

УДК 538.93

Расчет полных коэффициентов распыления слоистых неоднородных структур при бомбардировке мишеней легкими ионами

В. В. Манухин

На основе модели распыления слоисто-неоднородных поверхностей легкими ионами, получена аналитическая формула, позволяющая рассчитывать полные коэффициенты распыления слоев неоднородности с поверхности твердого тела легкими ионами. Результаты расчетов хорошо согласуются с данными компьютерного моделирования, и показывают, что при распылении с поверхности подложки слоя материала, состоящего из атомов массой существенно меньшей, чем масса атомов подложки, наблюдается существенное увеличение коэффициента распыления («эффект зеркала») атомов слоя.

PACS: 79.20.-m, 79.20.Rf, 81.15.Cd, 34.35.+a

Ключевые слова: распыление, ионная бомбардировка, слоисто-неоднородные поверхности, коэффициент распыления, легкие ионы.

Введение

В последнее время все более широко используются технологии, в результате которых на поверхности однородного материала наносятся тонкие пленки иного материала. Слоистость поверхности возникает также как следствие естественных процессов, например, таких, как адсорбция остаточных газов, окислительные процессы, ионно-стимулированная диффузия, радиационно-индуцированная сегрегация и т.п. Существование подобных слоистых структур ставит ряд задач о взаимодействии слоисто-неоднородных материалов с потоками заряженных частиц. В частности, возникает задача о распылении слоев неоднородности с поверхности иного материала.

Проведенные ранее исследования показали, что наличие на поверхности подложки однородного тонкого слоя материала, состоящего из атомов с массой существенно меньшей, чем масса атомов подложки, приводит к существенному увеличению коэффициента распыления материала этого слоя, по сравнению с коэффициентом распыления однородной мишени из материала слоя («эффект зеркала») [1].

В данной работе решается задача теоретического описания распыления слоистых структур легкими ионами. Решение задачи основывается на принципах инвариантного погружения Чандрасекара [2], и развиваются идеи, предложенные для описания ионного распыления свободных тонких пленок [3—5].

Теоретическая модель

Рассмотрим простейшую слоисто-неоднородную мишень с резкой границей раздела (см. рис. 1): однородный слой толщиной x_0 однородного однокомпонентного материала (2) на однородной полубесконечной подложке другого материала (3). Пусть широкий пучок ионов массой M_1 с энергией E_0 падает под углом θ_0 (угол отсчитывается от внутренней нормали к поверхности) на поверхность слоистой мишени. Сталкиваясь с атомами мишени, ионы рассеиваются на них, изменяя направление своего первоначального движения. Вследствие этого на любой глубине x часть ионов движется внутрь мишени, другая часть — к поверхности. Исходя из этого, для описания процесса распыления слоя неоднородности предлагается модель, основанная на принципах инвариантного погружения [2] и включающая в себя два механизма распыления (рис. 1).

Механизм 1. Распыление восходящим потоком ионов — прохождение ионов через слой неоднородности толщины x , отражение потока ионов от нижележащих слоев мишени (слой неоднородности толщиной $x_0 - x$ и подложка иного материала

Манухин Владимир Владимирович, доцент.
Национальный исследовательский университет «МЭИ».
Россия, 111250, Москва, ул. Красноказарменная, 14.
Тел. 8 (916) 304-04-46. E-mail: ManukhinVV@mpei.ru

Статья поступила в редакцию 20 сентября 2016 г.

ла), выбивание отраженным ионом первичного атома отдачи, самораспыление на прострел слоя толщиной x .

Механизм 2. Распыление нисходящим потоком ионов — прохождение иона через слой тол-

щиной x , выбивание первичного атома отдачи, отражение выбитого атома от нижележащих слоев мишени, либо распыление выбитым атомом слоистой структуры со слоем неоднородности x_0-x , самораспыление на прострел слоя толщиной x .

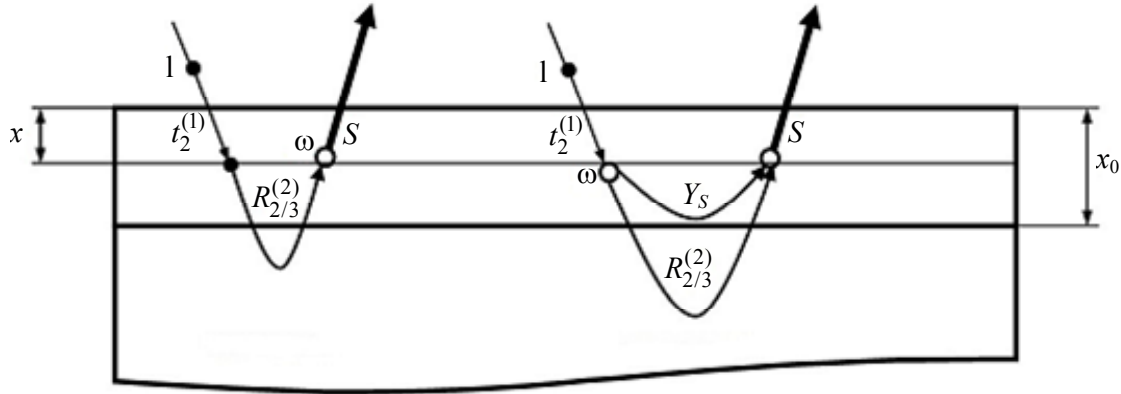


Рис. 1. Схематическое изображение процессов, приводящих к распылению слоя неоднородности.

В соответствии с предлагаемой моделью распыления слоисто-неоднородной мишени, учитывая принципы инвариантного погружения, полный коэффициент распыления слоя неоднородности можно описать следующим выражением:

$$Y(E_0, \theta_0, x_0) = N t_2^{(1)} \otimes R_{2/3}^{(1)} \otimes \omega \otimes S + N t_2^{(1)} \otimes \omega \otimes [R_{2/3}^{(2)} + Y_s] \otimes S. \quad (1)$$

В этом выражении знак \otimes обозначает интегрирование по всем общим параметрам, например:

$$t_2^{(1)} \otimes R_{2/3}^{(1)} \otimes \omega \otimes S = \int_0^{x_0} dx \int dE_1 \int d^2\Omega_1 \int dE_2 \int d^2\Omega_2 \int dT \int d^2\Omega_3 t_2^{(1)}(x, E_0, \Omega_0; E_1, \Omega_1) R_{2/3}^{(1)}(x_0 - x, E_1, \Omega_1; E_2, \Omega_2) \omega(E_2, \Omega_2; T, \Omega_3) S(x, T, \Omega_3),$$

В этих выражениях обозначено: N — атомная плотность материала слоя, $t_2^{(1)}$ — функция пропускания ионов (индекс 1) слоем материала 2, $R_{2/3}^{(1)}$ — дифференциальная функция отражения ионов (индекс 1) от слоисто-неоднородной мишени с толщиной слоя неоднородности (индекс 2) x_0-x , ω — сечение передачи энергии от движущегося иона неподвижному атому, S — функция прямого (на прострел) самораспыления слоя материала 2, $R_{2/3}^{(2)}$ — дифференциальная функция отражения атомов слоя неоднородности (индекс 2) от слоисто-неоднородной мишени с толщиной слоя неоднородности (индекс 2) x_0-x , Y_s — дифференциальная функция обратного самораспыления слоя неоднородности толщиной x_0-x .

Интегрирование выражения (1) проводилось с использованием следующих моделей и приближений.

1. Модель непрерывного замедления в приближении «прямо-вперед» для описания функции пропускания $t_2^{(1)}$ [6].

2. Модель степенного сечения передачи энергии от движущегося иона неподвижному атому [7].

3. Метод перевала при интегрировании функций отражения $R_{2/3}^{(1)}$ и $R_{2/3}^{(2)}$ [8].

4. Функции прямого самораспыления S и обратного самораспыления Y_s в рамках модели работы [3—5].

В результате интегрирования выражения (1) получена формула, позволяющая рассчитать полные коэффициенты распыления материала верхнего слоя неоднородности слоисто-неоднородной мишени легкими ионами:

$$Y(E_0, \theta_0, x_0) = \frac{1}{8C_0U} \frac{1}{p^{-1} + 1} \left[R_{N2/3}^{(1)}(E_0, \theta_0, x_0) S_n(E^*) \left[1 - (U / \gamma E^*)^{1-m} \right] + S_n(E_0) \psi(E_{th}^S / \gamma E_0, \theta_0) \right] [1 - 4E_4(C_0 N x_0)]. \quad (2)$$

Здесь приняты следующие обозначения: U — поверхностная энергия связи атомов слоя неоднородности [7]; C_0 — константа в степенном сечении рассеяния [7] ($C_0 = 1,808089 \text{ \AA}^2$); $E_4(C_0 N x_0)$ — интегральная экспонента; γ — кинематический фактор ($\gamma = 4M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$); $R_{N2/3}^{(1)}(E_0, \theta_0, x_0)$ — полный коэффициент отражения ионов от слоистой поверхности; p — безразмерная величина, определяемая пробегом ионов в материале (2): $p = 2C_0 R_0 R_p \cos \theta_0 / 3l_{tr}$, R_0 — полный пробег ионов в материале (2), R_p — проективный пробег ионов в материале (2), l_{tr} — транспортный пробег иона в материале (2); $S_n(\)$ — сечение ядерного торможения [9]; E^* — средняя энергия ионов, отраженных от слоистой структуры: $E^* = E_0 R_{E2/3}^{(1)}(E_0, \theta_0) / R_{N2/3}^{(1)}(E_0, \theta_0)$, $R_{E2/3}^{(1)}(E_0, \theta_0, x_0)$ — полный коэффициент отражения энергии ионов от слоисто-неоднородной поверхности; E_{th}^S — пороговая энергия самораспыления [10]; m — показатель степени в степенном сечении взаимодействия частиц, ψ — функция, определяющая самораспыление атомов слоя неоднородности, которая аппроксимирована выражением: $\psi(y) = 0,18694 [1 - y^{2/3}] [1 - y]^2$.

Результаты расчетов

Результаты расчетов по формуле (2) коэффициентов распыления пленок алюминия с поверхности никеля ионами водорода показывают, что при распылении с поверхности подложки слоя материала, состоящего из атомов массой существенно меньшей, чем масса атомов подложки (см. рис. 2), наблюдается существенное увеличение коэффициента распыления («эффект зеркала» [1]), по сравнению с коэффициентом распыления однородной мишени из материала слоя неоднородности.

На рис. 2 приведены результаты расчетов полных коэффициентов распыления по формуле (2) атомов слоя алюминия с поверхности никеля ионами водорода с энергией 1000 эВ и 5000 эВ (нормальное падение) в зависимости от толщины слоя алюминия. Результаты расчетов приведены в сравнении с данными компьютерного моделирования по программе SRIM-2013pro с аналогичными

исходными параметрами. Программа SRIM-2013pro основана на статистическом методе моделирования взаимодействия заряженных частиц с аморфными материалами (в т.ч. слоистыми), неоднократно апробирована [11] и доступна для научных расчетов (<http://www.srim.org/>).

Отмеченный выше эффект ранее был экспериментально исследован в работе [1] на других комбинациях материалов слоя и подложки. Результаты расчетов показывают, что, начиная с определенной толщины слоя неоднородности (в данном случае $\approx 250 \text{ \AA}$), наличие подложки не влияет на значение коэффициента распыления слоя неоднородности, а при увеличении энергии ионов увеличивается толщина слоя, при которой наблюдается максимум коэффициента распыления слоя неоднородности.

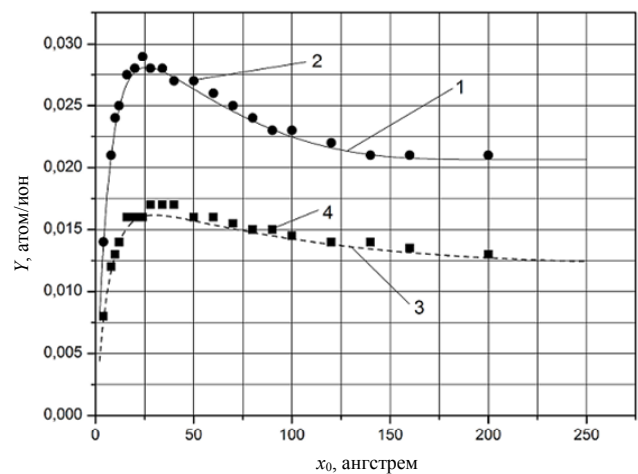


Рис. 2. Коэффициент распыления пленки алюминия (Al) с поверхности никеля (Ni) ионами водорода (H⁺) (нормальное падение) в зависимости от толщины пленки алюминия: 1 — расчет по формуле (2), энергия ионов водорода 1000 эВ, 2 — результаты компьютерного моделирования SRIM2013pro [11], энергия ионов водорода 1000 эВ, 3 — расчет по формуле (2), энергия ионов водорода 5000 эВ, 4 — результаты компьютерного моделирования SRIM2013pro [11], энергия ионов водорода 5000 эВ.

При распылении с поверхности подложки слоя материала, состоящего из атомов с массой большей, чем масса атомов подложки, наблюдается обратный эффект, а именно, уменьшение коэффициента распыления при определенной толщине слоя неоднородности (по сравнению с коэффициентом распыления однородной мишени из материала слоя неоднородности). На рис. 3 приведены результаты расчетов полных коэффициентов рас-

пыления атомов слоя никеля, находящегося на подложке из алюминия, ионами водорода с энергией 1000 эВ и 5000 эВ (нормальное падение), в зависимости от толщины слоя никеля. Результаты расчетов приведены в сравнении с данными компьютерного моделирования по программе SRIM-2013pro.

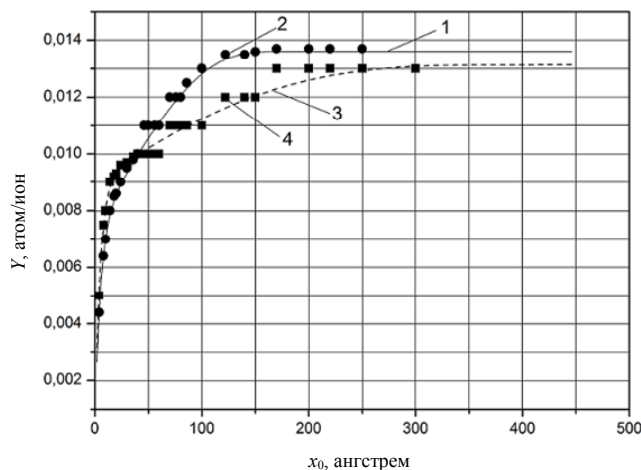


Рис. 3. Коэффициент распыления пленки никеля (Ni) с поверхности алюминия (Al) ионами водорода (H^+) (нормальное падение) в зависимости от толщины пленки никеля: 1 — расчет по формуле (2), энергия ионов водорода 1000 эВ, 2 — результаты компьютерного моделирования SRIM2013pro [11], энергия ионов водорода 1000 эВ, 3 — расчет по формуле (2), энергия ионов водорода 5000 эВ, 4 — результаты компьютерного моделирования SRIM2013pro [11], энергия ионов водорода 5000 эВ.

Заключение

В работе на основе предложенной модели распыления слоисто-неоднородных мишеней легкими ионами получена достаточно простая расчетная формула для полных коэффициентов распыления слоя неоднородности. Предложенная

модель позволяет объяснить наблюдаемый в эксперименте «эффект зеркала» — существенное увеличение коэффициента распыления слоя неоднородности (при определенной толщине этого слоя), находящегося на подложке материала, состоящего из более тяжелых атомов, по сравнению с коэффициентом распыления однородной мишени из материала слоя неоднородности. А именно, наличие подложки, состоящей из более тяжелых атомов, существенно увеличивает поток отраженных ионов [12], который, в свою очередь, увеличивает восходящий поток выбитых атомов слоя неоднородности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Абесаломов М. К., Афанасьев В. П., Манухин В. В., Федорович С. Д. Тезисы докладов XIX Всесоюзного совещания по физике взаимодействия частиц с кристаллами. — М.: Изд-во Моск. Университета, 1989. С. 188.
2. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. — М.: Изд-во иностр. лит., 1956.
3. Манухин В. В. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 8. С. 6.
4. Барат А. А., Манухин В. В. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 2. С. 117.
5. Манухин В. В. // Прикладная физика. 2007. № 5. С. 14.
6. Ремизович В. С., Рогозкин Д. В., Рязанов М. И. Флуктуации пробегов заряженных частиц. — М.: Энергоатомиздат, 1988.
7. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бериша. — М.: Мир, 1984. Т. 1.
8. Джеффрис Г., Свирлс Б. Методы математической физики, пер. с англ., вып. 1-3, гл. 17. — М., «Мир», 1970.
9. Biersak J., Haggmark L. G. // Nucl. Instr. and Meth. 1980. Vol. 174. P. 257.
10. Matsunami N., Yamamura Y., Itikawa Y. // Atomic data and nuclear data tables. 1984. Vol. 31. P. 1.
11. James F. Ziegler, Jochen P. Biersack, Matthias D. Ziegler SRIM — The Stopping and Range of Ions in Matter; <http://www.srim.org>
12. Афанасьев В. П., Манухин В. В., Науекс Д. // Поверхность (Физика, химия, механика). 1990. № 9. С. 151.

Calculation of total sputtering coefficients of layered heterogeneous structures at bombarding a target by light ions

V. V. Manukhin

National Research University "MPEI"
14 Krasnokazarmennaya str., Moscow, 111250, Russia
E-mail: ManukhinVV@mpei.ru

Received September 20, 2016

There is an analytical formula allowing to calculate the sputtering yields of heterogenous solid targets with light ions, based on the model of sputtering layered surfaces with light ions. The results of the calculations are in good agreement with the data of computer simulation, and show that the sputtering

yields layers with a certain thickness, higher than the sputtering yields of homogeneous material layer targets ("mirror effect").

PACS: 79.20.-m, 79.20.Rf, 81.15.Cd, 34.35.+a

Keywords: sputtering, ion bombardment, layered surface, sputtering yield, light ions.

REFERENCES

1. M. K. Abesalomov, V. P. Afanas'ev, V. V. Manukhin, and S. D. Fedorovich, in *Proc. All-USSR Meeting on Physics of Interaction of Particles with Crystals*, Ed. by Prof. A.F. Tulinov. (MGU, Moscow, 1989). P. 188 [in Russian].
2. S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer* (Oxford, 1950).
3. V. V. Manukhin, *Tech. Phys.* **52**, 968 (2007).
5. V. V. Manukhin, *Prikl. Fiz.*, No. 5, 14 (2007).
6. V. S. Remizovich, D. V. Rogozkin, and M. I. Ryazanov, *Fluctuations of Charge Particle Paths* (Moscow, Energoatomizdat, 1988) [in Russian].
7. *Sputtering by Particle Bombardment, vol. I*. Ed. by R. Behrish, (Springer-Verlag, 1981).
8. Y. Jeffreys and B. S. Jeffreys, *Methods of Mathematical Physics* (Cambridge Univ. Press, 1966).
9. J. Biersak and L. G. Hagmark, *Nucl. Instr. and Meth.* **174**, 257 (1980).
10. N. Matsunami, Y. Yamamura, and Y. Itikawa, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **31**, 1-80 (1984).
11. James F. Ziegler, Jochen P. Biersack, Matthias D. Ziegler, *SRIM — The Stopping and Range of Ions in Matter* // <http://www.srim.org>
12. V. P. Afanas'ev, V. V. Manukhin, and D. Naueks, *Poverkhnost'*, No. 9, 151 (1990).