

ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ПОСЛОЙНОГО АНАЛИЗА

*В.В. Бобков,
Д.Л. Рябчиков,
В.В. Цуканов*

*Харьковский государственный университет,
Харьков 310108, пр. Курчатова 31.*

Разработано программное обеспечение обработки результатов послойного анализа, получаемых методом масс — спектрометрии вторичных ионов. Получены экспери-

ментальные результаты, определяющие эффективность разработанной методики обработки результатов послойного анализа.

В последнее время продолжает возрастать количество работ посвященных исследованию поверхности твердого тела. Это связано с бурным ростом таких отраслей промышленности как микроэлектроника, сверхчистые технологии и так далее. При исследованиях поверхности важное значение имеет определение состава твердого тела и распределения примесей в приповерхностной зоне, которое проще всего осуществить с помощью методов, основанных на эрозии образца под действием потока частиц средних энергий. Среди таких методов наиболее распространенным является масс-спектрометрия вторичных ионов (МСВИ), и базирующийся на его основе послойный анализ (ПА) для определения распределения профиля концентрации примеси по глубине.

Целью данной работы является разработка методики, учитывающей факторы, искажающие форму профиля концентрации примеси по глубине, и перевод ее в реальную концентрацию. Известно, что процесс распыления не просто ведет к регулярному последовательному удалению атомных слоев, а сопровождается существенными повреждениями в приповерхностной области, включая смещение атомов. В тоже время может изменяться морфология поверхности, поскольку, например, может расплыться второй атомный слой при частичном сохранении первого. Существующие причины ухудшения послойного разрешения и искажения профилей концентрации можно разделить на два класса : аппаратные и физические.

Аппаратные.

- Пучок первичных ионов имеет неравномерную по радиусу плотность тока. Образующийся кратер травления, соответственно, не имеет прямоугольной формы, что обуславливает получение информации не только со дна кратера, но и с его стенок [1].
- Материал со стенок кратера, распыляемый первичными ионами, может повторно осаждаться в центре кратера, снова расплыться и анализироваться [2].
- Эффект “галло” [2]. За счет процессов перезарядки при столкновениях первичных ионов с атомами остаточного газа и стенками прибора будут образовываться нейтральные частицы. Падая на поверхность образца, они также будут выбивать вторичные ионы и поставлять информацию со всех частей кратера.
- Эффект памяти [3]. Материал из кратера осаждается на оптике и затем вторично расплыется другими ионами и нейтралями, и далее анализируется

Кроме того, существует адсорбция атомов остаточной атмосферы на периферии кратера. Существенной проблемой остается моноэнергитичность и чистота первичного пучка, перекрытие ионных пиков при недостаточно высоком разрешении прибора.

Физические.

- Микротопография поверхности [4]. За счет межзеренных и поверхностных дефектов, которые распыляются быстрее, увеличиваются микронеровности поверхности. Это обуславливает для большинства материалов уширение профиля концентрации за счет топографии, которое достигает 5 – 10 % от анализируемой толщины.
- Атомное перемешивание [5, 6]. В работе [5] Андерсен показал, что фактором, ограничивающим послойное разрешение в процессе распыления, является разупорядочение объекта бомбардирующими ионами до акта распыления. Основным механизмом разупорядочения — это перемешивание атомов за счет соударений [6], которое качественно можно разделить на имплантацию атомов отдачи и каскадное перемешивание. Согласно [5], прямое смещение атома мишени налетающим ионом есть имплантация путем отдачи, тогда как косвенные процессы, вовлекающие и другие атомы мишени, можно назвать каскадным перемешиванием. По этой схеме имплантация атомов отдачи будет вызвать сдвиг и расширение исходного профиля, а каскадное перемешивание приводит, главным образом, к расширению профиля концентрации. С перемешиванием атомов за счет соударений отчасти связано селективное распыление, при котором состав распыленного потока может отличаться от состава поверхностного слоя. Такая связь проистекает из того, что компоненты мишени обладают различными массами и энергиями связи, отличие которых порождает различающиеся коэффициенты распыления и, следовательно, происходит обеднение поверхности легкораспыляемой компонентой, в отличие от объема [7].
- Сегрегация [8]. При наличии сегрегации на поверхности образуются отдельные фазы, что препятствует достижению стационарного состояния распыления.
- Радиационно-ускоренная диффузия (или радиационно-стимулированная диффузия) [9]. При ионной бомбардировке поверхности происходит перестройка первоначального профиля концентрации компонентов за счет образования радиационных дефектов, прежде всего структурных вакансий.

Поставленная задача количественной обработки результатов послойного анализа потребовала привлечения современных теоретических исследований процесса ионного распыления и образования вторичных ионов. В результате алгоритм строился в следующих предположениях :

1. Алгоритм верен для бинарных систем, т.е. предусматривается, что в веществе a , имеется профиль концентрации вещества b . Причем должно выполняться :

$$\text{Max}(C_a) \gg \text{Max}(C_b), \quad (1)$$

где C_a — концентрация вещества a , C_b — концентрация вещества b .

2. Мишень должна быть или аморфной, или поликристаллической для того, чтобы отсутствовали матричные эффекты распыления.
3. Распределение плотности тока пучка по радиусу должно иметь вид гауссианы, т.е. подчиняться распределению вида :

$$J(r) = J_0 e^{-\frac{r^2}{r_0^2}}, \quad (2)$$

где J_0 - плотность тока в центре пучка,

r_0 - эффективный радиус пучка,

r - расстояние до центра пучка.

4. Пучок первичных ионов должен быть достаточно чистым, состоять из одного сорта бомбардирующих частиц и обладать моноэнергитичностью.
5. Угол между направлением первичного пучка и нормалью к поверхности должен находиться в пределах от 0 до 45 градусов, чтобы угловую зависимость коэффициента распыления можно было бы аппроксимировать в виде :

$$Y_{\alpha} = \frac{Y_0}{\cos \alpha}, \quad (3)$$

где α — угол между первичным пучком и нормалью к поверхности,

Y_{α} - значение коэффициента распыления при угле α ,

Y_0 - значение коэффициента распыления при угле 0° .

6. Мишень должна представлять собой твердый раствор вещества b в веществе a , для того, чтобы не образовывалось соединений, которые искажали бы значение энергии связи веществ в мишени.
7. Концентрация вещества b должна зависеть только от глубины.
8. Коэффициент распыления и соответственно скорость распыления не зависит от концентрации вещества b .

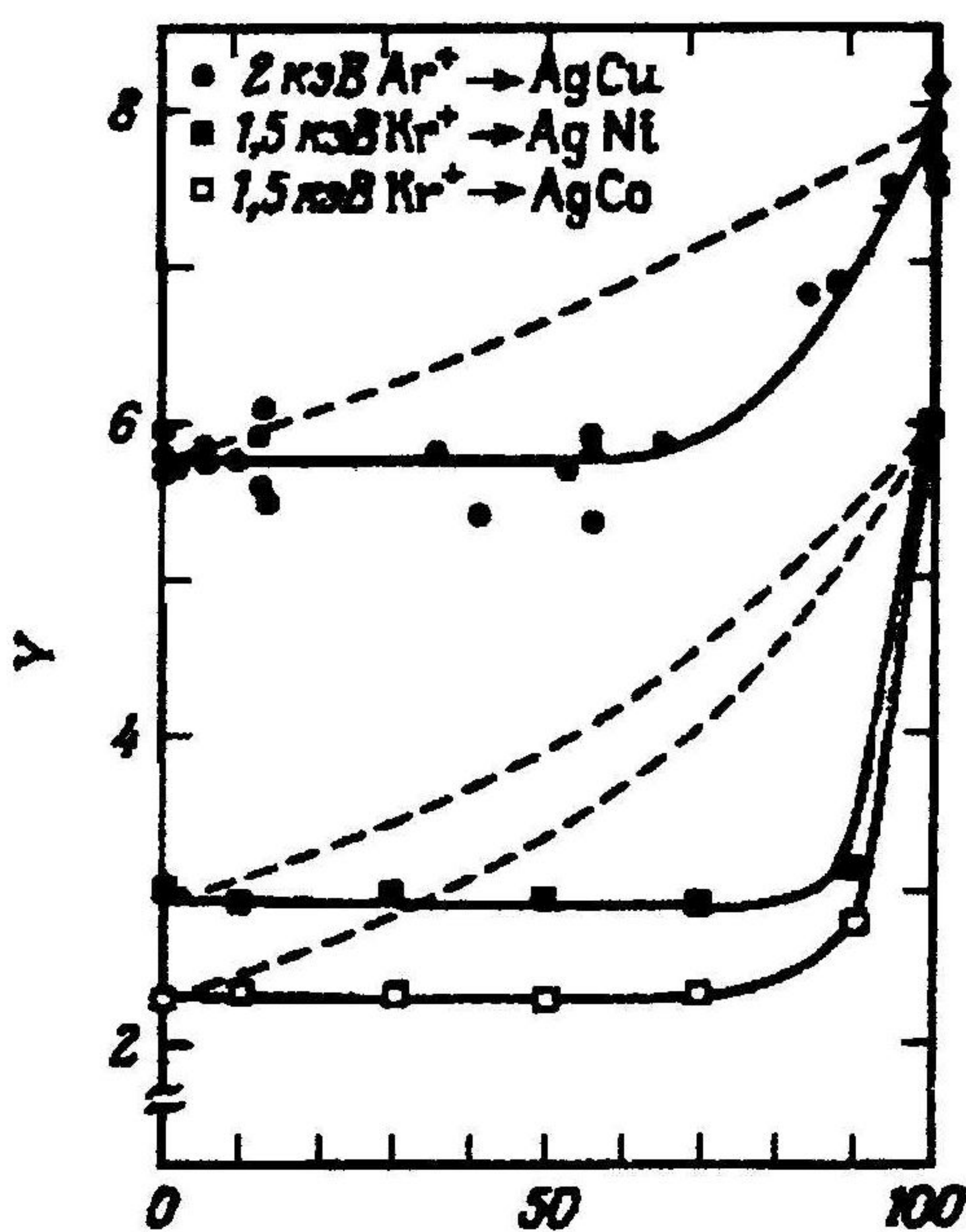


Рис.1. Зависимость коэффициента распыления в двухкомпонентной мишени.

Это предположение нуждается в обосновании. В связи с тем, что мы работаем в области малых концентраций вещества b и не образуется соединений $a_x b_y$, зависимость коэффициента распыления от концентрации можно представить в виде изображенном на рис. 1 (данные [10]). На этом рисунке представлены данные о зависимости коэффициента распыления материала от концентраций в бинарной системе твердого расплава. По оси X объемная концентрация Ag, %. Кривая 1 — AgCo, бомбардируемый 1,5 кэВ Kr⁺; 2 — AgNi, бомбардируемый 1,5 кэВ Kr⁺. Видно, что коэффициент распыления до достаточно высоких концентраций остается на уровне трудно распыляемого компонента и лишь при концентрациях порядка 80 % начинает возрастать до значения коэффициента распыления легкораспыляемого компонента. В связи с этим, в этой работе рассматриваются системы, матрица которых распыляется хуже чем примесь, и для чистых веществ можно записать :

$$Y_{\text{матрицы}} < Y_{\text{примеси}} \quad (4)$$

9. Вероятность вторичной ионизации считаем пропорциональной расчетной с масштабным множителем A , который у матрицы и у примеси одинаков, т.е. :

$$\begin{aligned} \beta_{\text{им}} &= A\beta_{\text{рм}} \\ \beta_{\text{ип}} &= A\beta_{\text{рп}} \end{aligned} \quad (5)$$

где $\beta_{\text{им}}, \beta_{\text{ип}}$ — вероятность вторичной ионизации истинная;

$\beta_{\text{рм}}, \beta_{\text{рп}}$ — вероятность вторичной ионизации расчетная.

Исходя из вышеизложенного предположения, в модели используется для работы отношение расчетных вероятностей вторичной ионизации, которое равно отношению истинных вероятностей вторичной ионизации :

$$\frac{\beta_{\text{им}}}{\beta_{\text{ип}}} = \frac{\beta_{\text{рм}}}{\beta_{\text{рп}}}; \quad (6)$$

При обработке полученных экспериментальных данных производятся следующие шаги:

Осуществляется перевод интенсивностей тока вторичных ионов из выходного формата масс-спектрометра (вольты) в число ионов данного сорта путем деления на коэффициент усиления ВЭУ и распространенность данного изотопа.

По полуэмпирической теории Юдина [11] находятся коэффициенты распыления матрицы и примеси :

$$Y(E) = Y_{\max} \frac{2(E / E_{\max})^{1/2}}{1 + E / E_{\max}}, \quad (7)$$

где

$$Y_{\max} = \Lambda(Z_1, Z_2) \frac{\pi \cdot N a^2}{F E_s}, \quad (8)$$

$$F = \frac{\varepsilon}{E} = \frac{6,92 \cdot 10^6 a M_2}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)} \text{ эВ}^{-1}, \quad (9)$$

N — концентрация атомов мишени,

E_s — энергия сублимации,

a — радиус экранирования Томаса — Ферми,

$\Lambda(Z_1, Z_2)$ — эмпирическая зависимость атомных номеров Z_1 и Z_2 .

Вычисляются параметры распределения плотности тока по радиусу исходя из того, что :

$$I = \pi \cdot r_0^2 j_{\text{центра}}, \quad (10)$$

где I — полный ионный ток пучка,

$j_{\text{центра}}$ — плотность тока в центре пучка.

Вычисляются, исходя из теории Шроера, коэффициент вторичной ионизации [12] и осуществляется переход от количества вторичных ионов к количеству вторичных частиц.

Находим скорость распыления из выражения предложенного Черепиным в работе [13]:

$$V_0 = j_0 Y / eN, \quad (11)$$

где j_0 — плотность тока в центре пучка,

N — число частиц в единице объема,

Y — коэффициент распыления.

Используя методику Хоффмана, предложенную в работе [14], учитывается кратерный эффект, путем решения дифференциального уравнения :

$$f(t) = \frac{d}{dt} (tc(t)), \quad (12)$$

где $f(t) = \pi \cdot r_0^2 V_0 c_0(z) K$,

$c_0(z)$ — зависимость концентрации от глубины,

$c(t)$ — зависимость количества распыленных частиц от времени.

Используя теорию Линхарда [15] об учете упругих и неупругих потерь, находим пробег первичного иона в мишени R и параметр уширения профиля концентрации α , и затем решается интегральное уравнение :

$$C_{\Pi_1}(x) = \int_{-r}^{+r} \frac{1}{\sqrt{2\alpha^2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\alpha^2}\right) C_{\Pi_2}(x') dx', \quad (13)$$

где C_{Π_1} — измеряемый профиль примеси,

C_{Π_2} — исходный профиль примеси.

Решая интегральное уравнение, получаем истинный профиль концентрации.

Был разработан алгоритм, реализующий обработку данных послойного анализа, и написана программа на языке Turbo Pascal 6.0. Программа функционально состоит из следующих блоков :

Блок ввода данных. Обеспечивает ввод в программу данных о исследуемых веществах, амплитудах токов вторичных ионов, условиях эксперимента.

Блок предварительной обработки. Блок осуществляет перевод интенсивностей тока вторичных частиц из выходного формата масс-спектрометра в число ионов данного сорта.

Блок учета кратерного эффекта. Блок учитывает искажение профиля концентрации, вносимое кратерным эффектом.

Блок учета каскадного перемешивания и атомов отдачи. Блок восстанавливает исходный профиль концентрации.

В качестве экспериментальной установки использовался прибор на базе серийного масс-спектрометра MS-7201M. В качестве образцов для исследования были выбраны пленки меди, нанесенные на никель, и пленки углерода, нанесенные на медь. Система Cu — Ni была выбрана в связи с тем, что эти два материала безгранично растворяются друг в друге и при этом не образуют химических и интерметаллических соединений. Исходя из этого, было приготовлено в вакуумном универсальном poste ВУП — 5 два вида образцов : медная пленка на подложке из никеля, полученная испарением, и такая же пленка, отожженная при температуре 300 °С в течении 15 минут.

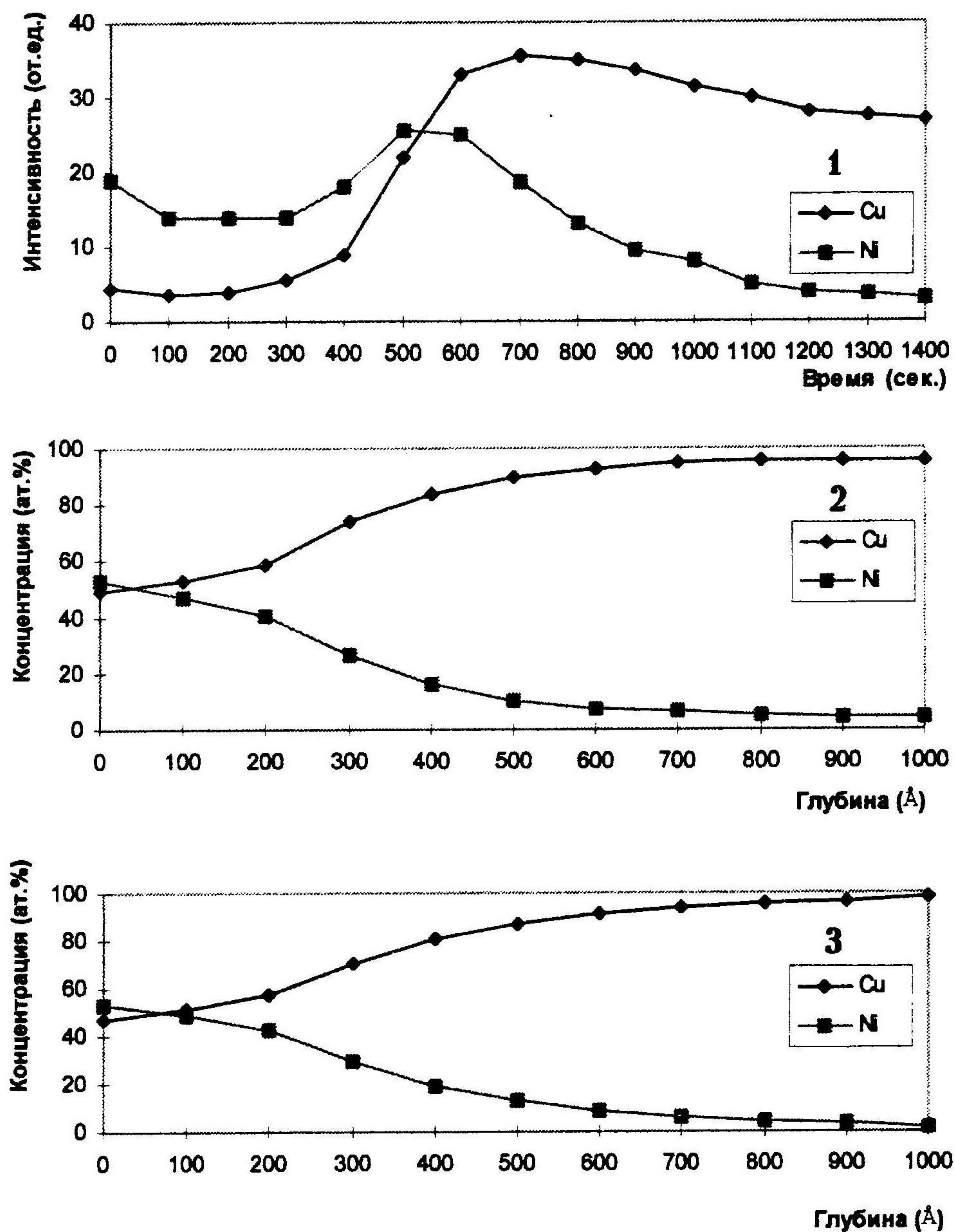


Рис.2. Система Cu — Ni отожженная при 300 °С.

- 1) Зависимость интенсивности тока вторичных ионов от времени.
- 2) Зависимость концентрации от глубины после учета кратерного эффекта.
- 3) Зависимость концентрации от глубины после учета каскадного перемешивания и атомов отдачи.

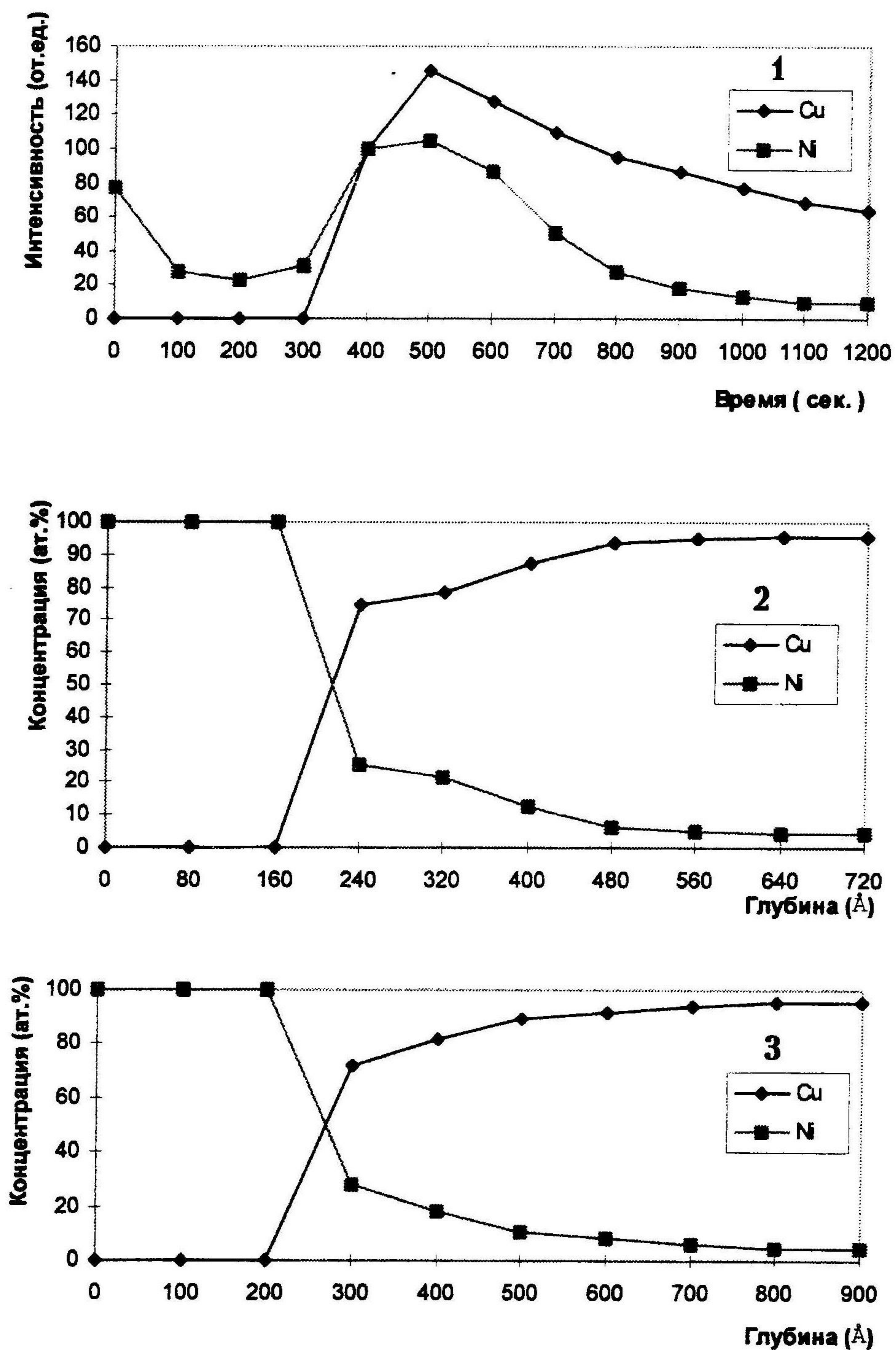


Рис.3. Система Cu – Ni не отожженная.

- 1) Зависимость тока вторичных ионов от времени.
- 2) Зависимость концентрации от глубины после учета кратерного эффекта.
- 3) Зависимость концентрации от глубины после учета каскадного перемешивания и атомов отдачи.

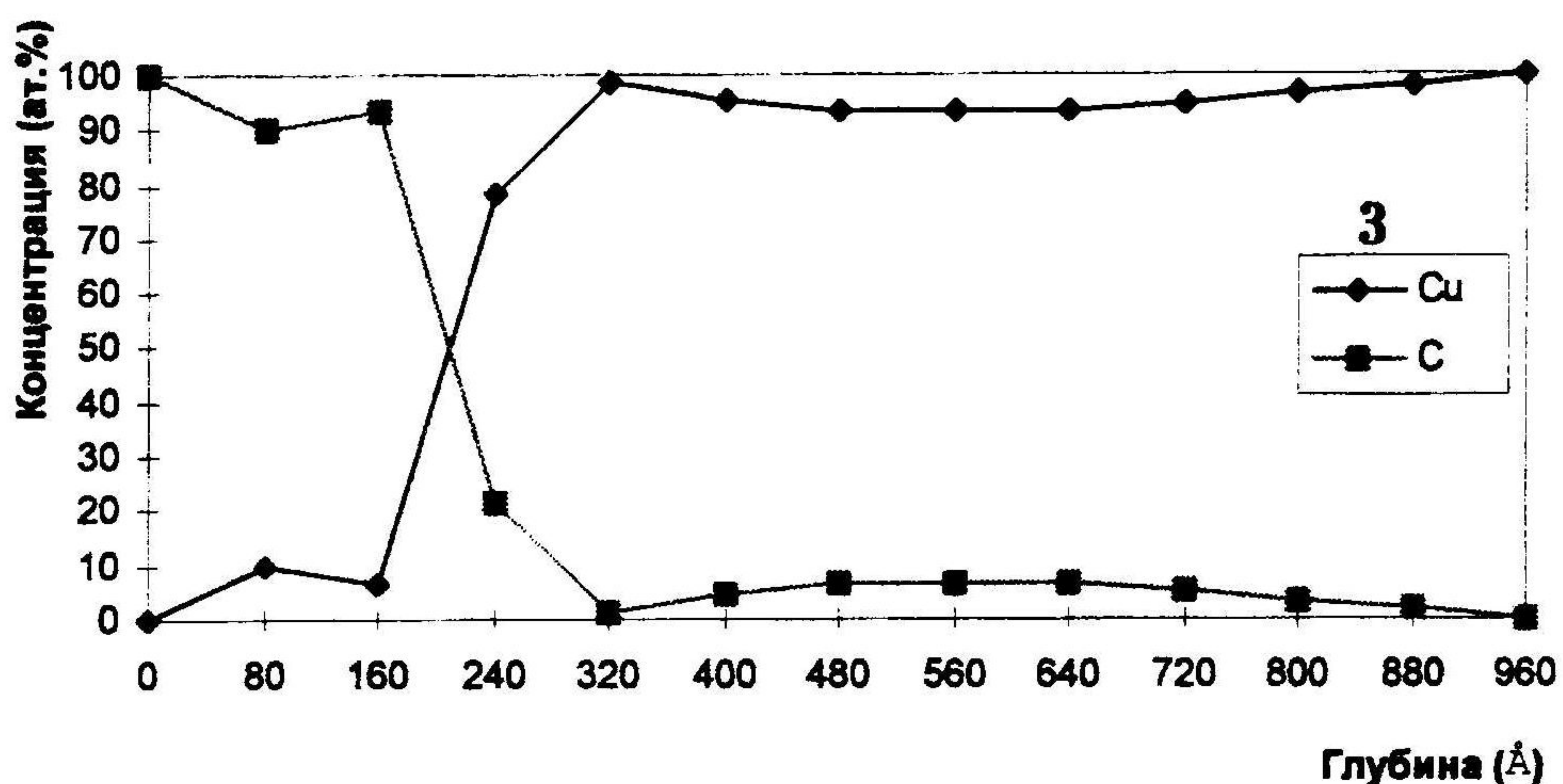
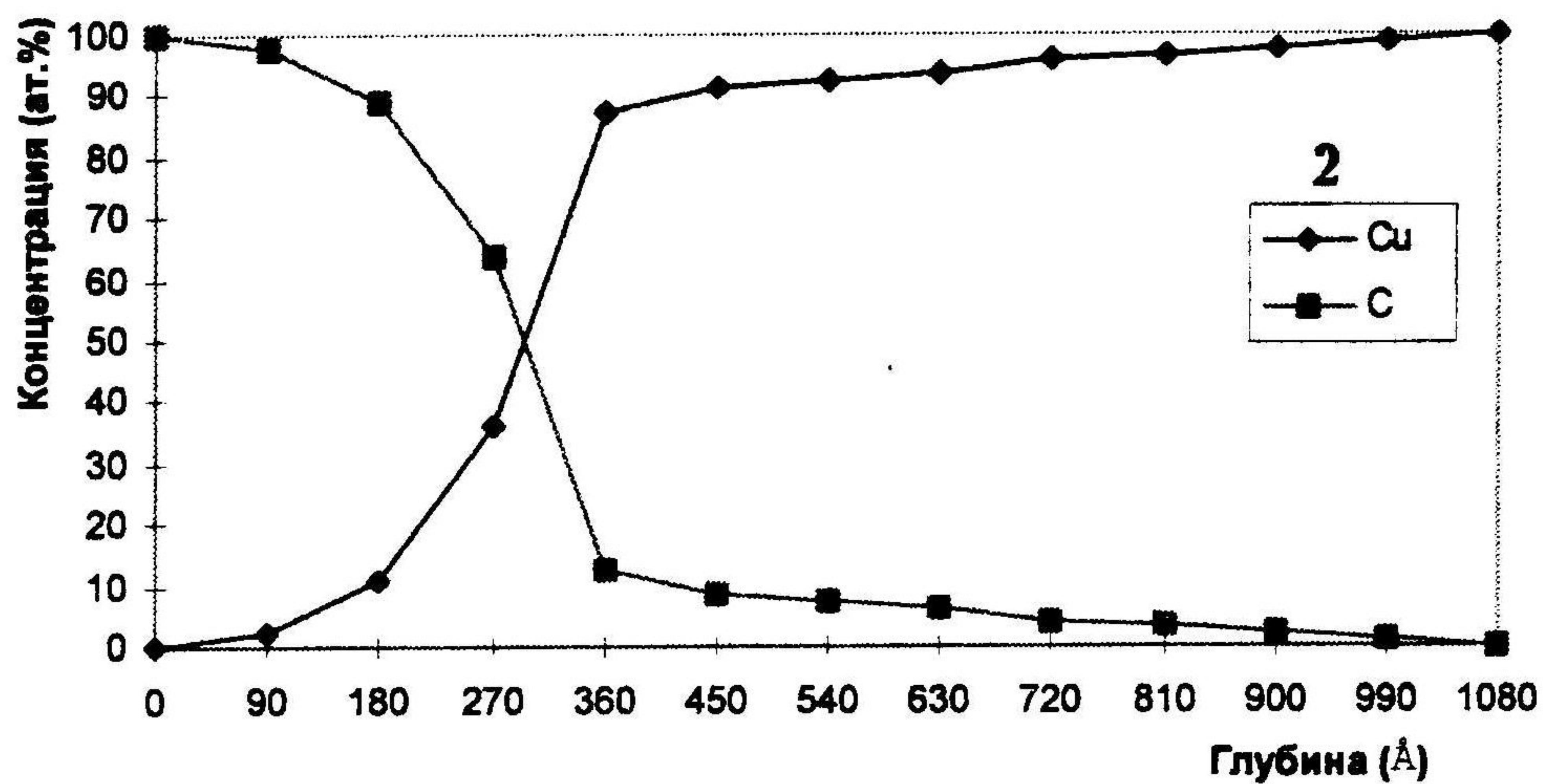
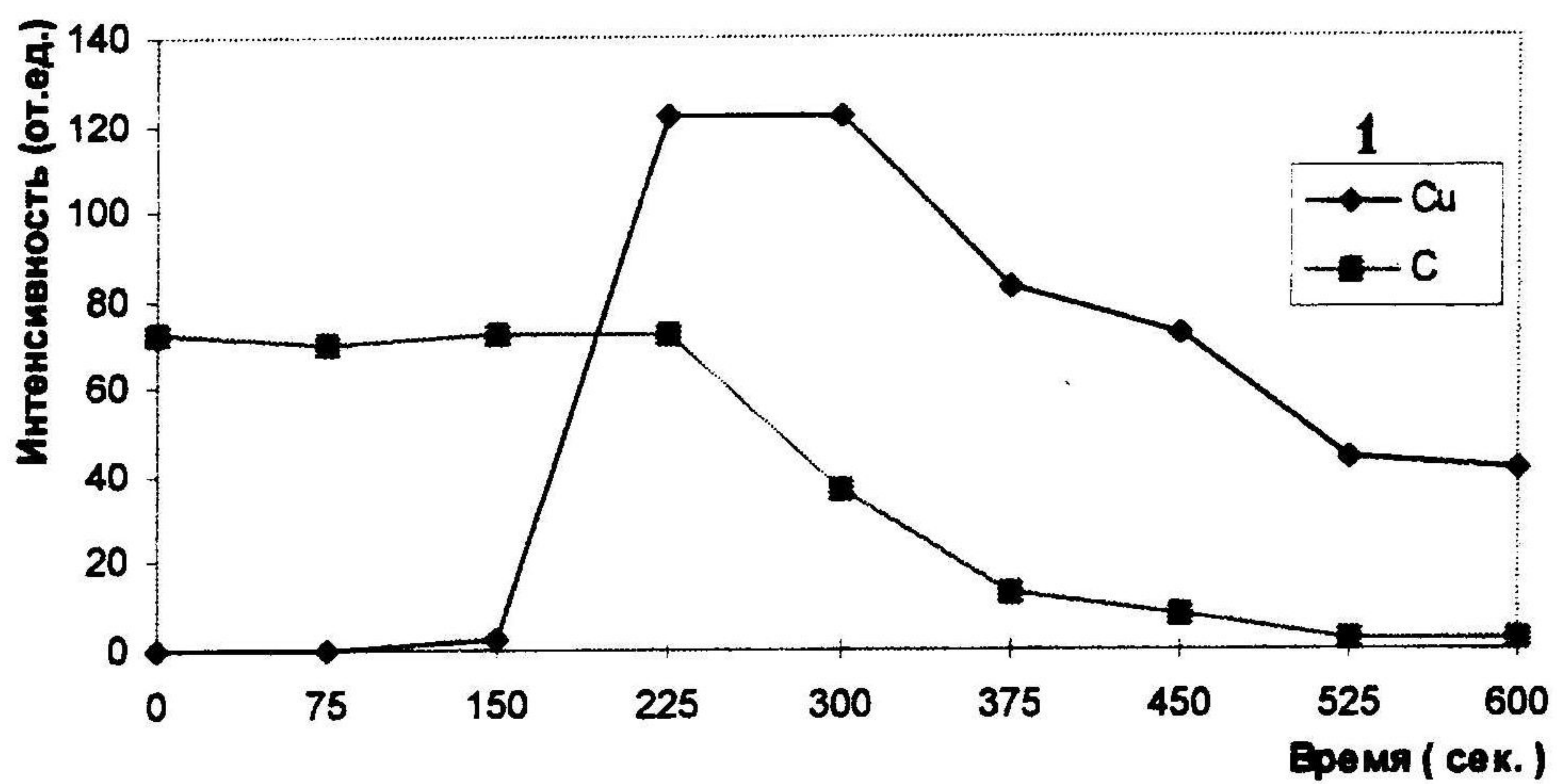


Рис.4. Система С — Си не отоженная.

- 1) Зависимость тока вторичных ионов.
- 2) Зависимость концентрации от глубины после учета кратерного эффекта.
- 3) Зависимость концентрации от глубины после учета каскадного перемешивания и атомов отдачи.

Система С-Си выбиралась из противоположных соображений. Известно, что углерод не растворяется в меди, что обеспечивает четкую границу раздела. Из вакуумной камеры ВУП-5 образец переносился в камеру мишени масс-спектрометра и проводился послойный анализ. В результате были получены кривые зависимостей токов вторичных ионов материала пленки и материала подложки от времени. Эти зависимости были введены в машину и обработаны.

Проведен сравнительный анализ исходных кривых с кривыми, полученными после машинной обработки. Виден вклад кратерного эффекта, вносимый в результаты измерений распределения концентрации вещества методом МСВИ. Вклад каскадного перемешивания меньше для данных плотностей и энергии первичного пучка, чем кратерного эффекта (1 — 2 % в каждой точке).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Tsong I.S.T., Power G.L., Hoffman D.W., Magee C.W., Nucl. Instr. and Meth., 1980, v.168, p.399.
- [2] Croset M., Rev. Tesh. Thompson — CSF, 1971, v.3, p.19.
- [3] Werner H.W., Acta Electron., 1976, v.19, p.53.
- [4] McHugh J.A., Radiat. Eff., 1974, v.21, p.209.
- [5] Andersen H.H., Appl. Phys., 1979, v.18, p.131.
- [6] Instani T., Shimizu R., Appl. Phys., 1975, v.6, p.241.
- [7] Liau Z.L., Mayer J.W., Brown W.L., Poate J.M., J. Appl. Phys., 1978, v.49, p.5295.
- [8] Proc. Of the Worlashop on Soute Segregation and Phase Stability during Irradiation ed. J.O.Shegler, Journ.Nucl.Mater., v.83, 1979.
- [9] Бажин А.И., Смирнова Т.С., Ступак В.А., Вторичная ионная и ионно-фотонная эмиссия. Харьков, 1988, Тезисы докладов, ч.1, стр. 179.
- [10] Машкова Е.С., Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел. Сборник статей. М., Мир, 1989.
- [11] Юдин В.В., Электронная техника. Серия 2. Полупроводниковые приборы. Выпуск 6 (172), с.3, 1984.
- [12] Schroeer J.M., Rhodin T.N., Bradley R.C., Surf. Sci., 1973, v.34, N3, p.571
- [13] Черепин В.Т., Ионный зонд, Киев, Наукова Думка, 1981, с.327.
- [14] Hoffman D.W., Surf. Sci., 1973, v.50, N1, p.29.
- [15] Lindhard J., Nielsen V., Scharff M., K. Dan. Vidensk. Selsk Mat. Fys. Medd., 1968, v.36, N10.