

Численное моделирование спектров Резерфордского обратного рассеяния ионов от многослойных многокомпонентных мишеней

Кибардин А. В.

Кибардин Алексей Владимирович / Kibardin Alexey Vladimirovich - кандидат физико-математических наук, доцент,
кафедра вычислительной техники,
Физико-технологический институт,

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург

Аннотация: в работе рассматриваются вопросы численного моделирования спектров Резерфордского обратного рассеяния ионов в тонких пленках.

Abstract: the work deals with the numerical modeling of the spectra of Rutherford backscattering of ions in thin films.

Ключевые слова: тонкие пленки, ион, упругое рассеяние, спектры, математическое моделирование.

Keywords: thin films, ion elastic scattering spectra, mathematical modeling.

Наиболее интересную информацию в исследованиях изменения атомного состава в процессах диффузии и твердофазных реакций в тонких порядка нескольких десятков или сотен нм пленках дает методика Резерфордского обратного рассеяния заряженных частиц. Она позволяет получить количественную информацию о распределении атомов по глубине образца без его разрушения и не требует калибровки с использованием внешних стандартов. Это дает возможность проводить анализ сложных многослойных систем, например, используемых в микроэлектронике. Однако количественный анализ спектров обратного рассеяния от таких систем требует использования адекватной математической модели и компьютерной обработки результатов.

Теоретическое описание процесса упругого рассеяния тяжелых быстрых ионов с энергией дано в ряде работ, например [1-3]. Быстрый ион, двигаясь в твердом теле, теряет свою энергию за счет двух процессов: рассеяния на электронах атомов мишени и рассеяния на атомах мишени. Взаимодействие с электронами, будучи основным фактором потери ионом энергии, вызывает лишь небольшие отклонения траектории иона. Взаимодействие с ядрами атомов, при условии, что начальная энергия иона не превышает 1 МэВ/нуклон, можно рассматривать как упругое столкновение с чисто кулоновским потенциалом взаимодействия. На рис. 1 показано рассеяние иона с зарядом z_1 и начальной энергией E_0 на большой угол ($>90^\circ$) двухслойной мишенью (толщина первого слоя много меньше полной длины пробега иона). Количество ионов, рассеянных на угол θ в малом слое толщиной dt на глубине t в элемент телесного угла $\Delta\Omega$, дается выражением (1):

$$F(E_2) = Nn \frac{d\sigma(E_1, \theta)}{d\Omega} \Delta\Omega dt / \cos \theta_1, \quad (1)$$

где n – величина потока падающих ионов; N – концентрация атомов мишени; $d\sigma/d\Omega$ – дифференциальное сечение упругого рассеяния ионов; E_1 – энергия иона на глубине t непосредственно перед рассеянием; E_2 – энергия, к которой регистрируется ион, рассеянный на глубине t .

Дифференциальное сечение упругого рассеяния ионов описывается выражением (2):

$$\frac{d\sigma(E_1, \theta)}{d\Omega} = \left(\frac{z_1 z_2 e^2}{E_1} \right)^2 \left[\sqrt{1 - \left(\frac{m_1}{m_2} \sin \theta \right)^2} + \cos \theta \right]^2, \quad (2)$$

где m_1, m_2, z_1, z_2 – массы и зарядовые числа налетающего иона и атома мишени соответственно, θ – угол рассеяния в лабораторной системе координат.

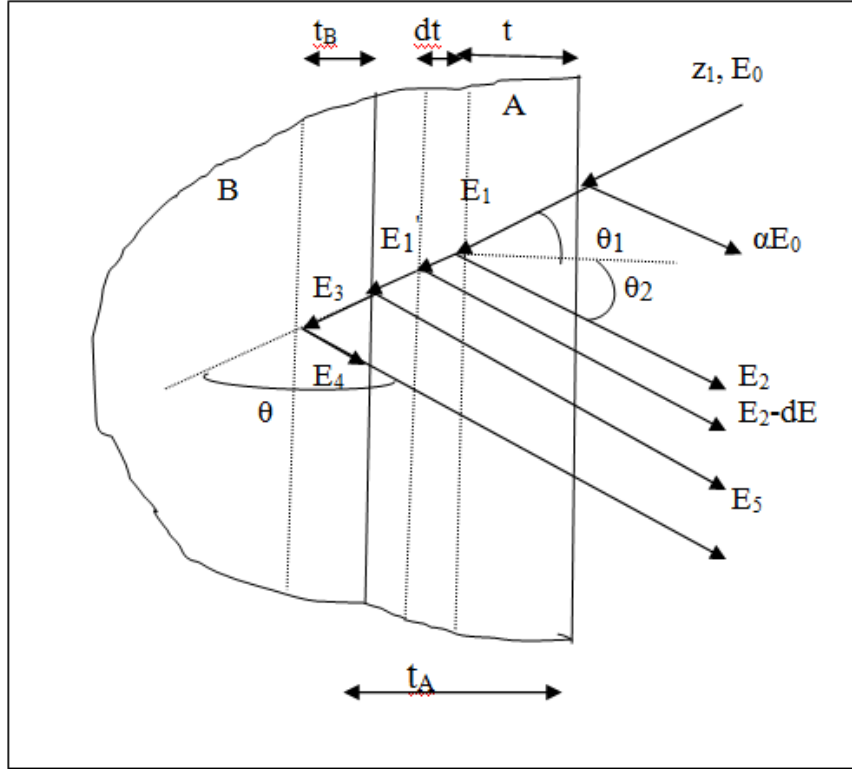


Рис. 1. Схема однократного упругого рассеяния иона с начальной энергией E_0 двухслойной мишенью

Для определения энергии необходимо знать пробег частиц в веществе до столкновения. Его можно определить, решив систему уравнений (3):

$$\begin{cases} t / \cos \theta_1 = - \int_{E_0}^{E_1} \frac{dE}{S(E)} \\ t / \cos \theta_2 = - \int_{\alpha E_1}^{E_2} \frac{dE}{S(E)} \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $S(E)$ - удельные потери иона в веществе.

Проблема заключается в необходимости использования экспериментальных данных удельных потерь иона в веществе, которые не могут быть описаны аналитической зависимостью во всем диапазоне энергий от начальной и до нуля.

Поскольку в исследованиях тонких пленок для нас представляют интерес глубины в веществе t , много меньше полного пробега ионов R_p , будем рассматривать удельные потери в интервале энергий $0,2 < E < 1$ МэВ/нуклон. В этом диапазоне удельные потери ионов в веществе с хорошей точностью можно аппроксимировать функциональной зависимостью $S(E) = A \cdot \exp(-\beta)$. Это позволяет получить из решения системы (3) простые аналитические выражения, связывающие начальную энергию E_0 и конечную энергию E_2 иона с глубиной рассеяния t в веществе [4, с. 50]:

$$t = \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2}{(\cos \theta_1 + \alpha^{\beta+1} \cos \theta_2) A (\beta + 1)} [(\alpha E_0)^{\beta+1} - E_2^{\beta+1}], \quad (4)$$

где α - кинематический фактор, определяющий долю энергии, уносимую упруго рассеянной частицей; θ_1, θ_2 - углы падения и отражения соответственно; A, β - коэффициенты аппроксимации энергетических потерь частицы.

Энергия частицы непосредственно перед упругим рассеянием на глубине t определяется из (3) с учетом аппроксимации (формула (5)):

$$E_1 = \left[E_0^{\beta+1} + \frac{A(\beta+1)t}{\cos \theta_1} \right]^{\frac{1}{\beta+1}}, \quad (5)$$

Для получения выхода рассеяния от следующего слоя (рис. 1) необходимо определить энергию E_3 . Ее можно рассчитать, зная толщину первого слоя t_a и последовательно вычисляя E_1 (энергия иона на границе со вторым слоем) и E_4 (энергия иона на границе со слоем A после рассеяния в слое вещества B на глубине t_b):

$$E_4 = (E_5^{\beta_a+1} - A_a(\beta_a+1)t_a / \cos \theta_2)^{\frac{1}{\beta_a+1}}, \quad (6)$$

где

$$E_5 = ((\alpha_b E_1')^{\beta_a+1} - A_a(\beta_a+1)t_a / \cos \theta_1)^{\frac{1}{\beta_a+1}} \quad (7)$$

– начало спектра обратного рассеяния от второго слоя. Индексы a и b относятся к соответствующим параметрам слоев A и B .

Далее, аналогично (4) для глубины t_b во втором слое получим соотношение (8):

$$t_b = \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2}{(\cos \theta_1 + \alpha^{\beta_b+1} \cos \theta_2) A_b(\beta_b+1)} [(\alpha_b E_b')^{\beta_b+1} - E_4^{\beta_b+1}] \quad (8)$$

Энергия иона перед рассеянием на глубине t_b (аналогично (5)) определяется выражением (9):

$$E_3 = (E_1'^{\beta_b+1} - A_b(\beta_b+1)t_b / \cos \theta_1)^{\frac{1}{\beta_b+1}} \quad (9)$$

Аналогично ведутся расчеты для 3-го и последующих слоев.

Для того чтобы получить реальный спектр обратного рассеяния ионов, необходимо учесть флуктуации потерь энергии частицей из-за страгглинга Γ_s и конечное энергетическое разрешение измерительной системы (так называемую аппаратную функцию) Γ_0 . Распределение энергии ионов после прохождения слоя вещества толщиной $t \ll R_p$ (R_p – полный пробег частицы в веществе) можно оценить с помощью приближения Бора:

$$\Gamma_s = 4\pi(8 \ln 2) z_1 z_2 e^4 N t \quad (10)$$

С учетом аппаратной функции измерительной установки и разброса энергии ионов при движении вглубь образца и на пути их выхода из образца после акта рассеяния выражение для распределения частиц по энергии примет вид (11):

$$\Gamma^2 = \Gamma_0^2 + \alpha \Gamma_s^2 + \Gamma_s^2 \quad (11)$$

Коэффициенты гауссовского распределения по энергии:

$$P_{ij}(E_{2i} - E_{2j}) = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi}\Gamma} \exp\left[-\frac{4 \ln 2}{\Gamma^2} (E_{2j} - E_{2i})^2\right] \quad (12)$$

Здесь индексы i, j соответствуют разным энергетическим интервалам.

При расчете страгглинга в многокомпонентном слое мы использовали принцип линейной аддитивности, в соответствии с которым параметр Γ для слоя, состоящего, например, из двух компонентов, определяется следующей формулой:

$$(\Gamma^{A_n B_m})^2 = n(\Gamma^a)^2 + m(\Gamma^b)^2 = 4\pi(8 \ln 2) z_1 e^4 (z_2^a n N_a^{A_n B_m} + z_2^b m N_b^{A_n B_m}) t, \quad (13)$$

где $N_a^{A_n B_m}$, $N_b^{A_n B_m}$ – парциальные концентрации элементов A и B ; n, m – стехиометрические коэффициенты.

Модифицированный с учетом коэффициентов (12) спектр обратного рассеяния ионов имеет вид:

$$H(E_{2i}) = \sum_{j=i-k}^{j=i+k} P_{ij}(E_{2i} - E_{2j}) F_j(E_{2j}), \quad (14)$$

где количество интервалов $j=2k$ выбирается таким, чтобы оно примерно составляло 3σ гауссовского распределения.

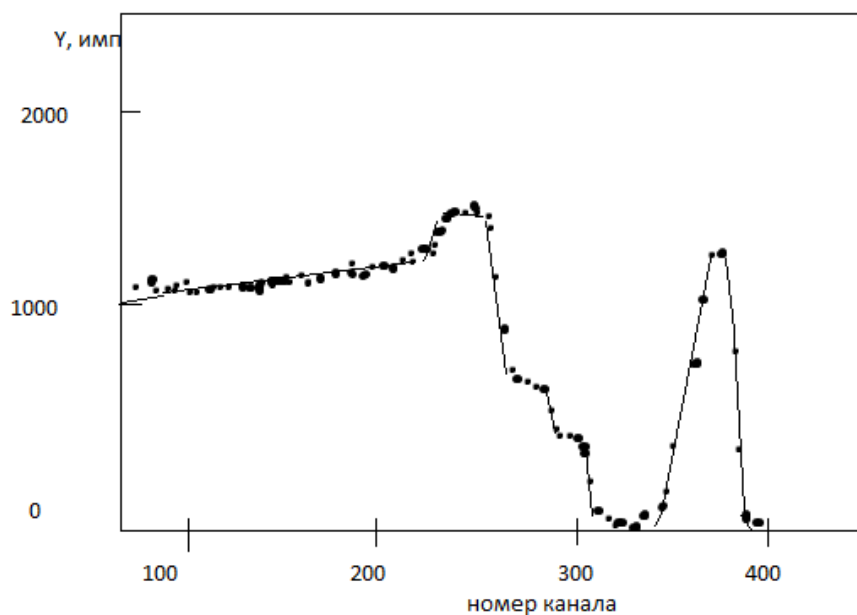


Рис. 2. Спектры резерфордского обратного рассеяния ионов водорода с начальной энергией 600 кэВ:
• экспериментально полученный спектр от многослойной структуры W(31 нм) / SiO₂ (580 нм) / Si;
— расчетный спектр

На основе предложенной модели нами разработан ряд программ, позволяющих моделировать спектры резерфордского рассеяния и решать обратную задачу: по энергетическим спектрам рассчитывать профили атомных концентраций. На рис. 2 представлены пример расчета в сравнении с экспериментальными данными, полученными от многослойной структуры: пленки W толщиной 31 нм, нанесенной на окисленную поверхность монокристалла Si (слой окисла толщиной 580 нм). Как видно из рисунка, достигается хорошая точность в описании спектров вплоть до энергии ≈ 200 кэВ, соответствующей глубине порядка 1 мкм в подложке кремния.

Литература

1. Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции. Под редакцией Поуга Дж., Ту К., Мейера Дж. М.: Мир. 1982. 576 с.
2. *Chu W. K., Mayer J. W., Nicolet M. A.* Backscattering spectrometry. N.-Y.: Academic Press. 1978. 384 p.
3. *Шуатов Э. Т.* Обратное рассеяние быстрых ионов. Ростов. Изд-во Ростовского гос. университета. 1988. 154 с.
4. *Кибардин А. В.* Изменение профилей концентрации атомов в тонкопленочных структурах Me-Si при тепловом и радиационном воздействиях.: Дисс... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург.: УГТУ. 1996.