

Распыление карбидных пленок с поверхности металла ионами гелия

© В.В. Манухин

Национальный исследовательский университет „МЭИ“,
111250 Москва, Россия
e-mail: ManukhinVV@mpei.ru

Поступило в Редакцию 6 мая 2022 г.

В окончательной редакции 6 мая 2022 г.

Принято к публикации 25 июля 2022 г.

Исследована зависимость коэффициентов распыления легкими ионами поверхностных слоев титана и вольфрама, модифицированных углеродом, от толщины слоя. Теоретическое исследование проведено на основе модели распыления (ранее адаптированной для описания распыления двухкомпонентных мишеней и слоисто-неоднородных поверхностей), базирующейся на двух механизмах распыления, позволяющей проанализировать полученные зависимости. Теоретические расчеты полных коэффициентов распыления ионами гелия поверхностных слоев титана и вольфрама, модифицированных углеродом, приведены в сравнении с результатами компьютерного моделирования, полученными с помощью программы SRIM-2013pro.

Ключевые слова: модифицированная поверхность, карбид металла, легкие ионы, ионная бомбардировка, парциальный коэффициент распыления, слоисто-неоднородные поверхности.

DOI: 10.21883/JTF.2022.11.53448.48-22

Введение

Все более широкое использование материалов с модифицированным углеродом поверхностным слоем, в том числе в конструкциях плазменных установок, ставит задачу о взаимодействии потоков заряженных частиц с такими поверхностями. В частности, появляется проблема теоретического описания распыления подобных неоднородных поверхностей легкими ионами. Часто используемые для расчетов коэффициентов распыления однородных материалов теории распыления [1–3], позволяющие получить достаточно точные результаты, не могут быть применены к случаю распыления слоистых структур. Некоторое время назад была предложена модель распыления мишеней легкими ионами, основанная на методе, изложенном в работе Чандрасекара [4]. Согласно этой модели, распыление может быть представлено как результат действия как восходящего, так и нисходящего потоков ионов, которые можно выделить внутри бомбардируемой мишени. Использование модели, основанной на двух механизмах распыления, позволило достаточно точно описать распыление не только однородных однокомпонентных материалов, но и двухкомпонентных однородных материалов и слоистых мишеней [5]. Применение модели, основанной на двух механизмах распыления, позволяет не только корректно описать распыление различных конструкционных материалов, но объяснить эффекты, которые при этом могут наблюдаться [6]. В настоящей работе эта модель адаптирована для случая распыления поверхностных модифицированных углеродом слоев титана и вольфрама ионами гелия.

1. Теоретическая модель

Для теоретического описания распыления поверхности титана или вольфрама, модифицированной углеродом, под действием бомбардировки легкими ионами гелия использована модель слоистой неоднородной мишени с резкой границей раздела. Согласно этой модели, на однородной титановой (или вольфрамовой) подложке большой толщины располагается однородный слой карбида титана TiC (или соответственно карбида вольфрама WC) (M_1 — масса атома титана (вольфрама), M_2 — масса атома углерода) толщиной x_0 . Бомбардировка мишени осуществляется широким пучком легких ионов гелия с массой M_0 и с энергией E_0 , направленным под углом θ_0 на мишень (угол отсчитывается от внутренней нормали к поверхности). Для исключения учета возможного изменения компонентного состава мишени в процессе распыления, будем считать, что доза облучения мала.

В основе модели распыления пленок карбида титана (вольфрама) с поверхности титана (вольфрама) ионами гелия, лежит утверждение, что в мишени на глубине x можно выделить два потока ионов: один направлен в основном внутрь мишени, другой, в результате рассеяния ионов на атомах, направлен к поверхности. Следуя методу, изложенному в [4], в результате столкновений ионов нисходящего и восходящего потоков с атомами мишени, на глубине x можно выделить два потока первично выбитых атомов: один направлен в основном вглубь мишени, другой — к поверхности. Вследствие этого предполагается, что распыление каждого компонента слоя может быть представлено как последовательность процессов, инициированных восходящим и нисходящим потоками

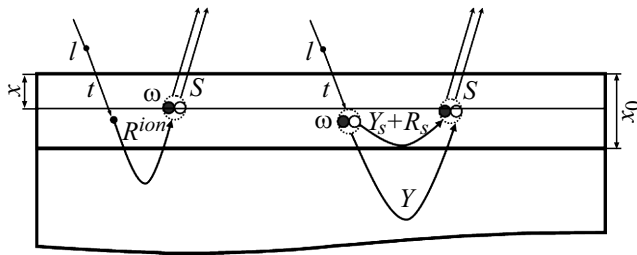


Рис. 1. Графическое изображение процессов, приводящих к распылению мишени с модифицированным углеродом слоем на поверхности.

ионов независимо (два механизма распыления). В этом подходе не предполагается совместное решение интегральных уравнений, описывающих отдельно потоки ионов и выбитых атомов, а записывается интегральное выражение, в которое входят функции, описывающие как поток ионов, так и поток атомов, значения которых определяются независимыми методами. Таким образом, распыление слоистых двухкомпонентных материалов легкими ионами описывается двумя механизмами. Графическое изображение последовательности процессов, приводящих к распылению i -го компонента верхнего слоя мишени, представлено на рис. 1.

На левой части рис. 1 представлены процессы, приводящие к распылению i -го компонента верхнего слоя мишени в результате столкновений восходящего потока ионов с атомами слоя карбида титана (вольфрама):

- восходящий поток ионов на глубине x представляет собой результат прохождения ионов через слой карбида металла толщиной x (описывается с помощью дифференциальной функции пропускания t ионов слоем мишени толщиной x [7]) и отражения потока ионов от нижележащих слоев мишени (определяется посредством дифференциальной функции отражения ионов R_{ion} от слоисто-неоднородной мишени с толщиной слоя неоднородности $x_0 - x$ [8]);

- при столкновении ионов восходящего потока с атомами происходит выбивание из двухкомпонентного слоя неоднородности первичного атома отдачи с эффективным зарядом Z_{eff} (описывается с помощью сечения передачи энергии ω от движущегося иона к неподвижному атому [1]);

- вылет атомов с поверхности мишени определяется эмиссией выбитых атомов бинарного слоя неоднородности, движущихся с глубины x к поверхности, которая рассматривается в рамках модели [9] с использованием дифференциальной функции S_i прямого (на прострел) самораспыления слоя материала компонента i .

На правой части рис. 1 представлены процессы, приводящие к распылению i -го компонента верхнего слоя мишени в результате столкновений нисходящего потока ионов с атомами слоя карбида металла:

- в данном механизме нисходящий поток ионов, т.е. поток ионов, прошедших через слой карбида металла

толщиной x , выбивает из двухкомпонентного слоя неоднородности первичные атомы отдачи с эффективным зарядом Z_{eff} по направлению вглубь мишени;

- далее выбитые атомы компонентов двухкомпонентного слоя неоднородности могут отразиться от нижележащих слоев мишени (описывается дифференциальной функцией самоотражения атомов слоя мишени R_s) или участвовать в распылении нижележащих атомов мишени (включая атомы подложки), что определяется с помощью дифференциальной функции обратного самораспыления слоя Y_s [9] и дифференциальной функцией распыления материала подложки Y ;

- вылет атомов с поверхности мишени рассматривается как эмиссия первичных и вторичных выбитых атомов, движущихся с глубины x к поверхности.

При описании эмиссии атомов с поверхности карбида металла (двухкомпонентного материала) учитывается, что покинуть поверхность мишени могут только атомы с энергией, большей, чем энергия поверхностной связи атомов i -го компонента в соединении U_i (модель плоского поверхностного потенциального барьера), которая рассчитывается по формуле [2]:

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

где U_{0i} — энергия связи атомов i -го компонента в однокомпонентном материале, c_i — относительная концентрация i -го компонента в соединении.

На основе предлагаемой модели с учетом ряда приближений [5] получена аналитическая формула, позволяющая рассчитать парциальные коэффициенты распыления i -го компонента слоя карбида металла легкими ионами:

$$Y_i(E_0, \theta_0, x_0) = \frac{1}{8C_0 U_i} \frac{1}{1+p} \left[\frac{\gamma_i}{\gamma_0} \right]^{1-m} \times \left\{ R_{N}^{ion}(E', \theta, x_0) S_n(E^*(E')) \times \left[1 - \left(\frac{U_i}{\gamma_i E^*(E')} \right)^{1-m} \right] + S_n(E') \psi \left(\frac{E_{th}^s}{\gamma_i E'}, \theta_0 \right) \times (1 + \delta_{1i} 3E_3(C_0 N x_0)) \right\} \cdot [1 - 4E_4(C_0 N x_0)]. \quad (2)$$

Здесь C_0 — константа в степенном сечении рассеяния ($C_0 = 1.808089 \text{ \AA}^2$); $E_n(C_0 N x_0)$ — интегральная экспонента степени n ; E' — средняя энергия ионов в слое неоднородности, рассчитываемая по формуле

$$E' = E_0 \left(1 - 3 / (4C_0 N (1 + p) R_0 \cos \theta_0) \right),$$

δ_{li} — символ Кронекера; N — концентрация атомов в слое; p — безразмерная величина, зависящая от полного R_0 , проективного R_p и транспортного l_{tr} пробегов ионов в материале:

$$p = 2C_0 R_0 R_p \cos \theta_0 / 3l_{tr},$$

γ_0 — кинематический фактор при столкновении ионом с Z_{eff} ; $R_N^{\text{ion}}(E_0, \theta_0, x_0)$, $R_E^{\text{ion}}(E_0, \theta_0, x_0)$ — полные коэффициенты отражения ионов и энергии ионов от слоистой мишени; S_n — сечение ядерного торможения ионов [1]; E^* — средняя энергия ионов, отраженных от слоистой мишени:

$$E^* = E_0 \cdot (R_E^{\text{ion}}(E_0, \theta_0, x_0) / (R_N^{\text{ion}}(E_0, \theta_0, x_0)),$$

E_{th}^S — пороговая энергия самораспыления [10]; m — показатель в степенном приближении сечения ядерного торможения. Показатель степени рассчитывается по ранее апробированной аппроксимационной формуле (для средних энергий ионов) в зависимости от энергии налетающего иона (в единицах приведенной энергии Лидхарда ε [1]):

$$m(\varepsilon) = 1 - \exp(-0.9\varepsilon^{0.22});$$

ψ — функция, определяющая самораспыление атомов, которая аппроксимируется выражением [5]:

$$\psi(y) = 0.18694[1 - y^{2/3}] \cdot [1 - y]^2,$$

$$\psi(y, \theta_0) = \psi(y, 1) + (1 - \psi(y, 1))(1 - \cos \theta_0)^{1.5}.$$

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

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

Результаты расчетов полных коэффициентов распыления ионами гелия слоев карбида титана и вольфрама различной толщины поверхности соответствующего металла представлены на рис. 2 и 3.

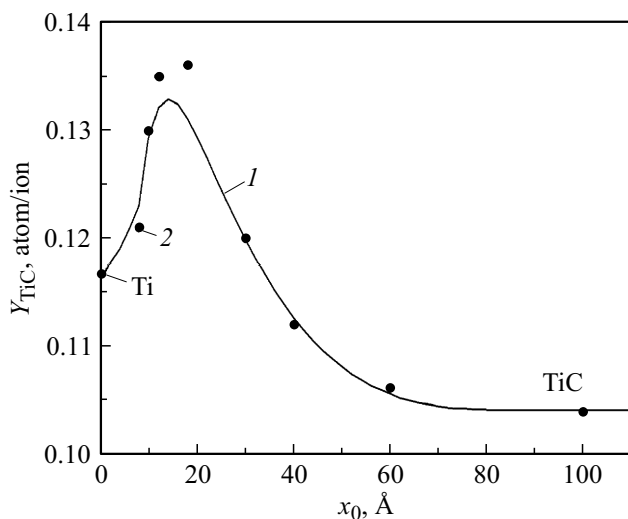


Рис. 2. Результаты расчетов коэффициентов распыления слоя TiC с поверхности Ti ионами гелия в зависимости от толщины слоя TiC: 1 — расчет по формуле, 2 — результаты компьютерного моделирования SRIM-2013pro.

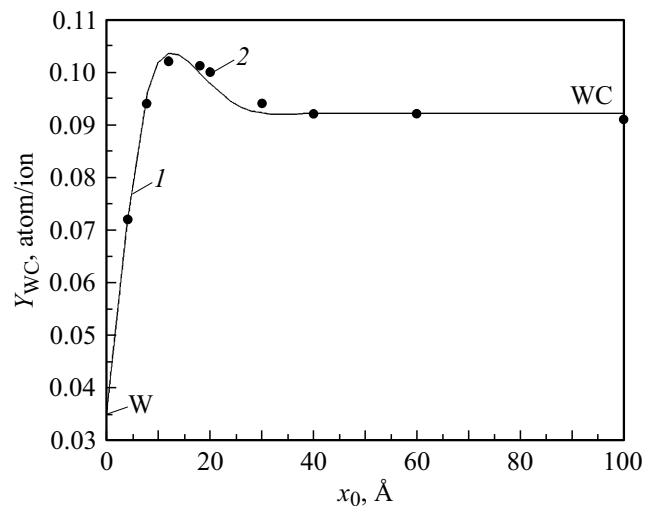


Рис. 3. Результаты расчетов коэффициентов распыления слоя WC с поверхности W ионами гелия в зависимости от толщины слоя WC: 1 — расчет по формуле, 2 — результаты компьютерного моделирования SRIM-2013pro.

2. Результаты расчетов

Исследование зависимости полных коэффициентов распыления от толщины слоя модифицированного углеродом титана и вольфрама с поверхности соответствующего металла ионами гелия проводилось на основе вышеописанной модели. Необходимо отметить, что ранее эта модель [5] и ее упрощенная версия [6] применялись для анализа распыления слоисто-неоднородных однокомпонентных материалов. Эти исследования показали, что при распылении легких слоев неоднородности с поверхности тяжелой подложки наблюдается эффект зеркала — существенного увеличения коэффициента распыления материала слоя при определенной толщине по сравнению с коэффициентом распыления однородной мишени из материала слоя [6].

На рис. 2 результаты расчета коэффициентов распыления слоев TiC с поверхности чистого титана ионами гелия (He^+) в зависимости от толщины слоя карбида титана (нормальное падение ионов с энергией 1 keV) приведены в сравнении с результатами компьютерного моделирования с помощью программы SRIM-2013pro (<http://www.srim.org/>). Имеется хорошее согласие между расчетными значениями и результатами компьютерного моделирования. Следует отметить, что наблюдается существенное увеличение коэффициента распыления при определенной толщине слоя по сравнению с коэффициентом распыления однородной двухкомпонентной мишени, как и в случае распыления слоисто-неоднородных однокомпонентных материалов [5].

Результаты расчета коэффициентов распыления слоев WC с поверхности чистого вольфрама ионами гелия (He^+) в зависимости от толщины слоя карбида вольфрама (нормальное падение ионов с энергией 1 keV)

представлены на рис. 3 в сравнении с результатами компьютерного моделирования с помощью программы SRIM-2013pro (<http://www.srim.org/>).

Анализ представленных результатов показывает, что при толщине модифицированного углеродом слоя металла в 10–20 Å наблюдается существенное увеличение коэффициента распыления слоя по сравнению с коэффициентом распыления толстой мишени из карбида металла. Этот эффект наблюдается как в случае распыления модифицированной углеродом поверхности титана, так и в случае распыления модифицированной углеродом поверхности вольфрама.

Существование максимума на зависимости коэффициента распыления слоя неоднородности от толщины слоя может быть объяснено в рамках используемой модели распыления. С одной стороны, оба механизма распыления указывают на рост среднего числа выбитых атомов слоя с увеличением толщины слоя (за счет увеличения числа атомов, с которыми может произойти столкновение иона и последующие вторичные столкновения атомов) до значения в несколько средних глубины образования распыленного атома [11]. С другой стороны, восходящий поток ионов определяется коэффициентом отражения ионов от слоистой структуры и, в нашем случае (слой легкого материала на тяжелом), он уменьшается с толщиной слоя [8]. Таким образом, в механизме распыления восходящим потоком ионов действуют два противоположно направленных фактора, которые определяют наличие максимума на зависимости коэффициента распыления от толщины слоя.

Заключение

Отмеченный выше „эффект зеркала“ [6] при распылении пленок карбида металла определенной толщины с поверхности металла связан с тем, что эффективная масса верхнего распыляемого слоя меньше массы атомов однородной подложки. Поэтому восходящий поток ионов в слоистой мишени больше, чем в мишени, состоящей из материала слоя. Как следствие этого — коэффициент распыления оказывается тоже больше. Также можно заметить, что при стремлении толщины слоя карбидного соединения к нулю коэффициент распыления определяется значением коэффициента распыления материала подложки. При достаточно толстых слоях карбида металла коэффициент распыления определяется значением коэффициента распыления мишени, состоящей только из карбида металла.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] R. Behrisch. *Sputtering by Particle Bombardment I: Physical Sputtering of Single-Element Solids* (Springer, NY., 1981)
- [2] R. Behrisch. *Sputtering by Particle Bombardment II: Sputtering of Alloys and Compounds, Electron and Neutron Sputtering, Surface Topography* (Springer, NY., 1983)
- [3] G. Falcone. *La Rivista del Nuovo Cimento*, **13** (1), 1 (1990).
- [4] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer* (Oxford, Clarendon Press, 1950)
- [5] В.В. Манухин. *Прикладная физика*, **5**, 5 (2016).
- [6] М.К. Абесаломов, В.П. Афанасьев, В.В. Манухин, С.Д. Федорович. *Тезисы докладов XIX Всесоюзного совещания по физике взаимодействия частиц с кристаллами*, под ред. проф. А.Ф. Тулинова. (Изд-во МГУ, М., 1989), с. 188.
- [7] В.С. Ремизович, Д.В. Рогозкин, М.И. Рязанов. *Флуктуации пробега заряженных частиц* (Энергоатомиздат, М., 1988)
- [8] V.P. Afanasev, D. Naujoks, *Z. Phys. B*, **84**, 397 (1991).
- [9] В.В. Манухин. *ЖТФ*, **77** (8), 6 (2007). [*V.V. Manukhin. Tech. Phys.*, **52** (8), 968 (2007).]
- [10] N. Matsunami, Y. Yamamura, Y. Itikawa. *Atomic Data Nuclear Data Tables.*, **31**, 1 (1984).
- [11] P. Sigmund. *Phys. Rev.*, **184** (2), 303 (1969).