

Распыление карбидных пленок с поверхности титана и вольфрама ионами гелия средних энергий

В. В. Манухин

Аналитическая модель распыления бинарных слоистых неоднородных мишеней применена к случаю распыления пленок карбида металла с поверхности металла ионами гелия. На основе модели получена аналитическая формула, позволяющая рассчитать полный и парциальные коэффициенты распыления неоднородных мишеней легкими ионами. Результаты расчетов полных коэффициентов распыления пленок карбидов титана и вольфрама с поверхности металлов ионами гелия приведены в сравнении с результатами компьютерного моделирования.

Ключевые слова: модифицированная поверхность, распыление, легкие ионы, ионная бомбардировка, слоисто-неоднородные поверхности, карбиды металлов, парциальный коэффициент распыления.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-3-67-72

Введение

Модификация поверхности металлов углеродом широко используется для создания поверхностных покрытий с необходимыми свойствами. Изменение состава поверхности металлов может происходить также в результате естественных процессов, таких как ионно-индуцированная диффузия, адсорбция остаточных газов и радиационно-индуцированная сегрегация. Металлы с модифицированными поверхностями часто используются в конструкциях установок плазменных исследований. При облучении металлов с покрытиями из карбида металла потоками ионов возникает задача описания взаимодействия ионов с такими поверхностями, в том числе проблема описания распыления слоисто-неоднородных поверхностей. Классические теории распыления [1–3], позволяющие достаточно точно

рассчитать коэффициенты распыления однородных материалов, не могут быть применены к случаю распыления слоистых структур. В данной работе решается задача теоретического описания распыления слоя бинарного соединения (карбида металла) с поверхности металла легкими ионами. Решение задачи основано на методе, изложенном в работе Чандрасекара [4] и развивает идеи, ранее предложенные для описания распыления однородных тонких пленок [5], двухкомпонентных однородных материалов [6] и слоистых мишеней [7].

Теоретическая модель

Для описания распыления модифицированных углеродом поверхностей используется простейшая модель слоистой неоднородной мишени с резкой границей раздела: на однородной металлической подложке большой толщины располагается однородный слой толщиной x_0 карбида металла M_qC_b (где q и b – стехиометрические коэффициенты атомов металла (массы M_1) и атомов углерода (массы M_2) в соединении). Бомбардировка мишени осуществляется широким пучком легких ионов с

Манухин Владимир Владимирович, доцент, к.ф.-м.н.
E-mail: ManukhinVV@mpei.ru
Национальный исследовательский университет «МЭИ».
Россия, 111250, Москва, ул. Красноказарменная, 14.

Статья поступила в редакцию 15 марта 2022 г.

© Манухин В. В., 2022

массой M_0 и с энергией E_0 , направленным под углом θ_0 (угол отсчитывается от внутренней нормали к поверхности) на мишень. Для того чтобы не учитывать изменение компонентного состава поверхностного слоя мишени, будем считать, что доза облучения мала.

В основе модели распыления пленок карбида металла с поверхности металла легкими ионами, лежит предположение, что в мишени на глубине x существует два потока ионов: один направлен, в основном, внутрь мишени, другой, в результате рассеяния ионов на атомах, направлен к поверхности. Следуя методу, изложенному в [4], в мишени на глубине x можно выделить два потока первично выбитых атомов: один направлен в основном вглубь мишени, другой – к поверхности. Вследствие этого, предполагается, что распы-

ление каждого компонента слоя может быть представлено как последовательность процессов, инициированных восходящим и нисходящим потоками ионов независимо (два механизма распыления) [6, 7]. В этом подходе не предполагается, как в работе [5], совместное решение интегральных уравнений, описывающих отдельно потоки ионов и выбитых атомов, а записывается интегральное выражение, в которое входят функции, описывающие как поток ионов, так и поток атомов, значения которых определяются независимыми методами.

Каждый механизм, приводящий к распылению i -го компонента верхнего слоя мишени, представлен в виде последовательности процессов, графическое изображение последовательности которых приведено на рис. 1.

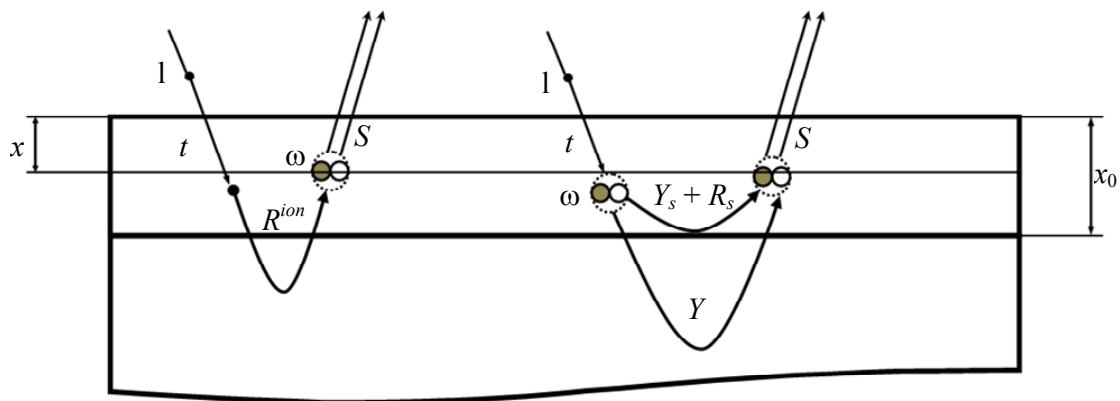


Рис. 1. Графическое изображение процессов, приводящих к распылению мишени с карбидным слоем на поверхности

Распыление восходящим потоком ионов (механизм 1):

- прохождение ионов через слой карбида металла толщиной x – описывается с помощью дифференциальной функции пропускания t ионов слоем мишени толщиной x [8];
- отражение потока ионов от нижележащих слоев мишени – определяется посредством дифференциальной функции отражения ионов R_{ion} от слоисто-неоднородной мишени с толщиной слоя неоднородности $x_0 - x$ [9];
- выбивание из двухкомпонентного слоя неоднородности первичного атома отдачи с эффективным зарядом Z_{ef} отраженным ионом – описывается с помощью сечения передачи энергии ω от движущегося иона к неподвижному атому [1];

- эмиссия выбитых атомов бинарного слоя неоднородности, движущихся с глубины x к поверхности – рассматривается в рамках модели [5] с использованием дифференциальной функции S_i прямого (на прострел) самораспыления слоя материала компонента i .

Распыление нисходящим потоком ионов (механизм 2):

- прохождение ионов через слой карбида металла толщиной x ;
- выбивание из двухкомпонентного слоя неоднородности первичных атомов отдачи с эффективным зарядом Z_{ef} по направлению вглубь мишени;
- отражение выбитых атомов компонентов двухкомпонентного слоя неоднородности от нижележащих слоев мишени (описыв-

вается дифференциальной функцией самоотражения атомов слоя мишени R_s) или распыление нижележащих атомов материала (включая атомы подложки) – определяется с помощью дифференциальной функции обратного самораспыления слоя Y_s [5] и дифференциальной функцией распыления материала подложки Y ;

- эмиссия первичных и вторичных выбитых атомов, движущихся с глубины x к поверхности.

При применении выше перечисленных механизмов распыления двухкомпонентных слоистых мишеней использованы следующие приближения:

- Движущиеся частицы взаимодействуют только с неподвижными атомами мишени (движущиеся частицы не взаимодействуют друг с другом);

- Взаимодействие рассматривается в модели парных столкновений [1] по двум независимым каналам: упругим (учитывается изменение, как направления движения, так и энергии частицы) и неупругим (движущаяся частица теряет энергию, но не меняет своего направления движения) [8];

- Для описания упругого взаимодействия использована модель степенного сечения взаимодействия [1];

- Торможение ионов в карбидном слое рассматривается как замедление ионов в однокомпонентном материале, состоящем из атомов с эффективным зарядом и массой [8]:

$$Z_{ef} = \sum_{i=1}^n c_i Z_i, \quad M_{ef} = \sum_{i=1}^n c_i M_i \quad (i = 1, \dots, n), \quad (1)$$

где c_i – относительная концентрация i -го компонента в соединении.

- Предполагается, что эффективность распыления атомов мишени пропорциональна энергии, передаваемой атомам от налетающего иона (энергия, передаваемая ионами атомам мишени в результате упругих столкновений). Считаем, что ион передает в единицу объема энергию атому с эффективным зарядом Z_{ef} , которая перераспределяется между компонентами пропорционально их относительной концентрации в соединении. При этом энергия, приходящаяся на каждый атом соединения, не должна превышать энергию,

передаваемую при упругом взаимодействии ион-атом – $\gamma_i E_0$ (γ_i – кинематический фактор при столкновении иона с атомом компоненты i).

- Эмиссия атомов с поверхности мишени, описывается в модели плоского поверхностного потенциального барьера. Энергия поверхностной связи атомов i -го компонента в соединении U_i рассчитывается по формуле [2]:

$$U_i = \left(U_{0i} + \sum_{j=1, j \neq i}^n c_j U_{0j} \right) / \left(1 + \sum_{j=1, j \neq i}^n c_j \right), \quad (2)$$

где U_{0i} – энергия связи атомов i -го компонента в однокомпонентном материале.

Учитывая успешную апробацию модели распыления двухкомпонентных однородных мишеней легкими ионами [6], распыление i -компонента двухкомпонентного слоя будет рассматриваться как распыление однокомпонентной однородной мишени, состоящей из атомов с Z_{ef} с учетом плоского поверхностного потенциала U_i для каждого компонента.

Парциальный коэффициент распыления компонента i , определяемый как среднее количество атомов компонента i , вылетевших с поверхности мишени на один падающий ион, в рамках предлагаемой модели можно описать следующим символьным выражением:

$$Y_i(E_0, \theta_0) = N_i t \otimes R^{ion} \otimes \omega \otimes S_i + N_i t \otimes \omega \otimes [R_s + Y_s + Y] \otimes S_i. \quad (3)$$

Здесь символ \otimes – обозначает интегрирование по всем общим параметрам интегрируемых функций, N_i – концентрация атомов i -го компонента.

Интегрирование выражения (3) проводилось с использованием следующих моделей и приближений:

- Модель непрерывного замедления ионов в приближении «прямо-вперед» при описании функции пропускания [8];

- При проведении интегрирования функции отражения ионов и сечения передачи энергии использовался метод перевала [10].

В результате интегрирования выражения (3) получена формула, позволяющая рассчитать парциальные коэффициенты распыления i -го компонента материала верхнего бинарного слоя неоднородности мишени легкими ионами:

$$Y_i(E_0, \theta_0, x_0) = \frac{1}{8C_0 U_i} \frac{1}{1+p} \left[\frac{\gamma_i}{\gamma_0} \right]^{1-m} \times$$

$$\times \left\{ R_N^{ion}(E', \theta_0, x_0) S_n(E^*(E')) \left[1 - \left(\frac{U_i}{\gamma_i E^*(E')} \right)^{1-m} \right] + S_n(E') \psi \left(\frac{E_{th}^s}{\gamma_i E'}, \theta_0 \right) (1 + \delta_{1i} 3E_3(C_0 N x_0)) \right\} \times$$

$$\times [1 - 4E_4(C_0 N x_0)].$$

Здесь C_0 – константа в степенном сечении рассеяния ($C_0 = 1,808089 \text{ \AA}^2$);

$E_n(C_0 N x_0)$ – интегральная экспонента степени n ;

E' – средняя энергия ионов в слое неоднородности, рассчитываемая по формуле

$$E' = E_0 \left(1 - 3 / (4C_0 N (1+p) R_0 \cos \theta_0) \right);$$

δ_{1i} – символ Кронекера;

N – концентрация атомов в слое;

p – безразмерная величина, зависящая от пробега ионов в материале:

$$p = 2C_0 R_0 R_p \cos \theta_0 / 3l_{tr},$$

γ_0 – кинематический фактор при столкновении ион – «атом с Z_{ef} »;

$R_N^{ion}(E_0, \theta_0, x_0)$, $R_E^{ion}(E_0, \theta_0, x_0)$ – полные коэффициенты отражения ионов и энергии ионов от слоистой мишени;

R_0 , R_p , l_{tr} – полный, проективный и транспортный пробеги ионов в материале слоя;

S_n – сечение ядерного торможения ионов [1];

E^* – средняя энергия ионов, отраженных от слоистой мишени:

$$E^* = E_0 \times R_E^{ion}(E_0, \theta_0, x_0) / R_N^{ion}(E_0, \theta_0, x_0),$$

E_{th}^S – пороговая энергия самораспыления [11];

m – показатель в степенном приближении сечения ядерного торможения. Показатель степени рассчитывается по ранее апробированной аппроксимационной формуле (для средних энергий ионов) [12], в зависимости от энергии налетающего иона (в единицах приведенной энергии Лидхарда ε [1]):

$$m(\varepsilon) = 1 - \exp(-0,9\varepsilon^{0,22});$$

ψ – функция, определяющая самораспыление атомов, которая аппроксимируется выражением [7]:

$$\psi(y) = 0,18694 [1 - y^{2/3}] \times [1 - y]^2,$$

$$\psi(y, \theta_0) = \psi(y, 1) + (1 - \psi(y, 1))(1 - \cos \theta_0)^{1,5}.$$

Полные коэффициенты распыления мишени рассчитываются как сумма парциальных коэффициентов распыления компонентов слоя:

$$Y(E_0, \theta_0, x_0) = \sum_{i=1}^2 Y_i(E_0, \theta_0, x_0).$$

Результаты расчетов полных коэффициентов распыления слоев карбида титана и карбида вольфрама с поверхности металлов представлены на рис. 2 и 3.

Результаты расчетов

На рис. 2 результаты расчета полных коэффициентов распыления слоев TiC с поверхности чистого титана ионами гелия (He^+) в зависимости от толщины слоя карбида титана (нормальное падение ионов с энергией 1 кэВ) приведены в сравнении с результатами компьютерного моделирования, полученными с помощью программы SRIM-2013pro (<http://www.srim.org/>). Наблюдается хорошее согласие между расчетными значениями и результатами моделирования. Следует отметить, что наблюдается существенное увеличение коэффициента распыления карбида титана при определенной толщине слоя по сравнению с коэффициентом распыления однородной двухкомпонентной мишени, как и в случае распыления слоисто-неоднородных однокомпонентных материалов [7].

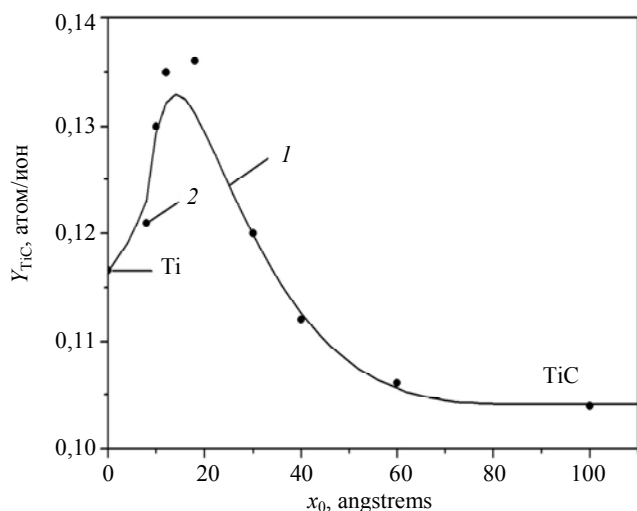


Рис. 2. Результаты расчетов полных коэффициентов распыления слоя TiC с поверхности Ti ионами гелия в зависимости от толщины слоя TiC: 1 – расчет по формуле, 2 – результаты компьютерного моделирования SRIM-2013pro

Результаты расчета коэффициентов распыления слоев WC с поверхности чистого вольфрама ионами гелия (He^+) в зависимости от толщины слоя карбида вольфрама (нормальное падение ионов с энергией 1 кэВ) представлены на рис. 3 в сравнении с результатами компьютерного моделирования, полученными с помощью программы SRIM-2013pro (<http://www.srim.org/>).

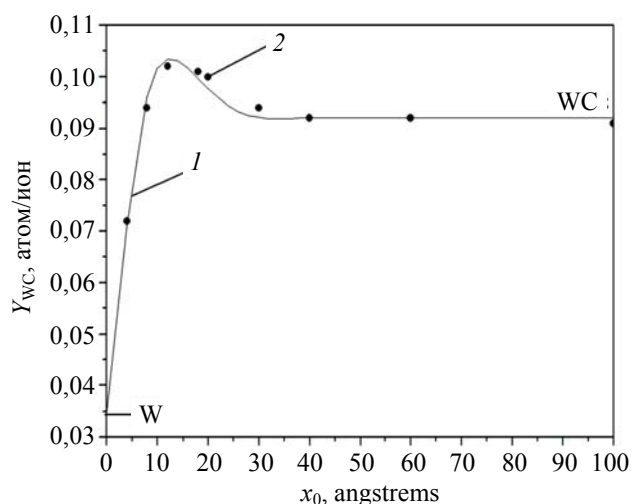


Рис. 3. Результаты расчетов полных коэффициентов распыления слоя WC с поверхности W ионами гелия в зависимости от толщины слоя WC: 1 – расчет по формуле, 2 – результаты компьютерного моделирования SRIM-2013pro

Заключение

Отмеченный выше «эффект зеркала» [7] при распылении пленок карбида металла определенной толщины с поверхности металла, связан с тем, что эффективная масса верхнего распыляемого слоя меньше массы атомов однородной подложки. Поэтому восходящий поток ионов в слоистой мишени больше, чем в мишени, состоящей из материала слоя. Как следствие этого – коэффициент распыления оказывается тоже больше. Также можно заметить, что при стремлении толщины слоя карбидного соединения к нулю, коэффициент распыления определяется значением коэффициента распыления материала подложки. При достаточно толстых слоях карбида металла коэффициент распыления определяется значением коэффициента распыления мишени, состоящей только из карбида металла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Behrisch R. Sputtering by Particle Bombardment I: Physical Sputtering of Single-Element Solids. – New York: Springer, 1981.
2. Behrisch R. Sputtering by Particle Bombardment II: Sputtering of Alloys and Compounds, Electron and Neutron Sputtering, Surface Topography. – New York: Springer, 1983.
3. Falcone G. Sputtering Theory. // La Rivista del Nuovo Cimento. 1990. Vol. 13. № 1. P. 1.
4. Chandrasekhar S. Radiative Transfer. – Oxford: Clarendon Press, 1950.
5. Манухин В. В. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 8. С. 6.
6. Манухин В. В. // Прикладная физика. 2018. № 6. С. 69.
7. Манухин В. В. // Прикладная физика. 2016. № 5. С. 5.
8. Ремизович В. С., Rogozkin Д. В., Рязанов М. И. Флуктуации пробегов заряженных частиц. – М.: Энергоатомиздат, 1988.
9. Afanasev V. P., Naujoks D. // Z. Phys. 1991. Vol. 84. P. 397.
10. Джеффрис Г., Свирлс Б. Методы математической физики / пер. с англ. – М.: «Мир», 1970. Вып. 1–3. Гл. 17.
11. Matsunami N., Yamamura Y., Itikawa Y. // Atomic data and nuclear data tables. 1984. Vol. 31. P. 1.
12. Манухин В. В. Тезисы докладов XXXII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / под ред. проф. А. Ф. Тулинова. – М.: Изд-во Моск. Университета, 2002.

Sputtering of titanium and tungsten carbide films from the surface titanium and tungsten by helium ions of medium energies bombardment

V. V. Manukhin

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

Received March 15, 2022

The analytical model of sputtering of binary layered inhomogeneous targets is applied to the case of sputtering of metal carbide films from the metal surface with helium ions. On the basis of the model, an analytical formula was obtained that allows to calculate the complete and partial sputtering yields of inhomogeneous targets by light ions. The calculation results of the total sputtering yields of titanium and tungsten carbide films from the surface of metals by helium ions are given in comparison with the results of computer simulation.

Keywords: modified surface, ion bombardment, sputtering, light ions, layered surface, metal carbide, sputtering yield, partial sputtering yield.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-3-67-72

REFERENCES

1. R. Behrisch, *Sputtering by Particle Bombardment I: Physical Sputtering of Single-Element Solids*. (Springer, New York, 1981).
2. R. Behrisch, *Sputtering by Particle Bombardment II: Sputtering of Alloys and Compounds, Electron and Neutron Sputtering, Surface Topography*. (Springer, New York, 1983).
3. G. Falcone, *Sputtering Theory // La Rivista del Nuovo Cimento*, **13** (1), 1 (1990).
4. S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer*. Oxford, Clarendon Press, 1950. – 393 p.
5. V. V. Manukhin, *Tech. Phys.*, No. 52, 968 (2007).
6. V. V. Manukhin, *Applied Physics*, No. 6, 69 (2018) [in Russian].
7. V. V. Manukhin, *Applied Physics*, No. 5, 5 (2016) [in Russian].
8. V. S. Remizovich, D. V. Rogozkin, and M. I. Ryazanov, *Fluktuazii probegov zaryazennykh chastits*. (Energoatomizdat, Moscow, 1988).
9. V. P. Afanasev and D. Naujoks, *Z. Phys.* **84**, 397 (1991).
10. Y. Jeffreys and B. S. Jeffreys, *Methods of mathematical physics, 3-ed ed.* (Cambridge Univ. Press, 1966).
11. N. Matsunami, Y. Yamamura, and Y. Itikawa, *Atomic data and nuclear data tables* **31**, 1 (1984).
12. V. V. Manukhin, *Tesisy meghdunarodoy konferenzii po vzaimodeystviu zaryaghenykh chastitz s kristallami / pod red. Prof. A. F. Tulinova*. – (MSU, Moscow, 2002) [in Russian].