

Пороговое поведение шероховатости поверхности монокристаллического кремния при распылении ионами криптона

© М.С. Михайленко, А.Е. Пестов, М.В. Зорина, И.Д. Оськин, А.И. Артюхов, А.А. Назаров, П.А. Юнин, Н.И. Чхало

Институт физики микроструктур РАН,
607680 Нижний Новгород, Россия
e-mail: mikhaylenko@ipmras.ru

Поступило в Редакцию 5 июня 2026 г.

В окончательно редакции 5 июня 2026 г.

Принято к публикации 5 июня 2026 г.

Проведено исследование распыления монокристаллического Si (001), (110) и (111) ускоренными ионами Kr с энергией 200–1000 eV при нормальном падении. Получены зависимости коэффициента распыления и эффективной шероховатости (10^{-2} – $63.5 \mu\text{m}^{-1}$) от энергии налетающих ионов. Обнаружено пороговое поведение шероховатости поверхности для ориентаций (001) и (110). С привлечением модели Ондерделина и моделирования методом молекулярной динамики показано, что критическая концентрация дефектов составляет $\sim 1.7\%$ – 2.0% атомной плотности, а традиционный критерий $dpa = 0.1$ неприменим, так как аморфизация реализуется при значениях на 1–2 порядка ниже.

Ключевые слова: монокристаллический кремний, ионное травление, распыление, шероховатость, аморфизация.

DOI: 10.61011/JTF.2026.10.63621.207-26

Введение

На протяжении более чем шести десятилетий монокристаллический кремний (Si) остается одним из наиболее востребованных материалов в различных областях науки и техники. Уникальное сочетание его физико-химических свойств, а также высокий уровень развития технологии получения бездефектных кристаллов большого диаметра с низкой плотностью дислокаций и контролируемым содержанием примесей предопределили его доминирующее положение в микроэлектронике, фотоэнергетике и в последние годы в рентгеновской оптике. Анализ наукометрических баз данных (Web of Science, Scopus) демонстрирует устойчивый интерес к этому материалу: общее количество публикаций, в аннотации или названии которых фигурирует „монокристаллический кремний“, превышает 4.5 миллиона, что свидетельствует о фундаментальной значимости и непрерывном развитии методов его исследования и применения. Развита технология получения бездефектных монокристаллов высокой чистоты из кремния определила выбор материала для подложек многослойных рентгеновских зеркал. Одной из важнейших характеристик поверхности оптического элемента для современных источников синхротронного излучения является угловая расходимость, которая должна быть на уровне 10^{-6} rad. При переходе в область коротковолнового излучения $\lambda \in [0.1–100 \text{ nm}]$, где основным элементом являются многослойные рентгеновские зеркала (МРЗ), одного параметра среднеквадратического отклонения (СКО, RMS) оказывается недостаточно, так как важно учитывать вклад ошибок формы с разными латеральными размерами. В таком

случае переходят на язык PSD-функций (Power Spatial Density — спектральная плотность мощности), а саму поверхность раскладывают в спектр по пространственным частотам. Весь диапазон пространственных частот 10^{-6} – $10^2 \mu\text{m}^{-1}$ условно можно разделить на три поддиапазона, каждый из которых оказывает специфическое воздействие на качество изображения. Ошибки формы с латеральным размером более одного миллиметра приводят к абберационным искажениям изображения. В то же время ошибки формы с латеральными размерами менее одного миллиметра, но более $10 \mu\text{m}$, принято называть среднечастотной шероховатостью. Эти ошибки влияют на рассеяние излучения на малые углы, и как следствие, приводят к размытию изображения. Ошибки формы с латеральными размерами менее $10 \mu\text{m}$ называют высокочастотной шероховатостью. Ошибки в данном поддиапазоне влияют на коэффициенты отражения МРЗ. В предельном случае СКО и есть то значение, в которое входит вклад ошибок формы всех размеров:

$$\text{RMS} = \lim_{\nu_{\text{max}} \rightarrow \infty} \left(\iint_0^{\nu_{\text{max}}} \text{PSD}_{2D}(\nu_x, \nu_y) d\nu_x d\nu_y \right)^2. \quad (1)$$

Для того чтобы разделить вклад ошибок, необходимо проводить измерения поверхности в разных масштабах, используя, например, методы сканирующей зондовой микроскопии и интерферометрии. Требования на точность формы и шероховатость поверхности современных рентгенооптических элементов лежат в области 1 nm по параметру СКО и менее 0.2 nm по параметру эффективной шероховатости в диапазоне пространственных частот 10^{-3} – $10^2 \mu\text{m}^{-1}$. На данный момент для

удовлетворения таким требованиям применяется технология ионно-пучкового травления [1–4] ввиду высокой степени контролируемости процесса и возможности проводить удаление материала на глубину менее 1 nm. В основе технологии ионного травления лежит эффект физического распыления. Значение энергии налетающей частицы и ее массы определяет тип взаимодействия: одиночные столкновения, линейные каскады соударений и режим тепловых пиков. При энергиях ионов ниже 200 eV значения коэффициентов распыления минимальны, так как порог распыления большинства материалов лежит в области 100 eV [5]. При энергиях выше 10 keV имплантация ионов происходит на большие глубины в объеме вещества, что приводит к тому, что переданная энергия рассеивается в объеме и не доходит до атомов поверхности, что приводит к падению величины коэффициента распыления, значение которого важно при проведении процедуры коррекции [6]. На практике для коррекции формы поверхности оптических элементов методом ионно-пучкового травления применяются ионы инертных газов с энергией в диапазоне 200–1500 eV.

Несмотря на многолетнюю историю изучения взаимодействия ускоренных ионов с кремнием, большинство работ сосредоточено на сравнительно узком диапазоне энергий (энергии вблизи порога распыления 10–100 eV, либо от 10 keV), либо на использовании наиболее распространенных ионов аргона [7–9]. В то же время выбор рабочего газа определяет не только скорость удаления материала, но и характер эволюции поверхности. Криптон, обладая промежуточной атомной массой между аргоном и ксеноном, позволяет реализовать режимы распыления с повышенной эффективностью при сохранении контролируемости процесса на наноуровне. Систематические данные о поведении шероховатости монокристаллического кремния при облучении ионами криптона в широком диапазоне энергий, особенно в области перехода от кристаллографически-избирательного распыления к аморфизации, остаются ограниченными. Заполнение этого пробела необходимо как для фундаментального понимания физики ионно-стимулированной эволюции шероховатости поверхности, так и для оптимизации технологических режимов изготовления прецизионных рентгенооптических элементов.

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование энергетических зависимостей коэффициентов распыления и величины эффективной шероховатости поверхности монокристаллического кремния с кристаллографическими ориентациями (001), (110) и (111) при нормальном падении ускоренных ионов криптона в диапазоне энергий 200–1000 eV. Особое внимание уделено выявлению пороговых эффектов, связанных с переходом от кристаллографически-избирательного механизма распыления к режиму ионно-индуцированной аморфизации приповерхностного слоя, впервые обнаруженном в работе [10], а также оценке достижимого уровня шероховатости в спектральном диапазоне

пространственных частот, значимом для рентгеновской оптики.

1. Методика эксперимента

В ходе работы исследовалось влияние бомбардировки ионами криптона с различной энергией на морфологию поверхности монокристаллического кремния. В качестве образцов использовались подложки для микроэлектронной промышленности КДБ-7.5, нарезанные на лазерном станке размерами 15×15 mm из монокристаллического кремния трех кристаллографических ориентаций: (001), (110) и (111).

1.1. Описание процесса травления и установки

Эксперименты проводились на установке ионно-пучкового травления с использованием технологического источника ускоренных ионов КЛАН-103М (НТО „Платар“, Россия). Образец закреплялся на держателе аким образом, чтобы пучок ионов падал строго перпендикулярно его поверхности. Для последующего определения глубины травления использовался метод „свидетеля“ — часть поверхности образца из того же материала закрывалась литографической маской. После достижения рабочего давления газа $1.3 \cdot 10^{-2}$ Pa в камере задавались требуемая плотность ионного тока (j) и ускоряющее напряжение (U_{Accel}), которое определяло энергию ионов в диапазоне от 200 до 1000 eV.

После завершения процесса облучения проводились два основных вида измерений. Глубина травления определялась с помощью интерферометрического микроскопа белого света SuperView W1 путем измерения высоты ступеньки на границе замаскированной области. А эффективная шероховатость в диапазоне $\lambda \in [10^{-2} - 63.5] \mu\text{m}^{-1}$ измерялась с помощью сканирующей зондовой микроскопии на атомно-силовом микроскопе Ntegra NT-NDT (Россия) по методике, описанной в [11]. Для этого сканировались участки размером от 2×2 до $40 \times 40 \mu\text{m}$. Значение эффективной шероховатости определялось путем интегрирования функции спектральной плотности мощности (PSD-функции), как описано в работе [11].

Во всех экспериментах глубина травления поддерживалась на уровне не менее $1 \mu\text{m}$ за счет изменения времени экспозиции. Такой подход был выбран по двум причинам: во-первых, для аморфных материалов при сьеме слоя более $1 \mu\text{m}$ шероховатость, как правило, выходит на насыщение [12]; во-вторых, именно такой объем материала удаляется при типичных операциях коррекции формы. На основе измеренной глубины и времени травления рассчитывалась скорость травления V_{Etch} . Коэффициент распыления (Y) вычислялся по формуле

$$Y = \frac{\rho e V_{Etch} N_A}{\cos \Theta_{Inc} j M}, \quad (2)$$

где ρ — плотность кремния, N_A — число Авогадро, Θ_{Inc} — угол падения ионов (в нашем случае 0°), j — плотность ионного тока, M — молярная масса мишени.

Плотность ионного тока контролировалась с помощью измерительного электрода, расположенного вблизи держателя образца, и поддерживалась постоянной в пределах $0.25\text{--}0.35\text{ мА/см}^2$ для всех режимов. Варьирование энергии ионов осуществлялось изменением ускоряющего напряжения в диапазоне $200\text{--}1000\text{ В}$ при неизменном напряжении на катоде источника.

1.2. Оценка радиационных повреждений и порога аморфизации

Для количественной интерпретации порогового поведения шероховатости проведен расчет накопленных радиационных повреждений в приповерхностном слое кремния согласно доработанной модели Кинчина–Пиза [13,14]. Основной характеристикой повреждений является количество смещений на атом (displacements per atom, dpa), которое определяет степень нарушения кристаллической структуры. Связь между дозой облучения Φ [ion/cm²] и накопленной dpa выражается соотношением

$$dpa = \frac{N_d \Phi}{n}, \quad (3)$$

где N_d — среднее количество смещенных атомов на один падающий ион, $n = 5 \cdot 10^{22}\text{ atom/cm}^3$ — атомная плотность кремния. Величина N_d была определена на основе данных из моделирования, полученных с помощью пакета SRIM-2013 [15] в режиме детального расчета каскадов столкновений („Detailed Calculation with Full Damage Cascades“). Для каждого сочетания ион/энергия были рассчитаны профили вакансий и определены средние значения N_d .

1.3. Рентгеновская рефлектометрия XRR ($\lambda = 0.154\text{ нм}$)

Для определения толщины нарушенного слоя использовалась рентгеновская рефлектометрия на длине волны $\lambda = 0.154\text{ нм}$ на рентгеновском дифрактометре Bruker D8 Discover.

1.4. Молекулярно-динамическое моделирование (МД)

Моделирование проводилось методом классической молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS. Расчетная ячейка представляла собой кристалл кремния с размерами $15 \times 15 \times 20\text{ нм}$, вдоль направления полета ионов (в направлении Z) формировалась свободная поверхность, тогда как в латеральном направлении (X, Y) задавались периодические граничные условия. Для описания ковалентного взаимодействия Si–Si применялся потенциал Стиллинджера–Вебера [16] с модифицированной отталкивательной частью, плавно

сшитой с универсальным потенциалом ZBL [17] при $r < 1.5\text{ Å}$. Сшивка потенциалов осуществлялась посредством функции Ферми, что обеспечивало плавный переход к отталкивающей части. Взаимодействие Kr–Kr задавалось стандартным потенциалом Леннарда–Джонса, а для описания взаимодействия Kr–Si использовался комбинированный потенциал ZBL, который сшивался с помощью экспоненциального сплайна с функцией Леннарда–Джонса для корректного учета взаимодействия на средних и больших дистанциях. В каждом расчете для набора статистики использовалось не менее 1000 ускоренных ионов криптона. Для количественной оценки радиационных повреждений и подсчета концентрации вакансий применялся метод ячеек Вороного. Данный подход позволил идентифицировать узлы кристаллической решетки, не занятые атомами кремния.

2. Результаты и обсуждение

2.1. Зависимости коэффициентов распыления и шероховатости от энергии ионов

В ходе экспериментальных исследований распыления монокристаллического кремния различных кристаллографических ориентаций под действием ускоренных ионов криптона в интервале энергий $200\text{--}1000\text{ эВ}$ были установлены энергетические зависимости коэффициента распыления и эффективной шероховатости поверхности (рис. 1, а). В окрестности энергии ионов 700 эВ наблюдается перегиб энергетической зависимости коэффициента распыления, который обусловлен сменой механизма взаимодействия ионов с поверхностью. При повышении энергии налетающих частиц доминирующий процесс переходит от режима одиночных соударений к развитым каскадам столкновений. Это приводит к увеличению числа атомов отдачи, способных достичь приповерхностной области. Поскольку энергия связи атомов на поверхности ниже, чем в объеме материала, их эмиссия становится более вероятной, что способствует росту коэффициента распыления. Дальнейшее повышение энергии ионов сопровождается увеличением глубины их проникновения в толщу материала, вследствие чего переданная энергия рассеивается в объеме и не участвует в процессе эмиссии поверхностных атомов, что обуславливает снижение эффективности распыления и, как видно из полученной зависимости, при значении энергии ионов 1 кеВ коэффициент распыления начинает выходить на насыщение.

Как видно из рис. 1, б, вблизи энергии ионов 700 эВ , также наблюдается изменение характера зависимости среднеквадратической шероховатости от энергии, которая меняет свое поведение пороговым образом. При энергии ионов ниже пороговой шероховатость существенно увеличивается, а при энергии ионов выше пороговой, наоборот, наблюдается сглаживание шероховатости. Таким образом, в настоящей работе наблюдается схожее пороговое поведение (рис. 1, б) энергетиче-

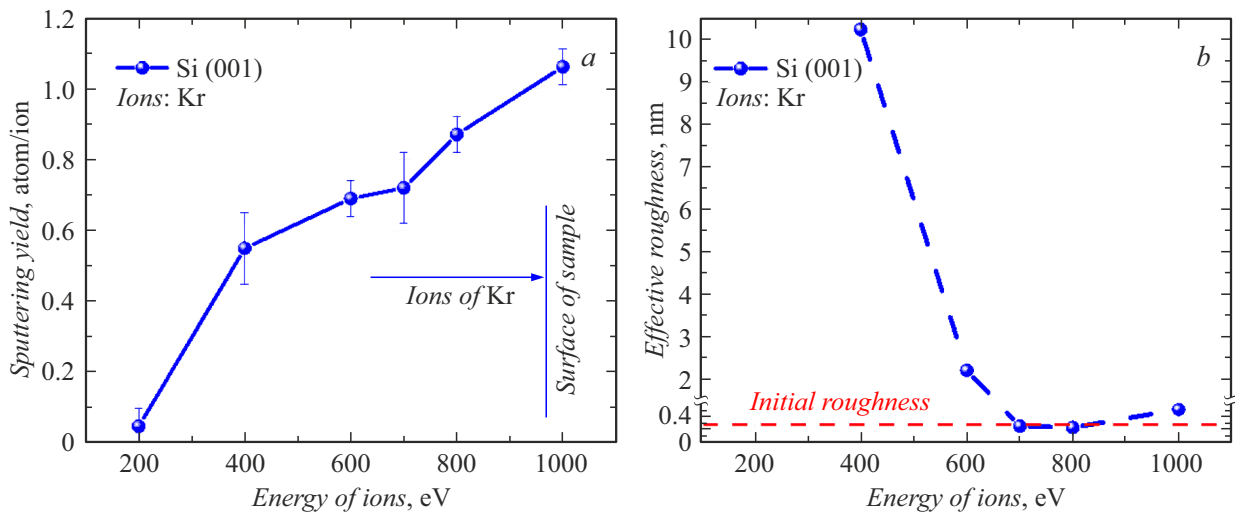


Рис. 1. Экспериментально полученная зависимость: *a* — коэффициента распыления монокристаллического кремния (001), *b* — эффективной шероховатости (в диапазоне пространственных частот 10^{-2} – $63.5 \mu\text{m}^{-1}$) от энергии ионов криптона при нормальном падении.

ческой зависимости шероховатости поверхности монокристаллического кремния при облучении ускоренными ионами Kr, как и в работах [10,18] с использованием других инертных газов (Ar, Xe), однако на криптоне при нормальном падении удалось увидеть наибольший сглаживающий эффект — до значений 0.14 nm в диапазоне пространственных частот 10^{-2} – $63.5 \mu\text{m}^{-1}$, а в диапазоне 0.5 – $63.5 \mu\text{m}^{-1}$, который отвечает за коэффициент отражения многослойных рентгеновских зеркал, это значение составляет 0.12 nm . Если учесть вклад шумов, вызванных температурными флуктуациями и вибрациями элементов стенда, потоками и Броуновским движением молекул воздуха, согласно выражению, где σ_n — вклад шумов, а σ_{sur} — истинная шероховатость поверхности:

$$\sigma_{\text{eff}}^2 = \sigma_{\text{sur}}^2 + \sigma_n^2. \quad (4)$$

Получается, что в диапазоне пространственных частот 10^{-2} – $63.5 \mu\text{m}^{-1}$ шероховатость 0.1 nm .

На рис. 2 приведены кадры АСМ и восстановленная PSD-функция для образцов, облученных ускоренными ионами криптона с энергией 1 keV , а на рис. 3 — для образцов, подвергшихся облучению с энергией 400 eV .

Из рис. 3, с видно, что поверхность настолько развита, что функция спектральной плотности мощности, восстановленная по кадрам 2×2 , 10×10 и $40 \times 40 \mu\text{m}$, не перекрывается из-за сильно развитого рельефа поверхности. Такое поведение типично для кристаллографически-избирательного травления, при котором на поверхности формируются структуры с характерными латеральными размерами, превышающими поле зрения малых сканов. В противоположность этому, для энергии 800 eV (рис. 2, с) наблюдается хорошее перекрытие PSD-функций в широком диапазоне пространственных частот, что свидетельствует о статистически однородном изотропном рельефе, характерном для аморфизованного

приповерхностного слоя. Переход от неизотропного к изотропному рельефу происходит в том же интервале энергий (600 – 1000 eV), где фиксируется аномалия в коэффициенте распыления, что подтверждает единую физическую природу наблюдаемых пороговых явлений.

На рис. 4, а приведена экспериментально полученная зависимость коэффициента распыления монокристаллического кремния (110) от энергии ионов криптона, на которой также видно отклонение значения в области 800 eV от типичной зависимости для аморфного кремния. Полученные результаты позволяют идентифицировать пороговую энергию аморфизации монокристаллического кремния при облучении ионами криптона как $E_{\text{threshold}} \approx 800 \text{ eV}$. При энергии ниже порога глубина проникновения ионов недостаточна для создания плотности смещений, необходимой для разрушения кристаллической решетки в тонком приповерхностном слое. В этом режиме преобладает анизотропное распыление, связанное с различием порогов смещения атомов для разных кристаллографических направлений, что приводит к развитию шероховатости. При превышении порога формируется аморфный слой, поведение которого при дальнейшем распылении схоже с поведением аморфного материала, где доминируют изотропное распыление и диффузионные механизмы сглаживания. Для ориентаций (110) и (111) (рис. 5) пороговое поведение качественно сохраняется, однако абсолютные значения коэффициента распыления и степень сглаживания различаются, что объясняется разной плотностью упаковки атомов и энергией связи на поверхности.

Сравнение энергетических зависимостей коэффициента распыления для ориентаций (001), (110) и (111) показывает, что пороговая область 700 – 800 eV сохраняется для всех трех ориентаций, что свидетельствует об универсальности механизма ионно-индуцированной

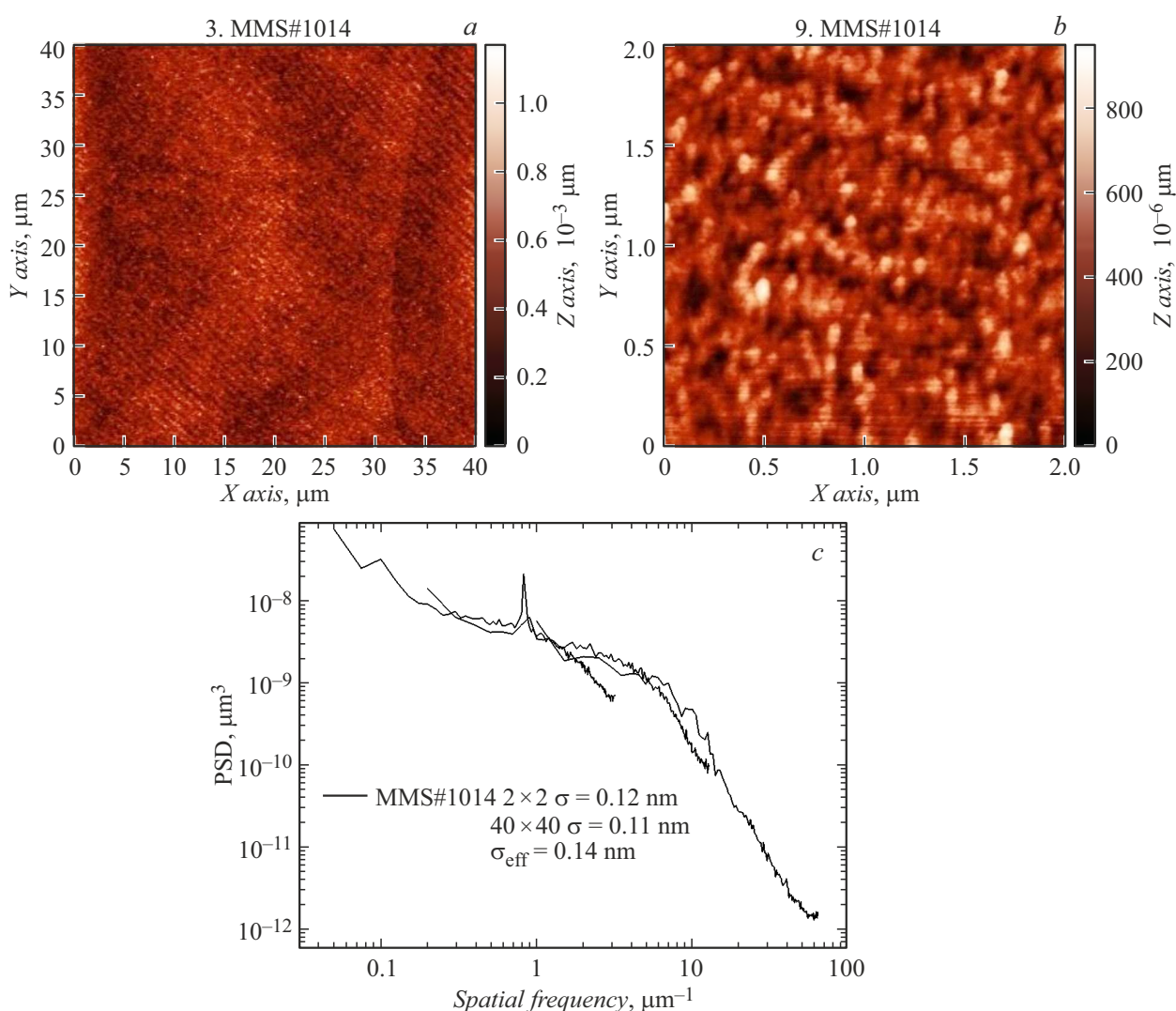


Рис. 2. АСМ кадры: *a* — 2×2 , *b* — $40 \times 40 \mu\text{m}$, *c* — восстановленная функция спектральной плотности мощности шероховатости поверхности монокристаллического кремния (001) после облучения ускоренными ионами криптона с энергией 800 eV.

аморфизации как основного фактора, определяющего смену режимов. Степень сглаживания шероховатости при энергиях выше порога также зависит от ориентации: наименьшие значения эффективной шероховатости достигнуты для (001), что делает эту ориентацию предпочтительной для практического применения в рентгенооптике. На Si (111) сглаживания поверхности в диапазоне энергий ионов криптона до 1 keV не наблюдалось, однако для всех трех ориентаций наблюдается наличие перегиба в энергетической зависимости шероховатости.

2.2. Рентгеновская рефлектометрия XRR ($\lambda = 0.154 \text{ nm}$)

Для определения толщины нарушенного слоя, формирующегося при ионном травлении, были проведены измерения методом малоугловой рентгеновской дифракции образцов Si (001), (110) и (111), облученных ионами Kr^+ с энергиями 1000 eV (рис. 6).

Зарегистрированные угловые зависимости фитировались с применением программного обеспечения дифрактометра. Вычисленные значения толщины нарушенного слоя приведены в таблице. Как видно из рис. 6, зависимости для образцов Si (001) и Si (011) имеют выраженную модуляцию, соответствующую наличию на поверхности нарушенного слоя; для образца Si (111) наблюдается катастрофическое падение коэффициента отражения при углах выше критического, что говорит о развитии шероховатости поверхности (рис. 7).

3. Моделирование

Глубина нарушенного слоя моделировалась с привлечением метода МД, также результаты моделирования сопоставлялись с расчетами методом Монте-Карло (МК) в пакете SRIM [17] для аморфного кремния. При интерпретации результатов необходимо учитывать два

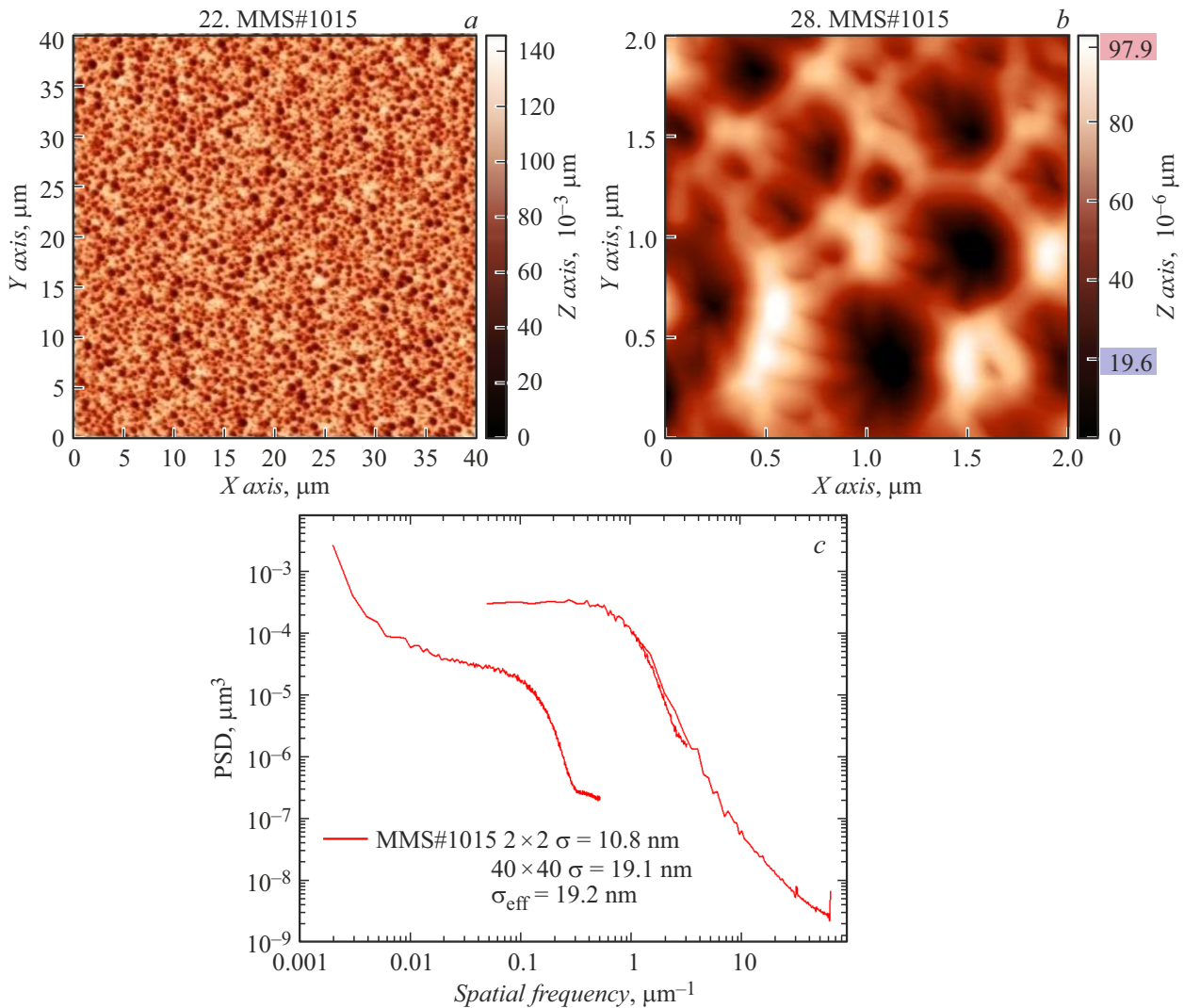


Рис. 3. АСМ кадры: *a* — 2×2 , *b* — $40 \times 40 \mu\text{m}$, *c* — восстановленная функция спектральной плотности мощности шероховатости поверхности монокристаллического кремния (001) после облучения ускоренными ионами криптона с энергией 400 эВ.

принципиальных ограничения МК-модели: во-первых, выходные данные SRIM отражают лишь начальное распределение пар Френкеля без учета их рекомбинации на стадии первичного отжига; во-вторых, приближение аморфной мишени исключает влияние кристаллографической анизотропии, что приводит к искажению профиля распределения вакансий по глубине и неточному определению величины проекционного пробега R_p . Тогда можно учесть ряд таких особенностей, например, с помощью теории Линдхарда [19], в работе которого показано, что критический угол осевого каналирования (Ψ_2) определяется формулой (1). Ψ_2 — максимальный угол между направлением движения иона и кристаллографической осью, при котором возможно каналирование, т.е. при $\Psi < \Psi_2$ ион может быть захвачен в канал, а при $\Psi > \Psi_2$ — движется как в случайной среде:

$$\Psi_2 = \left(\frac{3a^2 Z_1 Z_2 e^2}{4\pi \epsilon_0 E d^3} \right)^{1/3}, \quad (5)$$

где a — радиус экранирования Томаса–Ферми, [м]; Z_1 — атомный номер налетающего иона; Z_2 — атомный номер атома мишени; e — заряд электрона, [C]; E — кинетическая энергия налетающего иона, [J]; d — межатомное расстояние вдоль кристаллографического направления, [м]; ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, [F/m]. Для ионов Kr^+ на $\text{Si}(001)$ ($d = 5.43 \text{ \AA}$, $Z_1 = 36$, $Z_2 = 14$, $E = 700 \text{ eV}$) расчет дает $\Psi_2 \approx 1.7^\circ$. Угловое расхождение пучка в эксперименте $\sim 1^\circ$, поэтому каналирование при нормальном падении возможно, но не является доминирующим фактором. Однако наличие каналирования объясняет более высокие значения числа вакансий в МД по сравнению с SRIM. Одна из моделей каналирования, которая так или иначе связана с предсказанием значения коэффициента распыления и глубины нарушенного слоя, была предложена Ондерделиндемом. Она учитывает влияние блокировки каналов атомами мишени при облучении последней ускоренными части-

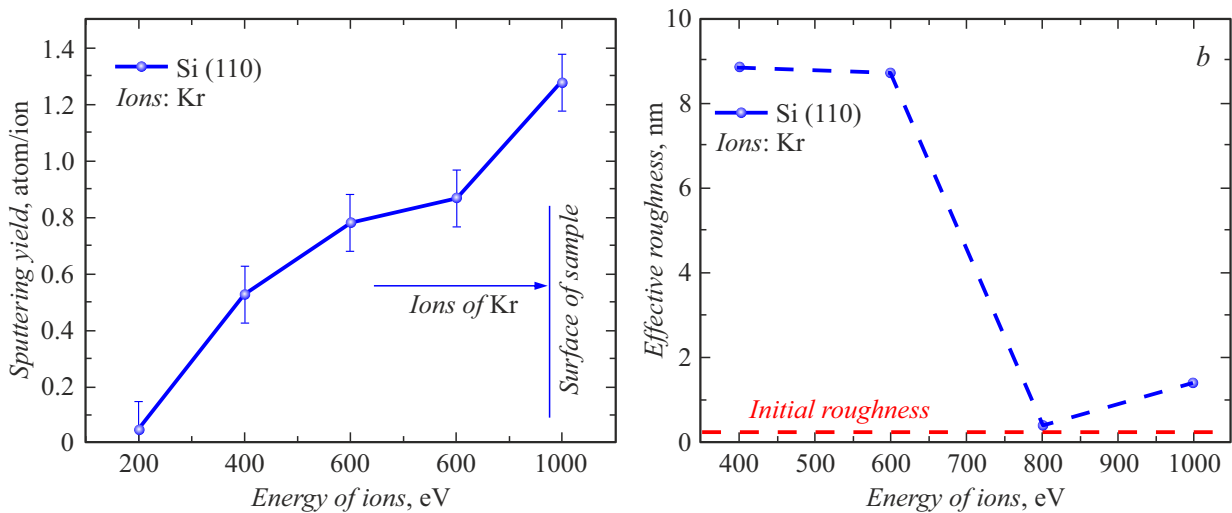


Рис. 4. Экспериментально полученная зависимость: *a* — коэффициента распыления монокристаллического кремния (011); *b* — эффективной шероховатости (в диапазоне пространственных частот 10^{-2} – $63.5 \mu\text{m}^{-1}$) от энергии ионов криптона при нормально падении.

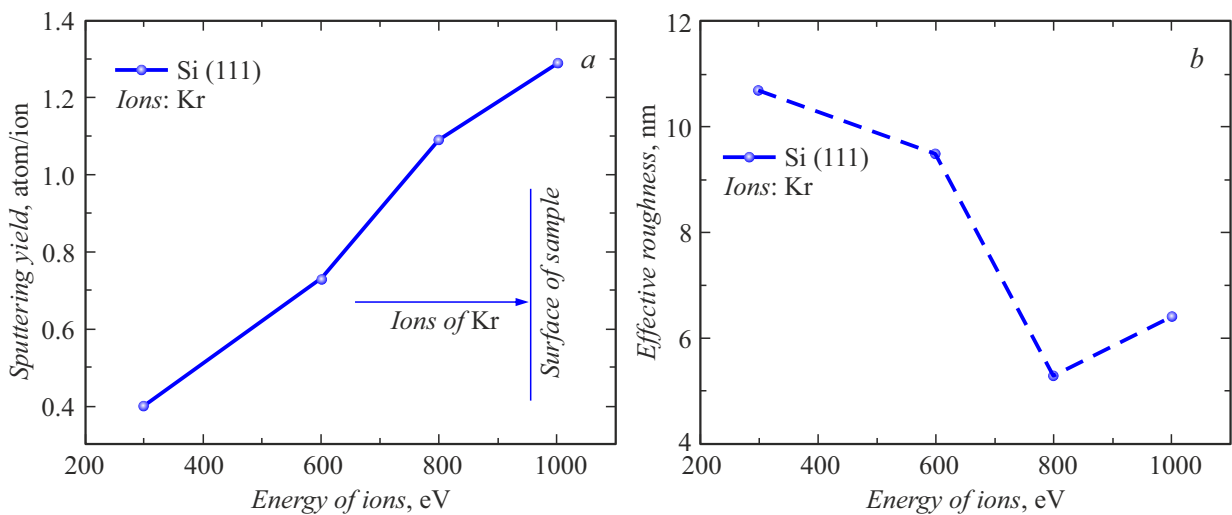


Рис. 5. Экспериментально полученная зависимость: *a* — коэффициента распыления монокристаллического кремния (111); *b* — эффективной шероховатости (в диапазоне пространственных частот 10^{-2} – $63.5 \mu\text{m}^{-1}$) от энергии ионов криптона при нормально падении.

цами [20]. Для вычисления доли ионов, которые не захватываются в каналы и ведут себя как в аморфной среде, Ондерделинден использует следующее выражение:

$$N_{N_e} = \pi N d^3 \Psi_2^2, \quad (6)$$

где N_{N_e} — доля неканализованных ионов; d — расстояние между атомами в атомном ряду. Согласно модели Ондерделиндена, коэффициент распыления пропорционален доле неканализованных ионов и энергии, рассеянной в слое толщиной x_0 :

$$Y = \alpha N_{N_e}(E, \Psi_2) F_{12}(E, x_0), \quad (7)$$

где α — эмпирическая константа пропорциональности, $[\text{eV}^{-1}]$; $F_{12}(E, x_0)$ — энергия, переданная в слое x_0 , $[\text{eV}]$,

которая применяется для описания энергетических потерь неканализованной части пучка в приповерхностном слое толщиной x_0 . Ондерделинден использовал модель каскадных столкновений. Энергия $F_{12}(E, x_0)$, переданная атомам мишени в слое x_0 , описывается рекуррентным соотношением:

$$F_{12}(E, x_0) = \int_0^{x_0} dx \int_0^{\bar{E}_m(x)} N d \sigma_{12}(\bar{E}(x), x_0) \times F_{22}\left(E_0, \frac{x_0 - x}{\sqrt{E_0/\bar{E}_m(x)}}\right), \quad (8)$$

где F_{22} — энергия, переданная атомам мишени первичным атомом отдачи, $[\text{eV}]$; $\bar{E}$ — средняя энергия иона

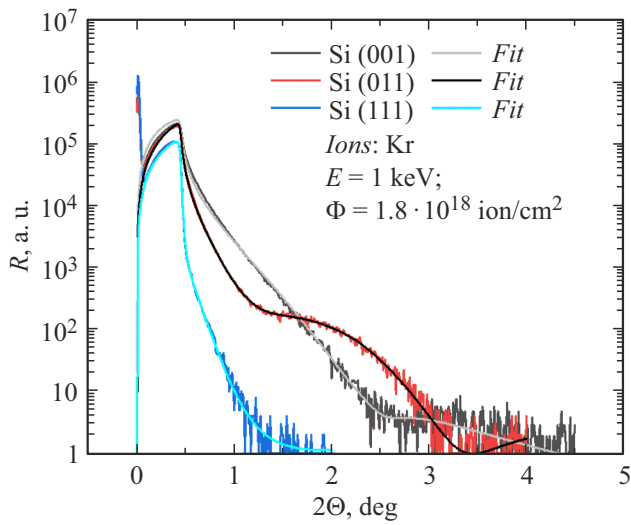


Рис. 6. XRR для трех ориентаций после травления ионами криптона с энергией 1 keV и дозой $1.8 \cdot 10^{18} \text{ ion/cm}^2$.

Толщина нарушенного слоя и шероховатость поверхности из данных рентгеновской рефлектометрии ($\lambda = 0.154 \text{ nm}$)

Кристаллографическая ориентация	$h_{\text{damage}}, \text{ nm}$
(001)	3.48
(011)	3.94
(111)	5.67

на глубине x_0 , [eV]; $\bar{E}_m$ — максимальная переданная энергия ионом, [eV]; $d\sigma_{12}$ — дифференциальное сечение рассеяния иона на атоме мишени, [m²]; N — атомная плотность, [m⁻³].

Тогда, используя данные XRR о толщине нарушенного слоя (см. таблицу) в качестве оценки x_0 и R_p из данных SRIM и МД, можно оценить вклад каналирования в процесс распыления. Оценим эффективную долю ионов, теряющих энергию в нарушенном слое:

$$N_{\text{Ne}}^{\text{eff}} = N_{\text{Ne}} + (1 - N_{\text{Ne}}) \frac{x_0}{R_p}. \quad (9)$$

Расчет для Si(001) при 700 eV дает $N_{\text{Ne}}^{\text{eff}} \approx 1.17$ (полное перемешивание), что физически означает, что практически все ионы ведут себя как неканализованные, а каскады от каналированных ионов все равно частично перекрываются с x_0 . Оценим критическую концентрацию дефектов, необходимую для сглаживания, используя данные МД для Kr^+ (число вакансий на ион N_{Vac}) и пробег R_p :

$$\rho_{\text{def}} = \frac{\Phi N_{\text{Vac}} N_{\text{Ne}}^{\text{eff}}}{\pi R_p^2 x_0}. \quad (10)$$

Для Si(001) при $E = 700 \text{ eV}$ (порог): $\rho_{\text{def}} \approx 9.6 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ($x_0 = 2.2 \text{ nm}$), что составляет $\sim 1.9\%$ от плотности атомов Si. Для Si(111) при $E = 700 \text{ eV}$ расчетная плотность дефектов составляет

$\rho_{\text{def}} \approx 9.3 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ($\sim 1.9\%$). Это указывает на то, что в области перехода к аморфизации глубина нарушенного слоя практически совпадает с проекционным пробегом, и эффект каналирования перестает быть определяющим. Для Si(111) отсутствие сглаживания при 700–1000 eV не связано с недостаточной средней концентрацией дефектов, а определяется другим фактором — возможно, более высокой критической плотностью дефектов, необходимой для разрушения кристаллической структуры именно этой ориентации, или тем, что механизмы рекомбинации и отжига дефектов в Si(111) эффективнее, и для аморфизации требуется большая локальная плотность радиационных нарушений.

Принимая, что аморфизация наступает при достижении критической дозы смещений $dpa_{\text{crit}} = 0.1$ (характерное значение для кремния при комнатной температуре [21], из формулы (3) можно оценить необходимое количество смещений на ион:

$$N_d^{\text{crit}} = \frac{dpa_{\text{crit}} n}{\Phi_{\text{exp}}}. \quad (11)$$

Для экспериментальной дозы $\Phi_{\text{exp}} \geq 10^{18} \text{ ion/cm}^2$, используемой в настоящей работе, получаем $N_d^{\text{crit}} = 7500 \text{ displacements/ion}$. Для количественного описания перехода от кристаллического состояния к аморфному использована модель Джонсона–Мейла–Аврами [22,23], согласно которой доля аморфизованной фазы f_{am} определяется выражением:

$$f_{\text{am}} = 1 - \exp\left(-\left(\frac{dpa}{dpa_{\text{crit}}}\right)^n\right), \quad (12)$$

где $n = 1.5$ — показатель, характерный для диффузионно-контролируемых процессов фазовых переходов в кремнии [24]. Воспользуемся полученными данными и вычислим зависимость $dpa(E)$. На рис. 8 приведены зависимости dpa и функции аморфизации от энергии ионов на основе данных, полученных из МД и SRIM.

Исходя из данных КРС в работе [18], получаем отношение квазиаморфной фазы к кристаллической (c-Si) на уровне 10%. Пусть $f_{\text{am}} = f_{\text{am}}(q\text{-Si/c-Si}) = 0.1$. Тогда

$$\left(\frac{dpa}{dpa_{\text{crit}}}\right)^{1.5} \approx 0.105, \quad (13)$$

откуда $dpa \approx 0.0223$ при $dpa_{\text{crit}} = 0.1$, что расходится с моделированием на порядок. Такое расхождение может быть связано с тем, что данные по dpa_{crit} относятся к диапазону энергий ионов на два порядка выше, чем рассматриваемый в настоящей работе. В таком случае, если предположить, что $dpa_{\text{crit}} > 0.01$, то значение dpa при такой дозе составит 0.0022, что близко к значениям, полученным из данных SRIM. Однако если опираться на данные из экспериментов и данных КРС [18], то $dpa = 0.00065$ достигается, когда $dpa_{\text{crit}} = 0.0029$. Мотивация выбора таких значений обусловлена тем,

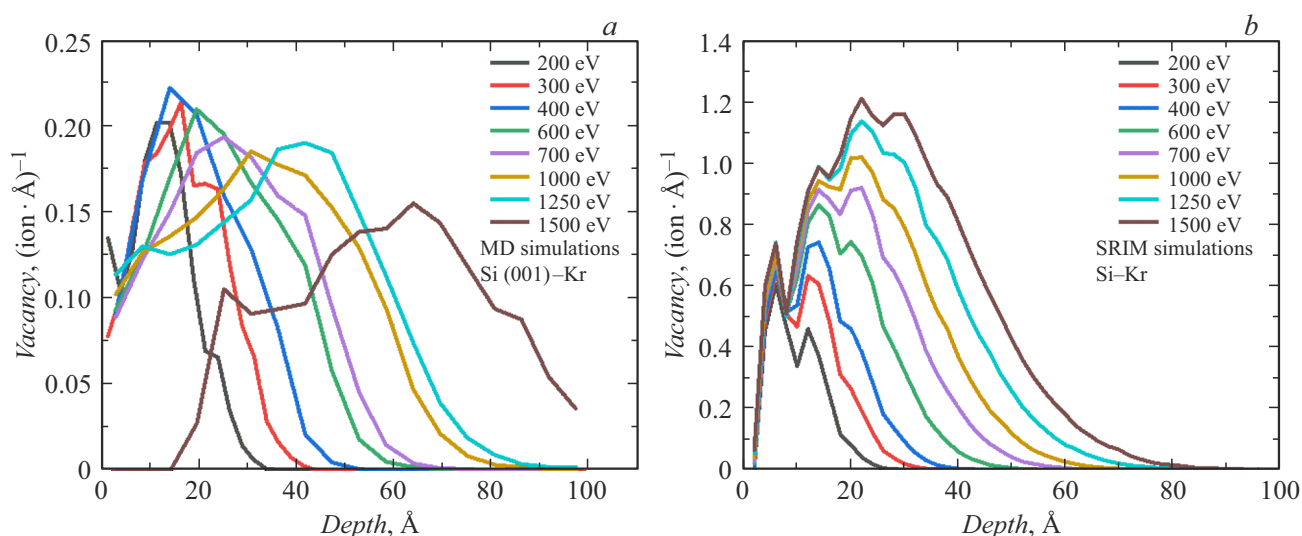


Рис. 7. Распределение вакансий по глубине из данных: *a* — МД, *b* — SRIM.

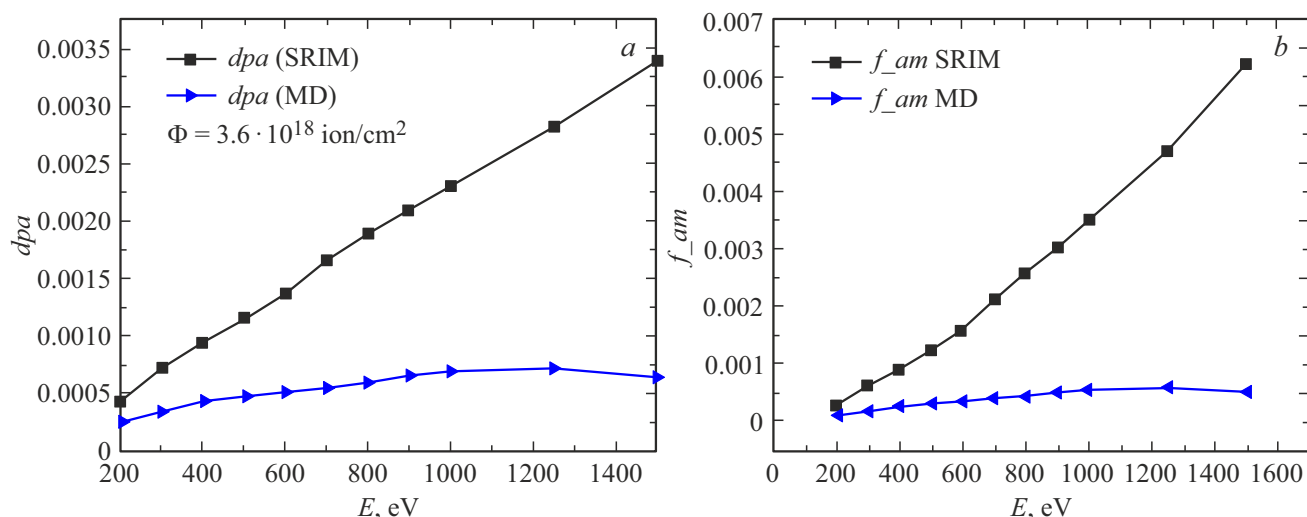


Рис. 8. Значение dpa (*a*) и доля аморфизованного материала (*b*) в зависимости от энергии ионов Kr^+ . Кривая рассчитана по модели Джонсона-Мейла-Аврами ($n = 1.5$, $dpa_{crit} = 0.1$).

что МД учитывает эффекты каналирования, а также термические, радиационные и диффузионные процессы.

В рамках исследований подтверждено пороговое поведение энергетической зависимости шероховатости поверхности для ионов Kr, наблюдавшейся ранее для ионов Ag и Xe, что говорит о частичной аморфизации приповерхностного слоя. Однако оценка величины dpa , традиционно применяемая при оценке доли аморфной фазы при облучении образцов высокоэнергетическими ионами (более 100 keV), оказалась существенно ниже пороговой. По-видимому, для ионов малых энергий (порядка 1 keV) следует вводить иные критерии формирования аморфной фазы. Данный факт предполагает проведение дополнительных исследований и будет рассмотрен в рамках последующих работ.

Заключение

В работе проведено комплексное экспериментальное и теоретическое исследование распыления монокристаллического кремния ионами криптона в диапазоне энергий 200–1000 eV при нормальном падении пучка. Получены энергетические зависимости коэффициента распыления и эффективной шероховатости поверхности в спектральном диапазоне пространственных частот 10^{-2} – $63.5 \mu m^{-1}$ для кристаллографических ориентаций (001), (110) и (111).

Установлено, что в исследуемом диапазоне энергий реализуется пороговое поведение шероховатости поверхности, связанное с переходом от кристаллографически-избирательного распыления к режиму ионно-

индуцированной аморфизации приповерхностного слоя. Для ориентаций Si (001) и Si (110) данный переход наблюдается в области энергий 700–800 eV и сопровождается сменой анизотропного рельефа на статистически изотропный, что приводит к эффективному сглаживанию поверхности до значений шероховатости порядка 0.1 nm в технологически значимом для современной рентгеновской оптики диапазоне пространственных частот. Для ориентации Si (111) в исследованном диапазоне энергий сглаживание не наблюдается, что свидетельствует о более высокой критической плотности радиационных дефектов, необходимой для аморфизации.

Показано, что немонотонный характер энергетических зависимостей коэффициента распыления и шероховатости отражает смену механизмов взаимодействия ионов с материалом и определяется соотношением между глубиной развития каскадов столкновений и толщиной приповерхностного слоя, в котором реализуется эмиссия атомов. Обнаруженный переход от анизотропного к изотропному рельефу подтверждает ключевую роль разрушения кристаллической структуры в формировании сглаженного состояния поверхности.

На основе сопоставления экспериментальных данных с результатами молекулярно-динамического моделирования и расчетов методом Монте–Карло (SRIM) показано, что традиционный критерий аморфизации, основанный на достижении $dpa \approx 0.1$, не применим в диапазоне энергий сотен электронвольт. В рассматриваемых условиях аморфизация реализуется при существенно меньших значениях dpa , что указывает на определяющую роль локальной плотности радиационных дефектов в приповерхностном слое, а не интегральной дозы повреждений. Установлено, что порог сглаживания соответствует достижению критической концентрации дефектов порядка нескольких процентов от атомной плотности кремния. Показано, что различия в поведении кристаллографических ориентаций обусловлены совокупным влиянием плотности упаковки атомов, энергии смещения и эффектов каналирования. Учет каналирования позволяет объяснить расхождения между результатами молекулярно-динамического моделирования и расчетами SRIM, а также уточнить механизм формирования нарушенного слоя.

Практически значимым результатом работы является определение оптимального диапазона энергий ионов криптона (700–900 eV), обеспечивающего минимальную шероховатость поверхности при сохранении высокой эффективности распыления. Полученные значения эффективной шероховатости (0.1–0.2 nm) удовлетворяют современным требованиям на качество поверхностей подложек рентгенооптических элементов.

Таким образом, полученные результаты углубляют понимание механизмов ионно-стимулированной эволюции поверхности монокристаллического кремния и демонстрируют, что управление шероховатостью в субнанометровом диапазоне определяется не только параметрами пучка, но и условиями формирования радиационно-

модифицированного приповерхностного слоя. Это открывает возможности для оптимизации режимов ионно-пучковой обработки в задачах высокоточной коррекции формы и создания сверхгладких оптических поверхностей.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-00043, <https://rscf.ru/project/25-72-00043/> и с использованием оборудования ЦКП „Физика и технологии микро- и наноструктур“ при ИФМ РАН.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Ch.J. Guo, N. Pei, D.S. Wang, F.M. Nie, G.P. Zhang, Y.P. Li. *AMM*, **395**–**396**, 1066 (2013). DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMM.395-396.1066
- [2] D. Flamm, A. Schindler, M. Berger. *Ion beam milling of optically polished CaF2 surfaces*, Proc. SPIE 5180, Optical Manufacturing and Testing V, null (2003). DOI: 10.1117/12.505658
- [3] N. Savvides, A. Knittel. *Ion Beam Figuring of Optics*. Report number: CIP2152, Affiliation: CSIRO (2016). DOI: 10.13140/RG.2.2.17830.01600
- [4] N.I. Chkhalo, I.A. Kaskov, I.V. Malyshev, M.S. Mikhaylenko, A.E. Pestov, V.N. Polkovnikov, N.N. Salashchenko, M.N. Toropov, I.G. Zabrodin. *Precision Engineering*, **48**, 338 (2017). DOI: 10.1016/j.precisioneng.2017.01.004
- [5] Sh. Shang, G. Cai, D. Zhu, B. He. *Vacuum*, **125**, 192 (2016). DOI: 10.1016/j.vacuum.2015.12.014
- [6] H.E. Roosendaal. *Sputtering yields of single crystalline targets*. In R. Behrisch (editor). *Sputtering by Particle Bombardment I: Physical Sputtering of Single-Element Solids* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1981), p. 219–256. DOI: 10.1007/3540105212_10
- [7] Ю.В. Балакшин, А.В. Кожемяко, А.П. Евсеев, Д.К. Миннебаев, Е.М. Elsehly. *Вестник Московского ун-та. Серия 3: Физика. Астрономия*, **3**, 23 (2020). [Yu.V. Balakshin, A.P. Evseev, D.K. Minnebaev, A.V. Kozhemiako, E.M. Elsehly. *Moscow Univ. Phys. Bull.*, **75** (3), 218 (2020). DOI: 10.3103/S0027134920030030]
- [8] T. Arnold, G. Böhm, R. Fechner, J. Meister, A. Nickel, F. Frost, T. Hänsel, A. Schindler. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, **616** (2–3), 147 (2010). DOI: 10.1016/j.nima.2009.11.013
- [9] Y. Lu, X. Xie, L. Zhou, Z. Dai, G. Chen. *Appl. Opt.*, **56** (2), 260 (2017). DOI: 10.1364/AO.56.000260
- [10] M.S. Mikhaylenko, A.E. Pestov, N.I. Chkhalo, M.V. Zorina, A.K. Chernyshev, N.N. Salashchenko, I.I. Kuznetsov. *Appl. Opt.*, **61** (10), 2825 (2022). DOI: 10.1364/AO.455096
- [11] М.М. Барышева, Н.И. Чхало, Ю.А. Вайнер, М.В. Зорина, М.С. Михайленко, Р.М. Смертин. *ЖТФ*, **95** (10), 1887 (2025). DOI: 10.61011/JTF.2025.10.61342.141-25

- [12] N.I. Chkhalo, S.A. Churin, M.S. Mikhaylenko, A. Pestov, V.N. Polkovnikov, N.N. Salashchenko, M.V. Zorina. *Appl. Opt.*, **55** (6), 1249 (2016). DOI: 10.1364/AO.55.001249
- [13] G.H. Kinchin, R.S. Pease. *Reports Progr. Phys.*, **18** (1), 1 (1955). DOI: 10.1088/0034-4885/18/1/301
- [14] M.J. Norgett, M.T. Robinson, I.M. Torrens. *Nucl. Eng. Design*, **33** (1), 50 (1975). DOI: 10.1016/0029-5493(75)90035-7
- [15] J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **268** (11–12), 1818 (2010). DOI: 10.1016/j.nimb.2010.02.091
- [16] F.H. Stillinger, Th.A. Weber. *Phys. Rev. B*, **31** (8), 5262 (1985). DOI: 10.1103/PhysRevB.31.5262
- [17] J.F. Ziegler. *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Elsevier, 1988), p. 3–61.
- [18] M.S. Mikhailenko, A.E. Pestov, A.K. Chernyshev, N.I. Chkhalo, A.N. Orlova, M.V. Zorina, N. Kumar, S.V. Goryainov, V.A. Volodin, A.A. Nazarov. *J. Vacuum Sci. Technol. A*, **43** (6), 062602 (2025). DOI: 10.1116/6.0004851
- [19] J. Lindhard. *Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles* (Munksgaard, Copenhagen, 1965)
- [20] D. Onderdelinden. *Can. J. Phys.*, **46** (6), 739 (1968).
- [21] I. Solana, M.D. Ynsa, F. Agulló-Rueda, J. Sánchez-Prieto, D. Grojo, J. Siegel, M. Garcia-Lechuga. *Surf. Interfaces*, **69**, 106772 (2025). DOI: 10.1016/j.surfin.2025.106772
- [22] M. Avrami. *J. Chem. Phys.*, **7** (12), 1103 (1939). DOI: 10.1063/1.1750380
- [23] M. Avrami. *J. Chem. Phys.*, **8** (2), 212 (1940). DOI: 10.1063/1.1750631
- [24] R.S. Sposili, J.S. Im. *Appl. Phys. Lett.*, **69** (19), 2864 (1996). DOI: 10.1063/1.117344