

**Распыление двухкомпонентных однородных мишеней легкими ионами***В. В. Манухин*

*На основе модели распыления двухкомпонентных материалов легкими ионами получена аналитическая формула, позволяющая рассчитывать полные и парциальные коэффициенты распыления бинарной мишени легкими ионами. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными. Выявлены закономерности преимущественного распыления двухкомпонентных материалов при низких энергиях бомбардирующих ионов.*

*Ключевые слова:* распыление, ионная бомбардировка, многокомпонентные материалы, парциальный коэффициент распыления, преимущественное распыление, легкие ионы.

**Ссылка:** Манухин В. В. // Прикладная физика. 2018. № 6. С. 69.

**Reference:** V. V. Manukhin, Prikl. Fiz., No. 6, 69 (2018).

**Введение**

Поскольку практически все материалы, используемые в технике, представляют собой многокомпонентные соединения, то особый интерес представляют процессы взаимодействия потоков ионов именно с многокомпонентными материалами. Отличительной особенностью распыления многокомпонентных материалов потоками ионов является тот факт, что при бомбардировке сплавов компоненты мишеней распыляются с различной интенсивностью (т. е. коэффициенты распыления компонентов различны) [1, 2]. Как следствие этого и других сопутствующих процессов (имплантация, ионное перемешивание и др.), концентрация компонентов в приповерхностных слоях мишени меняется (мишени становятся неоднородными), что, в свою очередь, влияет на интенсивность дальнейшего распыления. В связи с этим теоретическое описание явления распыления многокомпонентных материалов представляет собой многозадачную проблему.

Подход к описанию распыления многокомпонентных материалов, основанный на теории распыления П. Зигмунда, базирующейся на решении кинетического уравнения Больцмана, хотя и имеет ограниченную область применения, но до сих пор является основным при расчетах коэффици-

циентов распыления и сопутствующих эффектов (т. н. преимущественное распыление) [1, 2].

Целью данной работы является представление новой модели распыления однородных двухкомпонентных материалов легкими ионами. Модель основывается на подходе, уже апробированном для случая распыления однокомпонентных однородных материалов [3]. При этом предполагается, что атомы мишени распыляются за счет двух механизмов: распыление нисходящим потоком ионов и распыление восходящим потоком ионов. Этот модельный подход легко трансформируется под описание распыления неоднородных мишеней [4], что позволяет исследовать и более реальные мишени.

**Теоретическая модель**

Рассмотрим однородную аморфную полубесконечную двухкомпонентную мишень  $A_qB_b$  (где  $q$  – стехиометрический коэффициент элемента  $A$  массой  $M_1$  в соединении,  $b$  – стехиометрический коэффициент элемента  $B$  массой  $M_2$  в соединении), на поверхность которой под углом  $\theta_0$  от нормали к ней падает широкий пучок легких ионов (каждый массой  $M_0$  и с энергией  $E_0$ ). Ограничимся при этом случаем малых доз облучения, что позволяет считать мишень однородной по глубине. Другими словами, состав мишени не меняется на протяжении всего времени распыления.

При теоретическом описании процесса распыления двухкомпонентных материалов использованы следующие модели и приближения.

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

Статья поступила в редакцию 10 октября 2018 г.

1) Движущиеся частицы между собой не взаимодействуют, рассматриваются только столкновения движущейся частицы с неподвижной.

2) Взаимодействие движущихся частиц с неподвижными атомами мишени описывается в модели парных соударений.

3) Элементарный процесс взаимодействия описывается по двум независимым каналам: упругому (изменяется как направление движения частицы, так и ее энергия) и неупругому (движущаяся частица теряет энергию, но не меняет направление своего движения) [5].

4) Упругое сечение взаимодействия описывается степенной зависимостью [1].

5) Торможение быстрых ионов в многокомпонентном соединении описывается как торможение в однокомпонентном материале, но теперь состоящем из атомов, обладающих эффективным зарядом и эффективной массой, которые соответственно определяются следующими формулами:

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

где  $c_i$  – относительная концентрация  $i$ -того компонента в соединении. В нашем случае, как уже сказано, пока рассматривается только двухкомпонентное соединение ( $n=2$ ). Поскольку распыление атомов мишени определяется переданной им энергией ионного пучка (энергией, потерянной ионами за счет упругих соударений с атомами мишени), то считаем, что ион при упругом взаимодействии передает в единицу объема энергию атому с эффективным зарядом  $Z_{ef}$ , которая перераспределяется между составляющими мишень компонентами  $A$  и  $B$  в соответствии с их относительной концентрацией в соединении. Энергия, приходящаяся на каждый атом соединения, не должна превышать максимально возможную передаваемую энергию при упругих взаимодействиях «ион–атом», т. е. величину  $\gamma_i E_0$  ( $\gamma_i$  – кинематический фактор,  $\gamma_i = 4M_0 M_i / (M_0 + M_i)^2$ ,  $M_0$  – масса иона,  $M_i$  – масса атома).

б) При описании атомов, покидающих мишень, используется модель плоского поверхностного потенциального барьера. Энергия поверх-

ностной связи атомов  $i$ -й компоненты в соединении  $U_i$  рассчитывается по формуле:

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

где  $U_{0i}$  – энергия связи атомов  $i$ -й компоненты в однокомпонентном материале.

В мишени на глубине  $x$  существует два потока быстрых ионов: один направлен преимущественно вглубь мишени, другой, вследствие рассеяния ионов, направлен к поверхности. Необходимо отметить, что первично выбитые атомы всегда направлены в сторону движения налетающей частицы перед столкновением, поэтому на глубине  $x$  можно выделить два потока первично выбитых атомов: один – направлен преимущественно вглубь мишени, другой – к поверхности. На основании этого можно предположить, что распыление двухкомпонентных материалов (также как и однокомпонентных мишеней) описывается двумя механизмами [3, 4]: 1) распыление нисходящим потоком ионов, 2) распыление восходящим потоком ионов.

Каждый механизм представляется как последовательность следующих процессов [3, 4], приводящих к распылению  $i$ -й компоненты мишени (см. рис. 1).

**Механизм 1** – прохождение потока ионов слоя толщиной  $x$ ; выбивание первичных атомов отдачи в направлении вглубь мишени; отражение первично выбитых атомов (ПВА) компонент  $A$  и  $B$  от нижележащих слоев материала, либо распыление нижележащих атомов материала; эмиссия первичных и вторичных выбитых атомов, движущихся на глубине  $x$  к поверхности.

**Механизм 2** – прохождение потока ионов слоя толщиной  $x$ ; отражение потока ионов от нижележащих слоев материала; выбивание ионами, движущимися к поверхности, первичных атомов отдачи на глубине  $x$ ; эмиссия выбитых атомов, движущихся с глубины  $x$  к поверхности.

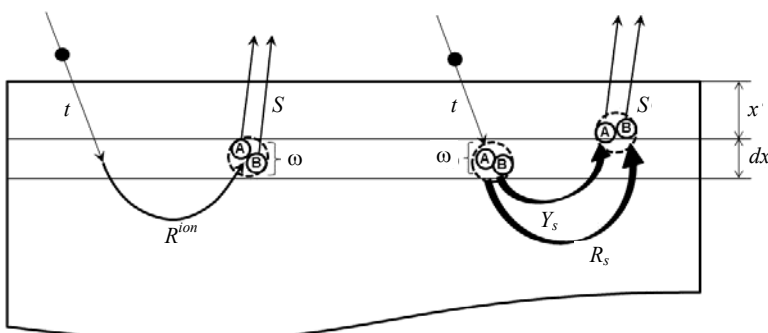


Рис. 1. Схематическое изображение процессов, приводящих к распылению двухкомпонентной мишени.

Возможность описания процесса распыления с использованием понятия атома с эффективным зарядом можно обосновать, исходя из следующих соображений:

а) среднее число ПВА каждой компоненты, движущихся в мишени, пропорционально концентрации этих атомов в материале;

б) энергия ПВА обратно пропорциональна их массе;

в) в среднем можно считать, что движется некоторый конгломерат из атомов обеих компонент, который можно отождествить с атомом с  $Z_{ef}$ .

Исходя из этого, описание явления распыления  $i$ -й компоненты двухкомпонентной мишени будем проводить как распыление однокомпонентной однородной мишени, состоящей из атомов с  $Z_{ef}$  с учетом плоского поверхностного потенциала  $U_i$ .

В соответствии с предлагаемой моделью распыления двухкомпонентной мишени, учитывая принципы инвариантного погружения, парциальный коэффициент распыления компоненты  $i$ , определяемый как среднее число атомов компоненты  $i$ , вылетевших с поверхности мишени, приходящееся на один падающий ион, можно описать следующим выражением:

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

$$Y_i(E_0, \theta_0) = \frac{1}{8C_0 U_i} \frac{1}{1+p} \left[ \frac{\gamma_i}{\gamma_0} \right]^{1-m} \left\{ R_N^{ion}(E', \theta) S_n(E^*(E')) \left[ 1 - \left( \frac{U_i}{\gamma_i E^*(E')} \right)^{1-m} \right] + S_n(E') \Psi \left( \frac{E_{th}^s}{\gamma_i E'}, \theta_0 \right) \right\}, \quad (4)$$

где  $E' = E_0 \left( 1 - \frac{3}{4C_0 N_0 (1+p) R_0 \cos \theta_0} \right)$ ,  $C_0$  – константа в степенном сечении рассеяния [1] ( $C_0 = 1,808089 \text{ \AA}^2$ );  $N_0$  – концентрация атомов в материале мишени;  $\gamma_0$  – кинематический фактор упругого взаимодействия «ион–атом с  $Z_{ef}$ » ( $\gamma_0 = 4M_0 M_{ef} / (M_0 + M_{ef})^2$ );  $R_N^{ion}(E_0, \theta_0)$  – полный коэффициент отражения ионов;  $p$  – безразмерная величина, определяемая пробегом ионов в материале:  $p = 2C_0 R_0 R_p \cos \theta_0 / 3l_{tr}$ ,  $R_0$  – полный пробег ионов в материале,  $R_p$  – проективный пробег ионов в материале,  $l_{tr}$  – транспортный пробег иона в материале;  $S_n()$  – сечение ядерного торможения [8];  $E^*$  – средняя энергия ионов, отраженных от слоистой структуры:  $E^* = E_0 R_E^{ion}(E_0, \theta_0) / R_N^{ion}(E_0, \theta_0)$ ,  $R_E^{ion}(E_0, \theta_0)$  – полный коэффициент отражения энергии ионов от

В этом выражении знак  $\otimes$  обозначает интегрирование по всем общим параметрам,  $N_i$  – атомная плотность  $i$ -й компоненты,  $t$  – функция пропускания ионов слоем мишени толщиной  $x$ ,  $R^{ion}$  – дифференциальная функция отражения ионов от мишени,  $\omega$  – сечение передачи энергии от движущегося иона неподвижному атому,  $S_i$  – функция прямого (на прострел) самораспыления слоя материала толщиной  $x$ ,  $R_s$  – дифференциальная функция самоотражения атомов мишени,  $Y_s$  – дифференциальная функция обратного самораспыления мишени.

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

1. Модель непрерывного замедления в приближении «прямо-вперед» для описания функции пропускания [5];

2. Метод перевала при интегрировании функций отражения [6];

3. Функции прямого самораспыления  $S$  и обратного самораспыления  $Y_s$  рассматривается в рамках модели работы [7].

В результате интегрирования выражения (3) получена формула, позволяющая рассчитать парциальные коэффициенты распыления  $i$ -й компоненты материала мишени легкими ионами:

поверхности;  $E_{th}^s$  – пороговая энергия самораспыления [9];  $m$  – показатель степени в степенном сечении взаимодействия частиц,  $\Psi$  – функция, определяющая самораспыление атомов, которая аппроксимирована выражением:

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

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

Полные коэффициенты распыления мишени рассчитываются как сумма парциальных коэффициентов распыления компонентов:  $Y(E_0, \theta_0) = \sum_{i=1}^2 Y_i(E_0, \theta_0)$ .

### Результаты расчетов

Результаты расчетов по формуле (4) парциальных коэффициентов распыления двухкомпонентных мишеней из соединения  $TiB_2$  ионами ге-

лия ( $\text{He}^+$ ) и мишеней из соединения TiC ионами дейтерия ( $\text{D}^+$ ) приведены соответственно на рис. 2 и 3.

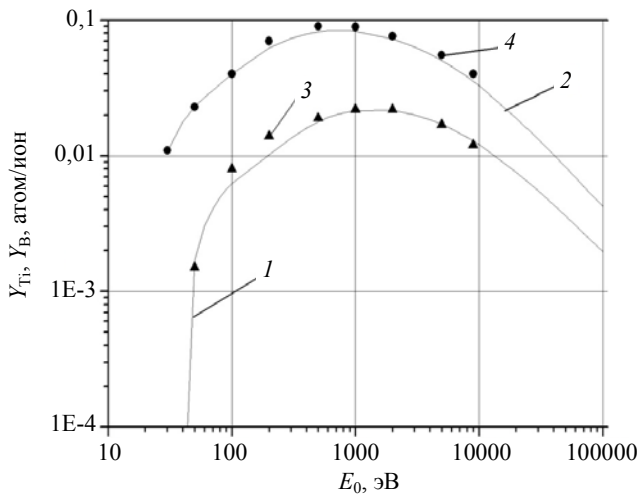


Рис. 2. Парциальные коэффициенты распыления соединения  $\text{TiB}_2$  ионами гелия ( $\text{He}^+$ ) (нормальное падение) в зависимости от энергии ионов: 1 – коэффициент распыления Ti, расчет по формуле (4); 2 – коэффициент распыления V, расчет по формуле (4); 3 – коэффициент распыления Ti, экспериментальные данные [10]; 4 – коэффициент распыления V, экспериментальные данные [10].

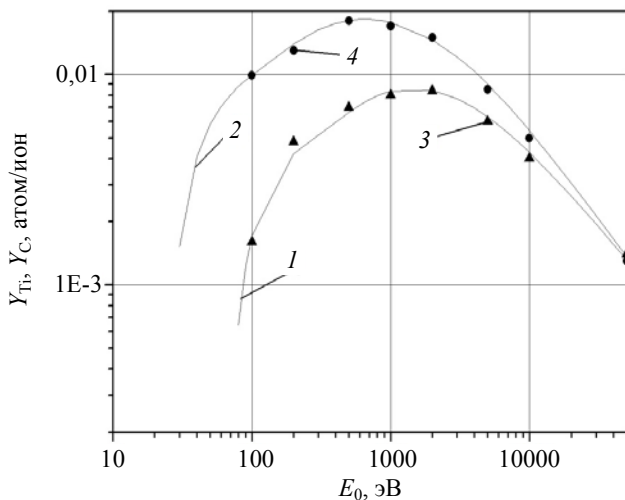


Рис. 3. Парциальные коэффициенты распыления соединения TiC ионами дейтерия ( $\text{D}^+$ ) (нормальное падение) в зависимости от энергии ионов: 1 – коэффициент распыления Ti, расчет по формуле (4); 2 – коэффициент распыления C, расчет по формуле (4); 3 – коэффициент распыления Ti, экспериментальные данные [10]; 4 – коэффициент распыления C, экспериментальные данные [10].

Результаты расчетов на рис. 2 и 3 хорошо совпадают с экспериментальными данными [10]. Заметим, что в обоих случаях наблюдается преимущественное распыление более легкой компоненты соединения, что подтверждается и экспериментальными данными.

## Выводы

На основе предложенной модели распыления двухкомпонентных мишеней легкими ионами получена достаточно простая расчетная формула для парциальных коэффициентов распыления компонентов. Анализ полученной формулы, а также результатов расчетов позволяют сделать следующие основные выводы.

1. Более эффективно распыляется менее связанный компонент, что определяется поверхностной энергией связи компонента  $U_i$ . В области низких энергий (ниже пороговой энергии более связанного компонента) будет происходить распыление только менее связанной компоненты. В этом случае при больших дозах облучения (что выходит за рамки данной работы) будет происходить обеднение поверхности менее связанным компонентом.

2. Множитель  $\left[\frac{\gamma_i}{\gamma_0}\right]^{1-m}$  в формуле опреде-

ляет долю энергии, поглощенной многокомпонентной мишенью, приходящейся на данную компоненту. Вследствие этого более легкий компонент распыляется интенсивнее, и возможна ситуация, как и в случае преимущественного распыления менее связанной компоненты.

3. Пороговая энергия распыления (каждой компоненты) для механизма распыления восходящим потоком ионов отлична от пороговой энергии распыления нисходящим потоком ионов. Анализ показывает, что пороговая энергия распыления нисходящим потоком ионов выше, а значит, пороговая энергия распыления атомов  $i$ -й компоненты определяется пороговой энергией распыления восходящим потоком ионов.

В дальнейшем предполагается развить модель на случай распыления изначально неоднородных двухкомпонентных мишеней легкими ионами.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Т. 1. / Под ред. Р. Бериша. – М.: Мир, 1984.
2. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Т. 2. / Под ред. Р. Бериша. – М.: Мир, 1986.
3. Manukhin V. V. // Nucl. Instr. and Meth. 1992. Vol. B72. P. 45.
4. Манухин В. В. // Прикладная физика. 2016. № 5. С. 5.
5. Ремизович В. С., Рогозкин Д. В., Рязанов М. И. Флуктуации пробегов заряженных частиц. – М.: Энергоатомиздат, 1988.
6. Джеффрис Г., Свирлс Б. Методы математической физики. – М.: «Мир», 1970.
7. Манухин В. В. // Прикладная физика. 2007. № 5. С. 14.
8. Biersak J., Hagmark L. G. // Nucl. Instr. and Meth. 1980. Vol. 174. P. 257.

9. Matsunami N., Yamamura Y., Itikawa Y. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1984. Vol. 31. P. 1.

10. Kaminsky M., Nielsen R., Zschack P. // J. Vac. Sci. Technol. 1982. Vol. 20. P. 1304.

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

## Sputtering binary alloys by light ions bombardment

V. V. Manukhin

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

Received October 10, 2018

***On the basis of the sputtering model of two-component materials with light ions, an analytical formula is obtained, which makes it possible to calculate the total and partial sputtering coefficients of a binary target with light ions. The calculation results are in good agreement with the experimental data. The patterns of preferential sputtering of two-component materials at low energies of bombarding ions are revealed.***

**Keywords:** sputtering, ion bombardment, multi-component materials, partial sputtering yield, preferential sputtering, light ions.

### REFERENCES

1. *Sputtering by particle bombardment. Vol. I.* Edited by R. Behrish, (Springer-Verlag, 1981; Mir, Moscow, 1984).
2. *Sputtering by Particle Bombardment. Vol. II: Sputtering of Alloys and Compounds, Electron and Neutron Sputtering, Surface Topography.* Edited by R. Behrish, (Springer, New York, 1984; Mir, Moscow, 1986).
3. V. V. Manukhin, Nucl. Instr. and Meth. **B72**, 45 (1992).
4. V. V. Manukhin, Prikl. Fiz., No. 5, 5 (2016).
5. V. S. Remizovich, D. V. Rogozkin, and M. I. Ryazanov, *Fluctuations of the Charged Particles Paths* (Moscow, Energoatomizdat, 1988) [in Russian].
6. Y. Jeffreys and B. S. Jeffreys, *Methods of Mathematical Physics* (Cambridge Univ. Press, 1966; Mir, Moscow, 1970).
7. V. V. Manukhin, Prikl. Fiz., No. 5, 14 (2007).
8. J. Biersak and L. G. Haggmark, Nucl. Instr. and Meth. **174**, 257 (1980).
9. N. Matsunami, Y. Yamamura, and Y. Itikawa, Atomic Data and Nuclear Data Tables **31**, 1 (1984).
10. M. Kaminsky, R. Nielsen, and P. Zschack, J. Vac. Sci. Technol. **20**, 1304 (1982).