanced deposition (stitching) coefficient of CF_x radicals)
θ : κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας (surface coverage)
θ_C : κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από C (carbon surface coverage)
θ_{CFx} : κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από ουδέτερες ρίζες CF_x (CF_x radical surface coverage)
$\theta_{CFx/P}$: κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας πολυμερούς από ουδέτερες ρίζες CF_x (CF_x radical surface coverage on polymer)
θ_F : κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από άτομα F (fluorine atom surface coverage)
$\theta_{F/P}$: κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας πολυμερούς από άτομα F (fluorine atom surface coverage on polymer)
θ_P : κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές (polymer surface coverage)
θ_{TOT} : συνολικό κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας (total surface coverage)
$\theta_{TOT/P}$: συνολικό κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας πολυμερούς (total surface coverage on polymer)

b : παράμετρος που δηλώνει το κλάσμα των ακόρεστων προϊόντων SiF_x επί των κορεσμένων SiF_2 κατά την υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη (branching ratio coefficient)
E_{th} : κατώφλι ενέργειας ιόντων (ion energy threshold)

j : ροή (flux)
j_{CFx} : ροή ουδετέρων ριζών CF_x (CF_x radical flux)
j_F : ροή ατόμων F (fluorine atom flux)
j_{ION} : ροή ιόντων (ion flux)
k_{REC} : συντελεστής δράσης επανασύνδεσης των προσροφημένω ουδετέρων ριζών CF_x με άτομα F φυσικά ροφημάνε ή από την άερια φάση (CF_x(s) , F(g) recombination coefficient)
K(T) : αδιάστατος συντελεστής Arrhenius της αντίδρασης θερμικής εγχάραξης (dimensionless Arrhenius coefficient for thermal etching reaction)
R : λόγος ροής ουδέτερου είδους προς τη ροή ιόντων (ratio of neutral flux to ion flux)
R_{CFx} : λόγος ροής ουδετέρων ριζών CF_x προς τη ροή ιόντων (ratio of CF_x radical flux to ion flux)
R_F : λόγος ροής ατόμων F προς τη ροή ιόντων (ratio of fluorine atom flux to ion flux)
s : συντελεστής προσκόλλησης σε καθαρή επιφάνεια βομβαρδιζόμενη από ιόντα (sticking coefficient on a clean surface previously exposed to ion bombardment)
s_{CFx} : συντελεστής προσκόλλησης ουδετέρων ριζών CF_x σε καθαρή επιφάνεια βομβαρδιζόμενη από ιόντα (sticking coefficient for CF_x radical on a clean surface previously exposed to ion bombardment)
s_F : συντελεστής προσκόλλησης ατόμων F σε καθαρή επιφάνεια βομβαρδιζόμενη από ιόντα (sticking coefficient for fluorine atoms on a clean surface previously exposed to ion bombardment)
y : απόδοση εγχάραξης (etching yield)
y_C : απόδοση ιονοβολής C από την επιφάνεια (carbon sputtering yield)
y_d : απόδοση διεργασίας απευθείας εναπόθεσης ιόντων (direct ion deposition yield)
$y_{d,i}$: απόδοση διεργασίας απευθείας εναπόθεσης ιόντος με άυξων αριθμό i (direct ion deposition yield caused by ion i)
y_{SP} : απόδοση ιονοβολής ή μηχανικής εγχάραξης (physical sputtering yield)
$y_{SP,i}$: απόδοση ιονοβολής ή μηχανικής εγχάραξης λόγω του ιόντος με αύξων αριθμό i (physical sputtering yield caused by ion i)

Ο προσδιορισμός των συντελεστών (αποδόσεων) γίνεται με προσαρμογή αντίστοιχων πειραματικών δεδομένων.[20] Πλήρως χαρακτηρισμένες δέσμες ιόντων ή/και ουδετέρων ειδών προσπίπτουν σε επιφάνειες Si, SiO_2 και μετριέται πειραματικά[8,14,16,21,22,23,24,25,26] ο ρυθμός της εγχάραξης που προκαλούν. Για κάθε ένα από αυτά τα πειράματα κατασκευάζεται μοντέλο που συνδέει τον ρυθμό εγχάραξης με παραμέτρους της δέσμης (π.χ. ενέργεια ιόντων, ροή ουδετέρων ειδών) και το οποίο περιλαμβάνει προσαρμόσιμες παραμέτρους. Οι προσαρμόσιμες αυτές παράμετροι ταυτίζονται ανάλογα με το πείραμα με κάποιον από τους συντελεστές του μοντέλου εγχάραξης Si, SiO_2 που ορίστηκαν παραπάνω. Για παράδειγμα, πειραματικά δεδομένα απόδοσης εγχάραξης επιφάνειας SiO_2 κατά τον βομβαρδισμό από ιόντα CF_3^+ σαν συνάρτηση της ενέργειας των ιόντων προσαρμόζονται στην εξίσωση (7), οπότε και προσδιορίζεται ο συντελεστής Α για το CF_3^+ σε επιφάνεια SiO_2. Επομένως μπορούμε για ένα εύρος τιμών ενέργειας ιόντων να χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση (7) για τον υπολογισμό του συντελεστή ιονοβολής για το ιόν CF_3^+, $y_{SP,CF3+}$. Με παρόμοιο τρόπο υπολογίζονται και οι υπόλοιποι συντελεστές-σταθερές των βασικών μηχανισμών. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν παρουσιάζονται στους πίνακες του παραρτήματος Α.

2.4 Μοντέλο για τον προσδιορισμό των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης σε επιφάνεια Si, SiO_2

Με τα μοντέλα εγχάραξης που αναπτύχθηκαν στην παράγραφο 2.3 είναι δυνατό να προβλεφθεί η απόδοση εγχάραξης. Ένα πολύ χρήσιμο μέγεθος για τη μελέτη της εγχάραξης σε δομές, πέρα από την απόδοση, είναι η πιθανότητα προσκόλλησης ουδετέρων ειδών στην επιφάνεια. Αν είναι γνωστή η πιθανότητα προσκόλλησης ενός ουδετέρου είδους N στις στοιχειώδεις επιφάνειες μιας δομής, τότε είναι δυνατό να υπολογιστεί η ροή που φτάνει σε κάθε μια από αυτές τις επιφάνειες (3ο κεφάλαιο). Η πιθανότητα προσκόλλησης ενός ουδέτερου είδους εκφράζεται από το φαινόμενο συντελεστή προσκόλλησης.

Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης, S_E, ουδετέρου είδους εκφράζει το κλάσμα της ροής του ουδέτερου είδους που φαίνεται μακροσκοπικά να κολλά στην επιφάνεια που προσπίπτει, υπό δεδομένες συνθήκες βομβαρδισμού της από ιόντα και ουδέτερα είδη. Υπολογίζεται με βάση ισοζύγια μάζας του ουδέτερου είδους σε ένα λεπτό στρώμα πάνω από την επιφάνεια στην οποία αυτό προσπίπτει.

Μπορούμε να καταστρώσουμε τέτοιου είδους ισοζύγια για τα άτομα F και τις ουδέτερες ρίζες CF_x που προσπίπτουν σε επιφάνειες Si, SiO_2.

Για τα άτομα F :

$$\begin{aligned} S_{E,F}\, j_F = {} & s_F\,(1-\theta_{TOT}) j_F + s_{F/P}(1-\theta_{TOT/P})\,\theta_P\, j_F + \\ & + K_{(T)}(1-\theta_{CFx}-\theta_P) j_F + \\ & + K_{REC}\,\theta_{CFx}\, j_F + K_{REC}\theta_{CFx/P}\,\theta_P\, j_F \end{aligned} \qquad (28)$$

Για τις ουδέτερες ρίζες CF_x :

$$\begin{aligned} S_{E,CFx}\, j_{CFx} = {} & s_{CFx}(1-\theta_{TOT})\, j_{CFx} + s_{CFx/P}(1-\theta_{TOT/P})\,\theta_P\, j_{CFx} - \\ & -(2/3)\, K_{REC}\,\theta_{CFx}\, j_F - (2/3)\, K_{REC}\theta_{CFx/P}\,\theta_P\, j_F \end{aligned} \qquad (29)$$

Στο ισοζύγιο για τα άτομα F (εξίσωση 28) ο πρώτος και ο δεύτερος όρος στο δεξιό μέλος εκφράζει τη ροή ατόμων F που προσροφάται στην επιφάνεια. Ο τρίτος όρος αφορά στη ροή ατόμων F που καταναλώνονται κατά τη θερμική εγχάραξη της επιφάνειας. Ο τέταρτος και πέμπτος αναφέρεται στη ροή ατόμων F που καταναλώνεται στην αντίδραση επανασύνδεσης του $F_{(g)}$ με τις προσροφημένες ουδέτερες ρίζες CF_x.

Στο ισοζύγιο για τις ουδέτερες ρίζες CF_x ο πρώτος και ο δεύτερος όρος στο δεξιό μέλος εκφράζει τη ροή ουδετέρων ριζών CF_x που προσροφάται στην επιφάνεια. Ο τρίτος και ο τέταρτος όρος αφορά την παραγωγή ελεύθερων ουδετέρων ριζών CF_{x+1} από την αντίδραση επανασύνδεσης του F με τις προσροφημένες ουδέτερες ρίζες CF_x:

$$F_{(g)} + CFx_{(s)} \rightarrow CF_{x+1\,(g)}$$

Από τις αντιδράσεις αυτού του τύπου ενδιαφέρον για το ισοζύγιο που καταστρώνεται εμφανίζουν οι ακόλουθες δύο

$$F_{(g)} + CF_{(s)} \rightarrow CF_{2\,(g)}$$
$$F_{(g)} + CF_{2(s)} \rightarrow CF_{3\,(g)}$$

αφού μόνο αυτές παράγουν ουδέτερες ρίζες CF_x (x<4). Ποιο ποσοστό $F_{(g)}$ καταναλώνεται σε κάθε μία δεν είναι γνωστό. Αν θεωρήσουμε ότι x=1,2,3 τότε υπάρχει μία μόνο ακόμη αντίδραση

$$F_{(g)} + CF_{3(s)} \rightarrow CF_{4\,(g)}$$

Επομένως, αν θεωρήσουμε την ίδια σταθερά επανασύνδεσης, K_{REC}, και για τις τρεις αντιδράσεις, μπορούμε να πούμε ότι τα (2/3) των προϊόντων είναι CF_x (x<4). Αν δεχτούμε την ίδια θεώρηση και για τις ουδέτερες ρίζες CF_x που έχουν προσροφηθεί πάνω στο πολυμερές, τότε μπορούμε και πάλι να θεωρήσουμε ότι τα (2/3) των προϊόντων επανασύνδεσης πάνω στο πολυμερές είναι CF_x (x<4).

Ο υπολογισμός των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης είναι προσεγγιστικός, ωστόσο αποτελεί μια πρώτη χρήσιμη εκτίμηση.

2.5 Οι δυνατότητες και η εφαρμογή των μοντέλων

Τα μοντέλα επιφάνειας που περιγράφηκαν στις προηγούμενες παραγράφους είναι δυνατό να εφαρμοστούν κατά την εγχάραξη ελεύθερων επιφανειών Si και SiO_2 σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων που περιέχει ιόντα CF_3^+, CF_2^+ και CF^+, ουδέτερες ρίζες CF_3, CF_2, CF και άτομα F. ***Υπάρχει η δυνατότητα επέκτασής του και σε πλάσμα που περιέχει και άλλα ιόντα (ή ουδέτερα είδη) αρκεί να υπάρχουν διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα που να περιγράφουν την αλληλεπίδραση του νέου ιόντος (π.χ του CHF_2^+) με την εγχαρασσόμενη επιφάνεια.***

Συνοψίζοντας τις δυνατότητες των μοντέλων που αναπτύχθηκαν μπορούμε να αναφέρουμε ότι υπολογίζουν:

- τα κλάσματα κάλυψης της επιφάνειας από άτομα F, ουδέτερες ρίζες CF_x και από το σχηματιζόμενο επί της επιφάνειας πολυμερές P
- τις αποδόσεις εγχάραξης ή εναπόθεσης
- τους ρυθμούς εγχάραξης ή εναπόθεσης

$$\text{Ρυθμός εγχάραξης} = \frac{(\text{απόδοση εγχάραξης})\,(\text{ροή ιόντων})}{(\text{πυκνότητα εγχαρασσόμενου υλικού})}$$

  Αν η απόδοση εγχάραξης δίδεται σε άτομα Si/ιόν, η ροή ιόντων σε ιόντα/(cm^2s), και η πυκνότητα του υλικού σε άτομα Si/cm^3, τότε ο ρυθμός εγχάραξης δίδεται σε cm/s.
- την εκλεκτικότητα εγχάραξης του SiO_2 προς το Si που ορίζεται ως ο λόγος των αποδόσεων εγχάραξης των δύο υλικών
- τους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης των ατόμων F και των ουδετέρων ριζών CF_x

Για να πάρει τιμές το παραπάνω σύνολο εξαρτημένων μεταβλητών του μοντέλου, χρειάζονται οι τιμές των παρακάτω ανεξάρτητων μεταβλητών :

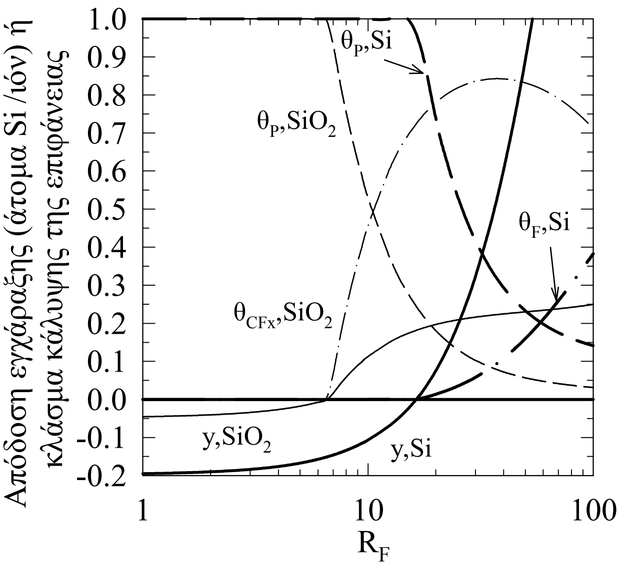
- Οι λόγοι της ροής των ατόμων F και των ουδετέρων ριζών CF_x προς τη ροή των ιόντων
- Η σύσταση και η ενέργεια των ιόντων

• Η ροή των ιόντων αν ζητούμενο είναι ο ρυθμός εγχάραξης

2.6 Αποτελέσματα των μοντέλων

Στα σχήματα που ακολουθούν φαίνεται η επίδραση των ανεξάρτητων μεταβλητών των μοντέλων εγχάραξης στην απόδοση εγχάραξης.

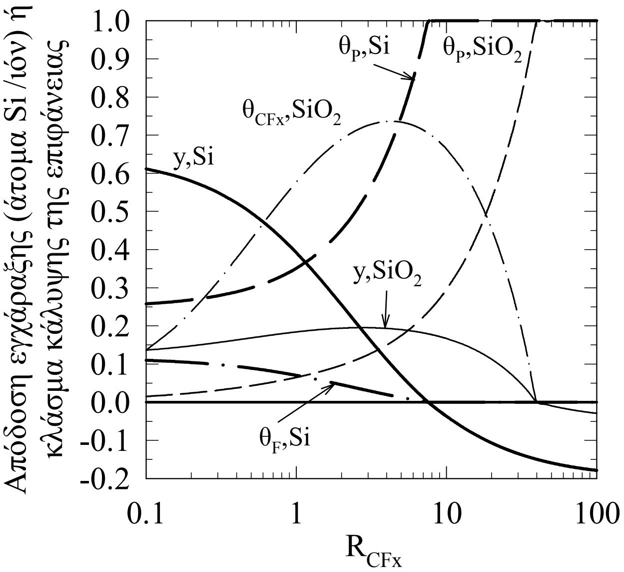
Στο σχήμα 2.4 φαίνεται η απόδοση εγχάραξης Si και SiO_2 (άτομα Si ανά προσπίπτον ιόν) και τα κλάσματα κάλυψης της επιφάνειας, θ, σαν συνάρτηση του λόγου της ροής των ατόμων F προς τη ροή των ιόντων, R_F, με το λόγο της ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς αυτή των ιόντων, R_{CFx} να παραμένει σταθερός. Η ενέργεια των ιόντων έχει την τυπική τιμή των 100eV και η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+. Η επιλογή αυτής της σύστασης ιόντων έγινε με βάση τη σύσταση[6] ενός πλάσματος CHF_3. Σε πλάσμα CHF_3, εκτός από CF_3^+, CF_2^+, CF^+ υπάρχει και CHF_2^+, ένα ιόν για το οποίο δεν είναι διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα, όπως για τα υπόλοιπα τρία είδη ιόντων. Έτσι, έχει γίνει η παραδοχή ισοδυναμίας στη συμπεριφορά των ιόντων CF_2^+ και CHF_2^+.



<u>Σχήμα 2.4.</u> Απόδοση εγχάραξης (y, συνεχείς καμπύλες) και κλάσμα κάλυψης από πολυμερές (θ_P, διακεκομμένες καμπύλες) επιφάνειας Si (παχιές καμπύλες), SiO_2 (λεπτές καμπύλες) σαν συνάρτηση του λόγου της ροής ατόμων F προς τη ροή ιόντων, R_F. Φαίνονται επίσης το κλάσμα κάλυψης από άτομα F (θ_F) για επιφάνεια Si, από ουδέτερες ρίζες CF_x (θ_{CFx}) για επιφάνεια SiO_2 (διακεκομμένες-εστιγμένες καμπύλες). Ο λόγος ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς αυτή των ιόντων, R_{CFx}, είναι 20, η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+.

Σε μικρές τιμές του λόγου R_F, η εναπόθεση πολυμερούς υπερκερά την εγχάραξή του και η επιφάνεια καλύπτεται απόλυτα από πολυμερές (θ_P=1). Τότε η απόδοση εγχάραξης είναι αρνητική. Καθώς ο λόγος R_F αυξάνεται και πλησιάζει τον R_{CFx}, η απόδοση εγχάραξης περνά από το μηδέν και ταυτόχρονα το θ_P γίνεται μικρότερο της μονάδας. Η μετάβαση στις καμπύλες απόδοσης εγχάραξης είναι απότομη και για τα δύο υποστρώματα και συμβαίνει σε μικρότερα R_F για το SiO_2. Θα πρέπει να σημειωθεί η αντιστοιχία της καμπύλης απόδοσης εγχάραξης για το Si με την καμπύλη θ_F και της καμπύλης απόδοσης εγχάραξης για το SiO_2 με την καμπύλη θ_{CFx}.

Στο σχήμα 2.5 φαίνεται η απόδοση εγχάραξης Si και SiO_2 (άτομα Si ανά προσπίπτον ιόν) και τα κλάσματα κάλυψης της επιφάνειας, θ, σαν συνάρτηση του λόγου της ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς τη ροή των ιόντων, R_{CFx}, με το λόγο της ροής των ατόμων F προς αυτή των ιόντων, R_F, να παραμένει σταθερός.



<u>Σχήμα 2.5.</u> Απόδοση εγχάραξης (y, συνεχείς καμπύλες) και κλάσμα κάλυψης από πολυμερές (θ_P, διακεκομμένες καμπύλες) επιφάνειας Si (μαύρες καμπύλες), SiO_2 (κόκκινες καμπύλες) σαν συνάρτηση του λόγου της ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς τη ροή ιόντων, R_{CFx}. Φαίνονται επίσης το κλάσμα κάλυψης από άτομα F (θ_F) για επιφάνεια Si, από ουδέτερες ρίζες CF_x (θ_{CFx}) για επιφάνεια SiO_2 (διακεκομμένες-εστιγμένες καμπύλες). Ο λόγος ροής των ατόμων F προς αυτή των ιόντων, R_F, είναι 10, η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+.

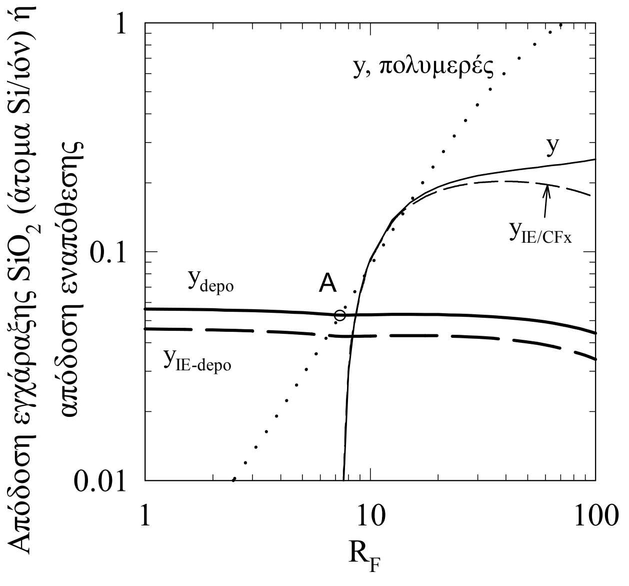
Σε μικρές τιμές του λόγου R_{CFx}, η εγχάραξη του πολυμερούς υπερισχύει της εναπόθεσης και η απόδοση εγχάραξης είναι θετική. Καθώς ο λόγος R_{CFx} αυξάνεται, η απόδοση εγχάραξης για το SiO_2 αρχικά αυξάνεται ελαφρώς και στη συνέχεια μειώνεται. Η απόδοση εγχάραξης για το Si μειώνεται μονότονα με την αύξηση του R_{CFx}. Η διαφορά στη μονοτονία μεταβολής μεταξύ των δύο υποστρωμάτων οφείλεται στο ότι οι ουδέτερες ρίζες CF_x μπορούν να προκαλέσουν εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα στο SiO_2, κάτι που δεν συμβαίνει στο Si. Βέβαια οι ουδέτερες ρίζες βοηθούν και στην δημιουργία πολυμερούς στην επιφάνεια των υποστρωμάτων. Αυτό ακριβώς το φαινόμενο υπερισχύει από κάποια τιμή R_{CFx} και πάνω στο SiO_2 και για αυτό αλλάζει και η μονοτονία της αντίστοιχης καμπύλης απόδοσης. Και σε αυτό το διάγραμμα φαίνεται απότομη μεταβολή των καμπυλών εγχάραξης κοντά στην περιοχή μετάβασης από εγχάραξη σε εναπόθεση. Όταν οι αποδόσεις εγχάραξης περάσουν σε αρνητικές τιμές, το θ_P και για τα δύο υποστρώματα φτάνει στη μονάδα. Θα πρέπει να σημειωθεί η αντιστοιχία της καμπύλης απόδοσης εγχάραξης για το Si με την καμπύλη θ_F και της καμπύλης απόδοσης εγχάραξης για το SiO_2 με την καμπύλη θ_{CFx}.

Στο σχήμα 2.6 φαίνονται σε λογαριθμική κλίμακα όροι εγχάραξης και εναπόθεσης για το SiO_2 σαν συνάρτηση του R_F. Στο σχήμα περιέχονται η (συνολική) απόδοση εγχάραξης όπως και η απόδοση ***Υποβοηθούμενης Από Ιόντα (ΥΑΙ)*** εγχάραξης με ουδέτερες ρίζες CF_x και φαίνεται ότι οι δύο αυτές καμπύλες στο μεγαλύτερο εύρος τιμών του R_F ταυτίζονται. Η ΥΑΙ εγχάραξη με ουδέτερες ρίζες CF_x

είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός εγχάραξης στο SiO_2 και είναι ανάλογη με το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από CF_x, θ_{CFx} (εξίσωση 27). Για αυτό το λόγο η απόδοση εγχάραξης για το SiO_2 ακολουθεί το θ_{CFx} στα σχήματα 2.4 και 2.5. Ο συντελεστής προσκόλλησης για τις ουδέτερες ρίζες CF_x στο SiO_2 είναι πολύ μεγαλύτερος από αυτόν των ατόμων F. Έτσι, η ΥΑΙ εγχάραξη του SiO_2 με άτομα F γίνεται σημαντική μόνο σε μεγάλες τιμές R_F, οπότε και μπορεί να πάρει αξιόλογες τιμές το κλάσμα κάλυψης από άτομα F, θ_F.

Στο ίδιο σχήμα φαίνονται η συνολική (απευθείας εναπόθεση ιόντων + ΥΑΙ εναπόθεση) απόδοση εναπόθεσης και η απόδοση ΥΑΙ εναπόθεσης. Για το SiO_2, μόνο το ιόν CF^+ εναποτίθεται απευθείας αφού η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και είναι μεγαλύτερη από τα αντίστοιχα κατώφλια ενέργειας για τα ιόντα CF_2^+, CF_3^+. Έτσι, ο σχηματισμός πολυμερούς οφείλεται σχεδόν εξ' ολοκλήρου στην ΥΑΙ εναπόθεση των ουδετέρων ριζών CF_x. *Οι ουδέτερες ρίζες CF_x προκαλούν και την ΥΑΙ εναπόθεση επί αλλά και την ΥΑΙ εγχάραξη του SiO_2.*

Τέλος, στο σχήμα περιέχεται η καμπύλη απόδοσης για την ΥΑΙ εγχάραξη του πολυμερούς που δίδεται από το γινόμενο $\beta_{F/P}\ \theta_{F/P}$ (εξίσωση 12) και είναι ο μοναδικός μηχανισμός απομάκρυνσης του σχηματιζόμενου πολυμερούς από την επιφάνεια που λαμβάνεται υπόψη. Στην τιμή R_F = 7.5 περίπου η απόδοση εγχάραξης του SiO_2 πέφτει γρήγορα στο μηδέν. Είναι το σημείο στο οποίο η εγχάραξη του πολυμερούς εξισορροπείται από τους μηχανισμούς σχηματισμού του (σημείο Α). Το αντίστοιχο σημείο στο σχήμα 2.4 είναι το σημείο μετάβασης από εγχάραξη της επιφάνειας SiO_2 σε εναπόθεση επί αυτής.

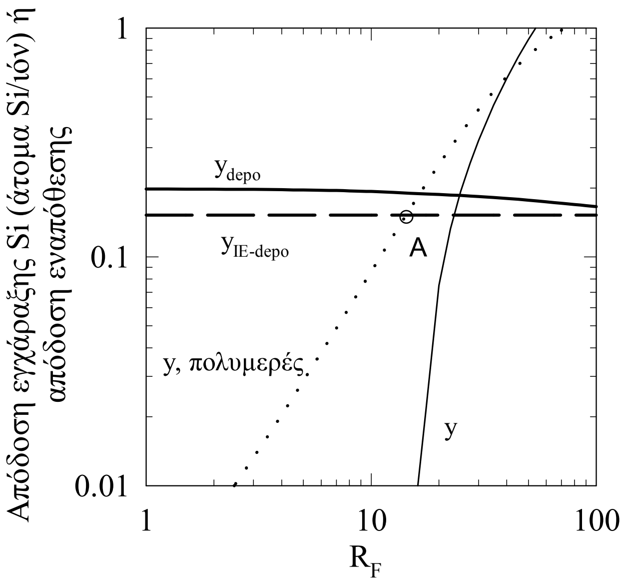


<u>Σχήμα 2.6.</u> *Συνολική απόδοση εγχάραξης (y, λεπτή συνεχής καμπύλη), απόδοση ΥΑΙ εγχάραξης με ουδέτερες ρίζες CF_x ($y_{IE/CFx}$, λεπτή διακεκομμένη καμπύλη), συνολική απόδοση εναπόθεσης (y_{depo}, παχιά συνεχής καμπύλη), απόδοση ΥΑΙ εναπόθεσης ($y_{IE\text{-}depo}$, παχιά διακεκομμένη καμπύλη) και απόδοση εγχάραξης του πολυμερούς (y, εστιγμένη καμπύλη) για υπόστρωμα SiO_2 σαν συνάρτηση του R_F. Ο λόγος ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς αυτή των ιόντων, R_{CFx}, είναι 20, η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+.*

Στο σχήμα 2.7 φαίνονται σε λογαριθμική κλίμακα όροι εγχάραξης και εναπόθεσης για το Si σαν συνάρτηση του R_F. Στο σχήμα περιέχονται η (συνολική) απόδοση εγχάραξης που ταυτίζεται με τη απόδοση ΥΑΙ εγχάραξης με άτομα F. Η ΥΑΙ εγχάραξη με άτομα F είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός εγχάραξης στο Si και είναι ανάλογη με το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από F, θ_F (εξίσωση 24). Για αυτό το λόγο η απόδοση εγχάραξης για το Si ακολουθεί το θ_F στα σχήματα 2.4 και 2.5.

Στο ίδιο σχήμα φαίνονται η συνολική (απευθείας εναπόθεση ιόντων + ΥΑΙ εναπόθεση) απόδοση εναπόθεσης και η απόδοση απευθείας εναπόθεσης ιόντων. Στη συνολική απόδοση εναπόθεσης συνεισφέρει κυρίως ο όρος απευθείας εναπόθεσης των ιόντων CF_2^+, CF^+.

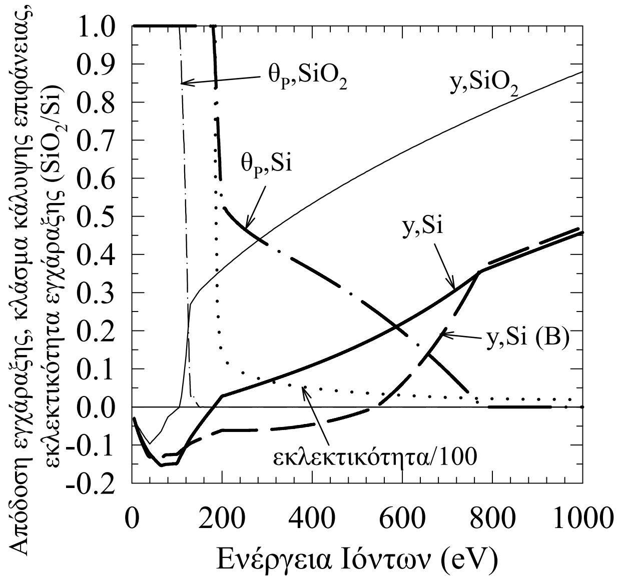
Τέλος, στο σχήμα περιέχεται η καμπύλη απόδοσης για την ΥΑΙ εγχάραξη του πολυμερούς που δίδεται από το γινόμενο $\beta_{F/P}$ $\theta_{F/P}$ (εξίσωση 12) και είναι ο μοναδικός μηχανισμός απομάκρυνσης του σχηματιζόμενου πολυμερούς από την επιφάνεια που λαμβάνεται υπόψη. Στην τιμή R_F = 14.5 περίπου η απόδοση εγχάραξης του Si πέφτει γρήγορα στο μηδέν. Είναι το σημείο στο οποίο η εγχάραξη του πολυμερούς εξισορροπείται από τους μηχανισμούς σχηματισμού του (σημείο Α). Το αντίστοιχο σημείο στο σχήμα 2.4 είναι το σημείο μετάβασης από εγχάραξη της επιφάνειας Si σε εναπόθεση επί αυτής.



<u>Σχήμα 2.7.</u> Συνολική απόδοση εγχάραξης (y, λεπτή συνεχής καμπύλη), συνολική απόδοση εναπόθεσης (y_{depo}, παχιά συνεχής καμπύλη), απόδοση ΥΑΙ εναπόθεσης ($y_{IE\text{-}depo}$, παχιά διακεκομμένη καμπύλη) και απόδοση εγχάραξης του πολυμερούς (y, εστιγμένη καμπύλη) για υπόστρωμα Si σαν συνάρτηση του R_F. Ο λόγος ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς αυτή των ιόντων, R_{CFx}, είναι 20, η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+.

Στο σχήμα 2.8 φαίνεται η μεταβολή των αποδόσεων εγχάραξης για το Si και το SiO_2 σαν συνάρτηση της ενέργειας ιόντων. Η μετάβαση από εναπόθεση σε εγχάραξη για σύσταση ιόντων 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ γίνεται σε μικρότερες τιμές ενέργειας ιόντων για το SiO_2. Η τιμή ενέργειας στην οποία γίνεται μετάβαση εξαρτάται από τη σύσταση των ιόντων. Όταν η σύσταση ιόντων αλλάξει και γίνει 45%CF_3^+, 35%CF_2^+, 20%CF^+, η μετάβαση στο Si συμβαίνει στα 500eV αντί των 200eV με την αρχική σύσταση. Αυτό συμβαίνει διότι αυξήθηκε η περιεκτικότητα του ρεύματος ιόντων σε CF^+, ένα ιόν που εναποτίθεται ευκολότερα από τα υπόλοιπα. Το σημείο μετάβασης με την αλλαγή σύστασης παραμένει σχεδόν αμετάβλητο για το SiO_2. Για το SiO_2, η ΥΑΙ εναπόθεση είναι σημαντικότερη από την απευθείας εναπόθεση των ιόντων όπως φάνηκε και στο σχήμα 2.6.

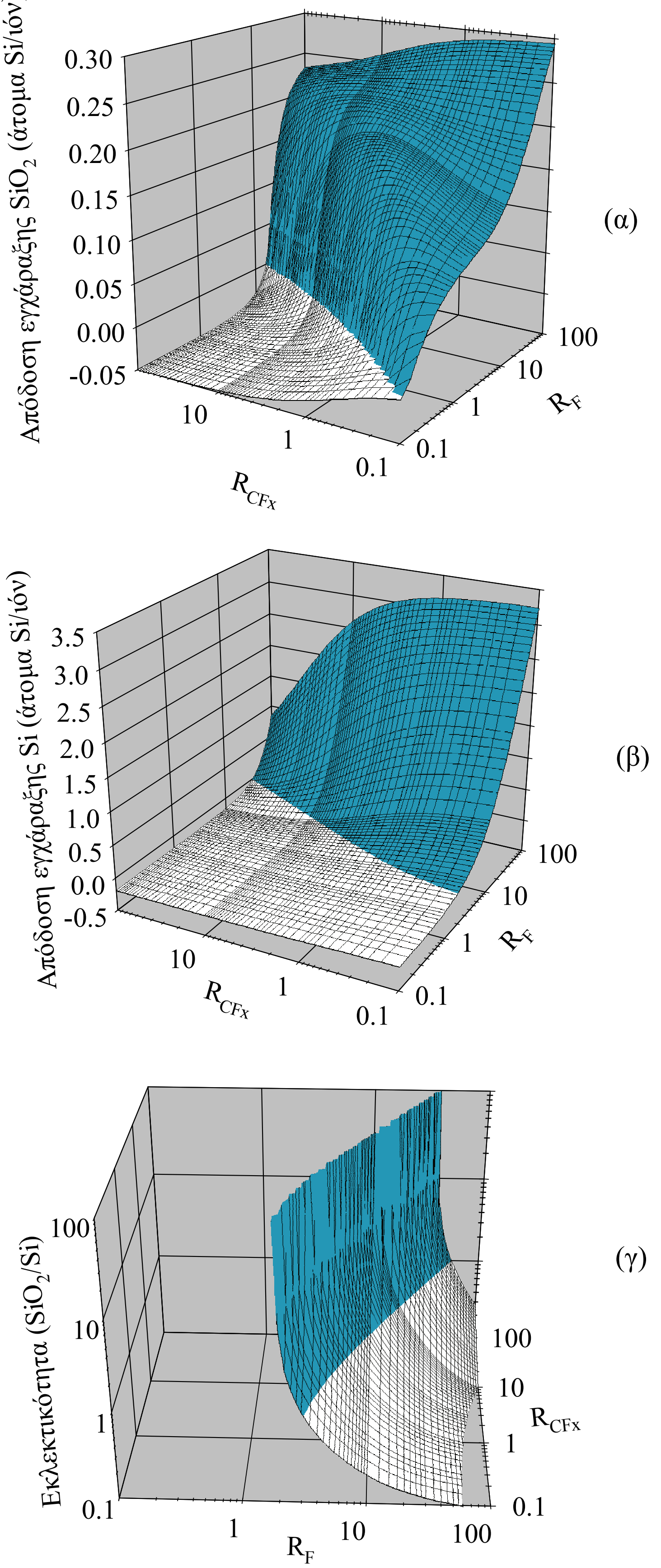
Η εκλεκτικότητα SiO_2/Si δεν ορίζεται όταν το πολυμερές καλύπτει πλήρως την επιφάνεια και των δύο υποστρωμάτων. Είναι άπειρη όταν η επιφάνεια Si καλύπτεται πλήρως από πολυμερές και η επιφάνεια SiO_2 εγχαράσσεται. Επίσης είναι υψηλή όταν το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές είναι υψηλό για το Si και χαμηλό για το SiO_2. Υπάρχει μια στενή περιοχή ενεργειών για την οποία η εκλεκτικότητα μπορεί να είναι υψηλή. Η τιμή της εκλεκτικότητας εξαρτάται από το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας Si από πολυμερές. Αυτή η εξάρτηση θα φανεί καθαρότερα σε επόμενο διάγραμμα.



<u>Σχήμα 2.8.</u> Απόδοση εγχάραξης (y, συνεχείς καμπύλες), κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές (θ_P, διακεκομμένες-εστιγμένες καμπύλες) για το Si (παχιές καμπύλες) και για το SiO_2 (λεπτές καμπύλες), και εκλεκτικότητα εγχάραξης SiO_2/Si διαιρεμένη με το 100 (εστιγμένη καμπύλη) σαν συνάρτηση της ενέργειας των ιόντων. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+. Φαίνεται επίσης η απόδοση εγχάραξης για το Si για σύσταση ιόντων 35%CF_3^+, 45%CF_2^+, 20%CF^+ (y, B σύσταση ιόντων, διακεκομμένη καμπύλη). Οι λόγοι R_F και R_{CFx} είναι 4 και 10 αντίστοιχα.

Το σχήμα 2.9 είναι μια τρισδιάστατη απεικόνιση αποτελεσμάτων (αποδόσεων εγχάραξης, εκλεκτικότητας) του μοντέλου σαν συνάρτηση των λόγων R_F, R_{CFx}. Οι άξονες R_F, R_{CFx} είναι λογαριθμικοί, ώστε τα αποτελέσματα να αφορούν και υψηλής (High Density) και χαμηλής πυκνότητας (Reactive Ion Etching, RIE) πλάσμα. Στο πλάσμα χαμηλής πυκνότητας (RIE) η ροή ιόντων είναι χαμηλή και οι λόγοι R_F, R_{CFx} υψηλοί (>>1). Αντίθετα, σε πλάσμα υψηλής πυκνότητας η ροή ιόντων είναι υψηλοί και οι λόγοι R_F, R_{CFx} χαμηλοί (της τάξης της μονάδας). Η περιοχή τιμών R_F, R_{CFx} στην οποία συμβαίνει εναπόθεση πολυμερούς είναι μεγαλύτερη για το Si από αυτή για το SiO_2 (λευκές επιφάνειες στα σχήματα (α) και (β)). Αυτό οφείλεται στο ότι οι ουδέτερες ρίζες CF_x μπορούν να προκαλούν μόνο εναπόθεση στο Si. Αντίθετα στο SiO_2, μπορούν να προκαλέσουν και εγχάραξη με μεταφορά ατόμων F στο Si και απομάκρυνση του C με το άτομα O.

Η μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση είναι απότομη και για τις δύο επιφάνειες περισσότερο όμως για το SiO_2. Στην περιοχή μετάβασης για το Si η εκλεκτικότητα (SiO_2/Si) είναι υψηλή και μπορεί να ελεγχθεί μεταβάλλοντας τους λόγους R_F, R_{CFx}.



<u>Σχήμα 2.9.</u> *α) Απόδοση εγχάραξης SiO_2, β) Απόδοση εγχάραξης Si και γ) εκλεκτικότητα εγχάραξης SiO_2/Si συναρτήσει των λόγων R_F και R_{CFx}.* ***Η εκλεκτικότητα δεν ορίζεται***

για χαμηλές τιμές του λόγου R_F διότι τότε και οι δύο επιφάνειες καλύπτονται πλήρως από πολυμερές*. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και η σύσταση των ιόντων 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+.*

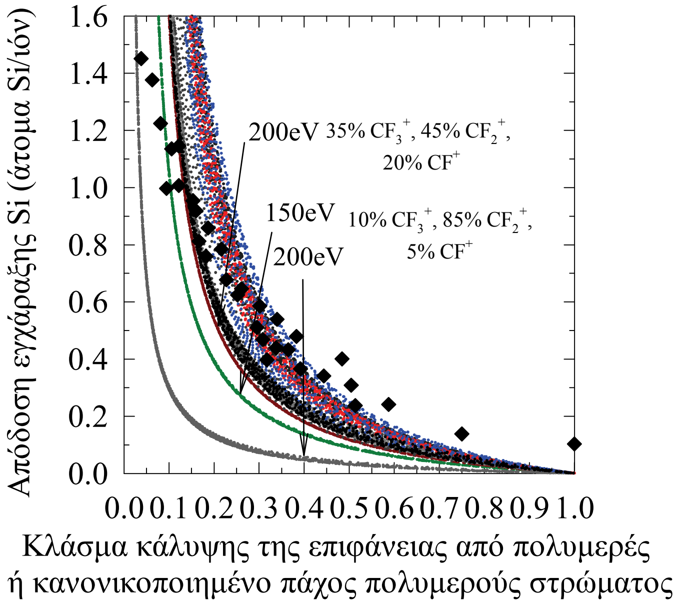
2.7 Σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα

Πειραματικά αποτελέσματα από τις ομάδες του G. Oehrlein και του G. Turban έδειξαν ότι κατά την εγχάραξη Si και SiO_2 με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων δημιουργείται ένα πολυμερές στρώμα στην επιφάνεια. Αυτό το στρώμα είναι παχύτερο για το Si. Επίσης τα πειραματικά αποτελέσματα δείχνουν μείωση των ρυθμών εγχάραξης σαν συνάρτηση του πάχους αυτού του πολυμερούς στρώματος. Στο μοντέλο επιφάνειας που αναπτύχθηκε η απόδοση (άρα και ο ρυθμός) εγχάραξης πέφτουν στο μηδέν όταν το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές γίνει μονάδα. Αφού η εγχαρασσόμενη επιφάνεια είναι άμορφη λόγω του βομβαρδισμού της από ιόντα,[27,28] το κλάσμα κάλυψης από πολυμερές μπορεί να θεωρηθεί σε ένα γενικότερο πλαίσιο από αυτό του στρώματος ρόφησης κατά Langmuir. Μπορεί να θεωρηθεί ως *κάτι αντίστοιχο του πάχους του πολυμερούς στρώματος που πειραματικά παρατηρείται στην επιφάνεια και ειδικότερα ως το κανονικοποιημένο πάχος του πολυμερούς στρώματος επί της επιφάνειας: όταν φτάνει τη μέγιστη τιμή ο ρυθμός εγχάραξης μηδενίζεται.*

Τα σχήματα 2.10 και 2.11 ενισχύουν τον παραπάνω ισχυρισμό. Στο σχήμα 2.10 φαίνονται περισσότερα από 30000 αποτελέσματα προσομοίωσης που δίνουν την απόδοση εγχάραξης σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές. Τα αποτελέσματα αφορούν διαφορετικές ενέργειες (70, 100, 130, 150, 190, 200) και συστάσεις (10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και 35%CF_3^+, 45%CF_2^+, 20%CF^+) ιόντων. Στο σχήμα 2.10 έχουν σημειωθεί και τα πειραματικά αποτελέσματα των Schaepkens et al.[5] Το πάχος του πολυμερούς στρώματος που μετρούν έχει κανονικοποιηθεί με τα 30A, πάχος στο οποίο ο ρυθμός εγχάραξης πλησιάζει το μηδέν. Η σύγκριση των καμπυλών πειραματικών αποτελεσμάτων και αποτελεσμάτων προσομοίωσης είναι ενθαρρυντική. Η καμπύλη προσομοίωσης που προκύπτει όταν η ενέργεια ιόντων είναι 200eV και η σύσταση 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ είναι μετατοπισμένη προς τα αριστερά σε σχέση με τον κυρίως όγκο των αποτελεσμάτων. Σε αυτή την ενέργεια ιόντων εναποτίθεται απευθείας στην επιφάνεια μόνο το CF^+ και όχι και το CF_2^+ όπως συνέβαινε σε μικρότερες ενέργειες. Η μετατόπιση δηλώνει την εξάρτηση του πάχους του πολυμερούς στρώματος στην απευθείας εναπόθεση ιόντων για το Si.

Θα πρέπει επίσης να σημειωθεί ότι ανάλογα με τη σύσταση και την ενέργεια των ιόντων τα αποτελέσματα προσομοίωσης "πέφτουν" σε διαφορετικές καμπύλες όπως ακριβώς και τα πειραματικά αποτελέσματα των Rueger et al.[19]

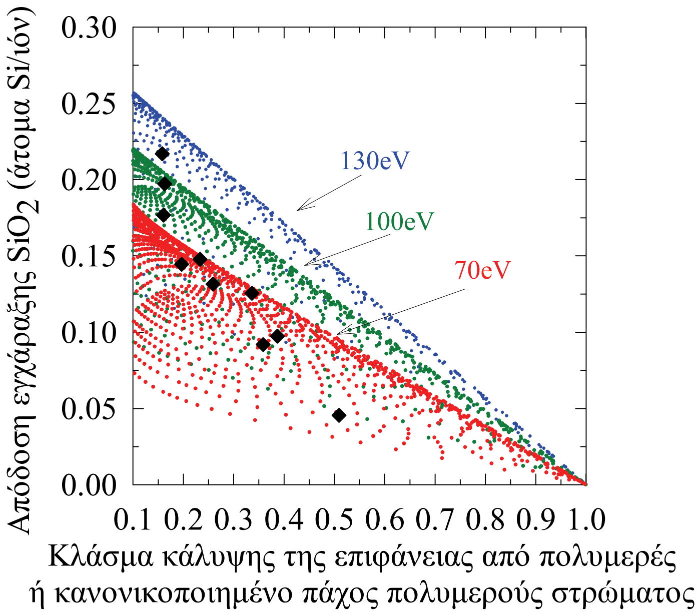
Στο σχήμα 2.11α φαίνεται η απόδοση εγχάραξης SiO_2 σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές καθώς και τα πειραματικά δεδομένα των Rueger et al.[3] για τα οποία το πάχος του πολυμερούς στρώματος έχει κανονικοποιηθεί με τα 12A. Τα αποτελέσματα αναφέρονται σε 2 διαφορετικές συστάσεις και 3 διαφορετικές ενέργειες ιόντων (70, 100, 130eV). Η ενέργεια των ιόντων φαίνεται να καθορίζει και τη διαφορά στις καμπύλες. Στο σχήμα 2.11β οι αποδόσεις εγχάραξης έχουν κανονικοποιηθεί με την τετραγωνική ρίζα της ενέργειας των ιόντων (μείον την τετραγωνική ρίζα κατωφλίου ενέργειας). Σε αυτό το διάγραμμα όλες οι καμπύλες πέφτουν πάνω σε μία, όπως ακριβώς τα πειραματικά αποτελέσματα των Rueger et al.[3] που επίσης φαίνονται στο διάγραμμα. Οι ακριβείς τιμές για την απόδοση εγχάραξης υπερεκτιμώνται από το μοντέλο. Αυτό συμβαίνει διότι, λόγω έλλειψης πειραματικών αποτελεσμάτων, έχει εξομοιωθεί η συνεισφορά των ιόντων CF_2^+, CF^+ στην ΥΑΙ εγχάραξη, με αυτή των ιόντων CF_3^+κάτι το οποίο δεν συμβαίνει αφού τα ιόντα CF_3^+ είναι αποτελεσματικότερα.



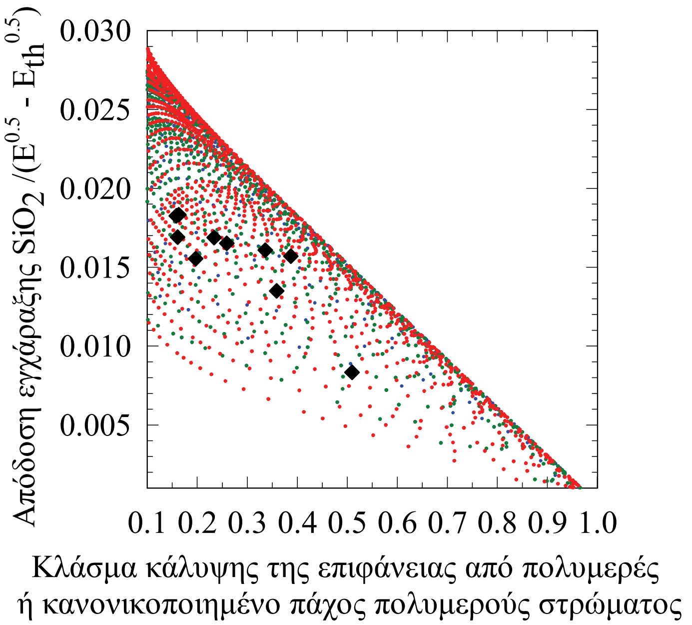
<u>Σχήμα 2.10.</u> Απόδοση εγχάραξης Si σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές. Στο διάγραμμα φαίνονται περισσότερα από 3000 αποτελέσματα προσομοίωσης που αντιστοιχούν στο σχήμα 2.9β σε ενέργεια ιόντων100eV, 12000 αποτελέσματα σε διαφορετική ενέργεια ιόντων (70, 130, 150 και 200eV) και 15000 αποτελέσματα για διαφορετική σύσταση ιόντων (35%CF_3^+, 45% CF_2^+, 20%CF^+) και ενέργειες 70, 100, 150, 190, 200eV καθώς επίσης και πειραματικά αποτελέσματα[5] σε διαφορετικές συστάσεις και ενέργειες ιόντων. Το πάχος του στρώματος πολυμερούς που περιγράφεται στην αναφορά έχει κανονικοποιηθεί με τα 30A, την τιμή για την οποία ο ρυθμός εγχάραξης Si πλησιάζει το μηδέν.

Στο σχήμα 2.12 φαίνεται η εκλεκτικότητα στην εγχάραξη SiO_2 έναντι του Si σαν συνάρτηση με το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας Si από πολυμερές. Φαίνεται ότι η εκλεκτικότητα εξαρτάται (υπό δεδομένη σύσταση και ενέργεια ιόντων) από το σχηματιζόμενο πολυμερές επί της επιφάνειας Si ΜΟΝΟ, και μπορεί να φτάσει σε υψηλές τιμές όταν το κλάσμα κάλυψης είναι υψηλό. Η ίδια τάση εμφανίζεται και στα πειραματικά αποτελέσματα των Rueger et al.[19] που επίσης φαίνονται στο διάγραμμα. Το αναφερόμενο σε αυτά πάχος πολυμερούς έχει κανονικοποιηθεί με το μέγιστο πάχος (πάχος στο οποίο ο ρυθμός εγχάραξης τείνει στο μηδέν) που πειραματικά μετριέται.

Στο σχήμα 2.13 φαίνεται η μεταβολή της απόδοσης εγχάραξης SiO_2 με την ενέργεια των ιόντων. Συγκρίνεται με πειραματικά δεδομένα των Oehrlein et al.[1] και των Rueger et al.[3] Μολονότι οι πειραματικές ροές ατόμων F και ουδετέρων ριζών CF_x δεν είναι γνωστές ώστε η σύγκριση να είναι ακριβής, η μορφή της πειραματικής καμπύλης είναι ίδια με αυτή του μοντέλου. Από τις καμπύλες προσομοίωσης προκύπτει ότι η ενέργεια στην οποία γίνεται η μετάβαση εξαρτάται από τους λόγους R_F, R_{CFx}.

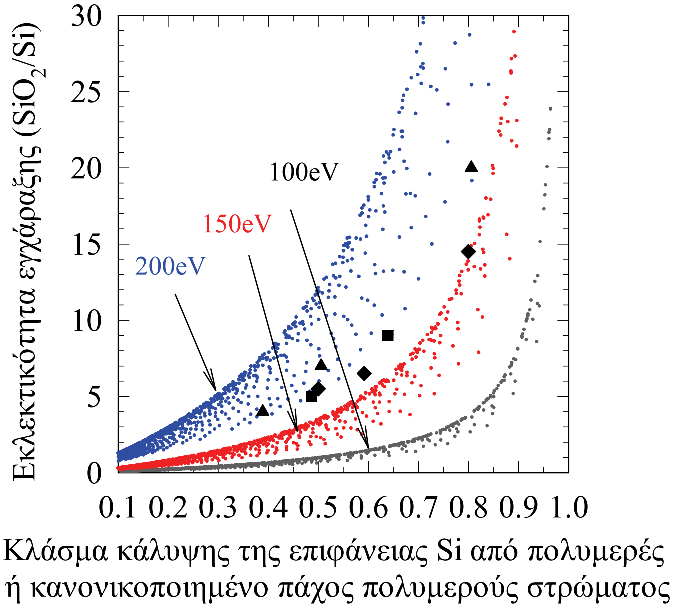


(α)

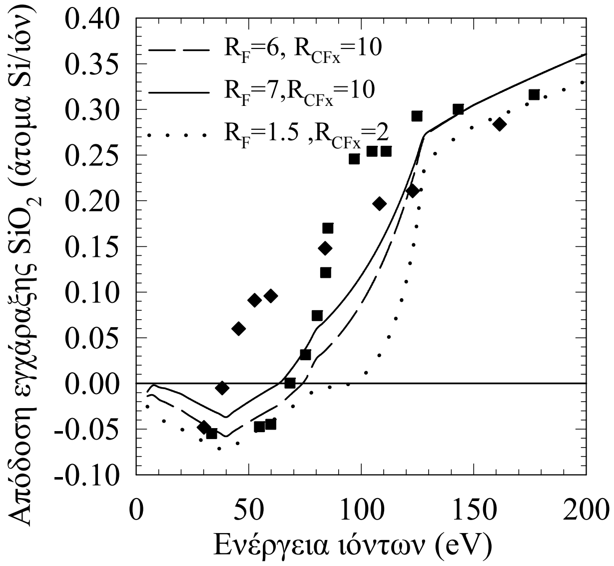


(β)

Σχήμα 2.11. α) Απόδοση εγχάραξης SiO_2 σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές. Στο διάγραμμα φαίνονται περισσότερα από 3000 αποτελέσματα προσομοίωσης που αντιστοιχούν στο σχήμα 2.9α σε ενέργεια ιόντων 100eV, 6000 αποτελέσματα σε διαφορετική ενέργεια ιόντων (70 και 130eV) καθώς επίσης και πειραματικά αποτελέσματα[3] σε διαφορετικές συστάσεις και ενέργειες ιόντων. Το πάχος του στρώματος πολυμερούς που περιγράφεται στην αναφορά έχει κανονικοποιηθεί με τα 12Α, την τιμή για την οποία ο ρυθμός εγχάραξης SiO_2 πλησιάζει το μηδέν β) τα ίδια αποτελέσματα με το (α) κανονικοποιημένα με $\sqrt{E} - \sqrt{E_{th}}$, E_{th}=4eV.



<u>Σχήμα 2.12.</u> Εκλεκτικότητα εγχάραξης (SiO_2/Si) σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας Si από πολυμερές. Φαίνονται αποτελέσματα προσομοίωσης σε ενέργειες ιόντων 100, 150 και 200eV και σε σύσταση ιόντων 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+. Επίσης φαίνονται πειραματικά αποτελέσματα των Rueger et al.[19] σε ενέργεια ιόντων 115eV και σε 3 πιέσεις (6, 10, 20 mTorr). Το πάχος του πολυμερούς στρώματος των πειραματικών αποτελεσμάτων έχει κανονικοποιηθεί με την τιμή για την οποία ο ρυθμός εγχάραξης πλησιάζει το μηδέν δηλαδή με τα 90A (6mTorr), τα 72A (10mTorr) και τα 60A (20mTorr).



<u>Σχήμα 2.13.</u> Απόδοση εγχάραξης SiO_2 σαν συνάρτηση της ενέργειας ιόντων για διαφορετικές τιμές R_F, R_{CFx}. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+. Τα πειραματικά αποτελέσματα είναι των Oehrlein et al.[1] (τετράγωνα) και των Rueger et al.[3](ρόμβοι).

2.8 Συμπεράσματα

Το μοντέλο ελεύθερης επιφάνειας που αναπτύσσεται προβλέπει απότομη μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση με την μείωση του λόγου της ροής των ατόμων F προς τη ροή των ιόντων, με τη μείωση της ενέργειας των ιόντων και με την αύξηση του λόγου της ροής των ριζών CF_x προς τη ροή των ιόντων. Επίσης, τα αποτελέσματά του φανερώνουν ότι η εκλεκτικότητα SiO_2/Si μπορεί να πάρει εξαιρετικά υψηλή τιμή με κατάλληλη επιλογή παραμέτρων (π.χ ροή και σύσταση ουδετέρων ειδών και ιόντων, ενέργεια ιόντων). Η αντιστοίχηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές με το κανονικοποιημένο πάχος του πολυμερικού στρώματος επί της επιφάνειας που πειραματικά παρατηρείται κατά την εγχάραξη Si, SiO_2, καθιστά δυνατή τη σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου με πειραματικά. Τα αποτελέσματα της σύγκρισης «νομιμοποιούν» και επιβεβαιώνουν την αντιστοίχηση.

Αναφορές

[1]G. S. Oehrlein, Y. Zhang, D. Vender, and M. Haverlag, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 323 (1994).
[2]G. S. Oehrlein, Y. Zhang, D. Vender, and M. Haverlag, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 333 (1994).
[3] Rueger, J. J. Beulens, M. Schaepkens, M. F. Doemling, J. M. Mirza, T. E. F. M. Standaert, and G. S. Oehrlein, J. Vac. Sci. Technol. A **15**, 1881 (1997).
[4] T. E. F. M. Standaert, M. Schaepkens, N. R. Rueger, P. G. M. Sebel, G. S. Oehrlein, and J. M. Cook, J. Vac. Sci. Technol. A **16**, 239 (1998).
[5] M. Schaepkens, T. E. F. M. Standaert, N. R. Rueger, P. G. M. Sebel, G. S. Oehrlein, and J. M. Cook, J. Vac. Sci. Technol. A **17**, 26 (1999).
[6] L. Rolland, M. C. Peignon, Ch. Cardinaud, and G. Turban, to appear in Microelectronic Engineering (2000).
[7] L. Rolland, M. C. Peignon, Ch. Cardinaud, and G. Turban, Le Vide: Science, Technique et applications, Supl No **291**, 117 (1999).
[8] D. C. Gray, I. Tepermeister and H. H. Sawin, J. Vac. Sci. Technol. B **11**, 1243 (1993).
[9] T. M. Mayer and R. A. Barker, J.Electrochem. Soc. **129**, 585 (1982).
[10] R. A. Barker, T. M. Mayer and W. C. Pearson, J. Vac. Sci. Technol. B **1**, 37 (1983).
[11] E. Zawaideh and N. S. Kim, J. Appl. Phys. **62**, 2498 (1987).
[12] E. Zawaideh and N. S. Kim, J. Appl. Phys. **64**, 4199 (1988).
[13] V. F. Lukichev and V. A. Yunkin, Russian Microelectronics **27**, 194 (1998).
[14] C. Steinbruchel, Appl. Phys. Lett. **55**, 1960 (1989).
[15] T. Maruyama, N. Fujiwara, K. Siozawa, and M. Yoneda, Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 **35**, 2463 (1996).
[16] S. Tachi, K. Miyake, and T. Tokuyama, Jpn. J. Appl. Phys. **21**, 141 (1982).
[17] S. Tachi, K. Tsujimoto, S. Arai, and T. Kure, J. Vac. Sci. Technol. A **9**, 796 (1991).
[18] N. V. Mantzaris, E. Gogolides, A. G. Boudouvis, A. Rhallabi, and G. Turban, J. Appl. Phys. **79**, 3718 (1996).
[19] N. R. Rueger, M. F. Doemling, M. Schaepkens, J. J. Beulens, T. E. F. M. Standaert, and G. S. Oehrlein, J. Vac. Sci. Technol. A **17**, 2492 (1999).
[20] E. Gogolides, P. Vauvert, G. Kokkoris, G. Turban, and A. G. Boudouvis, accepted for publication in Journal of Applied Physics (2000).
[21] D. C. Gray, PhD Thesis, *Beam Simulation Studies of Plasma-Surface Interaction in Fluorocarbon Etching of Si and SiO_2*, Massachusetts Institute of Technology, April 1992.
[22] T. Shibano, N. Fujiwara, M. Hirayama, H. Nagata, and K. Demizu, Appl. Phys. Lett. **63**, 2336 (1993).
[23] Y.Y. Tu, T.J. Chuang, H. F. Winters, Phys. Review B **23**, 823 (1981).
[24] J. M. E. Harper, J. J. Cuomo, P. A. Leary, G. M. Summa, H. R. Kaufman, and F. J. Bresnock, J. Electrochem. Soc. **128**, 1077 (1981).
[25] D. C. Gray, H. H. Sawin, and J. W. Butterbaugh, J. Vac. Sci. Technol. A **9**, 779 (1991).
[26] J. W. Butterbaugh, PhD Thesis, *Characterization and Modeling of SiO_2 Etching in Tetrafluoromethane RF Glow Discharges,* Massachusetts Institute of Technology, September 1990.
[27] M. E. Barone and D. B. Graves, J. Appl. Phys. **77,** 1263 (1995).
[28] M. E. Barone and D. B. Graves, J. Appl. Phys. **78** , 6604 (1995).

3

Μαθηματικό πρότυπο για τον υπολογισμό των τοπικών τιμών ροής ουδετέρων ειδών και ιόντων μέσα στις εγχαρασσόμενες δομές

Περίληψη

Εξετάζεται η επίδραση της γεωμετρίας μιας δομής (π.χ. αυλάκι, οπή με κυλινδρική συμμετρία) και των φαινομένων μεταφοράς της ροής εντός αυτής στις ροές ουδετέρων ειδών και ιόντων (παραμέτρους που καθορίζουν το ρυθμό εγχάραξης). Ουσιαστικά μελετάται η διαφορά στις τιμές αυτών των παραμέτρων σε ελεύθερη επιφάνεια και σε επιφάνεια δομής: άλλη ροή φτάνει σε μια ελεύθερη επιφάνεια και άλλη σε μια επιφάνεια στη βάση ενός αυλακιού, λόγω φαινομένων σκίασης και επανεκπομπής της ροής.

Περιεχόμενα

3.1 Εισαγωγή

Οι τοπικές τιμές των παραμέτρων που καθορίζουν το ρυθμό εγχάραξης σε μια επιφάνεια δομής είναι διαφορετικές από τις τιμές των ίδιων παραμέτρων σε ελεύθερη επιφάνεια. Η γεωμετρία και φαινόμενα μεταφοράς της ροής εντός των δομών επηρεάζουν τις τιμές αυτών των παραμέτρων.

Στο παρόν κεφάλαιο, αφού συνοπτικά περιγραφούν τα βασικά φαινόμενα που συμβαίνουν εντός μιας εγχαρασσόμενης δομής, αναπτύσσεται ένα μοντέλο για τον υπολογισμό της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών που φτάνουν τοπικά σε κάθε επιφάνεια της δομής.

Η ροή των ιόντων είναι ισχυρά κατευθυνόμενη από το πεδίο που αναπτύσσεται στην οριακή στοιβάδα. Η ροή των ουδετέρων ειδών είναι μοριακή εντός των δομών αφού ο αριθμός Knudsen (λόγος του μήκους ελεύθερης διαδρομής προς την χαρακτηριστική διάσταση της δομής, πλάτος για το αυλάκι, διάμετρος για την οπή) είναι πολύ μεγαλύτερος της μονάδας για τις συνήθεις συνθήκες πίεσης σε έναν αντιδραστήρα πλάσματος (μερικά έως μερικές δεκάδες mTorr) και για τη συνήθη χαρακτηριστική διάσταση των εγχαρασσόμενων δομών (<1μm). Η μοριακή ροή επικρατεί[1] για πιέσεις μέχρι και 100Pa (~750mTorr). Οι Coburn και Winters υπολόγισαν[2] την αύξηση της πίεσης στη βάση μιας δομής Si (κυλινδρικής οπής Si) με υψηλό λόγο ασυμμετρίας (A=10) σε σχέση με την πίεση στην κορυφή της δομής. Βρήκαν ότι είναι αμελητέα (~4mTorr) και δεν μπορεί να προκαλέσει μεταβολή στις συνθήκες μοριακής ροής.

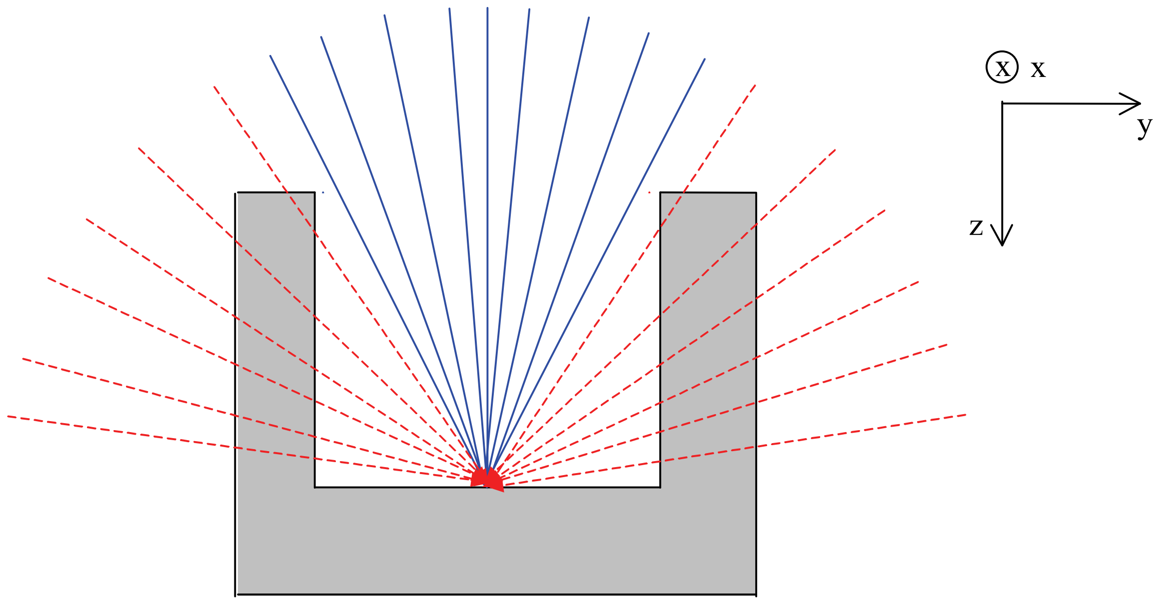
Οι συνθήκες μοριακής ροής επιτρέπουν να αγνοηθούν οι συγκρούσεις των ουδετέρων ειδών μεταξύ τους και με τα ιόντα εντός της εγχαρασσόμενης δομής και να θεωρηθεί ότι τα σωματίδια συγκρούονται μόνο με τα τοιχώματα της δομής. Επίσης θεωρείται ότι δεν υπάρχουν ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ιόντων.

3.2 Τα βασικά φαινόμενα

Τα βασικά φαινόμενα που συμβαίνουν σε μια δομή και μεταβάλλουν τις τιμές των παραμέτρων (π.χ. ροή ιόντων και ουδετέρων ειδών, ενέργεια ιόντων) που καθορίζουν το ρυθμό εγχάραξης είναι τα παρακάτω:

Α) Σκίαση της ροής

Η ροή από τον κυρίως όγκο ενός αντιδραστήρα πλάσματος που φτάνει σε μια ελεύθερη επιφάνεια είναι διαφορετική από αυτή που φτάνει στη βάση ενός αυλακιού ή μιας οπής. Αν υποθέσουμε ότι τα σωματίδια που εισέρχονται στην δομή δεν συγκρούονται μεταξύ τους (μοριακή ροή), η επίδραση της σκίασης στην προσπίπτουσα σε επιφάνεια ροή μπορεί να γίνει κατανοητή με βάση το σχήμα 3.1. Στο σχήμα αυτό φαίνεται το σύνολο των κατευθύνσεων (σε δύο διαστάσεις) υπό τις οποίες τα προσπίπτοντα σωματίδια (μόρια ή ιόντα) φτάνουν στην επιφάνεια. Όταν η επιφάνεια είναι ελεύθερη, τότε το σύνολο των κατευθύνσεων συνθέτει ένα ημικύκλιο στις δύο διαστάσεις ενώ στην περίπτωση σκίασης ένα τμήμα ημικυκλίου. *Η σκίαση της ροής επιδρά μειωτικά στη προσπίπτουσα ροή.*

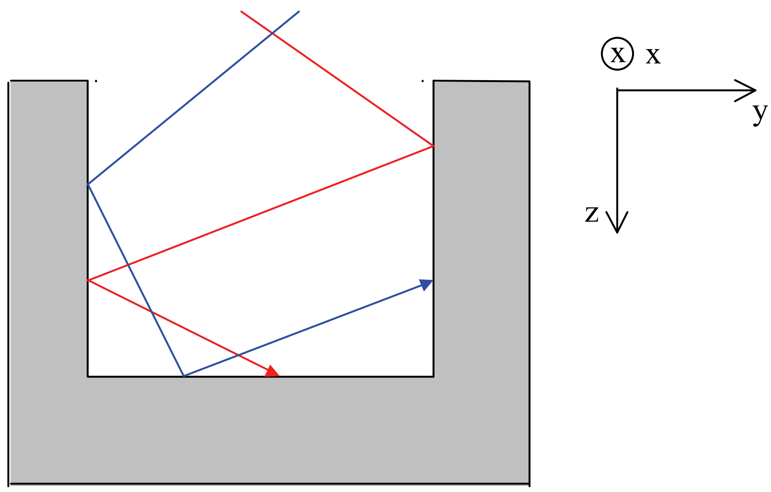


<u>Σχήμα 3.1.</u> Το σύνολο των κατευθύνσεων υπό τις οποίες σωματίδια φτάνουν στη βάση ενός αυλακιού (συνεχείς γραμμές) είναι υποσύνολο αυτών που αντιστοιχούν στην ελεύθερη επιφάνεια.

<u>Β) Επανεκπομπή της ροής</u>

Ένα σωματίδιο (μόριο ή ιόν) που προσπίπτει σε μια επιφάνεια δεν είναι σίγουρο ότι θα προσκολληθεί σε αυτήν. Η πιθανότητα προσκόλλησης εξαρτάται από τις δράσεις που λαμβάνουν χώρα στην επιφάνεια.

Το κλάσμα της ροής που δεν προσκολλάται στην επιφάνεια επανεκπέμπεται από αυτή. Έτσι, στη βάση ενός αυλακιού ή μιας οπής εκτός από την ροή που φτάνει άμεσα από τον κυρίως όγκο του πλάσματος φτάνει και αυτή που επανεκπέμπεται από τα πλάγια τοιχώματα.

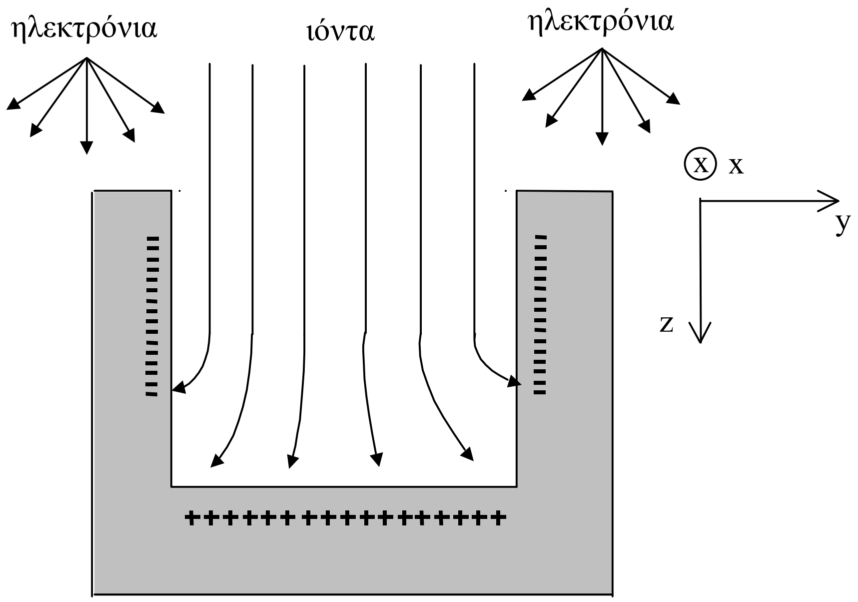


<u>Σχήμα 3.2.</u> Τροχιά σωματιδίων που προσπίπτουν σε κάποιο σημείο ενός αυλακιού. Τα σωματίδια είναι δυνατό να επανεκπέμπονται αρκετές φορές μέχρι να προσκολληθούν στην επιφάνεια.

<u>Γ) Φαινόμενο φόρτισης (Charging)</u>[3,4,5,6]

Κατά την ηλεκτρική εκκένωση σε αντιδραστήρα πλάσματος στον κυρίως όγκο του πλάσματος παράγονται ουδέτερα είδη, ηλεκτρόνια και ιόντα (στη μεγάλη πλειοψηφία τους θετικά). Στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια φτάνουν τα ιόντα που επιταχύνονται από το ηλεκτρικό πεδίο που αναπτύσσεται στην οριακή στοιβάδα η οποία δρα και ως φράκτης ηλεκτρονίων. Το πεδίο όμως αυτό είναι εναλλασσόμενο όπως και η τάση που εφαρμόζεται στα ηλεκτρόδια του αντιδραστήρα. Έτσι, για κάποια διαστήματα του κύκλου του εναλλασσόμενου πεδίου της οριακής στοιβάδας, φτάνουν και ηλεκτρόνια στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια με κατανομή κατευθύνσεων που προσεγγίζει την ισοτροπική. Από την άλλη πλευρά τα ιόντα προσπίπτουν στην εγχαρασσόμενη δομή με κατεύθυνση που επιβάλλεται από το πεδίο της οριακής στοιβάδας και είναι κατακόρυφη για την πλειοψηφία των ιόντων. Αυτή η διαφορά στις κατανομές κατευθύνσεων που φτάνουν στην επιφάνεια έχει σαν αποτέλεσμα στη δομή να φτάνουν τοπικά άνισες ροές ιόντων και ηλεκτρονίων. Η συνέπεια είναι η τοπική φόρτιση της εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Αν η εγχαρασσόμενη δομή είναι αυλάκι μη αγώγιμου υλικού συσσωρεύεται αρνητικό φορτίο στα πλάγια τοιχώματα και θετικό φορτίο στη βάση (σχήμα 3.3). Αυτή η φόρτιση μπορεί να προκαλέσει σε ιόντα και ηλεκτρόνια απόκλιση από την αρχική τροχιά τους και πρόσπτωσή τους σε διαφορετικό σημείο της δομής. Εκτός από την απόκλιση στην κατανομή κατευθύνσεων ιόντων και ηλεκτρονίων το φαινόμενο της φόρτισης προκαλεί και μεταβολή των κατανομών ενέργειας. Η πολυπλοκότητα του προβλήματος είναι εμφανής αν αναλογιστεί κανείς ότι το αναπτυσσόμενο πεδίο επιδρά στις ροές και την ενέργεια ιόντων και ηλεκτρονίων οι οποίες επιδρούν με τη σειρά τους στην τοπική φόρτιση και άρα στο πεδίο που αναπτύσσεται.

Τέλος, σημειώνεται ότι τα προβλήματα φόρτισης που καλείται κανείς να λύσει κατά την εγχάραξη δομών εξαρτώνται από την αγωγιμότητα των υλικών της δομής που εγχαράσσεται.



<u>Σχήμα 3.3.</u> Η τοπική φόρτιση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια προκαλεί αποκλίσεις στην κατεύθυνση των ιόντων.[3]

Δ) Διάχυση επί της εγχαρασσόμενης επιφάνειας (surface diffusion)

Τα σωματίδια των ουδετέρων ειδών που προσκολλούνται στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια είναι δυνατό να διαχυθούν σε γειτονικές θέσεις. Το φαινόμενο της διάχυσης επί της επιφάνειας χαρακτηρίζεται από το μήκος διάχυσης, που εκφράζει τη μέση απόσταση επί της επιφάνειας που διανύει ένα ουδέτερο είδος πριν αντιδράσει με το υπόστρωμα. Το μήκος διάχυσης, που συνδέεται με το συντελεστή διάχυσης και με την ευκινησία (mobility) των σωματιδίων στην επιφάνεια, εξαρτάται από το πόσο ισχυρά προσροφάται ένα σωματίδιο στην επιφάνεια. Όσο πιο ισχυρές είναι οι δυνάμεις που συγκρατούν ένα σωματίδιο στην επιφάνεια τόσο μικρότερο είναι το μήκος διάχυσης, η ευκινησία και ο συντελεστής διάχυσης στην επιφάνεια. Γενικά, η ενέργεια ενεργοποίησης για τη διάχυση ενός σωματιδίου επί της επιφάνειας είναι 10-20% της ενέργειας του δεσμού που κρατά προσροφημένο το σωματίδιο αλλά η τιμή της εξαρτάται και από το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας.[7] Στην πράξη σε συστήματα αερίου σε ηλεκτρική εκκένωση και στερεού το μήκος διάχυσης είναι άγνωστο. Για αυτό το λόγο[8] στα περισσότερα μοντέλα διάχυσης επί της επιφάνειας που αναπτύσσονται αποτελεί προσαρμόσιμη παράμετρο.[9,10,11]

Η επίδραση του φαινόμένου διάχυσης ουδετέρων ειδών επί της επιφάνειας γίνεται σημαντικότερη όταν αυξάνεται το μήκος διάχυσης. Μήκος διάχυσης συγκρίσιμο με τις διαστάσεις της εγχαρασσόμενης δομής μπορεί να επηρεάσει το τοπικό ρυθμό εγχάραξης της δομής.[8]

Από διαστατική ανάλυση[12] προκύπτει ότι η σκίαση της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών, η επανακπομπή της ροής των ουδετέρων είναι φαινόμενα που εξαρτώνται από το λόγο ασυμμετρίας της δομής. Κάποιες από τις επιπτώσεις του φαινομένου φόρτισης είναι επίσης εξαρτώμενες από το λόγο ασυμμετρίας ενώ η διάχυση στην επιφάνεια εξαρτάται από τις απόλυτες διαστάσεις της δομής.

Εκτός από τα παραπάνω φαινόμενα υπάρχουν και άλλα[12] που επιδρούν λιγότερο ή περισσότερο στην εγχάραξη δομών ανάλογα με τις ειδικές συνθήκες εγχάραξης και τη χημεία που χρησιμοποιείται. *Η πειραματικά παρατηρούμενη εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το λόγο ασυμμετρίας (1ο κεφάλαιο) υποδηλώνει ότι τα φαινόμενα σκίασης, επανεκπομπής και φόρτισης παίζουν σημαντικό ρόλο στην εγχάραξη δομών.*

Στο υπόλοιπο του κεφαλαίου εξετάζονται η σκίαση και η επανεκπομπή της ροής και περιγράφονται τα αντίστοιχα μαθηματικά πρότυπα.

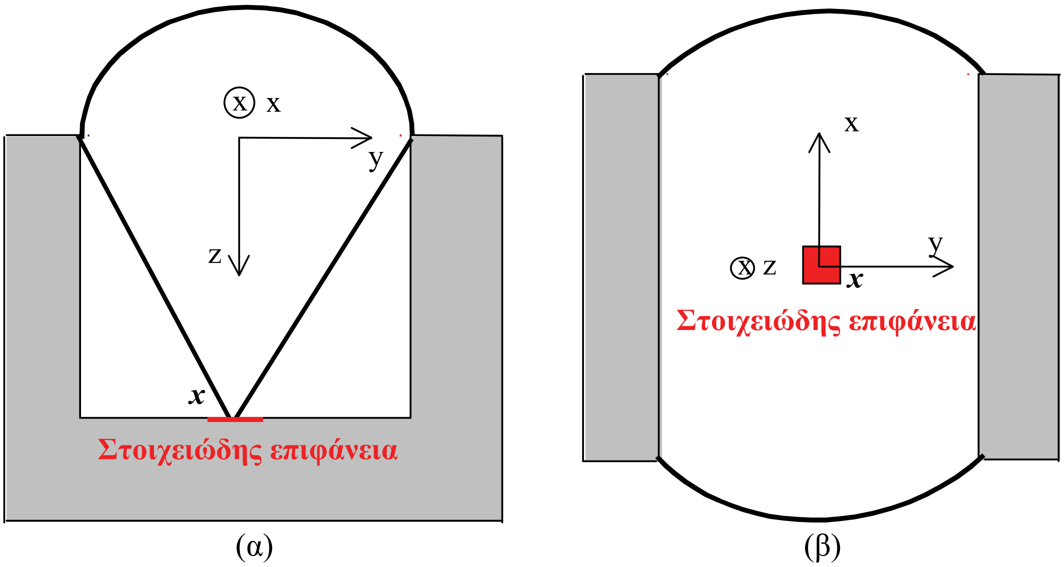
3.3 Σκίαση της ροής

Η ροή σωματιδίων (ιόντων, ουδετέρων μορίων) που φτάνει σε μια στοιχειώδη επιφάνεια μιας δομής (σχήμα 3.4) δεν είναι ίδια με αυτή που φτάνει σε ελεύθερη επιφάνεια. Η ροή περιορίζεται από τη γεωμετρία της δομής που καθορίζει τη στερεά γωνία διαμέσου της οποίας ο κυρίως όγκος του πλάσματος είναι «ορατός» στη στοιχειώδη επιφάνεια. Έτσι, για να υπολογίσουμε τη ροή που φτάνει άμεσα από τον κυρίως όγκο του πλάσματος σε μια στοιχειώδη επιφάνεια θα πρέπει να ολοκληρώσουμε στη στερεά γωνία Ω.

Η ροή που φτάνει σε ένα σημείο $\boldsymbol{x}$ δίδεται από τη σχέση:

$$\boldsymbol{j}_{direct}(\boldsymbol{x}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{x})} \boldsymbol{j}_{direct}(\omega)\mathrm{d}\omega \qquad (1)$$

όπου $\boldsymbol{j}_{direct}(\boldsymbol{x})$ το διάνυσμα της ροής από τον κυρίως όγκο του πλάσματος στο σημείο $\boldsymbol{x}$ και
dω το στοιχείο στερεάς γωνίας.



Σχήμα 3.4. *Τομές της στερεάς γωνίας Ω για στοιχειώδη επιφάνεια στη βάση ορθογωνικού αυλακιού α) στο επίπεδο yz και β) στο επίπεδο xy.*

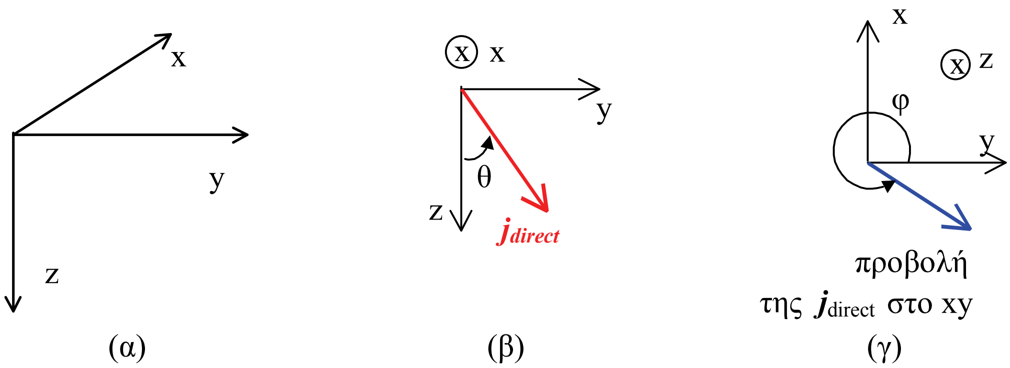
Το στοιχείο στερεάς γωνίας dω στο σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων του σχήματος 3.5 είναι

$$d\omega = \sin\theta \, d\varphi \, d\theta \qquad (2)$$

Επομένως

$$\boldsymbol{j}_{direct}(\boldsymbol{x}) = \iint \boldsymbol{j}_{direct}(\theta,\varphi)\sin\theta \, d\theta \, d\varphi \qquad (3)$$

όπου $\boldsymbol{j}_{direct}(\theta,\varphi)$ το διάνυσμα της ροής κατά την κατεύθυνση που ορίζεται από το ζεύγος (θ,φ).



Σχήμα 3.5. *Σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων, ορισμός των γωνιών θ,φ σε επίπεδο yz και σε επίπεδο xy : θ είναι η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα της ροής με τον άξονα z και φ η γωνία της προβολής του διανύσματος της ροής στο επίπεδο xy με τον άξονα y.*

Μπορούμε να γράψουμε ότι

$$\boldsymbol{j}_{direct}(\theta,\varphi) = \mathrm{j}_{\mathrm{direct}}(\theta,\varphi)\, \boldsymbol{n}_j(\theta,\varphi) \qquad (4)$$

όπου $\mathrm{j}_{\mathrm{direct}}(\theta,\varphi)$ το μέτρο της ροής κατά την κατεύθυνση που ορίζεται από το ζεύγος (θ,φ) και
$\boldsymbol{n}_j$ το μοναδιαίο διάνυσμα κατά την κατεύθυνση της ροής.

Σε καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων :

$$\boldsymbol{n}_j = \sin\theta \sin\varphi\ \hat{e}_x - \sin\theta \cos\varphi\ \hat{e}_y + \cos\theta\ \hat{e}_z \qquad (5)$$

όπου $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ τα μοναδιαία διανύσματα στους άξονες x,y,z.

Από τις εξισώσεις (3), (4) και (5) προκύπτουν οι συνιστώσες της ροής από τον κυρίως όγκο του πλάσματος που φτάνει σε ένα σημείο ***x***. *Πρόκειται για τη ροή που θα έφτανε σε μια επιφάνεια με κέντρο το σημείο **x** και κάθετη στον άξονα x , y, και z αντίστοιχα* :

$$\mathrm{j}_{\mathrm{direct,x}}(\boldsymbol{x}) = \iint_{\Omega(\boldsymbol{x})} \mathrm{j}_{\mathrm{direct}}(\theta,\varphi) \sin^2\theta \sin\varphi\, \mathrm{d}\varphi\, \mathrm{d}\theta \qquad (6)$$

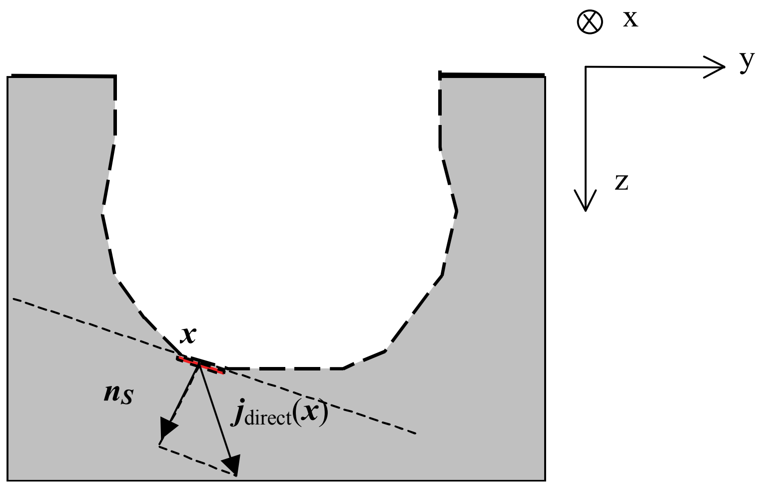
$$\mathrm{j}_{\mathrm{direct,y}}(\boldsymbol{x}) = -\iint_{\Omega(\boldsymbol{x})} \mathrm{j}_{\mathrm{direct}}(\theta,\varphi) \sin^2\theta \cos\varphi\, \mathrm{d}\varphi\, \mathrm{d}\theta \qquad (7)$$

$$\mathrm{j}_{\mathrm{direct,z}}(\boldsymbol{x}) = \iint_{\Omega(\boldsymbol{x})} \mathrm{j}_{\mathrm{direct}}(\theta,\varphi) \sin\theta \cos\theta\, \mathrm{d}\varphi\, \mathrm{d}\theta \qquad (8)$$

Για τον υπολογισμό των συνιστωσών $\mathrm{j}_{\mathrm{direct,x}}$, $\mathrm{j}_{\mathrm{direct,y}}$ και $\mathrm{j}_{\mathrm{direct,z}}$, δηλαδή *του πεδίου ροής (από τον κυρίως όγκο του πλάσματος) στη δομή*, θα πρέπει να προσδιορίσουμε τη στερεά γωνία Ω δηλαδή τα όρια ολοκλήρωσης για τις *θ*, *φ* και να γνωρίζουμε τη συνάρτηση $\mathrm{j}_{\mathrm{direct}}(\theta,\varphi)$.

Κατά την εξέλιξη της τοπογραφίας μιας δομής η εγχαρασσόμενη επιφάνεια χωρίζεται σε στοιχειώδεις (σχήμα 3.6). Αυτό που ενδιαφέρει είναι η ροή που φτάνει σε κάθε μία από αυτές τις επιφάνειες. Αν προσδιοριστεί το πεδίο ροής δηλαδή οι συνιστώσες $\mathrm{j}_{\mathrm{direct,x}}$, $\mathrm{j}_{\mathrm{direct,y}}$, $\mathrm{j}_{\mathrm{direct,z}}$ σε οποιοδήποτε σημείο ***x*** του πεδίου ροής, η ροή που φτάνει σε στοιχειώδη επιφάνεια S με κέντρο το σημείο ***x***, $\mathrm{j}_{\mathrm{S,direct}}(\boldsymbol{x})$, είναι η συνιστώσα του διανύσματος της ροής στο μοναδιαίο κάθετο στη στοιχειώδη επιφάνεια διάνυσμα και υπολογίζεται από το εσωτερικό γινόμενο :

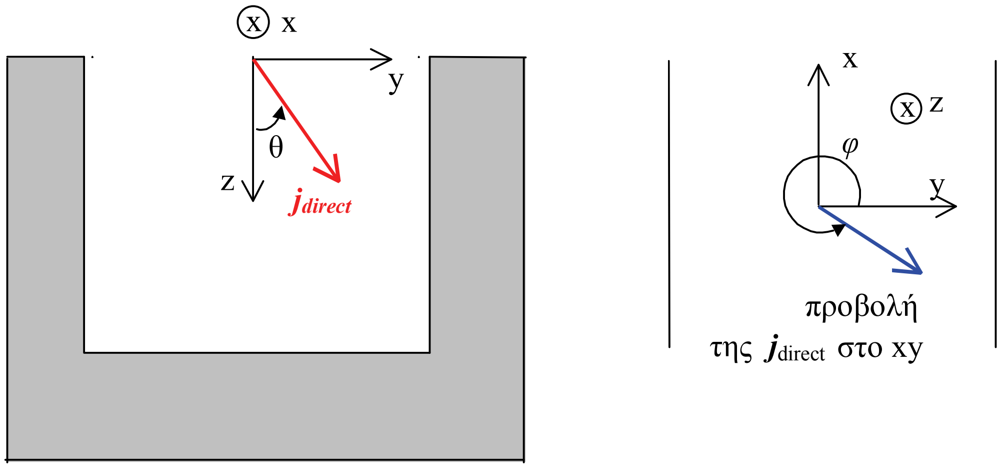
$$\mathrm{j}_{\mathrm{S,direct}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{j}_{direct}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{n}_S(\boldsymbol{x}) \qquad (9)$$



*<u>Σχήμα 3.6.</u> Η ροή που φτάνει σε στοιχειώδη επιφάνεια με κέντρο το σημείο **x**, υπολογίζεται από το εσωτερικό γινόμενο της j_{direct} με το κάθετο στη στοιχειώδη επιφάνεια διάνυσμα $\boldsymbol{n}_s$.*

3.3.1 Στερεά γωνία Ω για αυλάκι

Θεωρούμε ότι η διάσταση του αυλακιού κατά τον άξονα x είναι πολύ μεγαλύτερη από τις άλλες δύο διαστάσεις ώστε να μπορεί γίνει η παραδοχή ότι είναι άπειρη καθώς και ότι η τομή της δομής στο επίπεδο yz παραμένει αμετάβλητη κατά τη διεύθυνση x.

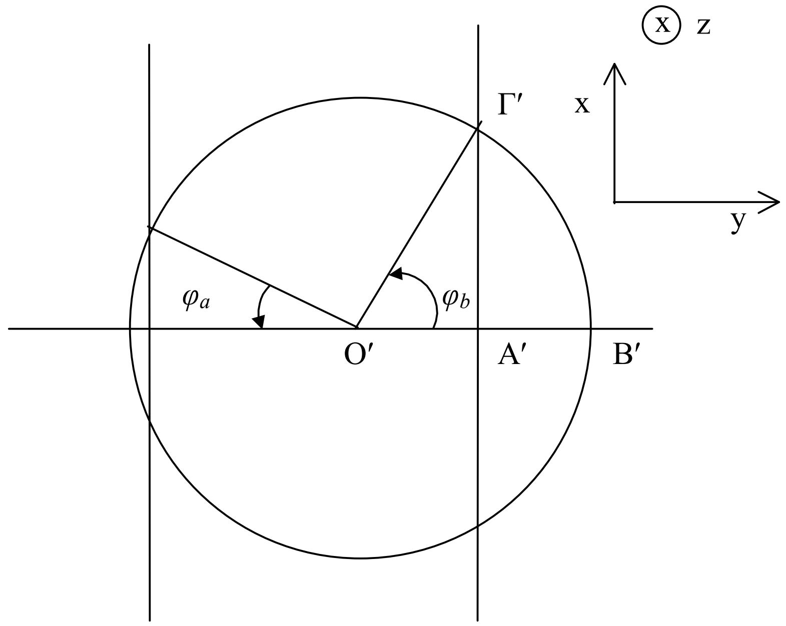


(α) (β)

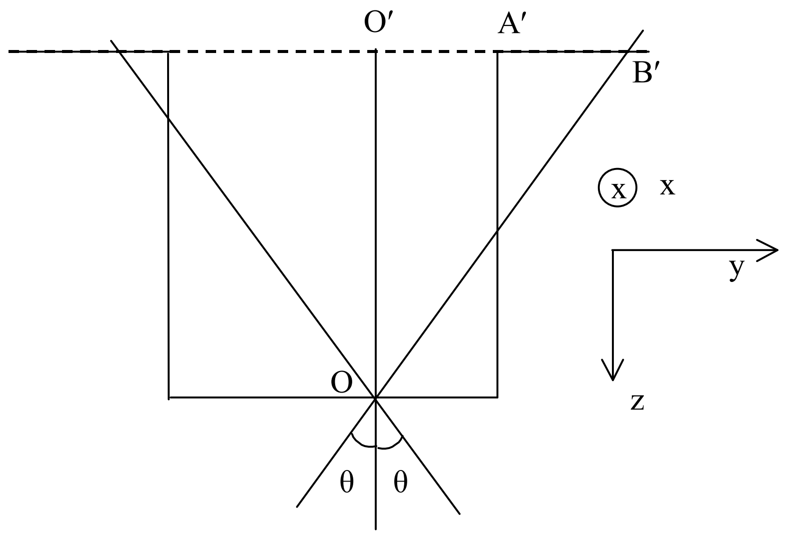
<u>Σχήμα 3.7.</u> Ορισμός των γωνιών α) θ σε τομή αυλακιού σε επίπεδο yz και β) φ σε τομή αυλακιού σε επίπεδο xy : θ είναι η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα της ροής με τον άξονα z και φ η γωνία της προβολής του διανύσματος της ροής στο επίπεδο xy με τον άξονα y.

Η στερεά γωνία Ω για κάποιο σημείο ***x*** σε αυλάκι ορίζεται από τις παρακάτω σχέσεις σε συμφωνία με τους Singh et al.[11], Shaqfeh et al.[13], Abraham et al.[14]:

$$\Omega(\boldsymbol{x}) = \left\{ \begin{array}{c} 0 \le \theta \le \dfrac{\pi}{2} \\ \varphi_b \le \varphi \le \pi - \varphi_a \\ \pi + \varphi_a \le \varphi \le 2\pi - \varphi_b \end{array} \right\} \qquad (10)$$



(α)



(β)

<u>Σχήμα 3.8.</u> Γωνίες φ_α και φ_b σε κάποια θέση x στη βάση του αυλακιού για μια τυχαία γωνία θ.

Οι γωνίες φ_α και φ_b (σχήμα 3.8) εξαρτώνται από τη θέση του $\boldsymbol{x}$ καθώς και από τη γωνία θ. Αν η θέση $\boldsymbol{x}$ είναι στο σημείο Ο του σχήματος 3.8 τότε μπορούμε να υπολογίσουμε την φ_b για μια γωνία θ με τις παρακάτω σχέσεις:

$\cos\varphi_b$ = Ο′Α′/ Ο′Γ′ = Ο′Α′/ Ο′Β′

και

$\tan\theta = O'B'/ O'O \Rightarrow O'B' = O'O \tan\theta$

άρα

$\cos\varphi_b = O'A'/(O'O \tan\theta) \Rightarrow \varphi_b = \arccos[O'A'/(O'O \tan\theta)]$

Με αντίστοιχο τρόπο υπολογίζεται και η γωνία φ_a για το σημείο O και για τη γωνία θ. Γενικά οι φ_α και φ_b ορίζονται από τις παρακάτω εξισώσεις:

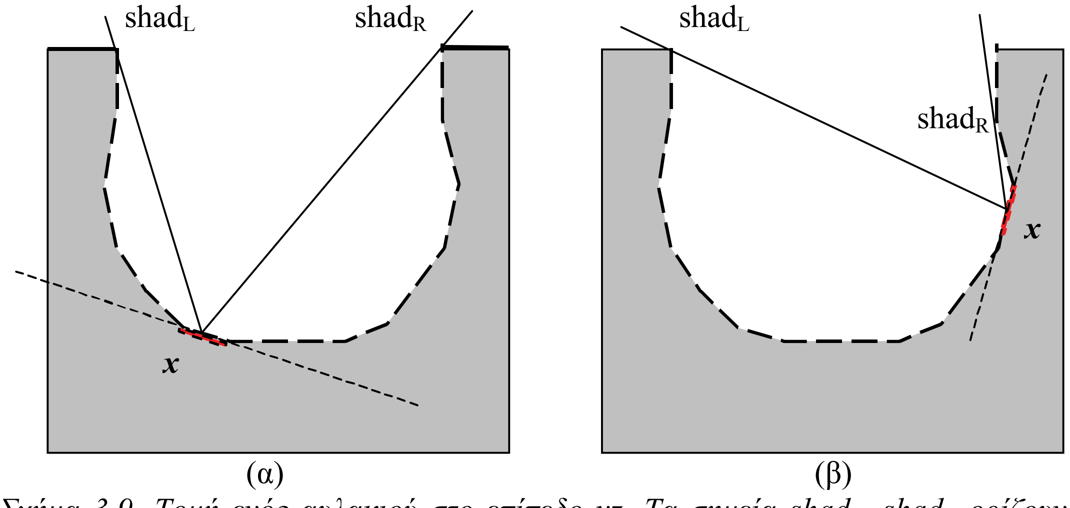
$$\varphi_a(d_{yL} > 0) = \begin{Bmatrix} \arccos\left(\dfrac{a}{\tan\theta}\right) & , \tan\theta \ge a \\ 0 & , \tan\theta < a \end{Bmatrix} \tag{11}$$

$$\varphi_a(d_{yL} \le 0) = \begin{Bmatrix} \pi - \arccos\left(\dfrac{-a}{\tan\theta}\right) & , \tan\theta \ge -a \\ \pi & , \tan\theta < -a \end{Bmatrix} \tag{12}$$

$$\varphi_b(d_{yR} > 0) = \begin{Bmatrix} \arccos\left(\dfrac{b}{\tan\theta}\right) & , \tan\theta \ge b \\ 0 & , \tan\theta < b \end{Bmatrix} \tag{13}$$

$$\varphi_b(d_{yR} \le 0) = \begin{Bmatrix} \pi - \arccos\left(\dfrac{-b}{\tan\theta}\right) & , \tan\theta \ge -b \\ \pi & , \tan\theta < -b \end{Bmatrix} \tag{14}$$

όπου $a = d_{yL}/ d_{zL}$, $b = d_{yR}/ d_{zR}$.



*<u>Σχήμα 3.9.</u> Τομή ενός αυλακιού στο επίπεδο yz. Τα σημεία $shad_L$, $shad_R$ ορίζουν το παράθυρο ορατότητας της στοιχειώδους επιφάνειας στη θέση **x** στον όγκο εκτός της δομής όταν α) $d_{yL}>0$ και $d_{yR}>0$, β) $d_{yL}>0$ και $d_{yR}<0$.*

Οι παράμετροι d_{yL}, d_{zL} , d_{yR}, d_{zR} ορίζονται ως εξής :

$$d_{yL} = y(\boldsymbol{x}) - y(shad_L) \tag{15}$$
$$d_{zL} = z(\boldsymbol{x}) - z(shad_L) \tag{16}$$
$$d_{yR} = y(shad_R) - y(\boldsymbol{x}) \tag{17}$$

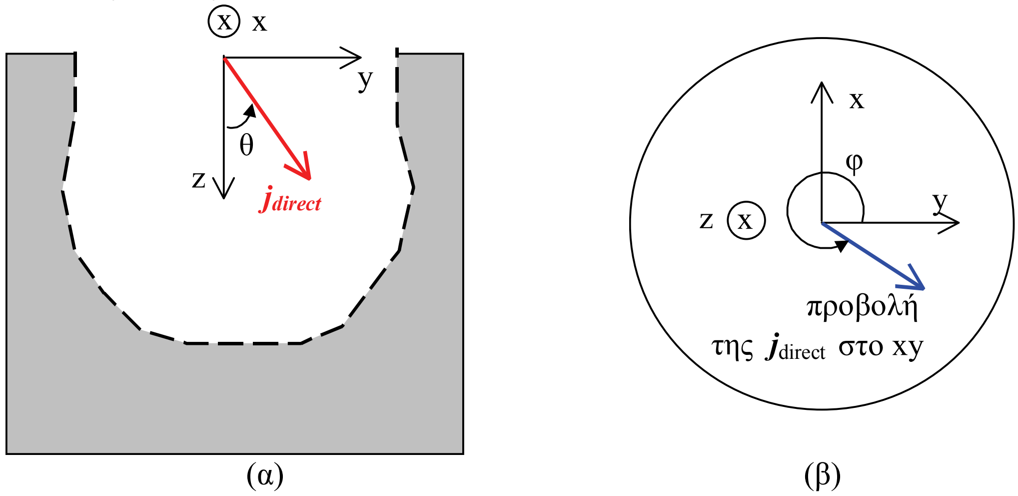
$$d_{zR} = z(\boldsymbol{x}) - z(\mathrm{shad}_R) \tag{18}$$

όπου τα σημεία **x**, *shad*$_R$, *shad*$_L$ *καθορίζουν το παράθυρο ορατότητας* της στοιχειώδους επιφάνειας στη θέση **x** στον όγκο εκτός της δομής (*σχήμα 3.9).*

Η εφαρμογή των σχέσεων (10)-(14) δεν περιορίζεται μόνο σε αυλάκια ορθογώνιας τομής αλλά ισχύουν σε οποιαδήποτε δομή εκτείνεται στο άπειρο κατά μία διάσταση και η τομή της σε επίπεδο κάθετο σε αυτή τη διάσταση δεν μεταβάλλεται.

3.3.2 Στερεά γωνία Ω για οπή

Θεωρούμε ότι η οπή εμφανίζει κυλινδρική συμμετρία. Στο σχήμα 3.10 φαίνεται το σύστημα συντεταγμένων που χρησιμοποιείται. Ο άξονας z ταυτίζεται με τον κεντρικό άξονα της οπής. Ο άξονας y ορίζεται σε κάποια τυχαία ακτινική κατεύθυνση. Ο άξονας x έχει διεύθυνση κάθετη στην τυχαία αυτή ακτινική κατεύθυνση δηλαδή διεύθυνση εφαπτομενική στις στοιχειώδεις επιφάνειες που φαίνονται σε τομή στο σχήμα 3.10α. Λόγω κυλινδρικής συμμετρίας κάθε τομή στο xy είναι ένας κύκλος.



<u>*Σχήμα 3.10.*</u> *Ορισμός των γωνιών α) θ σε τομή οπής σε επίπεδο yz και β) φ σε τομή οπής σε επίπεδο xy : θ είναι η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα της ροής με τον άξονα z και φ η γωνία της προβολής του διανύσματος της ροής στο επίπεδο xy με τον άξονα y.*

Η στερεά γωνία Ω για κάποιο σημείο $\boldsymbol{x}$ σε οπή ορίζεται από τις παρακάτω σχέσεις:[15,11]

$$\Omega(\boldsymbol{x}) = \left\{ \begin{array}{c} 0 \le \theta \le \pi/2 \\ 0 \le \varphi \le \varphi_{\mathrm{crit}} \\ 2\pi - \varphi_{\mathrm{crit}} \le \varphi \le 2\pi \end{array} \right\} \tag{19}$$

Η γωνία φ_{crit} εξαρτάται από τη θέση του $\boldsymbol{x}$ καθώς και από τη γωνία θ και ορίζεται από τις παρακάτω εξισώσεις :

$$\varphi_{crit}(r<R)=\begin{cases}\pi & ,\tan\theta<\dfrac{R-r}{dz_{MAX}}\\ \arccos\left[\dfrac{R^2-r^2-dz_{MAX}{}^2\tan^2\theta}{2rdz_{MAX}\tan\theta}\right] & ,\dfrac{R-r}{dz_{MAX}}<\tan\theta<\dfrac{R+r}{dz_{MAX}}\\ 0 & ,\dfrac{R+r}{dz_{MAX}}<\tan\theta\end{cases} \tag{20}$$

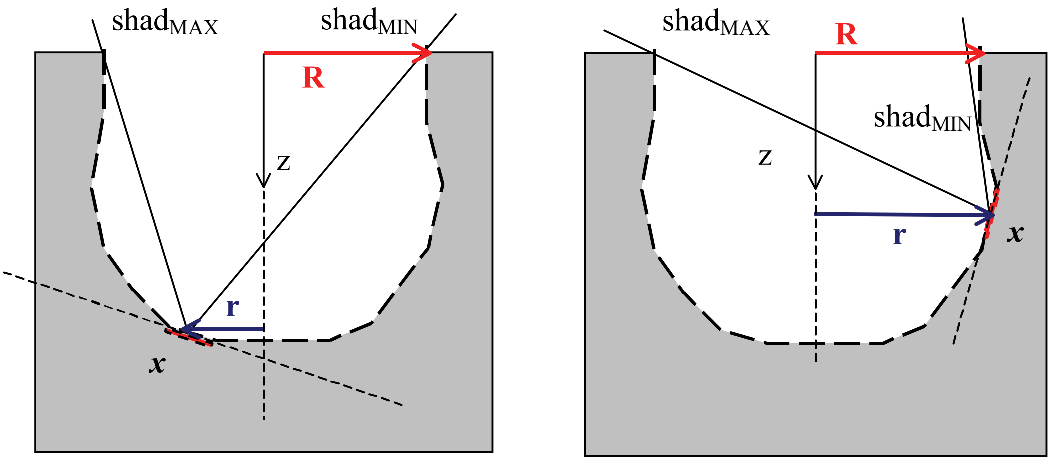
$$\varphi_{crit}(r>R)=\begin{cases}0 & ,\tan\theta<\dfrac{r-R}{dz_{MIN}}\\ \arccos\left[\dfrac{R^2-r^2-dz_{MIN}{}^2\tan^2\theta}{2rdz_{MIN}\tan\theta}\right] & ,\dfrac{r-R}{dz_{MIN}}<\tan\theta<\left[\dfrac{r^2-R^2}{dz_{MAX}dz_{MIN}}\right]^{1/2}\\ \arccos\left[\dfrac{R^2-r^2-dz_{MAX}{}^2\tan^2\theta}{2rdz_{MAX}\tan\theta}\right] & ,\left[\dfrac{r^2-R^2}{dz_{MAX}dz_{MIN}}\right]^{1/2}<\tan\theta<\dfrac{r+R}{dz_{MAX}}\\ 0 & ,\dfrac{r+R}{dz_{MAX}}<\tan\theta\end{cases} \tag{21}$$

όπου R είναι η ακτίνα της κυκλικής τομής στο επίπεδο xy στην κορυφή της οπής(z=0),
r είναι η ακτίνα της κυκλικής τομής στο επίπεδο xy στο z όπου βρίσκεται το $\boldsymbol{x}$.

και

$dz_{MAX} = z(\boldsymbol{x}) - z(shad_{MAX})$ (22)

$dz_{MIN} = z(\boldsymbol{x}) - z(shad_{MIN})$ (23)



(α) (β)

Σχήμα 3.11. *Τομή μιας οπής στο επίπεδο yz. Τα σημεία $shad_{MIN}$, $shad_{MAX}$ ορίζουν το παράθυρο ορατότητας της στοιχειώδους επιφάνειας στον όγκο εκτός της δομής α) r<R και β) r>R.*

3.3.3 Ροή ουδετέρων από τον κυρίως όγκο του πλάσματος σε αυλάκι και οπή

Για να υπολογίσουμε τις συνιστώσες της ροής είναι απαραίτητο να γνωρίζουμε τη συνάρτηση $j_{direct}(\theta,\varphi)$. Η συνάρτηση αυτή μπορεί να οριστεί με βάση κάποια από τις γνωστές κατανομές (Maxwell-Boltzmann, Gauss) ή να προκύψει από προσομοιώσεις Monte Carlo ή πειραματικά δεδομένα.

Θεωρούμε ότι η κατανομή ταχυτήτων των ουδετέρων μορίων (radicals) είναι Maxwell-Boltzmann αγνοώντας τις συγκρούσεις ανταλλαγής φορτίου των ουδετέρων ειδών με ιόντα που θα μπορούσαν να προκαλέσουν απόκλιση από την ισοτροπική κατανομή.[14] Έτσι, σύμφωνα με την κινητική θεωρία των αεριών, στοιχεία της οποίας παρατίθενται στο παράρτημα Β, οι ουδέτερες ρίζες ακολουθούν την παρακάτω ισοτροπική κατανομή ταχυτήτων:

$$f(u) = 4\pi u^2\left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{3/2} e^{-Mu^2/2RT} \tag{24}$$

όπου u είναι το μέτρο της ταχύτητας ενός μορίου,
M η γραμμομοριακή μάζα του αερίου,
R η παγκόσμια σταθερά των αερίων και
T η απόλυτη θερμοκρασία του αερίου.

Χρησιμοποιώντας την κατανομή Maxwell καταλήγουμε (παράρτημα Β) στο ότι η ροή ουδετέρων που φτάνει σε μια ελεύθερη επιφάνεια, $j_{S,N,0}$, είναι:

$$j_{S,N,0} = \frac{1}{4}\,\bar{c}\,N \tag{25}$$

όπου N=N/V είναι η πυκνότητα του αερίου, το πλήθος των μορίων του αερίου ανά μονάδα όγκου και
$\bar{c}$ η μέση ταχύτητα του αερίου.

Την ζητούμενη συνάρτηση $j_{N,direct}(\theta,\varphi)$ μπορούμε να την προσδιορίσουμε μέσω της εξίσωσης (8) ορίζοντας τα όρια ολοκλήρωσης θ,φ τέτοια ώστε να μην υπάρχει σκίαση της ροής, δηλαδή να καλύπτουν κάθε πιθανή κατεύθυνση (θ,φ) που ανήκει στο ημισφαίριο πάνω από την ελεύθερη επιφάνεια :

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2} j_{N,direct}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\theta\ d\theta\, d\varphi = j_{S,N,0} = \frac{1}{4}\,\bar{c}\,N \tag{26}$$

Αφού η κατανομή είναι ισοτροπική δηλαδή το μέτρο της ροής δεν εξαρτάται από την κατεύθυνση μπορεί να βγει από το ολοκλήρωμα. Έτσι, προκύπτει ότι :

$$j_{N,direct}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4\pi}\,\bar{c}\,N = \frac{j_{S,N,0}}{\pi} \tag{27}$$

Αντικαθιστώντας την σχέση (27) στις εξισώσεις (6), (7) και (8) οι συνιστώσες της ροής ουδετέρων στο σημείο $\boldsymbol{x}$ είναι :

$$j_{N,direct,x}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{\pi} \iint\limits_{\Omega(\boldsymbol{x})} \sin^2\theta \sin\varphi \, d\varphi \, d\theta \tag{28}$$

$$j_{N,direct,y}(\boldsymbol{x}) = -\frac{j_{S,N,0}}{\pi} \iint\limits_{\Omega(\boldsymbol{x})} \sin^2\theta \cos\varphi \, d\varphi \, d\theta \tag{29}$$

$$j_{N,direct,z}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{\pi} \iint\limits_{\Omega(\boldsymbol{x})} \sin\theta \cos\theta \, d\varphi \, d\theta \tag{30}$$

3.3.3.1 Υπολογισμός ροής ουδετέρων σε αυλάκι

Αν θεωρήσουμε ότι η δομή που εγχαράσσεται είναι αυλάκι, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις εξισώσεις (10)-(18) για την στερεά γωνία $\Omega(\boldsymbol{x})$, οπότε το πεδίο ροής ουδετέρων στο σημείο $\boldsymbol{x}$ περιγράφεται από τις παρακάτω εξισώσεις :

$$j_{N,direct,x}(\boldsymbol{x})=0 \tag{31}$$

$$j_{N,direct,y}(\boldsymbol{x}) = \frac{2j_{S,N,0}}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin^2\theta \, (\sin\varphi_b - \sin\varphi_a) \, d\theta \tag{32}$$

$$j_{N,direct,z}(\boldsymbol{x}) = \frac{2j_{S,N,0}}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin\theta \cos\theta \, (\pi - \varphi_a - \varphi_b) \, d\theta \tag{33}$$

Ολοκληρώνοντας τις παραπάνω σχέσεις αναλυτικά εφαρμόζοντας κατάλληλους μετασχηματισμούς προκύπτει για το πεδίο ροής σε αυλάκι

$$j_{N,direct,x}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{34}$$

$$j_{N,direct,y}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{b^2+1}} - \frac{1}{\sqrt{a^2+1}} \right] \tag{35}$$

$$j_{N,direct,z}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{2} \left[\frac{a}{\sqrt{a^2+1}} + \frac{b}{\sqrt{b^2+1}} \right] \tag{36}$$

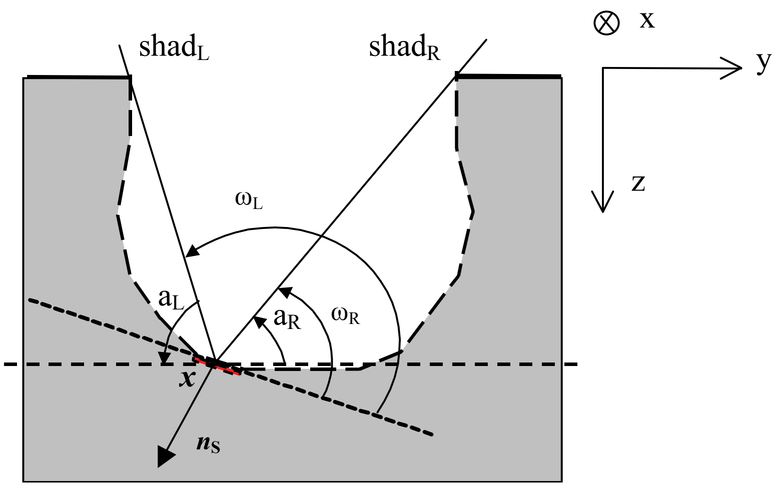
όπου $a = d_{yL}/ d_{zL}$, $b = d_{yR}/ d_{zR}$. Οι παράμετροι d_{yL}, d_{zL} , d_{yR}, d_{zR} ορίζονται στις εξισώσεις (15)-(18).

Ορίζοντας τις γωνίες a_L, a_R (σχήμα 3.12) μπορούμε να ξαναγράψουμε τις παραπάνω εξισώσεις του πεδίου ροής:

$$j_{N,direct,x}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{37}$$

$$j_{N,direct,y}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[\sin a_R - \sin a_L\right] \tag{38}$$

$$j_{N,direct,z}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[\cos a_R + \cos a_L\right] \tag{39}$$



Σχήμα 3.12. Τομή ενός αυλακιού στο επίπεδο yz. Τα σημεία $shad_L$, $shad_R$ ορίζουν το παράθυρο ορατότητας της στοιχειώδους επιφάνειας στον όγκο εκτός της δομής. Οι γωνίες a_L και a_R ορίζονται με βάση την οριζόντιο (παράλληλη με τον άξονα y) και με θετική φορά αντίστροφη των δεικτών του ρολογιού. Οι γωνίες ω_R και ω_L ορίζονται με βάση την κλίση στη στοιχειώδη επιφάνεια με κέντρο το x και με φορά αντίστροφη των δεικτών του ρολογιού.

Η ροή ουδετέρων που φτάνει σε στοιχειώδη επιφάνεια S (σχήμα 3.12) με κέντρο το σημείο $\boldsymbol{x}$, $j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x})$, είναι η συνιστώσα του διανύσματος της ροής στο μοναδιαίο κάθετο στην στοιχειώδη επιφάνεια S διάνυσμα και υπολογίζεται από το εσωτερικό γινόμενο της εξίσωσης (9) :

$$j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{j_{N,direct}}(\boldsymbol{x}) \cdot n_S(\boldsymbol{x}) \tag{40}$$

Το τελικό αποτέλεσμα που δίνει τη συνιστώσα της ροής στο κάθετο σε στοιχειώδη επιφάνεια διάνυσμα είναι το παρακάτω:

$$j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x}) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[\cos\omega_R - \cos\omega_L\right] & ,\alpha\nu\ \omega_R, \omega_L \in [0,\pi]\ \kappa\alpha\iota\ \omega_R + \omega_L \le \pi \\ \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[\cos 0 - \cos\omega_L\right] & ,\alpha\nu\ \omega_L \in [0,\pi]\ \kappa\alpha\iota\ \omega_R \le 0 \\ \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[\cos\omega_R - \cos\pi\right] & ,\alpha\nu\ \omega_R \in [0,\pi]\ \kappa\alpha\iota\ \omega_L \ge \pi \\ \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[\cos 0 - \cos\pi\right] & ,\alpha\nu\ \omega_R \le 0\ \kappa\alpha\iota\ \omega_L \ge \pi \end{array} \right\} \tag{41}$$

όπου οι γωνίες ορατότητας ω_L και ω_R ορίζονται με βάση την κλίση της στοιχειώδους επιφάνειας και με φορά αντίθετη των δεικτών του ρολογιού (σχήμα 3.12).

Τέλος σημειώνεται ότι οι σχέσεις (41) ισχύουν στην περίπτωση που υπάρχει ευθεία γραμμή που ενώνει το σημείο $\boldsymbol{x}$ του πεδίου ροής στη δομή με τον κυρίως όγκο του πλάσματος χωρίς αυτή να τέμνει τη δομή. Με άλλα λόγια ισχύουν μόνο αν το σημείο $\boldsymbol{x}$ «φαίνεται» από τον κυρίως όγκο του πλάσματος.

3.3.3.2 Υπολογισμός ροής ουδετέρων σε οπή

Το πεδίο ροής σε οπή με αξονική συμμετρία μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά ολοκληρώνοντας τις εξισώσεις (28), (29) και (30) στη στερεά γωνία $\Omega(\boldsymbol{x})$ που περιγράφεται από τις σχέσεις (19)-(23). Τελικά προκύπτει[15]

για r=0 :

$$j_{direct,x}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{42}$$

$$j_{direct,y}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{43}$$

$$j_{direct,z}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[\frac{2R^2}{R^2 + dz_{MAX}^2}\right] \tag{44}$$

Για r<R, r≠0:

$$j_{direct,x}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{45}$$

$$j_{direct,y}(\boldsymbol{x}) = p\,\frac{j_{S,N,0}}{2}\frac{dz_{MAX}}{r}\left[\frac{R^2 + r^2 + dz_{MAX}^2}{\left[(R^2 - r^2)^2 + 2(R^2 + r^2)dz_{MAX}^2 + dz_{MAX}^4\right]^{1/2}} - 1\right] \tag{46}$$

$$j_{direct,z}(\boldsymbol{x}) = \frac{j_{S,N,0}}{2}\left[1 + \frac{R^2 - r^2 - dz_{MAX}^2}{\left[(R^2 - r^2)^2 + 2(R^2 + r^2)dz_{MAX}^2 + dz_{MAX}^4\right]^{1/2}}\right] \tag{47}$$

Για r>R:

$$j_{direct,x}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{48}$$

$$j_{direct,y}(\boldsymbol{x}) = p\,\frac{j_{S,N,0}}{2}\left\{ -\frac{dz_{MAX}}{r}\left\{1 - \frac{1}{\pi}\arccos\left[\frac{2dz_{MIN}R^2 - d\,r^2 + d\,R^2}{2rRdz_{MIN}}\right]\right\} - \right.$$
$$-\frac{dz_{MIN}}{\pi r}\arccos\left[\frac{2dz_{MIN}R^2 + d\,r^2 + d\,R^2}{2rRdz_{MAX}}\right] +$$

$$+\frac{dz_{MIN}}{\pi r}\left[\frac{r^2+dz_{MIN}^2+R^2}{\left[(R^2-r^2)^2+2(R^2+r^2)dz_{MIN}^2+dz_{MIN}^4\right]^{1/2}}\right]$$

$$\arccos\left[\frac{b_1 dz_{MIN}^2}{4rR}+\frac{c_1 dz_{MIN}^2}{2rR(R^2+r^2+dz_{MIN}dz_{MAX})}\right]+$$

$$+\frac{dz_{MAX}}{r}\left[\frac{r^2+dz_{MAX}^2+R^2}{\left[(R^2-r^2)^2+2(R^2+r^2)dz_{MAX}^2+dz_{MAX}^4\right]^{1/2}}\right]$$

$$\left\{1-\frac{1}{\pi}\arccos\left[\frac{b_2 dz_{MAX}^2}{4rR}+\frac{c_2 dz_{MAX}^2}{2rR(R^2+r^2+dz_{MIN}dz_{MAX})}\right]\right\}\ \Bigg\} \tag{49}$$

$$j_{direct,z}(\boldsymbol{x})=\frac{j_{S,N,0}}{2}\Bigg\{\ 1-\frac{1}{\pi}\arccos\left[\frac{2dz_{MIN}R^2-d\,r^2+d\,R^2}{2rRdz_{MIN}}\right]+$$

$$+\frac{1}{\pi}\arccos\left[\frac{2dz_{MIN}R^2+d\,r^2+d\,R^2}{2rRdz_{MAX}}\right]-$$

$$-\frac{1}{\pi}\left[\frac{r^2+dz_{MIN}^2-R^2}{\left[(R^2-r^2)^2+2(R^2+r^2)dz_{MIN}^2+dz_{MIN}^4\right]^{1/2}}\right]$$

$$\arccos\left[\frac{b_1 dz_{MIN}^2}{4rR}+\frac{c_1 dz_{MIN}^3 dz_{MAX}}{2rR(R^2+r^2+dz_{MIN}dz_{MAX})}\right]-$$

$$-\left[\frac{r^2+dz_{MAX}^2-R^2}{\left[(R^2-r^2)^2+2(R^2+r^2)dz_{MAX}^2+dz_{MAX}^4\right]^{1/2}}\right]$$

$$\left\{1-\frac{1}{\pi}\arccos\left[\frac{b_2 dz_{MAX}^2}{4rR}+\frac{c_2 dz_{MAX}^3 dz_{MIN}}{2rR(R^2+r^2+dz_{MIN}dz_{MAX})}\right]\right\}\ \Bigg\} \tag{50}$$

όπου $d = dz_{MAX}-dz_{MIN}$ (51)

$$b_1=-2-2\frac{R^2+r^2}{dz_{MIN}^2} \tag{52}$$

$$b_2=-2-2\frac{R^2+r^2}{dz_{MAX}^2} \tag{53}$$

$$c_1=1+2\frac{R^2+r^2}{dz_{MIN}^2}+\frac{(R^2-r^2)^2}{dz_{MIN}^4} \tag{54}$$

$$c_2=1+2\frac{R^2+r^2}{dz_{MAX}^2}+\frac{(R^2-r^2)^2}{dz_{MAX}^4} \quad (55)$$

$$p=-1 \text{ αν } y\leq 0,\ p=1 \text{ αν } y>0 \quad (56)$$

Οι παράμετροι R, r dz_{MAX}, dz_{MIN} έχουν ήδη οριστεί στη παράγραφο 3.3.2 (εξισώσεις 22, 23) και στο σχήμα 3.11.

Σημειώνεται ότι η συνιστώσα $j_{direct,y}(\boldsymbol{x})$ είναι η ακτινική συνιστώσα της ροής από τον κυρίως όγκο του πλάσματος σε στοιχειώδη επιφάνεια $\boldsymbol{x}$ οπής με αξονική συμμετρία. Η συνιστώσα $j_{direct,x}(\boldsymbol{x})$ είναι η εφαπτομενική συνιστώσα της ροής στη στοιχειώδη επιφάνεια της οπής.

Η ροή ουδετέρων που φτάνει σε στοιχειώδη επιφάνεια S οπής δίδεται όπως και στην περίπτωση δομής αυλακιού από το εσωτερικό γινόμενο του διανύσματος της ροής με το μοναδιαίο κάθετο στην επιφάνεια S διάνυσμα (εξίσωση 40).

3.3.4 Ροή ιόντων από τον κυρίως όγκο του πλάσματος σε αυλάκι και οπή

Τα ιόντα επιταχύνονται από το ηλεκτρικό πεδίο που αναπτύσσεται στην οριακή στοιβάδα (sheath) κάθετα προς την εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Ωστόσο, μέσα στην οριακή στοιβάδα και πριν εισβάλλουν στη δομή (π.χ. αυλάκι) συγκρούονται με ουδέτερα μόρια με αποτέλεσμα να μεταβάλλεται η κατεύθυνση και η ροή τους. Μάλιστα όσο μεγαλύτερη είναι η πίεση τόσο μεγαλύτερο είναι το πλήθος των συγκρούσεων και άρα τόσο μεγαλύτερο είναι το εύρος της κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων. Η κατανομή των ιόντων εξαρτάται από τον τύπο του ιόντος και τις συνθήκες που επικρατούν στον αντιδραστήρα.

Θεωρούμε ότι η κατευθύνσεις των ιόντων ακολουθούν μια κανονική κατανομή (Gauss) με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας :

$$G(\theta,\varphi) = \frac{2}{2\pi\,\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{ION})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (57)$$

Όπου θ η γωνία των ιόντων ως προς τον άξονα z (ορίζεται στο σχήμα 3.5),
φ η γωνία που σχηματίζει η προβολή του διανύσματος κατεύθυνσης των ιόντων στο επίπεδο xy με τον άξονα y (ορίζεται στο σχήμα 3.5).
θ_{ION} η κύρια κατεύθυνση των ιόντων ως προς τον άξονα z (παράμετρος θέσης της κατανομής),
σ η τυπική απόκλιση των κατευθύνσεων πρόσπτωσης των ιόντων ως προς την θ_{ION}

Η εξίσωση (57) ισχύει μόνο για αξονικά συμμετρικές ως προς την κύρια κατεύθυνση των ιόντων κατανομές.

Η κανονική κατανομή επιβεβαιώνεται από αποτελέσματα Monte Carlo προσομοιώσεων.[16,17] Η τυπική απόκλιση της κατανομής εξαρτάται από το πάχος της οριακής στοιβάδας και το μήκος ελεύθερης διαδρομής των ιόντων.[16] Δεν υπάρχει κάποια μέθοδος για τον προσδιορισμό της με βάση τις δύο αυτές παραμέτρους, αλλά γενικά η μείωση της πίεσης αυξάνει το λόγο του μήκους ελεύθερης διαδρομής των ιόντων προς το πάχος της οριακής στοιβάδας με αποτέλεσμα τη μείωση του πλήθους των συγκρούσεων και άρα τη συρρίκνωση του εύρους της κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων και συνεπώς τη μείωση της τυπικής απόκλισης, σ. Τυπικές τιμές που χρησιμοποιούνται σε μοντέλα της βιβλιογραφίας κυμαίνονται από 1^{o} έως 10^{o}.[16,17,18]

Σημειώνεται ότι στην πράξη υπάρχει και εξάρτηση της ενέργειας των ιόντων από τη γωνία πρόσπτωσης. Ιόντα με υψηλότερες αποκλίσεις από την κατακόρυφο έχουν υποστεί περισσότερες συγκρούσεις στην οριακή στοιβάδα και επομένως έχουν μειωμένη σχετικά κινητική ενέργεια. Ιόντα με μειωμένη ενέργεια φτάνουν λόγω της γωνίας πρόσπτωσής τους στα πλάγια τοιχώματα της δομής που εγχαράσσεται. Για λόγους απλότητας του μοντέλου αυτή η εξάρτηση από την ενέργειας των ιόντων αμελείται.

Η ροή ιόντων που φτάνει σε ελεύθερη επιφάνεια είναι δυνατό να υπολογιστεί με βάση την κατανομή (εξίσωση 57) και δίδεται από τη σχέση :

$$\mathrm{j}_{\mathrm{S,ION,0}} = \int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{j}_{\mathrm{ION,R}}\, G(\theta,\varphi)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta \qquad (58)$$

από την οποία προκύπτει ότι

$$\mathrm{j}_{\mathrm{ION,R}} = \frac{\mathrm{j}_{\mathrm{S,ION,0}}}{\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{G}(\theta,\varphi)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta} \qquad (59)$$

Η συνάρτηση $\mathrm{j}_{\mathrm{direct}}(\theta,\varphi)$ των εξισώσεων (6), (7) και (8) για τα ιόντα $\mathrm{j}_{\mathrm{ION,direct}}(\theta,\varphi)$ μπορεί να προσδιοριστεί μέσω της εξίσωσης (8) ορίζοντας τα όρια ολοκλήρωσης θ,φ τέτοια ώστε να μην υπάρχει σκίαση της ροής, δηλαδή να καλύπτουν κάθε πιθανή κατεύθυνση (θ,φ) που ανήκει στο ημισφαίριο πάνω από την ελεύθερη επιφάνεια :

$$\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{j}_{\mathrm{ION,R}}\, G(\theta,\varphi)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta = \int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{j}_{\mathrm{ION,direct}}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\theta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta \qquad (60)$$

από την οποία προκύπτει ότι

$$\mathrm{j}_{\mathrm{ION,direct}}(\theta,\varphi) = \mathrm{j}_{\mathrm{ION,R}}\,\mathrm{G}(\theta,\varphi) = \mathrm{j}_{\mathrm{S,ION,0}}\,\frac{\mathrm{G}(\theta,\varphi)}{\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{G}(\theta,\varphi)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta} \qquad (61)$$

αντικαθιστώντας την εξίσωση (61) στις (6), (7) και (8) προκύπτει για το πεδίο ροής των ιόντων που φτάνουν από τον κυρίως όγκο του πλάσματος:

$$\mathrm{j}_{\mathrm{ION,ditrect,x}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{j}_{\mathrm{S,ION,0}}\,\frac{\iint_{\Omega(\mathbf{x})} \mathrm{G}(\theta,\phi)\sin^2\theta\sin\varphi\,\mathrm{d}\theta\,d\varphi}{\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{G}(\theta,\phi)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta} \qquad (62)$$

$$j_{\mathrm{ION,direct,y}}(\boldsymbol{x}) = j_{\mathrm{S,ION,0}} \frac{\iint_{\Omega(\mathbf{x})} \mathrm{G}(\theta,\phi)\sin^2\theta\cos\varphi\,\mathrm{d}\theta\, d\varphi}{\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{G}(\theta,\phi)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\,\varphi\,\mathrm{d}\theta} \tag{63}$$

$$j_{\mathrm{ION,direct,z}}(\boldsymbol{x}) = j_{\mathrm{S,ION,0}} \frac{\iint_{\Omega(\mathbf{x})} \mathrm{G}(\theta,\phi)\sin\theta\cos\theta\,\mathrm{d}\theta\, d\varphi}{\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \mathrm{G}(\theta,\phi)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\,\varphi\,\mathrm{d}\theta} \tag{64}$$

Οι γωνίες θ, φ αναφέρονται στο σύστημα συντεταγμένων του σχήματος 3.5.

Αφού υπολογιστεί το πεδίο ροής των ιόντων, η ροή ιόντων που φτάνει στη στοιχειώδη επιφάνεια της δομής (αυλακιού ή οπής) στο $\boldsymbol{x}$ είναι:

$$j_{\mathrm{S,ION,direct}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{j}_{\boldsymbol{ION,direct}}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{S}}(\boldsymbol{x}) \tag{65}$$

3.3.4.1 Υπολογισμός ροής ιόντων σε αυλάκι

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (10)-(18) που δίνουν τη στερεά γωνία Ω($\boldsymbol{x}$) για αυλάκι καθώς και την εξίσωση (57) στις εξισώσεις (62)-(64) και ολοκληρώνοντας ως προς φ προκύπτει για το πεδίο ροής των ιόντων :

$$j_{\mathrm{ION,ditrect,x}}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{66}$$

$$j_{\mathrm{ION,direct,y}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\frac{j_{\mathrm{S,ION,0}}}{\pi}\int_0^{\pi/2}\exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\sin^2\theta\,(\sin\varphi_b-\sin\varphi_a)\mathrm{d}\theta}{\int_0^{\pi/2}\exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\theta} \tag{67}$$

$$j_{\mathrm{ION,direct,z}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\frac{j_{\mathrm{S,ION,0}}}{\pi}\int_0^{\pi/2}\exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\cos\theta\sin\theta\,(\pi-\varphi_{\mathrm{b}}-\varphi_a)\,\mathrm{d}\theta}{\int_0^{\pi/2}\exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\theta} \tag{68}$$

Ο υπολογισμός του πεδίου ροής των ιόντων προκύπτει με αριθμητική ολοκλήρωση των ολοκληρωμάτων των εξισώσεων (66)-(68) ως προς θ χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (10)-(18) που δίνουν τις γωνίες φ_a, φ_b. Η μέθοδος που χρησιμοποιείται είναι η μέθοδος ολοκλήρωσης Gauss (Gauss quadrature) στοιχεία της οποίας περιέχονται στο παράρτημα Γ.

3.3.4.2 Υπολογισμός ροής ιόντων σε οπή

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (19)-(23) που δίνουν τη στερεά γωνία Ω($\boldsymbol{x}$) για οπή καθώς και την εξίσωση (57) στις εξισώσεις (62)-(64) και ολοκληρώνοντας ως προς φ προκύπτει για το πεδίο ροής των ιόντων :

$$\mathrm{j}_{\mathrm{ION,ditrect,x}}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{69}$$

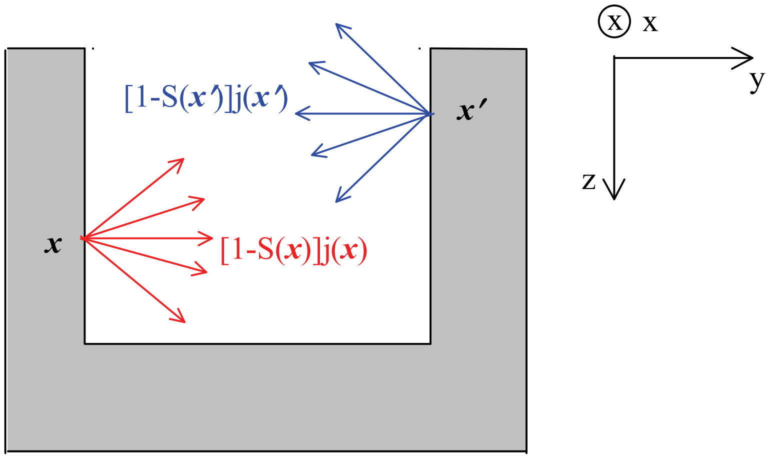
$$\mathrm{j}_{\mathrm{ION,direct,y}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\dfrac{\mathrm{j}_{\mathrm{S,ION,0}}}{\pi}\displaystyle\int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\sin^2\theta\,\sin\varphi_{\mathrm{crit}}\,\mathrm{d}\theta}{\displaystyle\int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\cos\theta\,\sin\theta\,\mathrm{d}\theta} \tag{70}$$

$$\mathrm{j}_{\mathrm{ION,direct,z}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\dfrac{\mathrm{j}_{\mathrm{S,ION,0}}}{\pi}\displaystyle\int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\cos\theta\,\sin\theta\,\varphi_{\mathrm{crit}}\,\mathrm{d}\theta}{\displaystyle\int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{-(\theta-\theta_{\mathrm{ION}})^2}{2\sigma^2}\right)\cos\theta\,\sin\theta\,\mathrm{d}\theta} \tag{71}$$

Ο υπολογισμός του πεδίου ροής των ιόντων προκύπτει με αριθμητική ολοκλήρωση των ολοκληρωμάτων των εξισώσεων (69)-(71) ως προς θ χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (19)-(23) που δίνουν τη γωνία φ_{crit}. Η μέθοδος που χρησιμοποιείται είναι η μέθοδος ολοκλήρωσης Gauss (Gauss quadrature) στοιχεία της οποίας περιέχονται στο παράρτημα Γ.

3.4 Επανεκπομπή της ροής

Σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της εγχαρασσόμενης δομής, εκτός από τη ροή από τον κυρίως όγκο του πλάσματος (direct flux), φτάνει και ροή από επανεκπομπή (flux from re-emission) από τις υπόλοιπες στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής. Αν η πιθανότητα προσκόλλησης σε μια στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση $\boldsymbol{x}$ είναι S και στη θέση $\boldsymbol{x}$ φτάνει ροή j, τότε από αυτή τη θέση θα επανεκπέμπεται προς όλες τις υπόλοιπες στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής ροή (1−S)j. Τα ιόντα στις εφαρμογές ενδιαφέροντος έχουν πιθανότητα προσκόλλησης κοντά στη μονάδα με συνέπεια η ροή από επανεκπομπή να είναι αμελητέα. Αντίθετα, τα ουδέτερα μόρια εμφανίζουν πιθανότητες προσκόλλησης σημαντικά μικρότερες της μονάδας με αποτέλεσμα η ροή από επανεκπομπή να είναι σημαντική.



*Σχήμα 3.13. Από κάθε στοιχειώδη επιφάνεια **x** του αυλακιού επανεκπέμπεται ροή [1-S(**x**)]j(**x**).*

3.4.1 Ροή ουδετέρων από επανεκπομπή

Στις χαμηλές πιέσεις που επικρατούν σε έναν αντιδραστήρα πλάσματος ο αριθμός Knudsen, ο λόγος του μήκους ελεύθερης διαδρομής προς το χαρακτηριστική διάσταση της δομής είναι πολύ μεγαλύτερος από τη μονάδα, αρκετά μεγάλος ώστε η συχνότητα συγκρούσεων μεταξύ των σωματιδίων να είναι αμελητέα σε σύγκριση με τη συχνότητα συγκρούσεων με τα τοιχώματα. Τότε τα μόρια κινούνται σε ευθείες τροχιές πριν και μετά από κάθε σύγκρουση με τα τοιχώματα της δομής. Η ροή από επανεκπομπή μπορεί να υπολογιστεί με την κατανομή «πηγών ροής» στην επιφάνεια της εγχαρασσόμενης δομής. Κάθε πηγή αντιστοιχεί σε μια στοιχειώδη επιφάνεια και επανεκπέμπει τη ροή που δεν προσκοκολλάται σε αυτή. Έτσι, κάθε στοιχειώδης επιφάνεια-πηγή λαμβάνει ροή από τον κυρίως όγκο του πλάσματος και ροή επανεκπεμπόμενη από τις υπόλοιπες πηγές στην επιφάνεια της δομής.

Ας θεωρήσουμε δύο τέτοιες πηγές τις $\boldsymbol{x}$(x,y,z) και $\boldsymbol{x}'$(x′,y′,z′). Έστω ότι η συνολική ροή ουδετέρων σε αυτές τις δύο θέσεις είναι $j_{S,N}(\boldsymbol{x})$ και $j_{S,N}(\boldsymbol{x}')$ και τα κάθετα μοναδιαία $\boldsymbol{n}$ και $\boldsymbol{n}'$ αντίστοιχα. Επίσης, *έστω **xx′** το μοναδιαίο διάνυσμα που ξεκινά από την θέση **x** και καταλήγει στην θέση **x′** και **x′x** το μοναδιαίο διάνυσμα που ξεκινά από την θέση **x′** και καταλήγει στην θέση **x**.*

Από την πηγή ροής $\boldsymbol{x}'$ στην οποία αντιστοιχεί η στοιχειώδης επιφάνεια dA′, ο αριθμός των ουδετέρων που επανεκπέμπεται στη μονάδα χρόνου είναι :

$$[1-S_E(\boldsymbol{x}')]\, j_{S,N}(\boldsymbol{x}')dA'$$

Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης στην πηγή $\boldsymbol{x}'$, $S_E(\boldsymbol{x}')$ εκφράζει την πιθανότητα προσκόλλησης σε αυτή. *Στη θεώρηση και στους υπολογισμούς που ακολουθούν θεωρείται ότι είναι γνωστή συνάρτηση της θέσης x′.*

Αν η πιθανότητα επανεκπομπής ροής από την πηγή στη θέση $\boldsymbol{x}'$ προς τη θέση $\boldsymbol{x}$ είναι $P(\boldsymbol{xx}',\boldsymbol{n}')$, τότε η ροή από επανεκπομπή που φτάνει από τη θέση $\boldsymbol{x}'$ στη θέση $\boldsymbol{x}$ είναι:[11]

$$\frac{P(\boldsymbol{xx}',\boldsymbol{n}')(\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{n})[1-S_E(\boldsymbol{x}')]j_{S,N}(\boldsymbol{x}')}{|\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\,|^2}dA'$$

Η ροή μειώνεται με το τετράγωνο της απόστασης μεταξύ των δύο πηγών. Η ροή από επανεκπομπή, $j_{S,N,re}(\boldsymbol{x})$, που φτάνει στην πηγή $\boldsymbol{x}$ προκύπτει αν αθροίσουμε τις συνεισφορές όλων των πηγών $\boldsymbol{x}'$ *για τις οποίες υπάρχει ευθεία γραμμή σύνδεσης χωρίς να τέμνει τη δομή με τη θέση **x***. Αν στο αποτέλεσμα προσθέσουμε τη ροή από τον κυρίως όγκο του πλάσματος καταλήγουμε για την στην ολοκληρωτική εξίσωση που δίδει τη συνολική ροή ουδετέρων που φτάνει στη θέση $\boldsymbol{x}$:

$$j_{S,N}(\boldsymbol{x}) = j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x}) + j_{S,N,re}(\boldsymbol{x}) \Rightarrow$$

$$j_{S,N}(\boldsymbol{x}) = j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x}) + \int_A \frac{P(\boldsymbol{xx}',\boldsymbol{n}')(\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{n})[1-S_E(\boldsymbol{x}')]j_{S,N}(\boldsymbol{x}')}{|\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\,|^2}dA' \qquad (72)$$

όπου A είναι η επιφάνεια της εγχαρασσόμενης δομής.

Η συνάρτηση κατανομής της επανεκπεμπόμενης ροής, $P(\boldsymbol{xx'},\boldsymbol{n'})$, είναι πολύ σημαντική και μελετήθηκε για πρώτη φορά από τον Knudsen. Αυτή η συνάρτηση εξαρτάται από την αλληλεπίδραση μεταξύ των τοιχωμάτων και σωματιδίων. Η αλληλεπίδραση αυτή για την περίπτωση ουδετέρων μορίων *δεν είναι* απλή ανάκλαση όπου η γωνία πρόσπτωσης είναι ίση με τη γωνία επανεκπομπής. Αυτό οφείλεται είτε στο ότι η επιφάνεια δεν είναι αρκετά λεία (επίπεδη) είτε στο ότι τα μόρια παραμένουν προσκολλημένα στην επιφάνεια για σημαντικό (για το φαινόμενο) χρονικό διάστημα.[19] Πειραματικά δεδομένα κυρίως του Knudsen οδήγησαν στο συμπέρασμα ότι ουδέτερα μόρια αερίου που συγκρούονται με στερεή επιφάνεια παγιδεύονται προσωρινά στην επιφάνεια και στη συνέχεια «εξατμίζονται» επανεκπέμπομενα από αυτή με τρόπο που είναι ανεξάρτητος από την κατεύθυνση που είχαν πριν την σύγκρουση.[19,20] Αυτό ο μηχανισμός επανεκπομπής καλείται diffuse re-emission[11] ή diffuse reflection και σύμφωνα με αυτόν η συνάρτηση κατανομής της επανεκπεμπόμενης ροής P δίδεται από τη σχέση:

$$P(\boldsymbol{xx'},\boldsymbol{n'}) = \frac{\boldsymbol{xx'}\cdot\boldsymbol{n'}}{\pi} \tag{73}$$

όπου ο παρονομαστής κανονικοποιεί τη ροή σε ένα ημισφαίριο με κέντρο το $\boldsymbol{x'}$. 'Ετσι, η εξίσωση (66) γίνεται :

$$j_{S,N}(\boldsymbol{x}) = j_{S,N,\mathrm{direct}}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{\pi}\int_A \frac{(\boldsymbol{xx'}\cdot\boldsymbol{n'})(\boldsymbol{x'x}\cdot\boldsymbol{n})\left[1-S_E(\boldsymbol{x'})\right]j_{S,N}(\boldsymbol{x'})}{|\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x'}\,|^2}\,dA' \tag{74}$$

Η παραπάνω εξίσωση στη γενική περίπτωση απαιτεί ολοκλήρωση σε δύο διαστάσεις. Για δομές όμως με συγκεκριμένες συμμετρίες (αυλάκια που δεν μεταβάλλονται κατά μία διεύθυνση, οπές με κυλινδρική συμμετρία) το πρόβλημα μπορεί να απλοποιηθεί σε μία μόνο διάσταση.

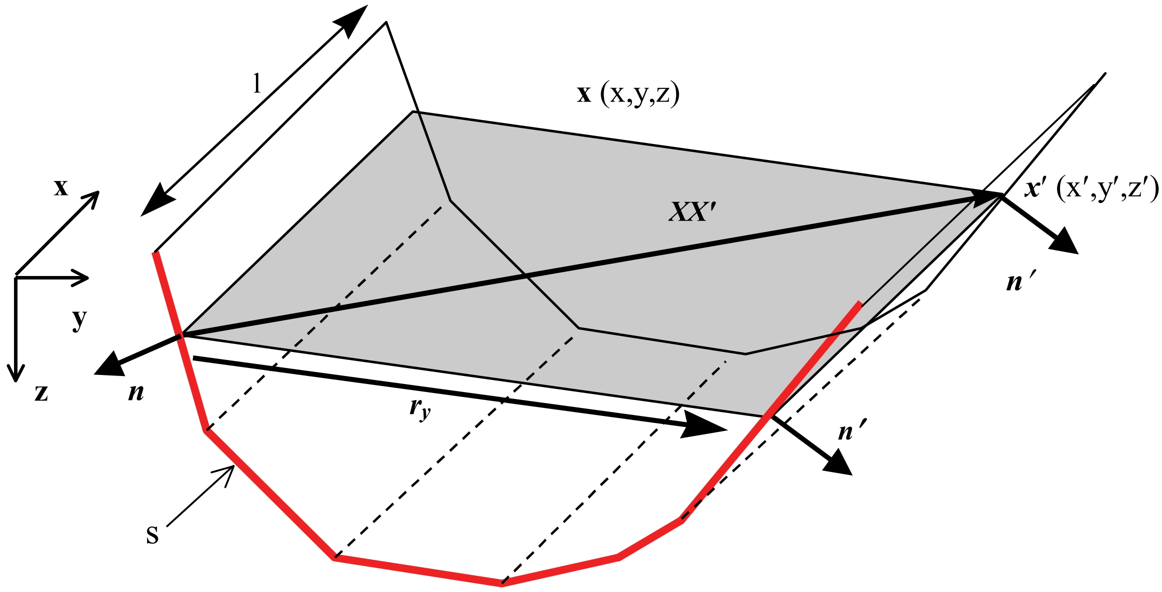
3.4.1.1 Ροή από επανεκπομπή σε αυλάκι

Θεωρούμε τη δομή του σχήματος 3.14 η οποία δεν μεταβάλλεται κατά τον άξονα x. Αυτό σημαίνει ότι οι πλάγιες επιφάνειές της ανήκουν σε ημιεπίπεδα που περιέχουν τον άξονα x. Έστω $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x'}$ δύο πηγές ροής και $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{n'}$ τα μοναδιαία κάθετα διανύσματα στις στοιχειώδεις επιφάνειες των πηγών. Επίσης, έστω $\boldsymbol{XX'}$ το διάνυσμα που ενώνει τις $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x'}$($\neq \boldsymbol{xx'}$= μοναδιαίο διάνυσμα κατά την κατεύθυνση $\boldsymbol{XX'}$).

Με βάση το σχήμα 3.14 τα εσωτερικά γινόμενα μεταξύ μοναδιαίων διανυσμάτων που μετέχουν στην ολοκληρωτική εξίσωση (74) είναι:

$$\mathbf{xx'}\cdot\mathbf{n'} = \frac{\mathbf{XX'}}{|\,\mathbf{XX'}\,|}\cdot\mathbf{n'} = \frac{\mathbf{XX'}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x'}|}\cdot\mathbf{n'} = \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x'}|}(l\,\hat{e}_x + \mathbf{r}_y)\cdot\mathbf{n'} = \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x'}|}(l\,\hat{e}_x\cdot\mathbf{n'} + \mathbf{r}_y\cdot\mathbf{n'}) \tag{75}$$

$$\mathbf{x'x}\cdot\mathbf{n} = \frac{\mathbf{X'X}}{|\,\mathbf{X'X}\,|}\cdot\mathbf{n} = \frac{\mathbf{X'X}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x'}|}\cdot\mathbf{n} = \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x'}|}(-l\,\hat{e}_x - \mathbf{r}_y)\cdot\mathbf{n} = -\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x'}|}(l\,\hat{e}_x\cdot\mathbf{n} + \mathbf{r}_y\cdot\mathbf{n}) \tag{76}$$



*Σχήμα 3.14. Πηγές ροής **x**, **x**′ σε δομή αυλακιού.*

Όμως τα διανύσματα $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{n}'$ είναι κάθετα στην x-διεύθυνση. Έτσι :

$$\hat{e}_x \cdot \boldsymbol{n} = 0 \tag{77}$$
$$\hat{e}_x \cdot \boldsymbol{n}' = 0 \tag{78}$$

Από τις παραπάνω σχέσεις προκύπτει

$$\boldsymbol{xx}' \cdot \boldsymbol{n}' = \frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \boldsymbol{r}_y \cdot \boldsymbol{n}' \tag{79}$$

$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{n} = -\frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \boldsymbol{r}_y \cdot \boldsymbol{n} \tag{80}$$

και η ολοκληρωτική εξίσωση (74) γίνεται :

$$\mathrm{j_{S,N}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{j_{S,N,direct}}(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{\pi} \int_A \frac{(\boldsymbol{r}_y \cdot \boldsymbol{n}')(\boldsymbol{r}_y \cdot \boldsymbol{n})[1 - \mathrm{S_E}(\boldsymbol{x}')]\mathrm{j_{S,N}}(\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|^4} \mathrm{dA}' \tag{81}$$

Η στοιχειώδης επιφάνεια-πηγή ροής είναι dA′=dx′ds′ όπου dx′ το στοιχειώδες διάστημα κατά τον άξονα x και ds′ το στοιχειώδες διάστημα κατά μήκος της τομής της δομής στο επίπεδο yz. *Αν θεωρήσουμε ότι η δομή εκτείνεται στο άπειρο κατά τη διεύθυνση x* έχουμε :

$$\mathrm{j_{S,N}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{j_{S,N,direct}}(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{\pi} \int_{\partial S} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\boldsymbol{r}_y \cdot \boldsymbol{n}')(\boldsymbol{r}_y \cdot \boldsymbol{n})[1 - \mathrm{S_E}(\boldsymbol{x}')]\mathrm{j_{S,N}}(\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|^4} \mathrm{dx}'\mathrm{ds}' \tag{82}$$

Από τους όρους της προς ολοκλήρωσης συνάρτησης μόνο ο $|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|^4$ εξαρτάται από το x′ (θεωρώντας ότι η ροή $j_{S,N}(\boldsymbol{x})$ και ο $S_E(\boldsymbol{x})$ δεν μεταβάλλονται κατά τη διεύθυνση x). Συνεπώς :

$$j_{S,N}(\boldsymbol{x}) = j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{\pi}\int_{\partial S}(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n}')(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n})\left[1-S_E(\boldsymbol{x}')\right]j_{S,N}(\boldsymbol{x}')\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|^4}\,dx'ds' \tag{83}$$

Είναι :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|^4}dx' = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\left[(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2\right]^2}dx' =$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\left[(x'-x)^2+(y-y')^2+(z-z')^2\right]^2}d(x'-x)=$$

$$=\frac{\pi}{2\left[(y-y')^2+(z-z')^2\right]^{3/2}}=\frac{\pi}{2\left|\boldsymbol{r_y}\right|^3} \tag{84}$$

Επομένως η ολοκληρωτική εξίσωση απλοποιείται σε μια διάσταση, αυτή κατά μήκος της τομής της δομής στο επίπεδο yz και γίνεται :

$$j_{S,N}(\boldsymbol{x}) = j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{2}\int_{\partial S}\frac{(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n}')(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n})\left[1-S_E(\boldsymbol{x}')\right]j_{S,N}(\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{r_y}|^3}ds' \tag{85}$$

Οι διανυσματικές συναρτήσεις $\boldsymbol{r_y}$, $\boldsymbol{n}'$, $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{x}'$ είναι συναρτήσεις της μεταβλητής που διατρέχει το προφίλ - τομή στο επίπεδο yz - του αυλακιού. Αν S_{end} είναι το μήκος του προφίλ η εξίσωση (85) μπορεί να γραφεί ως εξής :

$$j_{S,N}(s) = j_{S,N,direct}(s) + \int_0^{S_{end}} g(s,s')\left[1-S_E(s')\right]j_{S,N}(s')ds' \tag{86}$$

όπου ο καθαρά γεωμετρικός όρος g(s, s′) δίδεται από την εξίσωση

$$g(s,s') = -\frac{(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n}')(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n})}{2|\boldsymbol{r_y}|^3} \tag{87}$$

3.4.3 Ροή από επανεκπομπή σε οπή

Θεωρούμε ότι κάθε τομή της οπής στο επίπεδο xy είναι κυκλική. Η ολοκληρωτική εξίσωση (74) στην περίπτωση οπής με τρόπο ανάλογο με αυτόν που παρουσιάστηκε στη δομή αυλακιού απλοποιείται σε μια διάσταση.

Το κάθετο στην επιφάνεια διάνυσμα στη θέση $\boldsymbol{x}$(x,y,z) μπορεί να οριστεί με βάση το σύστημα συντεταγμένων του σχήματος 3.5 και είναι :

$$\boldsymbol{n_s}(\boldsymbol{x}) = \sin\theta \sin\varphi\ \hat{e}_x - \sin\theta \cos\varphi\ \hat{e}_y + \cos\theta\ \hat{e}_z \qquad (88)$$

Λόγω της κυλινδρικής συμμετρίας της δομής η συνολική ροή $j_{S,N}(\boldsymbol{x})$ και ο $S_E(\boldsymbol{x})$ είναι ανεξάρτητα από την γωνία φ. Έτσι, είναι δυνατό να ολοκληρώσουμε αναλυτικά κατά φ από 0 έως 2π. Η διαδικασία είναι περισσότερο πολύπλοκη από την περίπτωση δομής αυλακιού. Οι εξισώσεις οι οποίες προκύπτουν είναι:[11]

$$j_{S,N}(\boldsymbol{x}) = j_{S,N,direct}(\boldsymbol{x}) + \int_{\partial S} \frac{(c\,d\,e^2 - a\,e^3 + 3\,b\,d\,e^2 - b\,d^3)[1 - S_E(\boldsymbol{x}')]j_{S,N}(\boldsymbol{x}')}{e^2(d^2 - e^2)^{3/2}} ds' \qquad (89)$$

όπου $a = -r'^2\sin\theta \sin\theta' - r^2\sin\theta'\sin\theta + r(z-z')\sin\theta'\cos\theta - r'(z-z')\cos\theta'\sin\theta$
$b = rr'\sin\theta \sin\theta'$
$c = rr'\sin\theta \sin\theta' - r'(z-z')\sin\theta'\cos\theta + r(z-z')\sin\theta'\cos\theta' - (z-z')^2\cos\theta\cos\theta'$
$d = (z-z')^2 + r^2 + r'^2$
$e = -2rr'$

Τα διανύσματα $\boldsymbol{x}'$, $\boldsymbol{x}$ και οι παράμετροι $r', z', \theta', r, z, \theta$ είναι συναρτήσεις της μεταβλητής που διατρέχει το προφίλ -τομή στο επίπεδο yz- της οπής. Αν S_{end} είναι το μήκος του προφίλ η εξίσωση (89) μπορεί να γραφεί ως εξής :

$$j_{S,N}(s) = j_{S,N,direct}(s) + \int_0^{S_{end}} g(s,s')[1 - S_E(s')]j_{S,N}(s')ds' \qquad (90)$$

όπου ο γεωμετρικός όρος g(s, s′) δίδεται από την εξίσωση

$$g(s, s') = \frac{(c\,d\,e^2 - a\,e^3 + 3\,b\,d\,e^2 - b\,d^3)}{e^2(d^2 - e^2)^{3/2}} \qquad (91)$$

Καταλήγουμε, όπως και στην περίπτωση του αυλακιού, σε μια ολοκληρωτική εξίσωση σε μία διάσταση.

3.4.4 Ροή ιόντων από επανεκπομπή

Η πιθανότητα επανεκπομπής ιόντων είναι συνάρτηση της ενέργειας τους, της γωνίας πρόσπτωσης και της σύστασης της επιφάνειας. Ο Dalton[21] υποθέτει ότι η κυρίαρχη παράμετρος είναι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων και αναφέρει ότι αν η αυτή είναι πολύ μικρή (τα ιόντα έχουν κατεύθυνση πολύ κοντά στην εφαπτομενική της επιφάνειας) τότε τα ιόντα μεταφέρουν ένα μικρό κλάσμα της ενέργειας τους στην επιφάνεια και είναι πιθανότερο να ανακλαστούν από αυτή. Όταν η κατεύθυνση πλησιάζει την κάθετη στην επιφάνεια, τότε τα ιόντα μεταφέρουν μεγαλύτερο κλάσμα της ενέργειας τους στην επιφάνεια και προκαλούν δράσεις ή μηχανική εγχάραξη ή απλά εισβάλουν σε αυτή. Έτσι, η πιθανότητα επανεκπομπής αναμένεται να είναι κοντά στη μονάδα για κατευθύνσεις ιόντων κοντά στην εφαπτομενική της επιφάνειας και να μειώνεται καθώς αυξάνεται η γωνία πρόσπτωσης πλησιάζοντας τη μονάδα σε κάποια γωνία πρόσπτωσης.

Στις εφαρμογές ενδιαφέροντος η πιθανότητα επανεκπομπής για τα ιόντα θεωρείται κοντά στο μηδέν δηλαδή ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης είναι κοντά στη μονάδα και ότι φτάνει στην επιφάνεια κολλά σε αυτή. Με άλλα λόγια θεωρείται ότι η σύσταση της επιφάνειας είναι τέτοια ώστε ακόμη και ένα μικρό κλάσμα της ενέργειας των ιόντων αρκεί για να προκαλέσουν αντίδραση, μηχανική εγχάραξη ή να εισβάλλουν στην επιφάνεια.

3.5 Εφαρμογές και δυνατότητες του μοντέλου υπολογισμού των τοπικών τιμών της ροής

Το μοντέλο για τον υπολογισμό των ροών ουδετέρων ειδών και ιόντων που περιέχεται στις προηγούμενες παραγράφους και βασίζεται στα φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής της ροής μπορεί να εφαρμοστεί άμεσα στις δομές με συγκεκριμένες συμμετρίες που περιγράφηκαν: α) αυλάκι το οποίο έχει σταθερή διατομή και εκτείνεται στο άπειρο κατά μία διεύθυνση και β) σε οπές με κυλινδρική συμμετρία. Λαμβάνονται υπόψη οι τρεις διαστάσεις της δομής αλλά γίνονται υπολογισμοί σε δύο. Το μοντέλο μπορεί να εφαρμοστεί και σε περιπτώσεις δομών που εμφανίζουν άλλου είδους συμμετρία (π.χ. τετραγωνικές οπές) αλλά και σε δομές που δεν εμφανίζουν κάποιου είδους συμμετρία. Σε αυτές τις περιπτώσεις πρέπει να χρησιμοποιηθούν οι αρχικές μορφές των εξισώσεων, πριν τις απλοποιήσεις λόγω συμμετριών, να τροποποιηθούν κατάλληλα οι στερεές γωνίες και όλες οι ολοκληρώσεις να γίνουν αριθμητικά.

Το μοντέλο υπολογισμού των ροών μπορεί να εφαρμοστεί άμεσα για τον υπολογισμό των ροών όταν ο μηχανισμός επανεκπομπής σωματιδίων ροής είναι ο λεγόμενος "diffuse re-emission". Με μικρές αλλαγές στην ολοκληρωτική εξίσωση (αλλαγή του γεωμετρικού όρου $g(s,s')$) μπορεί να εφαρμοστεί και σε περιπτώσεις όπου τα σωματίδια εμφανίζουν άλλο είδος αλληλεπίδρασης με την επιφάνεια στην οποία προσπίπτουν (π.χ. ανάκλαση).

Το μοντέλο υπολογισμού ροών εφαρμόζεται άμεσα όταν η κατανομή κατευθύνσεων των ιόντων είναι κανονική (Gauss) και η αντίστοιχη των ουδετέρων ειδών ισοτροπική (Maxwel-Boltzmann). Υπάρχει η δυνατότητα άμεσα να χρησιμοποιηθούν και άλλου είδους κατανομές είτε θεωρητικές είτε πειραματικές αντικαθιστώντας τη συνάρτηση $j_{direct}(\theta,\varphi)$ στις αντίστοιχες εξισώσεις.

Τα απαραίτητα δεδομένα για τον υπολογισμό της ροής ουδετέρων είναι η συνάρτηση $S_E(\boldsymbol{x})$ που εκφράζει το φαινόμενο συντελεστή προσκόλλησης του ουδέτερου είδους που εξετάζεται.

Τέλος, το μοντέλο υπολογισμού ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών μπορεί να εφαρμοστεί και σε άλλες διεργασίες εκτός της εγχάραξης, όπως η εναπόθεση.[22]

Αναφορές

[1] M. K. Abachev, Y. B. Baryshev, V. F. Lukichev, A. A. Orlikovsky, and K. A. Valiev, Vacuum **42**, 129 (1991).
[2] J. W. Coburn and H. F. Winters, Appl. Phys. Lett. **55**, 2730 (1989).
[3] J. C. Arnold and H. H. Sawin, J. Appl. Phys. **70**, 5314 (1991).
[4] G. S. Hwang and K. P. Giapis, J. Vac. Sci. Technol. **B 15**, 70 (1997).
[5] T. Kinoshita, M. Hane, and J. P. McVittie, J. Vac. Sci. Technol. **B 14**, 560 (1996).
[6] S. G. Ingram, J. Appl. Phys. **68**, 500 (1990).
[7] P. W. Atkins, *Physical Chemistry, sixth edition* (Oxford University Press, New York, 1999), p. 865-866.
[8] V. F. Lukichev and V. A. Yunkin, Russian Microelectronics **27**, 194 (1998).
[9] M. Sato, S. Kato, and Y. Arita, Japanese Journal of Applied Physics **30**, 1549 (1991).
[10] A. F. Gerodolle and J. Pelletier, IEE Transactions on Electron Devicces 38, 2025 (1991).
[11] V. K. Singh, E. S. G. Shaqfeh, and J. P. McVittie, J. Vac. Sci. Tachnol. **B 10**, 1992 (1091).
[12] R. A. Gottscho, C. W. Jurgensen, and D. J. Vitkavage, J. Vac. Sci. Technol. **B 10**, 2133 (1992).
[13] E. S. G. Shaqfeh and C. W. Jurgensen, J. Appl. Phys. **66**, 4664 (1989).
[14] B. Abraham-Shrauner and C. D. Wang, J. Electrochem. Soc. **143**, 672 (1996).
[15] B. Abraham-Shrauner and W. Chen, J. Vac. Sci. Technol. **B 14**, 3492 (1996).
[16] J. I. Ulacia F., C. J. Petti, and J. P. McVittie, J. Electrochem. Soc. : Solid State Science and Technology **135**, 1521 (1988).
[17] Y. J. T. Lii and J. Jorne, J. Electrochem. Soc. **137**, 2837 (1990).
[18] A. Misaka, K. Harafuji, M. Kubota, and N. Nomura, Jpn. J. Appl. Phys. **31**, Part 1, 4363 (1992).
[19] R. D. Present, *Kinetic Theory of Gases* (McGraw-Hill, New York, 1958), p. 56-61.
[20] J. Jeans, *An Introduction to the Kinetic Theory of Gases*, (Cambridge University Press, London, 1962), p. 51-55.
[21] T. J. Dalton, J. C. Arnold, H. H. Sawin, S. Swan, and D. Corliss, J. Electrochem. Soc. **140**, 2395 (1993).
[22] T. S. Cale and G. B. Raupp, J. Vac. Sci. Technol. **B 8**, 1242 (1990).

4

Αριθμητικές μέθοδοι και υπολογισμοί

Περίληψη

Περιγράφονται οι αριθμητικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την επίλυση των εξισώσεων του μοντέλου υπολογισμού της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών και παρουσιάζονται και σχολιάζονται αποτελέσματα εφαρμογής των. Το πρόβλημα υπολογισμού της ροής των ιόντων περιλαμβάνει απλές αριθμητικές ολοκληρώσεις, ενώ το πρόβλημα υπολογισμού της ροής ουδετέρων ειδών είναι περισσότερο πολύπλοκο και απαιτεί την επίλυση μιας ολοκληρωτικής εξίσωσης.

Περιεχόμενα

4.1 Εισαγωγή

Τόσο ο υπολογισμός της ροής των ιόντων όσο και αυτός της ροής ουδετέρων ειδών δεν μπορούν να γίνουν αναλυτικά. Το πρόβλημα υπολογισμού της ροής ιόντων περιλαμβάνει αριθμητική ολοκλήρωση ενώ το πρόβλημα υπολογισμού της ροής ουδετέρων ειδών (η οποία επανεκπέμπεται) είναι περισσότερο πολύπλοκο και απαιτεί την επίλυση μιας ολοκληρωτικής εξίσωσης. Η μέθοδος επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης απαιτεί την επίλυση μεγάλης διάστασης γραμμικών συστημάτων.

4.2 Αριθμητική ολοκλήρωση

Αριθμητική ολοκλήρωση χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του πεδίου ροής των ιόντων που περιγράφεται από τις εξισώσεις (66)-(68) (για αυλάκι) και (69)-(71) (για οπή) του 3ου κεφαλαίου, αλλά και σε ενδιάμεσους υπολογισμούς των μεθόδων επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης. Σε κάθε περίπτωση εφαρμόζεται η μέθοδος Gauss (Gauss quadrature). Τα σημεία και οι συντελεστές βάρους Gauss που χρησιμοποιούνται υπολογίζονται με βάση τον αλγόριθμο των Gauss-Legendre.[1] Στοιχεία για τη μέθοδο περιέχονται στο παράρτημα Γ.

Στην περίπτωση του πεδίου ροής των ουδετέρων ειδών, η ισοτροπική κατανομή κατευθύνσεων μας επιτρέπει να ολοκληρώσουμε αναλυτικά επί της στερεάς γωνίας. Αν η κατανομή ήταν διαφορετική, τότε και σε αυτή την περίπτωση θα ολοκληρώναμε αριθμητικά.

4.3 Επίλυση της ολοκληρωτικής εξίσωσης

4.3.1 Η ολοκληρωτική εξίσωση

Η τελική εξίσωση υπολογισμού της συνολικής ροής είναι μια ολοκληρωτική εξίσωση σε μια διάσταση τόσο στην περίπτωση αυλακιού (εξίσωση 86 του κεφαλαίου 3) όσο και στην περίπτωση οπής (εξίσωση 90 του κεφαλαίου 3). Πριν την αριθμητική επίλυσή της γίνεται κανονικοποίηση των μεγεθών που περιλαμβάνει με τη ροή που φτάνει σε ελεύθερη επιφάνεια, $j_{S,N,0}$, οπότε προκύπτει η παρακάτω εξίσωση :

$$F(s) = F_{direct}(s) + \int_0^{S_{end}} g(s,s')[1 - S_E(s')]F(s')ds' \qquad (1)$$

όπου $$F(s) = \frac{j_{S,N}(s)}{j_{S,N,0}} \qquad (2)$$

και $$F_{direct}(s) = \frac{j_{S,N,direct}(s)}{j_{S,N,0}} \qquad (3)$$

Σημειώνεται ότι και στις δύο περιπτώσεις, τόσο για αυλάκι όσο και για οπή *έχει γίνει η παραδοχή ότι ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης σε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής (δεν εξαρτάται από την ροή ουδετέρων και) είναι μια γνωστή συνάρτηση της μεταβλητής s*. Για αυτό το λόγο και τη συμβολίζουμε με $S_E(s')$. Αν ορίσουμε

$$K(s, s') = g(s, s')\,[1-S_E(s')] \quad (4)$$

η εξίσωση (1) παίρνει τη μορφή :

$$F(s) = F_{direct}(s) + \int_0^{S_{end}} K(s,s')\,F(s')ds' \quad (5)$$

Η εξίσωση υπολογισμού της συνολικής ροής ουδετέρων, (5), ανήκει σε μια γενική κατηγορία ολοκληρωτικών εξισώσεων της μορφής:

$$f(s) - \lambda \int_a^b K(s,t)\,f(t)\,dt = h(s) \quad (6)$$

Η συνάρτηση K(s,t) καλείται πυρήνας (kernel) της ολοκληρωτικής εξίσωσης. Αν h(s)=0, η εξίσωση (6) ονομάζεται *ομογενής*. Για τη μη ομογενή περίπτωση το λ θεωρείται ως μία δεδομένη παράμετρος, ενώ για την ομογενή αποτελεί ιδιοτιμή. Αν το διάστημα [a, b] δεν είναι άπειρο και ο πυρήνας K φράσσεται και είναι συνεχής, η (6) καλείται *κανονική ή ομαλή (regular)*. Αν το διάστημα [a, b] είναι άπειρο ή ο πυρήνας K δεν φράσσεται ή δεν είναι συνεχής, η (6) καλείται *ιδιόμορφη ή ανώμαλη (singular).*[2] *Η γραμμικότητα* της ολοκληρωτικής εξίσωσης (6) εξαρτάται από τον πυρήνα. Αν ο πυρήνας είναι συνάρτηση της μορφής K(s,t), τότε η εξίσωση είναι γραμμική. Αν όμως είναι συνάρτηση της μορφής K[s, t, f(t)] η εξίσωση είναι μη γραμμική.[3] Αν τα άκρα ολοκλήρωσης a, b είναι σταθερά, τότε η εξίσωση (6) καλείται *ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm δεύτερου είδους*.

4.3.2 Οι μέθοδοι επίλυσης

Το πρόβλημα που καλούμαστε να αντιμετωπίσουμε είναι η αριθμητική επίλυση μιας μη ομογενούς, γραμμικής (αν δεχτούμε ότι ο πυρήνας είναι ο K(s,s′)) ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm δεύτερου είδους. Οι μέθοδοι επίλυσης τέτοιου είδους εξισώσεων ποικίλουν. Μια πολύ καλή αναφορά για τις μεθόδους επίλυσης ολοκληρωτικών εξισώσεων *Fredholm* είναι το βιβλίο του Atkinson.[4] Στις επόμενες παραγράφους περιγράφονται δύο από αυτές.

4.3.2.1 Η μέθοδος προβολής collocation (collocation method)

Θεωρούμε ότι η λύση F(s) προσεγγίζεται από μια πεπερασμένη σειρά συναρτήσεων :

$$F(s)=\sum_{j=1}^{n} F_j \varphi^j(s) \quad (7)$$

F_j είναι οι τιμές της άγνωστης συνάρτησης στους κόμβους s_j και n είναι το πλήθος των κόμβων μιας τυχαίας διαμέρισης (σχήμα 4.1). Οι συναρτήσεις $\varphi^j(s)$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες και καλούνται συναρτήσεις βάσης. Ουσιαστικά η άγνωστη συνάρτηση F(s) προβάλλεται από τον χώρο άπειρης διάστασης σε έναν χώρο διάστασης n. Για αυτό το λόγο και η μέθοδος συγκαταλέγεται στις μεθόδους προβολής.[4]

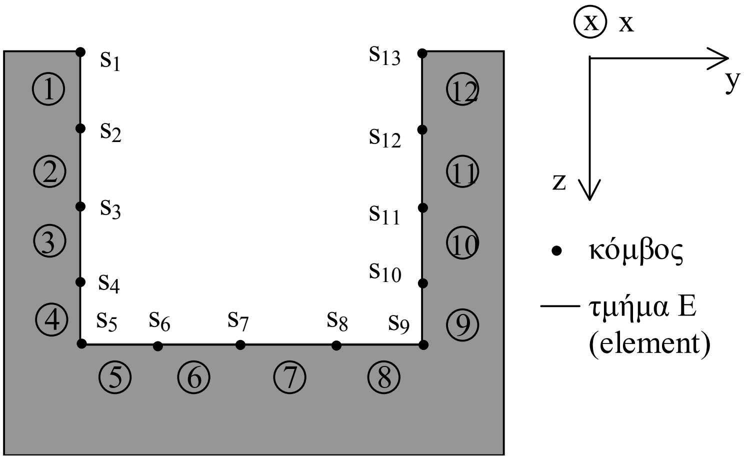
Για τις συναρτήσεις φ^j πρέπει να ισχύει

$$\det[\varphi^i(t_j)] \neq 0 \tag{8}$$

ώστε το σύστημα

$$F_i = F(s_i) = \sum_{j=1}^{n} F_j \varphi^j(s_i) \qquad i=1,2,\ldots,n \tag{9}$$

να έχει μοναδική λύση.



<u>Σχήμα 4.1.</u> Διαμέριση του διαστήματος ολοκλήρωσης, κατανομή των κόμβων που ορίζουν τα τμήματα (elements) της διαμέρισης.

Ορίζεται το υπόλοιπο

$$R(s) = F(s) - \int_0^{S_{end}} K(s,s')\,F(s')ds' - F_{direct}(s) \tag{10}$$

το οποίο λόγω της εξίσωσης (7) γίνεται

$$R(s) = \sum_{j=1}^{n} F_j \varphi^j(s) - \int_0^{S_{end}} K(s,s') \sum_{j=1}^{n} F_j \varphi^j(s')ds' - F_{direct}(s) \tag{11}$$

Οι συντελεστές F_j (τιμές της άγνωστης συνάρτησης στους κόμβους της διαμέρισης) υπολογίζονται από τις εξισώσεις μηδενισμού του υπολοίπου R(s) στους κόμβους της διαμέρισης, s_i.

$$R(s_i) = 0 \quad ,i=1,2,\ldots,n.$$

ή

$$R(s_i) = \sum_{j=1}^{n} F_j \left[\varphi^j(s_i) - \int_0^{S_{end}} K(s_i, s')\varphi^j(s')ds' \right] - F_{direct}(s_i) = 0, \qquad i=1,2,\ldots,n \qquad (12)$$

Ο μηδενισμός του υπολοίπου R(s) επιβάλλεται μόνο στους κόμβους της διαμέρισης και όχι σε κάθε σημείο του διαστήματος $[0, S_{end}]$. Με αυτό τον τρόπο επιδιώκεται

$$R(s) \approx 0, \ \forall s \in [0, S_{end}] \qquad (13)$$

Από την εξίσωση (12) φαίνεται ότι το πρόβλημα ανάγεται στον υπολογισμό των τιμών F_j της άγνωστης συνάρτησης μέσω της επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος:

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \qquad (14)$$

όπου

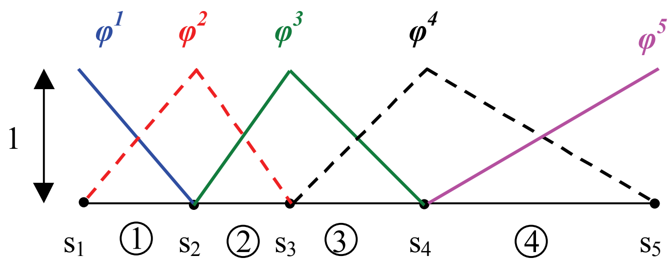
$$a_{ij} = \varphi^j(s_i) - \int_0^{S_{end}} K(s_i, s')\varphi^j(s')ds' \quad , i=1,2,\ldots,n \text{ και } j=1,2,\ldots,n \qquad (15)$$

$$b_i = F_{direct}(s_i) \qquad , i=1,2,\ldots,n \qquad (16)$$

Τα b_i υπολογίζονται άμεσα αφού η συνάρτηση $F_{direct}(s_i)$ είναι γνωστή (ο αναλυτικός υπολογισμός περιέχεται στο 3ο κεφάλαιο) ενώ για τον υπολογισμό των a_{ij} χρειάζεται να ολοκληρώσουμε. Η συνάρτηση πυρήνα $K(s_i,s')$ είναι γνωστή όπως και οι συναρτήσεις $\varphi^j(s')$.

Οι συναρτήσεις βάσης $\varphi^j(s')$ είναι συνήθως πολυώνυμα πρώτου ή δευτέρου βαθμού της ανεξάρτητης μεταβλητής s′. Επίσης, επιλέγεται η συνάρτηση $\varphi^k(s)$ να παίρνει την τιμή 1 στον κόμβο s_k και είναι μη μηδενική μόνο στα τμήματα διαμέρισης $k-1$ και k δηλαδή μηδενική σε όλους τους κόμβους s_j, $j \neq k$.

Στο σχήμα 4.2 φαίνονται γραμμικές συναρτήσεις βάσης σε μια διαμέριση 4 τμημάτων.



Σχήμα 4.2. Γραμμικές συναρτήσεις $\varphi^j(s')$ σε πλέγμα 4 τμημάτων

Η επιλογή των συναρτήσεων βάσης με τις παραπάνω ιδιότητες διευκολύνει την ολοκλήρωση κατά διαστήματα κατά τον υπολογισμό των συντελεστών a_{ij} του γραμμικού συστήματος:

$$a_{ij} = \varphi^j(s_i) - \sum_{k=1}^{nel} \int_{Ek} K(s_i, s')\varphi^j(s')ds' \quad , i=1,2,\ldots,n \text{ και } j=1,2,\ldots,n \tag{17}$$

όπου nel είναι το πλήθος των τμημάτων διαμέρισης (12 για το σχήμα 4.1) και E_k το τμήμα διαμέρισης με αύξων αριθμό k.

Από το σχήμα 4.2 εύκολα επιβεβαιώνεται ότι :

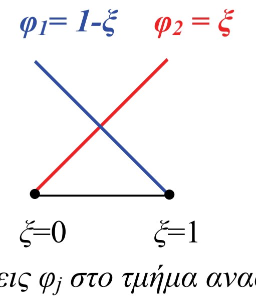
$$\varphi^j = \frac{s_{j+1} - s}{s_{j+1} - s_j} \text{ στο τμήμα } E_j \ (j=1,2,3,4) \tag{18α}$$

$$\varphi^j = \frac{s - s_{j-1}}{s_j - s_{j-1}} \text{ στο τμήμα } E_j \ (j=2,3,4,5) \tag{18β}$$

Το μέγεθος και το σχήμα των τμημάτων ενός πλέγματος επιλέγονται αυθαίρετα (στο σχήμα 4.2 οι αποστάσεις μεταξύ των κόμβων είναι διαφορετικές) με αποτέλεσμα οι συναρτήσεις φ^j να αλλάζουν έκφραση από τμήμα σε τμήμα (εξίσωση 18). Για να αποφευχθεί η διαδικασία ορισμού των φ^j σε κάθε τμήμα της διαμέρισης εφαρμόζεται η *ισοπαραμετρική απεικόνιση*.[5] Η ισοπαραμετρική απεικόνιση είναι ένας μετασχηματισμός που επιτρέπει στις συναρτήσεις φ^j να έχουν ενιαία έκφραση για κάθε τμήμα διαμέρισης. Η ενιαία αυτή έκφραση των φ^j ορίζεται σε τμήμα αναφοράς, το μοναδιαίο διάστημα [0,1]. Αν η χωρική μεταβλητή του τμήματος αναφοράς είναι η ξ, τότε η ενιαία έκφραση των κλάδων (φ_1,φ_2) των γραμμικών συναρτήσεων φ^j στο τμήμα αναφοράς είναι :

$$\varphi_1 = 1 - \xi \tag{19α}$$

$$\varphi_2 = \xi \tag{19β}$$



<u>Σχήμα 4.3.</u> Γραμμικές συναρτήσεις φ_j στο τμήμα αναφοράς.

Ο μετασχηματισμός που επιβάλλει η ισοπαραμετρική απεικόνιση είναι :

$$s(\xi) = \sum_{j=1}^{nk} s_j \varphi_j(\xi) \tag{20}$$

όπου n_k είναι ο αριθμός των κόμβων σε κάθε τμήμα διαμέρισης. Για τις γραμμικές συναρτήσεις ο αριθμός αυτός είναι 2. Πράγματι από το σχήμα 4.2 φαίνεται ότι στο τμήμα 1 υπάρχουν οι κόμβοι 1 και 2 στο τμήμα 2 οι κόμβοι 2 και 3 κ.ο.κ.

Αν εφαρμόσουμε το μετασχηματισμό (20) στο ολοκλήρωμα της εξίσωσης (17) προκύπτει ότι :

$$a_{ij} = \varphi^j(s_i) - \sum_{k=1}^{nel}\left[\int_0^1 K[s_i, s'(\xi)]\varphi^j \frac{ds'}{d\xi} d\xi\right], \quad i=1,2,\ldots,n \text{ και } j=1,2,\ldots,n \tag{21}$$

όπου nel είναι το πλήθος των τμημάτων διαμέρισης (12 για το σχήμα 4.1) και

$$\frac{ds'}{d\xi} = \sum_{j=1}^{nk} s'_j \frac{d\varphi_j(\xi)}{d\xi} \tag{22}$$

Οι συναρτήσεις φ^j των εξισώσεων (21) είναι

$$\varphi^j = \left\{\begin{array}{ll} \xi & , \quad \sigma\tau o\ E_j \\ 1-\xi & , \quad \sigma\tau o\ E_{j+1} \\ 0 & , \sigma\tau\alpha\ E_k, k \neq j, j+1 \end{array}\right\} \quad j=2,3,\ldots,n-1. \tag{23α}$$

και

$$\varphi^1 = \left\{\begin{array}{ll} 1-\xi & , \quad \sigma\tau o\ E_1 \\ 0 & , \sigma\tau\alpha\ E_k, k \neq 1 \end{array}\right\} \tag{23β}$$

$$\varphi^n = \left\{\begin{array}{ll} \xi & , \quad \sigma\tau o\ E_n \\ 0 & , \sigma\tau\alpha\ E_k, k \neq n \end{array}\right\} \tag{23γ}$$

Η μέθοδος ολοκλήρωσης που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των συντελεστών a_{ij} (εξίσωση 21) είναι η μέθοδος Gauss (Παράρτημα Γ).

4.3.2.2 Η μέθοδος Nystrom

Η δεύτερη προτεινόμενη μέθοδος για την επίλυση της ολοκληρωτικής εξίσωσης

$$F(s) = F_{direct}(s) + \int_0^{S_{end}} K(s,s')\, F(s')ds' \tag{24}$$

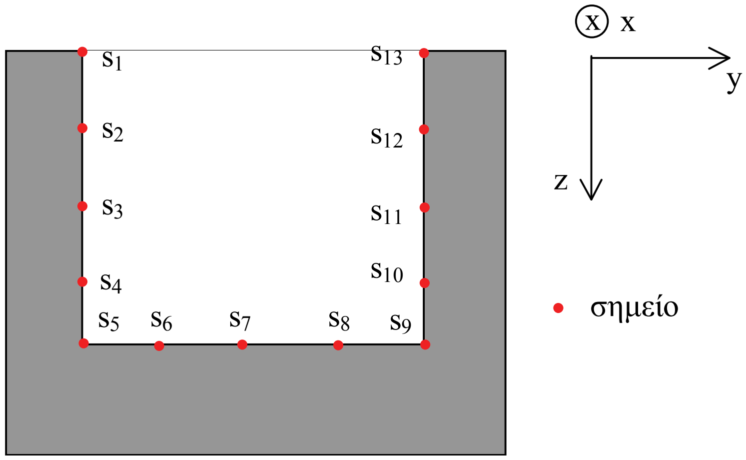
είναι απλή στην εφαρμογή της και απαιτεί την επιλογή κάποιου κανόνα ολοκλήρωσης:

$$\int_a^b y(t)dt = \sum_{j=1}^{N} w_j y(t_j) \tag{25}$$

όπου N είναι το πλήθος των σημείων διαμέρισης του διαστήματος [a,b] και w_j , t_j είναι ο συντελεστής βάρους και η συντεταγμένη του σημείου j.

Αν εφαρμόσουμε τον κανόνα ολοκλήρωσης (25) στην ολοκληρωτική εξίσωση (24) προκύπτει:

$$F(s) = F_{direct}(s) + \sum_{j=1}^{N} w_j K(s,s_j)\,F(s_j) \tag{26}$$



<u>Σχήμα 4.4.</u> Κατανομή των σημείων διαμέρισης για τη μέθοδο Nystrom. Εξαρτάται από τον κανόνα ολοκλήρωσης που χρησιμοποιείται.

Σύμφωνα με την εξίσωση (26) οι τιμές της F(s) στα σημεία διαμέρισης είναι:

$$F(s_i) = F_{direct}(s_i) + \sum_{j=1}^{N} w_j K(s_i,s_j)\,F(s_j) \quad i=1,2,\ldots,N \tag{27}$$

Καταλήγουμε σε ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{28}$$

όπου

$$a_{ij} = \begin{Bmatrix} -w_j K(s_i,s_j) & ,i \neq j \\ 1 - w_j K(s_i,s_j) & ,i = j \end{Bmatrix} \qquad i=1,2,\ldots,N \text{ και } j=1,2,\ldots,N \tag{29}$$

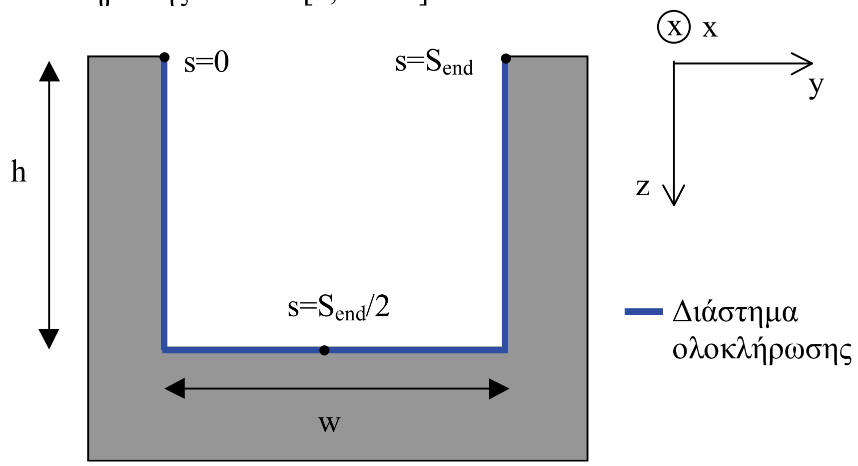
$$b_i = F_{direct}(s_i) \qquad i=1,2,\ldots,N \tag{30}$$

Με τη λύση του γραμμικού συστήματος προσδιορίζονται οι τιμές της F(s) στα σημεία διαμέρισης. Στην παραπάνω ανάλυση της μεθόδου φαίνεται ότι η διαμέριση δεν μπορεί να είναι τυχαία. Τα σημεία διαμέρισης εξαρτώνται από τον κανόνα ολοκλήρωσης. Έτσι, με μια πρώτη ματιά φαίνεται ότι δεν είναι δυνατό να υπολογίσουμε τις τιμές της F(s) στα σημεία μιας αυθαίρετα επιλεγμένης διαμέρισης. Το πρόβλημα μπορεί να παρακαμφθεί. Αν ζητούμενη είναι η τιμή της F(s) σε σημείο διαφορετικό από το σύνολο των σημείων διαμέρισης, δεν χρησιμοποιούμε απλά γραμμική παρεμβολή διότι αυτό θα «κατέστρεφε» την ακρίβεια υπολογισμών της μεθόδου. Η ιδέα του Nystrom,[3,4] η οποία διατηρεί την ακρίβεια των προηγούμενων υπολογισμών, ήταν η χρησιμοποίηση της εξίσωσης (26) ως συνάρτησης παρεμβολής. Επομένως είναι δυνατό να υπολογίσουμε με τη μέθοδο Nystrom την τιμή της F(s) στα σημεία μιας αυθαίρετα επιλεγμένης διαμέρισης και μάλιστα χωρίς απώλεια της ακρίβειας.

Ο κανόνας ολοκλήρωσης που καθορίζει τα σημεία ολοκλήρωσης και τους συντελεστές βάρους, w_j, θα πρέπει να δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα με τη χρήση όσο το δυνατόν λιγότερων σημείων. Όσο περισσότερα είναι τα σημεία ολοκλήρωσης τόσο μεγαλύτερη είναι και η διάσταση του γραμμικού συστήματος που τελικά προκύπτει. Για ομαλές (κανονικές) ολοκληρωτικές εξισώσεις κανένας κανόνας δεν είναι καλύτερος[3] από τον κανόνα ολοκλήρωσης Gauss (Παράρτημα Γ).

4.3.2.3 Αξιολόγηση των μεθόδων επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης

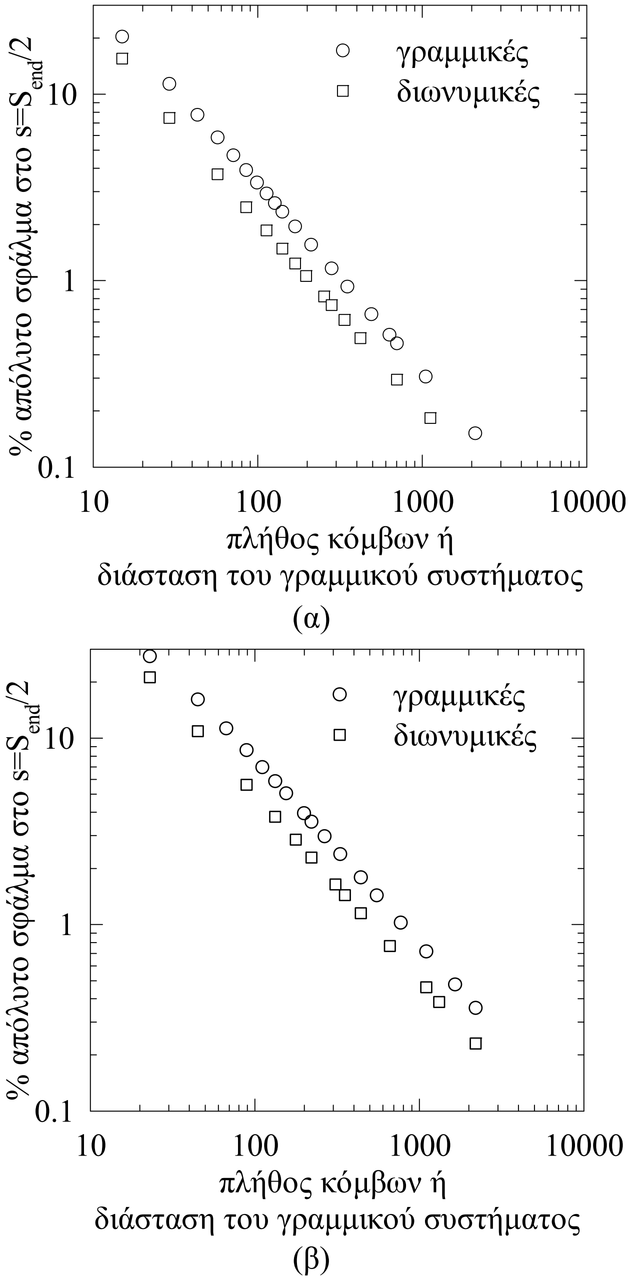
Πριν την παρουσίαση των συγκριτικών αποτελεσμάτων των δύο μεθόδων κρίνεται σκόπιμο να οριστούν μεγέθη και έννοιες που θα χρησιμοποιηθούν: Το προφίλ δομής ή το διάστημα ολοκλήρωσης επί του οποίου γίνονται οι υπολογισμοί φαίνεται στο σχήμα 4.5. Ορίζονται η αρχή και το τέλος του διαστήματος ολοκλήρωσης $[0, S_{end}]$ καθώς και το μέσο του το οποίο βρίσκεται στο κέντρο της βάσης του αυλακιού. Το βάθος του αυλακιού είναι h και το πλάτος του w, συνεπώς το διάστημα ολοκλήρωσης είναι το [0, 2h+w].



<u>Σχήμα 4.5.</u> Βασικά μεγέθη του προφίλ της δομής αυλακιού που εισάγεται στους υπολογισμούς.

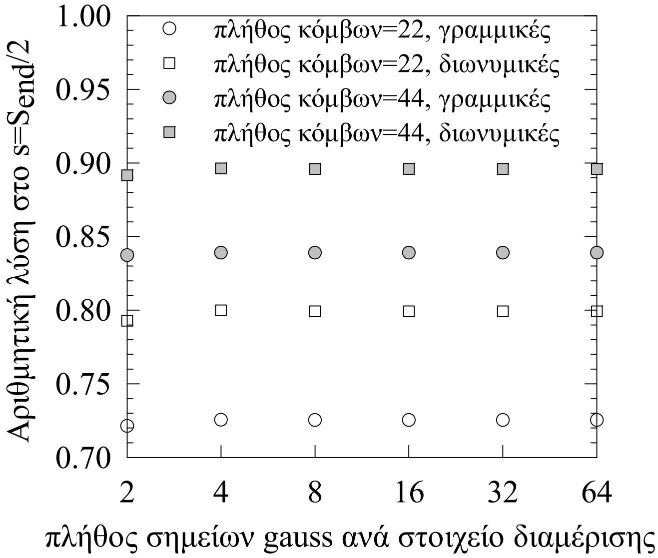
Τα βασικά κριτήρια για την επιλογή της μιας ή της άλλης μεθόδου είναι η ακρίβεια και η ταχύτητα υπολογισμών. Ο ασφαλέστερος τρόπος εκτίμησης της ακρίβειας υπολογισμών μιας αριθμητικής μεθόδου είναι η σύγκριση των αποτελεσμάτων της με την αναλυτική λύση. Αυτό προφανώς είναι δυνατό όταν γνωρίζουμε την αναλυτική λύση. Στο πρόβλημα της ολοκληρωτικής εξίσωσης (5) η αναλυτική λύση είναι γνωστή[6] [F(s)=1] μόνο όταν η συνάρτηση S_E είναι σταθερή και ίση με το μηδέν, οπότε και K(s,s′)=g(s,s′) (εξίσωση 4).

Στο σχήμα 4.6 φαίνεται η επίδραση της διαμέρισης του διαστήματος ολοκλήρωσης στην ακρίβεια υπολογισμού της άγνωστης συνάρτησης F(s) με την μέθοδο collocation όταν S_E=0 δηλαδή όταν γνωρίζουμε την αναλυτική λύση. Στον οριζόντιο άξονα είναι το πλήθος των κόμβων (η διάσταση του γραμμικού συστήματος που επιλύεται) και στον κατακόρυφο άξονα είναι η % απόλυτη απόκλιση από πραγματική λύση στο σημείο $s=S_{end}/2$. Παρατηρούμε ότι οι διωνυμικές συναρτήσεις βάσης δίνουν αποτελέσματα που βρίσκονται πιο κοντά στην αναλυτική λύση από αυτά των γραμμικών συναρτήσεων. Η κλίσεις των δύο καμπυλών είναι οι ίδιες δηλαδή η ταχύτητα σύγκλισης προς την αναλυτική λύση είναι η ίδια.



<u>Σχήμα 4.6.</u> Επίδραση του αριθμού των κόμβων στην ακρίβεια και ταχύτητα υπολογισμού της $F(S_{end}/2)$ (κέντρο της βάσης του αυλακιού) με τη μέθοδο collocation με γραμμικές και διωνυμικές συναρτήσεις βάσης. Η αναλυτική λύση είναι $F(S_{end}/2) = F(s) = 1$ ($S_E = 0$) και το διάστημα ολοκλήρωσης είναι α) το [0, 7] (h=3, w=1) και β) το [0, 11] (h=5, w=1).

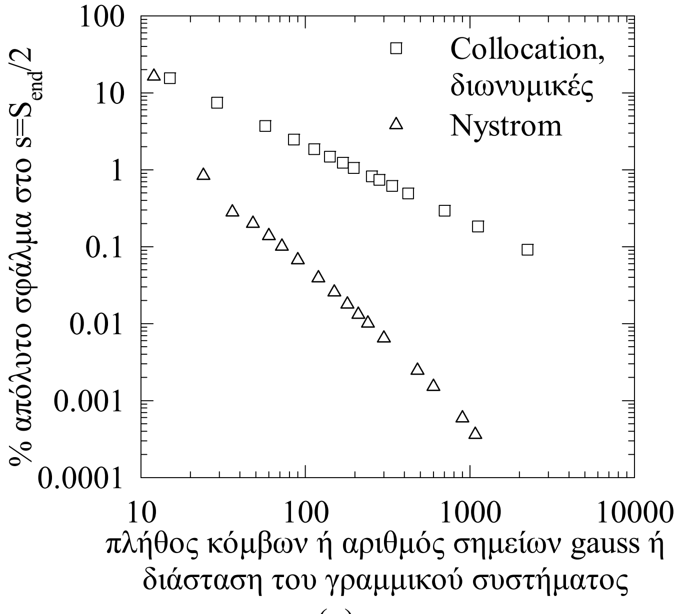
Εξετάζονται οι τρόποι με τους οποίους είναι δυνατό να βελτιωθεί η ακρίβεια της μεθόδου collocation. Αρχικά ελέγχεται η επίδραση του αριθμού των σημείων gauss ανά τμήμα διαμέρισης που χρησιμοποιούνται στα ολοκληρώματα υπολογισμού των a_{ij} (εξισώσεις 21). Τα αποτελέσματα για την τιμή $F(S_{end}/2)$ φαίνονται στο σχήμα 4.7. Η αναλυτική λύση είναι η $F(S_{end}/2)=F(s)=1$. Το πλήθος των σημείων gauss ανά τμήμα διαμέρισης δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα και συνεπώς η αύξηση τους δεν είναι δυνατό να τα βελτιώσει.



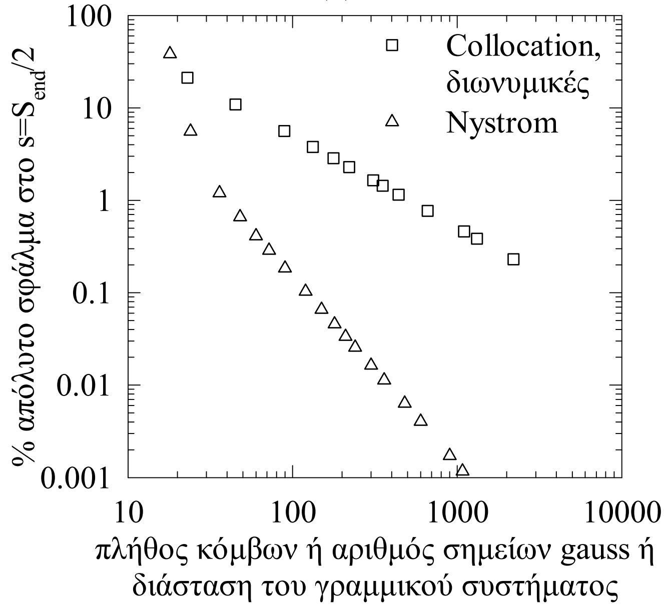
<u>Σχήμα 4.7.</u> Επίδραση του αριθμού των σημείων gauss (gauss points) ανά τμήμα διαμέρισης στην υπολογιζόμενη με την μέθοδο collocation τιμή $F(S_{end}/2)$ (κέντρο της βάσης του αυλακιού) για δύο διαφορετικές ισοδιαμερίσεις του διαστήματος ολοκλήρωσης [0,11] (h=5, w=1) χρησιμοποιώντας γραμμικές και διωνυμικές συναρτήσεις βάσης. Η πραγματική λύση είναι η $F(S_{end}/2) = F(s) =1$.

Ένας σίγουρος τρόπος η μέθοδος collocation να δώσει αποτελέσματα μεγαλύτερης ακρίβειας είναι η διαίρεση των αρχικών τμημάτων διαμέρισης σε μικρότερα, όπως φαίνεται και από το σχήμα 4.6. Επίσης, τα αποτελέσματα είναι πιθανό να βελτιωθούν αν χρησιμοποιηθούν συναρτήσεις βάσης υψηλότερης τάξης.

Με τη μέθοδο Nystrom, βελτίωση των αποτελεσμάτων προκύπτει με την αύξηση των σημείων gauss. Στο σχήμα 4.8 φαίνεται η επίδραση του αριθμού των σημείων gauss στην απόκλιση των αποτελεσμάτων της μεθόδου Nystrom από την αναλυτική λύση. Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται και η επίδραση του πλήθους των κόμβων στην ακρίβεια υπολογισμού με την μέθοδο collocation με διωνυμικές συναρτήσεις βάσης. *Στον οριζόντιο άξονα είναι η διάσταση του γραμμικού συστήματος που προκύπτει δηλαδή το πλήθος των κόμβων για την μέθοδο collocation (n των εξισώσεων 15-16) και το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης για τη Nystrom (N των εξισώσεων 29-30).* Στον κατακόρυφο άξονα είναι η %απόλυτη απόκλιση από την πραγματική λύση στο σημείο $s=S_{end}/2$. Η μέθοδος Nystrom φαίνεται να υπερέχει ξεκάθαρα: δίνει σε κάθε περίπτωση μικρότερο σφάλμα και η σύγκλισή της προς την αναλυτική λύση είναι ταχύτερη από αυτή της μεθόδου collocation.



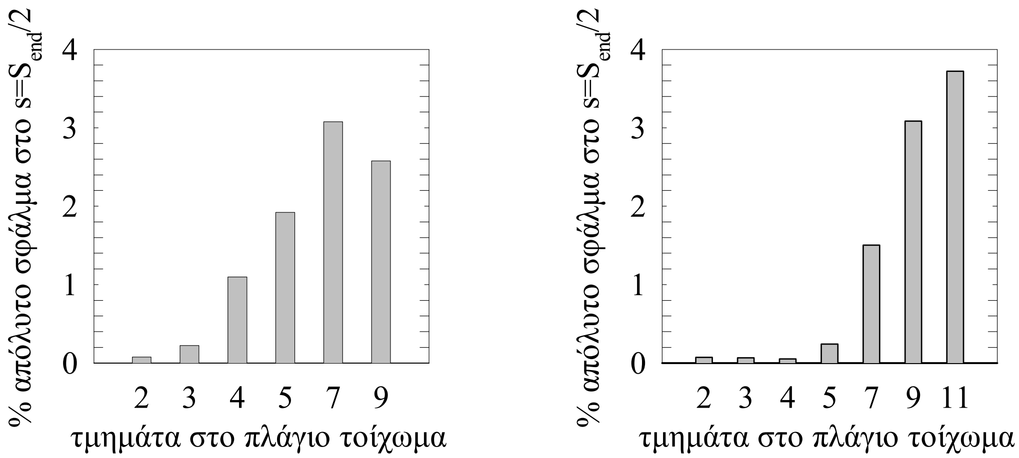
(α)



(β)

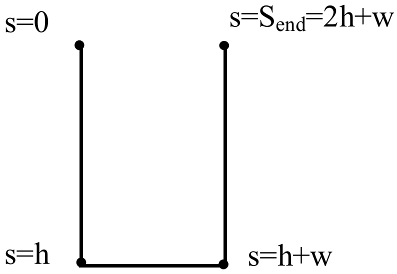
<u>Σχήμα 4.8.</u> Σύγκριση του σφάλματος στις τιμές $F(S_{end}/2)$ με την μέθοδο collocation (διωνυμικές συναρτήσεις βάσης) και με τη μέθοδο Nystrom. Στον οριζόντιο άξονα είναι η διάσταση του γραμμικού συστήματος που επιλύεται δηλαδή ο αριθμός των κόμβων για τη μέθοδο collocation και το πλήθος των σημείων gauss για τη μέθοδο Nystrom. Για την μέθοδο collocation θεωρούμε σε κάθε περίπτωση ισοδιαμέριση ενώ για τη μέθοδο Nystrom χωρίζουμε το διάστημα ολοκλήρωσης σε 6 τμήματα: [0, h/2],[h/2,h] (αριστερό πλάγιο τοίχωμα), [h, (h+w)/2], [(h+w)/2, h+w] (βάση) και [h+w, 3h/2+w], [h+w, 3h/2+w] (αριστερό πλάγιο τοίχωμα). Σε αυτά τα 6 τμήματα διασκορπίζονται τα σημεία gauss. Η πραγματική λύση είναι η $F(S_{end}/2) = F(s) =1$ ($S_E = 0$) και το διάστημα ολοκλήρωσης είναι το α) [0,7] (h=3,w=1) και β) [0,11] (h=5,w=1).

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να σημειωθεί ότι ο τρόπος διαμέρισης επηρεάζει τα αποτελέσματα. Το απαιτούμενο για την επιθυμητή ακρίβεια πλήθος σημείων ή κόμβων εξαρτάται από το αν ισοδιαμεριστεί ή όχι το διάστημα ολοκλήρωσης καθώς από την πυκνότητα της διαμέρισης σε συγκεκριμένα τμήματα του συνολικού διαστήματος ολοκλήρωσης. Στο σχήμα 4.9 φαίνεται η μεταβολή της απόκλισης από την πραγματική λύση σαν συνάρτηση του τρόπου διασποράς των σημείων gauss με τη μέθοδο Nystrom. Διαιρούμε σε δύο τμήματα το διάστημα [h, h+w] που ορίζει τη βάση του αυλακιού και μεταβάλλουμε το πλήθος των τμημάτων στα διαστήματα [0,h] και [h+w, 2h+w] που ορίζουν τα πλάγια τοιχώματα του αυλακιού. Στα τμήματα που σχηματίζονται διασκορπίζεται σταθερό συνολικά πλήθος σημείων gauss. Η ακρίβεια υπολογισμών εξαρτάται από τη διασπορά των σημείων gauss. Γενικά, όσο μεγαλύτερο είναι το πλήθος των τμημάτων τόσο μεγαλύτερο είναι το σφάλμα.



(α) (β)

<u>Σχήμα 4.9.</u> Το %απόλυτο σφάλμα στις τιμές F(S_{end}/2) της μεθόδου Nystrom για διαφορετικές διαμερίσεις του διαστήματος ολοκλήρωσης [0, 2h+w], διατηρώντας το συνολικό αριθμό σημείων gauss σταθερό. Το διάστημα [h, h+w] (βάση του αυλακιού) διαιρείται σε δύο τμήματα. α) Το διάστημα ολοκλήρωσης είναι το [0,7] (h=3,w=1) και τα διαστήματα [0,h]=[0,3] και [h+w, 2h+w]=[4,7] (πλάγια τοιχώματα του αυλακιού) διαιρούνται σε 2,3,4,5,7 και 9 τμήματα. Το πλήθος των σημείων gauss που διασκορπίζεται στα τμήματα διαμέρισης είναι σε κάθε περίπτωση 80. β) Το διάστημα ολοκλήρωσης είναι το [0,11] (h=5,w=1) και τα διαστήματα [0,h]=[0,5] και [h+w, 2h+w]=[6,11] (πλάγια τοιχώματα του αυλακιού) διαιρούνται σε 2,3,4,5,7,9 και 11 τμήματα. Το πλήθος των σημείων gauss που διασκορπίζεται στα τμήματα διαμέρισης είναι σε κάθε περίπτωση 140.



Πέρα από τις επιδόσεις θα πρέπει να εξεταστεί και η απλότητα των μεθόδων. Η μέθοδος Nystrom είναι απλούστερη στην κατανόηση και εφαρμογή της. Περιέχει ένα παραπάνω βήμα, αυτό της παρεμβολής, για τον υπολογισμό των τιμών στα σημεία της αυθαίρετα επιλεγμένης διαμέρισης, αλλά δεν χρησιμοποιούνται μετασχηματισμοί, ούτε απαιτείται ολοκλήρωση για τον υπολογισμό των συντελεστών a_{ij} του γραμμικού συστήματος.

Ολοκληρώνοντας την αξιολόγηση των μεθόδων σημειώνεται ότι η ταχύτητα σύγκλισης και η απλότητα είναι σίγουρα δύο βασικά στοιχεία υπεροχής της μέθοδου Nystrom. Τα αποτελέσματα και των δύο μεθόδων επηρεάζονται εξαρτώνται ισχυρά από τον τρόπο διαμέρισης. Η επιλογή κάποιας από τις δύο εξαρτάται και από την επιθυμητή ακρίβεια.

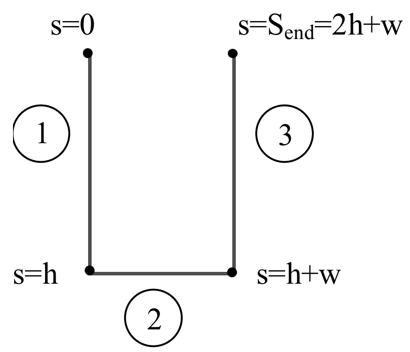
Οι Delves και Mohamed[3,7] διερεύνησαν μεθόδους για την επίλυση ολοκληρωτικών εξισώσεων περισσότερο πολύπλοκες από τη μέθοδο Nystrom. Για τις ολοκληρωτικές Fredholm δεύτερου είδους προτείνουν τη μέθοδο Nystrom και τη χρήση του κανόνα ολοκλήρωσης Gauss. Αναφέρουν χαρακτηριστικά “ This routine is extremely simple…. Such results are enough to make a numerical analyst weep“. O Atkinson[4] συμπληρώνει ότι η μέθοδος collocation είναι δύσκολο να συναγωνιστεί τη μέθοδο Nystrom και σημειώνει ότι για τις περισσότερες περιπτώσεις πυρήνων ο κανόνας ολοκλήρωσης Gauss για τη μέθοδο Nystrom είναι ο προτεινόμενος.

Ανεξάρτητα από το ποια μέθοδος χρησιμοποιείται τα αποτελέσματα της θα πρέπει να αντιμετωπίζονται κριτικά και να εκτιμάται πάντα η πιθανή απόκλιση τους από την πραγματική λύση. Ένας τρόπος για την εκτίμηση της ακρίβειας υπολογισμών των δύο μεθόδων όταν η συνάρτηση S_E δεν είναι μηδενική και επομένως η αναλυτική λύση δεν είναι γνωστή (αυτό συμβαίνει στην πράξη) είναι ο διπλασιασμός των κόμβων/σημείων του πλέγματος διαμέρισης και η σύγκριση του αποτελέσματος πριν και μετά το διπλασιασμό. Η απόκλιση των αποτελεσμάτων μπορεί να θεωρηθεί ως μια πρώτη εκτίμηση του σφάλματος[3] που φέρει το αποτέλεσμα μετά το διπλασιασμό.

Τέλος, οι μέθοδοι που περιγράφηκαν δεν είναι οι μοναδικές. Ποικιλία μεθόδων και λεπτομέρειες για αυτές μπορεί κάποιος να αναζητήσει στα βιβλία των Atkinson,[4] Delves-Mohamed,[7] Goldberg[8] ή σε βιβλία που περιγράφουν μεθόδους επίλυσης με τη μέθοδο των συνοριακών στοιχείων.

4.3.3. Αποτελέσματα επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης

Στις επόμενες παραγράφους παρουσιάζονται και σχολιάζονται τα αποτελέσματα επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης. Εφαρμόζεται η μέθοδος Nystrom και το διάστημα ολοκλήρωσης χωρίζεται σε 3 διαστήματα (σχήμα 4.10): το πρώτο αντιστοιχεί στο αριστερό πλάγιο τοίχωμα, το δεύτερο στη βάση και το τρίτο στο δεξιό πλάγιο τοίχωμα του ορθογωνικού προφίλ.



Σχήμα 4.10. Τα τρία διαστήματα ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούνται για τη διασπορά των σημείων gauss.

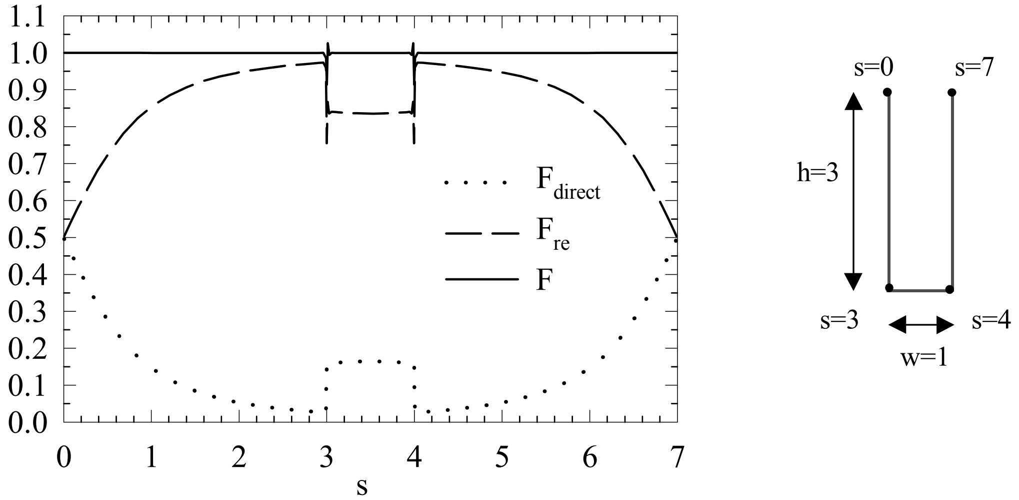
4.3.3.1 Υπολογισμός της άγνωστης συνάρτησης F(s)

Στα σχήματα 4.11 και 4.12 φαίνονται αποτελέσματα επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης όταν $S_E=0$. Η δομή που εξετάζεται είναι αυτή των σχημάτων 4.5, 4.10. Η συνάρτηση F(s) εκφράζει την κανονικοποιημένη (ως προς τη ροή στην ελεύθερη επιφάνεια, εξίσωση 2) συνολική ροή που φτάνει σε σημείο s του προφίλ που εξετάζεται. Τα διαστήματα [0,h] και [h+w, 2h+w] αντιστοιχούν στα πλάγια τοιχώματα της δομής, ενώ το διάστημα [h,h+w] στη βάση της. Η υπολογιζόμενη συνολική ροή, F(s), διατηρείται σταθερή στην τιμή 1 σε όλο το εύρος του διαστήματος ολοκλήρωσης όπως ακριβώς και η πραγματική λύση.

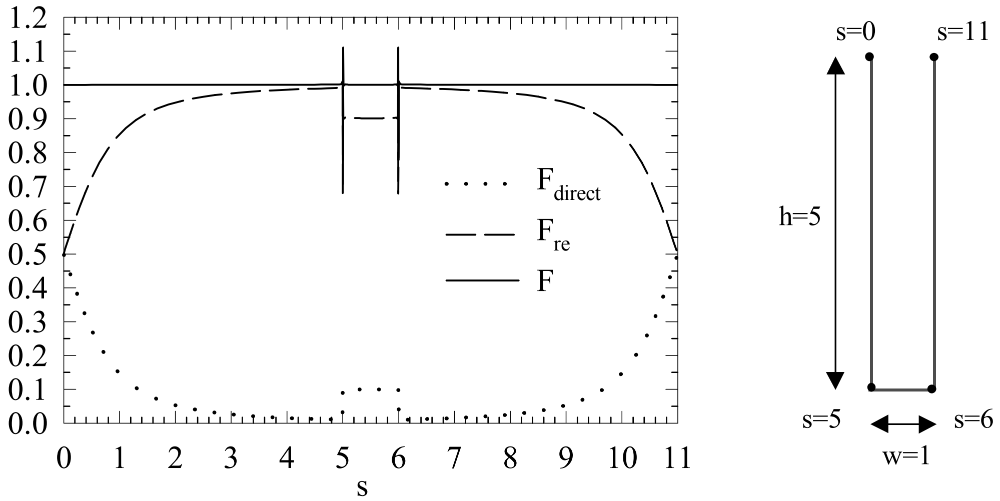
Στα σχήματα 4.11 και 4.12, εκτός από τη συνολική ροή, F(s), φαίνονται και οι δύο συνιστώσες της: η ροή απευθείας από τον κυρίως όγκο του πλάσματος, $F_{direct}(s)$, και η ροή από επανεκπομπή, $F_{re}(s)$. Η τελευταία προκύπτει από τη διαφορά:

$$F_{re}(s) = F(s) - F_{direct}(s)$$

Παρατηρείται μείωση της F_{direct} και αύξηση της F_{re} στο πλάγιο τοίχωμα από την κορυφή προς τη βάση του αυλακιού. Όλες οι ροές στη βάση είναι σχεδόν σταθερές.



Σχήμα 4.11. Η υπολογιζόμενη συνάρτηση F(s) όταν S_E=0.0 και για διάστημα ολοκλήρωσης το [0, 7] (h=3, w=1). Η αναλυτική λύση είναι η F(s)=1.



Σχήμα 4.12. Η υπολογιζόμενη συνάρτηση F(s) όταν S_E=0.0 και για διάστημα ολοκλήρωσης το [0, 11] (h=5, w=1). Η αναλυτική λύση είναι η F(s)=1.

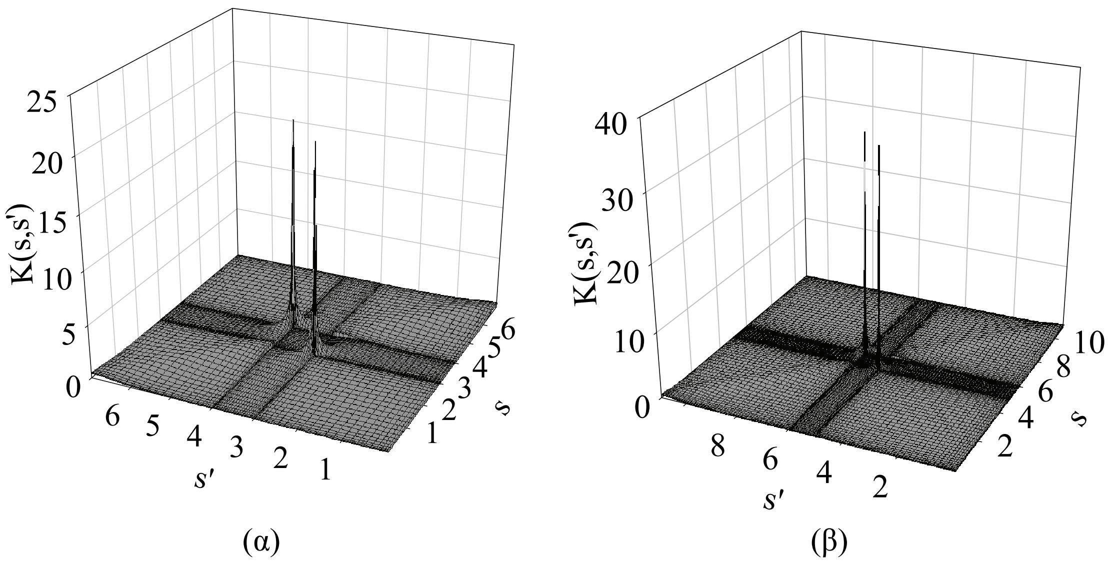
Στα σχήματα 4.11 και 4.12 παρατηρείται μια σημαντική διακύμανση στις τιμές της συνάρτησης F(s) στις γωνίες του προφίλ (s=h και s=h+w).

4.3.3.2 Οι διακυμάνσεις της άγνωστης συνάρτησης F(s) στις γωνίες του προφίλ

Από τα σχήματα 4.11 και 4.12 είναι φανερό ότι οι διακυμάνσεις στις γωνίες του προφίλ χρεώνονται στην συνιστώσα $F_{re}(s)$ της συνολικής ροής,

$$F_{re}(s) = \int_0^{S_{end}} K(s,s')\,F(s')ds' \qquad (31)$$

και οφείλονται στις εξαιρετικά απότομες μεταβολές του πυρήνα $K(s,s')$ οι οποίες μπορούν να οδηγήσουν[4] σε σημαντικά σφάλματα κατά τον αριθμητικό υπολογισμό του ολοκληρώματος. Οι μεταβολές του πυρήνα είναι πράγματι εξαιρετικά απότομες σε σημεία s κοντά στις γωνίες όπως φαίνεται και από το σχήμα 4.13 στο οποίο απεικονίζεται ο πυρήνας $K(s,s')$ όταν $S_E=0$.

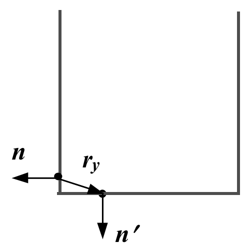


Σχήμα 4.13. Ο πυρήνας K(s,s′) της ολοκληρωτικής εξίσωσης όταν $S_E=0$. α) Το διάστημα ολοκλήρωσης είναι το [0, 7] (h=3, w=1). Οι γωνίες του προφίλ αντιστοιχούν σε s=h=3 και s=h+w=4. β) Το διάστημα ολοκλήρωσης το [0,11] (h=5, w=1). Οι γωνίες του προφίλ αντιστοιχούν σε s=h=5 και s=h+w=6.

Οι διακυμάνσεις του πυρήνα για s που αντιστοιχούν στις γωνίες οφείλονται στην απότομη αλλαγή κλίσης στο προφίλ που μεταβάλλει απότομα και την τιμή του πυρήνα.

$$K(s,s') = -\frac{(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n'})(\boldsymbol{r_y}\cdot\boldsymbol{n})}{2\left|\boldsymbol{r_y}\right|^3}[1-S_E(s')] \qquad (32)$$

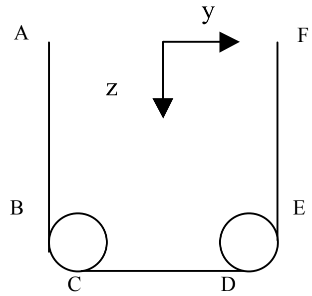
Παρακολουθώντας τη μεταβολή του πυρήνα για s λίγο πριν την πρώτη γωνία του προφίλ παρατηρούμε ότι για $s'<s$ ο $K(s,s')$ είναι ίσος με το μηδέν λόγω μηδενισμού του αριθμητή της εξίσωσης (32). Όταν αλλάξει η κλίση ο αριθμητής παύει να είναι μηδενικός ενώ ο παρονομαστής είναι πάρα πολύ μικρός. Η χαμηλή τιμή του παρονομαστή είναι αυτή που οδηγεί σε υψηλές τιμές τον πυρήνα.



Σχήμα 4.14. Επεξήγηση συμβόλων της εξίσωσης υπολογισμού του πυρήνα K.

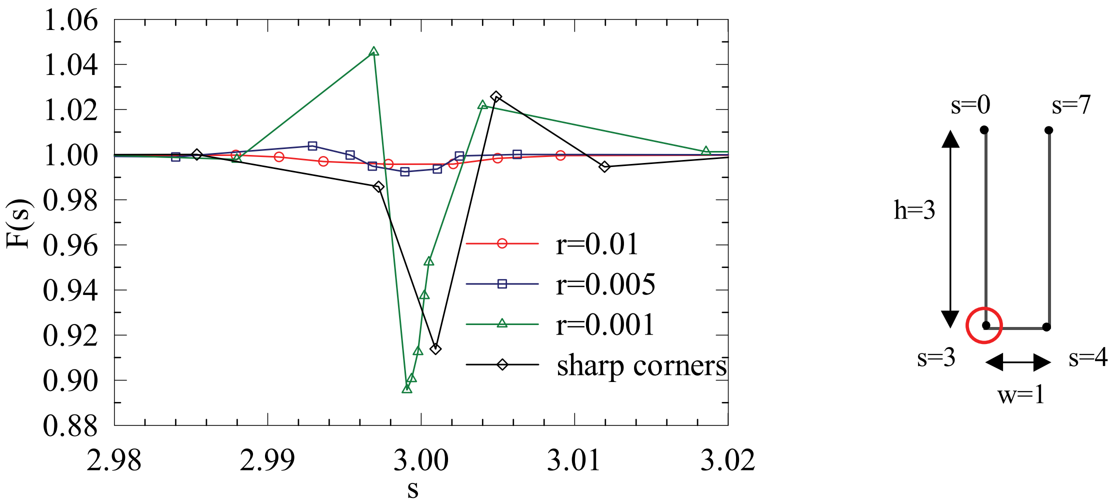
Η απότομη μεταβολή του πυρήνα

που δυσχεραίνει τον αριθμητικό υπολογισμό οφείλεται στο ορθογωνικό προφίλ που εξετάζεται. Όταν η ορθογωνική δομή του αυλακιού (σχήμα 4.5) προσεγγίζεται από ένα προφίλ στο οποίο οι γωνίες έχουν αντικατασταθεί από τεταρτοκύκλια (σχήμα 4.15) η μεταβολή της κλίσης κοντά στις γωνίες είναι λιγότερο απότομη.

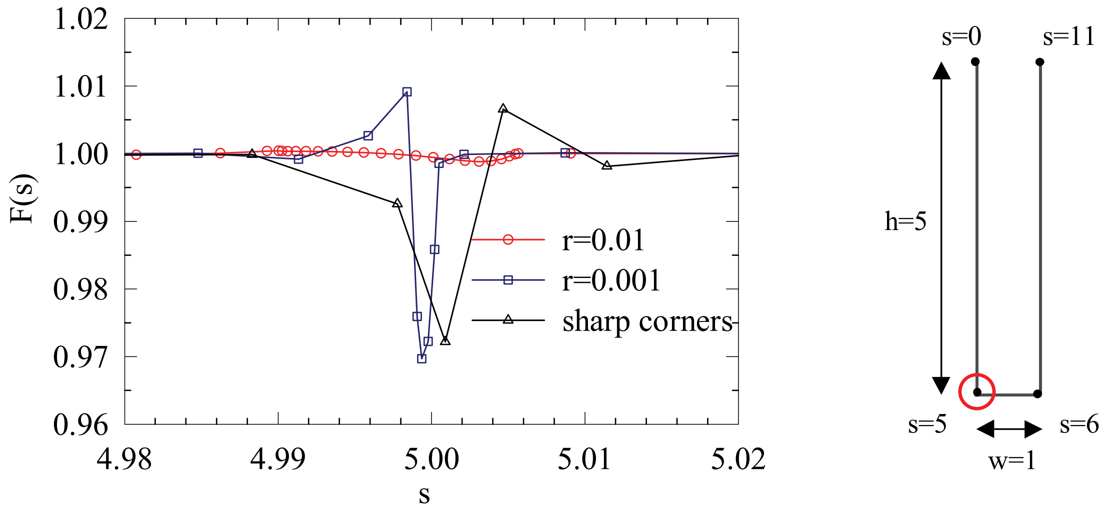


<u>Σχήμα 4.15.</u> Αντικατάσταση των γωνιών από τεταρτοκύκλια στη δομή αυλακιού.

Στα σχήματα 4.16, 4.17 φαίνεται η συνάρτηση F(s) σε διάστημα περί της γωνίας για τα προφίλ των σχημάτων 4.5 και 4.15. Δοκιμάζονται διαφορετικές ακτίνες τεταρτοκυκλίων για το προφίλ του σχήματος 4.15. Μεγαλύτερη ακτίνα τεταρτοκυκλίου συνεπάγεται ομαλότερη μεταβολή της κλίσης με αποτέλεσμα πολύ μικρές διακυμάνσεις στο διάστημα περί της γωνίας. Μείωση της ακτίνας συνεπάγεται περισσότερο απότομη μεταβολή της κλίσης και γένεση διακυμάνσεων που καθώς μικραίνει η ακτίνα πλησιάζουν αυτές που αντιστοιχούν στο ορθογωνικό προφίλ.



<u>Σχήμα 4.16.</u> Η υπολογιζόμενη συνάρτηση F(s) για τα προφίλ των σχημάτων 4.15 και 4.5 στο διάστημα περί της μίας εκ των δύο γωνιών. Η ακτίνα των τεταρτοκυκλίων του σχήματος 4.15 που προσεγγίζει τη γωνία είναι r=0.01, 0.005, 0.001. Η αναλυτική λύση είναι η F(s)=1. Το διάστημα ολοκλήρωσης είναι το [0, 7] (h=3,w=1).



<u>Σχήμα 4.17.</u> Η υπολογιζόμενη συνάρτηση F(s) για τα προφίλ των σχημάτων 4.15 και 4.5 στο διάστημα περί της μίας εκ των δύο γωνιών. Η ακτίνα των τεταρτοκυκλίων του σχήματος 4.15 που προσεγγίζουν τις γωνίες είναι r=0.01, 0.001. Η αναλυτική λύση είναι η F(s)=1. Το διάστημα ολοκλήρωσης είναι το [0, 11] (h=5,w=1).

Για την επίλυση του προβλήματος των διακυμάνσεων δοκιμάστηκε η αύξηση του πλήθους των σημείων gauss. Αύξηση του πλήθους των σημείων οδηγεί σε μείωση του εύρους των διακυμάνσεων και μικρή μείωση του πλάτους τους. Το πρόβλημα αμβλύνθηκε με πύκνωση των σημείων γύρω από τις γωνίες, ωστόσο δεν αντιμετωπίστηκε πλήρως. Η χρησιμοποίηση ενός διαφορετικού κανόνα ολοκλήρωσης (π.χ. ένας τύπος Newton-Cotes) επίσης δεν έδωσε τα επιθυμητά αποτελέσματα.

Οι διακυμάνσεις είναι αριθμητικά σφάλματα και για αυτό δεν θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη όταν αναζητούνται τιμές της F(s) στο διάστημα που εμφανίζονται. Οι υπολογιζόμενες τιμές της F(s) στο εύρος των διακυμάνσεων αποκόπτονται και προσδιορίζονται με γραμμική προεκβολή των τιμών εκτός του εύρους διακυμάνσεων.

4.4 Η επίλυση του γραμμικού συστήματος

Γραμμικό σύστημα προκύπτει από τη διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης είτε με τη μέθοδο collocation (εξίσωση 14) είτε με τη μέθοδο Nystrom (εξίσωση 28). Για την επίλυση του γραμμικού συστήματος $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ χρησιμοποιούνται :

α) επαναληπτικές μέθοδοι, όπως η Jacobi, η Gauss-Seidel και η μέθοδος διαδοχικής υπερχαλάρωσης γνωστή με τα αρχικά SOR[9,10] (Successive Over-Relaxation) και

β) μία άμεση, η παραγοντοποίηση του πίνακα $\boldsymbol{A}$ σε άνω και κάτω τριγωνικό (LU-decomposition[1]).

4.4.1 Οι επαναληπτικές μέθοδοι

Οι επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ χρησιμοποιούνται κυρίως όταν είναι γνωστό από πριν ότι η σύγκλιση τους είναι γρήγορη ή όταν ο πίνακας $\boldsymbol{A}$ του συστήματος είναι μεγάλης διάστασης και τα περισσότερα στοιχεία του είναι μηδενικά. Στις περιπτώσεις αυτές το πλήθος των πράξεων που απαιτείται για την εύρεση λύσης με την επαναληπτική μέθοδο είναι συνήθως πολύ μικρότερο[9] από αυτό που απαιτείται με την άμεση. Υπάρχει μεγάλη ποικιλία επαναληπτικών μεθόδων και η αποτελεσματικότητά τους εξαρτάται από το ειδικό πρόβλημα που επιλύουν.[11]

Απαραίτητη προϋπόθεση για τη χρησιμοποίηση μιας επαναληπτικής μεθόδου είναι η σύγκλιση. Για τις επαναληπτικές μεθόδους ικανή και αναγκαία προϋπόθεση για τη σύγκλιση ανεξάρτητα από την αρχική εκτίμηση του διανύσματος της λύσης είναι η φασματική ακτίνα (μέγιστη ιδιοτιμή του $\boldsymbol{B}$), $\rho(\boldsymbol{B})$, του επαναληπτικού πίνακα $\boldsymbol{B}$ της μεθόδου να είναι μικρότερη της μονάδας. Για τις επαναληπτικές τεχνικές Jacobi, Gauss-Seidel αρκεί[12] η διαγώνια υπεροχή του πίνακα $\boldsymbol{A}$ του γραμμικού συστήματος για τη σύγκλισή τους ανεξάρτητα από την αρχική εκτίμηση της λύσης.

Το πλήθος επαναλήψεων k που απαιτούνται αν η επιθυμητή ακρίβεια είναι της τάξης 10^{-p} είναι :

$$k \geq \frac{p}{-\log[\rho(\boldsymbol{B})]}$$

Μικρότερες τιμές της φασματικής ακτίνας οδηγούν σε αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης. Η επιλογή κατάλληλης τιμής για τον συντελεστή χαλάρωσης της μεθόδου SOR, ω, ο οποίος επιδρά στον επαναληπτικό πίνακα της μεθόδου, μπορεί να οδηγήσει σε μείωση της φασματικής και μείωση του πλήθους των επαναλήψεων. Έχει βρεθεί στην πράξη ότι το πλήθος των επαναλήψεων με τη μέθοδο υπερχαλάρωσης χρησιμοποιώντας κατάλληλο ω μειώνεται πολύ, σε μερικές περιπτώσεις και εκατό φορές.[13]

Τέλος, για την εύρεση λύσης με τις επαναληπτικές μεθόδους Jacobi, Gauss-Seidel και SOR απαιτούνται περίπου kN^2 εκτελέσεις ενός βρόγχου που περιέχει μια πρόσθεση και ένα πολλαπλασιασμό.

4.4.1.1 Η επιλογή της επαναληπτικής μεθόδου

Από τις επαναληπτικές μεθόδους Jacobi, Gauss-Seidel και SOR επιλέχθηκε η μέθοδος SOR λόγω της παραμέτρου χαλάρωσης ω που μπορεί να επιταχύνει τη σύγκλιση. Στον πίνακα 4.1 φαίνεται το πλήθος των επαναλήψεων που απαιτείται για την επίλυση του γραμμικού συστήματος που προκύπτει για διαφορετικά προβλήματα

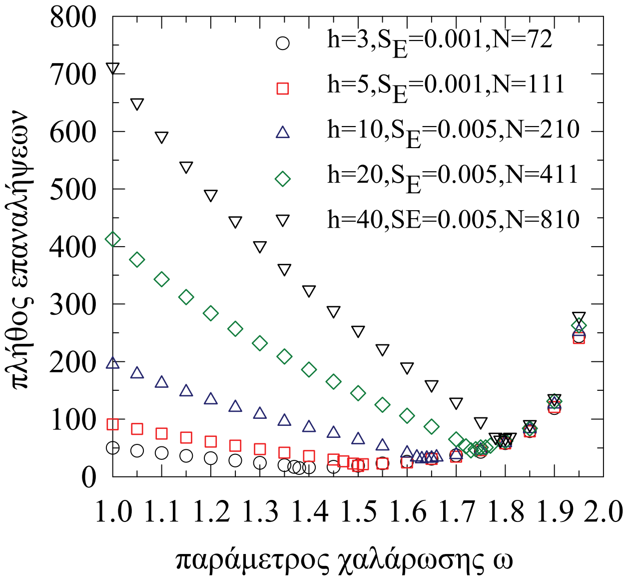
<u>Πίνακας 4.1.</u> *Πλήθος επαναλήψεων για τις μεθόδους Jacobi, Gauss-Seidel και SOR για την επίλυση των γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν για 5 διαφορετικά προβλήματα. Το κάθε πρόβλημα καθορίζεται από το άνω όριο ολοκλήρωσης Send (ουσιαστικά από το βάθος h, αφού σε κάθε περίπτωση το πλάτος w είναι ίσο με 1), τη συνάρτηση S_E και το πλήθος των σημείων, N (διάσταση του γραμμικού συστήματος).*

Πρόβλημα \ Μέθοδος	Jacobi	Gauss-Seidel	SOR
h=3,S_E=0.001,N=72	93	50	15 (ω=1.38)
h=5,S_E=0.001,N=111	170	91	19 (ω=1.50)
h=10,S_E=0.005,N=210	365	195	31 (ω=1.63)
h=20,S_E=0.005,N=411	772	413	46 (ω=1.73)
h=40,S_E=0.005,N=810	1332	712	64 (ω=1.79)

με τις μεθόδους Jacobi, Gauss-Seidel και SOR. *Η μέθοδος SOR υπερέχει, αφού για κάθε πρόβλημα απαιτεί τον ελάχιστο αριθμό επαναλήψεων. Οι μέθοδοι Jacobi και*

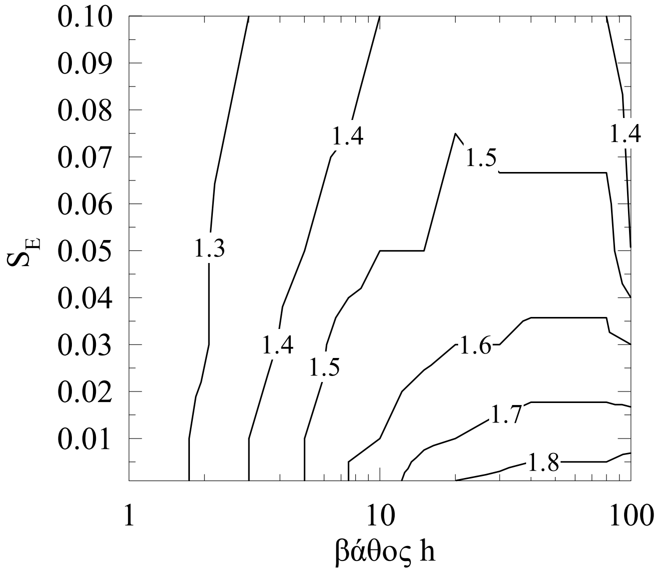
Gauss-Seidel χρειάζονται πολλαπλάσιο πλήθος επαναλήψεων για να φτάσουν στην σύγκλιση.

Το αδύνατο σημείο της SOR είναι ότι γενικός τρόπος για τον προσδιορισμό της τιμής της παραμέτρου ω που οδηγεί σε ταχύτατη σύγκλιση δεν υπάρχει και η ταχύτητα σύγκλισης είναι υψηλή μόνο σε μια στενή ζώνη τιμών.[3] Στο σχήμα 4.18 φαίνεται το πλήθος των επαναλήψεων που απαιτούνται για την επίλυση του γραμμικού συστήματος με τη μέθοδο SOR για διάφορες τιμές της παραμέτρου ω. Η επιλογή τιμής για την παράμετρο ω έξω από τη ζώνη μπορεί να έχει σαν συνέπεια μέχρι και το δεκαπλασιασμό των απαιτούμενων επαναλήψεων. Η ζώνη ελαχίστου είναι στενότερη για τα γραμμικά συστήματα με τη μεγαλύτερη διάσταση.

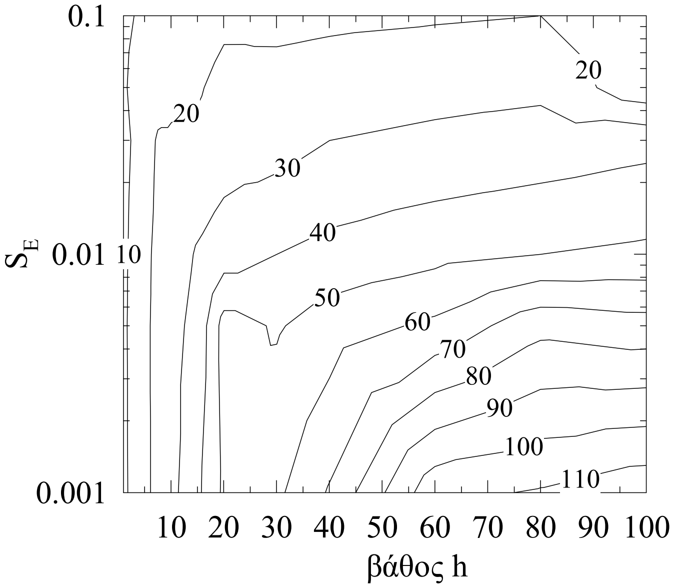


<u>Σχήμα 4.18.</u> Η μεταβολή του πλήθους των επαναλήψεων για τη σύγκλιση της μεθόδου SOR σαν συνάρτηση της παραμέτρου χαλάρωσης, ω, για γραμμικά συστήματα προβλήματα που προκύπτουν από 5 διαφορετικά προβλήματα (το κάθε πρόβλημα χαρακτηρίζεται από το βάθος h, τη συνάρτηση S_E και το πλήθος των σημείων).

Το βέλτιστο ω, δηλαδή η τιμή ω που θα επιταχύνει στο μέγιστο βαθμό τη σύγκλιση της επαναληπτικής μεθόδου μπορεί να προσδιοριστεί εμπειρικά εξετάζοντας τις παραμέτρους του προβλήματος που επιδρούν στην ταχύτητα σύγκλισης. Έτσι, εξετάστηκε η επίδραση του πλήθους των σημείων, του άνω ορίου ολοκλήρωσης, S_{end}, (ή καλύτερα του βάθους h) της συνάρτησης S_E και της αρχικής εκτίμησης της λύσης στο βέλτιστο ω. Το πλήθος των σημείων φαίνεται να μην επηρεάζει σημαντικά τη βέλτιστη τιμή του ω, ούτε το αντίστοιχο πλήθος επαναλήψεων. Σημειώνεται ότι δοκιμάστηκε πλήθος σημείων ικανό δώσει ικανοποιητική ακρίβεια στις υπολογιζόμενες τιμές. Ούτε η αρχική εκτίμηση της λύσης επιδρά σημαντικά στην βέλτιστη τιμή του ω και το αντίστοιχο πλήθος επαναλήψεων. Ωστόσο για διαφορετικές τιμές S_E, S_{end}(h) προκύπτουν διαφορετικές βέλτιστες τιμές για το ω. Η επίδραση των παραμέτρων h και S_E στο βέλτιστο ω και στον αντίστοιχο αριθμό επαναλήψεων περιγράφεται στα σχήματα 4.19 και 4.20. Έτσι, είναι δυνατός ο προσεγγιστικός προσδιορισμός του κατάλληλου ω για κάθε ζεύγος τιμών h, S_E στην περιοχή ενδιαφέροντος.



<u>Σχήμα 4.19.</u> *Ισοϋψείς της βέλτιστης τιμής της παραμέτρου σαν συνάρτηση του βάθους h και της τιμής της συνάρτησης S_E.*



<u>Σχήμα 4.20.</u> *Ισοϋψείς του πλήθους των επαναλήψεων που αντιστοιχούν στη βέλτιστη τιμή του ω σαν συνάρτηση του βάθους h και της τιμής της συνάρτησης S_E.*

Τα αποτελέσματα του σχήματος 4.19 προσαρμόστηκαν σε κατάλληλη συνάρτηση ώστε να είναι δυνατό να κωδικοποιηθούν. Έτσι, το βέλτιστο ωμέγα δίδεται από τη συνάρτηση:

$$\omega_{\beta\acute{\varepsilon}\lambda\tau\iota\sigma\tau o}(h, S_E) = \begin{Bmatrix} \left(a + \dfrac{b}{h}\right)\left[1 + c\log(S_E)\right], & S_E \neq 0 \\ d\log(h) + e \qquad , & S_E = 0 \end{Bmatrix} \tag{33}$$

όπου a=1.2692
b=-0.4118
c=-0.072
d=0.1387

e=1.3033

4.4.2. Οι άμεσες μέθοδοι

Οι άμεσες μέθοδοι μπορούν να δώσουν λύση στο γραμμικό σύστημα οποιαδήποτε κι αν είναι η μορφή του πίνακα ***A***. Βασικό πρόβλημα για τις άμεσες μεθόδους είναι τα σφάλματα στρογγυλοποίησης τα οποία γίνονται σημαντικά όταν η διάσταση του συστήματος είναι μεγάλη. Στον αλγόριθμο της παραγοντοποίησης που χρησιμοποιείται (παραγοντοποίηση του πίνακα ***A*** σε άνω και κάτω τριγωνικό-LU decomposition[1]) έχει εφαρμοστεί μερική οδήγηση (partial pivoting[1]), διαδικασία που μειώνει τα σφάλματα στρογγυλοποίησης.

Το πλήθος των εκτελέσεων του βρόγχου που περιέχει μια πρόσθεση και έναν πολλαπλασιασμό είναι περίπου $(1/3)N^3$ με τη μέθοδο παραγοντοποίησης που χρησιμοποιείται.

4.4.3 Αξιολόγηση

Ο πίνακας ***A*** του γραμμικού συστήματος στο οποίο οδηγεί η διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης εμφανίζει γενικά διαγώνια υπεροχή (εκτός από περιπτώσεις όπου το πλήθος των σημείων διακριτοποίησης είναι εξαιρετικά μικρό σε σχέση με το διάστημα ολοκλήρωσης) οπότε οι επαναληπτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται συγκλίνουν.

Στις περισσότερες των περιπτώσεων χρησιμοποιείται η μέθοδος SOR με παράμετρο ω. Αν όμως το πλήθος των επαναλήψεων ξεπερνά το N/3, όπου N η διάσταση του γραμμικού συστήματος, τότε η μέθοδος της παραγοντοποίησης είναι προτιμητέα.

Αναφορές

[1] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press, New York, 1988), p. 131-137, 39-45.
[2] L. Collatz*, The Numerical Treatment of Differential Equations* (3rd edition, Springer Verlag, Berlin, 1966), pp. 467-468.
[3] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, *2nd edition*, (Cambridge University Press, New York, 1997), p. 788-794, 866-869.
[4] K. E. Atkinson, *A survey of Numerical Methods for the Solution of Fredholm Integral Equations of the Second Kind*, (Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1976), p.54, 62, 103, 176
[5] A. Γ. Μπουντουβής, *Υπολογιστική Αναλύση με τη Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων. Εισαγωγικές Σημειώσεις*, (Αθήνα 1992), σελ. 26-31.
[6] V. K. Singh, E. S. G. Shaqfeh, and J. P. McVittie, J. Vac. Sci. Technol. **B 10**, 1992 (1091).
[7] L. M. Delves and J. L. Mohamed, Computational Methods for Integral Equations (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).
[8] *Solutions Methods for Integral Equations. Theory and Applications, Mathematical Concepts and Methods in Science and Engineering Vol. 18.,* (edited by M. A. Golberg, Plenum Press, New York, 1979).
[9] Γ. Σ. Παπαγεωργίου, *Θέματα Αριθμητικής Ανάλυσης*, (εκδόσεις Συμεών, Αθήνα, 1990), σελ. 239-262.
[10] G. Dahlquist and A. Bjorck, *Numerical Methods*, Translated by N. Anderson, (Prentice-Hall, New Jersey, 1974), p. 188-196.
[11] G.F. Forsythe, M.A. Malcolm, and C.B. Mole, *Αριθμητικές Μέθοδοι και Προγράμματα για Μαθηματικούς Υπολογισμούς*, (Πανεπιστημικές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 1993), σελ. 64.
[12] Κ. Χ. Γιαννάκογλου, *Υπόλογιστικές Τεχνικές και Αλγόριθμοι Επίλυσης. Βασικές Επαναληπτικές Μέθοδοι Επίλυσης Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων* (σημειώσεις στα πλαίσια του μαθήματος Προχωρημένες Υπολογιστικές Τεχνικές του Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών: Υπολογιστική Μηχανική, Αθήνα, 1999), σελ. 11.
[13] F. Scheid, *Αριθμητική Ανάλυση*, (McGraw-Hill, New York, ΕΣΠΙ, Αθήνα 1976), σελ. 341.

5

Σύζευξη των μοντέλων ελεύθερης επιφάνειας και υπολογισμού τοπικών τιμών ροής σε δομές

Περίληψη

Η εφαρμογή του μοντέλου ελεύθερης επιφάνειας Si, SiO_2 (2ο κεφάλαιο) στην εγχάραξη δομών απαιτεί τη σύζευξή του με το μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών. Με τη σύζευξη είναι δυνατό να υπολογιστεί ο ρυθμός εγχάραξης τοπικά σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής που εξετάζεται και να μελετηθεί η επίδραση του λόγου ασυμμετρίας της δομής στο ρυθμό εγχάραξης.

Περιεχόμενα

5.1 Εισαγωγή

Στο 3ο κεφάλαιο περιγράφηκε ένα μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών σε δομή αυλακιού ή οπής. Ο στόχος είναι η τροφοδότηση αυτών των τιμών στο μοντέλο εγχάραξης ελεύθερων επιφανειών (2ο κεφάλαιο) και ο υπολογισμός των τοπικών τιμών ρυθμού εγχάραξης. Η εφαρμογή των μοντέλων δεν είναι διαδοχική αφού για τον υπολογισμό των τοπικών τιμών ροής πρέπει να υπολογιστούν οι αντίστοιχοι συντελεστές προσκόλλησης δηλαδή να χρησιμοποιηθεί το μοντέλο ελεύθερων επιφανειών. Παρακάτω, αφού αναλυθεί το πρόβλημα υπολογισμού της ροής ουδετέρων ειδών, περιγράφεται ο αλγόριθμος σύζευξης και παρουσιάζονται αποτελέσματα της σύζευξης.

5.2 Σύζευξη μοντέλου ελεύθερης επιφάνειας με το μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών των ροών

Η πιο πολύπλοκη διαδικασία στη σύζευξη των δύο μοντέλων είναι ο υπολογισμός της ροής ουδετέρων ειδών που φτάνει σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της εγχαρασσόμενης δομής. Η πολυπλοκότητα υπολογισμού της ροής ουδετέρων σε σχέση με τον υπολογισμό της ροής των ιόντων έγκειται στο ότι στα πλαίσια του μοντέλου τα ουδέτερα είδη επανεκπέμπονται δηλαδή έχουν συντελεστές προσκόλλησης διαφορετικούς της μονάδας (οι οποίοι υπολογίζονται από το μοντέλο ελεύθερης επιφάνειας).

5.2.1 Το πρόβλημα υπολογισμού της ροής των ουδετέρων ειδών

Η ολοκληρωτική εξίσωση που δίνει τη συνολική ροή ουδέτερου είδους σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής είναι η εξής :

$$F(s) = F_{direct}(s) + \int_{0}^{S_{end}} g(s,s')\left[1 - S_E(s')\right]F(s')ds' \qquad (1)$$

Η συνολική ροή που φτάνει σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής εξαρτάται από τη συνάρτηση S_E. Στην μέχρι στιγμής ανάλυση έχει θεωρηθεί ότι η συνάρτηση S_E είναι μια γνωστή συνάρτηση του s. Στην πράξη όμως η συνάρτηση S_E εξαρτάται από τη σύσταση της στοιχειώδους επιφάνειας δηλαδή από τη ροή των ουδετέρων ειδών, καθώς και από τη ροή, τη σύσταση και την ενέργεια των ιόντων που φτάνουν στη στοιχειώδη επιφάνεια. Η συνάρτηση S_E καθορίζει αλλά και εξαρτάται από τη σύσταση της επιφάνειας δηλαδή από τη ροή των ουδετέρων ειδών. Το μοντέλο ελεύθερης επιφάνειας που αναπτύχθηκε στο 2ο κεφάλαιο παρέχει την δυνατότητα για υπολογισμό αυτής της συνάρτησης για τα άτομα F και τις ουδέτερες ρίζες CF_x. ***Ο ταυτόχρονος υπολογισμός της ροής ουδετέρων και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης (S_E) είναι το κεντρικό σημείο της σύζευξης***. Ο συντελεστής προσκόλλησης για τα άτομα F είναι:

$$\begin{aligned} S_{E,F} = {} & s_F(1-\theta_{TOT}) + s_{F/P}(1-\theta_{TOT/P})\,\theta_P + \\ & + K_{(T)}(1-\theta_{CFx}-\theta_P) + \\ & + K_{REC}\,\theta_{CFx} + K_{REC}\theta_{CFx/P}\,\theta_P \end{aligned} \qquad (2)$$

Ο συντελεστής προσκόλλησης για τις ουδέτερες ρίζες CF_x είναι:

$$S_{E,CFx} = s_{CFx}(1 - \theta_{TOT}) + s_{CFx/P}(1 - \theta_{TOT/P})\,\theta_P \; -$$
$$- (2/3)\, K_{REC}\, \theta_{CFx}\, (j_F / j_{CFx}) - (2/3)\, K_{REC} \theta_{CFx/P}\, \theta_P\, (j_F / j_{CFx}) \qquad (3)$$

Μπορούμε να γράψουμε ότι

$$S_{E,F} = S_{E,F}\,(j_F, j_{CFx}, j_{ION}, E, x_i) = S_{E,F}\,(F_F, F_{CFx}, F_{ION}, E, x_i) \qquad (4)$$

$$S_{E,CFx}=S_{E,CFx}\,(j_F, j_{CFx}, j_{ION}, E, x_i) = S_{E,CFx}\,(F_F, F_{CFx}, F_{ION}, E, x_i) \qquad (5)$$

Οι συντελεστές προσκόλλησης εξαρτώνται από κάθε ανεξάρτητη μεταβλητή του μοντέλου εγχάραξης ελεύθερων επιφανειών δηλαδή από τις ροές των ουδετέρων ειδών, j_F , j_{CFx}, από τη ροή, j_{ION}, την ενέργεια, E, και τη σύσταση x_i των ιόντων. F_F και F_{CFx}, F_{ION} είναι οι κανονικοποιημένες ροές ουδετέρων ειδών και ιόντων ως προς τις αντίστοιχες ροές σε ελεύθερη επιφάνεια.

Συνεπώς το μοντέλο υπολογισμού των ροών των ουδετέρων ειδών αποτελείται από τις εξισώσεις:

$$F_F(s) = F_{direct,F}(s) +$$
$$+ \int_0^{S_{end}} g(s,s')\left\{1 - S_{E,F}\left[F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right]\right\} F_F(s')ds' \qquad (6)$$

$$F_{CFx}(s) = F_{direct,CFx}(s) +$$
$$+ \int_0^{S_{end}} g(s,s')\left\{1 - S_{E,CFx}\left[F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right]\right\} F_{CFx}(s')ds' \qquad (7)$$

ή

$$F_F(s) = F_{direct,F}(s) \; +$$
$$+ \int_0^{S_{end}} K_F\left[s, s', F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right] F_F(s')ds' \qquad (8)$$

$$F_{CFx}(s) = F_{direct,CFx}(s) +$$
$$+ \int_0^{S_{end}} K_{CFx}\left[s, s', F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right] F_{CFx}(s')ds' \qquad (9)$$

όπου

$$K_F\left[s, s', F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right] \quad =$$
$$= g(s,s')\left\{1 - S_{E,F}\left[F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right]\right\} \qquad (10)$$

$$K_{CFx}\left[s, s', F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right] \; =$$
$$= \; g(s,s')\left\{1 - S_{E,CFx}\left[s, s', F_F(s'), F_{CFx}(s'), F_{ION}(s'), E(s'), x_i(s')\right]\right\} \qquad (11)$$

Το πρόβλημα υπολογισμού της ροής των ουδετέρων ειδών ανάγεται στην επίλυση ενός συστήματος δύο μη ομογενών και μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων τύπου Fredholm 2ου είδους.

5.2.2 Γενίκευση του προβλήματος υπολογισμού της ροής

Αν το πλήθος των ουδετέρων ειδών είναι N, τότε για τον υπολογισμό της ροής όλων των ειδών θα πρέπει να λυθεί ένα σύστημα N μη ομογενών και μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων τύπου Fredholm 2ου είδους. Ο γεωμετρικός όρος g(s,s′) των ολοκληρωτικών εξισώσεων εξαρτάται, εκτός από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της δομής, από το μηχανισμό επανεκπομπής που θεωρείται. Τόσο τα άτομα F όσο και οι ουδέτερες ρίζες CF_x θεωρείται ότι επανεκπέμπονται με μηχανισμό diffuse re-emission, για αυτό το λόγο και οι γεωμετρικοί όροι στις εξισώσεις (10) και (11) είναι ταυτόσημοι. Αν ο μηχανισμός επανεκπομπής για τα δύο ουδέτερα είδη ήταν διαφορετικός, τότε οι πυρήνες των αντίστοιχων ολοκληρωτικών εξισώσεων θα διέφεραν και στο γεωμετρικό όρο g(s,s′). Στο σύστημα των ολοκληρωτικών εξισώσεων μπορούν να περιληφθούν και τα ιόντα εφόσον θεωρηθεί ότι αυτά επανεκπέμπονται με κάποιο μηχανισμό (π.χ. ανάκλαση). ***Το γενικό πρόβλημα υπολογισμού των τοπικών τιμών της ροής N το πλήθος ειδών σωματιδίων (ουδετέρων ειδών και ιόντων) περιγράφεται από σύστημα N μη ομογενών και μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2ου είδους:***

$$F_i(s) = F_{direct,i}(s) + \\ + \int_0^{S_{end}} K_i\left[s, s', F_1(s'), F_2(s'), \dots, F_N(s')\right] F_i(s')ds' \;,\; i=1,2,\dots,N \qquad (12)$$

όπου

$$K_i\left[s, s', F_1(s'), F_2(s'), \dots, F_N(s')\right] = \\ = g_i(s,s')\left\{1 - S_{E,i}\left[s, s', F_1(s'), F_2(s'), \dots, F_N(s')\right]\right\} \qquad (13)$$

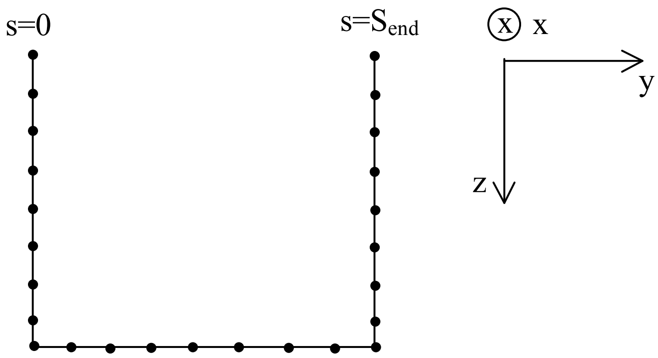
και $F_{direct,i}$ είναι η ροή των σωματιδίων i απευθείας από τον κυρίως όγκο του πλάσματος. Εκφράζει την επίδραση της σκίασης στη ροή του σωματιδίων και εξαρτάται από την κατανομή κατευθύνσεων και ταχυτήτων των σωματιδίων,

$g_i(s,s')$ γεωμετρικός όρος που εξαρτάται (εκτός από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της δομής) από το μηχανισμό επανεκπομπής των σωματιδίων i,

$S_{E,i}$ ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των σωματιδίων i.

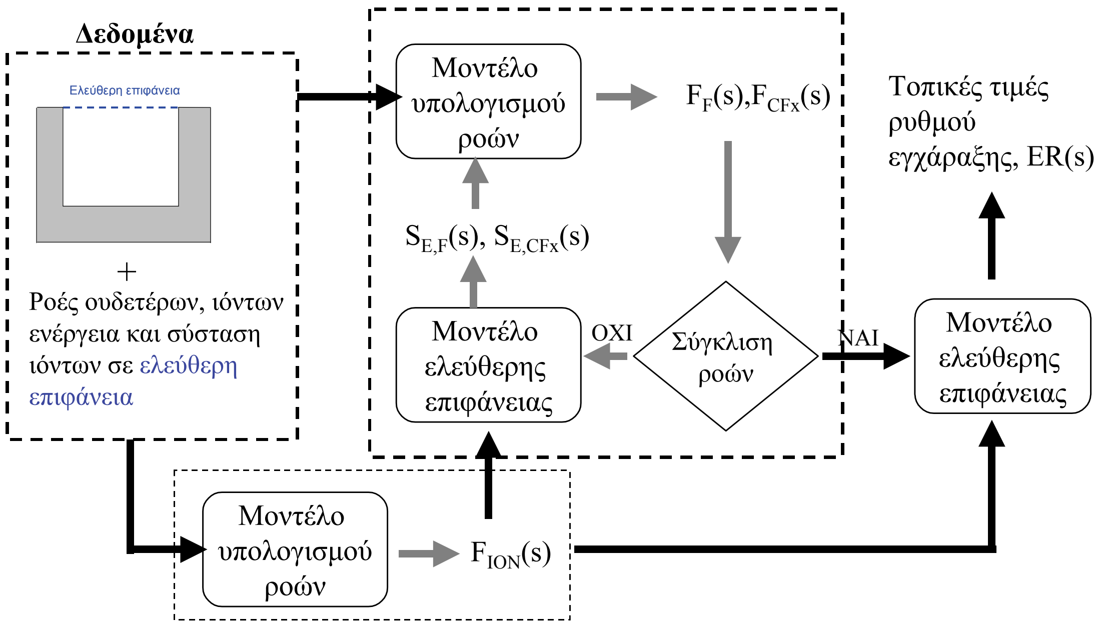
5.2.3 Ο αλγόριθμος

Τα δεδομένα για τον υπολογισμό του τοπικού ρυθμού εγχάραξης είναι οι ροές ουδετέρων ειδών, καθώς και η ροή, η ενέργεια και η σύσταση των ιόντων. Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιείται περιγράφεται παρακάτω (σχήμα 5.2).



Σχήμα 5.1. Διαμέριση του διαστήματος ολοκλήρωσης [0, S_{end}].

Αφού γίνει διαμέριση του προφίλ της δομής (π.χ. αυλάκι) στο επίπεδο yz υπολογίζεται η ενέργεια και η σύσταση των ιόντων σε κάθε ένα από τα σημεία. Η επιφάνεια της εγχαρασσόμενης δομής θεωρείται ισοδυναμική και επομένως η ενέργεια των ιόντων είναι ομοιόμορφη, σταθερή και ίση με την αντίστοιχη τιμή σε ελεύθερη επιφάνεια σε κάθε σημείο. Ομοιόμορφη και σταθερή σε κάθε σημείο θεωρείται και η σύσταση των ιόντων. Το επόμενο βήμα είναι ο υπολογισμός της ροής των ιόντων σε κάθε σημείο της διαμέρισης με βάση τις αντίστοιχες εξισώσεις. Αμέσως μετά υπολογίζονται οι ροές των ουδετέρων ειδών μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας: υπολογίζεται η ροή των ουδετέρων ειδών (ριζών CF_x, ατόμων F) : θεωρούμε σαν πρώτη προσέγγιση ότι οι συνολικές ροές ουδετέρων ειδών (F_F, F_{CFx}) σε κάθε σημείο είναι οι ροές από τον κυρίως όγκο του πλάσματος ($F_{direct,F}$, $F_{direct,CFx}$). Υπολογίζουμε με βάση αυτές τις ροές τις συναρτήσεις $S_{E,F}$ και $S_{E,CFx}$ από τις



Σχήμα 5.2. Σχηματική παράσταση του αλγόριθμου σύζευξης των μοντέλων ελεύθερης επιφάνειας και υπολογισμού των τοπικών τιμών των ροών.

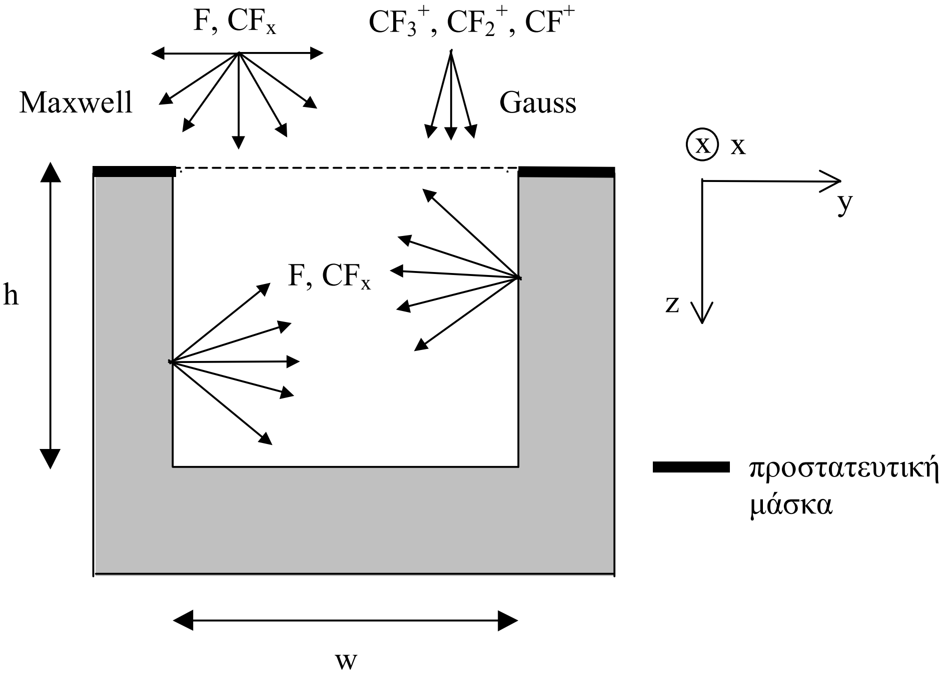
εξισώσεις (2) και (3) και στη συνέχεια από τις ολοκληρωτικές εξισώσεις (8) και (9) νέες εκτιμήσεις για τις ροές ουδετέρων ειδών που φτάνουν σε κάθε σημείο. Συγκρίνουμε τις νέες τιμές ροών με αυτές που θεωρήθηκαν για τον υπολογισμό των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης. Αν διαφέρουν περισσότερο από κάποιο όριο ανοχής, τότε επαναλαμβάνουμε τους υπολογισμούς των $S_{E,F}$, $S_{E,CFx}$ θεωρώντας ότι οι συνολικές ροές ουδετέρων που φτάνουν σε κάθε σημείο είναι οι νέες εκτιμήσεις. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση μεταξύ των θεωρούμενων και υπολογιζόμενων ροών. Όταν επιτευχθεί σύγκλιση, οι τοπικές τιμές όλων των ανεξάρτητων μεταβλητών του μοντέλου εγχάραξης θα είναι γνωστές και επομένως ο τοπικός ρυθμός εγχάραξης είναι εύκολο να υπολογιστεί εφαρμόζοντας το μοντέλο εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας.

Σημειώνεται ότι κατά την επαναληπτική διαδικασία του αλγόριθμου ***επιλύονται σε κάθε επανάληψη δύο ολοκληρωτικές εξισώσεις γραμμικές (και όχι μη γραμμικές) αφού η συναρτήσεις S_E προσδιορίζονται πριν από τη λύση των ολοκληρωτικών εξισώσεων***. Τα κύρια βήματα του αλγόριθμου περιγράφονται στο σχήμα 5.2.

5.3 Αποτελέσματα

5.3.1 Καθορισμός των παραμέτρων του προβλήματος

Έστω ότι η προς εγχάραξη δομή είναι αυλάκι SiO_2 (ή Si) ορθογωνικής διατομής (σχήμα 5.3). Επίσης, έστω ότι η διάσταση κατά τον άξονα x είναι πολύ μεγαλύτερη από τις άλλες δύο, ώστε να μπορεί να θεωρηθεί άπειρη. Το βάθος του αυλακιού είναι h και το πλάτος του είναι w.



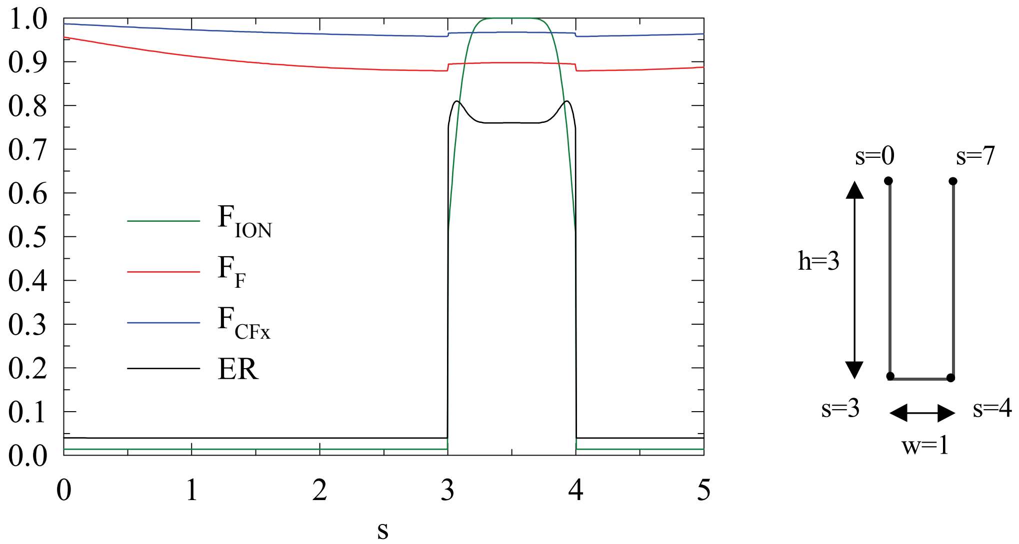
Σχήμα 5.3. Αυλάκι με πολύ μεγάλη διάσταση (σε σχέση με τις άλλες δύο) κατά τη διεύθυνση x. Η τομή του στο επίπεδο yz δεν αλλάζει κατά τη διεύθυνση x. Τα ιόντα που εισέρχονται σε αυτό ακολουθούν κατανομή κατευθύνσεων Gauss με τυπική απόκλιση σ και τα ουδέτερα είδη κατανομή Maxwell-Boltzmann. Φαινόμενα επανεκπομπής της ροής των ουδετέρων ειδών συμβαίνουν εντός του αυλακιού.

Η ροή των ιόντων (CF_3^+, CF_2^+, CF^+) εμφανίζει κανονική κατανομή κατευθύνσεων (Gauss με τυπική απόκλιση σ) γύρω από την κατεύθυνση που ορίζεται από τον άξονα z και θεωρείται ότι δεν επανεκπέμπεται, επομένως ότι φτάνει στην επιφάνεια από τον κυρίως όγκο του πλάσματος κολλά σε αυτή. Οι ροές ουδετέρων που φτάνουν στην επιφάνεια είναι δύο ειδών : η ροή των ουδετέρων ριζών CF_x και η ροή των ατόμων F. Και για τα δύο ουδέτερα είδη θεωρείται ισοτροπική κατανομή κατευθύνσεων. Ο συντελεστής προσκόλλησής τους στην επιφάνεια θεωρείται διαφορετικός από τη μονάδα και επανεκπέμπονται με μηχανισμό diffuse re-emission. Η πίεση στο αυλάκι είναι τόσο χαμηλή ώστε μας επιτρέπει να αγνοήσουμε τις συγκρούσεις σωματιδίων (ουδετέρων ειδών, ιόντων) μεταξύ τους. Θεωρείται επίσης ότι το ελέγχον στάδιο στη συνολική διεργασία είναι η εγχάραξη της επιφάνειας.

Τέλος, θεωρούνται γνωστές (ή τα δεδομένα του προβλήματος είναι) η ροή ουδετέρων ειδών και η ροή, η σύσταση και η ενέργεια των ιόντων που φτάνουν στη νοητή ελεύθερη επιφάνεια (διακεκομμένη γραμμή στο σχήμα 5.3) στην είσοδο του αυλακιού. Από εδώ και στο εξής όταν γράφουμε ελεύθερη επιφάνεια θα θεωρούμε αυτή την νοητή επιφάνεια. Η σύσταση και η ενέργεια των ιόντων θεωρούμε ότι είναι ομοιόμορφες και σταθερές συναρτήσεις στο χώρο του αυλακιού.

5.3.2 Τοπικές τιμές ροής και ρυθμού εγχάραξης σε αυλάκι

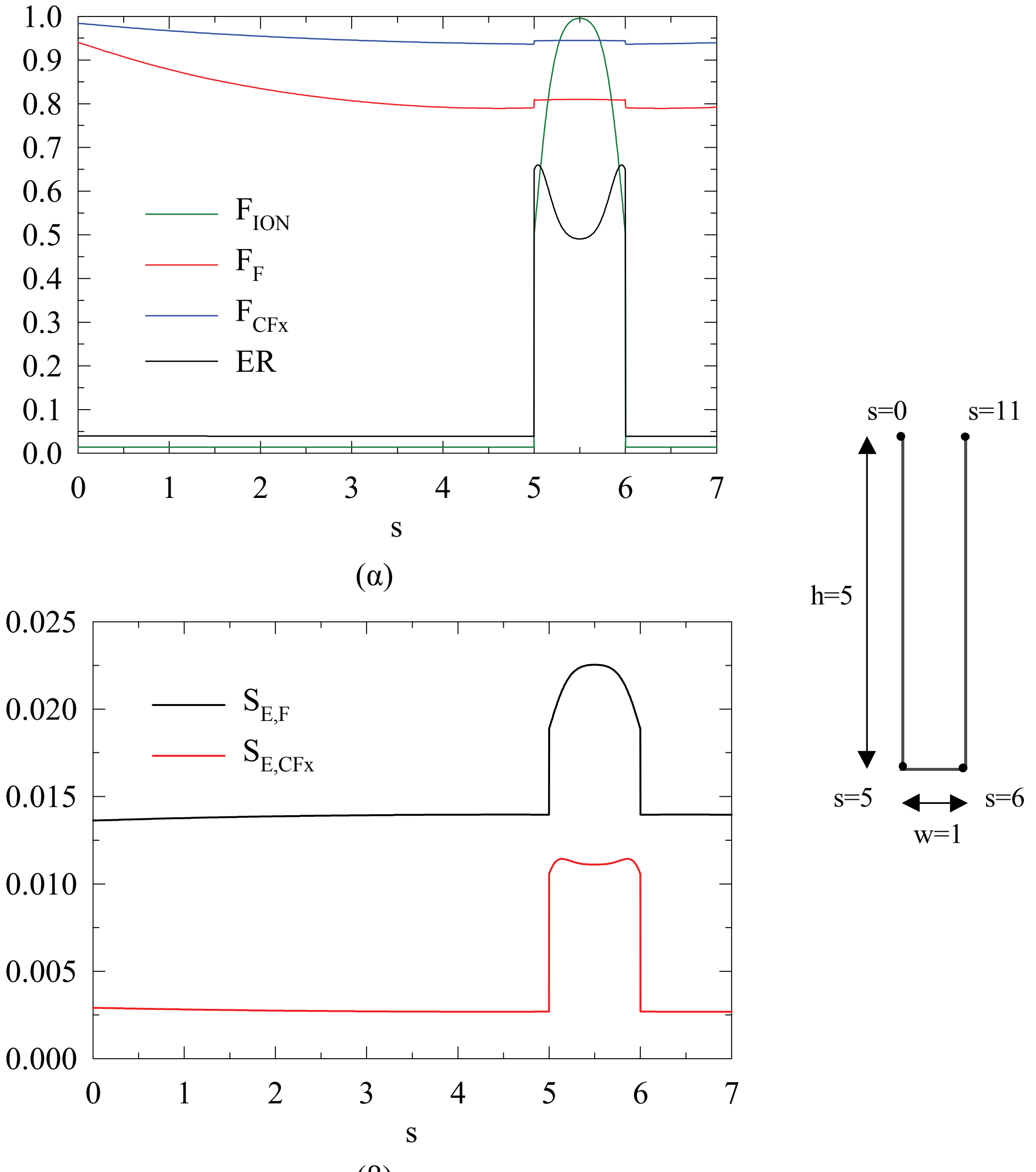
Στο σχήμα 5.4 φαίνονται οι τοπικές τιμές της ροής ιόντων, ουδετέρων ειδών καθώς και του ρυθμού εγχάραξης για αυλάκι SiO_2 βάθους h=3 και πλάτους w=1. Οι τιμές όλων των μεγεθών που απεικονίζονται στο διάγραμμα είναι κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες στην ελεύθερη επιφάνεια. Η μεταβολή της ροής ιόντων και του ρυθμού εγχάραξης καθώς περνάμε από το πλάγιο τοίχωμα στη βάση του αυλακιού είναι απότομη. Η σημαντική διαφορά στις τιμές της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών οφείλεται στο ότι τα ιόντα δεν επανεκπέμπονται καθώς και στη διαφορά στις κατανομές κατευθύνσεων (ισοτροπική για τα ουδέτερα είδη και κανονική με μικρή τυπική απόκλιση για τα ιόντα).



<u>Σχήμα 5.4.</u> Η ροή ιόντων, $F_{ION}(s)$, ατόμων F, $F_F(s)$, και ουδετέρων ριζών CF_x, $F_{CFx}(s)$ καθώς και ο ρυθμός εγχάραξης ER(s) κατά μήκος του προφίλ αυλακιού SiO_2 με βάθος h=3 πλάτος w=1. Όλες οι τιμές είναι κανονικοποποιημένες ως προς τις αντίστοιχες σε ελεύθερη επιφάνεια (π.χ. $F_F=j_{S,F}/j_{S,F,0}$). Συνθήκες : η ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $j_{S,ION,0}$, η ροή ατόμων F και ουδετέρων ριζών CF_x ελεύθερη επιφάνεια είναι $6j_{S,ION,0}$ και $10j_{S,ION,0}$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της

δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.

Στο σχήμα 5.5α φαίνονται οι τοπικές τιμές της ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών, του ρυθμού εγχάραξης και στο 5.5β οι τοπικές τιμές των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης των ουδετέρων ειδών για αυλάκι SiO_2 βάθους h=5 και πλάτους w=1. Οι φαινόμενοι συντελεστές στο πλάγιο τοίχωμα του αυλακιού δεν εμφανίζουν σημαντικές μεταβολές. Συγκρίνοντας τους ρυθμούς εγχάραξης στη βάση των αυλακιών των σχημάτων 5.4 και 5.5α (όλες οι παράμετροι των προβλημάτων είναι ίδιες εκτός από το βάθος του αυλακιού), είναι φανερό ότι ο ρυθμός εγχάραξης στο στενότερο αυλάκι είναι μικρότερος. Τα αίτια αυτής της διαφοράς θα εξεταστούν στην επόμενη παράγραφο.



(β)

<u>Σχήμα 5.5.</u> α) Η ροή ιόντων, $F_{ION}(s)$, ατόμων F, $F_F(s)$, και ουδετέρων ριζών CF_x, $F_{CFx}(s)$ καθώς και ο ρυθμός εγχάραξης ER(s) και β) οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ατόμων F, $S_{E,F}$, και των ουδετέρων ριζών CF_x, $S_{E,CFx}$ κατά μήκος του προφίλ αυλακιού SiO_2 με βάθος h=5 πλάτος w=1. Οι ροές και ο ρυθμός εγχάραξης είναι κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες σε ελεύθερη επιφάνεια (π.χ.

$F_F=j_{S,F}/j_{S,F,0}$). Συνθήκες: η ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $j_{S,ION,0}$, η ροή ατόμων F και ουδετέρων ριζών CF_x ελεύθερη επιφάνεια είναι $6j_{S,ION,0}$ και $10j_{S,ION,0}$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι $10\%CF_3^+$, $85\%CF_2^+$, $5\%CF^+$ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.

5.3.3 Εξάρτηση της ροής και του ρυθμού εγχάραξης από το λόγο ασυμμετρίας

Η διαφορά που παρατηρείται στις τιμές του ρυθμού εγχάραξης στη βάση των δύο αυλακιών με διαφορετικό βάθος (σχήματα 5.4 και 5.5) μπορεί να οφείλεται είτε στις απόλυτες διαστάσεις του αυλακιού (βάθος και πλάτος) είτε *στο λόγο ασυμμετρίας (λόγος βάθους προς πλάτος)* αφού κάθε άλλη παράμετρος εκτός του βάθους είναι η ίδια και για τα δύο προβλήματα.

Οι παράμετροι που επηρεάζουν το ρυθμό εγχάραξης είναι η ροή ουδετέρων ειδών καθώς και η ροή, η σύσταση και ενέργεια των ιόντων. Αν αυτές οι παράμετροι εξαρτώνται από το λόγο ασυμμετρίας, τότε και ο ρυθμός εγχάραξης θα είναι συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας.

Στη θεώρηση που έχει γίνει η ενέργεια και η σύσταση των ιόντων είναι ομοιόμορφες και σταθερές στο χώρο συναρτήσεις. Η ροή ιόντων, για τον υπολογισμό της οποίας λαμβάνεται υπόψη μόνο το φαινόμενο σκίασης της ροής, εξαρτάται από το λόγο ασυμμετρίας του αυλακιού. Αυτό προκύπτει από την εξέταση των εξισώσεων που δίνουν το πεδίο ροής ιόντων (εξισώσεις 66-68, 3ο κεφάλαιο) καθώς και των εξισώσεων που δίνουν τη στερεά γωνία (εξισώσεις 11-18, 3ο κεφάλαιο) επί της οποίας γίνεται η ολοκλήρωση για τον υπολογισμό της ροής ιόντων. Το συμπέρασμα αυτό είναι σύμφωνο με τη διαπίστωση των Gottscho et al.[1] ότι η σκίαση της ροής είναι μία από τις αιτίες της εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το λόγο ασυμμετρίας. Η ροή ουδετέρων ειδών υπολογίζεται από την ολοκληρωτική εξίσωση:

$$F(s) = F_{direct}(s) + \int_0^{S_{end}} g(s,s')\left[1 - S_E(s')\right]F(s')ds' \qquad (14)$$

Η συνάρτηση F_{direct} εκφράζει την επίδραση της σκίασης στη ροή ουδετέρων και εξαρτάται από το λόγο ασυμμετρίας του αυλακιού για τον ίδιο λόγο με τη ροή ιόντων. Ο γεωμετρικός όρος είναι επίσης εξάρτηση του λόγου ασυμμετρίας του αυλακιού (εξίσωση 87, 3ο κεφάλαιο). Επομένως το αν η ροή των ουδετέρων είναι συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας εξαρτάται από τη συνάρτηση S_E. Αν η S_E είναι συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, τότε και η ροή ουδετέρων θα είναι συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας. Σύμφωνα με το αντίστοιχο μοντέλο υπολογισμού (εξισώσεις 2-3), η S_E εξαρτάται από τη ροή, σύσταση και ενέργεια των ιόντων (παράμετροι που εξαρτώνται από το λόγο ασυμμετρίας) καθώς και από τη ροή ουδετέρων ειδών. Συνεπώς, η ροή ουδετέρων υπολογίζεται μέσω μιας εξίσωσης που περιέχει όρους-συναρτήσεις του λόγου ασυμμετρίας του αυλακιού. Άρα η ροή ουδετέρων ειδών εξαρτάται από το λόγο ασυμμετρίας του αυλακιού.

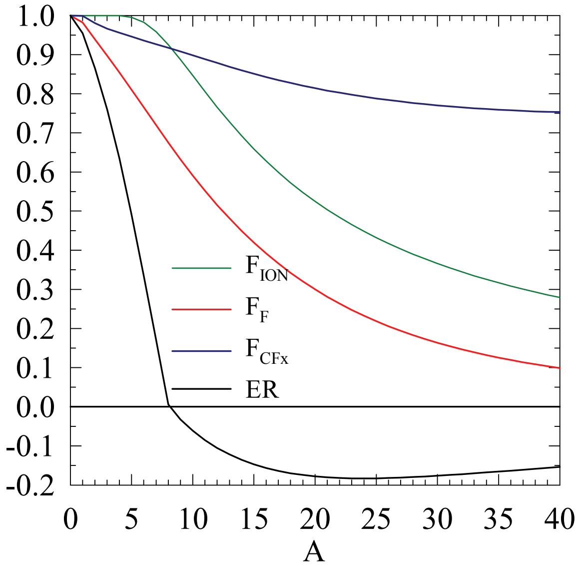
Όλες οι παράμετροι του μοντέλου που επηρεάζουν το ρυθμό εγχάραξης εξαρτώνται από το λόγο ασυμμετρίας του αυλακιού. Συνεπώς, και ο ρυθμός εγχάραξης που προβλέπει το μοντέλο είναι συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας. Για αυτό το λόγο στα διαγράμματα που ακολουθούν η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι ο λόγος ασυμμετρίας των αυλακιών.

Στο σχήμα 5.6α φαίνεται η ροή ιόντων, ουδετέρων ειδών που φτάνει στο κέντρο της βάσης αυλακιών SiO_2 με διαφορετικό βάθος ή καλύτερα με διαφορετικό λόγο ασυμμετρίας, Α. Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται και ο ρυθμός εγχάραξης για το ίδιο σημείο. Όλες οι τιμές είναι κανονικοποιημένες ως τις αντίστοιχες σε ελεύθερη επιφάνεια. Στο σχήμα 5.6β φαίνονται οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) καθώς και η πορεία (A→B) που ορίζουν οι μεταβαλλόμενοι με το λόγο ασυμμετρίας λόγοι R_F,R_{CFx} (R=ροή ουδετέρων ειδών / ροή ιόντων) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού. Οι λόγοι R_F, R_{CFx} σε ελεύθερη επιφάνεια ($R_{F,0} = j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}$, $R_{CFx,0} = j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}$), όπου ο λόγος ασυμμετρίας είναι 0, είναι 6 και 10 αντίστοιχα (σημείο Α). Μεταβάλλονται καθώς αλλάζει ο λόγος ασυμμετρίας και φτάνουν στις τιμές 2.1 και 27.0 (σημείο Β) όταν ο λόγος ασυμμετρίας γίνει 40. ***Η μείωση του ρυθμού εγχάραξης με την αύξηση του λόγου ασυμμετρίας οφείλεται τόσο στη μείωση της απόδοσης εγχάραξης όσο και στη μείωση της ροής ιόντων*** *(ο ρυθμός εγχάραξης είναι ανάλογος της ροής ιόντων).*

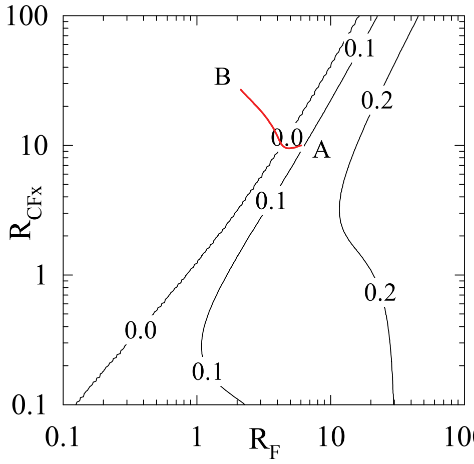
Στο σχήμα 5.6γ φαίνεται η μεταβολή των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης των F, CF_x στο πλάγιο τοίχωμα και στη βάση του αυλακιού για λόγους ασυμμετρίας από 0 έως 40. Οι τιμές των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης που φαίνονται στο διάγραμμα αφορούν το μέσο του πλάγιου τοιχώματος και το κέντρο της βάσης και μπορούν να θεωρηθούν αντιπροσωπευτικές του τμήματος στο οποίο αναφέρονται. Τόσο στο πλάγιο τοίχωμα όσο και στη βάση του αυλακιού οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης παραμένουν σχεδόν σταθεροί (σχήμα 5.4β).

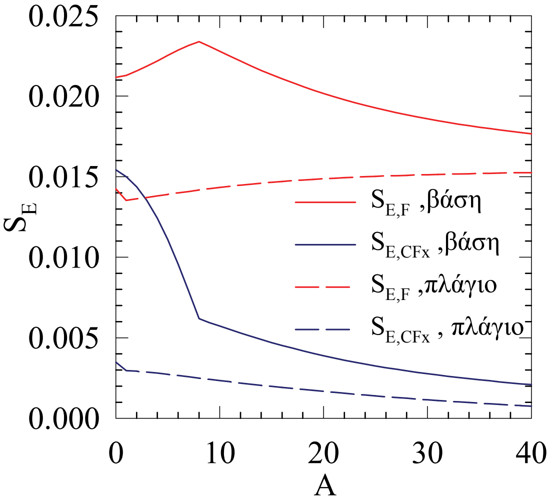
Στο σχήμα 5.7 φαίνονται τα ίδια αποτελέσματα με το 5.6 για διαφορετικές συνθήκες (χαμηλές τιμές $R_{F,0}$ και $R_{CFx,0}$). *Στο σχήμα 5.7β φαίνεται ότι η πορεία του ζεύγους (R_F,R_{CFx}) καθώς αυξάνεται ο λόγος ασυμμετρίας είναι διαφορετική από αυτή του 5.6β: η απόδοση εγχάραξης SiO_2 αυξάνεται με την αύξηση του λόγου ασυμμετρίας. Ωστόσο από το διάγραμμα 5.7α φαίνεται ότι ο ρυθμός εγχάραξης μειώνεται με την αύξηση του λόγου ασυμμετρίας.* ***Η μείωση του ρυθμού εγχάραξης οφείλεται στη μείωση της ροής ιόντων*** *(ο ρυθμός εγχάραξης είναι ανάλογος της ροής ιόντων).*

Τόσο στο σχήμα 5.6 όσο και στο σχήμα 5.7 αυτό που φαίνεται είναι ότι *στενότερα αυλάκια (αυλάκια με μεγαλύτερο λόγο ασυμμετρίας) εγχαράσσονται με μικρότερο ρυθμό. Προβλέπεται δηλαδή το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης που παρατηρείται πειραματικά.* Στις επόμενες παραγράφους εξετάζεται η επίδραση διαφόρων παραμέτρων στη συνάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το λόγο ασυμμετρίας.



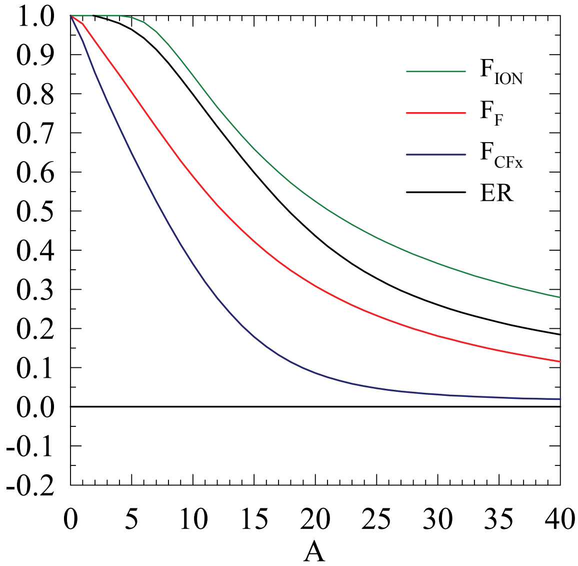
(α)



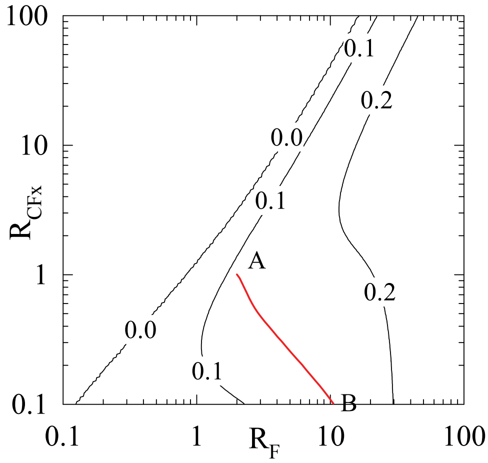


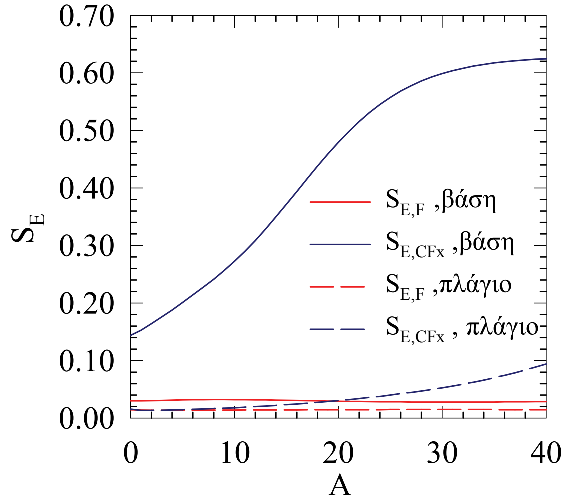
(β) (γ)

<u>Σχήμα 5.6.</u> α) Η ροή ιόντων, F_{ION}, ατόμων F, F_F, και ουδετέρων ριζών CF_x, F_{CFx}, καθώς και ο ρυθμός εγχάραξης ER στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, A, του αυλακιού. Οι ροές και ο ρυθμός εγχάραξης είναι κανονικοποποιημένες ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια (π.χ. $F_F=j_{S,F}/j_{S,F,0}$) β) Οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) σαν συνάρτηση των λόγων R_F ($j_{S,F}/j_{S,ION}$), R_{CFx} ($j_{S,CFx}/j_{S,ION}$) καθώς και η πορεία μεταβολής του ζεύγους (R_F, R_{CFx}) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού καθώς μεταβάλλεται ο λόγος ασυμμετρίας (πορεία από το A στο B). γ) Οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των F, CF_x στη βάση και στο πλάγιο τοίχωμα του αυλακιού σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας. Συνθήκες : οι λόγοι ροής ουδετέρων προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=6$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.



(α)



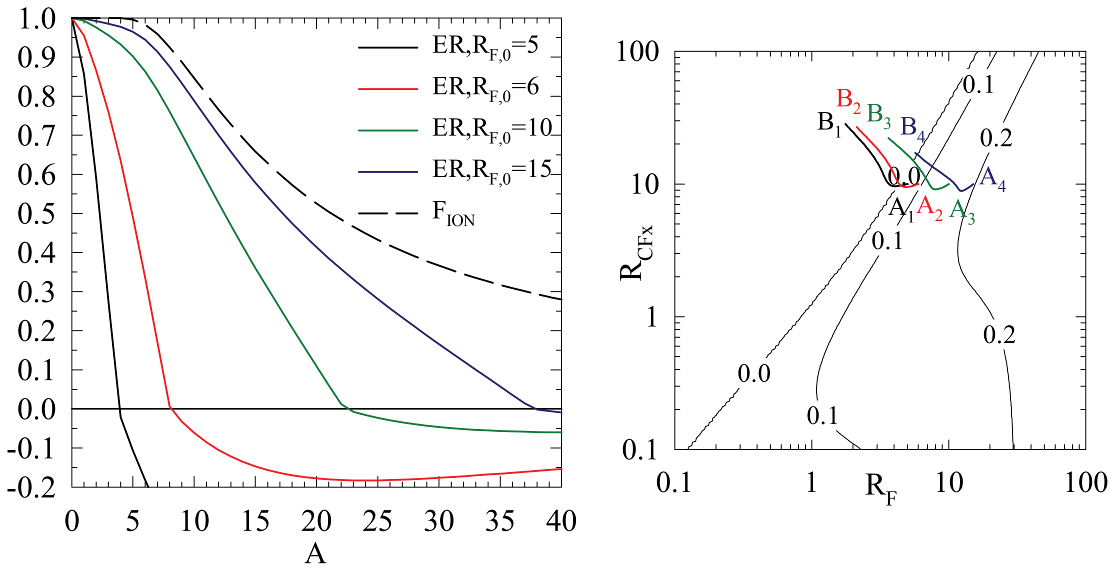


(β) (γ)

<u>Σχήμα 5.7.</u> α) Η ροή ιόντων, F_{ION}, ατόμων F, F_F, και ουδετέρων ριζών CF_x, F_{CFx}, καθώς και ο ρυθμός εγχάραξης ER στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, A, του αυλακιού. Οι ροές και ο ρυθμός εγχάραξης είναι κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια (π.χ. $F_F=j_{S,F}/j_{S,F,0}$) β) Οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) σαν συνάρτηση των λόγων R_F ($j_{S,F}/j_{S,ION}$), R_{CFx} ($j_{S,CFx}/j_{S,ION}$) καθώς και η πορεία μεταβολής του ζεύγους (R_F, R_{CFx}) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού καθώς μεταβάλλεται ο λόγος ασυμμετρίας (πορεία από το A στο B). γ) Οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των F, CF_x στη βάση και στο πλάγιο τοίχωμα του αυλακιού σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας. Συνθήκες: οι λόγοι ροής ουδετέρων προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=2$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=1$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.

5.3.3.1 Η επίδραση της ροής ατόμων F

Στο σχήμα 5.8α φαίνεται η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας του αυλακιού για διαφορετικές τιμές του λόγου $R_{F,0}$ (ροή ατόμων F προς ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια). Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται και η μεταβολή της ροής ιόντων σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας η οποία δεν επηρεάζεται από τη μεταβολή του λόγου $R_{F,0}$. Παρατηρείται ότι αύξηση της σχετικής ροής των ατόμων F (του λόγου $R_{F,0}$) μετακινεί το λόγο ασυμμετρίας στον οποίο συμβαίνει μετάβαση σε μεγαλύτερες τιμές. Στο σχήμα 5.8β φαίνονται οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης καθώς και οι πορείες από εγχάραξη σε εναπόθεση για τις διαφορετικές τιμές $R_{F,0}$ ($A_1 \rightarrow B_1$ για $R_{F,0}$=5, $A_2 \rightarrow B_2$ για $R_{F,0}$=6, $A_3 \rightarrow B_3$ για $R_{F,0}$=10, $A_4 \rightarrow B_4$ για $R_{F,0}$=15). Σε κάθε περίπτωση ***η μείωση του ρυθμού εγχάραξης οφείλεται στη μείωση τόσο της απόδοσης εγχάραξης όσο και της ροής ιόντων***.

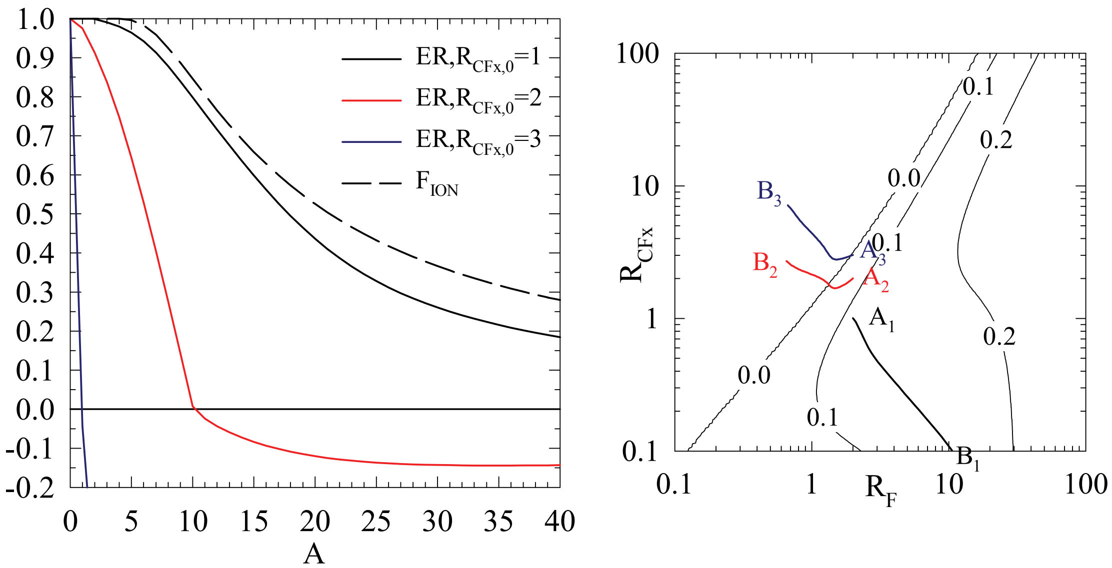


(α) (β)

<u>Σχήμα 5.8.</u> α) Ο ρυθμός εγχάραξης, ER, και η ροή ιόντων, F_{ION}, (κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια) στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, A, του αυλακιού για διαφορετικές τιμές (5, 6, 10, 15) του λόγου ροής ατόμων F προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια, $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}$. β) Οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) σαν συνάρτηση των λόγων R_F ($j_{S,F}/j_{S,ION}$), R_{CFx} ($j_{S,CFx}/j_{S,ION}$) καθώς και οι πορείες μεταβολής των ζευγών (R_F, R_{CFx}) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού καθώς μεταβάλλεται ο λόγος ασυμμετρίας (πορείες από τα A_1,A_2,A_3,A_4 στα B_1,B_2,B_3,B_4). Συνθήκες : ο λόγος ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.

5.3.3.2 Η επίδραση της ροής ουδετέρων ριζών CF_x

Στο σχήμα 5.9α φαίνεται η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας του αυλακιού για διαφορετικές τιμές του λόγου $R_{CFx,0}$ (ροή ουδετέρων ριζών CF_x προς ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια). Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται και η μεταβολή της ροής ιόντων σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας η οποία δεν επηρεάζεται από τη μεταβολή του λόγου $R_{CFx,0}$. Παρατηρείται ότι αύξηση της σχετικής ροής των ουδετέρων ριζών CF_x (του λόγου $R_{CFx,0}$) μετακινεί το λόγο ασυμμετρίας στον οποίο συμβαίνει μετάβαση σε μικρότερες τιμές. Στο σχήμα 5.9β φαίνονται οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης καθώς και οι πορείες από εγχάραξη σε εναπόθεση για τις διαφορετικές τιμές $R_{CFx,0}$ ($A_1 \rightarrow B_1$ για $R_{CFx,0}$=1, $A_2 \rightarrow B_2$ για $R_{CFx,0}$=2, $A_3 \rightarrow B_3$ για $R_{CFx,0}$=3).

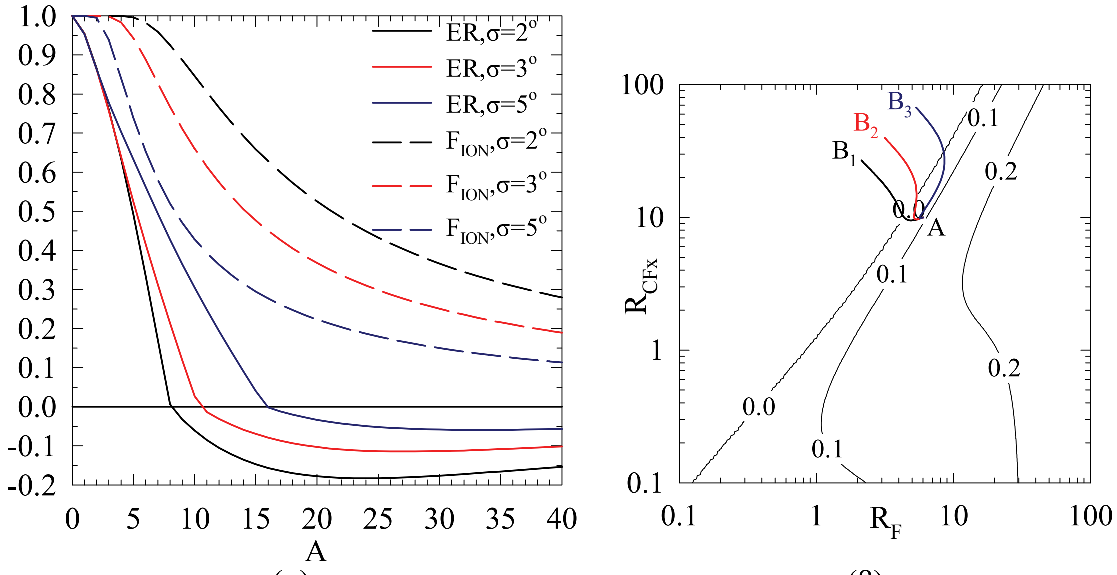


(α) (β)

<u>Σχήμα 5.9.</u> α) Ο ρυθμός εγχάραξης, ER, και η ροή ιόντων, F_{ION}, (κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια) στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, Α, του αυλακιού για διαφορετικές τιμές (1, 2, 3) του λόγου ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια, $R_{CFx,0}= j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}$. β) Οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) σαν συνάρτηση των λόγων R_F ($j_{S,F}/j_{S,ION}$), R_{CFx} ($j_{S,CFx}/j_{S,ION}$) καθώς και οι πορείες μεταβολής των ζευγών (R_F, R_{CFx}) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού καθώς μεταβάλλεται ο λόγος ασυμμετρίας (πορείες από τα A_1,A_2,A_3 στα B_1,B_2,B_3). Συνθήκες : ο λόγος ροής ατόμων F προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=2$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.

5.3.3.3 Η επίδραση της τυπικής απόκλισης της κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων

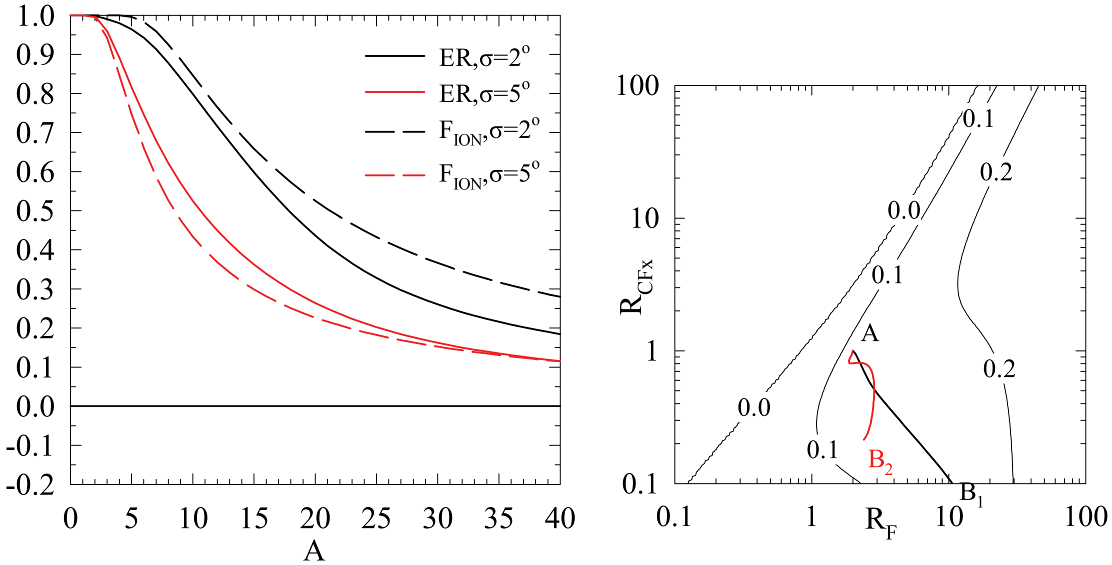
Στο σχήμα 5.10α φαίνεται η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης και της ροής ιόντων στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας του αυλακιού για διαφορετικές τιμές της τυπικής απόκλισης της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων, σ, γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z. Αύξηση της διασποράς κατευθύνσεων των ιόντων ως προς τον άξονα z (δηλαδή της τυπικής απόκλισης σ) μετακινεί το λόγο ασυμμετρίας στον οποίο συμβαίνει μετάβαση σε μεγαλύτερες τιμές. Στο σχήμα 5.10β φαίνονται οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης καθώς και οι πορείες των ζευγών (R_F, R_{CFx}) από εγχάραξη σε εναπόθεση για τις διαφορετικές τιμές σ (A→ B_1 για σ=2°, A→ B_2 για σ=3°, A→ B_3 για σ=5°). Η μείωση του ρυθμού εγχάραξης με την αύξηση του λόγου ασυμμετρίας οφείλεται σε κάθε περίπτωση και στη μείωση της απόδοσης εγχάραξης και στη μείωση της ροής των ιόντων. Η σχετική θέση των καμπυλών του ρυθμού εγχάραξης καθορίζεται από την αντίστοιχη διαφορά αποδόσεων εγχάραξης. Για παράδειγμα, η απόδοση εγχάραξης για την πορεία A→ B_3 (σ=5°) είναι μεγαλύτερη από αυτή για την πορεία A→ B_2 (σ=3°).



(α) (β)

<u>*Σχήμα 5.10*</u>*.α) Ο ρυθμός εγχάραξης, ER, και η ροή ιόντων, F_{ION}, (κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια) στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, A, του αυλακιού για διαφορετικές τιμές (2°, 3°, 5°) της* τυπικής απόκλισης της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων, σ, γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z. *β) Οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) σαν συνάρτηση των λόγων R_F ($j_{S,F}/j_{S,ION}$), R_{CFx} ($j_{S,CFx}/j_{S,ION}$) καθώς και οι πορείες μεταβολής των ζευγών (R_F, R_{CFx}) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού καθώς μεταβάλλεται ο λόγος ασυμμετρίας (πορείες από το A στα B_1,B_2,B_3). Συνθήκες: ο λόγος ροής των ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=6$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής.*

Στο σχήμα 5.11α φαίνεται η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης και της ροής ιόντων στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας του αυλακιού για διαφορετικές τιμές της τυπικής απόκλισης της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων, σ, γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z, σε συνθήκες διαφορετικές (χαμηλές τιμές $R_{F,0}$ και $R_{CFx,0}$) από αυτές του σχήματος 5.10. Σε αυτή την περίπτωση, *η αύξηση της διασποράς κατευθύνσεων των* *ιόντων ως προς τον άξονα z (δηλαδή της τυπικής απόκλισης σ) προκαλεί μείωση του ρυθμού εγχάραξης του αυλακιού για τον ίδιο λόγο ασυμμετρίας*, επίδραση αντίθετη από αυτή του σχήματος 5.10. Η διαφορά οφείλεται στην διαφορά των συνθηκών ροής και συγκεκριμένα των λόγων $R_{F,0}$ και $R_{CFx,0}$. Στο σχήμα 5.11β φαίνονται οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης καθώς και οι πορείες των ζευγών (R_F, R_{CFx}) για τις διαφορετικές τιμές σ (Α→ B_1 για σ=2^o, Α→ B_2 για σ=5^o). Σε αυτό το διάγραμμα δίδεται και η εξήγηση για την μειωμένη τιμή του ρυθμού εγχάραξης για τον ίδιο λόγο ασυμμετρίας όταν η διασπορά κατευθύνσεων είναι μεγαλύτερη. Όταν η τυπική απόκλιση είναι σ=2^o, η απόδοση εγχάραξης ακολουθεί την πορεία από το Α στο B_1 καθώς αυξάνεται ο λόγος ασυμμετρίας και είναι γενικά μεγαλύτερη από την απόδοση εγχάραξης κατά την πορεία από Α στο B_2 που αντιστοιχεί στην τυπική απόκλιση σ=5^o. Η ανισότητα στις αποδόσεις εγχάραξης υπερκερά την ανισότητα στις ροές ιόντων και δίδει ρυθμό εγχάραξης μεγαλύτερο για την περίπτωση όπου σ=2^o.



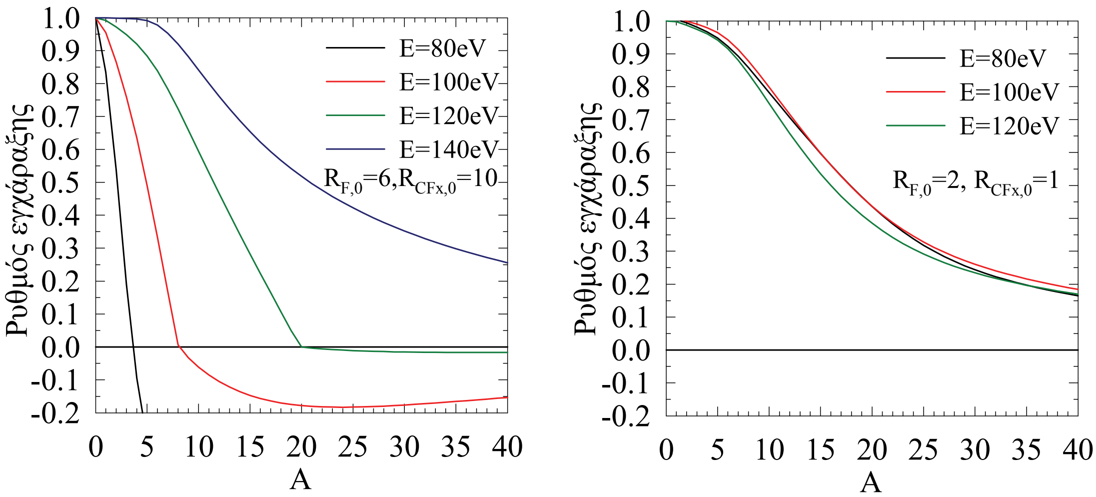
(α) (β)

<u>Σχήμα 5.11.</u> *α) Ο ρυθμός εγχάραξης, ER, και η ροή ιόντων, F_{ION}, (κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια) στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, Α, του αυλακιού για διαφορετικές τιμές (2^o, 5^o) της* τυπικής απόκλισης της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων, σ, γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z. *β) Οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) σαν συνάρτηση των λόγων R_F ($j_{S,F}/j_{S,ION}$), R_{CFx} ($j_{S,CFx}/j_{S,ION}$) καθώς και οι πορείες μεταβολής των ζευγών (R_F, R_{CFx}) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού καθώς μεταβάλλεται ο λόγος ασυμμετρίας (πορείες από το Α στα B_1,B_2). Ο λόγος ροής των ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=2$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=1$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής.*

Συμπερασματικά η επίδραση της διασποράς κατευθύνσεων των ιόντων εξαρτάται και από τις ροές ατόμων F και ουδετέρων ριζών CF_x σε ελεύθερη επιφάνεια, ή καλύτερα από τους λόγους αυτών των ροών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια ($R_{F,0}$ και $R_{CFx,0}$).

5.3.3.4 Η επίδραση της ενέργειας των ιόντων

Στο σχήμα 5.12 φαίνεται η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης στο κέντρο της βάσης του αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας του αυλακιού για διαφορετικές τιμές της ενέργειας ιόντων και για διαφορετικούς λόγους $R_{F,0}$, $R_{CFx,0}$. Παρατηρούμε στο σχήμα 5.12α ότι η αύξηση της ενέργειας αλλάζει την καμπύλη μεταβολής του ρυθμού εγχάραξης και μετακινεί τον λόγο ασυμμετρίας στον οποίο συμβαίνει μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση σε υψηλότερες τιμές. Στο σχήμα 5.12β οι καμπύλες μεταβολής του ρυθμού εγχάραξης επηρεάζονται ελάχιστα από την αλλαγή στην τιμή της ενέργειας ιόντων. Η επίδραση της ενέργειας στην καμπύλη μεταβολής εξαρτάται και από τις υπόλοιπες συνθήκες και ειδικότερα από τις ροές ατόμων F και ουδετέρων ριζών CF_x σε ελεύθερη επιφάνεια.



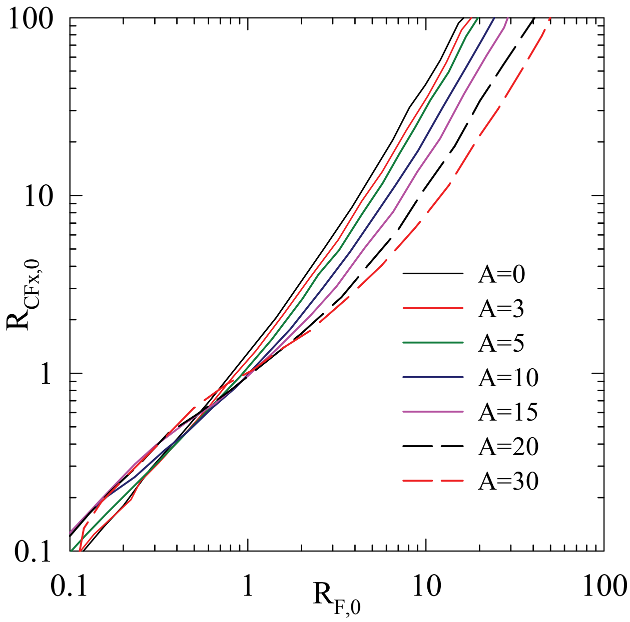
(α) (β)

<u>Σχήμα 5.12.</u> Ο ρυθμός εγχάραξης (κανονικοποιημένος ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια) στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, A, του αυλακιού για διαφορετικές τιμές ενέργειας ιόντων. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z. Ο λόγος ροής των ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι α) $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=6$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$ και β) $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=2$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=1$.

5.3.4 Συνθήκες για την επίτευξη εγχάραξης σε αυλάκια

Όπως φάνηκε στα παραπάνω σχήματα, οι συνθήκες σε ελεύθερη επιφάνεια ($R_{F,0}$, $R_{CFx,0}$, ενέργεια ιόντων) και η διασπορά κατευθύνσεων των ιόντων διαφοροποιούν το λόγο ασυμμετρίας για τον οποίο συμβαίνει μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση. Στο σχήμα 5.13 περιγράφεται η επίδραση των λόγων $R_{F,0}$ και $R_{CFx,0}$ στο λόγο ασυμμετρίας στον οποίο συμβαίνει η μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση για αυλάκια SiO_2. Φαίνονται οι καμπύλες ($R_{CFx,0}$ vs $R_{F,0}$) που χωρίζουν την εγχάραξη από την εναπόθεση για αυλάκια με διαφορετικούς λόγους ασυμμετρίας. Δεξιά των καμπυλών συμβαίνει εγχάραξη και αριστερά εναπόθεση. Οι πληροφορίες που μπορούμε να πάρουμε από ένα τέτοιο διάγραμμα είναι αρκετές : α) όταν είναι γνωστοί οι λόγοι ροής ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια,

$R_{F,0}$ και $R_{CFx,0}$, καθώς και ο λόγος ασυμμετρίας του προς εγχάραξη αυλακιού μπορεί να προβλεφθεί αν θα έχουμε εγχάραξη ή εναπόθεση στο αυλάκι. Για παράδειγμα αν $R_{F,0}$=6 και $R_{CFx,0}$=10, θα έχουμε εναπόθεση σε αυλάκι με λόγο ασυμμετρίας A=10 και εγχάραξη για αυλάκι με λόγο ασυμμετρίας A=5. β) Αν είναι δεδομένα ο λόγος $R_{F,0}$ (ή $R_{CFx,0}$) και ο λόγος ασυμμετρίας A του προς εγχάραξη αυλακιού, μπορούμε να προσδιορίσουμε την μέγιστη τιμή του λόγου $R_{CFx,0}$ (ή την ελάχιστη τιμή $R_{F,0}$) για την οποία συμβαίνει εγχάραξη. Για παράδειγμα αν $R_{F,0}$=2 σε αυλάκι με λόγο ασυμμετρίας A=5, η ελάχιστη τιμή $R_{CFx,0}$ για την οποία συμβαίνει εγχάραξη είναι 2.4.

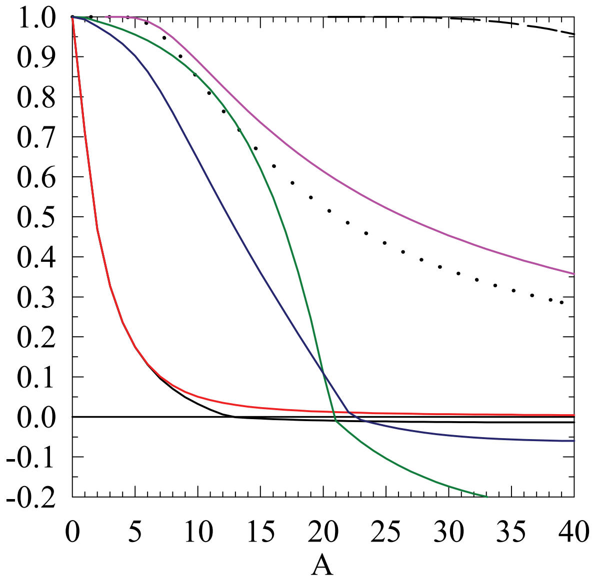


<u>Σχήμα 5.13.</u> Η καμπύλη μεταβολής του λόγου $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}$ σαν συνάρτηση του $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}$ που χωρίζει την εγχάραξη από εναπόθεση για αυλάκια SiO_2 με διαφορετικό λόγο ασυμμετρίας, A. Δεξιά των καμπυλών συμβαίνει εγχάραξη και αριστερά εναπόθεση. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.

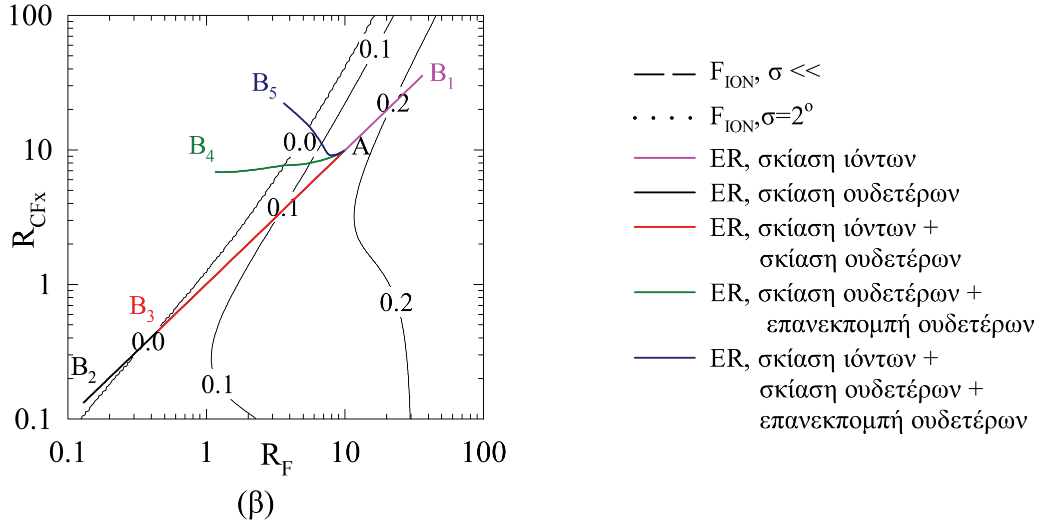
5.3.5 Η επίδραση των φαινομένων σκίασης και επανεκπομπής στην εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το λόγο ασυμμετρίας

Στα αποτελέσματα που έχουν παρουσιαστεί μέχρι στιγμής έχουν ληφθεί υπόψη τα φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής της ροής των ουδετέρων ειδών (F, CF_x) και το φαινόμενο σκίασης της ροής των ιόντων. Στο σχήμα 5.14 εξετάζεται η επίδραση κάθε ενός φαινομένου ή συνδυασμού φαινομένων στην εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης αυλακιών SiO_2 από το λόγο ασυμμετρίας. Στο σχήμα 5.14α φαίνεται ο ρυθμός εγχάραξης και η ροή ιόντων για 5 συνδυασμούς φαινομένων: σκίαση ροής ουδετέρων, σκίαση ροής ιόντων, σκίαση ροής ουδετέρων + σκίαση ροής ιόντων, σκίαση ροής ουδετέρων + επανεκπομπή ροής ουδετέρων, σκίαση ροής ουδετέρων + επανεκπομπή ροής ουδετέρων + σκίαση ροής ιόντων. Για τη ροή ιόντων υπάρχουν δύο καμπύλες : η πρώτη αντιστοιχεί σε ιόντα που φτάνουν κάθετα στη βάση του αυλακιού (με ελάχιστη διασπορά κατευθύνσεων, σ<<) συνεπώς σε ροή ιόντων που δεν σκιάζεται από τα πλάγια τοιχώματα και η δεύτερη αντιστοιχεί σε ροή ιόντων που εμφανίζει διασπορά διευθύνσεων (σ=2°), δηλαδή σε ροή ιόντων που σκιάζεται από τα πλάγια τοιχώματα του αυλακιού. Στο σχήμα 5.14β φαίνονται οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 καθώς και η πορεία του ζεύγους (R_F, R_{CFx}) κατά τη μεταβολή του λόγου ασυμμετρίας.

Η σκίαση της ροής ουδετέρων οδηγεί σε απότομη μείωση του ρυθμού εγχάραξης με το λόγο ασυμμετρίας δηλαδή το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης είναι έντονο. Λιγότερο έντονο γίνεται το φαινόμενο όταν στη σκίαση της ροής προστεθεί η επανεκπομπή της. Τέλος η σκίαση της ροής των ιόντων μολονότι οδηγεί σε αύξηση των τιμών R_F, R_{CFx} και συνεπώς αύξηση της απόδοσης εγχάραξης, προκαλεί μείωση του ρυθμού εγχάραξης με το λόγο ασυμμετρίας η οποία οφείλεται στη μείωση της ροής των ιόντων (ο ρυθμός εγχάραξης είναι ανάλογος της ροής ιόντων).



(α)



(β)

<u>Σχήμα 5.14.</u> α) Ο ρυθμός εγχάραξης, ER, και η ροή ιόντων, F_{ION}, (κανονικοποιημένες ως προς τις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια) στο κέντρο της βάσης αυλακιού SiO_2 σαν συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας, A, του αυλακιού για διαφορετικούς συνδυασμούς φαινομένων σκίασης και επανεκπομπής : σκίαση ροής ιόντων, σκίαση ροής ουδετέρων, σκίαση ροής ουδετέρων + σκίαση ροής ιόντων, σκίαση ροής ουδετέρων + επανεκπομπή ροής ουδετέρων, σκίαση ροής ουδετέρων + επανεκπομπή ροής ουδετέρων + σκίαση ροής ιόντων. Για τη ροή ιόντων υπάρχουν δύο καμπύλες η

πρώτη αντιστοιχεί σε ροή ιόντων που δεν σκιάζεται (σ<<) και η δεύτερη αντιστοιχεί σε ροή ιόντων που σκιάζεται (σ=2^o) από τα πλάγια τοιχώματα του αυλακιού. β) Οι ισοϋψείς απόδοσης εγχάραξης SiO_2 (άτομα Si/ιόν) σαν συνάρτηση των λόγων R_F ($j_{S,F}/j_{S,ION}$), R_{CFx} ($j_{S,CFx}/j_{S,ION}$) καθώς και οι πορείες μεταβολής των ζευγών (R_F, R_{CFx}) στο κέντρο της βάσης του αυλακιού καθώς μεταβάλλεται ο λόγος ασυμμετρίας (πορείες από το A στα B_1,B_2,B_3,B_4,B_5). Ο λόγος ροής των ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=10$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής.

5.3.6 Εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το χρόνο

Ο λόγος ασυμμετρίας ενός αυλακιού μεταβάλλεται κατά τη διάρκεια της εγχάραξής του. Όσο η διαδικασία εγχάραξης προχωρεί, το βάθος δηλαδή ο λόγος ασυμμετρίας του αυλακιού μεγαλώνει με αποτέλεσμα (δες σχήματα προηγούμενων παραγράφων) ο ρυθμός εγχάραξης μειώνεται.

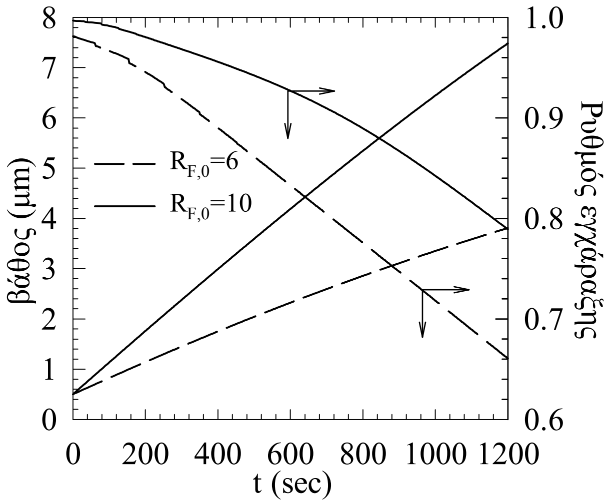
Ο ρυθμός εγχάραξης στο πλάγιο τοίχωμα αυλακιών SiO_2 είναι πολλές φορές μικρότερος από αυτόν στη βάση του αυλακιού όπως φαίνεται από τα σχήματα 5.4α και 5.5α. Ας υποθέσουμε ότι αυτή η διαφορά στους ρυθμούς εγχάραξης είναι αρκετά μεγάλη ώστε να μας επιτρέπει να θεωρήσουμε σχεδόν μηδενικό ρυθμό εγχάραξης στο πλάγιο τοίχωμα. Τότε τα πλάγια τοιχώματα του αυλακιού παραμένουν κάθετα και δεν μετακινούνται. Αν υποθέσουμε επίσης ότι η εγχάραξη στη βάση είναι ομοιόμορφη, τότε το αυλάκι μπορεί να θεωρηθεί ορθογωνικής διατομής και σταθερού πλάτους σε κάθε χρονική στιγμή της διαδικασίας εγχάραξης.

Σε ορθογωνικής διατομής και σταθερού πλάτους αυλάκια αναφέρονται και τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν στις προηγούμενες παραγράφους όπου περιγράφεται η εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης (στο κέντρο της βάσης του αυλακιού) από το λόγο ασυμμετρίας (ή από το βάθος εγχάραξης για δεδομένο πλάτος αυλακιού). Αν λοιπόν προσδιορίσουμε την εξάρτηση του λόγου ασυμμετρίας (ή του βάθους εγχάραξης) από το χρόνο μπορούμε να εξάγουμε και την εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το χρόνο. Αν h είναι το βάθος του αυλακιού, ο ρυθμός εγχάραξης, ER, του αυλακιού είναι :

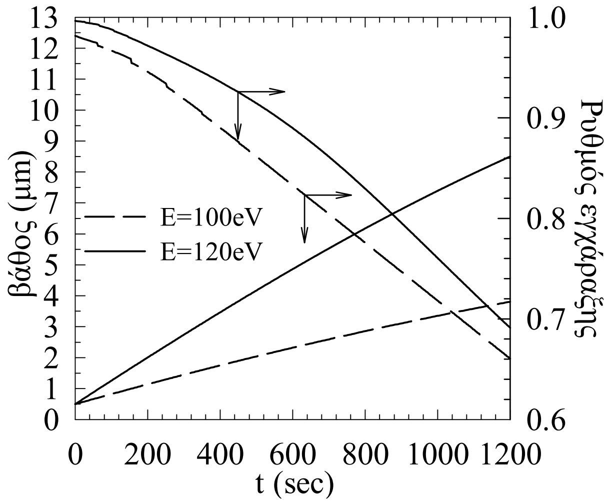
$$ER(t,h) = ER(h) = \frac{dh}{dt}\ ,\ h(0) = h_0 \qquad (15)$$

Από την παραπάνω διαφορική εξίσωση μπορούμε να υπολογίσουμε την εξάρτηση του βάθους ενός αυλακιού με το χρόνο και συνακόλουθα την εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης με το χρόνο. Η επίλυση της παραπάνω διαφορικής εξίσωσης γίνεται με μέθοδο[2] Runge-Kutta 7ης τάξης και προσαρμοζόμενου βήματος, στοιχεία της οποίας υπάρχουν στο παράρτημα Δ.

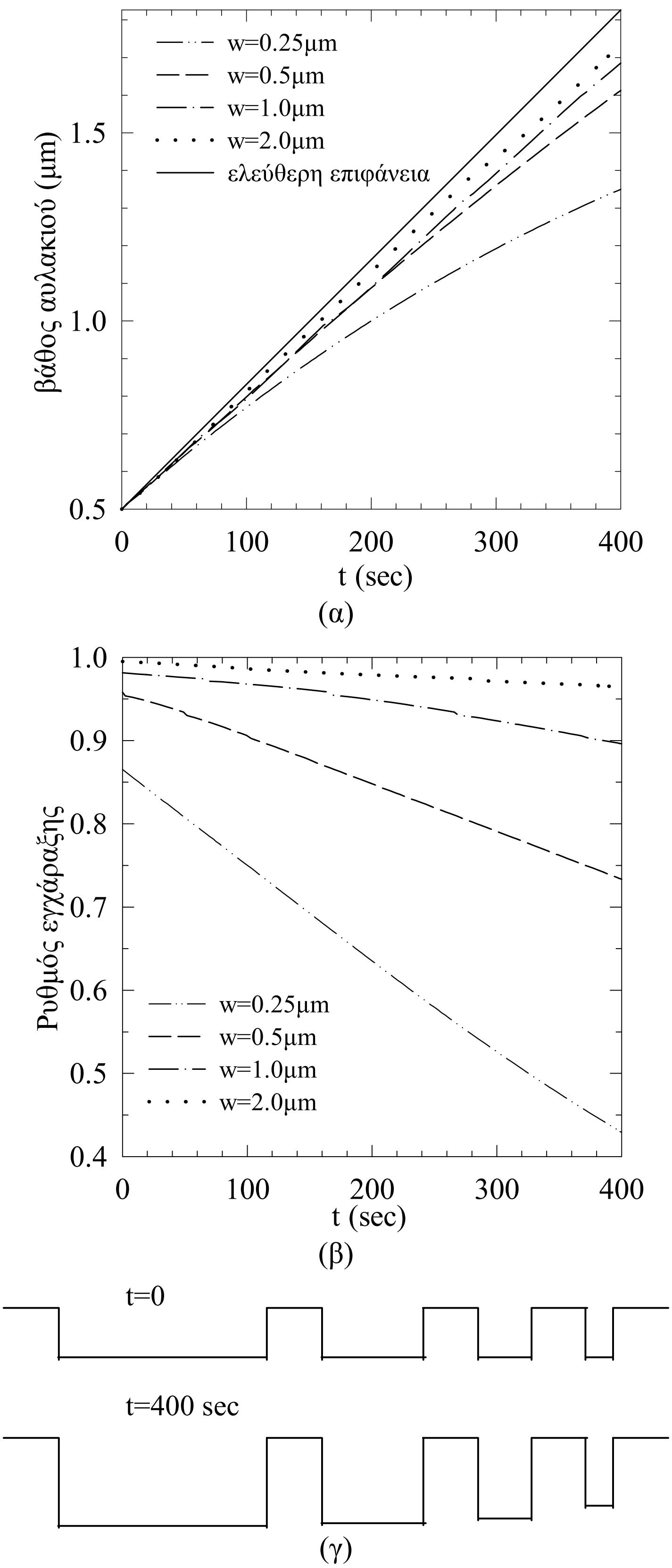
Στα σχήματα 5.15 και 5.16 φαίνεται η μεταβολή του βάθους και του ρυθμού εγχάραξης αυλακιού SiO_2. Παρατηρείται σε κάθε περίπτωση μείωση του ρυθμού αύξησης του βάθους του αυλακιού δηλαδή μείωση του ρυθμού εγχάραξης με το χρόνο.



<u>Σχήμα 5.15.</u> *Το βάθος και ο ρυθμός εγχάραξης (κανονικοποιημένος ως προς τις αντίστοιχες τιμές του σε ελεύθερη επιφάνεια) αυλακιού SiO_2 πλάτους w=1μm σαν συνάρτηση του χρόνου εγχάραξης για 2 διαφορετικές τιμές του λόγου $R_{F,0}$ (6,10). Το βάθος τη χρονική στιγμή t=0 θεωρείται ίσο με h_0=0.5μm. Ο λόγος ροής των ουδετέρων ριζών CF_x προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$. Η ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $j_{S,ION,0}$ = 8.625 10^{16} ιόντα/cm^2/s. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και θεωρείται σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.*



<u>Σχήμα 5.16.</u> *Το βάθος και ο ρυθμός εγχάραξης (κανονικοποιημένος ως προς τις αντίστοιχες τιμές του σε ελεύθερη επιφάνεια) αυλακιού SiO_2 πλάτους w=1μm σαν συνάρτηση του χρόνου εγχάραξης για 2 διαφορετικές τιμές της ενέργειας ιόντων E (100,120eV). Ο λόγος ροής των ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=6$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$. Η ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $j_{S,ION,0}$ = 8.625 10^{16} ιόντα/cm^2/s. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός της δομής. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.*



<u>Σχήμα 5.17.</u> *α) Η μεταβολή του βάθους 4 αυλακιών SiO_2 με διαφορετικό πλάτος w σαν συνάρτηση του χρόνου εγχάραξης. Το αρχικό βάθος των αυλακιών είναι h_0=0.5μm και τα αυλάκια σε κάθε χρονική στιγμή θεωρούνται ορθογωνικά και σταθερού πλάτους β) Η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης (κανονικοποιημένος ως προς την τιμή σε ελεύθερη επιφάνειας) για τα 4 αυλάκια σαν συνάρτηση του χρόνου γ) Η τομή των αυλακιών πριν*

(t=0) και μετά το τέλος της εγχάραξης (t=400sec). Ο λόγος ροής των ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=j_{S,F,0}/j_{S,ION,0}=6$ και $R_{CFx,0}=j_{S,CFx,0}/j_{S,ION,0}=10$. Η ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $j_{S,ION,0} = 8.625\ 10^{16}$ ιόντα/cm^2/s. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και είναι σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός των αυλακιών. Η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF_3^+, 85%CF_2^+, 5%CF^+ και είναι επίσης σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός των αυλακιών. Η τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων είναι 2^o γύρω από την κατεύθυνση που ορίζει ο άξονας z.

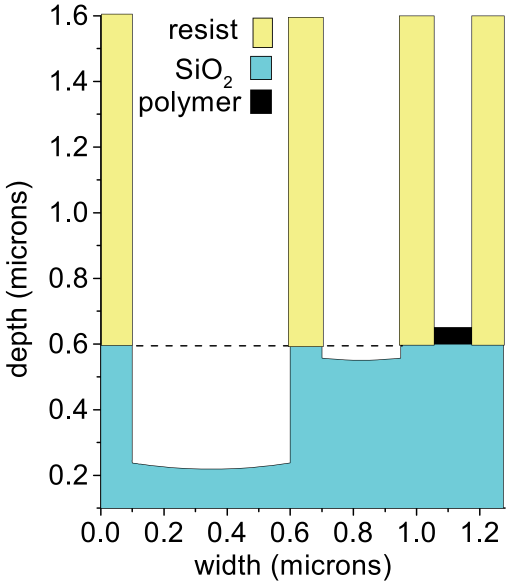
Στο σχήμα 5.17α φαίνεται το βάθος 4 εγχαρασσόμενων αυλακιών SiO_2 με διαφορετικό πλάτος w σαν συνάρτηση του χρόνου εγχάραξης. Το αρχικό βάθος των αυλακιών είναι 0.5μm και τα αυλάκια σε κάθε χρονική στιγμή θεωρούνται ορθογωνικά και σταθερού πλάτους. Για τον ίδιο χρόνο εγχάραξης τα στενότερα αυλάκια έχουν μικρότερο βάθος. Στο σχήμα 5.17β φαίνεται η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης για τα 4 αυλάκια σαν συνάρτηση του χρόνου, όπου και επιβεβαιώνεται ***το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης*** (1ο κεφάλαιο): ***τα στενότερα αυλάκια εγχαράσσονται με μικρότερο ρυθμό***. Στο σχήμα 5.17γ παρίστανται γραφικά τα αποτελέσματα που φανερώνουν την υστέρηση εγχάραξης.

Σημειώνεται ότι η θεώρηση ορθογωνικών αυλακιών σε κάθε χρονική στιγμή της διαδικασίας εγχάραξης δίνει μόνο προσεγγιστικά αποτελέσματα για την εξάρτηση του βάθους και του ρυθμού εγχάραξης με το χρόνο διότι το προφίλ αλλάζει σχήμα, δεν παραμένει ορθογωνικό κατά τη διαδικασία εγχάραξης. Ένας προσομοιωτής εξέλιξης τοπογραφίας είναι απαραίτητος για την ακριβέστερη εξέταση της μεταβολής του ρυθμού εγχάραξης με το χρόνο.

5.4 Ενσωμάτωση των μοντέλων σε προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας

Με τη σύζευξη των δύο μοντέλων (ελεύθερης επιφάνειας και υπολογισμού τοπικών τιμών ροής) είναι δυνατό να υπολογιστεί ο ρυθμός εγχάραξης τοπικά σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής. Ο προσομοιωτής εξέλιξης τοπογραφίας εγχαρασσόμενης δομής χρησιμοποιεί αυτές τις τοπικές τιμές του ρυθμού εγχάραξης και μεταβάλλει την εγχχαρασσόμενη επιφάνεια ακολουθώντας κατάλληλο αλγόριθμο. Υπάρχουν αρκετοί αλγόριθμοι εξέλιξης τοπογραφίας όπως ο αλγόριθμος 'string'[3], η μέθοδος των χαρακτηριστικών (method of characteristics[4]) και η μέθοδος level set.[5]

Ένα πρώτο αποτέλεσμα της ενσωμάτωσης των μοντέλων σε προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας φαίνεται στο σχήμα 5.18. Ο προσομοιωτής εξέλιξης τοπογραφίας δομών χρησιμοποιεί τον αλγόριθμο string και έχει αναπτυχθεί από την ομάδα πλάσματος[6] του ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής. Στο σχήμα 5.18 φαίνεται η υστέρηση εγχάραξης σε τρία αυλάκια SiO_2 με διαφορετικό λόγο ασυμμετρίας τα οποία εγχαράσσονται για τον ίδιο χρόνο. Στο μεσαίο αυλάκι είναι φανερή η υστέρηση εγχάραξης ενώ στο στενότερο είναι τόσο έντονο το φαινόμενο υστέρησης που αντί για εγχάραξη συμβαίνει εναπόθεση.



<u>Σχήμα 5.18.</u> Υστέρηση εγχάραξης και μετάβαση από εγχάραξη σε εναπόθεση για τρία αυλάκι SiO_2 με διαφορετικό λόγο ασυμμετρίας (2, 4, 8). ***Μόνο το φαινόμενο της σκίασης της ροής των ουδετέρων ειδών λαμβάνεται υπόψη.*** *Ο λόγος ροής των ουδετέρων ειδών προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}$=2 και $R_{CFx,0}$=1. Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και είναι σταθερή και ομοιόμορφη στο χώρο εντός των αυλακιών. Η σύσταση των ιόντων είναι 35%CF_3^+, 45%CF_2^+ , 20%CF^+.*

5.5 Συμπεράσματα και προτάσεις για το μέλλον

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας:

- Αναπτύχθηκε ένα λεπτομερές μοντέλο για την εγχάραξη ελεύθερων επιφανειών SiO_2, Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων

- Αναπτύχθηκε ένα μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών ροής ιόντων και ουδετέρων ειδών μέσα σε δομές (αυλάκια, οπές με κυλινδρική συμμετρία) που περιγράφει φαινόμενα όπως η σκίαση και η επανεκπομπή της ροής

- Εφαρμόστηκαν και αξιολογήθηκαν αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης των μαθηματικών προβλημάτων (ολοκληρωτική εξίσωση, σύστημα μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων) στα οποία οδηγεί η θεώρηση φαινομένων όπως η σκίαση και κυρίως η επανεκπομπή της ροής

- Έγινε σύζευξη των δύο μοντέλων: α) ελεύθερης επιφάνειας και β) υπολογισμού των τοπικών τιμών. Υπολογίστηκε τοπικά ο ρυθμός εγχάραξης δομών Si, SiO_2, έγινε πρόβλεψη της υστέρησης εγχάραξης και της μετάβασης από εγχάραξη σε εναπόθεση και μελετήθηκε ο ρόλος φαινομένων όπως η σκίαση και η επανεκπομπή της ροής στην υστέρηση εγχάραξης

- Έγιναν τα πρώτα βήματα ενσωμάτωσης των μοντέλων που αναπτύχθηκαν σε ένα προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας.

Στην περιοχή της προσομοίωσης εγχάραξης, τα μοντέλα εγχάραξης ελεύθερων επιφανειών SiO_2, Si με δυνατότητα πρόβλεψης είναι ελάχιστα και ανεξάρτητα από μοντέλα υπολογισμού τοπικών τιμών και προσομοιωτές εξέλιξης τοπογραφίας. Επίσης, ενώ έχει δωθεί έμφαση στους αλγορίθμους των προσομοιωτών εξέλιξης τοπογραφίας, σε αυτούς δεν λαμβάνονται υπόψη οι φυσικές και οι χημικές διεργασίες στην επιφάνεια. ***Η συμβολή της εργασίας είναι ένα λεπτομερές μοντέλο εγχάραξης ελέυθερων επιφανειών SiO_2 και Si σε σύζευξη με μοντέλο υπολογισμού τοπικών τιμών και με έναν προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας με στόχο την πρόβλεψη εξέλιξης τοπογραφίας εγχαρασσόμενων δομών.***

Οι προτάσεις για μελλοντική εργασία συνοψίζονται στις παρακάτω:

- Ανάπτυξη μοντέλων εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας νέων διηλεκτρικών υλικών όπως τα οργανικά πολυμερή

- Πλήρης ενσωμάτωση των μοντέλων που αναπτύχθηκαν (ελεύθερης επιφάνειας, υπολογισμού τοπικών τιμών ροής) σε προσομοιωτή εξέλιξης τοπογραφίας

- Θεώρηση πρόσθετων φαινομένων όπως η επανεκπομπή ιόντων και το φαινόμενο φόρτισης στο μοντέλο υπολογισμού των τοπικών τιμών

Αναφορές

[1] R. A. Gottscho, C. W. Jurgensen, and D. J. Vitkavage, J. Vac. Sci. Technol. B **10**, 2133 (1992).
[2] Γ. Κόκκορης, *Επίλυση διαφορικών εξισώσεων με τη μέθοδο Runge Kutta*, Προπτυχιακή Εργασία στα πλαίσια του μαθήματος Αριθμητική Ανάλυση του τμήματος Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ υπό τον κ. Γ. Σ. Παπαγεωργίου Αθήνα, 1996.
[3] K. Harafuji and A. Misaka, IEEE Transactions on Electron Devices **42**, 1903 (1995).
[4] J. C. Arnold, H. H. Sawin, M. Dalvie, and S. Hamaguchi, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 620 (1994).
[5] J. A. Sethian and D. Adalsteinsson, IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing **10**, 167 (1997).
[6] R. Pelle, *Topography Simulation during Etching Processes of thin films: Application to SiO2 and siloxane thin films*, Διπλωματική εργασία που εκπονήθηκε στο Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Αθήνα, 1998.

Παραρτήματα

Παράρτημα Α : Συντελεστές των μοντέλων εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας Si, SiO_2

Ο προσδιορισμός των συντελεστών των μοντέλων γίνεται με προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα των εξισώσεων που περιγράφουν τους βασικούς μηχανισμούς (παράγραφος 2.2). Απομονώνεται κάθε μια διεργασία (ή συνδυασμός διεργασιών) και προσδιορίζονται οι αντίστοιχοι συντελεστές, παράμετροι. Τα διαθέσιμα δεδομένα προέρχονται από πειράματα κατά τα οποία γνωστής σύστασης δέσμες ιόντων και ουδετέρων μορίων βομβαρδίζουν ελεύθερες επιφάνειες SiO_2 και Si.
Στους πίνακες που ακολουθούν περιέχονται τα αποτελέσματα των προσαρμογών.

<u>Πίνακας Α.1.</u> Συντελεστές ιονοβολής και απευθείας εναπόθεσης ιόντων CF_x^+.

Ιόν	Υπό-στρωμα	Συντελεστής ιονοβολής Α (εξ. 7)	Συντελεστής εναπόθεσης A_d (εξ. 8) ή Α (εξ. 9)	Κατώφλι ενέργεια ιόντων (eV)	Αναφορές/σχόλια
CF_3^+	Si	0.0414 ± 0.0019	A_d = 0.0171, A=0.0414	74	[a] για τη συνολική απόδοση. Κατώφλι το ίδιο με το SiO_2 από την [b]
CF_2^+	Si	0.0362 ± 0.0014	A_d = 0.0150, A=0.0362	200	[a]
CF^+	Si	0.1022 ± 0.0067	A_d =0.0370, A=0.1022	777	[a], E < 1000eV
C^+	Si	0.0490	Ad = 0.0280, A=0.0490 $E_{maximum-deposition\ yield}$ = 800eV	2000	[a]
CF_3^+	SiO_2	0.0456 ± 0.0016	A_d = 0.0189, A=0.0456	20	[c],[d]
CF_2^+	SiO_2	0.0306 ± 0.0016	A_d = 0.0127, A=0.0306	80	0.67xA του CF_3^+
CF^+	SiO_2	0.0228 ± 0.0016	A_d = 0.0094, A=0.0228	150	0.5xA του CF_3^+

[a] S. Tachi, K. Miyake, and T. Tokuyama, Jpn. J. Appl. Phys. **21**, 141 (1982).
[b] T. Shibano, N. Fujiwara, M. Hirayama, H. Nagata, and K. Demizu, Appl. Phys. Lett. **63**, 2336 (1993).
[c] Y.Y. Tu, T.J. Chuang, H. F. Winters, Phys. Review B **23**, 823 (1981).
[d] J. M. E. Harper, J. J. Cuomo, P. A. Leary, G. M. Summa, H. R. Kaufman, and F. J. Bresnock, J. Electrochem. Soc. **128**, 1077 (1981).

<u>Πίνακας Α.2.</u> Συντελεστές εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα από πειράματα βομβαρδισμού επιφανειών Si, SiO_2 με δέσμη ατόμων F / ιόντων Ar^+ (F/Ar^+ beams).

Υπό-στρωμα	Συντελεστής προσκόλλησης F σε καθαρή επιφάνεια	Συντελεστής $β_0'$ (εξ.. 4)	Κατώφλι ενέργειας (eV)	Παράμετρος b_0 (εξ. 4)	Αναφορές
Si	0.2	0.687	4	0.009	[a],[b]
SiO_2	0.02	0.053	4	0.007	[a],[b]

[a] D. C. Gray, I. Tepermeister and H. H. Sawin, J. Vac. Sci. Technol. B **11,** 1243 (1993).
[b] D. C. Gray, PhD Thesis, *Beam Simulation Studies of Plasma-Surface Interaction in Fluorocarbon Etching of Si and SiO$_2$*, Massachusetts Institute of Technology, April 1992.

<u>Πίνακας Α.3.</u> *Συντελεστής θερμικής (καθαρά χημικής) εγχάραξης με άτομα F, K(T), στους 300K.*

Υπό-στρωμα	K_0 σε $\frac{\text{A s cm}^2}{\text{min molecule}}$	K_0 σε cm^3/molecule	K(300K)	E_a σε eV	Αναφορές
Si	$3.59\ 10^{-15}$	$5.983\ 10^{-25}$	$4.6\ 10^{-4}$	0.108	[a],[b]
SiO_2	$7.37\ 10^{-16}$	$1.228\ 10^{-25}$	$4.2\ 10^{-6}$	0.168	[a],[b]

[a] D. C. Gray, I. Tepermeister and H. H. Sawin, J. Vac. Sci. Technol. B **11,** 1243 (1993).
[b] D. C. Gray, PhD Thesis, *Beam Simulation Studies of Plasma-Surface Interaction in Fluorocarbon Etching of Si and SiO$_2$*, Massachusetts Institute of Technology, April 1992.

<u>Πίνακας Α.4.</u> *Συντελεστές εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα, μηχανικής απομάκρυνσης άνθρακα, εναπόθεσης υποβοηθούμενης από ιόντα όπως προκύπτουν από πειράματα βομβαρδισμού επιφάνειας με δέσμες CF_2/Ar^+.*

Υπό-στρωμα	Συντελεστής προσκόλλησης CF_2 σε καθαρή επιφάνεια	Διεργασία	Συντελεστής y_C ή β_S	Κατώφλι ενέργειας (eV)	Αναφορές
Si	0.1	Ιονοβολή ουδετέρων ριζών CF_x ή Εναπόθεσή τους υποβοηθούμενη από ιόντα (Stitching) όταν $E \leq E_{th}$	0.0361 ± 0.0054	128±12	[a],[b]
SiO_2	–		0.0361 ± 0.0054 (θεωρείται το ίδιο με το Si)	128±12 (θεωρείται το ίδιο με το Si)	–
SiO_2	0.9 ± 0.3	Εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα με CF_2	0.0305 ± 0.0010	4	[c]
SiO_2	$1-(1-s_0)\ e^{-E//Eo}$ με s_0=0.02, E_O = 331 ± 147	Εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα με CF_2	0.0319 ± 0.0012	4	[c]

[a] D. C. Gray, PhD Thesis, *Beam Simulation Studies of Plasma-Surface Interaction in Fluorocarbon Etching of Si and SiO$_2$*, Massachusetts Institute of Technology, April 1992.
[b] D. C. Gray, H. H. Sawin, and J. W. Butterbaugh, J. Vac. Sci. Technol. A **9**, 779 (1991).
[c] J. W. Butterbaugh, PhD Thesis, *Characterization and Modeling of SiO$_2$ Etching in Tetrafluoromethane RF Glow Discharges,* Massachusetts Institute of Technology, September 1990.

Πίνακας Α.5. *Συντελεστές εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα όπως προκύπτουν από πειράματα βομβαρδισμού επιφάνειας με δέσμη F/ CF_3^+.*

Υπόστρωμα	Συντελεστής προσκόλλησης F σε καθαρή επιφάνεια	Συντελεστής β′	Κατώφλι ενέργειας (eV)	Αναφορές
Si	0.2	0.6290 ±0.0210	4	[a]
SiO_2	0.02	0.0454 ± 0.0048	4	[a]

[a] Y.Y. Tu, T.J. Chuang, H. F. Winters, Phys. Review B **23**, 823 (1981).

Πίνακας Α.6. *Συντελεστές επανασύνδεσης $CF_x(s)$ με F(g) όπως προκύπτουν από προσαρμογή σε δεδομένα από πειράματα βομβαρδισμού επιφανειών με δέσμες F/CF_x/Ar^+ ή CF_3^+.*

Υπόστρωμα	Συντελεστής επανασύνδεσης, k_{REC}	Αναφορές
Si	0.0153±0.0013	[a]
SiO_2	0.60±0.57 πολύ μεγάλη η αβεβαιότητα, η τιμή για το Si χρησιμοποιείται αντί αυτής	[b]

[a] D. C. Gray, PhD Thesis, *Beam Simulation Studies of Plasma-Surface Interaction in Fluorocarbon Etching of Si and SiO_2*, Massachusetts Institute of Technology, April 1992.
[b] D. C. Gray, H. H. Sawin, and J. W. Butterbaugh, J. Vac. Sci. Technol. A **9**, 779 (1991).

Σημειώνονται τα εξής:

- οι συντελεστές εγχάραξης υποβοηθούμενης από ιόντα CF_x^+ θεωρούνται ίσοι με αυτούς του CF_3^+.
- οι συντελεστές εναπόθεσης υποβοηθούμενης από ιόντα CF_x^+ (β_s) σε επιφάνεια SiO_2 (Si) ή πολυμερούς που καλύπτεται από ουδέτερες ρίζες CF_x είναι ίσοι με ίσοι με αυτούς του CF_3^+

Χρησιμοποιώντας τους συντελεστές που ορίστηκαν στην παράγραφο τάδε όπου περιγράφονται οι βασικοί μηχανισμοί Using the coefficients determined in section II one can write models for etching by fluorocarbon plasmas. In these plasma CF_x^+ ions, CF_x, and other fluorocarbon radicals, as well as F atoms are present. For the models presented below the sputtering or the direct ion deposition coefficients and the thermal etching coefficients are given in Table I and III respectively. For adsorbed carbon, polymer P and CF_x or other fluorocarbon radicals the sputtering or stitching coefficients are given in Table IV, i.e. they are taken equal to that of CF_2 (see section B3), due to lack of other appropriate experimental data. All ion-enhanced etching coefficients with CF_x^+ ions and F atoms (β) are taken equal to that of CF_3^+ ions (see Table V), the difference in the fluorine content of each ion being reflected only in their sputtering coefficients shown in Table I. Branching ratios for unsaturated SiF_x production are taken the same as for Ar^+/F system (see Table II).

In the polymer site balance (eq. 22) the first term is the direct ion deposition, while the second and the third terms are the ion-enhanced deposition terms (stitching) of chemisorbed fluorocarbon species. The last term is the ion enhanced etching of polymer. No other polymer removal term has been considered. The coefficient for ion-enhanced etching of the polymer is not known and should depend on the type of the polymer. We have considered that this coefficient should have the same form as the ones for Si and SiO_2 etching (see eq. 3), and an intermediate value of the coefficient β_0 (see Table II). We have chosen a value for β_0 equal to 0.2, a threshold of 4eV, and sticking coefficients for F and CF_x radicals equal to 0.1.

As a final note here it should also to be mentioned that the deposition coefficients (direct or ion-enhanced) are taken from data on Si or SiO_2. However, when polymer forms the surface changes, and the coefficients could change. For example the energy threshold for direct polymer deposition from CF_2^+ ions on Si is taken as 200eV, while for SiO_2 the value of 80eV is used (see Table I). For the part of the surface covered with polymer we continue to use the same coefficient as for the substrate, while probably an intermediate value should be used. Thus for Si surfaces we could slightly over-predict polymer deposition, while for SiO_2 we could slightly under-predict polymer deposition.

Παράρτημα Β: Στοιχεία κινητικής θεωρίας των αερίων

Β.1. Βασικά στοιχεία[1]

Η κινητική θεωρία των αερίων βασίζεται σε ένα μικρό σύνολο παραδοχών και μπορεί να δώσει σημαντικά ποσοτικά αποτελέσματα. Βασίζεται στις παρακάτω παραδοχές που ορίζουν και το ιδανικό αέριο :

- Τα μόρια του αερίου συμπεριφέρονται σαν μικρές όμοιες ελαστικές σφαίρες και βρίσκονται σε τυχαία και διαρκή κίνηση. Έτσι, κατά τις συγκρούσεις των μορίων με τα τοιχώματα του δοχείου η κινητική τους ενέργεια δεν αλλάζει.
- Μεταξύ των κινούμενων μορίων δεν ασκούνται δυνάμεις παρά μόνο κατά τη στιγμή που συγκρούονται. Επομένως, η μεταξύ δύο συγκρούσεων κίνηση είναι ευθύγραμμη και ισοταχής.
- Το μέγεθος των μορίων είναι αμελητέο υπό την έννοια ότι η διάμετρος τους είναι πολύ μικρότερη από τη μέση απόσταση που διανύουν μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων.

Με βάση τις παραπάνω παραδοχές, προκύπτει ότι η σχέση που συνδέει την πίεση p ενός αερίου με τον όγκο V που αυτό καταλαμβάνει είναι η παρακάτω :

$$p\,V = \frac{1}{3}\,n\,M\,c \qquad (1)$$

όπου n είναι ο αριθμός των γραμμομορίων,
M το μοριακό βάρος και
$c = \langle u^2 \rangle^{1/2}$ η τετραγωνική ρίζα της μέσης τιμής του τετραγώνου του μέτρου της ταχύτητας u των μορίων του αερίου.

Τα μόρια ενός αερίου σε κατάσταση ισορροπίας δεν έχουν την ίδια ταχύτητα εξαιτίας του τυχαίου τρόπου με τον οποίο ανταλλάσσουν ενέργεια μεταξύ τους και με τα τοιχώματα του δοχείου. Εφαρμόζοντας την κινητική θεωρία, ο Maxwell κατέληξε σε μία ισοτροπική κατανομή των μορίων του αερίου στις διάφορες ταχύτητες. Η κατανομή που είναι γνωστή ως κατανομή Maxwell περιγράφεται από την εξίσωση (2) και αποδίδεται στο σχήμα 1.

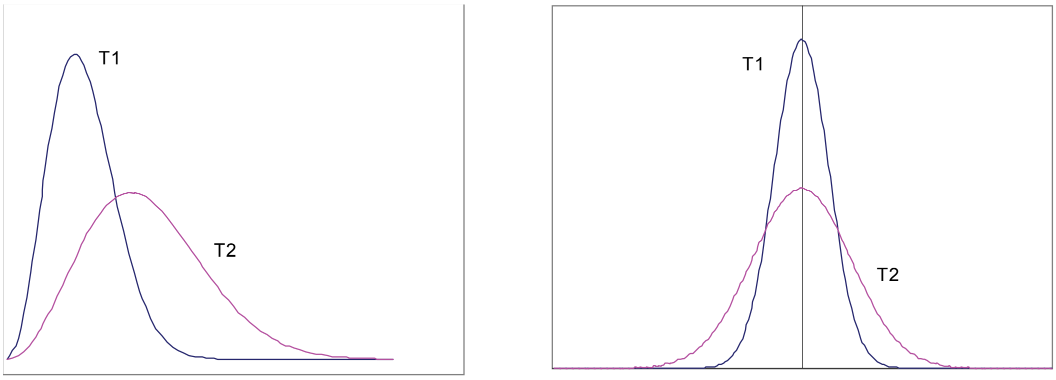
$$f(\boldsymbol{u}) = f(u_x, u_y, u_z) = f(u_x)\,f(u_y)\,f(u_z) =$$

$$= \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{1/2} e^{-Mu_x^2/2RT} \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{1/2} e^{-Mu_y^2/2RT} \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{1/2} e^{-Mu_z^2/2RT} =$$

$$= \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{3/2} e^{-Mu^2/2RT} \qquad (2)$$

και $f(u) = 4\pi u^2 \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{3/2} e^{-Mu^2/2RT}$ (3)

όπου $\boldsymbol{u}$ είναι η ταχύτητα (διάνυσμα) ενός μορίου,
u είναι το μέτρο της ταχύτητας ενός μορίου,
R η παγκόσμια σταθερά των αερίων και
T η απόλυτη θερμοκρασία του αερίου.



(α) (β)

<u>*Σχήμα Β.1.*</u> *α) Κατανομή Maxwell ταχυτήτων u β) Κατανομή Maxwell ταχυτήτων u_x για το ίδιο αέριο σε δύο διαφορετικές θερμοκρασίες ($T_1<T_2$).*

Η κατανομή Maxwell έχει επιβεβαιωθεί πειραματικά για αέρια και συνθήκες που πλησιάζουν το πρότυπο της κινητικής θεωρίας.

Με βάση την κατανομή ταχυτήτων μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση ταχύτητα, $\bar{c}$, των μορίων του αερίου

$$\bar{c} = \left(\frac{8RT}{\pi M}\right)^{1/2} \tag{4}$$

την τετραγωνική ρίζα της μέσης τιμής του τετραγώνου της ταχύτητας, c (root mean square velocity),

$$c = \left(\frac{3RT}{M}\right)^{1/2} \tag{5}$$

την πιθανότερη ταχύτητα, c^*, όπως προκύπτει από την κορυφή της κατανομής

$$c^* = \left(\frac{2RT}{M}\right)^{1/2} \tag{6}$$

και την σχετική μέση ταχύτητα, $\bar{c}_{rel}$ (relative mean square velocity), δηλαδή τη μέση ταχύτητα με την οποία ένα μόριο πλησιάζει ένα άλλο

$$\bar{c}_{rel} = 2^{1/2}\ \bar{c} \tag{7}$$

Η τελευταία εξίσωση μπορεί να γενικευτεί και για δύο διαφορετικά μόρια μάζας m_A και m_B :

$$\bar{c}_{rel} = \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2} \tag{8}$$

όπου $\mu = \dfrac{m_A m_B}{m_A + m_B}$ είναι η ανηγμένη μάζα των μορίων A και B και

$k = R/N_A$ η σταθερά Boltzmann.

Από τις σχέσεις (1) και (5) επιβεβαιώνεται η καταστατική εξίσωση του ιδανικού αερίου :

$$pV = n\,R\,T = N\,k\,T \tag{9}$$

όπου N είναι ο αριθμός των μορίων του αερίου στον όγκο V.

Η κινητική θεωρία μας επιτρέπει τον υπολογισμό της συχνότητας των συγκρούσεων μεταξύ των μορίων του αερίου καθώς και την απόσταση που διανύει κατά μέσο όρο ένα μόριο μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων.

Θεωρούμε ότι σύγκρουση συμβαίνει όταν τα κέντρα δύο μορίων σε απόσταση μικρότερη ή ίση από τη διάμετρο σύγκρουσης, d (collision diameter). Η διάμετρος d είναι τάξης μεγέθους της πραγματικής διαμέτρου των μορίων (για αδιαπέραστες σκληρές σφαίρες είναι ίση με τη διάμετρο της σφαίρας).

Η συχνότητα συγκρούσεων μεταξύ των μορίων, z, δηλαδή το πλήθος των συγκρούσεων ενός μορίου με άλλα προς το αντίστοιχο χρονικό διάστημα είναι

$$z = \sigma \bar{c}_{rel} \frac{N}{V} \tag{10}$$

όπου $\sigma = \pi d^2$ είναι η ενεργός διατομή σύγκρουσης (collision cross-section).

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (9) προκύπτει ότι

$$z = \frac{\sigma\, \vec{c}_{rel}\, p}{kT} \tag{11}$$

Με βάση τη συχνότητα συγκρούσεων μπορεί να υπολογιστεί το μήκος ελεύθερης διαδρομής, λ (mean free path), δηλαδή τη μέση απόσταση που διανύει ένα μόριο μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων :

$$\lambda = \frac{\bar{c}}{z} \tag{12}$$

Αντικαθιστώντας τη μέση ταχύτητα από την εξίσωση (4) και τη συχνότητα συγκρούσεων από την εξίσωση (12) καταλήγουμε :

$$\lambda = \frac{kT}{2^{1/2} \sigma\, p} \tag{13}$$

Β.2. Ροή αερίου σε επιφάνεια[1]

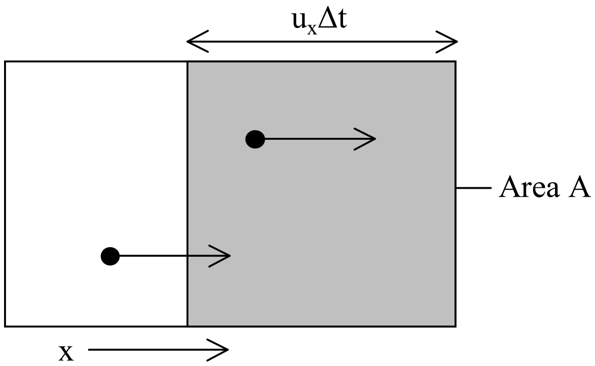
Η ροή που φτάνει σε μια επιφάνεια είναι ο ρυθμός με τον οποίο τα μόρια συγκρούονται με αυτή την επιφάνεια (που μπορεί να είναι μια φανταστική διατομή εντός του αερίου ή μέρος ενός τοιχώματος), δηλαδή το πλήθος των συγκρούσεων με την επιφάνεια σε ένα χρονικό διάστημα προς την επιφάνεια και το χρονικό διάστημα. Ας θεωρήσουμε ότι η επιφάνεια είναι ελεύθερη, δεν σκιάζεται.

Έστω μια επιφάνεια εμβαδού A κάθετη στη διεύθυνση x (σχήμα Β.2). Αν ένα μόριο έχει την x-συνιστώσα της ταχύτητας, u_x, θετική, δηλαδή κινείται προς την κατεύθυνση των θετικών x, θα συγκρουστεί με την επιφάνεια εντός χρονικού διαστήματος Δt μόνο αν βρίσκεται σε απόσταση $u_x\Delta t$. Επομένως, όλα τα μόρια εντός του όγκου $Au_x\Delta t$ και με $u_x>0$ θα συγκρουστούν με την επιφάνεια στο χρονικό διάστημα Δt. Ο συνολικός αριθμός συγκρούσεων σε αυτό το χρονικό διάστημα είναι το γινόμενο του όγκου $Au_x\Delta t$ με την πυκνότητα N/V του αερίου. Προκειμένου να λάβουμε υπόψη το εύρος ταχυτήτων στο αέριο, θα πρέπει να ολοκληρώσουμε το γινόμενο για όλες τις θετικές τιμές u_x με βάση την κατανομή ταχυτήτων στο αέριο. Έτσι, το πλήθος των συγκρούσεων δίδεται από την εξίσωση :

$$\text{Πλήθος συγκρούσεων} = \frac{N}{V} A\Delta t \int_0^\infty u_x f(u_x) du_x \tag{14}$$

Ενώ ο ρυθμός των συγκρούσεων ή η ροή του αερίου από την επιφάνεια A, j_x, είναι το πλήθος των συγκρούσεων προς το γινόμενο $A\Delta t$:

$$j_x = \frac{N}{V}\int_0^\infty u_x f(u) d^3u = \frac{N}{V}\int_0^\infty u_x f(u) 4\pi u^2 du = \frac{N}{V}\int_0^\infty u_x f(u_x) du_x \tag{15}$$



<u>Σχήμα Β.2.</u> Μόνο μόρια εντός της απόστασης $u_x\Delta t$ από την επιφάνεια A και με $u_x>0$ θα φτάσουν στην επιφάνεια A σε χρόνο Δt.

Αν θεωρήσουμε ότι η κατανομή ταχυτήτων ακολουθεί την Maxwell-Boltzmann, τότε η ροή j_x είναι :

$$j_x = \frac{1}{4}\bar{c}\mathcal{N} = \frac{p}{(2\pi mkT)^{1/2}} \tag{16}$$

όπου $\mathcal{N}$=N/V είναι η πυκνότητα του αερίου, το πλήθος των μορίων του αερίου ανά

μονάδα όγκου και
$m=M/N_A$ η μάζα ενός μορίου.

Αναφορές

[1] P. W. Atkins, *Physical Chemistry, sixth edition* (Oxford University Press, New York, 1999), p. 23-30, 723-725.

Παράρτημα Γ. Η μέθοδος ολοκλήρωσης Gauss και ο προσδιορισμός σημείων και συντελεστών βάρους

Η μέθοδος ολοκλήρωση Gauss (Gauss quadrature) βασίζεται στην προσέγγιση:

$$\int_a^b W(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} w_i f(x_i)$$

όπου W(x) συνάρτηση βάρους
και x_i, w_i είναι τα σημεία και οι συντελεστές βάρους Gauss αντίστοιχα.

Με τις μεθόδους ολοκλήρωσης Gauss έχουμε στη διάθεση μας διπλάσιο αριθμό βαθμών ελευθερίας σε σχέση με τις μεθόδους Newton-Cotes (τραπεζίου, Simpson κ.α). Μπορούμε να επιλέξουμε τόσο τα διαστήματα (σημεία υπολογισμού της προς ολοκλήρωσης συνάρτησης) όσο και τους συντελεστές βάρους. Έτσι, οι τύποι ολοκλήρωσης Gauss είναι τάξης ουσιαστικά διπλάσιας από αυτή των Newton-Cotes για δεδομένο αριθμό υπολογισμών της συνάρτησης. Ωστόσο, υψηλότερη τάξη δεν σημαίνει απαραίτητα και μεγαλύτερη ακρίβεια. *Υψηλή τάξη μεταφράζεται σε υψηλή ακρίβεια όταν η προς ολοκλήρωση συνάρτηση προσεγγίζεται ικανοποιητικά από ένα πολυώνυμο.*

Το σφάλμα αποκοπής της μεθόδου είναι:[1]

$$R_T = \frac{f^{(2N)}(\xi)}{2N!}\int_a^b w(x)[\pi(x)]^2 dx$$

όπου $\pi(x)=(x-x_1)(x-x_2)\ldots(x-x_N)$

Παρόλα αυτά δεν υπάρχει ένας πρακτικός τρόπος για την εκτίμηση του σφάλματος. Η καλύτερη πρακτική λύση είναι να αυξήσουμε το Ν κατά 50% ή 100% και να δούμε τη διαφορά στα αποτελέσματα σαν μια εκτίμηση του σφάλματος.[2]

Τα πλεονεκτήματά της σε σχέση με τους τύπους Newton-Cotes είναι[3] ότι

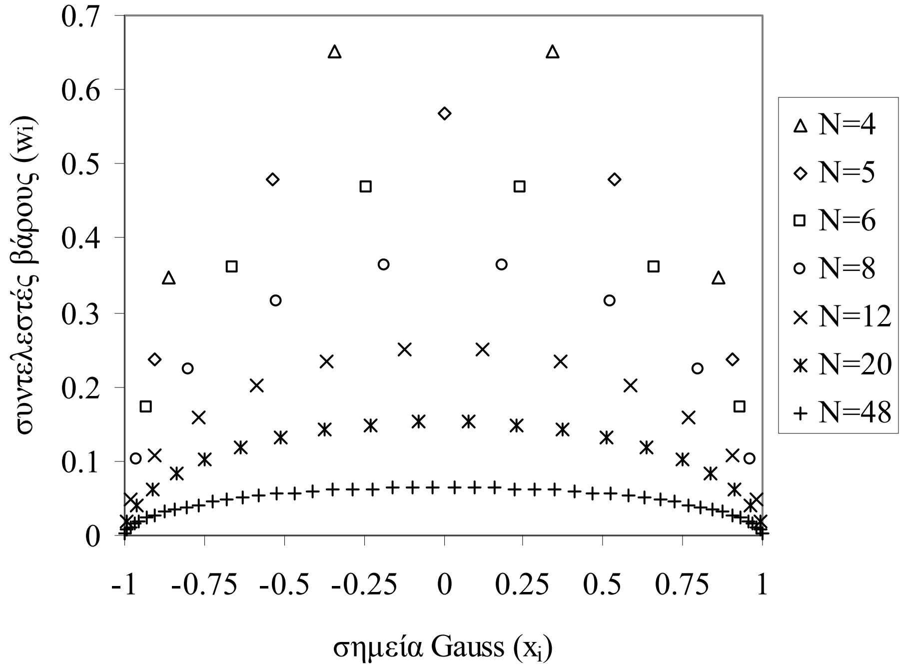
- αν η συνάρτηση που ολοκληρώνεται είναι πολυώνυμο 2Ν βαθμού (Ν ο αριθμός των σημείων υπολογισμού της f), τότε η μέθοδος είναι απόλυτα ακριβής.

- δεν χρησιμοποιεί σημεία της συνάρτησης στα άκρα του διαστήματος ολοκλήρωσης και συνεπώς μπορούμε να παρακάμψουμε ανώμαλα σημεία, αν υπάρχουν εκεί.

Υπάρχουν διάφοροι αλγόριθμοι για τον προσδιορισμό των συντελεστών βάρους και των σημείων Gauss. Αν η συνάρτηση βάρους είναι η W(x) =1 και το διάστημα ολοκλήρωσης το [-1,1] ο αλγόριθμος που ακολουθείται είναι των Gauss, Legendre και η μέθοδος καλείται ολοκλήρωση κατά Gauss-Legendre ή απλά ολοκλήρωση κατά Gauss.[4]

Ο αλγόριθμος Gauss-Legendre υλοποιείται σε κώδικα που έχει τη δυνατότητα να προσαρμόζει τα σημεία σε οποιοδήποτε διάστημα ολοκλήρωσης διαφορετικό του [-1,1]. Τα αποτελέσματα x_i,w_i (σχήμα Γ.1) που προκύπτουν από τους υπολογισμούς συγκρίνονται με τις τιμές των πινάκων που υπάρχουν στη γνωστή αναφορά των

Abramowitz and Stegun.[5] Διαφορά υπάρχει για κάποια από τα βάρη μετά το 10ο δεκαδικό για μικρά N και μετά το 15ο για μεγαλύτερα N. Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε έτοιμους πίνακες για τα x_i,w_i αλλά με τον υπολογισμό τους για κάθε N ο κώδικας γίνεται περισσότερο ευέλικτος. Εξάλλου, οι πίνακες δεν αναφέρονται σε όλες τις τιμές του N.



<u>Σχήμα Γ.1.</u> Τα N σημεία και οι αντίστοιχοι συντελεστές βάρους Gauss όπως υπολογίζονται από τον αλγόριθμο Gauss-Legendre.

Αναφορές

[1] F. Scheid, *Αριθμητική Ανάλυση*, (McGraw-Hill, New York, ΕΣΠΙ, Αθήνα 1976), σελ. 126.
[2] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing, 2nd edition*, (Cambridge University Press, New York, 1997), p. 793.
[3] N. Γλέζος, *Υπολογιστική Φυσική*, σημειώσεις μαθήματος του μεταπτυχιακού προγράμματος Μικροηλεκτρονικής, Αθήνα, 1999.
[4] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press, New York, 1988), p. 133,134.
[5] M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical functions, (Dover Publications, New York, 1964), p. 916.

Παράρτημα Δ : Η μέθοδος επίλυσης διαφορικών εξισώσεων Runge-Kutta 7ης τάξης με προσαρμοζόμενο βήμα

Για τον υπολογισμό του βάθους εγχάραξης στο κέντρο της βάσης ενός αυλακιού συναρτήσει του χρόνου καλούμαστε να λύσουμε τη διαφορική εξίσωση 13 (5ο κεφάλαιο):

$$ER(t,h) = ER(h) = \frac{dh}{dt} \text{ , } t \in [0,t_{end}] \text{ , } h(0) = h_0 \qquad (1)$$

ή

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \text{ , } x \in [a,b] \text{ , } y(a) = y_0 \qquad (2)$$

όπου $y=h$, $x=t$, $a=0$, $b=t_{end}$, $y_0=h_0$.

Η μέθοδος που χρησιμοποιείται για την επίλυση του παραπάνω προβλήματος αρχικών τιμών είναι η μέθοδος Runge-Kutta 7ης τάξης με προσαρμοζόμενο βήμα:

$k_1=f(x_r,y_r)$
$k_2=f(x_r+h/5,y_r+(h/5)k_1)$
$k_3=f(x_r+3h/40,y_r+(3h/40)(k_1-3k_2))$
$k_4=f(x_r+4h/5,y_r+(h/45)(44k_1-168k_2+160k_3))$
$k_5=f(x_r+8h/9,y_r+(h/6561)(19372k_1-76080k_2+64448k_3-1908k_4))$
$k_6=f(x_r+h,y_r+h((9017/3168)k_1-(355/33)k_2+(46732/5247)k_3+(49/176)k_4-(5103/18656)k_5))$
$k_7=f(x_r+h,y_r+h((35/384)k_1+(500/1113)k_3+(125/192)k_4-(2187/6784)k_5+(11/84)k_6))$

$y_{r+1}=y_r+h((35/384)k_1+(500/1113)k_3+(125/192)k_4-(2187/6784)k_5+(11/84)k_6)$
$y^*_{r+1}=y_r+h((5179/57600)k_1+(7571/16695)k_3+(393/640)k_4-(92097/339200)k_5+(187/2100)k_6+(1/40)k_7)$

Η μέθοδος υπολογίζει σε κάθε σημείο δυο προσεγγίσεις y_{r+1} , y^*_{r+1} με τις οποίες γίνεται η εκτίμηση του τοπικού σφάλματος για την προσέγγιση y_{r+1} από τη σχέση:

$$E_{r+1} = y^*_{r+1} - y_{r+1} \qquad (3)$$

Αν σε κάποιο σημείο δεν ικανοποιείται η σχέση $| E_{r+1} | < TOL$ (όριο ανοχής που ορίζεται από το χρήστη) οι υπολογισμοί επαναλαμβάνονται με νέο βήμα h_{new} το οποίο υπολογίζεται από τη σχέση :

$$h_{new} = 0.9h_{old}\{TOL / | E_{r+1} | \}^{1/5} \qquad (4)$$

Αν σε κάποιο σημείο ικανοποιείται η σχέση $| E_{r+1} | < TOL$, οι υπολογισμοί συνεχίζονται στο επόμενο σημείο (x_r+h_{new}) με το διάστημα h_{new} να ορίζεται από τη σχέση (4).