

Теоретические зависимости пороговых энергий распыления мишеней от угла падения первичных ионов

А. Н. Пустовит

*Институт проблем технологии микроэлектроники и
особочистых материалов РАН,
Черноголовка, Московская обл., Россия. E-mail:
pustan@iptm.ru*

Распыление образцов ионными пучками является одним из перспективных направлений при создании новых нанозлектронных структур и их анализе. Процесс распыления характерен тем, что начинается при некоторой начальной энергии первичных ионов E , названной пороговой энергией распыления E_{th} . При нормальном падении первичного пучка (порядковый номер Z_1 , масса m_1) на мишень (Z_2, m_2) пороговая энергия является конкретной величиной для системы ион-мишень и изменяется в широких пределах $E_{th} = 10\text{--}450$ эВ [1] (рис.1). Анализ экспериментальных данных зависимости E_{th}/U_0 (U_0 – энергия сублимации атомов мишени) от m_2/m_1 показывает значительный разброс (особенно в области $m_2/m_1 < 50$), связанный с различиями в физических свойствах элементов системы и трудностями в получении сепарированных ионных пучков низких энергий (большинство результатов получено в плазме разрядов). Наибольшие отклонения наблюдаются для ~20% мишеней (рекордный для C). Вместе с этим явно наблюдается функциональная зависимость E_{th}/U_0 от m_2/m_1 , описать которую пытались с помощью эмпирических формул [1-3]. Однако единой формулы, описывающей экспериментальные данные в диапазоне отношения масс $m_2/m_1 = 10^{-1} - 2 \cdot 10^2$, не найдено. Применение компьютерных методов моделирования для расчета коэффициентов распыления в области $< 10^{-4}$ атом/ион малоэффективно из-за резкого увеличения расчетного массива. По этой причине делается вывод о невозможности расчета E_{th} с помощью молекулярной динамики [4]. В настоящее время все исследования проведены для E_{th} при нормальном падении ионного пучка. Имеется лишь одна работа [3], в которой исследуется E_{th} для углеродной мишени при углах падения β (отсчет от нормали к поверхности мишени) равных 0° и 80° .

Нахождение зависимости E_{th}/U_0 от m_2/m_1 для различных углов β является одним из приоритетов в явлении распыления и стало задачей в данной работе.

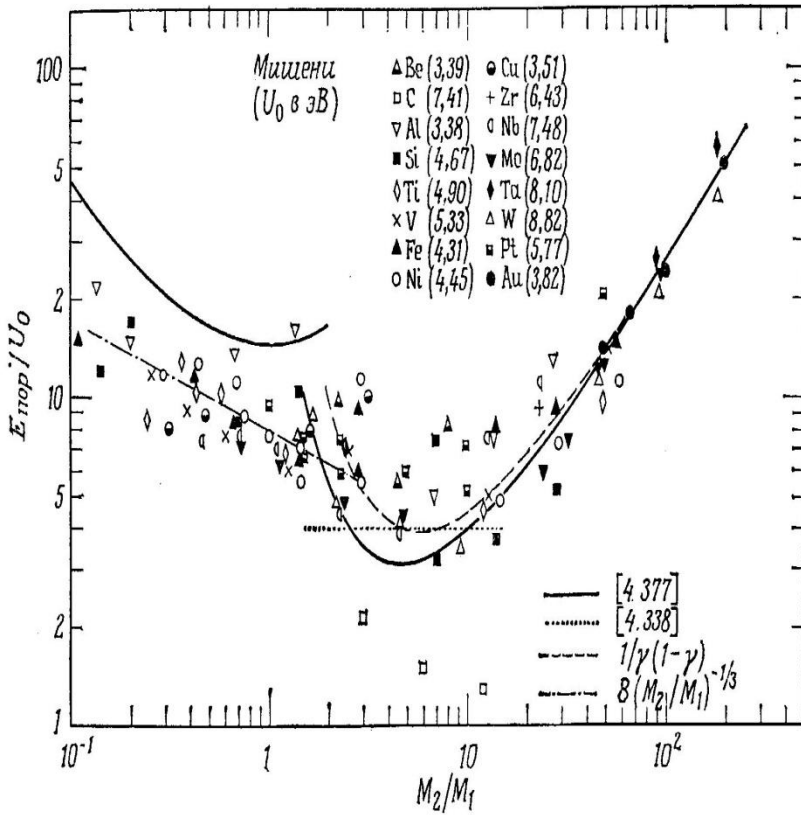


Рис. 1. Зависимости E_{th}/U_0 от m_2/m_1 , представленные X. Андерсен и X. Баи в работе [1].

[1] X. Андерсен, X. Баи, в *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой: Физ. распыление одноэлементных твердых тел*, под ред. Р. Бериша. (М.: Мир, 1984), с. 194.
 [2] М.Д. Габович, Н.В. Плешивцев, Н.Н. Семашко, *Пучки ионов и атомов для управляемого термоядерного синтеза и технологических целей* (М.: Энергоатомиздат, 1986), 249 с.
 [3] W. Eckstein, C. Garcia-Rosales, J. Roth, J. Laszlo, NIM B. **83**, 95 (1993).
 [4] C. Yan, Q.I. Zhang, AIP ADVANCES. **2** (3), 032107 (2012).

При пороговой энергии распыления удаление атомов происходит из верхнего слоя аморфной мишени с межатомным расстоянием d [5]. Это обстоятельство использовали для расчета зависимости E_{th}/U_0 от m_2/m_1 для $\beta = 0^\circ$ в работе [6], где предполагали, что при E_{th} глубина выхода распыленных частиц h (отсчет ведется вглубь от поверхности мишени) равна нулю. Полученная в результате формула для зависимости E_{th}/U_0 от m_2/m_1 дает хорошее совпадение экспериментальных и расчетных данных во всем диапазоне изменений m_2/m_1 .

Все выше отмеченные способы расчета E_{th} имеют общее свойство: они выполнены в 1-ом направлении (рис. 2). В данной работе расчеты выполнены по 2-ому направлению.

Для решения поставленной задачи было использовано физическое явление, связанное с блокировкой поверхности мишени при энергиях блокировки E_{bl} [7]. Для парного столкновения и отталкивающего степенного потенциала взаимодействия между частицами блокировка возникает за счет роста вершины конуса затенения до размеров межатомного расстояния в мишени. Величина энергии блокировки в зависимости от параметров частиц равна $E_{bl} = 6\text{--}30$ эВ.

- [5] R. Behrisch, G. Maderlechner, B.M.U. Scherzer, M.T. Robinson, Appl. Phys. **18**, 391 (1979).
- [6] А.Н. Пустовит, Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 10, 77 (2017).
- [7] А.Н. Пустовит, Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 4, 106 (2022).

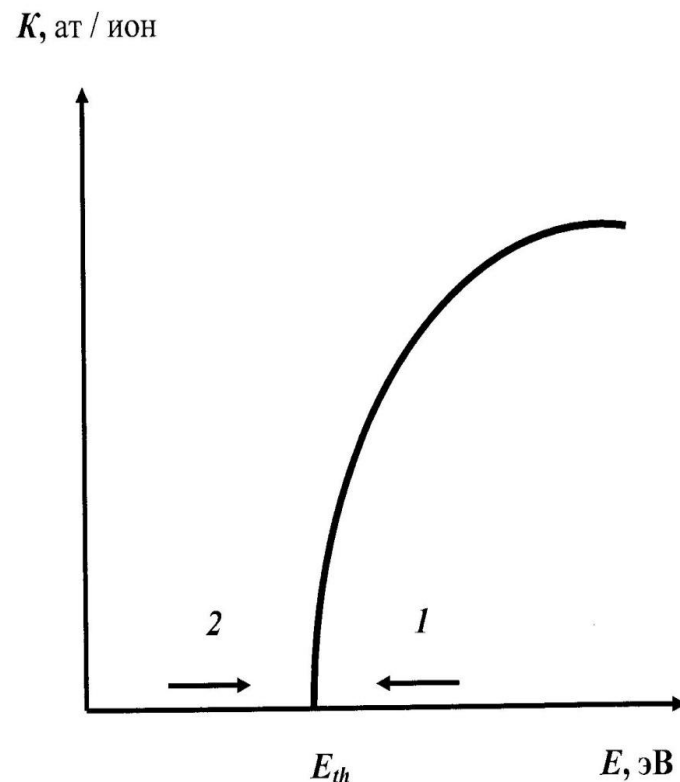


Рис. 2. Способы расчета пороговой энергии распыления E_{th} : 1 - ранее используемые, 2 – примененный в настоящей работе. K – коэффициент распыления, E – энергия падающих ионов.

Главной величиной для описания вершины конуса затенения является наибольшее расстояние сближения частиц при лобовом столкновении b_s . Величина b_s для парного отталкивающего степенного потенциала взаимодействия $U(r)$ находится из равенства $U(r) = E_0$ и равна [7]:

$$b_s = \left(\frac{Z_1 Z_2 q^2 k_s}{s a E_0} \right)^{1/s} a. \quad (1)$$

где q – заряд электрона, $E_0 = m_2 E / (m_1 + m_2)$ – относительная энергия сталкивающихся частиц, $k_s = [(s-1)/e]^{s-1}$, s – степенной показатель, $a = 0.8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ – длина экранирования, a_0 – радиус Бора.

При энергиях $\sim E_{bl}$ форма вершины конуса затенения представляет полусферу радиусом b_s . При $E \leq E_{bl}$ две соседние полусферы, находящиеся на расстоянии d , пересекаются и не дают возможность иону проникать внутрь мишени (рис.3а). При $E > E_{bl}$ между этими полусферами образуется щель (рис. 3b) через которую ион может проникнуть внутрь мишени. Для начала процесса распыления необходимо чтобы $E_{th} \gg E_{bl}$ [7]. При наклонном падении ионного пучка с энергией E_{th} , равной энергии при нормальном падении его на мишень, происходит частичное или полное затенение щели (рис. 3c). В плоскости перпендикулярной пучку размер щели зависит от угла β из-за изменения расстояния d (рис. 2c) по формуле:

$$d' = d \cos \beta. \quad (2)$$

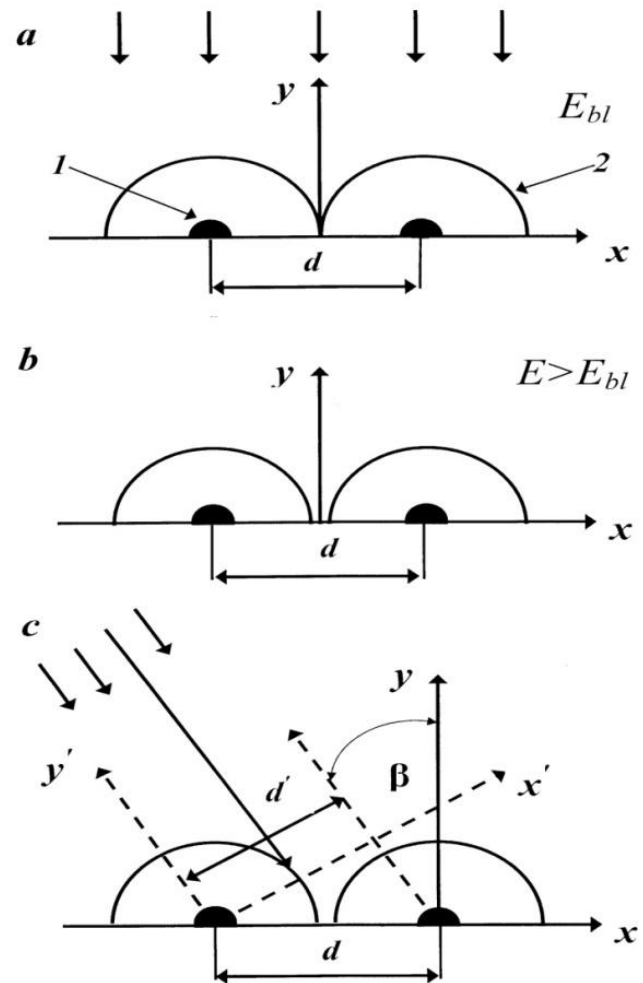


Рис. 3. Схемы блокировки поверхности и возникновения щели между атомами мишени при нормальном (а, b) и угловом (с) падении первичного ионного пучка. 1 – атом мишени, 2 – вершина конуса затенения.

Формы фигур в плоскостях xz и $x'z$ для возможного проникновения ионов в мишень при $\beta = 0^\circ$ и $\beta > 0^\circ$ показаны на рис.4, где ось z направлена перпендикулярно плоскости рис.3. Для варианта на рис. 4a площадь щели равна площади кольца, заключенной между двумя окружностями (внешней сплошной и пунктирной линиями). Для случая на рис. 4b площадь щели равна площади фигуры, заключенной между эллипсом и внутренней окружностью (пунктирной линиями). При неизменных параметрах ионного пучка и размере фигур по оси z площадь эллипса меньше площади круга, а площади внутренних окружностей равны. По этой причине площадь щели, прилегающая к одному атому мишени, будет меньше в случае $\beta > 0^\circ$. В результате вероятность начала процесса распыления снизится и для повышения ее необходимо увеличить площадь щели при $\beta > 0^\circ$. Этого можно добиться, увеличивая пороговую энергию распыления и тем самым понижая b_s (форм. 1). Поэтому должно выполняться условие $E_{th}(\beta) > E_{th}(0)$, где $E_{th}(\beta)$ и $E_{th}(0)$ пороговые энергии распыления при углах β и $\beta = 0^\circ$ соответственно.

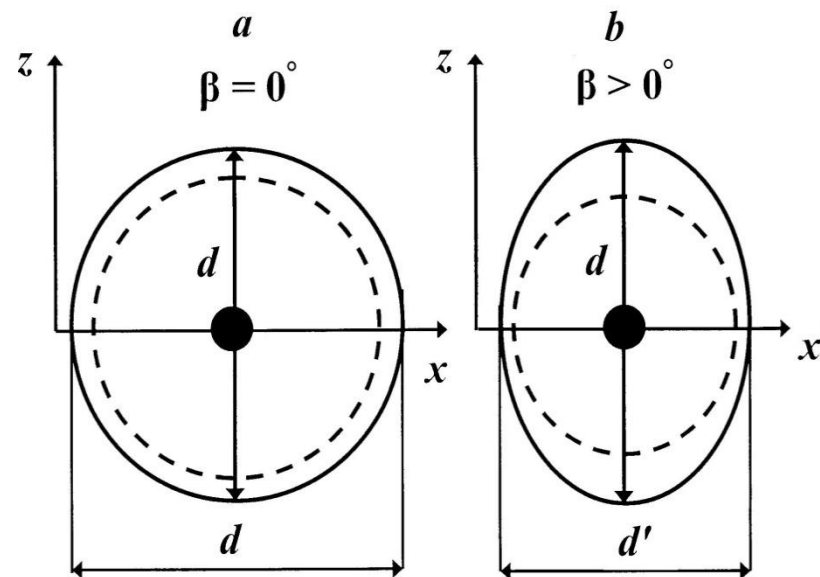


Рис. 3. Формы фигур для возможного проникновения ионов в мишень при нормальном (a) и наклонном (b) падении пучка.

При анализе явления распыления используются вероятностные методы [8]. Так как при изменении β общая площадь внешней фигуры изменяется, то вероятность начала процесса распыления пропорциональна отношению площадей кольца к полной площади фигуры (круга или эллипса)

$$W(\beta) \propto \frac{\left(\frac{d}{2}\right)^2 \cos \beta - b_s^2(\beta)}{\left(\frac{d}{2}\right)^2 \cos \beta} = 1 - \frac{4b_s^2(\beta)}{d^2 \cos \beta}, \quad (3)$$

где $b_s(\beta)$ значение наибольшего расстояния сближения частиц (1) при замене в формуле для E_0 величины E на $E_{th}(\beta)$.

Считая, что $W(0) = W(\beta)$ из (3) получаем:

$$\frac{W(\beta)}{W(0)} = 1 = \frac{d^2 - 4b_s^2(\beta) / \cos \beta}{1 - 4b_s^2(0)} \quad (4)$$

Замена в (4) значений $b_s(0)$ и $b_s(\beta)$ из формулы (1)6 дает окончательный результат:

$$E_{th}(\beta) = \frac{E_{th}(0)}{\cos^{1/2} \beta}. \quad (5)$$

[8] В. Экштайн, *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*, пер. с англ. под ред. Е. С. Машковой (М.: Мир, 1995), 319 с.

На рис. 5 представлены расчетные значения по формуле (5) зависимостей E_{th}/U_0 от m_2/m_1 для $s=2$ и β равных 0° , 30° и 60° . Кривая для $\beta = 0^\circ$ (1) построена с использованием уравнения и данных, приведенных в работе [6]. Экспериментальные результаты на рис. 5 взяты из работы [1] для Si, Ni, Mo и Au при $\beta = 0^\circ$.

Результаты на рис. 5 показывают, что теоретические кривые, по крайней мере, до углов $\beta \leq 30^\circ$ располагаются близко друг к другу и на них накладывається ряд экспериментальных точек для $\beta = 0^\circ$. Поэтому отметим, что дополнительно к причинам большого разброса экспериментальных данных для $\beta = 0^\circ$, указанных в [1], можно отнести следующие. Одна из них связана с шероховатостью поверхности мишени на атомном уровне. Эта неровность поверхности может быть естественного происхождения или образоваться в процессе эксперимента на поверхности мишени при длительном облучении ионами с энергией $E_{th}(0)$. Другая причина, возникающая при использовании плазмы разрядов в экспериментах (особенно для области $m_2/m_1 < 30$), связана с возможным распылением мишени нейтральными атомами. Образующиеся в плазме (или при перезарядке) нейтральные атомы могут лететь к поверхности мишени под разными углами. В результате воздействия этих двух факторов невозможно утверждать, что распыление происходило исключительно при $\beta = 0^\circ$.

[1] Х. Андерсен, Х. Баи, в *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой: Физ. распыление одноэлементных твердых тел*, под ред. Р. Бериша. (М.: Мир, 1984), с. 194.

[6] А.Н. Пустовит, *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед.* 10, 77 (2017).

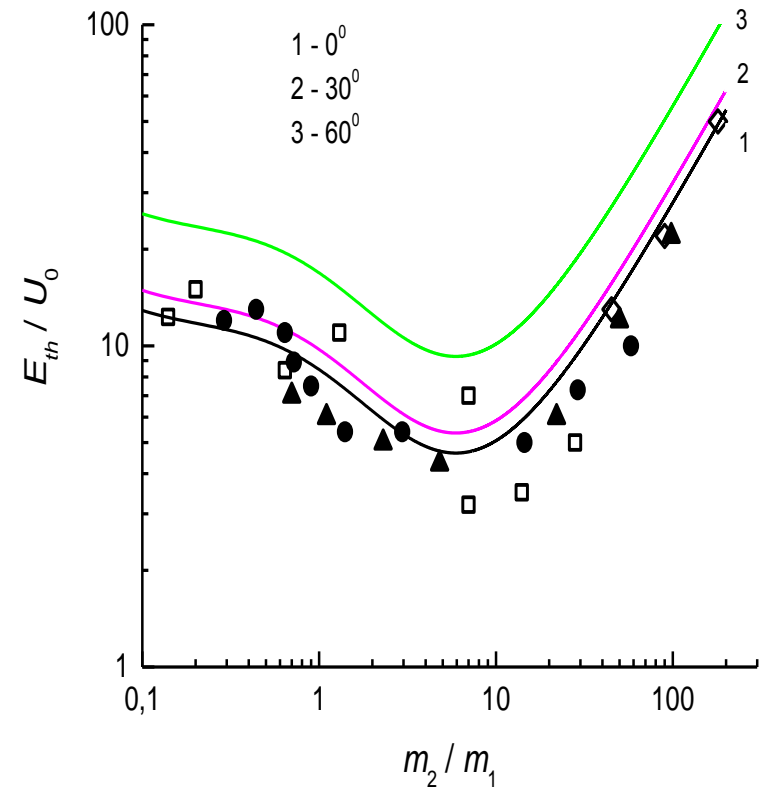


Рис. 5. Зависимости E_{th}/U_0 от m_2/m_1 для $s = 2$ и углов падения первичного пучка β равных 0° , 30° и 60° . Экспериментальные результаты [1]: \square – Si, \bullet – Ni, \blacktriangle – Mo, \diamond – Au.

К сожалению, сравнить полученные в настоящей работе расчетные результаты с экспериментальными данными для $\beta > 0^\circ$ не представляется возможным из-за отсутствия последних в литературе. Единственная работа [3], связанная с темой наших исследований, посвящена исследованию графита. Графит очень специфический материал с уникальными физико-химическими свойствами (например, большим значением U_0 и маленькой величиной d). Возможно, по этим причинам результаты представленные на рис. 4.35 [1] для С имеют наибольшие отклонения на графике зависимости E_{eff}/U_0 от m_2/m_1 .

Полученный в работе результат важен для более глубокого понимания физики процесса распыления и может быть использован в двух направлениях. Во-первых, экспериментальное подтверждение найденной в работе зависимости (5) может способствовать развитию технологии селективной обработки материалов при пороговых (или припороговых) энергиях распыления. Во-вторых, учет функциональной зависимости (5) между пороговыми энергиями распыления при нормальном и под углом падениями первичных ионов может улучшить результаты расчетов характеристик явления распыления и в первую очередь связанных с вариациями угла.

[1] Х. Андерсен, Х. Баи, в *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой: Физ. распыление одноэлементных твердых тел*, под ред. Р. Бериша. (М.: Мир, 1984), с. 194.

[3] W. Eckstein, C. Garcia-Rosales, J. Roth, J. Laszlo, NIM B. **83**, 95 (1993).