

## ФОКУСИРОВКА ИОННОГО ПУЧКА ПРИ МАССОПЕРЕНОСЕ С ОСТРИЯ

Л. Э. Барьюдин, В. Л. Булатов, Д. А. Тельнов

Рассмотрено влияние поляризации ионов в электрическом поле на траектории их движения при массопереносе с острия. Показано, что наличие у иона дипольного момента приводит к фокусировке пучка. Исследован характер зависимости степени фокусировки от формы острия, расстояния и разности потенциалов между острием и подложкой, а также материала иглы и типа ионов. Полученные результаты говорят о возможности использования эффекта фокусировки в установках для создания на поверхности структур молекулярных размеров, например в наноэлектронике.

### Введение

Размеры структур на поверхности, которые уже сейчас удается получать, составляют около 0.01 мкм [<sup>1, 2</sup>]. Наиболее перспективным представляется использование острийного источника частиц, расположенного вблизи поверхности. Такая возможность может быть реализована, например, использованием сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) [<sup>3, 4</sup>] в качестве инструмента для осаждения на поверхность подложки атомов (ионов) другого вещества. Например, в работе [<sup>5</sup>] при помощи СТМ наблюдалось появление атомов вольфрама на подложке германия после приложения к острию кратковременного импульса напряжения. При использовании СТМ в таком режиме возникает вопрос об оптимальном выборе формы острия и расстояния от острия до подложки с целью уменьшения размеров пятна попадания ионов. Для ответа на него необходимо рассчитать траектории движения десорбированных ионов.

Иногда предполагают (см., например, [<sup>6</sup>]), что заряженные частицы движутся вдоль силовых линий поля. Следует отметить, что это неверно даже для точечного заряда с массой, стремящейся к нулю. Кроме того, совершенно пренебрегается влиянием на траекторию иона его поляризации под действием внешнего поля. Вклад поляризационного члена в энергию иона, находящегося в электрическом поле с напряженностью  $F$ , пропорционален  $F^2$ . Так как величины реально используемых полей составляют порядка 0.01 а. е. (1 а. е. =  $51.4 \times 10^8$  В/м), то этот вклад действительно мал. Тем не менее траектория иона при учете его поляризуемости существенно меняется. Дишоль втягивается в область с более сильным полем, что приводит к появлению заметного фокусирующего эффекта. Расчету этого эффекта посвящена данная работа.

Если ион находится достаточно далеко от поверхности, то его можно рассматривать как совокупность точечного заряда и точечного диполя, наведенного полем. Тогда движение иона полностью определяется значением электростатического потенциала в точке расположения его ядра. В работе [<sup>7</sup>] было показано, что даже для ионов с высокой поляризуемостью, например для  $\text{Sc}^+$  и  $\text{Ti}^+$  (поляризуемости равны соответственно 78 и 64 а. е. [<sup>7</sup>]), такая модель вполне применима на расстояниях, превышающих 6 а. е. Тем более эта модель применима при расчете массопереноса, поскольку характерные расстояния составляют здесь десятки и сотни единиц. При таких расстояниях можно пренебречь также возмущением электронной плотности острия из-за взаимодействия с ионом. Будем считать, что вся потенциальная энергия иона электростатическая.

$$U(\mathbf{r}) = q\Phi(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}\alpha\{\nabla\Phi(\mathbf{r})\}^2, \quad (1)$$

где  $q$  — заряд иона,  $\alpha$  — его поляризуемость.

Потенциал  $\Phi(\mathbf{r})$  в (1) совпадает с электростатическим потенциалом системы игла+подложка в отсутствие иона. Таким образом, задача о расчете траекторий частиц между иглой и подложкой разбивается на две самостоятельные задачи: 1) расчет электростатического поля при заданной конфигурации электродов и 2) расчет траекторий частиц в заданном внешнем поле.

### Расчет электростатического потенциала системы игла+подложка

Классическая задача поиска электростатического потенциала  $\Phi(\mathbf{r})$  в пространстве, содержащем проводники с заданными потенциалами, сводится к решению задачи Дирихле для уравнения Лапласа [8]

$$\Delta\Phi = 0, \quad \Phi = \Phi_j \quad (\text{на границе } j\text{-го проводника}). \quad (2)$$

Введем конкретное расположение проводников в нашей задаче. Рассмотрим цилиндрическую систему координат  $(Z, \rho, \varphi)$  с осью  $Z$ , направленной вдоль оси острия. Поверхность подложки совместима с плоскостью  $Z=0$ . Тогда поверхность острия, обладающего осевой симметрией, будет описываться функцией  $Z=g(\rho)$ . Учитывая, что в случае осевой симметрии в расположении электродов электростатическое поле не зависит от азимутального угла, уравнение (2) можно переписать в виде

$$\Phi_{zz} + \Phi_{\rho\rho} + \frac{1}{\rho}\Phi_\rho = 0. \quad (3)$$

Уравнение (3) решается в области

$$0 \leq \rho \leq S; \quad 0 \leq Z \leq g(\rho) \quad (4)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \Phi(\rho, g(\rho)) &= \Phi_0 \quad (\text{поверхность острия}), \\ \Phi(\rho, 0) &= 0 \quad (\text{поверхность подложки}). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь  $S$  — диаметр цилиндра, внутри которого решается уравнение (3) (совпадает с диаметром иглы у основания). Аналитическое решение задачи (3) возможно лишь при некоторых модельных формах острия. В работе [9] острие аппроксимируется конусом. Недостатком такой модели является отсутствие закругления на вершине, наличие которого подтверждается экспериментально. Более удачным представляется моделирование острия гиперболоидом вращения [6]. Однако для заданной формы гиперболоида аналитическое решение существует лишь при фиксированном расстоянии между вершиной гиперболоида и подложкой, что сужает возможности модели [6].

Решить задачу для произвольной формы иглы можно с помощью ряда разработанных в математической физике численных методов. Мы выбрали сеточный метод [10] как наиболее простой и не предъявляющий больших требований к оперативной памяти ЭВМ.

В качестве модельной формы острия был выбран конус с углом раствора  $90^\circ$  и закругленной вершиной (рис. 1)

$$Z = g(\rho) = \begin{cases} H + \frac{\rho^2(3W - \rho)}{3W^2}, & \rho \leq W, \\ H - \frac{W}{3} + \rho, & \rho > W, \end{cases}$$

где  $H$  — расстояние от вершины острия до подложки,  $W$  — радиус закругления вершины.

Таким образом, геометрия системы электродов может быть описана тройкой чисел  $\{SHW\}$ . Для облегчения учета граничных условий (5) при расчете потенциала была сделана замена переменных  $(Z, \rho) \rightarrow (X, Y)$  по формулам

$$X = \rho, \quad Y = \frac{Z}{g(\rho)},$$

отображающая область (4) в прямоугольник.

В силу однородности уравнения (3) и граничных условий (5) можно выбрать произвольные единицы длины и потенциала. Пусть единица длины равна  $\lambda$ , а потенциала —  $\mu$ . Соответствующие масштабные преобразования имеют вид

$$x = \frac{X}{\lambda}, \quad z = \frac{Z}{\lambda}, \quad y = Y, \quad (6)$$

$$\varphi(r) = \frac{1}{\mu} \Phi(r), \quad (7)$$

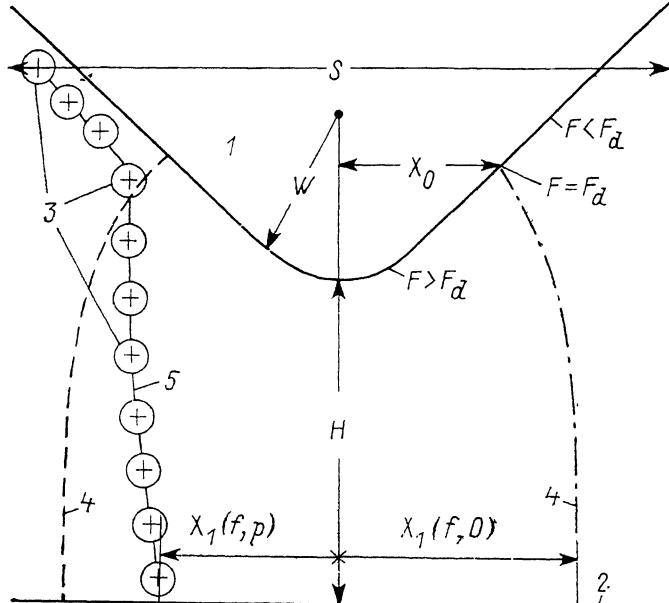


Рис. 1. Схема процесса массопереноса в рассматриваемой системе.

1 — игла, 2 — подложка, 3 — десорбируемые ионы, 4 — траектория ионов без учета их поляризации, 5 — траектория ионов с учетом поляризации.

причем  $\mu$  выбиралось так, что  $\varphi(r)=1$  на игле, т. е.  $\mu$  фактически равно приложеному напряжению. Геометрия системы электродов теперь задается тройкой  $\{shw\}$ , где

$$s = \frac{S}{\lambda}, \quad h = \frac{H}{\lambda}, \quad w = \frac{W}{\lambda}.$$

Отметим, что важны только относительные значения  $s, h$  и  $w$ .

### Расчет траекторий ионов во внешнем поле

Движение ионов в системе игла—подложка схематически показано на рис. 1. Предполагается, что вблизи основания иглы имеется резервуар ионов. Так как напряженность поля на поверхности иглы возрастает по направлению к острию, то ионы перемещаются в этом направлении (транспортируются). Ион десорбируется, когда его координата  $x$  достигнет значения  $x_0$ , определяемого из уравнения

$$F(x_0) = F_d. \quad (8)$$

Здесь  $F(x)$  — функциональная зависимость напряженности электрического поля на поверхности иглы от координаты  $x$ ,  $F_d$  — десорбирующее поле для данного материала иглы и данного типа ионов. Если на всей игле выполняется неравенство  $F(x) < F_d$ , то десорбция не происходит. В том случае когда десорбция возможна, в области  $x < x_0$  вокруг острия поле больше десорбирующего  $F(x) > F_d$ . Притока ионов в эту область нет, поэтому ионы десорбируются оттуда только в первоначальный момент времени. Следовательно, в установившемся режиме отрыв ионов от иглы происходит в узкой кольцевой области радиуса  $x_0$ . Эта качественная картина наблюдается экспериментально [11]. При заданных масштабах потенциала и длины ( $\mu$  и  $\lambda$ ) уравнение (8), определяющее  $x_0$ , можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\mu}{\lambda} \frac{1}{F_d} \left| \nabla \varphi \left( x_0, z = \frac{1}{\lambda} g(x_0) \right) \right| = 1.$$

Таким образом, точка отрыва ионов  $x_0$  (в единицах  $\lambda$ ) при данных  $\{shw\}$  определяется одним безразмерным параметром

$$f = \frac{\mu}{\lambda} (F_d)^{-1} \quad (9)$$

(отношение  $\mu/\lambda$  имеет размерность напряженности электрического поля).

Будем считать, что скорость иона в момент отрыва от иглы равна нулю. Траектория иона при таком предположении лежит в плоскости, проходящей через ось симметрии системы и точку вылета; положение иона в любой момент времени можно задать двумя декартовыми координатами  $x$  и  $z$ . Десорбируемые с иглы частицы достаточно массивны для того, чтобы их движение в промежутке между острием и подложкой можно было описывать в рамках классической механики. Движение иона с массой  $M$  во внешнем поле  $U(r)$  (1) определяется вторым законом Ньютона [12]. Совершая масштабные преобразования длины (6), потенциала (7), а также времени

$$(d\tau)^2 = \frac{(dt)^2 \mu q}{\lambda^2 M},$$

получаем

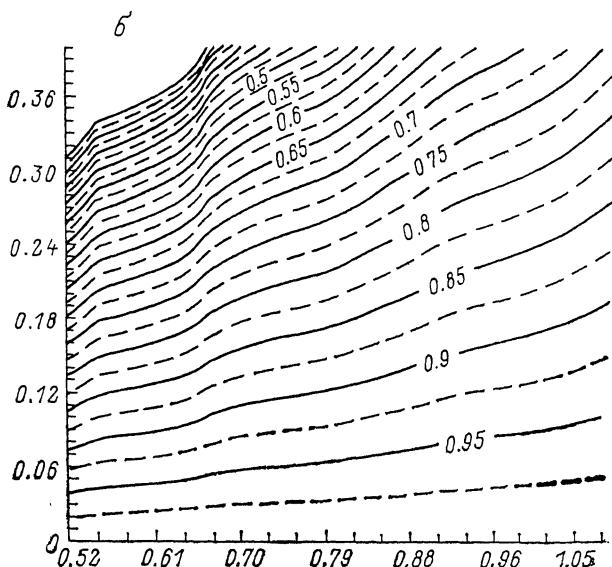
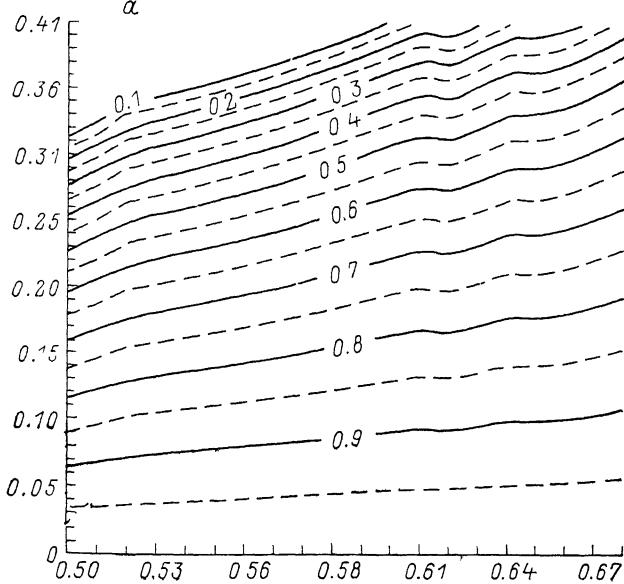
$$\begin{aligned} \frac{d^2 x}{d\tau^2} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \varphi - (1/2) \frac{\alpha}{q} \frac{\mu}{\lambda^2} (\nabla \varphi)^2 \right], \\ \frac{d^2 z}{d\tau^2} &= -\frac{\partial}{\partial z} \left[ \varphi - (1/2) \frac{\alpha}{q} \frac{\mu}{\lambda^2} (\nabla \varphi)^2 \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Из (10), в частности, видно, что траектория иона (при нулевой начальной скорости) не зависит от его массы. Начальное положение иона при заданных  $\{shw\}$  определяется величиной  $x_0$ , а последняя — параметром  $f$  (9). Другой безразмерной величиной, определяющей движение иона, согласно (10), будет

$$p = \frac{\alpha \mu}{q \lambda^2} = f \frac{\alpha F_d}{q \lambda^2}. \quad (11)$$

Величина  $L = (\alpha F_d)/q$  имеет размерность длины и может играть роль единицы измерения расстояний. Таким образом, если напряженность поля измерять в единицах  $F_d$ , а длину — в единицах  $L$ , то описание движения будет универсальным (не зависящим от типа иона и подложки, т. е. от величин  $\alpha$ ,  $q$  и  $F_d$ ).

Пусть ионы попадают на подложку на расстоянии  $x_1$  от оси симметрии;  $x_1$  зависит от параметров  $f$  (9) и  $p$  (11):  $x_1 = x_1(f, p)$ . Величину  $x_1$  естественно называть радиусом пятна попадания (в единицах  $\lambda$ ). Характеристикой фокусировки может служить отношение  $v(f, p) = x_1(f, p)/x_1(f, 0)$ , где  $x_1(f, 0)$ , очевидно, является радиусом пятна попадания в пренебрежении дипольной поляризацией ионов ( $\alpha=0$ ). Заданное значение  $v$  может быть достигнуто при различных сочетаниях масштабов  $\mu$  и  $\lambda$ . На рис. 2 приведены линии уровня  $v$  как функции  $\mu/\lambda$  (в единицах  $F_d$ ) и  $1/\lambda$  (в единицах  $1/L = q/(\alpha F_d)$ ) для систем электродов {111}, {211} и {311}. Двигаясь вдоль линии  $v=\text{const}$  и меняя тем самым соотно-



шение величин  $\mu$  и  $\lambda$ , можно подобрать технически приемлемые значения приложенного напряжения  $\mu$  и пространственного масштаба  $\lambda$ . В качестве примера рассмотрим ионы  $Ti^+$ , десорбируемые с вольфрамовой иглы (поляризуемость  $\alpha=78$  а. е. [7], десорбирующее поле при 77 К  $F_d \approx 3.7$  В/Å = 0.072 а. е. [13], заряд  $q=1$ ,  $L=\alpha F_d/q \approx 5.6$  а. е.). Из рис. 2, а (игла {111}) видно, что в области малых полей поляризуемость приводит к 30%-му уменьшению радиуса пятна попадания уже при  $\lambda \approx 40$  а. е. ( $\sim 20$  Å). Эта величина на порядок больше ионного радиуса титана, что свидетельствует о допустимости сделанных приближений.]

### Заключение

Рассмотренный в данной работе эффект фокусировки ионного пучка есть следствие поляризации иона во внешнем электрическом поле. Эффект тем сильнее, чем большее поляризуемость ионов и выше степень неоднородности электрического поля. Для увеличения степени неоднородности поля следует брат-

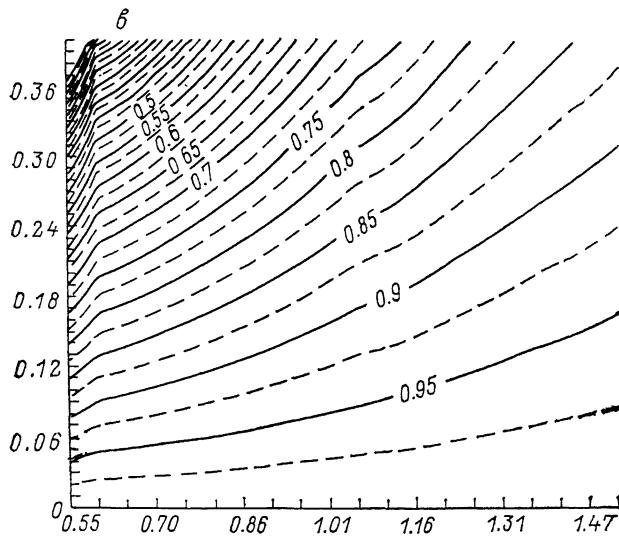


Рис. 2. Отношение радиуса пятна попадания ионов с учетом их поляризации к радиусу пятна попадания без учета поляризации как функция  $\mu/\lambda$  и  $1/\lambda$  для различных конфигураций электродов.  
 $a - \{111\}$ ,  $b - \{211\}$ ,  $c - \{311\}$ .

как можно более тонкие иглы. Такие острыйные источники могут быть созданы, например, методами термополевой обработки поверхности [14, 15].

Если  $\lambda$  достаточно велико, то сделанные предположения о характере движения иона несправедливы только в непосредственной близости от поверхности иглы, где, строго говоря, нужно рассматривать квантово-механическую задачу о взаимодействии иона с поверхностью. Но так как скорость движения иона на начальном участке траектории мала, а область расстояний, на которых существенно взаимодействие с поверхностью, тоже невелика ( $\sim 6$  а. е. для  $Ti^+$ ), то можно вообще исключить из рассмотрения этот участок. Разумеется, размеры оставшейся области должны быть достаточно велики, чтобы можно было говорить о траектории иона, который сам имеет размеры порядка нескольких атомных единиц.

Может оказаться, что конкретные значения параметров, необходимые для получения заданной фокусировки, оказываются на границе или даже за пределами применимости сделанных приближений (слишком сильное поле или слишком малые расстояния). Но даже в этом случае можно надеяться, что полученные в работе результаты качественно верны и позволяют оценить значения параметров системы, требуемые для достижения той или иной степени фокусировки.

Авторы выражают благодарность И. В. Абаренкову и Г. Г. Владимирову за обсуждение работы и полезные замечания.

#### Список литературы

- [1] Broers A. N. // Springer Proc. in Phys. 1986. Vol. 13. P. 2—14.
- [2] Goodhue W. D., Pang S. W., Johnson G. D. et al. // Appl. Phys. Lett. 1987. Vol. 51. N 21. P. 1726—1728.
- [3] Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E. // Appl. Phys. Lett. 1982. Vol. 40. N 2. P. 178—180.
- [4] Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E. // Phys. Rev. Lett. 1982. Vol. 49. N 1. P. 57—61.
- [5] Becker R. S., Golovchenko J. A., Swartzentruber B. S. // Nature. 1987. Vol. 325. N 6103. P. 419—421.
- [6] Russel A. M. // J. Appl. Phys. 1962. Vol. 33. N 3. P. 970—975.
- [7] Барьюдин Л. Э., Тельнов Д. А. // Вестн. ЛГУ. 1990. Сер. 4. № 25. С. 11—16.
- [8] Джексон Дж. Классическая электродинамика. М.: Мир, 1965. 702 с.
- [9] Ching M., Cutler P. H., Feuchtwang T. E., Miskovsky N. M. // J. de Phys. 1984. Vol. 45. Suppl. C9. P. 145—152.

- [10] Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 736 с.
- [11] Владимиров Г. Г. // ФТТ. 1968. Т. 10. Вып. 4. С. 1207—1213.
- [12] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Механика. М.: Наука, 1988. 125 с.
- [13] Владимиров Г. Г., Зубков А. С. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. Вып. 2. С. 147—150.
- [14] Павлов В. Г., Рабинович А. А., Шредник В. Н. // ФТТ. 1977. Т. 17. Вып. 7. С. 2045—2048.
- [15] Vlasov J. A., Golubev O. L., Shrednik V. N. // J. Phys. Colloq. (France). 1988. Vol. 49. N C6. P. 131—136.

С.-Петербургский университет

Поступило в Редакцию  
31 января 1991 г.

---