

Таким образом, индий и галлий обнаруживают в сплаве висмут – сурьма акцепторное действие, а сера и теллур – донорное. Термическая обработка фольги при температуре ниже 180 °С не приводит к каким-либо существенным изменениям электрических свойств. Степень изменения свойств при температуре выше указанной зависит от длительности термической обработки.

1. Гицу Д.В., Голбан Т.М., Канцер В.Г., Мунтяну Ф.М. Явления переноса в висмуте и его сплавах с сурьмой. Кишинев, 1983.

2. Гусакова С.В., Демидчик А.В., Шепелевич В.Г. // Тезисы докладов XIII Российского симпозиума по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел. Черноголовка, 2003. С. 127.

3. Иванов Г.А., Сараев Ю.Н., Коришев В.И. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 2. С. 630.

4. Шепелевич В.Г., Гречанников Э.Е. // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2000. № 4. С. 99.

5. Демидчик А.В., Шепелевич В.Г. // Современные научные проблемы и вопросы преподавания теоретической и математической физики, физики конденсированных сред и астрономии: Сб. междунар. науч.-метод. конф. Брест, 2003. С. 22.

6. Демидчик А.В., Гуикинг Л. // НИРС-2003: Тез. докл. VIII Респ. науч.-техн. конф. студентов и аспирантов: В 2 ч. Мн., 2003. Ч. 2. С. 179.

7. Демидчик А.В., Шепелевич В.Г. // Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий. Обнинск, 2003. С. 11.

8. Демидчик А.В., Шепелевич В.Г. // Машиностроение: Респ. межвед. сб. науч. тр. Мн., 2003. № 19. С. 644.

9. Хансен М., Андерко К. Структуры сплавов: В 2 т. / Под ред. И.И. Новикова и И.Я. Рогельберга. М., 1962. Т. 1, 2.

Поступила в редакцию 18.02.2004.

Александр Владимирович Демидчик – аспирант кафедры физики твердого тела. Научный руководитель – В.Г. Шепелевич.

Василий Григорьевич Шепелевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики твердого тела.

УДК 621.793.7

А.Ф. КОМАРОВ

ИОННО-АССИСТИРУЕМОЕ ОСАЖДЕНИЕ СЛОЕВ МЕТАЛЛОВ В ПРОЦЕССЕ РАСПЫЛЕНИЯ КОНИЧЕСКИХ МИШЕНЕЙ ИОННЫМ ПУЧКОМ

The featured and easy-to-use IBAD technique was proposed in order to realise in situ ion implantation and different material layer deposition on metals by the same ion beam. The developed simulation software enabled us to describe IBAD process as well as to calculate the radial and depth distributions of deposited/implanted atoms. These programs are especially effective ones to describe and control a procedure for ion beam assisted sputter coating of the inner walls of tubes. There is a reasonable agreement of theoretical predictions and experimental results for the deposition efficiency coefficient.

Ассистируемое ионным облучением осаждение (АИОО) слоев различных материалов последние годы широко используется для модификации механических, электрических, оптических, трибологических, барьерных, коррозионных и каталитических свойств приповерхностных слоев [1–3]. Основное отличие АИОО от обычной ионной имплантации заключается в том, что одновременно с ионным облучением имеет место осаждение дополнительной атомной или молекулярной компоненты из магнетронного, ионно-плазменного, дугового или иного источника, а также из остаточной атмосферы в приемной камере имплантатора ионов.

Профили распределения по глубине атомов наносимой и внедряемой компонент при АИОО определяются не только скоростью осаждения первой компоненты и кинетики атомных столкновений, но и процессами, связанными с накоплением примеси в мишени, распылением ее поверхности диффузией примеси, атомным перемешиванием (баллистическая и диффузионная составляющие процесса перемешивания), образованием новых фаз и радиационным распуханием покрытия и подложки.

Однако следует отметить, что широкое применение АИОО в ряде современных технологий (например, для улучшения эксплуатационных свойств металлических поверхностей) требует обеспечения процессов достаточно дорогостоящей и энергопотребляющей сложной техники, такой как ионный ускоритель плюс магнетронный, дуговой, ионно-плазменный или иной источник. Поэтому целесообразным и актуальным, на наш взгляд, является поиск нетрадиционных оригинальных технических и конструктивных решений, позволяющих упростить и удешевить технологию, сохранив основные достоинства процесса АИОО.

Конструкционные особенности системы для АИОО и моделирование процессов осаждения слоев

В работах [4–6] нами предложена новая оригинальная процедура модификации поверхностей металлов (в частности, меди с точки зрения приложений в инженерии электрических переключающих устройств) и иных материалов с помощью метода АИОО, в рамках которого *in situ* реализуется имплантация ионов (например, азота) и напыление металла (например, золота, никеля и др.) тем же ионным пучком. Мишень для распыления в виде усеченного конического объекта из требуемого или любого другого материала с нанесенным слоем необходимого материала является основным конструктивным узлом. Диафрагма в верхней части конического устройства, совпадающая по диаметру с подложкой (образцом), служит для обеспечения одного из возможных режимов: ионно-ассистируемого осаждения (без диафрагмы), нанесения слоя (с диафрагмой) или циклического (повторяющегося) нанесения с последующим АИОО и ионно-лучевым перемешиванием слоев. Таким образом, при открытой диафрагме центральная часть пучка воздействует только на поверхность образца, в то время как периферийная его часть служит для распыления стенки конуса. Некоторые распыленные частицы достигают поверхности образца, т. е. в процессе ионного облучения усеченного конуса мы одновременно имеем дело с процессами ионной имплантации, распыления и осаждения стенки конуса.

Моделирование АИОО слоев условно разделим на три относительно независимые задачи:

а) моделирование пространственного распределения потока распыленных частиц конической мишени как функции азимутального и полярного угла (из-за наклонного падения ионного пучка на распыляемую мишень);

б) вычисление радиального распределения потока распыленных частиц, достигающих поверхности подложки в единицу времени;

в) моделирование процесса ионно-ассистируемого осаждения слоя на подложку с учетом таких процессов, как распыление самой подложки с наносимым слоем, диффузия примеси, движение границы поверхности за счет нанесения и распыления. Скорость осаждения пленки вычисляется на основании выполнения процедур а) и б).

Задача а) решалась с применением программы SATVAL последней модификации [7]. Задача б) выполнялась по разработанной нами оригиналь-

ной программе SDI [4–6]. И наконец, часть в) этой работы производилась на основе программного комплекса, созданного нами для моделирования процессов ионно-ассистируемого осаждения (в рамках традиционной процедуры) [2, 8, 9] и высокодозной ионной имплантации в слоистые структуры (программа BEAM2HD) [10, 11].

Разработанный процесс моделирования позволяет получать информацию о радиальном и глубинном распределении осажденных/внедренных атомов как функции типа ионов и их энергии, флюенса и геометрии распыляемой конической поверхности.

Для обеспечения эффективности процедуры моделирования поверхность распыляемой мишени (конуса) и образца делится на систему колец одинаковой площади для того, чтобы получить равные флюенсы на каждое кольцо. Затем обрабатываются и анализируются двухугловое пространственное распределение распыляемых ионным пучком частиц (полученное по программе SATVAL [7]) для подсчета числа этих частиц на каждом кольце образца и полное радиальное распределение осажденных атомов в общем случае. Данная процедура выполняется с помощью программы SDI [4].

Результаты и их обсуждение

Эффективность обсуждаемого способа нанесения покрытий и модификации их ионным облучением зависит от материала конической мишени, геометрии конуса, сорта и энергии ионов, температуры подложки (в данных исследованиях – комнатная).

Для упрощения картины привяжем теорию к эксперименту выполним по интегральной (эффективной) толщине осажденного слоя $d_{эфф}$ (атом/см²):

$$d_{эфф} = \int_0^{\infty} N(x) dx, \quad (1)$$

где $N(x)$ – концентрационный профиль распределения осажденных/имплантированных атомов.

Весьма существенным фактором является масса и энергия бомбардирующих ионов. Рис. 1 иллюстрирует количество осажденных атомов золота на единицу площади подложки при облучении усеченной конической мишени, покрытой золотом, ионами N_2^+ , Ar^+ , Kr^+ , Xe^+ как функции энергии при закрытой диафрагме. Как и при нормальном падении ионов на мишень [3], наблюдается достаточно сильная зависимость коэффициента распыления мишени от энергии ионов. Однако в нашем случае на суммарный эффект накладывается еще и энергетическая зависимость углового (пространственного) распределения частиц. В общем случае оптимальные для нанесения более толстых слоев энергии ионов сдвигаются в

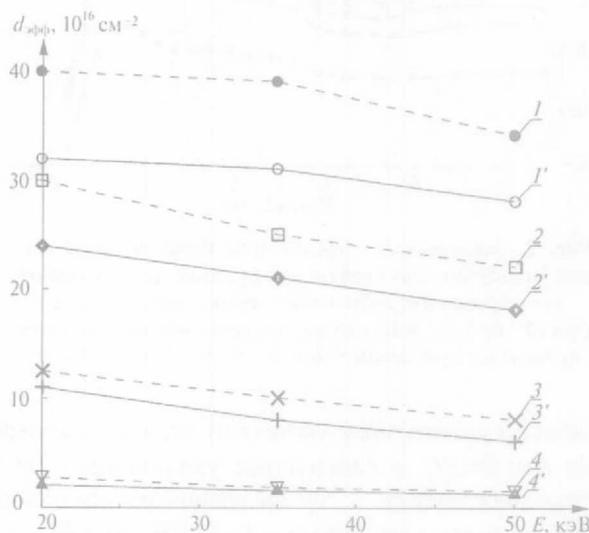


Рис. 1. Зависимость эффективной толщины наносимой золотой пленки от сорта ионов и их энергии для $D=2 \cdot 10^{17}$ ион/см²:

1, 1' – Xe^+ , 2, 2' – Kr^+ , 3, 3' – Ar^+ , 4, 4' – N_2^+ ; сплошная линия – толщина для центра образца; штриховая – максимальная толщина слоя

конической мишени, покрытой золотом, ионами N_2^+ , Ar^+ , Kr^+ , Xe^+ как функции энергии при закрытой диафрагме. Как и при нормальном падении ионов на мишень [3], наблюдается достаточно сильная зависимость коэффициента распыления мишени от энергии ионов. Однако в нашем случае на суммарный эффект накладывается еще и энергетическая зависимость углового (пространственного) распределения частиц. В общем случае оптимальные для нанесения более толстых слоев энергии ионов сдвигаются в

район более низких, чем характерные случаю нормального падения частиц энергий.

Как и при распылении материалов ионами в случае нормальной бомбардировки, эффективность распыления мишени и соответственно нанесения пленки зависит от массы ионов. Для нанесения относительно более толстых пленок с лучшей однородностью по диаметру образца предпочтительными являются пучки тяжелых ионов (Ar^+ , Kr^+ или Xe^+) (см. рис. 1). Так, эффективность нанесения покрытий ионами Xe^+ по сравнению с N_2^+ на порядков больше.

В общем случае более информативным, чем $d_{\text{эфф}}$, является коэффициент эффективности нанесения слоя K :

$$K \left(\frac{\text{атом}}{\text{ион}} \right) = \frac{d_{\text{эфф}} S_1}{S_2 D}, \quad (2)$$

где S_1 и S_2 – площади открытых частей входного и выходного торцов усеченного конуса, а D – флюенс. Этот коэффициент интегрально учитывает оптимальность выбора геометрии эксперимента, сорта и энергии ионов.

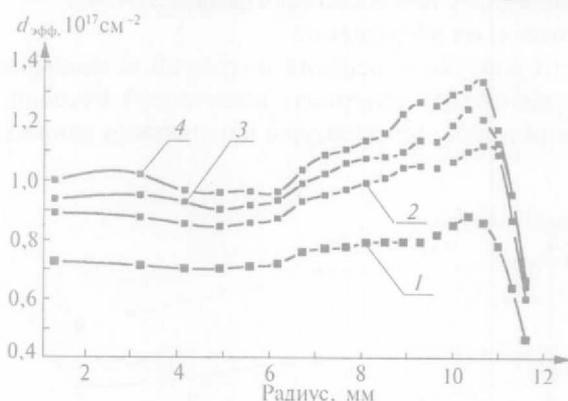


Рис. 2. Зависимость эффективной толщины осажденной вольфрамовой пленки как функция расстояния от оси образца для случая облучения ионами аргона: $D=3 \cdot 10^{17} \text{ Ar}^+/\text{см}^2$, $J=8,5 \text{ мкА}/\text{см}^2$ под разными углами (θ) влета пучка ионов в усеченный конус: 1 – 5° , 2 – 15° , 3 – 25° , 4 – 30°

ложки существенно зависят от угла θ : максимальная толщина была получена при $\theta=30^\circ$, а дальнейшее увеличение угла влета привело к уменьшению толщины пленки. С точки зрения равномерности толщины наносимых пленок оптимальным является $\theta=5 \pm 10^\circ$ (см. рис. 2).

При увеличении угла влета пучка ионов в конус растет число распыленных атомов (со стенок конуса) не на подложку, а на диафрагму, поэтому целесообразно закреплять подложку снизу. В нашем случае, даже когда $\theta=20^\circ$, большая часть распыленных атомов W со стенок конуса осаждается снизу на диафрагме. При этом путем поворота на 180° диафрагмы с подложкой в направлении пучка ионов можно легко осуществлять циклический режим осаждения пленки с последующим баллистическим и радиационно-стимулированным перемешиванием ее с подложкой.

Рис. 3 иллюстрирует количество осажденных атомов W на единицу площади подложки при облучении ионами Ar^+ с энергией 70 кэВ при открытой диафрагме как функции расстояния от оси образца. Осаждаемая на

На рис. 2 приведена зависимость эффективной толщины осажденной вольфрамовой пленки от угла влета пучка ионов Ar^+ с энергией $E=70 \text{ кэВ}$ в конус. Область образца вблизи стенки конуса характеризуется максимальной толщиной пленки. Результаты расчетов толщины наносимой пленки для $5^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$ показывают относительно слабое влияние величины угла (менее 20 %) для центральной области образца. Однако изменения толщины пленки вдоль диаметра под-

медную мишень вольфрамовая пленка непрерывно перемешивалась пучком Ag^+ . Экспериментальный профиль распределения атомов W в Cu получен методом RBS, а спектры RBS снимались в 7 точках вдоль радиуса мишени (см. рис. 3). В целом соответствие результатов моделирования с экспериментом можно считать удовлетворительным. В случае сильного проявления радиационно ускоренной диффузии осаждаемой примеси это соответствие может ухудшаться, так как отсутствуют точные данные для коэффициента диффузии при различных режимах ионного облучения. Отличие экспериментальных значений $d_{эфф}$ по сравнению с результатами моделирования для периферийной от центра части мишени может быть обусловлено такими факторами, как шероховатость поверхности распыляемого конуса, а также плохая осевая симметрия. В свою очередь, при моделировании не учтено изменение энергии связи поверхностных атомов по мере ионного облучения стенки конуса за счет накопления внедряемых атомов в ней. Моделирование выполняется для идеально гладкой поверхности конуса, а энергия связи поверхностных атомов U_0 , используемая в программе SATVAL [7], выбирается величиной постоянной для данного типа материала. В случае экспериментов на конусе с весьма гладкой поверхностью, полученной электролитическим осаждением золота, наблюдается лучшее соответствие результатам моделирования.

Таким образом, создана система моделирования процессов ионной имплантации и осаждения слоев различных материалов на металлы одним и тем же пучком. Данный комплекс программ позволяет описать процесс ионно-ассистируемого осаждения слоев, а также вычислить радиальное и глубинное распределение осажденных/имплантированных атомов. Наблюдается удовлетворительное соответствие теоретических результатов с экспериментальными.

Работа поддержана грантами БФФИ (№ Ф03-003 и № Ф04-057).

Автор приносит благодарность П.В. Жуковскому и Ч. Карвату за проведение имплантации в эксперименте, А.А. Комарову – за съемку спектров RBS.

1. Ensinger W. // Surface and Coat. Technol. 1996. Vol. 84. P. 363.
2. Komarov F.F., Komarov A.F., Mironov A.M. // Nucl. Instr. and Meth. 1996. Vol. B115. P. 505.
3. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твердые тела. Мн., 2001.
4. Komarov A.A., Komarov A.F., Pilko V.V. et al. // Proc. of the Fourth Intern. Conf. IRS-2001. Minsk, 2001. P. 344.

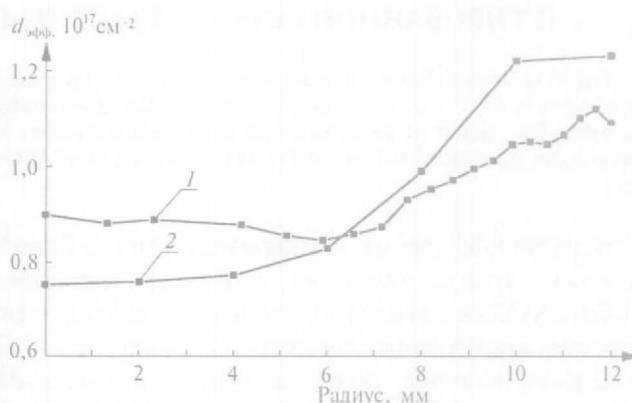


Рис. 3. Зависимость эффективной толщины осажденной вольфрамовой пленки как функция расстояния от оси образца. Условия ионной бомбардировки конической вольфрамовой системы ионами аргона: $E=70$ кэВ, $D=3 \cdot 10^{17} \text{ Ag}^+/\text{см}^2$, $J=8,5 \text{ мкА}/\text{см}^2$, $\theta=15^\circ$: 1 – экспериментальные данные (RBS), 2 – расчетные данные, полученные на основании программы SDI

5. Комаров Ф.Ф., Комаров А.А., Жуковски П. и др. // ЖТФ. 2003. Т. 7. № 5. С. 109.
6. Komarov F.F., Kamarou A.A., Zukowski P. et al. // Vacuum. 2003. Vol. 71. P. 215.
7. Sielanko J., Szysko W. // Nucl. Instr. and Meth. 1986. Vol. B16. P. 340.
8. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф., Миронов А.М. // Поверхность. 1997. № 6. С. 68.
9. Komarov A.F., Komarov F.F., Zukowski P. et al. // Nukleonika. 1999. Vol. 44. № 2. P. 363.
10. Комаров А.Ф., Комаров Ф.Ф., Шукан А.Л. и др. // Весці НАН Беларус Сер. фіз.-тэхн. 1999. № 3. С. 19.
11. Komarov A.F., Komarov F.F., Zukowski P. et al. // Vacuum. 2001. Vol. 63. № 4. P. 495.

Поступила в редакцию 18.02.2004.

Александр Фадеевич Комаров – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ.

УДК 53:621.38

А.В. БОРЗДОВ, В.О. ГАЛЕНЧИК

САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ И ИХ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ СЕЛЕКТИВНО-ЛЕГИРОВАННОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$

The influence of aluminium content x in $Al_xGa_{1-x}As$ layer on electron energy levels and their populations in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ heterostructure quantum well at temperatures $T = 77$ and 300 K is examined. The system of the Schrodinger and Poisson equations is solved self-consistently taking into account the dependence of electrophysical properties of $Al_xGa_{1-x}As$ layer on aluminium content x .

В настоящее время в микроэлектронике большое внимание уделяется полевым транзисторам на селективно-легированных гетероструктурах $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. Известно, что электронные и электрофизические свойства этих структур должны зависеть от состава слоя $Al_xGa_{1-x}As$ [1].

Оценим влияние доли x алюминия в $Al_xGa_{1-x}As$ на значения энергий и заселенностей двумерных электронных подзон, образующихся в потенциальной яме у границы гетероперехода при температурах $T = 77$ и 300 К путем численного самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона для соответствующей гетероструктуры.

Состояния электронов в потенциальной яме можно описать волновой функцией вида [1, 2]

$$\Psi_i(z, \mathbf{r}) = \psi_i(z) \exp(-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}),$$

где \mathbf{k} и \mathbf{r} – двумерные волновой вектор и радиус-вектор в плоскости, параллельной границе гетероперехода, $\psi_i(z)$ – огибающая волновой функции электронов i -й подзоны. Ось z направлена в глубину слоя $GaAs$ перпендикулярно плоскости гетероперехода.

Запишем систему уравнений Шредингера и Пуассона, решая которую можно рассчитать огибающие волновых функций электронов и энергии подзон в потенциальной яме гетероструктуры. При этом учтем, что от доли алюминия зависят эффективная масса электрона в $Al_xGa_{1-x}As$, величина диэлектрической проницаемости $Al_xGa_{1-x}As$ и разрыва дна зоны проводимости на границе гетероперехода. Тогда система уравнений Шредингера и Пуассона будет иметь вид [3, 4]