

การจำลอง 3 มิติ สำหรับการพิมพ์สามมิติด้วยไอออนจากแหล่งพลาสมา



นายธนัญชัย พิรุณพันธ์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรดุษฎีบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมนิวเคลียร์ ภาควิชานิวเคลียร์เทคโนโลยี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2551

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

**THREE DIMENSIONAL SIMULATION FOR IMPLANTATION WITH IONS
FROM PLASMA SOURCE**

Mr. Thananchai Piroonpan

**A Dissertation Submitted in Partial Fulfilment of the Requirements
for the Degree of Doctor of Engineering Program in Nuclear Engineering**

Department of Nuclear Technology

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

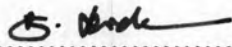
Academic Year 2008

Copyright of Chulalongkorn University


511083

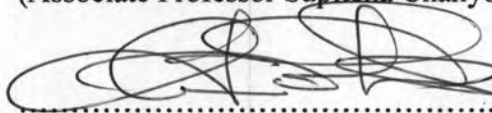
Thesis Title THREE DIMENSIONAL SIMULATION FOR ~~with focus on~~
IMPLANTATION WITH IONS FROM PLASMA SOURCE
By Mr. Thananchai Piroonpan
Field of study Nuclear Engineering
Thesis Advisor Associate Professor Sunchai Nilswankosit, Ph.D.

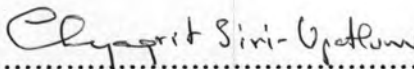
Accepted by the Faculty of Engineering, Chulalongkorn University in Partial
Fulfillment of the Requirements for the Doctoral Degree



.....Dean of Faculty of Engineering
(Associate Professor Boonsom Lerdhirunwong, Dr.Eng.)

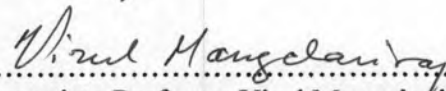
THESIS COMMITTEE

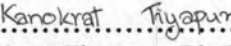

.....Chairman
(Associate Professor Supitcha Chanyotha, Ph.D.)


.....Advisor
(Associate Professor Sunchai Nilswankosit, Ph.D.)


.....Examiner
(Associate Professor Chyagrit Siri-Upathum)


.....Examiner
(Burin Asavapibhop, Ph.D.)


.....External Examiner
(Associate Professor Virul Manglaviraj)


.....External Examiner
(Kanokrat Tiya Pun, Ph.D.)

ธัญชัย พิรุณพันธ์ : การจำลอง 3 มิติ สำหรับการอิมพลานต์ด้วยไอออนจากแหล่งพลาสมา.
(THREE DIMENSIONAL SIMULATION FOR IMPLANTATION WITH IONS FROM PLASMA
SOURCE) อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รศ.ดร. สัจชัย นิลสุวรรณโฆษิต, 217 หน้า.

ได้สร้างแบบจำลอง 3 มิติ สำหรับการคำนวณการเคลื่อนที่ของพลาสมาภายใต้อิทธิพลของสนามไฟฟ้าแบบช่วงที่มีความเป็นลบสูง โดยให้สนามไฟฟ้าในช่วง 0 – 30 ไมโครวินาที ทำการจำลองภายใต้เงื่อนไขแบบขอบเขตแบบคาบ และศึกษาผลกระทบของช่วงเวลาในการให้สนามไฟฟ้าต่อการกระจายตัวของไอออนของไฮโดรเจนด้วยสมการของแมกเวลล์ และลอเรนซ์ พบว่าช่วงเวลาในการให้สนามไฟฟ้าไม่มีผลกระทบต่อการกระจายตัวของไอออนเมื่อความถี่ที่ให้แก่ระบบมากกว่าความถี่ของพลาสมา แต่พลังงานของไอออนในสนามพลาสมาขึ้นอยู่กับศักดาไฟฟ้าที่ให้กับระบบ

ได้ทำการศึกษาและวิเคราะห์ความสามารถในการทะลุทลวงของไอออนในตัวกลางที่มีโครงสร้างเป็นผลึกโดยอาศัยแบบจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล พลังงานศักย์ระยะไกลแบบครอบจักรวาลของ ZBL และพลังงานศักย์ระยะสั้นของเลนาร์ต โจนส์ ถูกใช้ในการคำนวณหาแรงภายในของโครงสร้างผลึกในตัวกลางที่ส่งผลกระทบต่อระดับพลังงานของไอออน แบบจำลองเชิงพลวัตเชิงโมเลกุลยังสามารถใช้ในการคำนวณหาระยะทางในการเคลื่อนที่ของไอออนและอธิบายพฤติกรรมของการเคลื่อนที่ของไอออนในตัวกลางได้ ผลจากการคำนวณค่าพิสัยที่ได้เทียบกับค่าที่ได้จากโปรแกรมมาตรฐาน TRIM/SRIM ได้ผลที่น่าพึงพอใจ โดยค่าพิสัยที่ได้นี้เป็นค่าเฉลี่ยการเคลื่อนที่ของไอออนในตัวกลางที่เป็นผลึก

ได้พัฒนาแบบจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลในการอธิบายพฤติกรรมของการเคลื่อนที่ด้วยไอออน พบว่าสามารถแบ่งชั้นของวัสดุเคลือบได้ตามค่าพิสัยและการกระจายตัวของไอออนได้เป็น 3 ชั้นคือ ชั้นเคลือบชั้นผสม และชั้นฐาน ในงานวิจัยครั้งนี้ความลึกของชั้นผสมและความหนาแน่นของไอออนในชั้นเคลือบสามารถปรับเปลี่ยนได้โดยการเปลี่ยนค่าพลังงาน ชนิดของไอออน และชนิดของตัวกลาง นอกจากนี้แล้วยังสามารถใช้ในการคำนวณหาเวลาที่ใช้ในการสร้างชั้นเคลือบและชั้นผสมได้

ภาควิชา.นิเวศวิทยเทคโนโลยี.....ลายมือชื่อนิสิต.....
สาขาวิชา.นิเวศวิทยเทคโนโลยี.....ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์.....
ปีการศึกษา.2551.....

4671839621: MAJOR NUCLEAR ENGINEERING

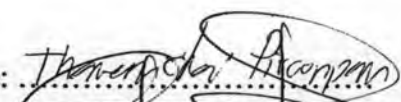
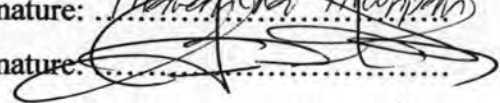
KEY WORD: PLASMA SOURCE ION IMPLANTATION/ ION COATING/
MOLECULAR DYNAMIC/ SIMULATION MODEL

THANANCHAI PIROONPAN: THREE DIMENSIONAL SIMULATION FOR
IMPLANTATION WITH IONS FROM PLASMA SOURCE. ADVISOR: Assoc.
Prof. Sunchai Nilsuwankosit, Ph.D., 217 pp.

A three-dimensional particle simulation model of plasma motion under the influence of the highly negative periodic electrical pulse was proposed. The pulses with the time period of 0-30 μ sec was applied under the periodic boundary condition. The ion density distribution was determined by the Maxwell's and Lorentz force equations. The electrical pulse did not affect the ion density distribution when the frequency of the pulses was higher than the plasma frequency.

The study simulated and analyzed the penetration of the ions in the crystalline medium by employing the molecular dynamic model. The universal ZBL long range potential and the Lennard Jones short range potential were considered in order to determine the interatomic force in the crystalline material, which impeded the motion of an ion in the medium. For this study, the molecular dynamic model was numerically implemented to determine the ion range and to describe the effect on the motion of an ion in the medium. Since the ion range in the lattice medium evaluated by this model was found to be comparable to the result obtained from the standard TRIM/SRIM code, it was concluded that the molecular model was adequate for the calculation of the ion range with the advantage that the motion of an ion in the crystalline medium could also be analyzed.

The developed model was then used to describe the ion coating process on the target. The layers of the coating ions were classified based on the ion range and the ions density distribution as the coating layer, the mixed layer and the basement layer. The model could be used to predict the thickness of the mixed layer and the ion intensity in the coating layer for the given ion energy. The time needed to create the mixed and the coating layers with the desired thickness and density could also be calculated.

Department: Nuclear Technology..... Student's signature: 
Field of study: Nuclear Engineering..... Advisor's signature: 
Academic year: 2008.....

ACKNOWLEDGEMENTS

This present dissertation would not have been accomplished without the author's advisor, Associated Professor Sunchai Nilswankosit, who not only originated this work, but also provided him with intensive suggestions, invaluable guidance, constructive criticisms, constant encouragement, inspiration and vital assistance throughout this research. *This study was conducted with the monetary support from the 72nd anniversary of H.M. King Bhumibol Adulyadej Scholarship by Chulalongkorn University.*

The author would also like to express his thank to his overseas supervisor Dr. Masaki Sukimoto (Research Group for Gas Separation Advanced Ceramics, Quantum Beam Science Directorate, Japan Atomic Energy Agency, Takasaki, Gunma, Japan) for the valuable recommendations, helpful guidance, and concerns during his stays in Japan. Deep gratitude is also given to Dr. Radoslaw A. Wach, Hiroyuki Hoshina and Dr. Masahito Yoshikawa for their fruitful discussion, worth advice and warm hospitality during his stay in Japan Atomic Energy Agency, Takasaki, Gunma, Japan. He would like to give sincere thank to all member in Research Group for Gas Separation Advanced Ceramics for their help, good time and good memories throughout his stay in Japan.

The author is also grateful to the dissertation committee for their suggestions and comments in the reading of the thesis book. He greatly appreciates all professors who have tendered invaluable knowledge to him at the Department of Nuclear Technology, Faculty of Engineering, Chulalongkorn University.

The author would also like to express his gratitude to all Professors in Department of Nuclear Technology, Faculty of Engineering, Chulalongkorn University who have helpful recommendation and warm encouragement throughout his education.

CONTENTS

	PAGE
Abstract (Thai)	iv
Abstract (English)	v
Acknowledgements	vi
Contents	vii
List of Tables	ix
List of Figures	x
CHAPTER	
I Introduction	1
1.1 Objective.....	2
1.2 Scope of research.....	2
1.3 Methodology.....	3
1.4 The expected results of this study.....	3
II Theoretical Background and Literature Review	4
2.1. Plasma Source Ion Implant.....	4
2.2 Theory of Plasma.....	7
2.3. Ion Implantation and Ion Coating.....	16
2.4 Ion Coating.....	18
2.5 Molecular Dynamic Calculation.....	18
2.6 Interatomic Potential	21
2.7 Two body short-range interaction.....	32
2.8 Particle Damping and Static Equilibrium Atom Position.....	36
2.9 Trajectory Calculation and Analysis on Coating Process.....	37
2.10 SRIM/TRIM Model.....	40
III Methodology	43
3.1. One Dimensional Simulation for Ions Motion in Plasma Field...	43
3.2 Three Dimensional Simulations for Ions Motion in Plasma Field	47

CHAPTER	PAGE
3.3 Plasma Source Ion Implantation.....	56
3.4 Ion Implantation.....	59
3.5 Ion Coating Model.....	71
IV Result and Discussions.....	76
4.1 Plasma Source Ion implantation.....	76
4.2 Ion Implantation.....	86
4.3 Ion Coating.....	96
V Conclusion.....	112
5.1 Plasma Source Ion Implantation.....	112
5.2 Ion Implantation.....	112
5.3 Ion Coating.....	112
References.....	114
Appendices.....	116
A. The Input files and codes for plasma source of ion implantation..	117
B. The Input files and codes for ion coating and implantation.....	177
VITAE.....	217

LIST OF TABLES

TABLE	PAGE
2.1 Interatomic potential.....	25
2.2 Functional forms for two-body interatomic potentials	35
4.1 The physical constants of the basement material with $Z = 26$ and the coating atom with $Z = 78$	87
4.2 % of each path ways at different ion energies.....	91
4.3 The properties of the mix layer zone.....	101
4.4 The properties of the coating layer.....	111

LIST OF FIGURES

FIGURE	PAGE
1.1 Schematic of implantation for coating concept.....	1
2.1 State of the matter.....	4
2.2 Schematic of conventional ion implantation.....	5
2.3 Schematic of plasma source ion implantation (PSII) process.....	6
2.4 Debye Shield.....	8
2.5 A Maxwellian velocity distribution.....	11
2.6 The relationship between interatomic energy and distance in lattice system.....	23
2.7 Corresponding to the equilibrium separation distance.....	24
2.8 Behavior of various potential functions over a range of separation distances between copper atoms.....	29
2.9 Characteristic of layer in coating model.....	39
2.10 SRIM/TRIM model Interface.....	42
3.1 Flow chart of Plasma source ion implant calculation.....	55
3.2 Schematic of simulation plasma container	58
3.3 Configuration of negative high voltage pulse biased.....	59
3.4 Flow chart of ion implantation calculation.....	71
3.5 Schematic of two body interatomic force equivalent between implanted ion and atom basement.....	73
3.6 Flow chart of ion coating calculation.....	75
4.1 The relationship of normalized ion density at $30 \mu\text{s } \lambda_0$	78
4.2 The relationship between normalized ion densities at $15 \mu\text{s } \lambda_0$	79
4.3 The relationship of normalized ion density at $3 \mu\text{Sec } \lambda_0$	80
4.4 The relationship of normalized ion density at $1.5 \mu\text{Sec } \lambda_0$	81
4.5 The relationship of normalized ion density at $0 \mu\text{Sec } \lambda_0$ (non biased)....	82
4.6 The effect of negative high voltage pulse biased time period in plasma flux movement.....	83

FIGURE	PAGE
4.7 The relationship of normalized ion flux density and time period.....	84
4.8.The relationship of ion velocity, energy and bias potential.....	85
4.9.The relationship of the increasing of the ion energy with time.....	86
4.10. The track of the 800eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the simple cubic basement material with $Z = 26$	88
4.11 The track of the 800eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the BCC basement material with $Z = 26$	89
4.12.Movement on Z axis of the 200eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC basement material with $Z = 26$	89
4.13.Velocity profile of the 200eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC basement material with $Z = 26$	90
4.14. The energy profile of the 200eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC basement material with $Z = 26$	90
4.15 Distribution of the ions ($Z = 78$) with different energies: (a) 200 eV, (b) 600 eV, and (c) 1000eV implanted on the SC lattice basement material ($Z = 26$).....	92
4.16. The distribution of the ions ($Z = 78$) with different energies: (a) 200 eV, (b) 600 eV, and (c) 1000eV implanted on the BCC lattice basement material ($Z = 26$).....	93
4.17. The comparison result of the coating ion with $Z = 78$ range in the basement material with $Z = 26$ by difference methods and structures	95
4.18. The distribution of 5 keV He ions implanted in the BCC Ta.....	95
4.19. The distribution of 25 keV N^+ ions implanted in the Si crystalline structure.....	96
4.20. The movement on Z axis of the first 200eV coating ion with $Z = 78$ implanted on the SC target with $Z = 26$	97
4.21. The velocity on Z axis of the first 100eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC target with $Z = 26$	97

FIGURE	PAGE
4.22 The energy profile of the first 100eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC target with $Z = 26$	98
4.23. The movement on Z axis of the first 200eV coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC target with $Z = 26$	99
4.24. Schematic of two body interatomic force equivalent between implanted ion and basement atom	99
4.25. The trajectory profile of the first coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC target with $Z = 26$	100
4.26. The energy profile of the first coating ion with $Z = 78$ implanted in the SC target with $Z = 26$	102
4.27. The energy profile of Pt ion at different range	103
4.28. The track of the 200eV coating ions with $Z = 78$ accumulate implanted in the SC target with $Z = 26$	104
4.29. The track of the 200eV coating ions with $Z = 78$ accumulate implanted in the SC target with $Z = 26$ that influence of periodic boundary condition.....	105
4.30. The track of the 100eV coating ions with $Z = 78$ accumulate implanted in the SC target with $Z = 26$	106
4.31 The track of the 200eV coating ions with $Z = 78$ accumulate implanted in the SC target with $Z = 26$	107
4.32. The track of the 200eV coating ions with $Z = 78$ accumulate implanted in the SC target with $Z = 26$	108
4.33. The distribution of the 200eV coating ions with $Z = 78$ in the SC target with $Z = 26$	109
4.34. The distribution of the 300eV coating ions with $Z = 78$ in the SC target with $Z = 26$	109
4.35. The distribution of the 200eV coating ions with $Z = 78$ in the SC target with $Z = 26$	111