

УДК 537.534

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА ПРИ СКОЛЬЗЯЩЕЙ ИОННОЙ БОМБАДИРОВКЕ¹⁾ Умаров Ф.Ф., ²⁾ Джухраханов А.А., ³⁾ Мукашев К.М.¹⁾ *Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан*²⁾ *University of Antwerp, Antwerp, Belgium*³⁾ *Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан*

В работе методом компьютерного моделирования исследованы скользящие взаимодействия ионов N^+ , Ne^+ , Ar^+ , Kr^+ , Be^+ и Se^+ с начальными энергиями $E_0 = 0,5 \div 10$ кэВ с поверхностью $Cu(100)$, $Ag(110)$, $Si(001)$, $SiC(001)$ и $GaAs(001)$ и образования первично выбитых атомов отдачи. Показано, что в области скользящего рассеяния упругие потери энергии рассеянных ионов существенно меньше, чем неупругие. Установлено, что сравнение энергий рассеянных ионов с экспериментально измеренными энергетическими распределениями позволяет сделать заключение о наличии и величине моноатомных ступенек. Рассчитаны коэффициенты распыления и десорбции, а также угловые, пространственные и энергетические распределения распыленных и десорбированных частиц. Показано, что при скользящем падении ионов на поверхность монокристалла распыленный и десорбированный поток образуют первично выбитые атомы с очень низкой энергией. Исследована диссоциативная и не диссоциативная десорбция адсорбированных молекул и показана возможность интенсивной не диссоциативной десорбции адсорбированных молекул. Рассчитаны пороги распыления по углу скольжения для одно- и двухкомпонентных кристаллов и их зависимости от массы, энергии бомбардирующих ионов и параметров структуры кристалла. Показано, что при скользящей ионной бомбардировке вдоль низкоиндексных направлений кристалла возможно послойное распыление поверхности монокристалла, оптимальное в узком интервале углов скольжения вблизи порогового угла распыления. Определены оптимальные условия для получения распределения имплантированных ионов по глубине с требуемой формой в приповерхностной области кристалла. Предложен высокочувствительный метод послойного анализа кристаллических поверхностей.

Ключевые слова: *скользящие взаимодействия ион-поверхность; рассеяния ионов; упругие и неупругие потери энергии; послойное распыление поверхности монокристалла; послойный анализ поверхности монокристалла; имплантация ионов; компьютерное моделирование.*

ВВЕДЕНИЕ

Использование скользящих углов падения ионов на поверхность кристалла открывает новые перспективы в исследовании тонких слоев вещества, в частности, в исследовании состава, структуры, топографии и потенциальных полей реальных поверхностей, при ионной полировке и контроле ионными пучками [1–5]. В неупругих процессах, сопровождающих взаимодействие ион-поверхность кристалла проявляются, так называемые траекторные эффекты, т.е. процессы возбуждения, ионизации, перезарядки и связанные с ними неупругие потери энергии зависят от характера и особенностей траекторий рассеиваемых частиц [1–3]. В условиях скользящего рассеяния ионов поверхностью монокристалла, наряду с общей тенденцией уменьшения относительных потерь энергии с уменьшением угла рассеяния, существует область углов скольжения, в которой наблюдается их аномальный рост [1]. Природа этих аномально высоких потерь энергии и их вклад в упругие и неупругие потери энергии остается не совсем ясной и не может быть интерпретирована в рамках модели непрерывного потенциала. Ионная бомбардировка поверхности кристалла приводит к образованию на ней радиационно-индуцированных дефектов типа вакансий, атомных ступенек и их кластеров и к формированию рельефа атомного мас-

штаба (< 10 нм). Существует корреляция между типом дефекта, углами блокировки отраженного пучка и энергетическими распределениями рассеянных частиц, что делает возможным определение типа дефекта и его концентрации на поверхности [3, 6]. Информация о местах связывания и ориентации молекул на поверхности интересна с точки зрения молекулярной структуры и важна для понимания химии гетерогенного катализа. Данные о положениях адсорбированных молекул на поверхности также необходимы для подготовки веществ с заданными свойствами в тонкопленочной технологии [7, 8]. Процесс распыления широко используется в современных микро- и нанотехнологиях. Такие процессы как плазменное травление и осаждение методом распыления, использующие ионную бомбардировку при относительно низких энергиях (~ 100 эВ), широко используются в полупроводниковых технологиях [9]. Однако, использование для модификации поверхности ионной бомбардировки под скользящими углами вместо традиционной бомбардировки под углами, близкими к нормали, позволяет расширить интервал энергий вплоть до ~ 10 кэВ [10], уменьшить повреждения (такие как формирование кратеров) [11] и способствовать формированию экстремально гладкой поверхности [12]. Это обусловлено

особенностями процесса рассеяния при скользящем падении ионов на поверхность монокристалла [13].

1 КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Специфика теоретического рассмотрения кратного рассеяния ионов атомами на поверхности твердого тела, связанная с трудностью описания взаимодействия многих частиц, обусловила широкое использование методов моделирования процесса рассеяния на ЭВМ [2, 3, 5]. Построение траекторий ионов, рассеиваемых атомами на поверхности твердого тела, в нашем алгоритме основывается на двух допущениях: 1) рассматриваются лишь парные столкновения ионов с атомами мишени; 2) путь, проходимый ионом между столкновениями, представляется в виде отрезков прямых линий [3]. Для описания взаимодействия частиц использовался универсальный потенциал Циглера-Бирзака-Литмарка [14]. Неупругие потери энергии рассчитывались по формуле Фирсова, усовершенствованной Кишиневским и были включены в кинематику рассеяния [3]. На рисунке 1 показана геометрия скользящего рассеяния и схематическое изображение полуканала на поверхности $\text{Cu}(100)$ вдоль направления $\langle 110 \rangle$ с расположенной на ней прицельной площадкой. Прицельные точки на поверхности кристалла заполняли прямоугольник, стороны которого были разделены на 100 отрезков в плоскости падения пучка (координата I) и 1000 отрезков в перпендикулярном направлении (координата J).

Размеры прицельной площадки составляли $1,28 \text{ \AA}$ (полуширина полуканала) по J -координате и $2,56 \text{ \AA}$ (межатомное расстояние вдоль направления $\langle 110 \rangle$) по I -координате. Расчеты проводились для прицельных точек равномерно покрывающих (координаты I и J) всю область поверхности мишени, где полное число налетающих ионов составляло $5 \cdot 10^4$. Для рассмотрения одновременных и почти одновременных столкновений ионов с атомами смежных цепочек, использовалась процедура, предложенная в работе [15]. При учете тепловых колебаний предполагалось, что атомы мишени колеблются независимо друг от друга и их отклонения от положения равновесия подчиняются распределению Гаусса. Влияние корреляции эквивалентно уменьшению амплитуды колебаний на $\sim 5\text{--}10\%$ в зависимости от рассматриваемого эффекта [3].

Распыление моделировалось в режиме первичного выбивания. Рассматривались только первично выбитые атомы отдачи (ПВА), испускаемые с первых трех поверхностных слоев. Учитывалось наличие на поверхности плоского потенциального барьера. Число налетающих ионов составляло $4 \cdot 10^4$. Каждая новая частица налетала на восстановленную, чистую поверхность. Траектории рассеиваемых ионов и атомов отдачи прослеживались в процессе их замедления до тех пор, пока их энергия не становилась ниже заранее заданной энергии: 25 эВ – для налетающих ионов и поверхностная энергия связи –

для выбитых атомов. Расчеты проводились на кристаллах, включающих до 120 атомных слоев.

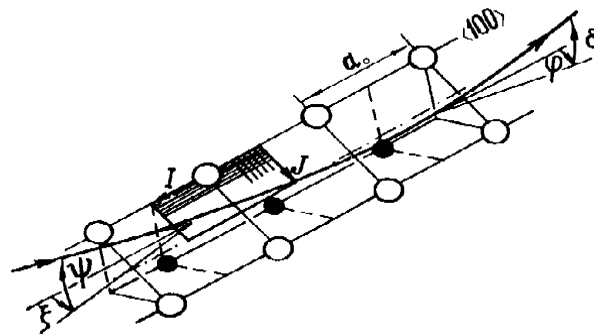


Рисунок 1. Схематическое изображение рассеяния ионов полуканалом на поверхности $\text{Cu}(100)$ и расположенной на ней прицельной площадки. I и J – координаты прицельных точек вдоль и поперек осей полуканала, определяющих число налетающих ионов

Начальная энергия налетающих ионов варьировалась от $0,5$ до 10 кэВ , скользящие углы падения ψ , отсчитываемые от поверхности мишени, составляли $3\text{--}30^\circ$ и азимутальные углы падения ξ , реализуемые вращением мишени относительно нормали к поверхности и отсчитываемые от направления $\langle 100 \rangle$ составляли $0\text{--}180^\circ$. Полярный угол рассеяния θ отсчитывался от направления первичного пучка, полярный угол вылета δ – от поверхности мишени и азимутальный угол рассеяния ϕ – от плоскости падения.

При моделировании процесса десорбции молекул с поверхности монокристалла места адсорбции молекул O_2 соответствовали позициям выше второго слоя с осью O-O параллельной поверхности $\text{Ag}(110)$ вдоль направления $\langle 110 \rangle$ с адсорбционной структурой $c(2 \times 2)$ (рисунок 2). Высота ее центра масс над поверхностной плоскостью составляла $0,094 \text{ нм}$, длина связи O-O – $0,155 \text{ нм}$, энергия связи E_b молекулы O_2 с поверхностью составляла $0,53 \text{ эВ}$ и энергия связи (диссоциации) ϵ молекулы O_2 – 5 эВ .

Необходимость использования компьютерного моделирования обусловлена сложностью траекторий рассеиваемых ионов и атомов отдачи в процессах скользящего рассеяния, послойного распыления и поверхностного каналирования, что препятствует использованию аналитических методов расчетов. Компьютерное моделирование является не только эффективным дополнительным методом повышения информативности результатов эксперимента, но может иметь и самостоятельное значение для выявления новых механизмов процессов ионного рассеяния, распыления и десорбции простых молекул.

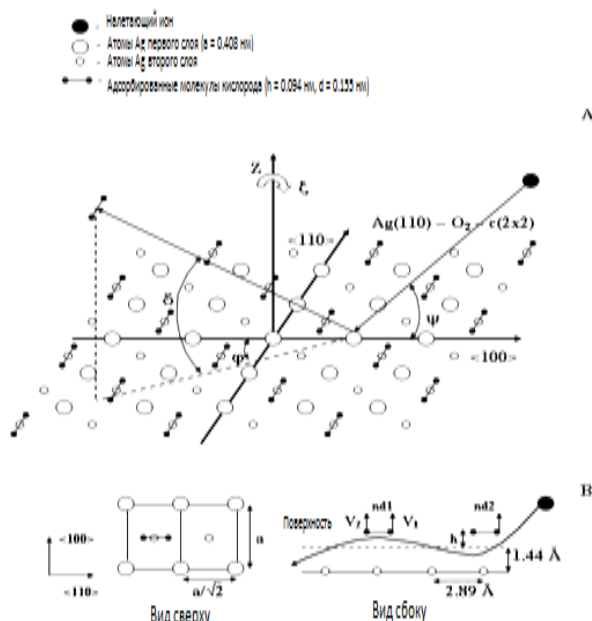


Рисунок 2. Первые два слоя монокристалла Ag(110) с адсорбированными молекулами O₂ и схематическое изображение направления падения иона и распыления молекулы O₂ без диссоциации [8]

2 РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Как было отмечено выше, в неупругих процессах, сопровождающих взаимодействие ионов с кристаллами, проявляются, так называемые траекторные эффекты. В основном, это означает, что неупругие процессы и связанные с ними неупругие потери энергии зависят от фактической траектории рассеянной частицы. Оказалось, что относительная величина аномальных потерь энергии зависит от ориентации кристалла и возрастает с уменьшением начальной энергии ионов. В работе [16] этот эффект был связан с механизмом поверхностного гиперканалирования (ПГК), который преобладает при очень малых углах скольжения.

2.1 Скользящее рассеяние ионов поверхностью монокристалла

В разделе представлены результаты исследования упругих и неупругих потерь энергии и характерных особенностей траекторий ионов, проявляющихся при рассеянии на дискретной атомной цепочке, в полуканале и канале на поверхности монокристалла при малых углах скольжения и рассеяния, а также вклады различных механизмов рассеяния в экспериментально наблюдаемые аномальные потери энергии [3, 18]. Траектории ионов Ag⁺ с начальной энергией 15 кэВ, испытывающих скользящее рассеяние на атомных цепочках, в полуканалах и каналах на поверхности Cu(100), прослеживались в самых верхних 10 атомных слоях с помощью компьютерного моделирования.

На рисунке 3 показаны гистограммы энергетических распределений ионов Ag⁺, испытывавших зер-

кальное рассеяние на поверхности Cu(100) $\langle 110 \rangle$ в детектор с угловой апертурой $\pm 0,5^\circ$. Ионы, рассеянные вдоль гребней атомных цепочек вносят вклад в пики, обозначенные цифрой 1. Пики, расположенные слева и обозначенные цифрами 2–4 соответствуют ионам, испытавшим поверхностное гиперканалирование (ПГК) [16]. В случае траекторий типа 4 ионы фокусируются в направлении $\langle 110 \rangle$, точка фокуса лежит на $\sim 0,5$ Å выше плоскости поверхности. При $\psi = 4^\circ$, форма спектра претерпевает существенное изменение вследствие резкого возрастания числа траекторий нового типа 5, и уменьшения вклада траекторий типа 1–4. Из рисунка 3 видно, что ионы с траекториями типа 5 фокусируются поверхностными рядами с точкой фокуса, расположенной немного выше поверхности и распространяются затем расходящимся потоком в направлении стенок полуканала. Траектории типа 5 отличаются по форме и характеру от траекторий ПГК. Резкое возрастание таких частиц наводит на мысль о существовании своеобразного эффекта перефокусировки, который проявляется в выраженном сужении пространственного распределения рассеянных частиц. Интервал углов, в котором наблюдается этот эффект перефокусировки мал ($3,5^\circ \leq \psi < 5^\circ$), так что при $\psi = 5^\circ$ он уже не наблюдается.

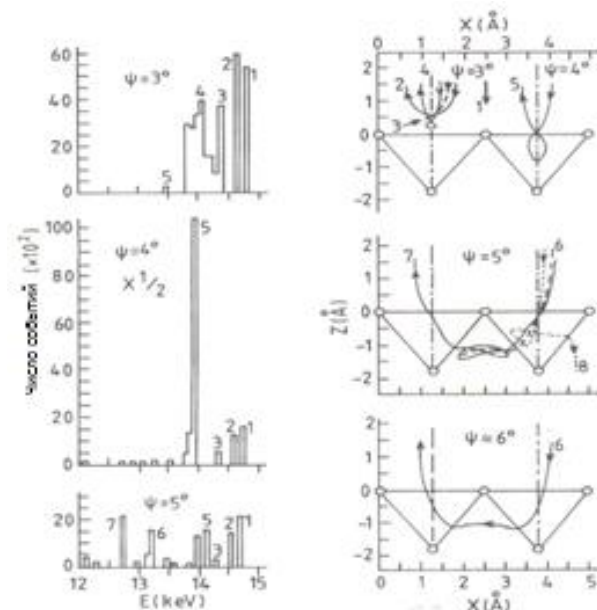


Рисунок 3. Гистограммы энергетических распределений ионов Ag⁺ с энергией 15 кэВ, рассеянных зеркально ($\theta=2\psi$) на поверхности Cu(100) $\langle 110 \rangle$. В правой части изображены наиболее характерные траектории ионов в проекции на поперечную плоскость полуканала $\langle 110 \rangle$

При $\psi = 5^\circ$ в дополнении к пикам 1–5 в спектре появляются новые низкоэнергетические пики 6 и 7. Характер траекторий частиц типа 7 более сложный, чем типа 6. В последнем случае часть траектории в канале короче, частицы фактически его пересекают. По своей форме и общей конфигурации эти траекто-

рии не принадлежат к траекториям, которые типичны для приповерхностного гиперканалирования, которые также наблюдались в наших расчетах. Также существуют траектории типа 8, соответствующие ионам, которые преодолевают потенциальный барьер стенок полуканала, внедряются в более глубокие слои и поэтому не рассеиваются обратно.

На рисунке 4 изображены экспериментальные [18] и рассчитанные [17] зависимости относительных потерь энергии $(E_0 - E)/E_0$ от угла скольжения для ионов Ag^+ с энергией 15 кэВ, рассеянных на поверхности $Cu(100) \langle 110 \rangle$. Кружки – эксперимент, крестики – расчет, 1 – упругие и 2 – неупругие вклады в полные относительные потери энергии. Расчетная кривая была построена усреднением потерь по различным механизмам рассеяния в соответствии с их относительным вкладом в спектр. Как видно из рисунка 4, основной вклад в аномальные потери энергии вносят неупругие потери энергии. Максимум неупругих потерь энергии вносится частицами с траекториями типа 5–7, а также частицами, испытывающими приповерхностное гиперканалирование. Таким образом, в области скользящего рассеяния упругие потери энергии существенно меньше чем неупругие потери. Факт превышения неупругих потерь энергии над упругими для малых углов скольжения ψ обусловлен возрастанием числа столкновений и длины траектории частиц в приповерхностной области, а также отсутствием малых прицельных параметров в процессе рассеяния. Преобладание неупругих потерь энергии должно проявлять себя в эффективности различных неупругих процессов, сопровождающих скользящее рассеяние ионов поверхностью монокристалла.

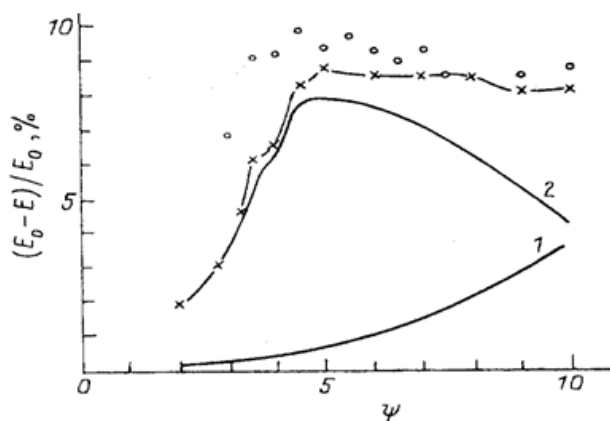


Рисунок 4. Экспериментальные [18] (кружки) и рассчитанные [3, 17] (крестики) зависимости относительных потерь энергии от угла скольжения для $\theta = 2\psi$ и ионов Ag^+ с энергией 15 кэВ, рассеянных поверхностью $Cu(100) \langle 110 \rangle$; упругие (1) и неупругие (2) вклады в полные относительные потери энергии

Ионная бомбардировка поверхности твердого тела приводит к образованию на ней радиационно-индуцированных дефектов типа вакансий и их скопле-

ний, атомных ступенек и кластеров точечных дефектов, а также к формированию на поверхности рельефа атомного масштаба ($< 100 \text{ \AA}$). Концентрация и тип формируемых радиационных дефектов зависит от условий эксперимента и существенно влияют на траектории, угловые и энергетические распределения, а также на число рассеянных частиц. Более того, существует корреляция между типом дефекта, углами блокировки отраженного пучка и энергетическими распределениями рассеянных частиц, что позволяет определить тип дефекта и его поверхностную концентрацию [1, 3, 6, 19].

В работе [20] было оценено число атомных ступенек, формируемых на поверхности монокристалла $Cu(100)$ при $T = 300 \text{ K}$, предварительно нарушенной бомбардировкой ионами Ag^+ с начальной энергией $E_0 = 10 \text{ кэВ}$ и плотностью тока на мишень в интервале $10^{-6} \div 10^{-8} \text{ A} \cdot \text{см}^{-2}$. На рисунке 5 изображены энергетические распределения полного числа (ионы + нейтралы) и ионной компоненты частиц аргона, рассеянных поверхностью $Cu(100)$ в направлении $\langle 100 \rangle$ для двух углов падения: $\psi = 7^\circ$ (а) и 23° (б) и угла рассеяния $\theta = 30^\circ$. Частицы, испытывающие квазиоднократное рассеяние на атомах монокристалла вносят вклад в пики 1 и 1' в спектре, а частицы, отраженные от атомов ступенек вносят вклад в пики 2 и 2' [20]. Схематически такие траектории показаны в верхней части рисунка 5. Число атомов ступенек оценивалось в соответствии с интенсивностью пиков квазиоднократного рассеяния в энергетическом спектре полного числа рассеянных частиц при $\psi = 7^\circ$ (1) и 23° (1'). На рисунке 5 эти спектры изображены сплошной линией.

Возможность рассеяния на угол $\theta = 30^\circ$ при малых ($\psi < 10^\circ$) и больших ($\psi > 20^\circ$) углах падения обусловлена тем, что бомбардировка вносит нерегулярности в совершенную бесконечную атомную цепочку, так что она становится конечной со ступеньками вверх (а) или вниз (б). Число атомов ступенек образуемых под действием ионной бомбардировки, и оцениваемых по пикам 1 и 1' в энергетическом спектре с точностью $\sim 30\%$, оказалось $\sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Рассчитанные энергии частиц, рассеянных вдоль траекторий 1, 1', 2 и 2' соответствовали экспериментально определенным положениям соответствующих пиков в спектре, а именно: $E/E_0 = 0,84$ и $E/E_0 = 0,92$ (вертикальные сплошные линии на рисунке 5, а, б). Ионы, рассеянные вдоль траекторий 2 и 2' предварительно или после отраженные на атоме ступеньки, испытывали обычно 8–10 столкновений с атомами цепочки. Их пробеги вдоль поверхности примерно составляли $25 \div 30 \text{ \AA}$, и неупругие потери энергии – примерно 20 % от полных потерь. Широкие максимумы 3, 4 и 3', 4' между пиками 1 и 2, а также 1' и 2' в работе [20] не были объяснены. Для объяснения максимумов 3, 4 и 3', 4' в спектрах нами были рассчитаны траектории ионов, рассеянных на поверх-

ности, на которой располагались полубесконечные моноатомные или изолированные ступеньки (атомные фрагменты) различной протяженности l , разделенные частями упорядоченной поверхности длины L . Схематически такие траектории показаны в нижней части рисунка 5. Траектории 3 и 3', вносящие вклад в широкие максимумы 3, 4 и 3', 4' в спектре, формируются двумя смежными ступеньками: частицы проходят под одной из ступенек и затем отражаются от торцевого атома второй ступеньки. Траектории квазидвукратного рассеяния 4 и 4' на торцевых атомах смежных ступенек также вносят вклад в эти максимумы. На рисунке 5 вклады вышеупомянутых траекторий обозначены вертикальными пунктирными линиями. Из расчетов следует, что возрастание числа атомов в первой ступеньке (атомный фрагмент) и соответственно ее удлинение с постоянным расстоянием между ступеньками L приводит к уменьшению энергии ионов, рассеиваемых вдоль траекторий типа 3 и 3'.

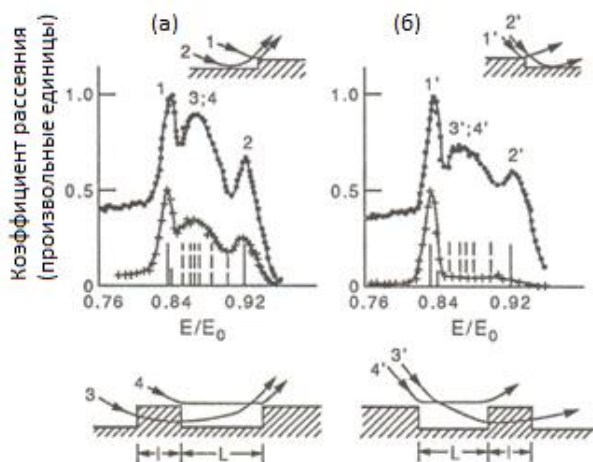


Рисунок 5. Энергетические распределения полного числа (•••••) и ионной компоненты (+ + + + +) частиц аргона, рассеянных на угол $\theta = 30^\circ$ поверхностью $\text{Cu}(100) \langle 100 \rangle$ при $\psi = 7^\circ$ (а) и 23° (б). Рассчитанные положения энергии в спектре, соответствующие рассеянным ионам, обозначены сплошными и пунктирными вертикальными линиями

Изменение числа атомов в первой ступеньке (атомный фрагмент) от одного до четырех дает возможность получить траектории рассеянных ионов типа 3 и 3' с энергиями, покрывающими весь интервал относительных энергий широкого максимума от $E/E_0 = 0,85$ до $E/E_0 = 0,90$. Наиболее вероятными оказались ступеньки (атомные фрагменты), содержащие два или три атома разделенные частями упорядоченной поверхности длиной $L = 15 \div 45 \text{ \AA}$. Рассеяние на таких ступеньках вносит вклад в область пиков 3, 4 and 3', 4' широкого максимума ($E/E_0 = 0,86 \div 0,88$). Расстояния между атомными ступеньками (фрагментами) варьируются от минимального, равного двум постоянным решеткам $\text{Cu}(100)$, до $\sim 45 \text{ \AA}$. Наличие и величина пиков 2 и 2' в спектре подтверждает существование расстояний между

ступеньками в интервале $\sim 25 \div 45 \text{ \AA}$. Траектории типа 4 и 4' слабо чувствительны (по значению энергии) к расстоянию между ступеньками, но их вероятность существенно уменьшается с ростом L . Интересно отметить, что исчезновение пиков 2', 3' и 4' в ионной компоненте рассеянного пучка при $\psi = 23^\circ$ хорошо согласуется с характером соответствующих траекторий. Выводы относительно пространственной протяженности атомных ступенек и расстояний между ними, полученные с использованием сопряженного потенциала, хорошо согласуются с результатами описанными выше и полученными с использованием универсального потенциала Бирзака-Литтмарка-Циглера.

Таким образом, из сравнения результатов моделирования траекторий и энергий рассеянных частиц с экспериментальными энергетическими распределениями можно сделать заключение, что при бомбардировке поверхности $\text{Cu}(100)$ ионами Ag^+ с начальной энергией 15 кэВ при экспериментальных условиях [20], на поверхности образуются изолированные моноатомные ступеньки (фрагменты), содержащие несколько (от одного до четырех) атомов. Расстояния между ступеньками варьируются от двух постоянных решеток для $\text{Cu}(100)$ до $\sim 45 \text{ \AA}$. Наиболее вероятным является появление ступенек (фрагментов), содержащих два или три атома, разделенных частями упорядоченной поверхности длиной $L = 15 \div 45 \text{ \AA}$. Оценка числа атомных ступенек, рассчитанная нами на основе предлагаемой модели нарушенной поверхности согласуется со значением $\sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, полученным в работе [20].

2.2 Десорбция молекул с поверхности монокристалла

Моделировались диссоциативная и недиссоциативная десорбции адсорбированных молекул [8]. Атом или молекула считались десорбированными, если их импульсы после всех возможных столкновений были направлены в сторону вакуума и их энергии были достаточными для преодоления поверхностного потенциального барьера. Для расчетов недиссоциативной десорбции молекул с поверхности монокристалла как димеров, использовалось приближение, подобное «отрывной» модели. В соответствии с этим приближением ион в результате серии коррелированных столкновений может выбить молекулу без разрыва связи между ее атомами, если относительная кинетическая энергия атомов не превышает энергию диссоциации молекулы:

$$E_r^{\text{mol}} = m_2 / 4 (v_1 - v_2)^2 \leq \varepsilon \quad (1)$$

и энергия центра масс достаточна для преодоления энергии связи молекулы с поверхностью E_b :

$$E_c = m_2 / 4 (v_1 + v_2)^2 \geq E_b, \quad (2)$$

где m_2 – масса атома молекулы, $v_{1,2}$ – скорости атомов молекулы. Молекула рассматривалась как десорбированная без диссоциации, если импульс ее центра масс был направлен в вакуум и удовлетворя-

лись условия (1) и (2). Для таких молекул рассчитывались их распределения по полярному δ и азимутальному ϕ углам вылета, а также коэффициент десорбции молекул кислорода без диссоциации. Поведение овалов рассеяния дает возможность определить места адсорбции двухатомных молекул в плоскости поверхности.

Показано, что при скользящей ионной бомбардировке возможна интенсивная десорбция адсорбированных молекул кислорода без диссоциации. На рисунке 6 представлены зависимости коэффициентов десорбции молекул кислорода от энергии налетающих ионов N^+ при угле скольжения $\psi=9^\circ$, бомбардирующих покрытую кислородом поверхность $Ag(110)$. Наблюдается интенсивная десорбция адсорбированных частиц при $E=2$ кэВ. Эта зависимость показывает, что при низких энергиях адсорбированные молекулы обычно десорбируются как молекулы, однако с ростом энергии ($E > 2$ кэВ) вероятность десорбции без диссоциации уменьшается.

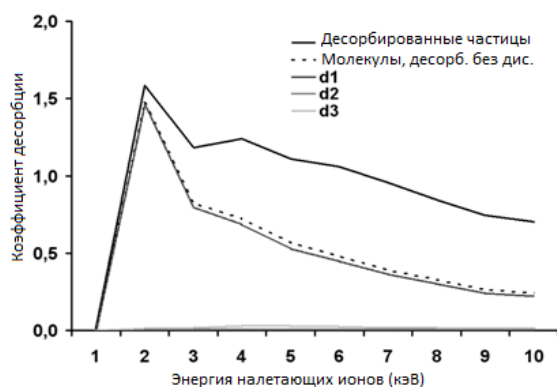
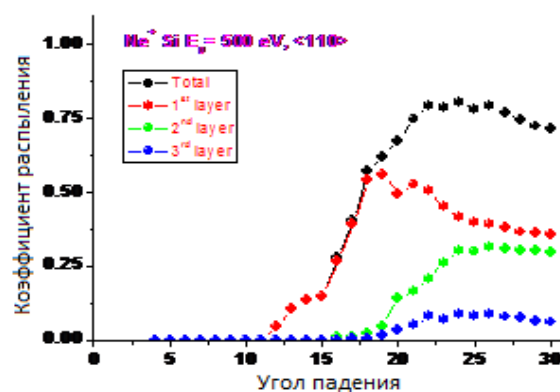


Рисунок 6. Зависимости коэффициентов десорбции молекул кислорода от энергии налетающих ионов N^+ при угле скольжения $\psi=9^\circ$, бомбардирующих покрытую кислородом поверхность $Ag(110)$ [8]

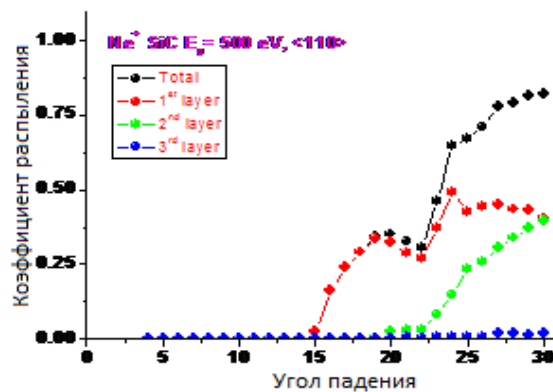
2.3 Послойное распыление поверхности монокристалла

В разделе представлены результаты компьютерного моделирования процесса распыления поверхностей $Si(001)$ и $SiC(001)$ при скользящей бомбардировке ионами Ne^+ с начальными энергиями 0,5–5 кэВ [21, 22]. На рисунке 7, а, б сравнены угловые зависимости коэффициентов распыления поверхностей $Si(001)$ и $SiC(001)$, бомбардируемых ионами Ne^+ с энергией 0,5 кэВ, с вкладом в распыление первых трех поверхностных слоев. Видно, что на всех зависимостях существуют пороговые углы скольжения, при меньших углах распыление не наблюдается. При углах падения, меньших порогового угла налетающие ионы не могут проникнуть в кристалл и распылить атомы мишени. С ростом энергии налетающих ионов пороговый угол смещается в сторону меньших значений угла падения налетающих ионов. При углах падения ψ больших чем пороговый угол, число первично выбитых атомов (ПВА)

вначале растет и достигает своего максимума. Вблизи порогового угла существует плато, так как энергия ионов недостаточна как для продолжительного движения ионов в пределах поверхностных полуканалов, так и для проникновения в более глубокие слои. С ростом начальной энергии это плато исчезает и коэффициент распыления уменьшается при больших ψ . Это уменьшение числа ПВА объясняется частичным проникновением ионов в более глубокие слои и преобладанием каскадного механизма распыления. Очевидно, что относительные вклады каждого слоя в величину полного числа ПВА существенно зависят от угла падения. В интервале углов $\psi = 11\text{--}20^\circ$ для Si, распыление имеет место только с первого слоя.



а)



б)

Рисунок 7. Коэффициенты распыления $Si(001)$ (а) и $SiC(001)$ (б) в зависимости от угла падения бомбардирующих ионов Ne^+

Рассчитаны коэффициенты распыления поверхностей $Si(001)$ и $SiC(001)$, подразделенные на вклады в распыление первых трех слоев поверхности в зависимости от энергии налетающих ионов Ne^+ для $\psi = 10^\circ$. Пороговая энергия распыления для этих случаев составляет примерно 1 кэВ. Оказалось, что основной вклад в полный коэффициент распыления вносит первый слой. Более того, в интервале энергий 0,5–1,5 кэВ распыление происходит только с первого слоя. Дальнейший рост энергии ионов при-

водит к росту вклада второго и третьего слоев. Вклад в распыление с третьего слоя больше, чем со второго слоя, когда атомные ряды второго слоя располагаются непосредственно под первым слоем в направлении $\langle 110 \rangle$. Из полученных результатов следует, что выбором угла падения и начальной энергии возможно добиться послойного распыления поверхности. Таким образом, особенности образования первично выбитых атомов от дачи (ПВА) при скользящем падении ионного пучка на атомно-гладкую поверхность монокристалла способствуют ее послойному распылению. Для реализации механизма послойного распыления необходимо, чтобы часть энергии иона, соответствующая нормальной компоненте его скорости, была бы меньше, чем порог распыления атомов слоя, следующего за поверхностью, то есть $E_i \sin^2 \psi_i < E_d$, где E_i – энергия иона до i -го столкновения, ψ_i – угол между направлением движения иона и осью полуканала до i -го столкновения, E_d – энергия смещения атомов второго слоя (в случае рассмотрения нижней цепочки полуканала). В этих условиях возможно добиться последовательного удаления слоев без нарушения последующего слоя при удалении предыдущего.

2.4 Ионная имплантация в приповерхностные слои монокристалла

В данном разделе представлены результаты компьютерного моделирования процесса ионной имплантации в приповерхностные слои GaAs(001) при бомбардировке ионами Be^+ и Se^+ с начальными энергиями $0,5 \div 10$ кэВ под скользящими углами падения ψ [23, 24]. Поверхность (001) III-V полупроводников является одной из наиболее широко используемых поверхностей полупроводников в процессах как гомо-, так и гетероэпитаксиального роста при изготовлении электронных устройств. Имплантация ионов Be и Se в GaAs(001) под скользящими углами позволяет вводить акцепторные и донорные примеси и ультра мелкие переходы в этот полупроводник. Пробеги имплантированных частиц в поверхностных полуканалах и каналах в этих условиях существенно возрастают и достигают сотен ангстрем благодаря эффекту каналирования.

На рисунке 8 представлены доли ионов Be и Se с начальной энергией 1 кэВ, имплантированных в поверхность GaAs(001) в зависимости от угла скольжения для направлений $\langle 110 \rangle$ и $\langle 1\bar{1}0 \rangle$. Небольшое различие этих зависимостей для двух направлений объясняется различной формой полуканалов в указанных направлениях. Видно, что при углах скольжения, меньших некоторого критического угла имплантация не имеет места. Значение критического угла уменьшается с уменьшением массы налетающего иона. При углах падения, при которых наблюдаются минимумы зависимостей, налетающие ионы интенсивно отражаются стенками полуканалов вследствие эффекта ионной фокусировки. Показано, что в случае скользящих взаимодействий ион-по-

верхность монокристалла основной пик профиля распределения внедренной примеси по глубине существенно мелок. Профили распределения имплантированной примеси зависят от массы иона, ориентации кристалла и угла скольжения. Сравнение профилей показало, что пробеги для ионов Se гораздо более мелкие и полуширина профиля распределения уже, чем для ионов Be. Полученные результаты позволяют подбирать оптимальные условия для получения профилей распределения примесей с требуемой формой в приповерхностной (5–10 атомных слоев) области кристалла.

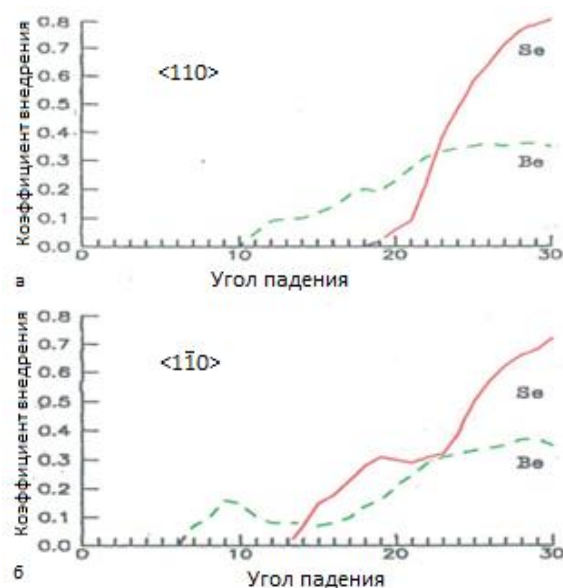


Рисунок 8. Зависимость числа ионов Be и Se с начальной энергией 1 кэВ, имплантированных в поверхность GaAs(001) от угла скольжения ψ . Число налетающих ионов 10^4

2.5 Послойный анализ поверхности при ионной бомбардировке под скользящими углами

Предложенный механизм послойного распыления поверхности монокристалла при бомбардировке под скользящими углами открывает возможность для разработки высокочувствительного метода послойного анализа кристаллических поверхностей. Целью предлагаемого метода является повышение точности и чувствительности элементного и фазового анализа кристаллических твердых тел, а также определения профиля концентрационных распределений имплантированных в твердое тело примесей [25]. Поставленная цель достигается тем, что послойное распыление мишени ионами осуществляют в диапазоне углов скольжения $\psi = 1 \div 5^\circ$, отсчитываемых от поверхности мишени, в диапазоне энергий ионов, верхний предел которой ниже порога распыления атомов поверхности мишени вдоль нормальной составляющей их скорости. При этом в ходе распыления мишень равномерно вращают относительно оси, нормальной к поверхности распыления. Отбор для масс-анализа вторичных частиц осуществ-

влияют по азимуту в угловом интервале $\varphi = 85 \pm 5^\circ$ к направлению бомбардирующего пучка. Перед анализом осуществляют предварительную обработку поверхности тем же пучком до шероховатости поверхности $R_z = 0,05$ мкм. При скользящих углах падения первичного пучка ионы рассеиваются в зеркальном направлении ($\theta = 2\psi$) по отношению к налетающему пучку и они пространственно отделены от первично выбитых атомов отдачи (ПВА) [26]. Вследствие этого увеличивается отношение сигнала к фону, а также обеспечивается возможность в равных условиях определять концентрацию примесей, находящихся не только в узлах кристаллической решетки, но и в ее междоузлиях. С помощью электронной пушки пучком электронов дополнительно ионизовали распыленные в направлении ($\varphi = 85 \pm 5^\circ$) первично выбитые атомы примесных элементов. Рассчитанные энергетические и пространственные распределения ПВА представлены на рисунке 9.

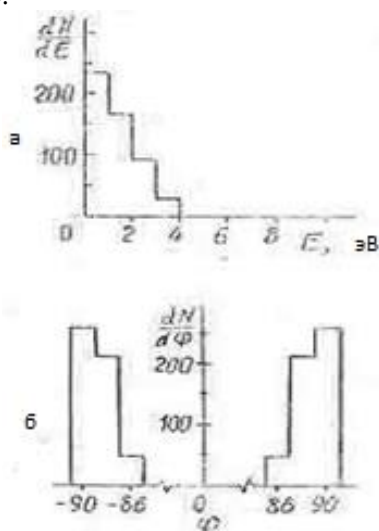


Рисунок 9. Энергетические (а) и пространственные (б) распределения ПВА при скользящей бомбардировке ионами Ar^+ поверхности $Cu(100) < 110 >$. $E_0 = 7$ кэВ и $\psi = 5^\circ$

Таким образом, располагая масс-анализатор перпендикулярно относительно плоскости падения пучка ($\varphi = 85 \pm 5^\circ$), мы увеличиваем чувствительность анализа, так как энергетическое распределение ПВА заключено в узком интервале $\sim 1-4$ эВ энергий, что обеспечивало достаточно высокую и примерно равную степень ионизации для всех распыленных частиц. Это позволяло увеличить точность количественного анализа в несколько раз.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе выполненных исследований можно сделать следующие выводы:

- В области скользящего ионного рассеяния упругие потери энергии значительно меньше неупругих. Преобладание неупругих потерь энергии проявляется в эффективности различных неупругих

процессов, сопровождающих скользящее рассеяние ионов поверхностью монокристалла;

- Показано, что при скользящей ионной бомбардировке поверхности монокристалла возможна интенсивная десорбция адсорбированных молекул без диссоциации;

- Поведение петель рассеяния в зависимости энергии рассеянных ионов от полярного угла вылета дает возможность определения мест адсорбции двухатомных молекул в плоскости поперечной относительно атома мишени;

- Из сравнения результатов компьютерного моделирования траекторий рассеянных частиц с экспериментальными энергетическими распределениями показано, что в условиях бомбардировки поверхности $Cu(100)$ ионами Ar^+ с начальной энергией $E_0 = 10$ кэВ, на поверхности образуются изолированные монокристаллические ступеньки (фрагменты), содержащие несколько атомов (от одного до четырех). Расстояния между ступеньками варьируются от двух постоянных решеток до ~ 45 Å;

- Рассчитаны коэффициенты распыления поверхностей $Si(001)$ и $SiC(001)$ при бомбардировке ионами неона в зависимости от начальной энергии налетающих ионов ($E_0 = 0,5-5$ кэВ), угла падения ($\psi = 3-30^\circ$) и азимутального угла падения ($\xi = 0-180^\circ$). Показано, что возможно эффективное послойное распыление вблизи пороговых углов и энергий распыления;

- Параметры монокристаллов (постоянная решетки, энергия связи и массы атомов) существенно влияют на угловые и энергетические зависимости коэффициента распыления. В общем, коэффициент распыления поверхности $SiC(001)$ больше, чем коэффициент распыления поверхности $Si(001)$;

- Показано, что в случае ионов Be^+ и Se^+ имплантируемых в поверхность $GaAs(001)$ основной пик распределения имплантированных ионов по глубине расположен значительно ближе к поверхности и пробеги ионов Se – значительно короче.

- Полученные результаты позволяют выбирать оптимальные условия для получения распределения имплантированных ионов по глубине с требуемой формой в приповерхностной (5–10 атомных слоев) области кристалла;

- Предложен высокочувствительный способ послойного количественного анализа кристаллических твердых тел на основе разработанного механизма послойного распыления поверхности монокристалла при бомбардировке под скользящими углами.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают искреннюю благодарность и признательность Э.С. Парилису за постановку задач исследований, внимание и поддержку на всех этапах их выполнения, а также Е.С. Машковой и незабвенному В.А. Молчанову за всемерную поддержку и признание наших исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. Mashkova, E. S. and Molchanov, V. A. Medium Energy Ion Reflection from Solids. North-Holland Publ., Amsterdam -1985.
2. Eckstein W. Computer simulation of Ion-Solid Interactions. Springer, Heidelberg, -1991.
3. Parilis, E. S., Kishinevsky, L. M., Turaev, N. Yu., Baklitzky, B. E., Umarov, F. F., Verleger, V. Kh., Nizhnaya, S. and Bitensky, I. S. Atomic Collisions on Solid Surfaces. North-Holland Publ., Amsterdam. - 1993.
4. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. -М.: -1995. Энергоатомиздат.
5. Van Hove M.A. Atomic Scale Structure: from Surfaces to Nanomaterials. Surf. Sci., -2009. -603, -PP.1301-1305,.
6. Begemann, S. H. A. and Boers, A. L. Surf. Sci., -1972. -30. 134.
7. Kapur Sh., Garrison B.J. Chem Phys. -1981.75. 445.
8. Dzhurakhalov A.A., Rahmatov S.E., Yadgarov I.D. Nucl. Instr. and Meth. B 230. -2005. 560.
9. Labanda J. G. C., Barnett S. A.: Sep., J. Electronic Mater. -1997.
10. Dzhurakhalov A. A., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B216, -2004. 202.
11. Rzeznik L., Paruch L. Garrison B.J., Postava Z. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B269.-2011.- 1586.
12. Frost F., Fechner R., Flamm D., Ziberi B., Frank W., Schindler A. Appl. Phys. A, -2004.-78.- 651.
13. Umarov F. F., Dzhurakhalov A. A., Teshabaeva N. A., Appl. Surf. Sci., -1998. -125 -226.
14. Ziegler J.F., Biersack J.P., and Littmark U. Stopping and Ranges of Ions in Matters. Pergamon, NewYork. -1983.
15. Robinson, M. T. and Torrens, I. M. Phys. Rev., -1974.- B9,-5008.
16. Evdokimov I.N., Webb R.P., Armour D.G. and Karpuzov D.S. Radiat Eff. -1979. -42. -83.
17. Dzhurakhalov A.A., Umarov, F.F. Nucl. Instr. and Meth. -1998.-B 136-138, -1092.
18. Evdokimov I.N., Mashkova E.S., Molchanov V.A. Dokl.Akad.Nauk SSSR. -1969. -186. -549.
19. Parilis E. S., Turaev N.Yu. and Umarov F. F. Radiat. Eff., 24, 207 (1975).
20. Luitjens S.B., Algra A.J., Suurmeijer E.P.Th.M. and Boers A.L. Surf. Sci. -1980.-100.- 315.
21. Umarov F. F., Dzhurakhalov A. A., Teshabaeva N. A., Appl. Surf. Sci. -1998. -125. -226.
22. Umarov F. F., Dzhurakhalov A. A. Surf. Interface Anal. -2013.-45. – 83.
23. Dzhurakhalov A.A., Umarov F. F. IEEE. -2000. -232.
24. Dzhurakhalov A.A., Ferleger V.Kh., Khakimov S., Surf. Sci. - 1999. -188. – pp.433–435.
25. Груич Д.Д., Морозов С.Н., Пичко С.В., Белкин В.С., Умаров Ф.Ф. и Джурахалов А.А. Авторское свидетельство СССР № 1262594. Способ послойного количественного анализа кристаллических твердых тел, -1986.
26. Shulga V.I. Radiat Eff. -1980. – 51. -1.

ИОНДАРМЕН КӨЛБЕЙ СӘУЛЕЛЕНДІРУ НӘТИЖЕСІНДЕ МОНОКРИСТАЛДЫҢ БЕТТІК ҚАБАТЫНДА НАНОӨЛШЕМДІ ҚҰРЫЛЫМДАРДЫҢ ТУЫНДАУЫН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛДЕУ

¹⁾ Ф.Ф. Умаров, ²⁾ А.А. Джурахалов, ³⁾ Қ.М. Мұқашев

¹⁾ Қазақ-Британ техникалық университеті, Алматы, Қазақстан

²⁾ Антверпен университеті, Антверпен, Белгия

³⁾ Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

Бастапқы энергиясы $E_0 = 0,5 \div 10$ кэВ болатын қиғаш түскен N^+ , Ne^+ , Ar^+ , Kr^+ , Be^+ және Se^+ иондарының $Cu(100)$, $Ag(110)$, $Si(001)$, $SiC(001)$ және $GaAs(001)$ монокристалдарының беттік қабатымен әсерлесуінің, соған байланысты, алғашқы ығысқан атомдардың туындауын компьютерлік моделдеу арқылы зерттеу нәтижелері баяндалады. Қиғаш шашырау кеңістігінде шашыраған иондар энергиясының серпімді шығыны серпімсіз шығыннан көп төмен екендігі байқалды. Шашыраған иондардың энергиясын эксперимент нәтижесінде анықталған энергетикалық үлестірулермен салыстыру арқылы моноатомдық сатылардың орын алатынын және олардың мөлшерін анықтауға болады. Тозандата таралған бөлшектердің бұрыштық, кеңістік және энергетикалық үлестірілуі мен тиісті коэффициенттері есептелді. Иондардың монокристалдың беттік қабатына қиғаш түсуі нәтижесінде тозаң түрінде тараған және десорбцияланған бөлшектердің энергиясы өте төмен алғашқы ығысқан атомдар ағынын құрайтыны белгілі болды. Адсорбцияға қатысқан молекулалардың диссоциативті және диссоциативті емес десорбциясы зерттеліп, олардың диссоциативті емес десорбциясы үлесінің қарқындылығының жоғары болу мүмкіндігі көрсетілді. Бір және екі компонентті кристалдар үшін бөлшектердің ығысу бұрышына байланысты тозаңдау табалдырығы табылып, сәулелендіруші иондардың массасына, энергиясына және кристалдың құрылымдық көрсеткіштеріне тәуелділігі анықталды. Қиғаш бағытта иондармен сәулелендіру арқылы сырғанау бұрышының шашырау табалдырығының оптималды аралығында, төменгі индекстік бағыттарда монокристалдың бетін қабат- қабатымен тозаңдатуға болатындығы дәлелденді. Кристалдың беттік қабатына жақын маңда имплантацияланған иондардың әртүрлі тереңдікте қажетті мөлшерде үлестірілу дәрежесін белгілеу шарттары мен жолдары анықталып, беттік аралықты қат-қабат бойынша талдаудың сезімталдығы жоғары әдісі ұсынылды.

Түйін сөздер: ион-беттік қабаттың сырғанай әсерлесуі, иондардың шашырауы, энергияның серпімді және серпімсіз шығыны, монокристалдың беттік кеңістігін қабаттап тозаңдату, монокристалдың бетін қабатпен талдау, иондар имплантациясы, компьютерлік модель.

COMPUTER SIMULATION OF NANO-DIMENSIONAL EDUCATION STRUCTURES ON THE SURFACE OF A MONOCRYSTAL AT THE SLIDE ION BOMBING

¹⁾ F.F. Umarov, ²⁾ A.A. Djurakhalov, ³⁾ K.M. Mukashev

¹⁾ *Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan*

²⁾ *University of Antwerp, Antwerp, Belgium*

³⁾ *Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan*

This work deals with the computer simulation of low- and medium energy ($E_0=0.5\div 10$ keV) N^+ , Ne^+ , Ar^+ , Kr^+ , Be^+ и Se^+ ions sliding collisions on the surface of a Cu(100), Ag(110), Si(001), SiC(001) and GaAs(001) solids, and of the accompanying effects, namely, scattering, sputtering and surface implantation. It has been shown that under these conditions the inelastic energy losses become predominant over the elastic ones. The anomalous energy losses observed experimentally at the grazing ion scattering by the single crystal surface were explained. It has been shown that from the correlation of the experimental and calculated energy distributions of the scattered particles, one may determine a spatial extension of the isolated atomic steps on the single crystal surface damaged by the ion bombardment. Results obtained can be also used to study short-range order in alloys undergoing ordering. Dissociative and non-dissociative desorption of adsorbed molecules were simulated. It was shown that at grazing ion bombardment the intensive non-dissociative desorption of adsorbed molecules is possible. A preferential emission of Cu atoms in the case of Cu_3Au (001) surface sputtering is observed. It was shown that in the case of grazing ion bombardment the layer-by-layer sputtering is possible and its optimum are observed within the small angle range of the glancing angles near the threshold sputtering angle. The obtained results allow to select the optimum conditions for obtaining implanted depth distributions with demanded shape in narrow near-surface region (5–10 atomic layers) of crystals. The highly sensitive layer-by-layer analysis method was proposed on the basis of layer-by-layer sputtering mechanism.

Keywords: grazing ion-surface interactions, ion scattering, elastic and inelastic energy losses, sputtering yield, layer-by-layer sputtering, surface implantation, surface channeling, grazing ion bombardment, layer-by-layer analysis of single crystal surface; computer simulation.