[7] *Шейхалиев Ш. М., Попель С. И.* // Порошковая металлургия. 1982. № 3. С. 82—91.
[8] *Барлетов В. А., Коваленко В. П., Рудько А. М.* // ЖТФ. 1988. Т. 58. Вып. 12. С. 2376—2379.
[9] *Абрамова К. Б., Златин Н. А., Перегуд Б. П.* // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. Вып. 6. С. 2007—2020.
[10] *Баланкин С. А., Горбачев Л. П., Григорьев Е. Г.* и др. // ЖПМТФ. 1977. № 4. С. 61—65.
[11] *Баланкин А. С., Любомудров А. А., Севрюков И. Т., Яневич Г. Н.* // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. Вып. 13. С. 1226—1231.
[12] *Фатьянов В. М., Олемской А. И., Умрихин В. В.* и др. // Изв. вузов. Физика. 1986. № 6. С. 3—8.
[13] *Плещанов А. С.* // ЖПМТФ. 1988. № 5. С. 28—33.
[14] *Баланкин С. А., Быков И. И., Григорьев Е. Г.* и др. // Письма в ЖТФ. 1983. Т. 9. Вып. 12. С. 760—764.

Поступило в Редакцию
5 января 1989 г.
В окончательной редакции
25 сентября 1989 г.

01; 05; 10; 11 *Журнал технической физики, т. 60, в. 8, 1990*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОФИЛЯ КРАТЕРА ПРИ РАСПЫЛЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА СКАНИРУЮЩИМ ИОННЫМ ПУЧКОМ В РЕЖИМЕ СПИРАЛЕВИДНОЙ РАЗВЕРТКИ

Н. В. Коненков, А. Б. Толстогузов

Введение

Математическое моделирование профиля кратера при распылении ионным пучком [1-3] необходимо для повышения степени достоверности определения состава приповерхностной области твердого тела методами электронной и ионной спектроскопии [4].

Это связано с решением проблемы улучшения динамического диапазона и предела обнаружения примесей при послойном анализе методом масс-спектрометрии вторичных ионов (МСВИ) [5, 6] за счет подавления «эффекта кратера» [6, 7], т. е. устранения вклада вторичных ионов со стенок кратера в сигнал, измеряемый со дна кратера. Сюда же примыкает и задача о восстановлении истинного распределения концентрации примеси по экспериментальным измерениям интенсивности масс-пиков вторичных ионов в зависимости от времени распыления [8, 9]. По результатам математического моделирования можно выбрать оптимальную форму и период сканирующего напряжения, задать размеры «электронной диафрагмы» в системе регистрации [1, 10], дискретность получения информации о профиле послойного анализа и другие характеристики.

Есть сообщения об использовании для распыления образцов в методе МСВИ спиралевидной развертки (СР) [11-13], при которой ионный пучок совершает движение по спирали от центра растра к его периферийной области и обратно.

Однако вплоть до настоящего времени спиралевидная развертка ионного пучка не нашла широкого применения в установках МСВИ, в том числе в сканирующих ионных микрозондах [14], несмотря на то что СР имеет преимущества по сравнению с традиционной прямоугольной в вопросах аппаратной реализации [12].

Одним из обстоятельств, сдерживающих применение СР, является отсутствие информации о профиле кратера распыления и в первую очередь о наличии в нем достаточно большого плоского дна. Данная работа призвана восполнить этот недостаток, осветив вопросы формирования профиля кратера распыления в режиме спиралевидной развертки в зависимости от закона ее изменения во времени, количества витков, степени их перекрытия и других факторов.

Постановка задачи и исходные данные

1. Первичный ионный пучок аксиально симметричен и распределение плотности тока в нем подчиняется закону Гаусса [1]

$$j(r) = \frac{I_0}{\pi r_0^2} \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right) = j_0 \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right), \tag{1}$$

где I_0 — полный ионный ток; j_0 — максимальное значение плотности ионного тока; r_0 — ширина распределения на уровне 0.78 j_0, т. е. эффективный диаметр ионного пучка.

Распределение плотности тока по Гауссу широко применяется в различных расчетах [1-3] и с достаточной степенью точности характеризует профиль плотности тока для большинства ионных пучков, используемых при послойном анализе методом МСВИ.

2. Сканирование оси ионного пучка по поверхности исследуемого образца происходит по спирали Архимеда [15]

$$\rho(t) = a\varphi(t) = \frac{k}{2\pi} \varphi(t), \tag{2}$$

где ρ и φ — полярные координаты оси, проходящей через центр ионного пучка; a — масштаб; k — шаг спирали.

Существуют и другие виды спиралевидной развертки (например, логарифмическая спираль [15]), однако спираль Архимеда относится к простейшим и легко реализуется на практике при подаче на плоскопараллельные отклоняющие пластины ионной пушки синусоидальных напряжений, сдвинутых по фазе на $\pi/2$ [11].

Возможны два основных варианта развертки пучка по закону Архимеда: 1) с постоянной угловой скоростью

$$\omega = \frac{d\varphi}{dt} = \text{const}, \tag{3}$$

2) с постоянной линейной скоростью

$$v_L = \frac{dL}{dt} = a\varphi \frac{d\varphi}{dt} = \text{const}, \tag{4}$$

где dL — элемент длины спирали.

Первый вариант приводит к сильной неоднородности кратера по глубине в зависимости от его радиуса, что делает такой кратер практически непригодным для послойного анализа. Поэтому вариант СР с постоянной угловой скоростью в данной работе не рассматривается.

3. Обозначим через $2T$ период развертки, а через N — число витков спирали. Будем считать, что за время T угол φ в выражении (2) изменяется от 0 до $2\pi N$ (прямой ход), а затем также за T от $2\pi N$ до 0 (обратный ход.)

Учитывая выражения (2) и (4), для прямого хода развертки получаем

$$\rho(t) = 2\pi a N \sqrt{\frac{t}{T}} = kN \sqrt{\frac{t}{T}} = \rho_{\max} \sqrt{\frac{t}{T}}, \tag{5}$$

а для обратного

$$\rho(t) = 2\pi a N \sqrt{1 - \frac{t}{T}} = kN \sqrt{1 - \frac{t}{T}} = \rho_{\max} \sqrt{1 - \frac{t}{T}}. \tag{6}$$

Из выражений (5) и (6) следует, что время пребывания пучка на n-м витке спирали составляет

$$\Delta t_n = \frac{2n - 1}{N^2} T. \tag{7}$$

4. Линейная скорость сканирующего пучка v_L, т. е. скорость, с которой ось пучка перемещается по поверхности образца, должна быть намного меньше скорости первичных ионов

$$v_L \ll \sqrt{\frac{2qU_{\text{уск}}}{m}}, \tag{8}$$

где q — заряд, m — масса бомбардирующего иона, $U_{\text{уск}}$ — ускоряющее напряжение.

Выполнение условия (8) дает возможность пренебречь эффектами сдвига фазы в процессе сканирования ионного пучка по поверхности образца.

5. Скорость распыления образца в любой точке на его поверхности прямо пропорциональна плотности ионного тока в этой точке, т. е. возможность деформации плоскости первоначальной поверхности вследствие образования микро- или макроскопических неровностей (поверхностной топографии) пренебрежимо мала. Это экспериментально подтверждается при распылении полупроводниковых и диэлектрических материалов [16].

6. Исходная поверхность образца однородная и идеально гладкая, а ионный пучок падает по нормали к поверхности.

Результаты вычислений и их обсуждение

Решение задачи математического моделирования профиля кратера распыления сводится в первую очередь к определению зависимости плотности ионного тока от координат точек растра.

Плотность ионного тока в окрестности точки P, расположенной на витке спирали C (рис. 1), можно представить в виде

$$J(r, \theta) = \frac{\Delta q}{2T\Delta s} = \frac{1}{2T}\int\limits_0^{2T} j\,[\,|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}(t)|\,]\,dt, \tag{9}$$

где Δq — суммарный ионный заряд, прошедший через площадку Δs за время $2T$.

Используя теорему косинусов, преобразуем выражение (9) к виду

$$J(r, \theta) = \frac{j_0}{2T}\int\limits_0^{2T} \exp\left\{\frac{r^2 + \rho^2(t) - 2r\rho(t)\cos[\varphi(t) - \theta]}{r_0^2}\right\} dt. \tag{10}$$

В дальнейшем для упрощения вычислений примем в качестве единицы времени T, а единицы длины — r_0. Тогда с учетом (5) и (6) получаем выражение

$$J(r, \theta) = \frac{j_0 \exp(-r^2)}{2}\int\limits_0^1 [F_1(t) + F_2(t)]\,dt, \tag{11}$$

где $F_1(t)$ и $F_2(t)$ — функции, соответствующие прямому и обратному ходу CP, причем

$$F_1(t) = \exp\left[(2\pi aN)^2 t - 4\pi aNr\sqrt{t}\cos\left(2\pi N\sqrt{t} - \theta\right)\right], \tag{12}$$

$$F_2(t) = \exp\left[(2\pi aN)^2(1 - t) - 4\pi aNr\sqrt{1-t}\cos\left(2\pi N\sqrt{1-t} - \theta\right)\right]. \tag{13}$$

Наличие подэкспоненциального гармонического множителя в функциях $F_1(t)$ и $F_2(t)$ приводит к тому, что интеграл (11) в явном виде не берется, поэтому интегрирование выражения (11) проводилось численным методом Симпсона [15] за ЭВМ ВУМС-128-013. Шаг интегрирования Δt выбирался равным $1/4N^2$ с тем, чтобы на первом витке спирали в соответствии с выражением (7) имелось хотя бы четыре расчетные точки. В процессе вычисления варьировалось количество витков N и степень перекрытия λ двух соседних витков

$$\lambda = \frac{2\pi a}{r_0} = \frac{k}{r_0}. \tag{14}$$

Расчеты показали, что достаточная однородность в профиле распределения плотности ионного тока достигается при $\lambda \leqslant 1$ (рис. 2). Отклонение в центре (кривая *2* на рис. 2) обусловлено особенностью поведения CP в начале координат и конечным шагом интегрирования Δt. Необходимо отметить и некоторую асимметрию по θ вследствие асимметрии спирали Архимеда. При $\lambda > 1$ характерно появление максимумов, отстоящих друг от друга на расстоянии $\Delta r = 2\pi a = k$ (кривая *1* на рис. 2).

Было установлено, что величина тангенса угла наклона кривой $J(r, \theta)$ к оси r практически не зависит от значений N и λ, а определяется характером распределения плотности ионного тока в исходном пучке. Величина J_0, подсчитанная для плоской части $J(r, \theta)$, оказывается равной

$$J_0 = \frac{j_0}{(\lambda N)^2}. \tag{15}$$

Приведем зависимость радиуса плоской части $r_{кр}$ профиля распределения плотности онного тока от количества витков N при $\lambda = 0.5$ (рис. 3). Значение $r_{кр}$ определялось на уровне

$0.99 J_0$. Забегая несколько вперед отметим, что выбор критерия $0.99 J_0$ базировался на данных работы [1], согласно которым разрешение по глубине $\Delta Z/Z$ при послойном анализе методом МСВИ в лучшем случае составляет 1—5 %.

Все предыдущие результаты, полученные в данной работе, касались профиля плотности ионного тока $J(r, \theta)$, усредненного по времени за период спиралевидной развертки $2T$. Переход к профилю кратера распыления можно осуществить согласно [1] по формуле

$$Z(r, \theta, t) = \frac{S_p t}{q C_0} J(r, \theta), \tag{16}$$

где Z — глубина кратера; S_p — коэффициент распыления образца; q — заряд бомбардирующего иона; C_0 — абсолютная концентрация атомов образца; t — время распыления, кратное $2T$.

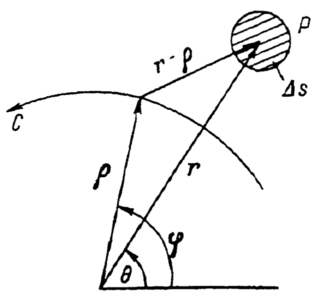
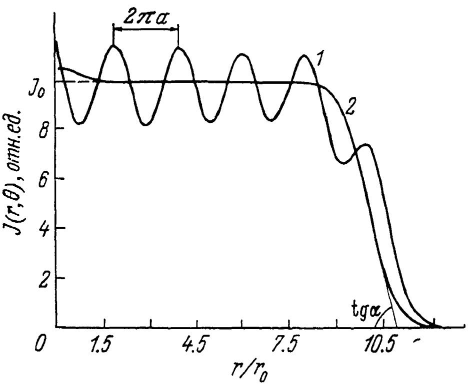


Рис. 1. К расчету плотности ионного тока $J(r, \tilde{\theta})$ в окрестности точки P.

Подобный переход возможен в том случае, если глубина кратера гораздо меньше диаметра ионного пучка [1], что обычно всегда реализуется при послойном анализе методом МСВИ [6]. Таким образом, профили кратеров распыления с точностью до постоянного множителя соответствуют профилям плотности ионного тока. С другой стороны, в работе [2] показано, что при соизмеримых величинах Z и r_0 эволюция профиля кратера в процессе распыления во многом обусловлена изменением величины S_p из-за изменения угла падения ионного пучка на стенки кратера. Этот подход к проблеме кратерообразования нашел дальнейшее развитие в работе [3]. Ситуация, в которой глубина кратера оказывается соизмеримой с диаметром



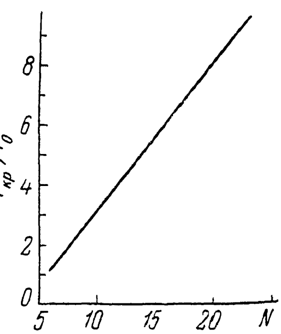


Рис. 2. Распределение плотности ионного тока $J(r, \tilde{\theta})$ по сечению растра в зависимости от параметров N и λ.

1 — $N=10$, $\lambda=2$; 2 — $N=30$, $\lambda=1/3$; $\theta=0$

Рис. 3. Зависимость радиуса плоской части дна кратера $r_{кр}$, определенного по критерию $0.99 J_0$, от количества витков спирали N при $\lambda=0.5$.

ионного пучка, реализуется в настоящее время только для жидкометаллических автоионных источников с субмикронными размерами r_0 [14]. Область применения таких источников в основном ограничена режимами получения изображений (микрограмм) исследуемой поверхности во вторичных электронах и ионах [16], поэтому в данной работе, посвященной вопросам математического моделирования профиля кратера распыления при послойном анализе методом МСВИ, этот случай не рассматривается.

Выводы

1. Предложен метод расчета профиля кратера распыления при детерминированном во времени законе развертки (спираль Архимеда).

2. Показано, что плоское однородное дно кратера образуется при параметре перекрытия соседних витков $\lambda \leqslant 1$.

3. Угол наклона стенок кратера практически не зависит от количества витков N и параметра λ.

4. В центре кратера наблюдается неоднородность по глубине, для исключения которой «электронная диафрагма» должна стробировать центральный участок с $\theta \leqslant 90°$.

5. Выбор оптимального количества витков спирали должен учитывать параметр перекрытия витков λ и зависимость плотности тока от N и λ. Например, при $\lambda = 0.5$ и $N = 10$ плоская часть дна кратера по критерию $0.99Z_0$ составляет около 65 % его площади, подсчитанной по ρ_{max}.

Дальнейшая работа предполагает практическую реализацию спиралевидной развертки в ионном микрозонде.

Список литературы

[1] *Wittmaack K.* // Appl. Phys. 1977. Vol. 12. N 1. P. 149—156.
[2] *Проценко А. Н.*, *Чайковский Э. Ф.* // Поверхность. 1985. № 9. С. 43—46.
[3] *Злобин В. А.*, *Коломейцев М. И.*, *Наумов А. Э.* // Поверхность. 1987. № 8. С. 144—146.
[4] Электронная и ионная спектроскопия твердых тел / Под ред. Л. Фирмэнса, Дж. Вэнника, В. Декейсера. М.: Мир, 1981. 467 с.
[5] *Черепин В. Т.* Ионный зонд. Киев: Наукова Думка, 1981. 328 с.
[6] *Волков С. С.*, *Толстогузов А. Б.* // Обзоры по электронной технике. Технология, организация производства и оборудование. М., 1988. Вып. 4 (1338). 48 с.
[7] *Magee C. W.* // Surf. Interf. Anal. 1982. Vol. 4. N 2. P. 35—41.
[8] *Чайковский Э. Ф.*, *Проценко А. Н.* // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 1. С. 158—161.
[9] *Гурьянов Г. М.* // Тр. ЛПИ им. М. И. Калинина. 1983. № 397. С. 57—61.
[10] *Hofer W. O.*, *Liebl H.*, *Roos G.*, *Staudenmaier G.* // Inter. J. Mass Spectr. Ion Phys. 1976. Vol. 19. P. 327—334.
[11] *Liebl H.* // Low-energy Ion Beams. Conf. series. Bristol; London, 1977. N 38. P. 266—281.
[12] *Усманов Р. Д.* // ПТЭ. 1988. № 4. С. 142—144.
[13] *Scholze Chr.*, *Frenzel H.*, *Maul J. L.* // J. Vac. Sci. Techol. A. 1987. Vol. 5. N 4. P. 1247—1249.
[14] *Денисов А. Г.*, *Волков С. С.*, *Толстогузов А. Б.* // Обзоры по электронной технике. Технология, организация производства и оборудование. М., 1987. Вып. 9 (1283). 61 с.
[15] *Бронштейн И. Н.*, *Семендяев К. А.* Справочник по математике. М.: Наука, 1967. 608 с.
[16] *Schulz F.*, *Wittmaack K.*, *Maul J. L.* // Rad. Effects. 1973. Vol. 18. N 2. P. 211—215.

Поступило в Редакцию
27 марта 1989 г.
В окончательной редакции
10 мая 1989 г.