

## Расчет коэффициентов распыления оксидных пленок с поверхности однородного материала ионами гелия средних энергий

В. В. Манухин

*Представлена аналитическая модель распыления двухкомпонентных слоистых неоднородных мишеней бомбардировкой легкими ионами. Получена аналитическая формула, позволяющая рассчитать полный и парциальный коэффициенты распыления бинарного слоя неоднородности мишени легкими ионами. Результаты расчетов хорошо согласуются с данными компьютерного моделирования.*

*Ключевые слова:* распыление, ионная бомбардировка, многокомпонентные материалы, слоисто-неоднородные поверхности, модифицированная поверхность, парциальный коэффициент распыления, легкие ионы.

DOI: 10.51368/1996-0948-2021-4-59-64

### Введение

В последнее время все более широко применяются технологические методы модификации поверхности, в результате которых поверхность материала становится слоисто-неоднородной. Слоистая поверхность также возникает в результате естественных процессов, таких как адсорбция остаточных газов, процессы окисления, ионно-индуцированная диффузия, радиационно-индуцированная сегрегация и т. д. Существование таких слоистых структур создает ряд проблем для теоретического описания взаимодействия многокомпонентных материалов с потоком заряженных частиц. В частности, возникает задача описания распыления слоев неоднородности многокомпонентного материала, находящихся на поверхности другого материала, при бомбардировке легкими ионами. Предыдущие исследования показали, что наличие на поверхности тяжелого материала с тонким слоем

легкого материала приводит к существенному увеличению коэффициента распыления материала этого слоя по сравнению с коэффициентами распыления однородных мишеней из легкого материала («эффект зеркала») [1].

В данной работе решается задача теоретического описания распыления слоя бинарного соединения с поверхности однородного материала при бомбардировке легкими ионами. Решение задачи основано на принципах инвариантности Чандрасекара [2] и развивает идеи, предложенные для описания распыления однородных тонких пленок [3], слоистых структур [4] и бинарных однородных материалов [5].

### Теоретическая модель

Рассмотрим слоистую неоднородную мишень с резкой границей раздела: однородный слой толщиной  $x_0$  бинарного материала  $A_qB_b$  (где  $q$  – стехиометрический коэффициент элемента  $A$  массы  $M_1$  в соединении,  $b$  – стехиометрический коэффициент элемента  $B$  массы  $M_2$  в соединении) находится на однородной полубесконечной подложке из материала одного из компонентов. Пусть широкий пучок ионов с массой  $M_0$  с энергией  $E_0$  падает под углом  $\theta_0$  (угол отсчитывается от внутрен-

---

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 28 мая 2021 г.

---

© Манухин В. В., 2021



**Механизм 2** (распыление нисходящим потоком ионов) – прохождение ионов через слой толщиной  $x$ ; выбивание первичных атомов отдачи по направлению вглубь мишени; отражение первоначально выбитых атомов компонентов  $A$  и  $B$  от нижележащих слоев материала (в том числе от подложки) или распыление нижележащих атомов материала (включая атомы подложки); эмиссия первичных и вторичных выбитых атомов, движущихся на глубине  $x$  к поверхности.

Возможность описания процесса распыления бинарного слоя неоднородности с использованием концепции атома с эффективным зарядом может быть оправдана, исходя из следующих соображений.

1. Среднее число первично выбитых атомов (ПВА) каждого компонента, движущихся в мишени, пропорционально концентрации этих атомов в материале;

2. Энергия ПВА обратно пропорциональна их массе;

3. Можно предположить, что движется некий конгломерат атомов обоих компонентов, который можно отождествить с атомом с  $Z_{ef}$ .

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

В соответствии с предложенной моделью и с учетом принципов инвариантности, парциальный коэффициент распыления компонента  $i$ , определяемый как среднее количество атомов компонента  $i$ , вылетевших с поверхности мишени на один падающий ион, можно описать следующим выражением:

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

В этом выражении знак  $\otimes$  обозначает интегрирование по всем общим параметрам,  $N_i$  – число атомов  $i$ -го компонента,  $t$  – дифференциальная функция пропускания ионов слоем двухкомпонентной мишени толщиной  $x$ ,  $R_{ion}$  – дифференциальная функция отражения ионов от слоисто-неоднородной мишени с толщиной слоя неоднородности  $x_0-x$ ,  $\omega$  – се-

чение передачи энергии от движущегося иона к неподвижному атому,  $S_i$  – функция прямого (на прострел) самораспыления слоя материала компонента  $i$  толщиной  $x$ ,  $R_s$  – дифференциальная функция самоотражения атомов слоя мишени,  $Y_s$  – дифференциальная функция обратного самораспыления слоя неоднородности,  $Y$  – дифференциальная функция распыления материала подложки.

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

1. Модель непрерывного замедления с приближением «прямо-вперед» при описании функции пропускания [6],

2. Метод перевала при проведении интегрирования функции отражения ионов [7],

3. Функции прямого  $S_i$  и обратного  $Y_s$  самораспыления определяются в рамках модели [3].

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

$$Y_i(E_0, \theta_0, x_0) = \frac{1}{8C_0 U_i} \frac{1}{1+p} \left[ \frac{\gamma_i}{\gamma_0} \right]^{1-m} \times \left\{ R_N^{ion}(E', \theta, x_0) S_n(E^*(E')) \left[ 1 - \left( \frac{U_i}{\gamma_i E^*(E')} \right)^{1-m} \right] + S_n(E') \Psi \left( \frac{E_s^s}{\gamma_i E'}, \theta_0 \right) (1 + \delta_{li} 3E_3(C_0 N x_0)) \right\} \times [1 - 4E_4(C_0 N x_0)]. \quad (4)$$

Здесь  $C_0$  – постоянная в степенном сечении рассеяния ( $C_0 = 1,808089 \text{ \AA}^2$ );  $E_n(C_0 N x_0)$  – интегральная экспонента степени  $n$ ;

$E' = E_0 \left( 1 - \frac{3}{4C_0 N (1+p) R_0 \cos \theta_0} \right)$ ;  $\delta_{li}$  – символ

Кронекера;  $N$  – концентрация атомов в слое неоднородности мишени;  $\gamma_0$  – кинематический фактор упругого взаимодействия ион – «атом с  $Z_{ef}$ »;  $R_N^{ion}(E_0, \theta_0, x_0)$  – полный коэффициент отражения ионов от слоистой поверхности;  $p$  – безразмерная величина, определяемая пробегом ионов в материале:

$p = 2C_0R_0R_p \cos\theta_0 / 3l_{tr}$ ,  $R_0$  – полный пробег ионов в материале слоя,  $R_p$  – проективный пробег ионов в материале слоя,  $l_{tr}$  – транспортный пробег ионов в материале слоя;  $S_n$  – сечение ядерного торможения ионов [8];  $E^*$  – средняя энергия ионов, отраженных от слоистой мишени:  $E^* = E_0 \times \frac{R_E^{ion}(E_0, \theta_0, x_0)}{R_N^{ion}(E_0, \theta_0, x_0)}$ ,

$R_E^{ion}(E_0, \theta_0, x_0)$  – коэффициент отражения энергии ионов от слоистой мишени;  $E_{th}^S$  – пороговая энергия самораспыления [9];  $m$  – показатель степени в приближении степенного сечения ядерного торможения, который рассчитывается по аппроксимационной формуле [10], в зависимости от энергии налетающего иона;  $\psi$  – функция, определяющая самораспыление атомов, которая аппроксимируется выражением [4]:  $\psi(y) = 0,18694[1 - y^{2/3}] \times [1 - y]^2$ ,  $\psi(y, \theta_0) = \psi(y, 1) + (1 - \psi(y, 1))(1 - \cos\theta_0)^{1,5}$ .

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

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

Результаты расчетов по формуле (4) парциальных коэффициентов распыления для двухкомпонентных мишеней представлены на рис. 2 и 3.

### Результаты расчетов

Результаты расчета коэффициентов распыления слоев  $\text{SiO}_2$  с поверхности чистого кремния ионами гелия  $\text{He}^+$  в зависимости от толщины слоя оксида кремния (нормальное падение ионов с энергией 1 кэВ) приведены на рис. 2 в сравнении с результатами компьютерного моделирования с помощью программы SRIM-2013pro (<http://www.srim.org/>). Наблюдается хорошее согласие между расчетными значениями и результатами компьютерного моделирования. Кроме того, следует отметить, что наблюдается также «эффект зеркала», как и в случае распыления слоисто-неоднородных однокомпонентных материалов [4].

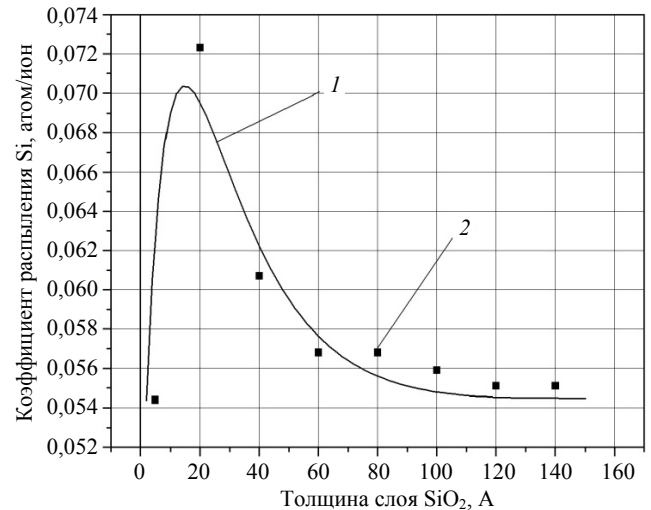


Рис. 2. Результаты расчетов коэффициентов распыления кремния из слоя  $\text{SiO}_2$  с поверхности Si ионами гелия в зависимости от толщины слоя  $\text{SiO}_2$ : 1 – расчет по формуле, 2 – результаты компьютерного моделирования SRIM-2013pro.

Результаты расчета коэффициентов распыления слоев  $\text{Al}_2\text{O}_3$  с поверхности чистого алюминия ионами гелия  $\text{He}^+$  в зависимости от толщины слоя оксида алюминия (нормальное падение ионов с энергией 5 кэВ) приведены на рис. 3 в сравнении с результатами компьютерного моделирования с помощью программы SRIM-2013pro (<http://www.srim.org/>).

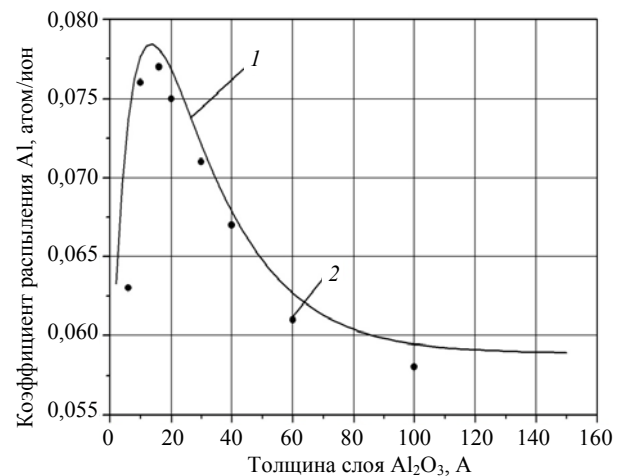


Рис. 3. Результаты расчетов коэффициентов распыления алюминия из слоя  $\text{Al}_2\text{O}_3$  с поверхности Al ионами гелия в зависимости от толщины слоя  $\text{Al}_2\text{O}_3$ : 1 – расчет по формуле, 2 – результаты компьютерного моделирования SRIM-2013pro.

В расчетах использована аппроксимационная формула для расчета показателя степени в степенном сечении ядерного торможения [10] в зависимости от энергии иона непо-

средственно перед столкновением с атомом (энергия зависит от механизма распыления). Данная методика расчета с успехом была использована в предыдущих работах [4, 5].

### Заключение

Результаты расчетов демонстрируют тот же «эффект зеркала», что и в случае распыления слоистых неоднородных однокомпонентных материалов [5], а именно, заметное увеличение коэффициентов распыления компонентов слоя (при определенной толщине слоя) по сравнению с коэффициентами распыления однородных материалов. В данном случае эффект, вероятно, связан с тем, что эффективная масса верхнего распыляемого слоя меньше массы атомов однородной подложки. Также можно отметить, что при стремлении толщины слоя оксида к нулю, коэффициент распыления определяется значением коэффициента распыления материала подложки. При достаточно толстых слоях оксида коэффициент распыления компоненты определяется значением коэффициента распыле-

ния компонента мишени, состоящей только из оксида.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Абесаломов М. К., Афанасьев В. П., Манухин В. В., Федорович С. Д. Тезисы докладов XIX Все-союзного совещания по физике взаимодействия частиц с кристаллами / Под ред. проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Изд-во Моск. Университета, 1989. С. 188.
2. Chandrasekhar S. Radiative Transfer. – Oxford, Clarendon Press, 1950.
3. Манухин В. В. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып 8. С. 6.
4. Манухин В. В. // Прикладная физика. 2016. № 5. С. 5.
5. Манухин В. В. // Прикладная физика. 2018. № 6. С. 69.
6. Ремизович В. С., Rogozkin Д. В., Рязанов М. И. Флуктуации пробега заряженных частиц. – М.: Энергоатомиздат, 1988.
7. Джеффрис Г., Свирлс Б. Методы математической физики, пер. с англ., вып. 1–3. – М.: Мир, 1970.
8. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой Т. 1 / Под ред. Р. Бериша. – М.: Мир, 1984.
9. Matsunami N., Yamamura Y., Itikawa Y. // Atomic data and nuclear data tables. 1984. Vol. 31. P. 1.
10. Манухин В. В. Тезисы докладов XXXI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под ред. проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Изд-во Моск. Университета, 2002.

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

## Calculation of the sputtering coefficients of oxide films from the surface of a homogeneous material by medium-energy helium ions

V. V. Manukhin

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

Received May 28, 2021

*The paper presents an analytical model for sputtering two-component layered inhomogeneous targets by bombardment with light ions. An analytical formula is obtained that makes it possible to calculate the total and partial sputtering yields of a binary layer of target inhomogeneity by light ions. The obtained formula is used to calculate the sputtering yields of oxide layers from the surface of a homogeneous substrate. The calculation results are in good agreement with the computer simulation data.*

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

**DOI:** 10.51368/1996-0948-2021-4-59-64

## REFERENCES

1. M. K. Abe salomov, V. P. Afanas'ev, V. V. Manukhin, and S. D. Fedorovich, Tesisy Vsesouznogo covestchaniya chastitz s kristallami / pod red. Prof. A. F. Tulinova. – M. MSU, 1989, p. 188 [in Russian].
2. S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer*. (Oxford, Clarendon Press, 1950).
3. V. V. Manukhin, Tech. Phys., No. 52, 968 (2007).
4. V. V. Manukhin, Applied Physics, No. 5, 5 (2016) [in Russian].
5. V. V. Manukhin, Applied Physics, No. 6, 69 (2018) [in Russian].
6. V. S. Remizovich, D. V. Rogozkin, and M. I. Ryazanov, *Fluktuazii probegov zaryazennyh chastits*. (Energoatomizdat, Moscow, 1988) [in Russian].
7. Y. Jeffreys and B. S. Jeffreys, *Methods of mathematical physics*, 3-ed ed., (Cambridge Univ. Press, 1966).
8. *Sputtering by particle bombardment I*, edited by R. Behrish, (Springer-Verlag, 1981).
9. N. Matsunami, Y. Yamamura, and Y. Itikawa, Atomic data and nuclear data tables. **31**, 1 (1984).
10. V. V. Manukhin, Tesisy meghdunarodoy konferenzii po vzaimodeiystviu zaryaghennyh chastitz s kristallami / pod red. Prof. A. F. Tulinova. – M. MSU, 2002 [in Russian].